

But de cette série : apprendre à interpréter des courbes de dispersion des phonons

1. Vibrations hors-plan d'un réseau carré

Soit un réseau carré plan de constante a formé d'atomes identiques de masse m soumis à la constante de rappel C entre premiers voisins dans les deux directions, et astreints à se déplacer perpendiculairement au plan du réseau. (Note : la valeur de C tient déjà compte du fait que le mouvement est hors-plan, elle est donc différente de la constante de rappel qui serait utilisée pour décrire les vibrations dans le plan).

On peut montrer que la relation de dispersion est :

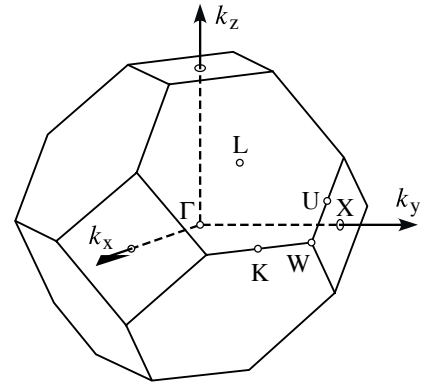
$$\omega^2(k_x, k_y) = \frac{4C}{m} \left(\sin^2 \frac{k_x a}{2} + \sin^2 \frac{k_y a}{2} \right)$$

- (a) Dessiner la 1ère zone de Brillouin correspondante au réseau carré.
Identifier les points $\Gamma = (0,0)$, $A = (0, \frac{\pi}{a})$ et $B = (\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a})$.
- (b) Représenter la courbe de dispersion $\omega(k)$ selon le chemin $\Gamma AB\Gamma$.

2. Directions et points à haute symétrie dans la 1ère zone de Brillouin d'un réseau fcc

Considérer un réseau de Bravais fcc. La figure ci-contre montre la 1ère zone de Brillouin correspondante. Des points à haute symétrie sont indiqués. Le point Γ correspond à l'origine.

Les vecteurs de l'espace réciproque selon les directions à haute symétrie peuvent être trouvés en fonction du vecteur unitaire $(\hat{x}, \hat{y}, \hat{z})$ grâce aux relations suivantes (voir polycopié Ch. 1) :



le long de ΓX : $k_x = k_z = 0, k_y = \mu \frac{2\pi}{a}$ $0 \leq \mu \leq 1$

le long de ΓL : $k_x = k_z = k_y = \mu \frac{2\pi}{a}$ $0 \leq \mu \leq \frac{1}{2}$

le long de ΓK : $k_z = 0, k_x = k_y = \mu \frac{2\pi}{a}$ $0 \leq \mu \leq \frac{3}{4}$

le long de ΓW : $k_z = 0, k_x = \frac{1}{2} \mu \frac{2\pi}{a}, k_y = \mu \frac{2\pi}{a}$ $0 \leq \mu \leq 1$

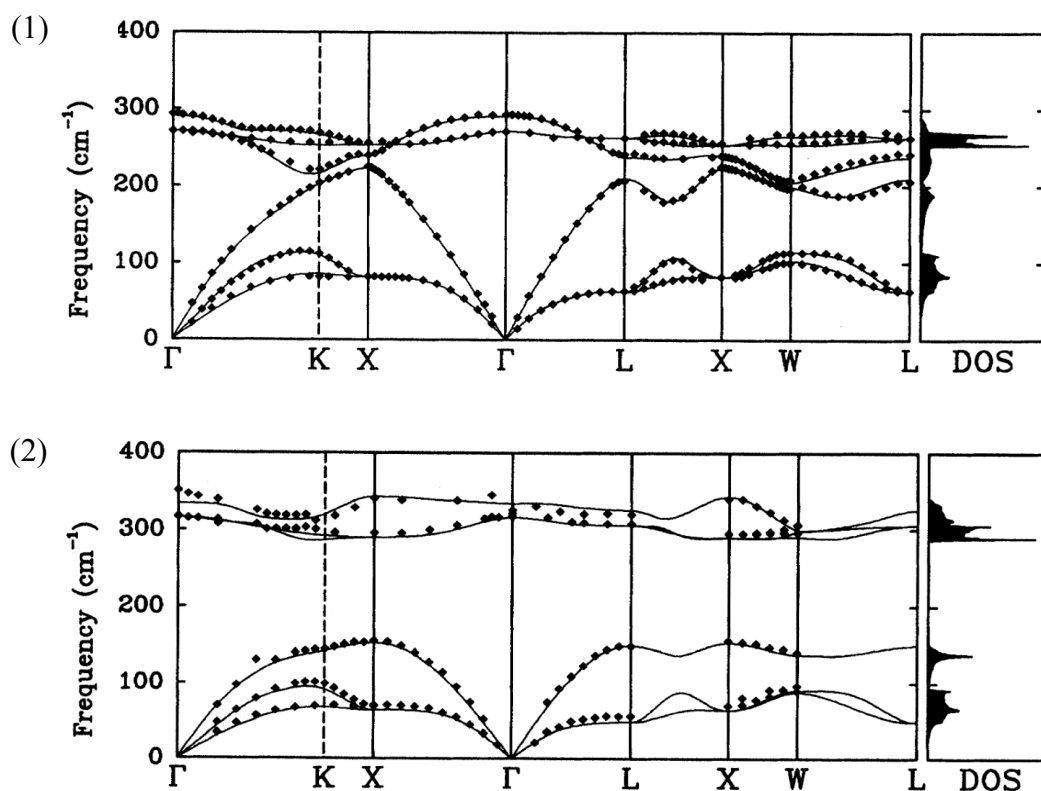
- (a) Déterminer les coordonnées des points Γ , X , L , K , W .
- (b) Déterminer la norme des vecteurs $\overline{\Gamma X}$, $\overline{\Gamma L}$, $\overline{\Gamma K}$, \overline{XW} , et l'exprimer en unités de $\frac{2\pi}{a}$. Quel est le point, situé au bord de la zone de Brillouin, le plus proche de Γ ?
- (c) Esquisser la section de la zone Brillouin i) dans le plan $k_x k_y, k_z = 0$ et ii) dans le plan identifié par k_z et $k_x = k_y$. Indiquer les points à haute symétrie.

3. Courbes de dispersion phononique dans les semiconducteurs

Les semiconducteurs du groupe IV cristallisent dans la structure du diamant (fcc avec une base composée de deux atomes du même élément). Dans le cas des semiconducteurs binaires (III-V et II-VI), la structure est comme celle du diamant, mais la base est constituée des deux atomes différents (structure de la blende de zinc ou zincblende, ZnS).

La figure montre les courbes de dispersion calculées pour deux matériaux semiconducteurs III-V binaires (AlSb et GaAs); les symboles correspondent à des données expérimentales. Les graphiques sont pris de Phys. Rev. B **43**, 7231 (1991).

- En utilisant les informations données dans le tableau périodique à la page suivante, établir quel graphique correspond au AlSb et quel graphique correspond au GaAs. Justifier les réponses.
- Considérer maintenant un cristal de Si et un cristal de Ge. Combien de branches y a-t-il et de quel type? Y a-t-il une bande interdite? Que peut-on dire au sujet des fréquences attendues pour les modes de vibration de ces deux matériaux? Comparer les deux matériaux entre eux et avec les systèmes du point (a). Justifier les réponses.



Note sur les unités de mesure des fréquences et énergies des modes de vibration

Plusieurs unités sont couramment utilisées : rad s^{-1} , cm^{-1} , THz, meV. Conversions :

$$1 \text{ cm}^{-1} = 0.030 \text{ THz} = 0.124 \text{ meV} = 0.19 \times 10^{12} \text{ rad s}^{-1}$$

$$1 \text{ THz} = 4.136 \text{ meV} = 6.28 \times 10^{12} \text{ rad s}^{-1} = 33.356 \text{ cm}^{-1}$$

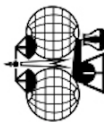
$$1 \text{ meV} = 1.52 \times 10^{12} \text{ rad s}^{-1} = 8.066 \text{ cm}^{-1} = 0.242 \text{ THz}$$

$$1 \times 10^{12} \text{ rad s}^{-1} = 5.304 \text{ cm}^{-1} = 0.159 \text{ THz} = 0.658 \text{ meV}$$

IUPAC Periodic Table of the Elements

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
1 H hydrogen 1.0080 ± 0.0002	2 He helium 4.0026 ± 0.0001																
3 Li lithium 6.94 ± 0.06	4 Be beryllium 9.0122 ± 0.0001	5 B boron 10.81 ± 0.02	6 C carbon 12.011 ± 0.002	7 N nitrogen 14.007 ± 0.001	8 O oxygen 15.999 ± 0.001	9 F fluorine 18.998 ± 0.001	10 Ne neon 20.180 ± 0.001										
11 Na sodium 22.990 ± 0.001	12 Mg magnesium 24.305 ± 0.002	13 Al aluminium 26.982 ± 0.001	14 Si silicon 28.085 ± 0.001	15 P phosphorus 30.974 ± 0.001	16 S sulfur 32.06 ± 0.02	17 Cl chlorine 35.45 ± 0.01	18 Ar argon 39.96 ± 0.16										
19 K potassium 39.098 ± 0.001	20 Ca calcium 40.078 ± 0.004	21 Sc scandium 44.956 ± 0.001	22 Ti titanium 47.887 ± 0.001	23 V vanadium 50.942 ± 0.001	24 Cr chromium 51.996 ± 0.001	25 Mn manganese 54.938 ± 0.001	26 Fe iron 55.845 ± 0.002	27 Co cobalt 58.933 ± 0.001	28 Ni nickel 58.693 ± 0.001	29 Cu copper 63.546 ± 0.003	30 Zn zinc 65.38 ± 0.02	31 Ga gallium 69.723 ± 0.001	32 Ge germanium 72.630 ± 0.008	33 As arsenic 74.922 ± 0.001	34 Se selenium 78.971 ± 0.008	35 Br bromine 79.904 ± 0.003	36 Kr krypton 83.798 ± 0.002
37 Rb rubidium 85.468 ± 0.001	38 Sr strontium 87.62 ± 0.01	39 Y yttrium 88.906 ± 0.001	40 Zr zirconium 91.224 ± 0.002	41 Nb niobium 92.906 ± 0.001	42 Mo molybdenum 95.94 ± 0.01	43 Tc technetium [97]	44 Ru ruthenium 101.07 ± 0.02	45 Rh rhodium 102.91 ± 0.01	46 Pd palladium 106.42 ± 0.01	47 Ag silver 107.87 ± 0.01	48 Cd cadmium 112.41 ± 0.01	49 In indium 114.82 ± 0.01	50 Sn tin 118.71 ± 0.01	51 Sb antimony 121.76 ± 0.01	52 Te tellurium 127.60 ± 0.03	53 I iodine 126.90 ± 0.01	54 Xe xenon 131.29 ± 0.01
55 Cs caesium 132.91 ± 0.01	56 Ba barium 137.33 ± 0.01	57-71 lanthanoids	72 Hf hafnium 178.49 ± 0.01	73 Ta tantalum 180.95 ± 0.01	74 W tungsten 183.84 ± 0.01	75 Re rhenium 186.21 ± 0.01	76 Os osmium 190.23 ± 0.03	77 Ir iridium 192.22 ± 0.01	78 Pt platinum 195.08 ± 0.02	79 Au gold 196.97 ± 0.01	80 Hg mercury 200.59 ± 0.01	81 Tl thallium 204.38 ± 0.01	82 Pb lead 207.2 ± 1.1	83 Bi bismuth 208.98 ± 0.01	84 Po polonium [209]	85 At astatine [210]	86 Rn radon [222]
87 Fr francium [223]	88 Ra radium [226]	89-103 actinoids	104 Rf rutherfordium [267]	105 Db dubnium [268]	106 Sg seaborgium [269]	107 Bh bohrium [270]	108 Hs hassium [289]	109 Mt meitnerium [277]	110 Ds darmstadtium [281]	111 Rg roentgenium [282]	112 Cn copernicium [285]	113 Nh nihonium [286]	114 Fl flerovium [290]	115 Mc moscovium [290]	116 Lv livermorium [293]	117 Ts tennessine [294]	118 Og oganesson [294]

Key:
atomic number
Symbol
name
abridged standard
atomic weight



INTERNATIONAL UNION OF
PURE AND APPLIED CHEMISTRY

For notes and updates to this table, see www.iupac.org. This version is dated 4 May 2022.
Copyright © 2022 IUPAC, the International Union of Pure and Applied Chemistry.

1. Vibrations hors-plan d'un réseau carré

- (a) Voir figure ci-dessous. Le carré représente la 1ère zone de Brillouin. Le chemin $\Gamma AB\Gamma$ est aussi indiqué.
- (b) Selon ΓA , $k_x = 0$, $k = k_y$ avec $0 \leq k_y \leq \frac{\pi}{a}$, et on a

$$\omega^2(k) = \frac{4C}{m} \sin^2 \frac{ka}{2} \Rightarrow \omega(k) = 2\sqrt{\frac{C}{m}} \left| \sin \frac{ka}{2} \right|$$

Selon $B\Gamma$ on a : $k_x = k_y = \frac{k}{\sqrt{2}}$, avec $k_{max} = \sqrt{2}\frac{\pi}{a}$

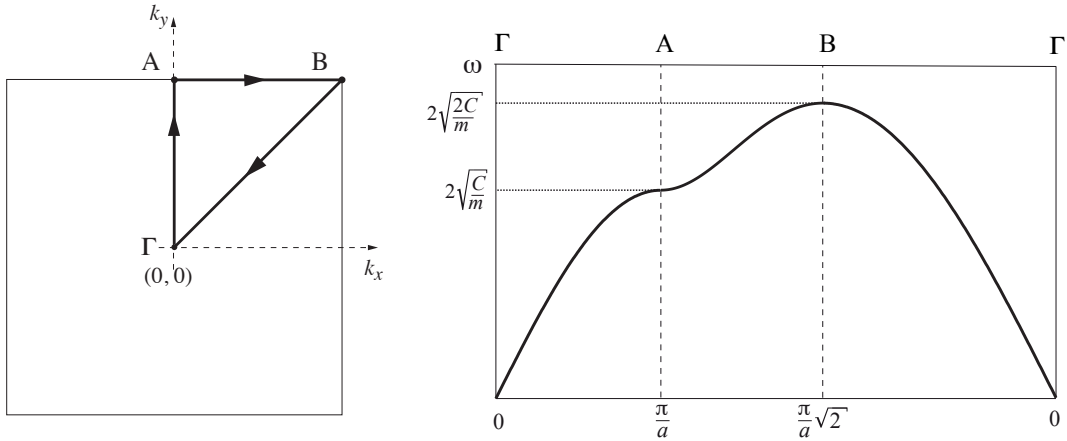
Pour $\omega(k)$ on obtient :

$$\omega^2(k) = \frac{8C}{m} \sin^2 \frac{ka}{2\sqrt{2}}$$

$$\omega(k) = 2\sqrt{\frac{2C}{m}} \left| \sin \frac{ka}{2\sqrt{2}} \right|, \quad \text{et} \quad \omega_{max} = 2\sqrt{\frac{2C}{m}}$$

Selon AB , $\mathbf{k} = (k_x, 1)$ avec $0 \leq k_x \leq \frac{\pi}{a}$.

$$\omega(k_x, k_y) = 2\sqrt{\frac{C}{m}} \sqrt{\left(\sin^2 \frac{k_x a}{2} + 1 \right)}$$



Souvent, pour représenter les courbes de dispersion, on introduit un vecteur d'onde réduit ζ . Dans cet exemple on aurait $\zeta = \mathbf{k} \frac{a}{\pi}$.

La direction ΓA correspond à la direction $[0\zeta]$, avec $0 \leq \zeta \leq 1$.

La direction ΓB correspond à la direction $[\zeta\zeta]$, avec $0 \leq \zeta \leq 1$.

La longueur relative des différents segments du chemin est respectée, et correspond à la distance entre les points considérés dans la zone de Brillouin.

2. Directions et points à haute symétrie dans la 1ère zone de Brillouin d'un réseau fcc

(a) Avec les expressions dans l'énoncé on trouve :

$$\Gamma = (0, 0, 0)$$

$$X = \frac{2\pi}{a}(0, 1, 0)$$

$$L = \frac{2\pi}{a}\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right)$$

$$K = \frac{2\pi}{a}\left(\frac{3}{4}, \frac{3}{4}, 0\right)$$

$$W = \frac{2\pi}{a}\left(\frac{1}{2}, 1, 0\right)$$

(b) On trouve

$$|\overline{\Gamma X}| = \frac{2\pi}{a}$$

$$|\overline{\Gamma L}| = \frac{\sqrt{3}}{2} \frac{2\pi}{a} \approx 0.866 \frac{2\pi}{a}$$

$$|\overline{\Gamma K}| = \frac{3}{2\sqrt{2}} \frac{2\pi}{a} \approx 1.061 \frac{2\pi}{a}$$

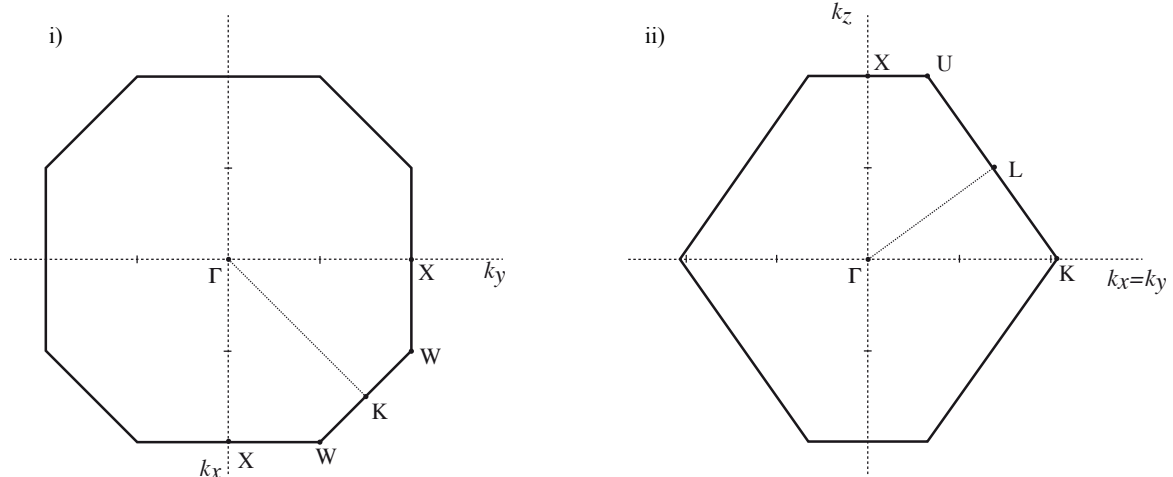
$$|\overline{\Gamma W}| = \frac{5}{2} \frac{2\pi}{a} \approx 1.118 \frac{2\pi}{a}$$

$$|\overline{XW}| = \frac{1}{2} \frac{2\pi}{a}$$

Le point le plus proche de Γ est le point L.

(c) Voir figure ci-dessous. Les points à haute symétrie sont indiqués explicitement dans le quadrant $k_x > 0, k_y > 0$ dans i), et dans le quadrant $k_x = k_y, k_z > 0$ dans ii). Les graduations sur les axes correspondent à des multiples de $\frac{1}{2} \frac{2\pi}{a}$.

Pour in dessin plus précis, on peut utiliser le fait que le point U a des coordonnées du type $U = \frac{2\pi}{a}(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, 1)$ et donc que $|\overline{XU}| = \frac{1}{2\sqrt{2}} \frac{2\pi}{a} \approx 0.35 \frac{2\pi}{a}$.



3. Courbes de dispersion phononique dans les semiconducteurs

- (a) Nous pouvons faire un raisonnement simplifié basé sur les masses, en négligeant les différences entre les constantes de rappel dans les deux matériaux. En effet, on est en train de comparer deux semiconducteurs qui ont des types de liaisons similaires (covalentes), et que par conséquent l'interaction (liaison) entre les atomes est assez similaire pour les deux matériaux.

Les masses des éléments considérés sont :

$$m_{\text{Al}} \approx 27 \text{ amu}$$

$$m_{\text{Ga}} \approx 70 \text{ amu}$$

$$m_{\text{As}} \approx 75 \text{ amu}$$

$$m_{\text{Sb}} \approx 122 \text{ amu}$$

Nous avons vu à la Série 3 que la largeur de la bande interdite (gap) entre branches acoustiques et branches optiques se réduit lorsque les deux masses d'un système sont similaires.

On en déduit que le graphe (1) représente la courbe de dispersion du GaAs, et le graphe (2) celle du AlSb.

Un peu plus quantitativement, on peut estimer les rapports entre les valeurs attendues en bord de zone de Brillouin dans les directions à haute symétrie, par exemple au point X, pour la branche longitudinale acoustique (LA) et la branche longitudinale optique (LO). (Ces branches sont la plus haute et la plus basse énergie au point X, respectivement.)

GaAs

$$\text{branche LA en X : } \omega \propto \sqrt{1/m_{\text{As}}} \approx 0.115$$

$$\text{branche LO en X : } \omega \propto \sqrt{1/m_{\text{Ga}}} \approx 0.119$$

$$\left. \frac{\omega_{\text{LA}}}{\omega_{\text{LO}}} \right|_{\text{X}} \approx 0.97$$

En effet, on peut voir que les deux branches sont très proches l'une de l'autre au point X.

AlSb

$$\text{branche LA en X : } \omega \propto \sqrt{1/m_{\text{Sb}}} \approx 0.090$$

$$\text{branche LO en X : } \omega \propto \sqrt{1/m_{\text{Al}}} \approx 0.192$$

$$\left. \frac{\omega_{\text{LA}}}{\omega_{\text{LO}}} \right|_{\text{X}} \approx 0.47$$

On trouve environ un facteur 2 entre les valeurs des deux branches en X, ce qui correspond bien au graphe.

Pour d'autres comparaisons et analyses, la figure 1 à la page suivante montre aussi les courbes de dispersion pour AlAs et GaSb.

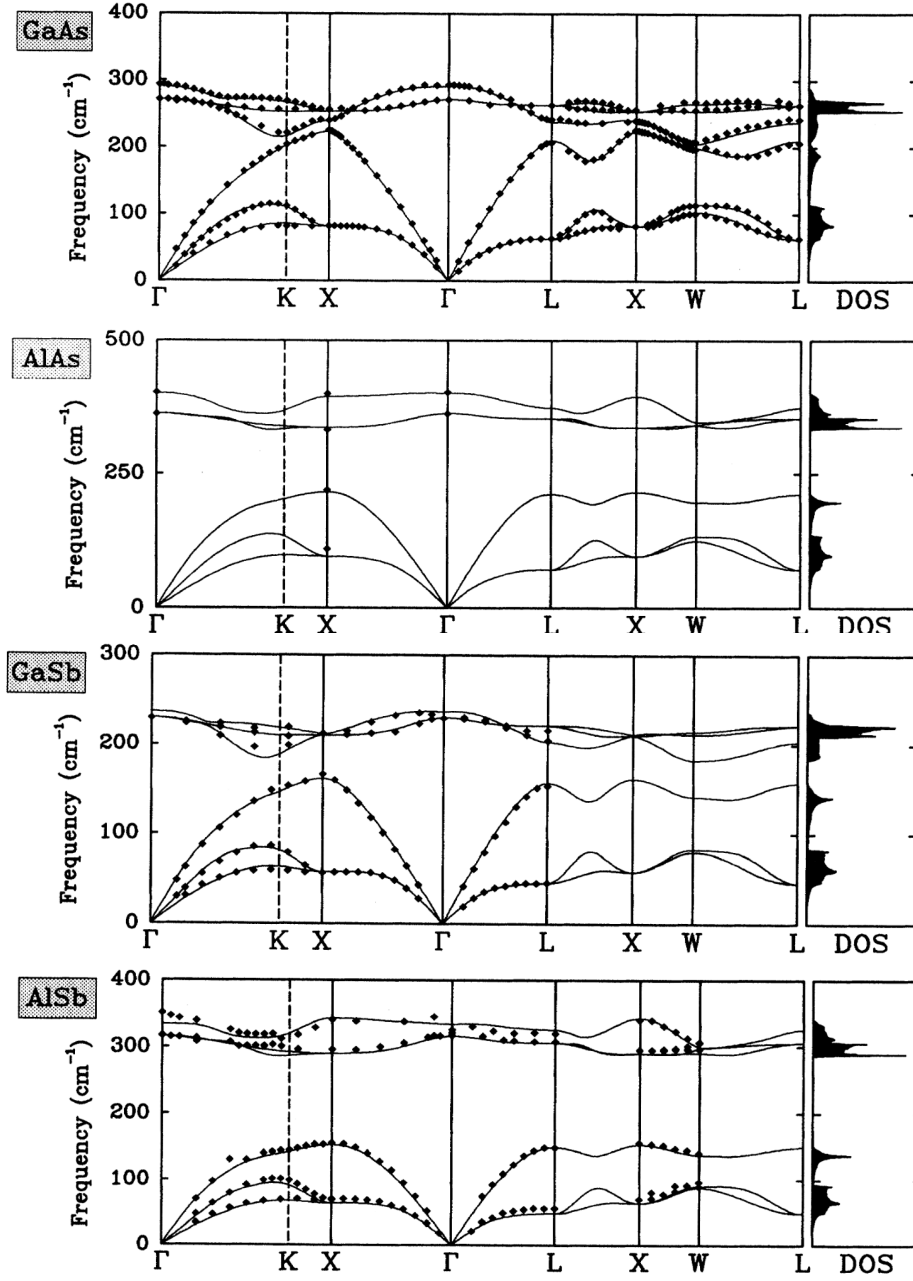


FIGURE 1 – Courbes de dispersion calculées pour une sélection de semiconducteurs binaires. Les symboles correspondent à des données expérimentales. Pris de Phys. Rev. B **43**, 7231 (1991).

- (b) En général, pour un crystal en 3D le nombre de branches est $3p$ où p est le nombre d'atomes dans la base. 3 de ces branches sont acoustiques, les restantes $3(p - 1)$ sont optiques. Le Si et le Ge sont composés chacun d'un seul élément ; la structure est celle du diamant, c'est-à-dire un fcc avec une base de deux atomes ($p = 2$). Par conséquent la relation de dispersion comporte au total 6 branches : 3 branches acoustiques (1 LA et 2 TA) et 3 branches optiques (1 LO et 2 TO). Comme tous les atomes ont la même masse, il n'y a pas de bande interdite : en bord de zone au point X, par exemple, la branche LA et la branche LO ont la même énergie (voir figure 2).

On compare la gamme d'énergie pour Si et Ge entre elles, et avec celles des composants binaires du point précédent.

Pour les masses on a :

$$m_{\text{Si}} \approx 28 \text{ amu}$$

$$m_{\text{Ge}} \approx 73 \text{ amu}$$

Donc on s'attend à que les modes de vibration pour le Si atteignent des fréquences plus élevées que pour le Ge, ainsi que pour tous les autres matériaux considérés dans cet exercice.

La comparaison entre Si et Ge donne

$$\text{Si, branche LA en X : } \omega \propto \sqrt{1/m_{\text{Si}}} \approx 0.189$$

$$\text{Ge, branche LA en X : } \omega \propto \sqrt{1/m_{\text{Ge}}} \approx 0.117$$

$$\left. \frac{\omega_{\text{LA}}(\text{Ge})}{\omega_{\text{LA}}(\text{Si})} \right|_{\text{X}} \approx 0.62$$

Ce rapport correspond bien aux valeurs dans le graphique.

Pour le Ge, on s'attend à une gamme d'énergie similaire à celle du GaAs, puisque les masses des trois éléments sont très similaires. Les courbes de dispersion confirment cette prédiction.

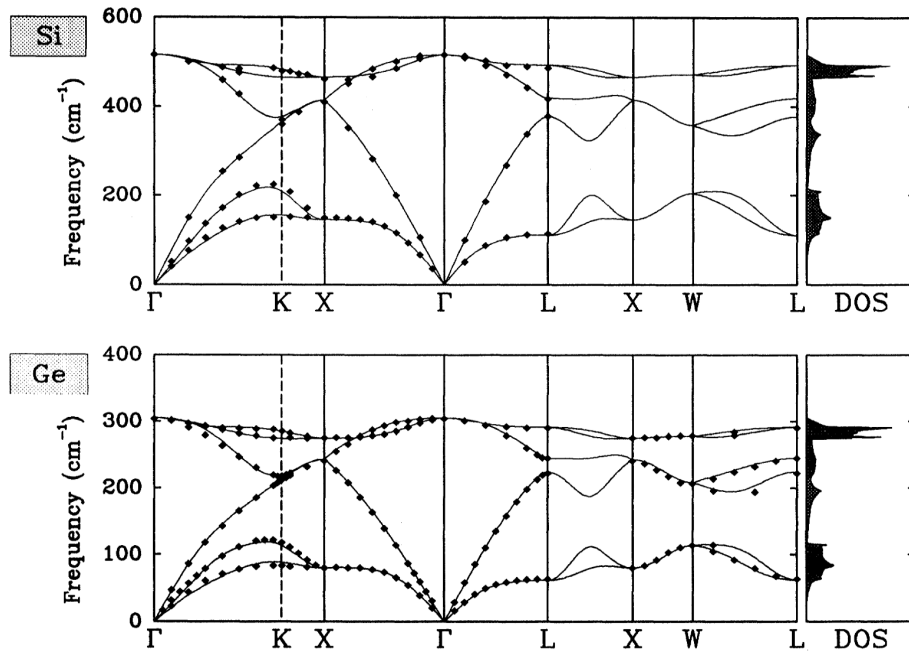


FIGURE 2 – Courbes de dispersion calculées pour des semiconducteurs élémentaires. Les symboles correspondent à des données expérimentales. Tirée de Phys. Rev. B **43**, 7231 (1991).