PHY6505:
Physique de la matière condensée

Cours 6
Modèle semi-classique

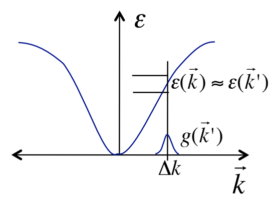
François Schiettekatte
Université de Montréal
Automne 2010

Peu de coefficients nécessaires autour de $\varepsilon(k)$

- Liaisons fortes: $\Psi(\vec{r}) = \sum_{\vec{R}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}}\phi(\vec{r}-\vec{R}),\ \ \phi(\vec{r}) = \sum_n b_n \Psi_n(\vec{r})$
  - $(\varepsilon(\vec{k}) - \varepsilon_m)b_m$ petit ➔ coefficients b_m petit sauf si $\varepsilon(\vec{k}) \approx \varepsilon_m$
- Faible potentiel périodique: $c_{\vec{k}-\vec{K}} \sim \dfrac{1}{\varepsilon - \varepsilon^0_{\vec{k}-\vec{K}}} O(U)$
  - $c_{\vec{k}-\vec{K}}$ grand pour $\varepsilon \sim \varepsilon^0_{\vec{k}-\vec{K}}$

e^- bien représentés par un paquet d'onde constitué de composantes k d'un espace restreint Δk

- Paquet d'ondes de Bloch
  - $\Psi(\vec{r},t)=\sum_{\vec{k}'} g(\vec{k}')\overbrace{\Psi_{n\vec{k}'}(\vec{r})}^{e^{i\vec{k}'\cdot\vec{r}}u_n(\vec{r})}e^{-i\varepsilon_n(\vec{k}')t/\hbar}$
  - $g(\vec{k}')$ ne prend des valeurs significative que si $\varepsilon(\vec{k})\approx\varepsilon(\vec{k}')$
  - caractérisé par largeur Δk restreinte dans l'espace réciproque

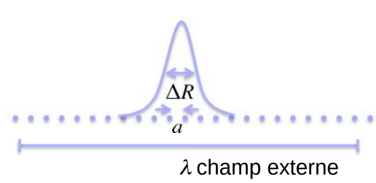


3

Étendue spatiale = plusieurs atomes

- Allure spatiale
  - $\Psi(\vec{r}_0+\vec{R},t)=\sum_{\vec{k}'} g(\vec{k}')\overbrace{\Psi_{n\vec{k}'}(\vec{r}_0)}^{\Psi_{n\vec{k}'}(\vec{r}_0+\vec{R})=\Psi_{n\vec{k}'}(\vec{r}_0)e^{i\vec{k}'\cdot\vec{R}}}\quad e^{i\left(\vec{k}'\cdot\vec{R}-\varepsilon_n(\vec{k}')t/\hbar\right)}$
  - $\Rightarrow\Psi(\vec{r}_0+\vec{R},t)$ appréciable quand $g(\vec{k}')\Psi_{n\vec{k}'}(\vec{r}_0)>>0\Rightarrow\Delta R\sim\frac{1}{\Delta k}$
  - si Δk petit p/r à la zone de Brillouin, ΔR grand p/r à a
- Paquet d'ondes: concept mal défini mais très utile
  - E, H classiques si λ du champ externe >> ΔR
  - U quantique car a << ΔR
  - suppose un schéma de bande *a priori*
  - quantités données par $\vec{k}$ central

    e.g.: $\vec{v}_n(\vec{k})=\frac{\partial\omega}{\partial\vec{k}}=\frac{1}{\hbar}\frac{\partial\varepsilon_{n\vec{k}}}{\partial\vec{k}}$



Paquet d'ondes:
un concept mal défini mais très utile

- E, H classiques si λ du champ externe >> ΔR
- U quantique car a << ΔR
- basé sur $\varepsilon(\vec{k})$ connu et fixe
  - obtenu par calcul TB, DFT, …
- quantités données par $\vec{k}$ central

e.g.: $\vec{v}_n(\vec{k}) = \dfrac{\partial\omega}{\partial\vec{k}} = \dfrac{1}{\hbar}\dfrac{\partial\varepsilon_{n\vec{k}}}{\partial\vec{k}}$

- on calcule l'évolution du paquet d'onde sous l'influence de E, H

5

Règles de fonctionnement

- Pas de changement de n
- $\dot{\vec{r}} = \vec{v}_n(\vec{k}) = \dfrac{1}{\hbar}\dfrac{\partial\varepsilon(\vec{k})}{\partial\vec{k}}$
- $\hbar\dot{\vec{k}} = -e\left[\vec{E}(\vec{r},t) + \vec{v}_n(\vec{k}) \times \dfrac{1}{c}\vec{H}(\vec{r},t)\right]$
- $n, \vec{r}, \vec{k}$ et $n, \vec{r}, \vec{k} + \vec{K}$ = même état
- taux de remplissage des états

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

6

Validité du modèle

- Le modèle cesse d'être valide si $U \to 0$ 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
      - $eEa << \frac{\varepsilon_{gap}^2}{\varepsilon_F}$ (facile à respecter)
      - $\hbar\omega_c << \frac{\varepsilon_{gap}^2}{\varepsilon_F}, \omega_c = \frac{eH}{mc}$ (plus difficile)
    - Aussi, $\hbar\omega << \varepsilon_{gap}$ sinon, transition inter-bande
  - $\lambda >> a$ pour que E, H soient ~constants sur ΔR

7

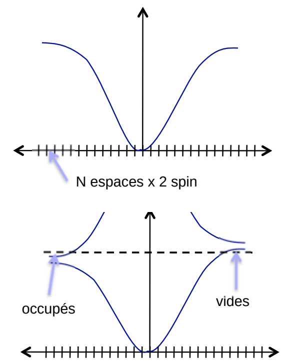
Transport:
pas de courant pour une bande pleine/vide

- Courants totaux
  - Électrique: $\vec{j} = -e\int \frac{d\vec{k}}{4\pi^3} \overbrace{\frac{1}{\hbar}\frac{\partial\varepsilon}{\partial\vec{k}}}^{\vec{v}(\vec{k})}$
  - Énergie: $\vec{j}_\varepsilon = \int \frac{d\vec{k}}{4\pi^3}\varepsilon(\vec{k})\frac{1}{\hbar}\frac{\partial\varepsilon}{\partial\vec{k}} = \frac{1}{2}\int \frac{d\vec{k}}{4\pi^3}\frac{1}{\hbar}\frac{\partial\varepsilon^2(\vec{k})}{\partial\vec{k}}$
  - 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

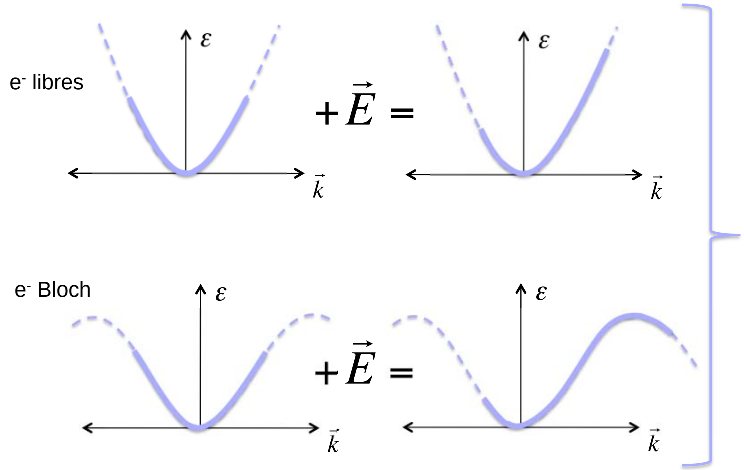
8

Transport: quand les bandes sont-elles pleines?

- Conduction seulement par les bandes partiellement remplies
  - Bandes nécessairement non pleines si le nombre d'électrons de valence est impaire
  - Bandes possiblement pleines si le nombre d'électrons et paire
    - ça dépend de la structure de bande



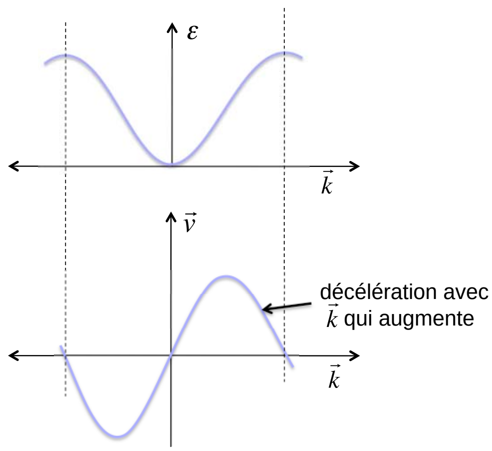
Conduction sous champ E_{DC}



$$\vec{k}(t) = \vec{k}(0) - \frac{e\vec{E}t}{\hbar}$$

Vitesse nulle au plan de Bragg

$$\vec{v}_n(\vec{k}) = \frac{\partial\omega}{\partial\vec{k}} = \frac{1}{\hbar}\frac{\partial\varepsilon_{n\vec{k}}}{\partial\vec{k}}$$



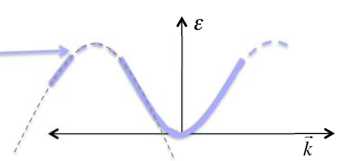
les trous: des manques d'électrons qui vont dans la mauvaise direction

$$\vec{j} = -e\int_{occupés}\frac{d\vec{k}}{4\pi^3}\vec{v}(\vec{k}) \quad \text{mais} \quad 0 = \int_{zone}\frac{d\vec{k}}{4\pi^3}\vec{v}(\vec{k}) = \int_{occupés}\frac{d\vec{k}}{4\pi^3}\vec{v}(\vec{k}) + \int_{non-occupés}\frac{d\vec{k}}{4\pi^3}\vec{v}(\vec{k})$$

$$\Rightarrow \vec{j} = +e\int_{non-occupés}\frac{d\vec{k}}{4\pi^3}\vec{v}(\vec{k})$$

- Près de l'équilibre, si on a des niveaux non occupés près du sommet d'une bande à $\vec{k}_0$

$$\varepsilon(\vec{k}) \approx \varepsilon(\vec{k}_0) - A(\vec{k}-\vec{k}_0)^2,\ A > 0$$



- Soit m^* tel que $\hbar^2/2m^* = A$

$$\vec{v}(\vec{k}) = \frac{1}{\hbar}\frac{\partial\varepsilon}{\partial\vec{k}} \approx -\frac{\hbar}{m^*}(\vec{k}-\vec{k}_0) \ \Rightarrow\ m^*\vec{a} = -\hbar\dot{\vec{k}}$$

- Les e^- se comportent comme s'ils avaient une masse $-m^*$
- Peuvent être vus comme des particules positives avec masse $+m^*$

… suite au tableau