



République Algérienne Démocratique et Populaire
Ministère de l'Enseignement Supérieure et de la Recherche Scientifique
Université de Relizane
Institut des Sciences Exactes et Sciences de la Nature et de la Vie
Département de Physique



Master I : Mécanique et Modélisation numérique.

Physique des solide approfondie

Présentée par : **Dr Talbi Khadidja**

Plan de présentation

1) Généralités :

- Réseaux de Bravais et réseaux réciproque
- Méthodes de déffraction
- Zones de Brillouin

2) Electron dans un cristal

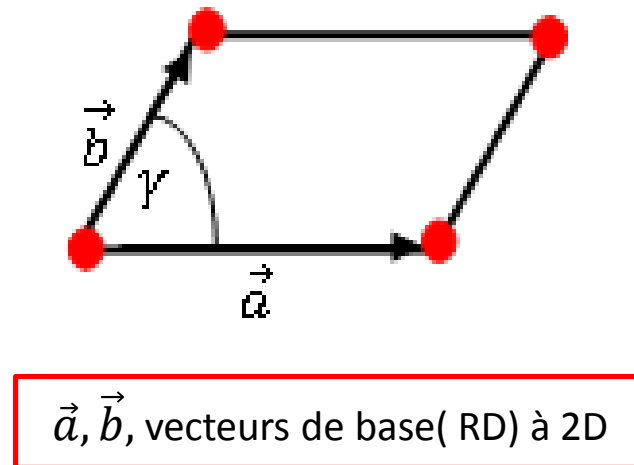
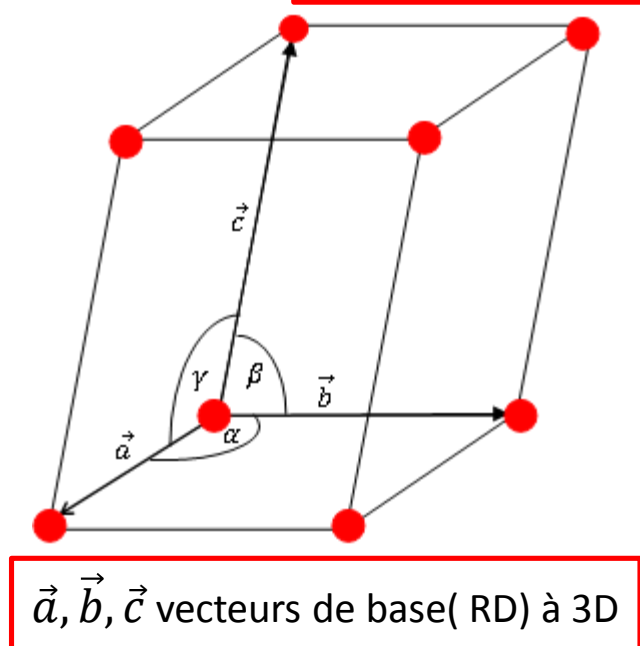
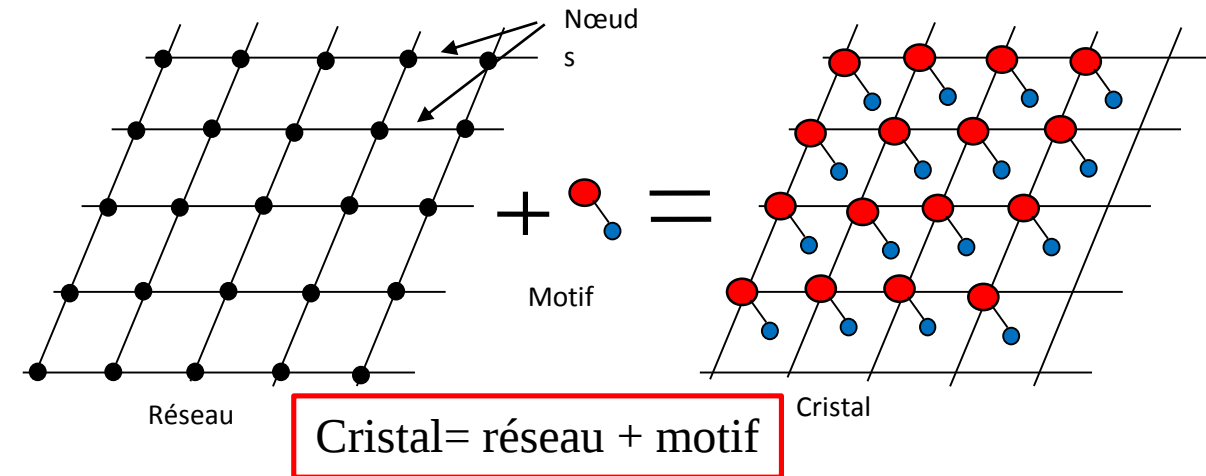
- Classement les solides à partir de la structure de bandes
- La fonction de Block
- La masse effective

3) Méthodes de calcul

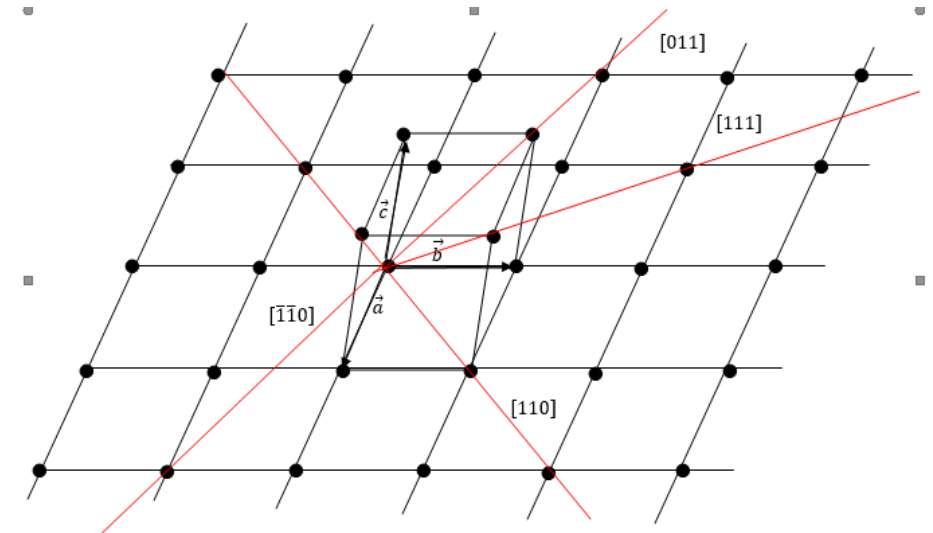
- Approximation d'électron presque libre (quasi libre)
- Méthode de liaisons fortes
- Méthode APW(ondes planes augmentes)
- Méthode FP-APW
- Théorie de la fonctionnelle de la densité

Généralités :

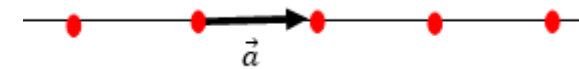
Le cristal : est caractérisé par la répétition tridimensionnelle d'un motif (atome, molécule,...)



Les rangées [u v w] : On appelle rangée toute droite passant par deux nœuds quelconque



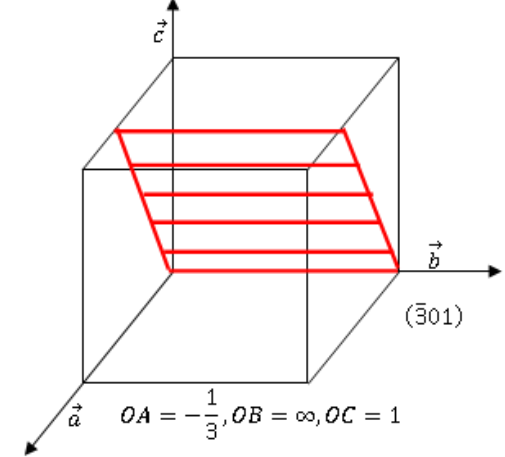
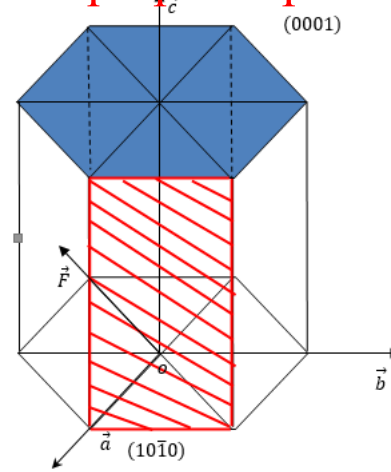
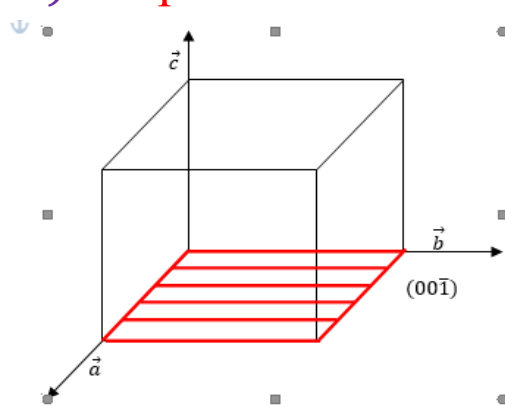
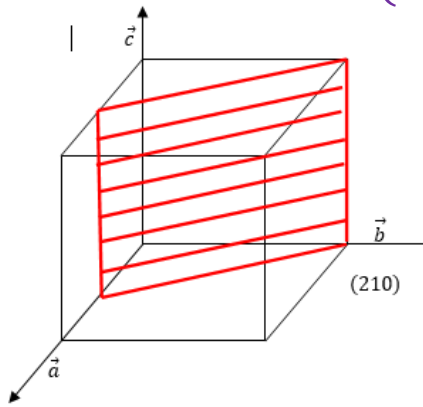
$$: \vec{R} = u\vec{a} + v\vec{b} + w\vec{c}$$



$\vec{a}$ vecteurs de base(RD) à 1D

Généralités :

Plans réticulaires (hkl): Un plan réticulaire est un plan qui passe par au moins trois nœuds du réseau non alignés.

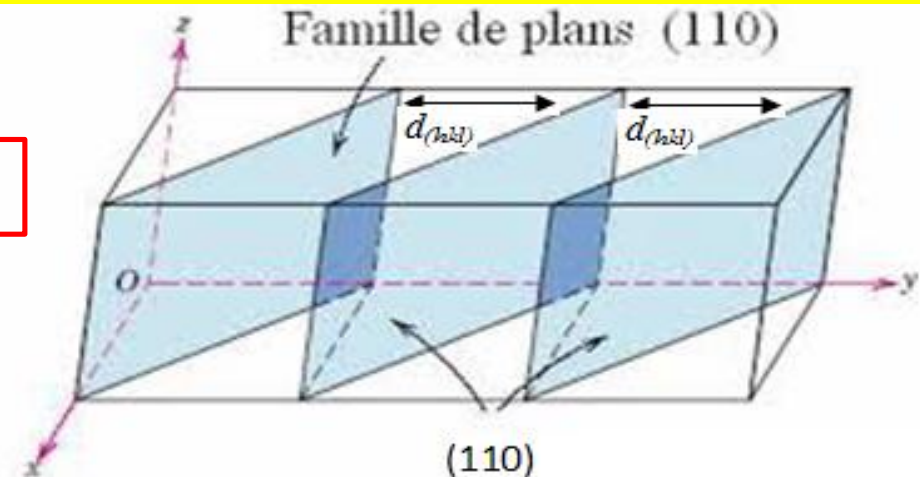


La distance inter-réticulaire d_{hkl} entre les plans réticulaire de la famille

$$d_{hkl} = \frac{2\pi V}{abc \left\{ h^2 \frac{\sin^2 \alpha}{a^2} + k^2 \frac{\sin^2 \beta}{b^2} + l^2 \frac{\sin^2 \gamma}{c^2} + 2 \left[\frac{hk}{ab} (\cos \alpha \cdot \cos \beta - \cos \gamma) + \frac{hl}{ac} (\cos \alpha \cdot \cos \gamma - \cos \beta) + \frac{kl}{bc} (\cos \beta \cdot \cos \gamma - \cos \alpha) \right] \right\}^{\frac{1}{2}}}$$

avec

$$V = abc [1 + 2 \cos \alpha \cdot \cos \beta \cdot \cos \gamma - (\cos^2 \alpha + \cos^2 \beta + \cos^2 \gamma)]^{\frac{1}{2}}$$

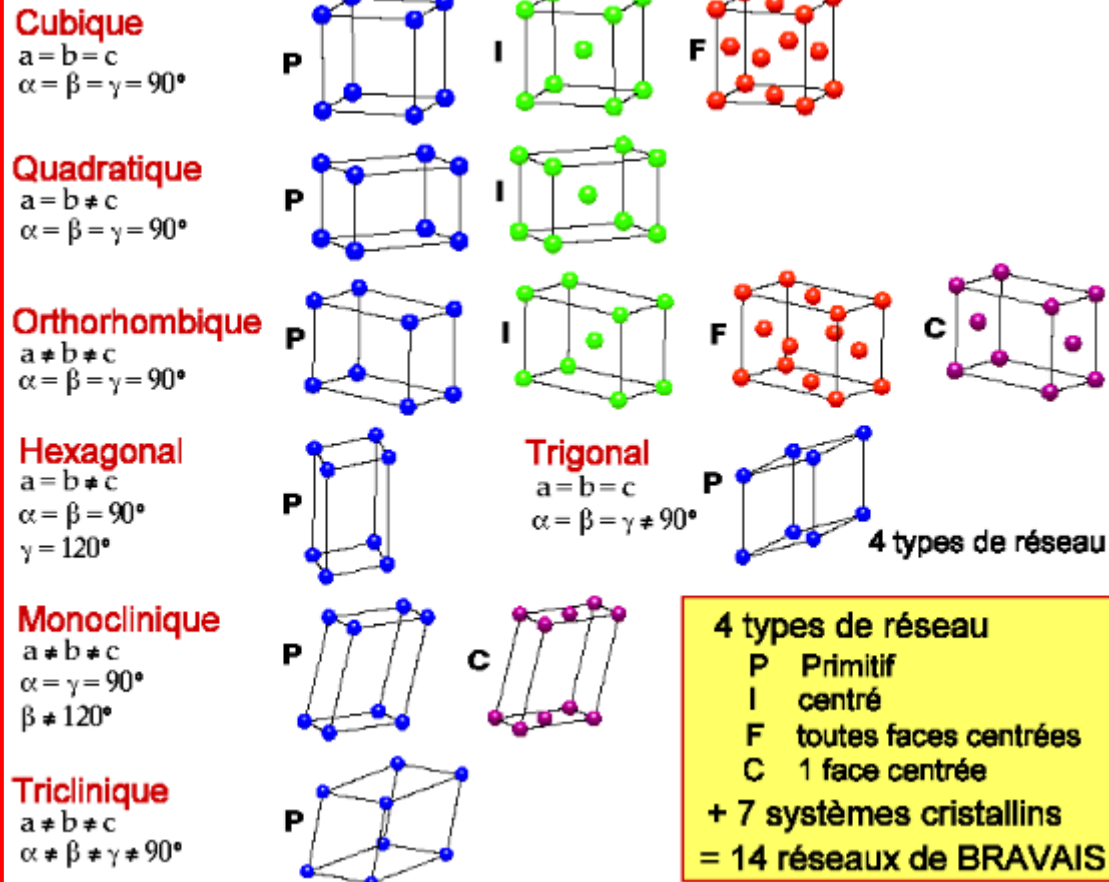


Généralités :

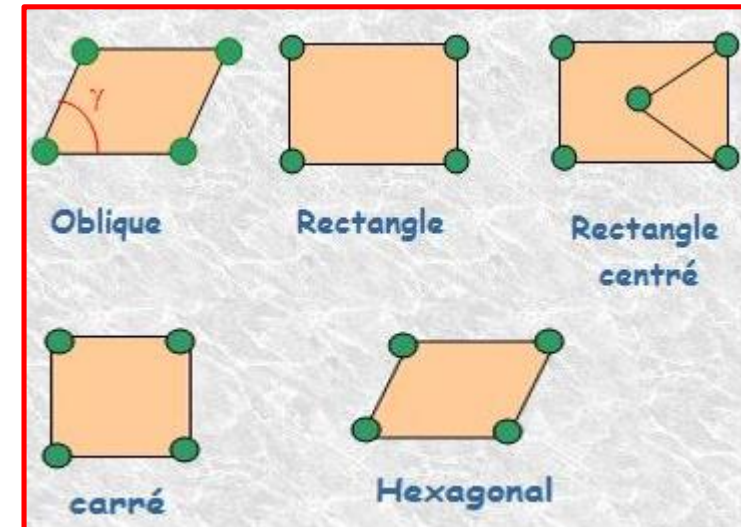
Réseaux de Bravais:

Auguste Bravais(1848) a montré, à partir des différentes combinaisons des éléments de symétrie cristalline, 32 classes de symétrie, qui elles-mêmes se répartissent en 14 types de réseaux.

Réseau tridimensionnel(3D): sept système cristallin :
14 types de réseaux.



Réseau bidimensionnel (2D): quatre système:
cristallin 5 types de réseaux.

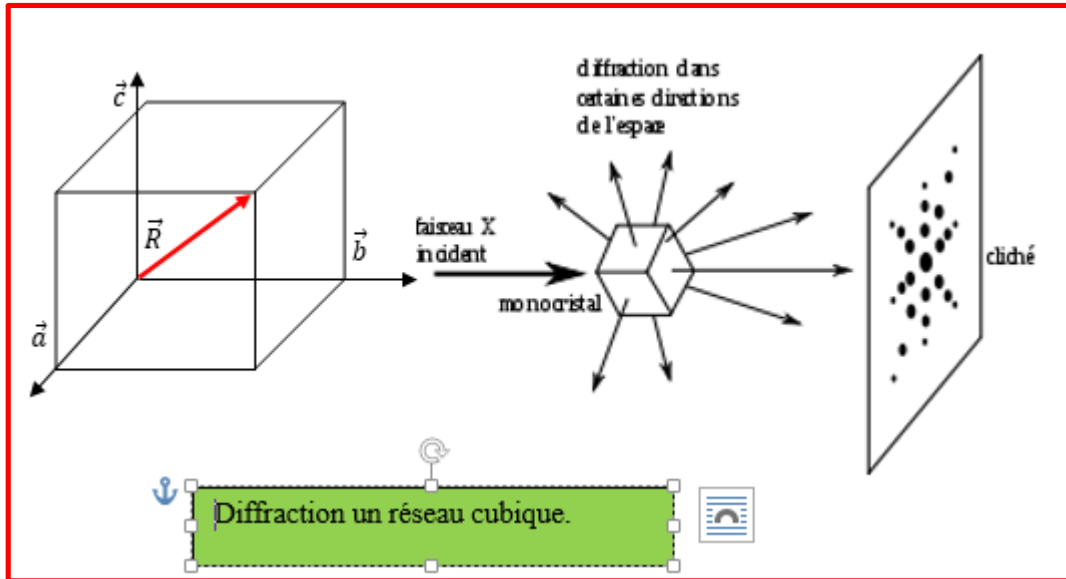


Généralités :

Réseau réciproque

Le réseau réciproque (R.R.) est l'ensemble des vecteurs $\vec{K}$

tels que : $e^{i\vec{K} \cdot \vec{R}} = 1$.



Distance interréticulaire : d_{hkl}

$$d_{hkl} = \frac{2\pi}{|\vec{G}_{hkl}|}$$

Les vecteurs de base de réseau réciproque :

$$\vec{a}^* = 2\pi \frac{\vec{b} \wedge \vec{c}}{\vec{a} \cdot (\vec{b} \wedge \vec{c})}$$

$$\vec{b}^* = 2\pi \frac{\vec{c} \wedge \vec{a}}{\vec{b} \cdot (\vec{c} \wedge \vec{a})}$$

$$\vec{c}^* = 2\pi \frac{\vec{a} \wedge \vec{b}}{\vec{c} \cdot (\vec{a} \wedge \vec{b})}$$

$$\vec{a}_i \vec{b}_j = 2\pi \delta_{ij}$$

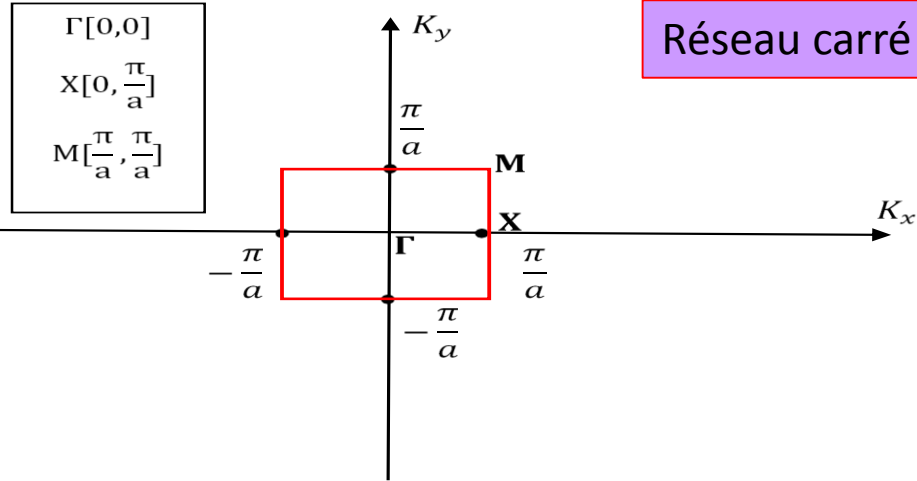
Vecteur du réseau réciproque:

$$\vec{G}_{hkl} = h\vec{a}^* + k\vec{b}^* + l\vec{c}^*$$

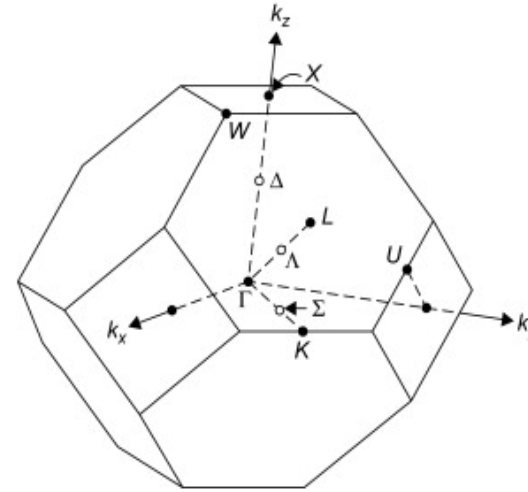
Généralités :

Zones de Brillouin :

Réseau carré

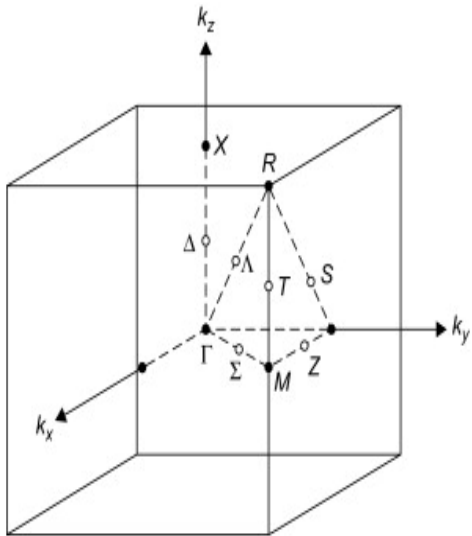


Réseau CFC



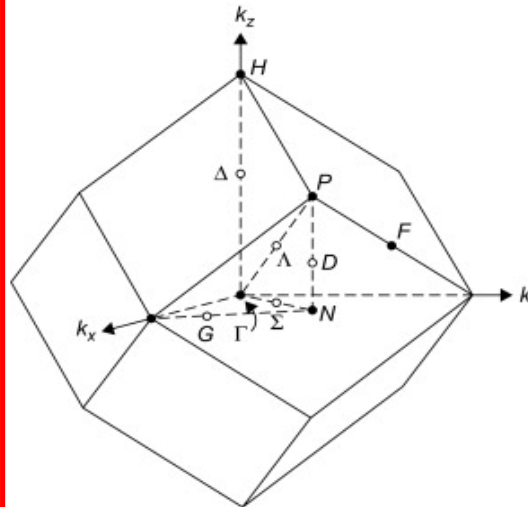
$$\begin{aligned}
 \Gamma(0,0,0) &\Rightarrow [0,0,0] \\
 X(0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}) &\Rightarrow [0, \frac{2\pi}{a}, 0] \\
 L(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}) &\Rightarrow [\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a}] \\
 W(0, \frac{1}{2}, 0) &\Rightarrow [\frac{\pi}{a}, \frac{2\pi}{a}, 0] \\
 K(\frac{3}{8}, \frac{3}{8}, \frac{3}{8}) &\Rightarrow [\frac{3\pi}{2a}, \frac{3\pi}{2a}, 0]
 \end{aligned}$$

Réseau CS



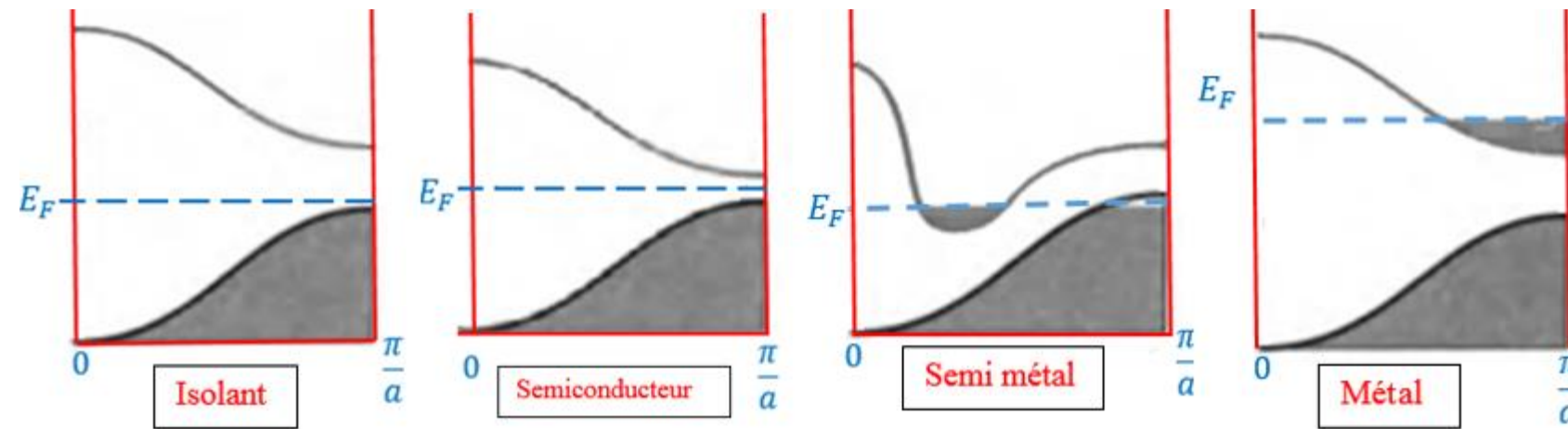
$$\begin{aligned}
 \Gamma(0,0,0) &\Rightarrow [0,0,0] \\
 R(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}) &\Rightarrow [\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a}] \\
 X(0, \frac{1}{2}, 0) &\Rightarrow [0, \frac{\pi}{a}, 0] \\
 M(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0) &\Rightarrow [\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a}, 0]
 \end{aligned}$$

Réseau CC



$$\begin{aligned}
 \Gamma(0,0,0) &\Rightarrow [0,0,0] \\
 H(-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}) &\Rightarrow [0, 0, \frac{2\pi}{a}] \\
 P(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}) &\Rightarrow [\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a}] \\
 N(0, \frac{1}{2}, 0) &\Rightarrow [0, \frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a}]
 \end{aligned}$$

Classement les solides à partir de la structure de bande



$$\psi(r) = e^{i\vec{k}\vec{r}} u_{\vec{k}}(r)$$

$$u_k(\vec{r} + \vec{R}) = u_k(\vec{r})$$

$\psi_r(\vec{r})$: est la fonction de Bloch

$u_k(\vec{r})$: est une fonction périodique

Le théorème de Bloch:

L'équation de Schrödinger :

$$H_e \Phi_n(r) = \left(\frac{p^2}{2m} + V(r) \right) \Phi_n(r) = E_n \Phi_n(r)$$

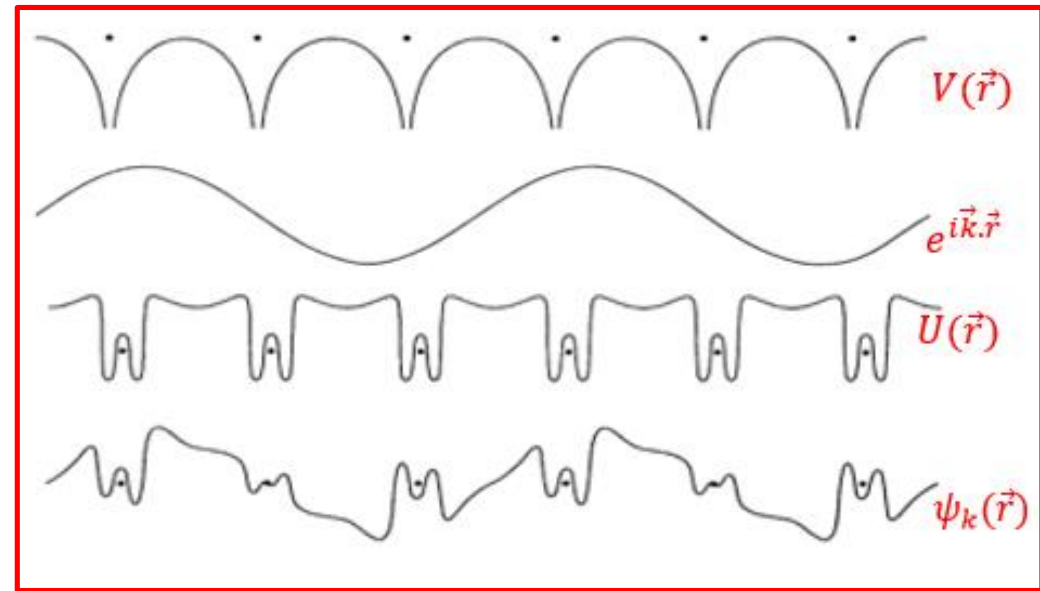
$$V(\vec{r} + \vec{R}) = V(\vec{r}) \text{ où } \vec{R} \text{ est un vecteur du R.D.}$$

$$\vec{R} = n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2 + n_3 \vec{a}_3$$

solution de l'équation de Schrödinger est

Les états propres peuvent se mettre sous la forme:

$$\psi_k(\vec{r} + \vec{R}) = e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}} \psi_k(r)$$

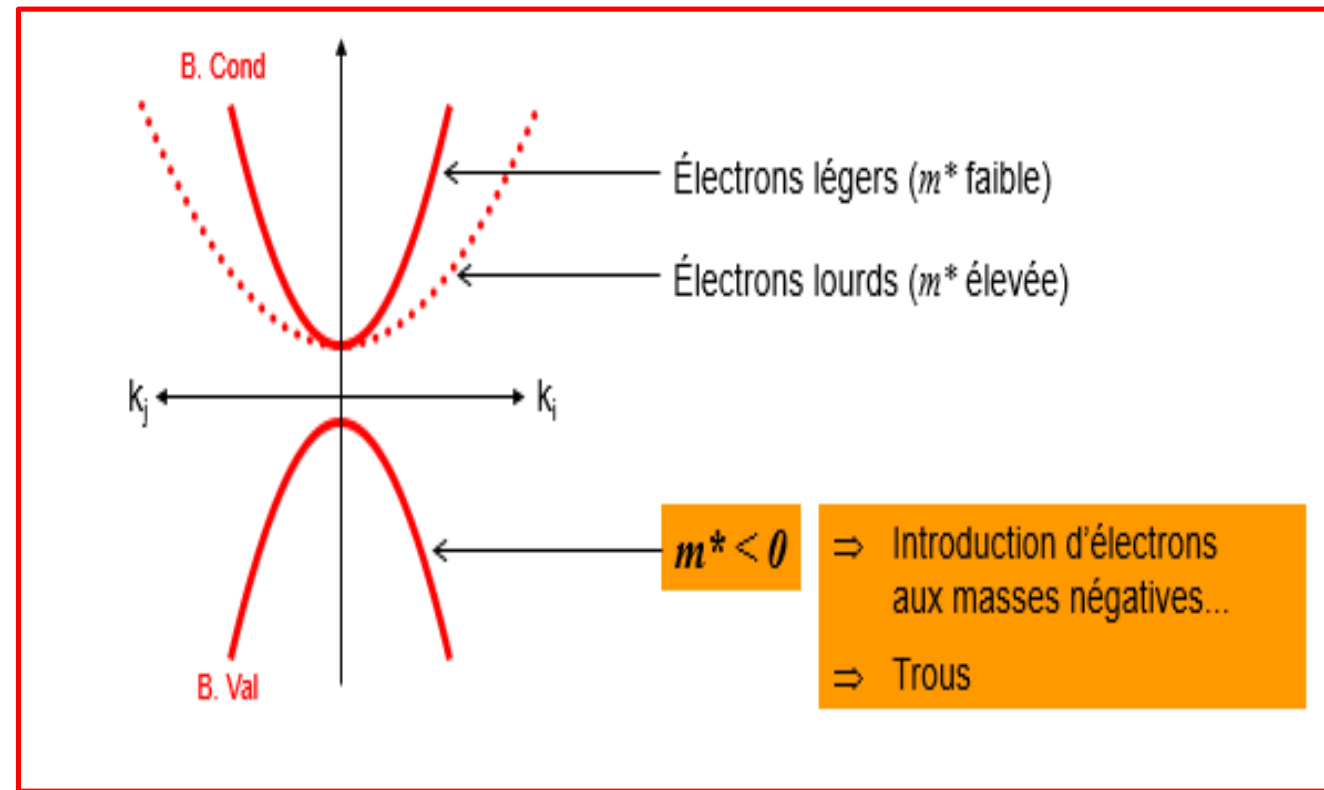


La masse effective :

$$m^* = \hbar^2 \left(\frac{d^2 E}{dk^2} \right)^{-1}$$

La masse effective est inversement proportionnelle à la courbure de la dispersion de l'énergie dans l'espace des k.

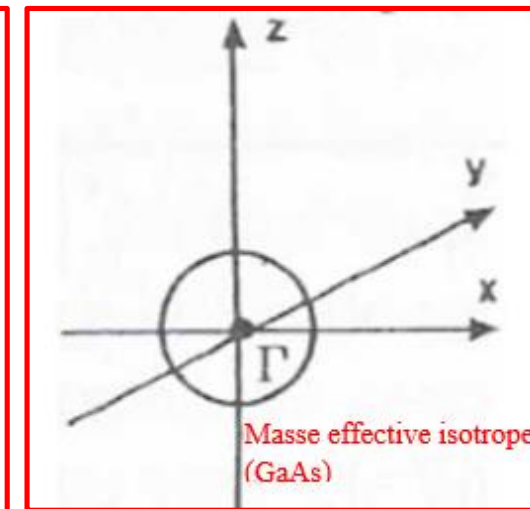
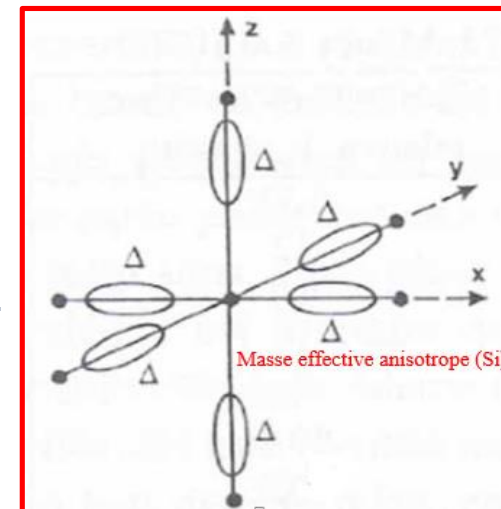
Masse effective positive pour un minimum de bande (BC) et négative pour un maximum de bande (BV).



La masse des porteurs dépend de la courbure de la structure de bande.

Dans le cas d'un semiconducteur :

- ❖ à bande interdite indirecte (GaAs), la bande de conduction est isotrope au voisinage de $k=0$ (état s)
- ❖ à bande interdite indirecte (Si), la bande de conduction n'est plus isotrope.



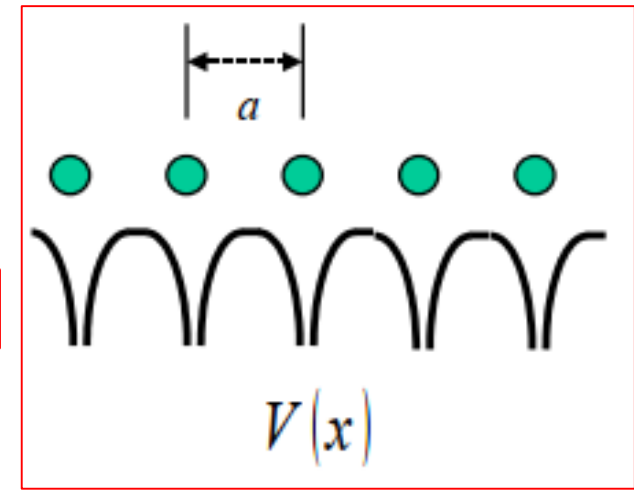
3) Méthodes de calcul :

Approximation l'électron quasi-libre

Electrons dans un cristal avec potentiel périodique V tel que $V(x + a) = V(x)$

Le potentiel $V < l'énergie cinétique des électrons (l'électron libre)$

Le potentiel cristallin périodique se développe en série de Fourier



$$V(x) = \sum_{G \in \mathbb{R}} V_G e^{iGx}$$

$$\psi(x) = \sum_K C(K) e^{-iKx}$$

$$\sum_K \left[\left(\frac{\hbar^2 K^2}{2m} - E \right) C(K) e^{-iKx} + \left(\sum_G V_G C(K) e^{-i(K-G)x} \right) \right] = 0$$

$$\begin{vmatrix} \frac{\hbar^2 (k-G)^2}{2m} - E & V \\ V & \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - E \end{vmatrix} = 0$$

$$E^\pm = \frac{1}{2} \frac{\hbar^2}{2m} ((k-G)^2 + k^2) \pm \frac{1}{2} \sqrt{[(k-G)^2 + k^2]^2 + 4V^2}$$

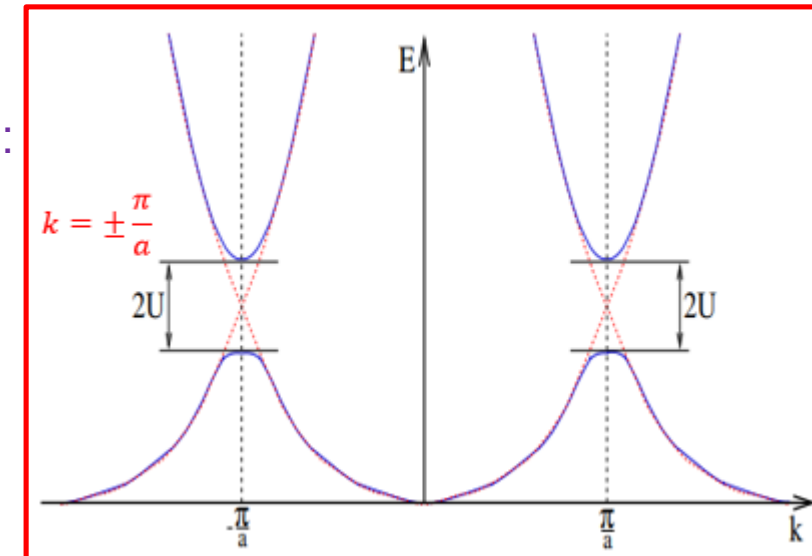
en posant :

$$q = k - G/2$$

$$E = E_0 \pm V + \frac{\hbar^2 q^2}{2m} \left(1 \pm \frac{2E_0}{V} \right)$$

La bande interdite E_g :

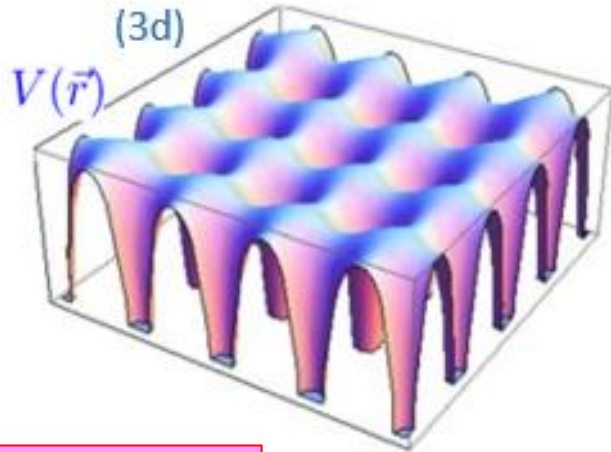
$$E_g = 2U$$



Méthode de liaisons fortes :

ce modèle cherche à décrire les électrons «peu délocalisés» : proches de leur couche interne avec un recouvrement partiel d'un site à l'autre.

$v(r)$ est fort : électron fortement lié



$$H = H_{at} + U \quad U = \text{couplage entre atomes}$$

$$E(k) = E_0 - \beta - \gamma \sum_m e^{i\vec{k} \cdot \vec{\rho}_m}$$

$\vec{\rho}_m$: représente les vecteurs reliant l'atome situé à l'origine à ses m plus proche voisins.

E_0 : l'énergie atomique initiale

β : l'énergie propre de l'orbitale

γ : l'énergie de recouvrement

Electron dans un réseau carré

$$\vec{\rho}: \begin{pmatrix} \pm \frac{a}{2} \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ \pm \frac{a}{2} \end{pmatrix}$$

$$E = E_0 - \alpha - 2\gamma(\cos k_x a + \cos k_y a)$$

Au voisinage de Γ : les surfaces d'isoénergie sont sphérique $m^* = \frac{\hbar^2}{2\gamma a^2}$

Electron dans un réseau cubique simple

$$\vec{\rho}: \begin{pmatrix} \pm \frac{a}{2} \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ \pm \frac{a}{2} \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \pm \frac{a}{2} \end{pmatrix}$$

$$E = E_0 - \alpha - 2\gamma(\cos k_x a + \cos k_y a + \cos k_z a)$$

Au voisinage de Γ : les surfaces d'isoénergie sont sphérique $m^* = \frac{\hbar^2}{2\gamma a^2}$

Electron dans un réseau cubique centrée

$$E = E_0 - \alpha - 8\gamma \cos \frac{k_x a}{2} \cos \frac{k_y a}{2} \cos \frac{k_z a}{2}$$

$$\vec{\rho}: \begin{pmatrix} \pm \frac{a}{2} \\ \pm \frac{a}{2} \\ \pm \frac{a}{2} \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} \pm \frac{a}{2} \\ \pm \frac{a}{2} \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} \pm \frac{a}{2} \\ 0 \\ \pm \frac{a}{2} \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ \pm \frac{a}{2} \\ \pm \frac{a}{2} \end{pmatrix}$$

Au voisinage de Γ : les surfaces d'isoénergie sont sphérique $m^* = \frac{\hbar^2}{8\gamma a^2}$

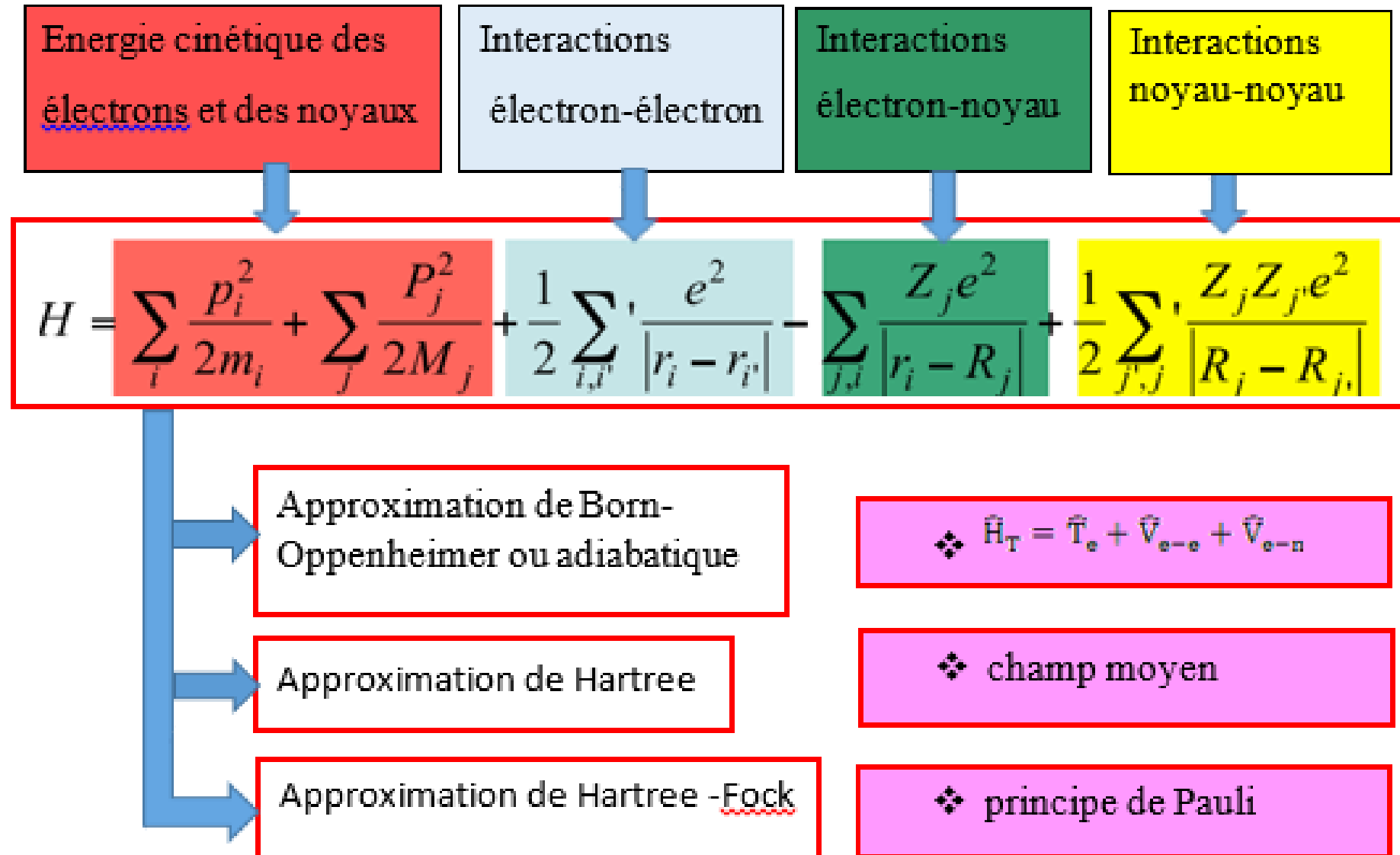
Electron dans un réseau cubique simple

$$\vec{\rho}: \begin{pmatrix} \pm \frac{a}{2} \\ \pm \frac{a}{2} \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} \pm \frac{a}{2} \\ 0 \\ \pm \frac{a}{2} \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ \pm \frac{a}{2} \\ \pm \frac{a}{2} \end{pmatrix}$$

$$E = E_0 - \alpha - 2\gamma \left(\cos \frac{k_x a}{2} \cos \frac{k_y a}{2} + \cos \frac{k_x a}{2} \cos \frac{k_z a}{2} + \cos \frac{k_y a}{2} \cos \frac{k_z a}{2} \right)$$

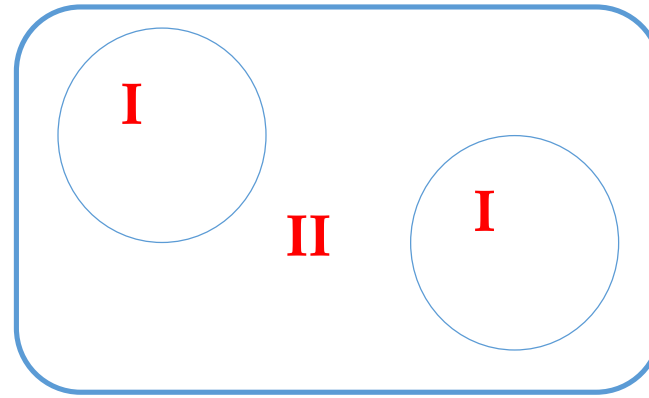
Problème à N corps

Pour un calcul complet nécessite de prendre en compte toutes les interactions et énergies cinétiques du système:



La méthode APW

Selon la méthode des ondes planes augmentées APW proposée par Slater, l'espace est divisé en deux régions



Slater

- (I) Des sphères appelées « Muffin-Tin » englobant les atomes où les fonctions d'ondes sont des fonctions radiales multipliées par des harmoniques sphériques.
- (II) Une région interstitielle délimitant l'espace résiduel non occupé par les sphères où les fonctions d'ondes sont sous forme d'ondes planes.

$$\phi_{k_n}^{APW}(r, \epsilon_l) = \begin{cases} \sum_{lm} A_{lm, k_n} u_l(r, \epsilon_l) Y_{lm}(\hat{r}) & (r \in MT) \\ \frac{1}{\sqrt{V}} e^{ik_n \cdot r} & (r \in I) \end{cases}$$

La méthode FP-LAPW

La méthode **LAPW** proposée par **Anderson** consiste à rendre les fonctions de bases dans les sphères en combinaisons linéaires, s'écrivent :

$$\phi_{k_n}^{LAPW}(\mathbf{r}) = \begin{cases} \sum_{lm} [A_{lm,k_n} u_l(\mathbf{r}, \epsilon_l) + B_{lm,k_n} u_l(\mathbf{r}, \epsilon_l)] Y_{lm}(\hat{\mathbf{r}}) & (\mathbf{r} \in MT) \\ \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{k}_n \cdot \mathbf{r}} & (\mathbf{r} \in I) \end{cases}$$

Le code **WIEN2K** développé par Blaha, Schwarz et leurs collaborateurs est une application réussie de la méthode FP-LAPW qui nous a servi de base pour la plupart des calculs.



Anderson

