

Chapitre 6

La dynamique des électrons en présence d'un potentiel périodique. Le modèle semi-classique

6.1 Les équations de la dynamique électronique

6.1.1 Introduction

Dans le **modèle de Sommerfeld** (voir chap. 4) un électron est décrit par un paquet d'onde formé par la superposition d'ondes planes.

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \sum_{\mathbf{k}'} g(\mathbf{k}') \exp \left[i \left(\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r} - \frac{E_{\mathbf{k}'}^0}{\hbar} t \right) \right] \quad (6.1)$$

où l'extension Δk de la distribution d'amplitudes $g(\mathbf{k}')$ est telle que

$$\Delta k \ll k_F \quad \longrightarrow \quad \Delta x \gg r_s$$

Dans le cas où les champs extérieurs appliqués varient peu sur les dimensions du paquet d'ondes, les équations de la dynamique des électrons de Sommerfeld s'écrivent **entre les collisions**

$$\begin{cases} \hbar \dot{\mathbf{k}} = -e [\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) + \mathbf{v} \wedge \mathbf{B}(\mathbf{r}, t)] \\ \mathbf{v} = \dot{\mathbf{r}} = \frac{\hbar \mathbf{k}}{m} \end{cases} \quad (6.2)$$

Dans ce modèle on tient compte de l'effet du réseau en introduisant un temps de relaxation τ , lié aux interactions des électrons avec les phonons et les défauts du cristal.

Le modèle semi-classique est une extension du modèle de Sommerfeld au cas d'électrons de Bloch se "déplaçant" dans le potentiel périodique du réseau. Il décrit le mouvement de paquets d'onde de Bloch, lorsqu'il n'est pas nécessaire de préciser la position de l'électron sur des dimensions de l'ordre de grandeur du paramètre du réseau. Un paquet d'onde associé à une bande n s'écrit dans ce cas,

$$\psi_n(\mathbf{r}, t) = \sum_{\mathbf{k}'} g(\mathbf{k}') \psi_{n\mathbf{k}'}(\mathbf{r}) \exp \left[-\frac{i}{\hbar} E_n(\mathbf{k}') t \right] \quad (6.3)$$

où l'extension Δk de $g(\mathbf{k}')$ est telle que

$$\Delta k \ll G \quad \longrightarrow \quad \Delta x \gg \frac{1}{G} \sim a$$

où G est un vecteur réciproque primitif et a est la longueur d'un vecteur primitif du réseau direct. Ainsi un paquet d'onde d'électrons de Bloch ayant un vecteur d'onde bien défini à l'échelle de la zone de Brillouin doit être étendu dans l'espace réel sur plusieurs cellules primitives.

Le modèle semi-classique décrit la réponse des électrons de conduction à des champs extérieurs (électriques et magnétiques) dont la longueur d'onde est supérieure aux dimensions du paquet d'onde et par conséquent nettement plus grande que les dimensions d'une cellule primitive.

Dans le modèle semi-classique, les champs extérieurs donnent lieu à des forces extérieures classiques qui apparaissent dans l'équation du mouvement qui décrit l'évolution de la position et du vecteur d'onde moyen du paquet d'ondes. Sa subtilité est liée au fait que le potentiel périodique du réseau, qui varie sur des distances faibles par rapport à la largeur du paquet d'onde, ne peut pas être traité classiquement. Son effet apparaît de façon indirecte dans la dépendance de l'énergie E_n en fonction de \mathbf{k} .

Il est important de remarquer que les fonctions de Bloch $\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$, solutions de l'équation de Schrödinger indépendante du temps, ont une vitesse moyenne en général non nulle, elle est donnée par (voir Ashcroft-Mermin, annexe E)

$$\mathbf{v}_n(\mathbf{k}) = \frac{1}{\hbar} \nabla E_n(\mathbf{k}) \quad (6.4)$$

Comme les fonctions d'onde de Bloch sont des solutions **stationnaires** de l'équation de Schrödinger en présence du potentiel des ions, le fait qu'un

état de Bloch ait une vitesse moyenne non nulle implique que cette vitesse persiste indéfiniment.

Un paquet d'onde de Bloch peut se propager dans un cristal périodique sans atténuation, la résistivité d'un cristal périodique parfait est nulle, la résistivité finie des métaux est due aux imperfections du réseau et aux vibrations thermiques qui détruisent la symétrie de translation du réseau parfait. On en tient compte en introduisant, comme dans le modèle de Sommerfeld, un temps de relaxation τ , qui dans le cas général dépend de \mathbf{r} et de \mathbf{k} : $\tau_n = \tau_n(\mathbf{r}_n(t'), \mathbf{k}_n(t'))$.

6.1.2 Les équations du mouvement

Les équations dynamiques du modèle semi-classique décrivent, **entre les collisions**, le mouvement des électrons en présence d'un potentiel périodique. Elles s'écrivent, par analogie avec (6.2),

$$\begin{cases} \dot{\mathbf{r}} = \mathbf{v}_n(\mathbf{k}) = \frac{1}{\hbar} \nabla E_n(\mathbf{k}) \\ \hbar \dot{\mathbf{k}} = -e [\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) + \mathbf{v}_n(\mathbf{k}) \wedge \mathbf{B}(\mathbf{r}, t)] \end{cases} \quad (6.5)$$

et sont valables à condition que les champs varient lentement par rapport aux dimensions du paquet d'onde associé à l'électron et par conséquent par rapport au paramètre du réseau a .

L'indice de bande n est une constante du mouvement. Ces équations expriment que chaque bande, caractérisée par $E_n(\mathbf{k})$, a sa propre dynamique, qui n'est pas couplée aux autres bandes. Aucune transition inter-bande n'est possible d'après le schéma ci-dessus. Pour de forts champs il est clair qu'il pourrait y avoir des transitions interbandes, on montre (voir Ashcroft-Mermin, annexe J) que cela peut arriver lorsque les conditions ci-dessous ne sont plus satisfaites en tout point \mathbf{k} ,

$$\begin{aligned} e|\mathbf{E}|a &\ll \frac{[E_{gap}(\mathbf{k})]^2}{E_F} \\ \hbar\omega_c &\ll \frac{[E_{gap}(\mathbf{k})]^2}{E_F} \end{aligned} \quad (6.6)$$

où $E_{gap}(\mathbf{k})$ est la différence entre $E_n(\mathbf{k})$ et l'énergie la plus proche $E_{n'}(\mathbf{k})$, et ω_c est la fréquence cyclotronique égale à $e|\mathbf{B}|/m$. La 1^{ère} condition, qui ne peut être violée que dans les isolants et les semi-conducteurs homogènes, correspond à ce que l'on appelle "claquage électrique" ("electric breakdown"),

la seconde condition qui peut être violée avec des champs magnétiques intenses, correspond à un “claquage magnétique” (“magnetic breakthrough”). Aux conditions (6.6) il faut encore ajouter la condition

$$\hbar\omega < E_{gap} \quad (6.7)$$

où E_{gap} est la largeur minimum de la bande interdite, car, si (6.7) n’est pas satisfaite, un photon pourrait fournir à un électron l’énergie nécessaire pour faire une transition interbande.

6.1.3 Discussion des équations de mouvement

La relation (6.5 a) n’est pas difficile à comprendre. Elle affirme simplement que la vitesse d’un électron dans le modèle semi-classique est la vitesse de groupe du paquet d’onde de Bloch associé à l’électron. En effet

$$\mathbf{v}_g = \frac{\partial\omega}{\partial\mathbf{k}} = \frac{\partial}{\partial\mathbf{k}} \frac{E(\mathbf{k})}{\hbar} = \frac{1}{\hbar} \nabla_{\mathbf{k}} E(\mathbf{k})$$

La relation (6.5 b) est beaucoup plus difficile à comprendre, car pour un électron de Bloch $\hbar\mathbf{k}$ n’est pas égal à la quantité de mouvement \mathbf{p} de l’électron. En réalité on aurait que

$$\frac{d\mathbf{p}}{dt} = \mathbf{F}_{ext} + \mathbf{F}_{réseau}$$

où \mathbf{F}_{ext} correspond au second membre de (6.5 b) et $\mathbf{F}_{réseau}$ correspond à la force exercée par le potentiel cristallin du réseau sur l’électron. Il faudrait montrer que la variation temporelle $\hbar\dot{\mathbf{k}}$ du “moment cristallin” n’est associée qu’aux forces extérieures \mathbf{F}_{ext} . Le lecteur intéressé pourra consulter le chap. 8 dans Kittel, qui donne une démonstration simple (voir aussi Ashcroft-Mermin, annexe H).

Dans le cas où la force extérieure est uniquement due à un champ électrique, la relation (6.5 b) peut être déduite de la conservation de l’énergie. Si ϕ est le potentiel associé à \mathbf{E} tel que $\mathbf{E} = -\nabla\phi$, on s’attend à ce que le paquet d’onde se déplace de telle sorte que l’énergie

$$E_n[\mathbf{k}(t)] - e\phi$$

reste constante. La dérivée temporelle de l’énergie s’écrit

$$\frac{d}{dt} E_n - e \frac{d\phi}{dt} = \frac{\partial E_n}{\partial \mathbf{k}} \dot{\mathbf{k}} - e \nabla \phi \cdot \dot{\mathbf{r}} = 0$$

que l'on peut écrire avec l'équation (6.5 a)

$$\mathbf{v}_n(\mathbf{k}) \cdot [\hbar \dot{\mathbf{k}} - e \nabla \phi] = 0$$

qui s'annule si

$$\hbar \dot{\mathbf{k}} = e \nabla \phi = -e \mathbf{E}$$

Cependant cette équation est encore vérifiée si l'on ajoute à $-e \mathbf{E}$ un terme perpendiculaire à $\mathbf{v}_n(\mathbf{k})$. Reste encore à montrer que le seul terme additionnel est celui associé au champ magnétique.

6.2 La conduction électrique dans le modèle semi-classique

Dans ce qui suit nous omettons l'indice de bande, car nous admettons qu'il n'y a pas de claquage. Nous admettons d'autre part que $T = 0$, ce qui ne modifie pas significativement les propriétés que nous discutons.

6.2.1 Une bande pleine ne "conduit" pas

En présence d'un champ électrique \mathbf{E} , l'équation de mouvement (6.5) s'écrit

$$\hbar \dot{\mathbf{k}} = -e \mathbf{E}$$

soit si l'on admet qu'il n'y a pas de collision pendant le temps t

$$\mathbf{k}(t) = \mathbf{k}(0) - \frac{e \mathbf{E}}{\hbar} t \quad (6.8)$$

De façon générale, sous l'effet d'un champ extérieur les électrons évoluent dans "l'espace de phase" à six dimensions $(r_x, r_y, r_z, k_x, k_y, k_z)$. On peut montrer (voir Ashcroft-Mermin, annexe H), par analogie avec le théorème de Liouville, en suivant les électrons dans leur mouvement, que le volume de l'espace de phase associé à un nombre donné d'électrons reste constant. Ceci implique que pour une bande pleine, la densité électronique dans l'espace de phase, égale à $1/(4\pi^3)$ en tout point, n'est pas modifiée par un champ extérieur.

Pour une bande d'énergie remplie, la densité de courant électronique s'écrit

$$\mathbf{j} = -e \int_{\text{zone Brillouin}} \frac{d^3 k}{4\pi^3} \mathbf{v} = -e \frac{1}{\hbar} \int_{\text{zone Brillouin}} \frac{d^3 k}{4\pi^3} \frac{\partial E}{\partial \mathbf{k}} \quad (6.9)$$

La relation (6.9) implique que $\mathbf{j} = \mathbf{0}$. Soit en effet une fonction périodique $f(\mathbf{k})$ ayant la périodicité du réseau réciproque, telle que $f(\mathbf{k} + \mathbf{G}) = f(\mathbf{k})$.

Comme l'intégrale est prise sur une cellule primitive,

$$I(\mathbf{g}) = \int_{\substack{\text{cellule} \\ \text{primitive}}} d^3k f(\mathbf{k} + \mathbf{g})$$

est indépendant de \mathbf{g} . Ainsi en particulier

$$\frac{\partial I(\mathbf{g})}{\partial \mathbf{g}} = \int_{\substack{\text{cellule} \\ \text{primitive}}} d^3k \frac{\partial f(\mathbf{k} + \mathbf{g})}{\partial \mathbf{g}} = \int_{\substack{\text{cellule} \\ \text{primitive}}} d^3k \frac{\partial f(\mathbf{k} + \mathbf{g})}{\partial \mathbf{k}} = \mathbf{0}$$

En évaluant l'intégrale en $\mathbf{g} = \mathbf{0}$, on démontre que toute fonction périodique $f(\mathbf{k})$ satisfait

$$\int_{\substack{\text{cellule} \\ \text{primitive}}} d^3k \frac{\partial f(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}} = \mathbf{0}$$

Ainsi l'intégrale du gradient d'une fonction périodique sur une cellule unité est nulle. Comme $E(\mathbf{k})$ est périodique de période \mathbf{G} , il en résulte que $\mathbf{j} = 0$. Ou en d'autres termes : les bandes pleines sont inertes du point de vue de la dynamique électronique.

La conduction électronique est ainsi uniquement due aux bandes partiellement remplies, ce qui justifie le fait que l'on ne tient compte que des électrons de valence pour décrire la conductibilité des solides. Il faut aussi noter, comme nous l'avons brièvement décrit, que cette remarque est à la base de la classification des solides en isolants, conducteurs, etc.

6.2.2 Une autre approche pour les bandes pleines

Il est surprenant de remarquer que, sous l'effet d'un champ électrique, le vecteur \mathbf{k} évolue en fonction du temps selon (6.8), et que néanmoins le courant résultant soit nul. Dans le modèle de Sommerfeld des électrons libres, on aurait la situation représentée dans la Fig. 6.1

Sous l'effet du champ électrique \mathbf{E} , l'ensemble des vecteurs \mathbf{k} évoluent pendant le temps Δt de $\Delta \mathbf{k} = -e\mathbf{E}\Delta t/\hbar$, il en résulte une densité de courant non nulle donnée par

$$\mathbf{j} = -en \frac{\hbar \Delta \mathbf{k}}{m}$$

Pour comprendre ce qui se passe dans le cas des électrons de Bloch il faut remarquer que le courant porté par un électron est proportionnel à sa vitesse, qui n'est pas égale à $\hbar \mathbf{k}/m$. La vitesse est une fonction périodique

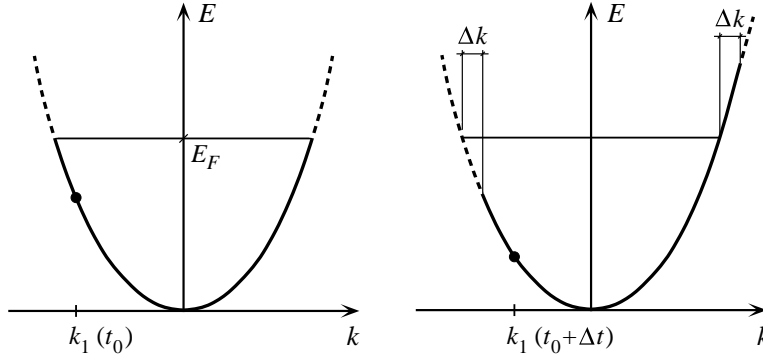


FIGURE 6.1 – Evolution des états occupés dans le modèle de Sommerfeld sous l'effet de l'enclenchement d'un champ \mathbf{E} . La courbe en traits pleins correspond aux états occupés et la courbe en traits interrompus aux états vides.

dans l'espace réciproque, de même que l'énergie $E(\mathbf{k})$ et l'on a la situation représentée dans la Fig. 6.2.

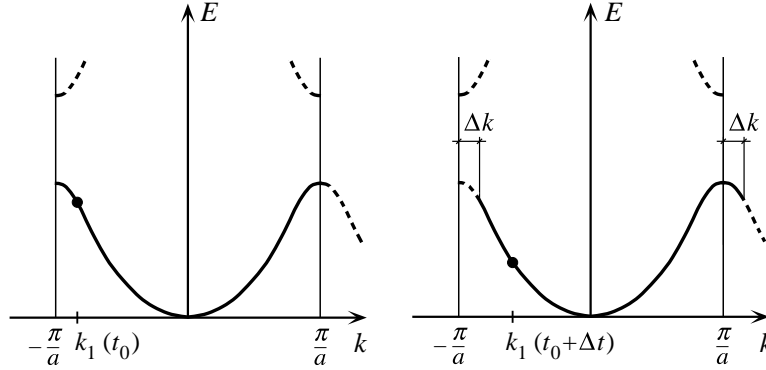


FIGURE 6.2 – Bande pleine. Évolution des états occupés, dans le modèle semi-classique, sous l'effet de l'enclenchement d'un champ \mathbf{E} de t_0 à $t_0 + \Delta t$. La courbe en traits pleins correspond aux états occupés, la courbe en traits interrompus aux états vides.

La Fig. 6.2 montre clairement que sous l'effet du champ \mathbf{E} le remplissage des états par les électrons n'est pas modifié, car deux états électroniques de la même bande qui diffèrent d'un vecteur du réseau réciproque doivent être considérés comme le même état (5.26).

Il est aussi intéressant de remarquer l'évolution de la vitesse en fonction de \mathbf{k} (voir Fig. 6.3).

La vitesse croît linéairement avec \mathbf{k} ou avec le temps selon (6.8) pour \mathbf{k} faible, elle passe par un maximum, puis **décroît** en s'approchant de la limite

de zone. Ce comportement est une conséquence des forces exercées par le potentiel cristallin sur l'électron. Lorsqu'un électron s'approche d'un plan de Bragg sous l'effet du champ électrique, il tend à être réfléchi dans la direction opposée. Si l'électron pouvait passer la limite de zone, il apparaîtrait un courant alternatif! Ceci n'est cependant pas possible car la variation de k entre deux collisions est très faible ($\Delta k \sim 10^{-1} \text{cm}^{-1}$ comparé à $1/a \sim 10^8 \text{cm}^{-1}$)

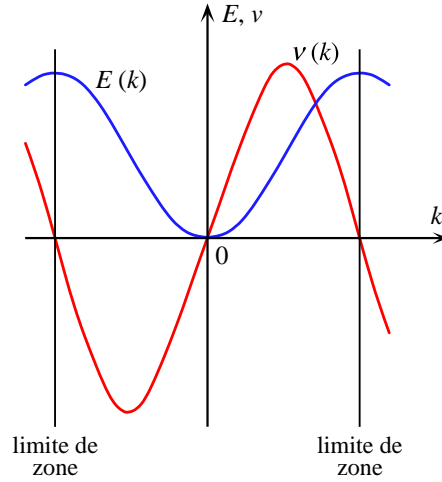


FIGURE 6.3 – $E(k)$ et $v(k)$ en fonction de k (ou en fonction du temps par (6.8)) dans une direction parallèle à un vecteur du réseau réciproque.

6.2.3 Conduction d'une bande partiellement remplie

Lorsqu'une bande est partiellement remplie, on a la situation donnée dans la Fig. 6.4.

Dans ce cas la densité de courant électrique est donnée par

$$\mathbf{j} = -e \int_{\text{états occupés}} \frac{d^3k}{4\pi^3} \mathbf{v}(\mathbf{k}) \quad (6.10)$$

où l'intégrale est prise sur tous les états occupés de la bande. Dans le cas où $\mathbf{E} = \mathbf{0}$, \mathbf{j} s'annule en tenant compte de la symétrie d'inversion de la zone de Brillouin, soit $E_n(\mathbf{k}) = E_n(-\mathbf{k})$ ce qui implique d'une part que si l'état \mathbf{k} est occupé, l'état $-\mathbf{k}$ l'est aussi, et d'autre part que $\mathbf{v}_n(\mathbf{k}) = -\mathbf{v}_n(-\mathbf{k})$. En présence d'un champ \mathbf{E} le remplissage des états électroniques s'écarte de la situation d'équilibre et il apparaît une densité de courant non nulle.

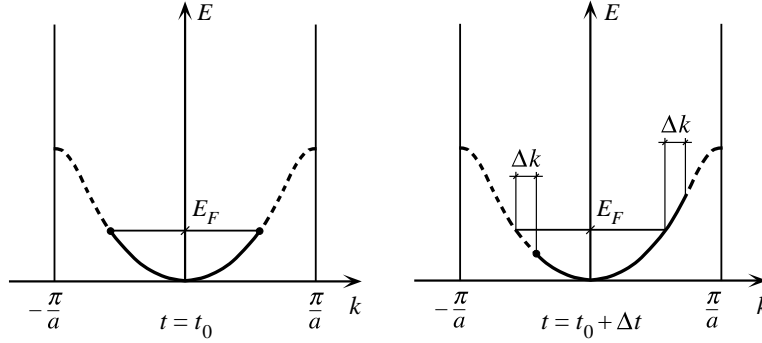


FIGURE 6.4 – Bande partiellement remplie. Évolution des états occupés, dans le modèle semi-classique, sous l’effet de l’enclenchement d’un champ \mathbf{E} de t_0 à $t_0 + \Delta t$. La courbe en trait plein correspond aux états occupés, la courbe en trait interrompu aux états vides.

Il faut en réalité tenir compte de l’effet des collisions qui tendent à ”ramener” les électrons dans une situation proche de la distribution électronique à l’équilibre. Le courant total est donné par (6.10) où l’intégrale est prise sur les états occupés dans cet équilibre dynamique, différent de l’équilibre en champ nul.

6.3 Le concept de trou et la notion de masse effective

Pour certains métaux (le Bi par exemple) le coefficient de Hall est positif, ce qui laisse sous-entendre que les porteurs de charge sont positifs. Un tel comportement, qui ne peut pas s’expliquer dans un modèle d’électrons libres, trouve une explication dans le modèle semi-classique.

6.3.1 La notion de trou

La relation (6.10) permet de calculer la densité de courant des électrons situés dans une bande d’énergie donnée en faisant une somme sur tous les niveaux électroniques occupés dans cette bande. On peut écrire cette relation différemment en remarquant qu’une bande remplie ne conduit pas, soit

$$\mathbf{0} = \int_{\text{zone Brillouin}} \frac{d^3 k}{4\pi^3} \mathbf{v}(\mathbf{k}) = \int_{\text{états occupés}} \frac{d^3 k}{4\pi^3} \mathbf{v}(\mathbf{k}) + \int_{\text{états vides}} \frac{d^3 k}{4\pi^3} \mathbf{v}(\mathbf{k})$$

ce qui permet d'écrire (6.10) sous la forme

$$\mathbf{j} = (+e) \int \frac{d^3\mathbf{k}}{4\pi^3} \mathbf{v}(\mathbf{k}) \quad (6.11)$$

*états
vides*

Donc il est équivalent de considérer que le courant relatif à une bande, ayant un certain nombre d'états occupés, est produit par :

— les électrons qui se trouvent dans des états occupés

ou

— des porteurs de charge $(+e)$ occupant les niveaux électroniques de la zone de Brillouin non occupés par les électrons.

Les particules imaginaires de charge $+e$ introduites ci-dessus sont appelées **trous**. Ainsi, bien que les porteurs de charge soient les électrons, on peut dans certaines situations simplifier la description en considérant que les porteurs de charge sont les trous. Mais ces deux descriptions sont complémentaires et ne peuvent pas être utilisées simultanément pour une même bande.

Pour compléter la description il faut encore connaître la façon dont les états inoccupés évoluent sous l'effet des champs extérieurs. La réponse est simple :

Les états inoccupés évoluent en fonction du temps sous l'effet des champs extérieurs comme s'ils étaient occupés par des électrons de charge $-e$.

Ceci est lié au fait que si l'on connaît les valeurs de \mathbf{k} et \mathbf{r} en $t = 0$, les équations semi-classiques du mouvement (6 équations de 1^{er} ordre avec 6 variables) déterminent de façon unique $\mathbf{k}(t)$ et $\mathbf{r}(t)$. Dans l'espace $\mathbf{k}, \mathbf{r}, t$ tout point d'une orbite donnée est suffisant pour caractériser toute l'orbite. Deux orbites distinctes ne peuvent ainsi pas avoir deux points en commun. On peut donc séparer les orbites entre orbites occupées et inoccupées, selon qu'elles contiennent ou non des électrons au temps $t = 0$. Pour tout temps t ultérieur, les états inoccupés se trouveront sur des orbites inoccupées et les états occupés sur des orbites occupées. Ainsi l'évolution des états occupés et inoccupés est entièrement déterminée par la structure des orbites, qui dépend uniquement de la forme des équations du mouvement, et pas du fait que l'orbite est occupée ou non. Ainsi les vecteurs \mathbf{k} des états inoccupés évoluent aussi selon la relation (6.5), soit (noter le signe $-$)

$$\hbar \dot{\mathbf{k}} = (-e)(\mathbf{E} + \mathbf{v} \wedge \mathbf{B}) \quad (6.12)$$

On peut s'en convaincre aisément dans un exemple simple, voir Fig. 6.5, où l'on a représenté l'évolution en fonction du temps des vecteurs \mathbf{k} associés

aux états occupés et vides d'une bande d'énergie typique d'un semiconducteur. On peut imaginer ici que le trou a été produit par éjection d'un électron de la bande de valence à la bande de conduction (voir Chap. 7).

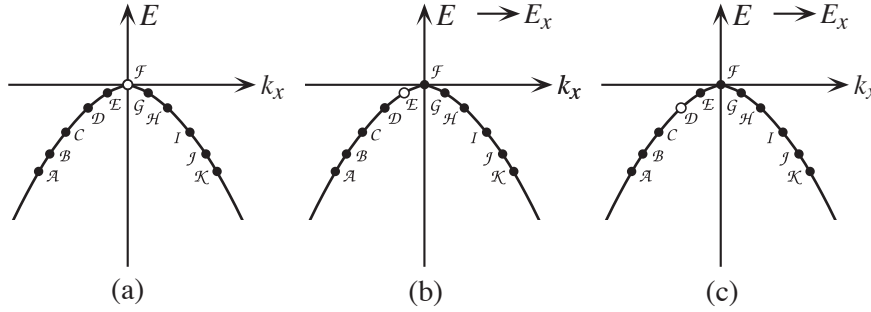


FIGURE 6.5 – a) Au temps $t = 0$ tous les états sont occupés, sauf l'état F au sommet de la bande b) Un champ électrique est appliqué dans la direction $+x$, une force sur les électrons apparaît dans la direction $-k_x$, ce qui correspond à un déplacement du trou de F en E . c) Après un temps supplémentaire le trou se trouve en D .

6.3.2 La notion de masse effective

Pour savoir si une orbite électronique (dans l'espace direct) se comporte comme celle d'une particule libre de charge négative ou non, il faut étudier la relation qui existe entre l'accélération $\mathbf{a} = \dot{\mathbf{v}}$ et $\dot{\mathbf{k}}$. Pour une particule libre $\dot{\mathbf{v}}$ est parallèle à $\dot{\mathbf{k}}$:

$$\dot{\mathbf{r}} = \mathbf{v} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \hbar^2 k^2}{\partial \mathbf{k}} = \frac{\hbar \mathbf{k}}{m}$$

soit

$$\ddot{\mathbf{r}} = \mathbf{a} = \frac{\hbar}{m} \dot{\mathbf{k}} \quad (6.13)$$

La situation est très différente pour un niveau électronique qui se trouve **proche du sommet d'une bande**. Dans un cas isotrope l'énergie peut s'écrire

$$E(\mathbf{k}) = E(\mathbf{k}_0) - A(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0)^2 \quad (6.14)$$

où \mathbf{k}_0 correspond au sommet de la bande et A est une constante positive. Une telle relation décrit l'énergie des niveaux électroniques au sommet de la bande représentée dans la Fig. 6.5. Plus généralement elle correspond souvent aux états vides dans une bande presque entièrement remplie. C'est par exemple le cas des états vides apparaissant dans la seconde zone de Brillouin de la Fig. 5.21, où l'énergie passe par un maximum au centre de la zone.

On définit une grandeur m^* positive ayant la dimension d'une masse par la relation

$$A = \frac{\hbar^2}{2m^*} \quad m^* > 0 \quad (6.15)$$

Ainsi au voisinage de \mathbf{k}_0 :

$$\mathbf{v}(\mathbf{k}) = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E}{\partial \mathbf{k}} \cong -\frac{\hbar}{m^*} (\mathbf{k} - \mathbf{k}_0)$$

soit

$$\mathbf{a} = \dot{\mathbf{v}} = -\frac{\hbar}{m^*} \dot{\mathbf{k}} \quad (6.16)$$

qui est une accélération opposée à $\dot{\mathbf{k}}$. En remplaçant dans l'équation de mouvement (6.12) on obtient

$$-m^* \mathbf{a} = \hbar \dot{\mathbf{k}} = (-e) [\mathbf{E} + \mathbf{v} \wedge \mathbf{B}] \quad (6.17)$$

On peut donc interpréter cette relation en disant que, pour autant que la relation (6.16) soit satisfaite, un électron (de charge négative) répond à un champ électrique comme s'il avait une masse négative $-m^*$. En changeant le signe des 2 membres de (6.17), on peut aussi interpréter cette équation en disant qu'elle décrit le **mouvement d'une particule de charge positive et de masse m^* positive**.

En particulier un trou, correspondant à une particule fictive dans un état électronique vide, se comporte au voisinage du sommet d'une bande comme une particule de charge $+e$ et de masse m^* . Ainsi, à tous les points de vue, soit du point de vue de l'équation du mouvement et de la conduction électrique, **les trous se comportent comme des particules de charge positive**.

6.3.3 Généralisation, deux remarques

- La condition pour que les niveaux inoccupés se trouvent suffisamment proches d'un maximum de bande et que \mathbf{a} et $\dot{\mathbf{k}}$ soient de sens opposé (voir 6.16) peut être généralisée sous la forme

$$\dot{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{a} < 0 \quad \implies \quad \sum_{i,j} \dot{k}_i \frac{\partial^2 E}{\partial k_i \partial k_j} \dot{k}_j < 0 \quad \forall d\mathbf{k}$$

- La notion de masse effective peut être généralisée, en introduisant un tenseur de masse effective

$$[\mathbf{m}^{-1}(\mathbf{k})]_{ij} = \pm \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E(\mathbf{k})}{\partial k_i \partial k_j} = \pm \frac{1}{\hbar} \frac{\partial v_i}{\partial k_j} \quad (6.18)$$

où le signe $+$ ou $-$ correspond aux situations où \mathbf{k} est proche d'un minimum de bande (électron) ou d'un maximum (trou). Dans ce cas l'équation d'évolution s'écrit

$$\sum_j m_{ij}^* a_j = \mp e [\mathbf{E} + \mathbf{v} \wedge \mathbf{B}]_i \quad (6.19)$$

6.4 Mouvement semi-classique dans un champ magnétique statique uniforme

6.4.1 Orbite électronique dans l'espace \mathbf{k}

Dans un champ magnétique \mathbf{B} constant, les équations du mouvement semi-classique s'écrivent,

$$\dot{\mathbf{r}} = \mathbf{v}(\mathbf{k}) = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E}{\partial \mathbf{k}} \quad (6.20)$$

$$\hbar \dot{\mathbf{k}} = (-e) \mathbf{v}(\mathbf{k}) \wedge \mathbf{B} \quad (6.21)$$

Si le champ \mathbf{B} est parallèle à l'axe z , on déduit de (6.21)

$$\dot{k}_z = 0 \quad \implies \quad k_z = cte$$

Et en multipliant (6.21) par \mathbf{v} ,

$$0 = \hbar \dot{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{v} = \frac{\partial E}{\partial \mathbf{k}} \cdot \dot{\mathbf{k}} = \frac{dE}{dt}$$

Ainsi dans l'espace réciproque les trajectoires électroniques sont situées à l'intersection d'une surface d'énergie constante et d'un plan perpendiculaire à \mathbf{B} .

Le sens de parcours dépend du sens de $\mathbf{v}(\mathbf{k})$ par rapport à la normale à la surface $E(\mathbf{k}) = cte$. Dans le cas de la Fig. 6.6, où le gradient de $E(\mathbf{k})$ pointe vers l'extérieur, la relation (6.21) fixe le sens de $\dot{\mathbf{k}}$, donc le parcours de l'électron. Une telle trajectoire est dite de type électronique ("electron orbit"). Par contre, lorsque $\nabla E(\mathbf{k})$ pointe vers l'intérieur de la surface, le sens de parcours de l'électron est inversé, on parle de trajectoire de type trou ("hole orbit").

De nombreuses techniques expérimentales, et en particulier **l'effet de Haas-van Alphen** permettent d'étudier le mouvement des électrons au niveau de Fermi en présence d'un champ \mathbf{B} . La surface d'énergie constante

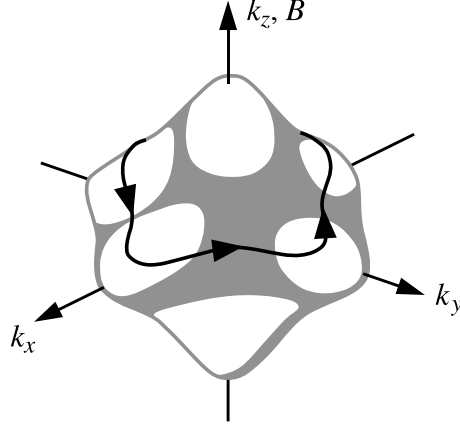


FIGURE 6.6 – Intersection d’une surface d’énergie constante avec un plan perpendiculaire au champ magnétique. La flèche indique la direction de mouvement le long de l’orbite dans le cas où l’énergie des niveaux intérieurs à la surface est inférieure à celle des niveaux à l’extérieur.

est dans ce cas la surface de Fermi, les états d’énergie supérieure sont inoccupés. La connaissance de la surface de Fermi permet ainsi de déterminer les trajectoires des électrons dans l’espace réciproque. Réciproquement la détermination des caractéristiques des trajectoires électroniques renseigne sur la forme de la surface de Fermi.

6.4.2 Trajectoire dans l’espace réel

On peut déterminer la projection dans un plan perpendiculaire à \mathbf{B} des trajectoires électroniques dans l’espace réel, en notant que

$$\mathbf{r}_\perp = \mathbf{r} - \frac{\mathbf{B}(\mathbf{B} \cdot \mathbf{r})}{B^2} = \frac{\mathbf{B} \wedge (\mathbf{r} \wedge \mathbf{B})}{B^2} \quad (6.22)$$

et en multipliant (6.21) par \mathbf{B}/B :

$$\frac{\mathbf{B} \wedge \hbar \dot{\mathbf{k}}}{B} = -e \frac{\mathbf{B} \wedge (\mathbf{v} \wedge \mathbf{B})}{B} = -e B \mathbf{v}_\perp = -e B \dot{\mathbf{r}}_\perp \quad (6.23)$$

ce qui donne en intégrant

$$\mathbf{r}_\perp(t) - \mathbf{r}_\perp(0) = -\frac{\hbar}{eB} \frac{\mathbf{B}}{B} \wedge [\mathbf{k}(t) - \mathbf{k}(0)] \quad (6.24)$$

Ainsi, au facteur $\frac{\hbar}{eB}$ près, $\mathbf{r}_\perp(t) - \mathbf{r}_\perp(0)$ est simplement tourné de 90° par rapport à $\mathbf{k}(t) - \mathbf{k}(0)$. Il en est de même de la projection de la trajectoire sur le plan perpendiculaire à \mathbf{B} .

Dans le cas particulier d'un électron libre, où les surfaces d'énergie constante sont des sphères, la trajectoire dans l'espace des \mathbf{k} est un cercle, il en est de même dans l'espace réel. On retrouve donc le résultat bien connu que les électrons décrivent des cercles dans le plan perpendiculaire à \mathbf{B} . La fréquence de révolution, dite **fréquence cyclotronique** ω_c est donnée par

$$\omega_c = \frac{eB}{m} \quad (6.25)$$

Il faut remarquer que les orbites dans l'espace des \mathbf{k} ne sont pas nécessairement fermées sur elles-mêmes. L'existence d'orbites non fermées explique par exemple que la résistivité en présence d'un champ \mathbf{B} dépende de \mathbf{B} , contrairement aux prédictions faites pour un électron libre. Nous donnons dans les Figs. 6.7 et 6.8 l'exemple d'orbites fermées et ouvertes à la surface de Fermi d'un métal monovalent.

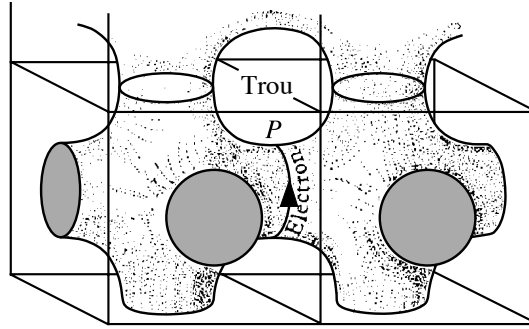


FIGURE 6.7 – Orbite électronique et orbite de trou à la surface de Fermi d'un métal, représenté dans un schéma de zone répétée.

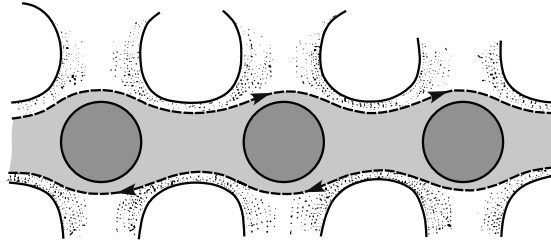


FIGURE 6.8 – Exemple d'une orbite non fermée dans un schéma de zone répétée.

6.4.3 Le temps de révolution - fréquence cyclotronique

Il est aussi intéressant de calculer le temps de révolution d'un électron sur une orbite, qui joue le même rôle que la période associée à la fréquence cyclotronique ω_c d'un électron libre. Considérons une orbite d'énergie E située dans un plan perpendiculaire à \mathbf{B} (Fig. 6.9).

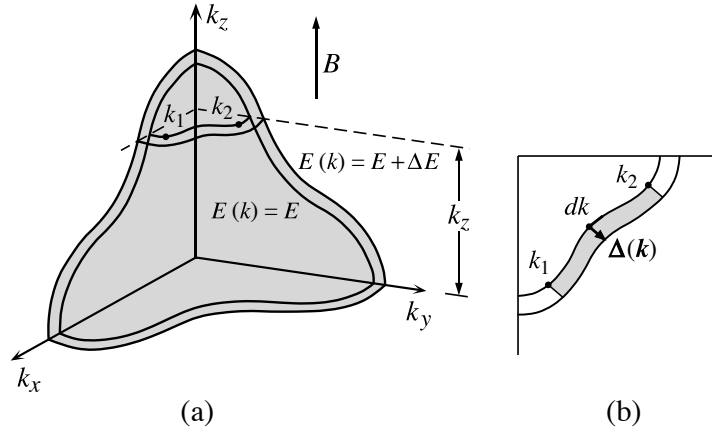


FIGURE 6.9 – a) Partie de deux orbites, de même k_z , se trouvant sur les surfaces d'énergie constante $E(\mathbf{k}) = E$ et $E(\mathbf{k}) = E + \Delta E$. Le temps de parcours de \mathbf{k}_1 à \mathbf{k}_2 est donné par (6.26). b) Une section de (a) dans un plan perpendiculaire à \mathbf{B} et contenant les orbites.

Le temps nécessaire pour passer de \mathbf{k}_1 à \mathbf{k}_2 est donné par

$$t_2 - t_1 = \int_{\mathbf{k}_1}^{\mathbf{k}_2} \frac{d\mathbf{k}}{|\dot{\mathbf{k}}|} \quad (6.26)$$

où

$$\dot{\mathbf{k}} = -\frac{e}{\hbar^2} \frac{\partial E}{\partial \mathbf{k}} \wedge \mathbf{B} = -\frac{e}{\hbar^2} \frac{\partial E}{\partial \mathbf{k}_\perp} \wedge \mathbf{B}$$

soit

$$|\dot{\mathbf{k}}| = \frac{eB}{\hbar^2} \left| \frac{\partial E}{\partial \mathbf{k}_\perp} \right| \quad (6.27)$$

Introduisons le vecteur $\Delta(\mathbf{k})$ (voir Fig. 6.9 b) qui relie les 2 surfaces d'énergie E et $E + \Delta E$, perpendiculaire à l'orbite d'énergie E au point \mathbf{k} , on a

$$\Delta E = \frac{\partial E}{\partial \mathbf{k}} \cdot \Delta(\mathbf{k}) = \left| \frac{\partial E}{\partial \mathbf{k}_\perp} \right| \Delta(\mathbf{k}) \quad (6.28)$$

En tenant compte des relations (6.27) et (6.28), (6.26) peut s'écrire

$$t_2 - t_1 = \frac{\hbar^2}{eB} \frac{1}{\Delta E} \int_{\mathbf{k}_1}^{\mathbf{k}_2} \Delta(\mathbf{k}) d\mathbf{k} \quad (6.29)$$

L'intégrale de (6.29) représente la surface, dans le plan perpendiculaire à \mathbf{B} , située entre deux orbites voisines (voir Fig. 6.9 b). En prenant la limite de (6.29) pour ΔE tendant vers zéro, il vient alors,

$$t_2 - t_1 = \frac{\hbar^2}{eB} \frac{\partial A_{1,2}(E)}{\partial E} \quad (6.30)$$

où $A_{1,2}(E)$ est l'aire, située dans le plan perpendiculaire à B , délimitée par la surface d'énergie $E = cte$ et les vecteurs \mathbf{k}_1 et \mathbf{k}_2 .

Dans le cas où l'orbite est fermée, on peut calculer le temps de révolution

$$T(E, k_z) = \frac{\hbar^2}{eB} \frac{\partial}{\partial E} A(E, k_z) \quad (6.31)$$

où $A(E, k_z)$ est l'aire du plan $k_z = cte$ découpée par la surface d'énergie E .

On définit souvent une **masse effective cyclotronique** $m^*(E, k_z)$ par la relation,

$$m^*(E, k_z) = \frac{\hbar^2}{2\pi} \frac{\partial A(E, k_z)}{\partial E} \quad (6.32)$$

ce qui permet d'écrire le temps de révolution sous la forme

$$T(E, k_z) = \frac{2\pi}{eB} m^*(E, k_z) \quad (6.33)$$

soit sous la forme que l'on obtiendrait pour un électron libre (voir 6.25).

La valeur de m^* , qui peut être déterminée expérimentalement dans les **expériences de résonance cyclotronique**, est ainsi une mesure indirecte de la forme des surfaces d'énergie constante.

Les mesures de résonance cyclotronique sont en particulier faites dans les semiconducteurs. L'échantillon est placé dans un champ magnétique statique, à basse température, de telle sorte que les porteurs de charge puissent décrire plusieurs orbites avant de subir une collision ($\omega_c \tau \gg 1$). Les porteurs de charges sont accélérés par un champ radiofréquence perpendiculaire à \mathbf{B} et une absorption résonante d'énergie a lieu lorsque la fréquence du champ radiofréquence est égale à la fréquence cyclotronique. Dans le cas où $m^*/m = 0.1$ la fréquence cyclotronique est égale à $\nu_c = 28$ GHz dans un champ de 1000 Gauss (= 0.1 Tesla).

6.5 Mouvement semi-classique dans des champs \mathbf{E} et \mathbf{B} uniformes, constants et perpendiculaires. L'effet Hall à haut champ.

Pour déterminer les orbites électroniques dans l'espace des \mathbf{k} il faut repartir de l'équation de mouvement (6.21) à laquelle on a ajouté le terme $-e\mathbf{E}$, la multiplier vectoriellement par le vecteur unité \mathbf{B}/B et intégrer, ce qui donne (voir 6.24)

$$\mathbf{r}_\perp(t) - \mathbf{r}_\perp(0) = -\frac{\hbar}{eB} \frac{\mathbf{B}}{B} \wedge [\mathbf{k}(t) - \mathbf{k}(0)] + \mathbf{w}t \quad (6.34)$$

où $\mathbf{w} = \frac{\mathbf{E} \wedge \mathbf{B}}{B^2}$

Ainsi le mouvement perpendiculaire à \mathbf{B} dans l'espace réel est la superposition du mouvement qu'aurait l'électron en l'absence de champ électrique et d'une translation uniforme de vitesse constante.

Le comportement de l'effet Hall dépend de la nature des orbites électroniques en présence du champ, et en particulier du fait qu'elles soient ouvertes ou fermées. Faisons l'hypothèse que **toutes les orbites occupées ou toutes les orbites non occupées sont fermées** (elles ne peuvent pas être simultanément fermées). Nous admettons d'autre part que la **période moyenne** T d'un porteur de charge à la surface de Fermi est **faible par rapport au temps de relaxation** τ . Cela implique que l'échantillon est pur, à basse température, placé dans un **champ magnétique élevé**. Dans ces conditions les porteurs de charge décrivent plusieurs révolutions entre 2 collisions successives.

La densité de courant s'écrit au temps $t = 0$, dans l'esprit du modèle de Drude,

$$\mathbf{j} = -nev$$

où \mathbf{v} est la vitesse moyenne acquise par un électron depuis sa dernière collision. Cette vitesse doit être moyennée sur l'ensemble des états électroniques occupés. La composante de la vitesse perpendiculaire à \mathbf{B} est donnée par

$$\mathbf{v}_\perp(0) \cong \frac{\mathbf{r}_\perp(0) - \mathbf{r}_\perp(-\tau)}{\tau} = -\frac{\hbar}{eB} \frac{\mathbf{B}}{B} \wedge \frac{\mathbf{k}(0) - \mathbf{k}(-\tau)}{\tau} + \mathbf{w} \quad (6.35)$$

Dans le cas où toutes les **orbites occupées sont fermées**, $\mathbf{k}(0) - \mathbf{k}(-\tau)$ est borné, la vitesse de translation \mathbf{w} est supérieure au 1^{er} terme de (6.35), et l'on a

$$\lim_{\tau/T \rightarrow \infty} \mathbf{j}_\perp = -ne\mathbf{w} = -\frac{ne}{B} \mathbf{E} \wedge \frac{\mathbf{B}}{B} \quad (6.36)$$

Le résultat (6.36) signifie que l'effet de la force de Lorentz "empêche" l'électron d'acquérir une vitesse moyenne de déplacement dans le sens de \mathbf{E} , seule la composante de \mathbf{j} perpendiculaire à \mathbf{E} est significative. On peut alors définir une constante de Hall R_H

$$R_H = \frac{E}{j_{\perp} B} = -\frac{1}{ne}$$

Dans le cas où toutes les **orbites non occupées sont fermées**, le résultat correspondant est

$$\lim_{\tau/T \rightarrow \infty} \mathbf{j}_{\perp} = +\frac{n_h e}{B} \mathbf{E} \wedge \frac{\mathbf{B}}{B}$$

La constante de Hall est alors donnée par

$$R_H = \frac{1}{n_h e}$$

où n_h est le nombre d'états électroniques non occupés par unité de volume.

Il faut remarquer que dans les cas où il existe à la fois des orbites occupées et des orbites non occupées qui sont ouvertes, le coefficient de Hall ne s'exprime plus aussi simplement, car on ne peut plus négliger dans (6.26) le 1^{er} terme de $\mathbf{v}_{\perp}(0)$ par rapport à \mathbf{w} .