

# PHY6505: Physique de la matière condensée

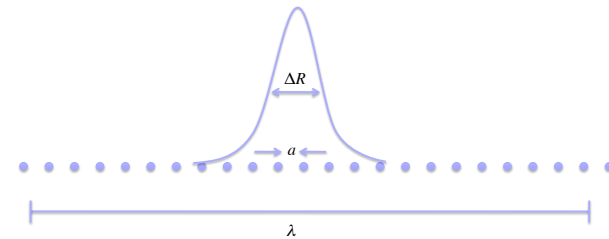
## Cours 6 Modèle semi-classique

François Schiettekatte  
Université de Montréal  
Automne 2009

1

## Paquet d'onde

### ■ Intro (tableau)



2

## Paquet d'onde

- Concept pas très bien défini mais très utile
  - $E, H$  classiques pour champs externes avec  $\lambda \gg \Delta R$
  - $U$  quantique car  $a \ll \Delta R$

3

## Modèle semi-classique

- Description du modèle semi-classique
  - Basé sur  $\epsilon(\vec{k})$  connu et fixe
    - Obtenu par calcul TB, DFT, ...
  - On calcule l'évolution du paquet d'onde sous l'influence de  $E, H$

4

## Modèle semi-classique

### ■ Description du modèle semi-classique (suite)

#### □ règles de fonctionnement

- Pas de changement de  $n$

$$\dot{\vec{r}} = \vec{v}_n(\vec{k}) = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \varepsilon(\vec{k})}{\partial \vec{k}}$$

$$\dot{\hbar \vec{k}} = -e \left[ \vec{E}(\vec{r}, t) + \vec{v}_n(\vec{k}) \times \frac{1}{c} \vec{H}(\vec{r}, t) \right]$$

#### □ $n, \vec{r}, \vec{k}$ et $n, \vec{r}, \vec{k} + \vec{K} =$ même état

#### □ Taux de remplissage des états

$$f(\varepsilon_n(\vec{k})) \frac{dk}{4\pi^3} = \frac{dk / 4\pi^3}{e^{(\varepsilon_n(\vec{k}) - \mu) / k_B T} + 1}$$

5

## Modèle semi-classique

### ■ Validité du modèle

#### □ Le modèle cesse d'être valide si $U \rightarrow 0$ car

- l'électron libre peut acquérir une quantité arbitraire d'énergie

- changement de  $n$  interdit; continu pour e- libre

- $\vec{E}, \vec{H}$  tels que

$$\square eEa \ll \frac{\varepsilon_{gap}^2}{\varepsilon_F} \text{ (facile à respecter)}$$

$$\square \hbar\omega_c \ll \frac{\varepsilon_F^2}{\varepsilon_{gap}}, \omega_c = \frac{eH}{mc} \text{ (plus difficile)}$$

- Aussi,  $\hbar\omega \ll \varepsilon_{gap}$  sinon, transition inter-bande

- $\lambda \gg a$  pour que  $E, H$  soient constants sur  $\Delta R$

6

## Transport

### ■ Courants totaux

$$\square \text{Électrique: } \vec{j} = -e \int \frac{d\vec{k}}{4\pi^3} \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \varepsilon}{\partial \vec{k}} \vec{v}(\vec{k})$$

$$\square \text{Énergie: } \vec{j}_e = \int \frac{d\vec{k}}{4\pi^3} \varepsilon(\vec{k}) \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \varepsilon}{\partial \vec{k}} = \frac{1}{2} \int \frac{d\vec{k}}{4\pi^3} \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \varepsilon^2(\vec{k})}{\partial \vec{k}}$$

- Intégrale nulle sur le gradient d'une fonction périodique  $\Rightarrow$  pas de courant pour une bande pleine

- Pas de conduction dans une bande vide

- pas d'électrons

7

## Transport

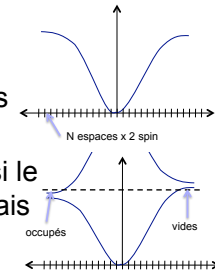
### ■ Courants totaux(suite)

- Conduction seulement par les bandes partiellement remplies

- Bandes nécessairement non pleines si le nombre d'électrons de valence est impair

- Bandes possiblement pleines si le nombre d'électrons est paire, mais ça dépend de la structure de bandes

... suite au tableau



8