

ÉCOLE POLYTECHNIQUE FÉDÉRALE DE LAUSANNE

Série No. 4

11 Mars 2025

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.

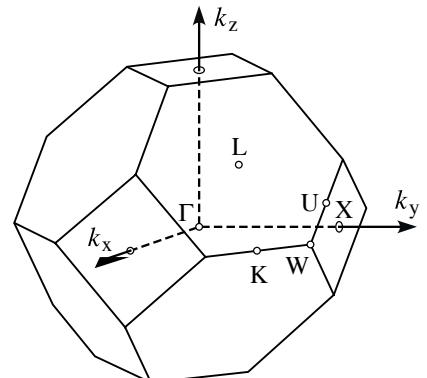
Identifier les points $\Gamma = (0,0)$, $A = (0, \frac{\pi}{a})$ et $B = (\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a})$.

- (b) Représenter la courbe de dispersion $\omega(k)$ selon le chemin $\Gamma A B \Gamma$.

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) :



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

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

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

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

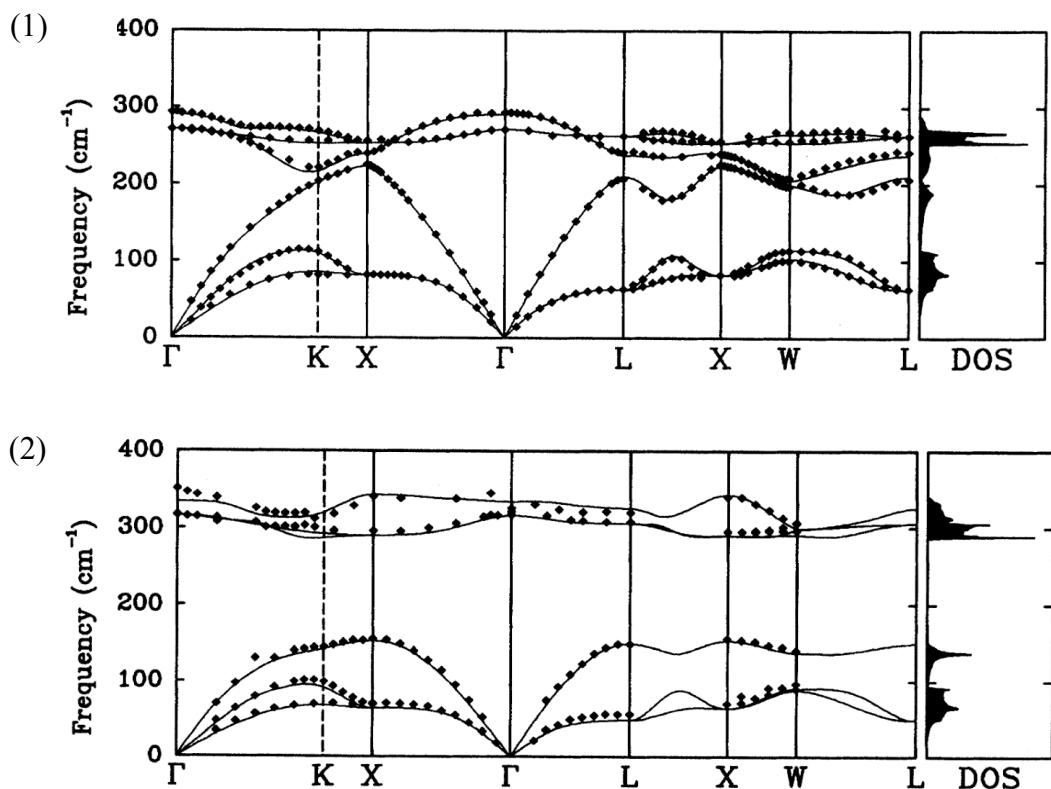
- (a) Déterminer les coordonnées des points Γ , X , L , K , W .
- (b) Déterminer la norme des vecteurs $\overline{\Gamma X}$, $\overline{\Gamma L}$, $\overline{\Gamma K}$, \overline{XW} , et l'exprimer en unités de $\frac{2\pi}{a}$. Quel est le point, situé au bord de la zone de Brillouin, le plus proche 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 H hydrogen 1.0080 ± 0.0002	2 He helium 4.0026 ± 0.0001	18 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
11 Na sodium 22.980 ± 0.001	12 Mg magnesium 24.305 ± 0.002	6 C carbon 12.011 ± 0.002
19 K potassium 39.098 ± 0.001	20 Ca calcium 40.078 ± 0.004	7 N nitrogen 14.007 ± 0.001
37 Rb rubidium 85.468 ± 0.01	38 Sr strontium 87.62 ± 0.01	8 O oxygen 15.999 ± 0.001
55 Cs caesium 132.91 ± 0.01	56 Ba barium 137.33 ± 0.01	9 F fluorine 18.998 ± 0.001
87 Fr francium [223]	88 Ra radium [226]	10 Ne neon 20.180 ± 0.001
1 H hydrogen 1.0080 ± 0.0002	2 He helium 4.0026 ± 0.0001	13 Al aluminium 26.982 ± 0.001
3 Li lithium 6.94 ± 0.06	4 Be beryllium 9.0122 ± 0.0001	14 B boron 10.81 ± 0.02
11 Na sodium 22.980 ± 0.001	12 Mg magnesium 24.305 ± 0.002	15 C carbon 12.011 ± 0.002
19 K potassium 39.098 ± 0.001	20 Ca calcium 40.078 ± 0.004	16 N nitrogen 14.007 ± 0.001
37 Rb rubidium 85.468 ± 0.01	38 Sr strontium 87.62 ± 0.01	17 O oxygen 15.999 ± 0.001
55 Cs caesium 132.91 ± 0.01	56 Ba barium 137.33 ± 0.01	18 F fluorine 18.998 ± 0.001
87 Fr francium [223]	88 Ra radium [226]	19 Ne neon 20.180 ± 0.001
1 H hydrogen 1.0080 ± 0.0002	2 He helium 4.0026 ± 0.0001	20 Ar argon 38.95 ± 0.16
3 Li lithium 6.94 ± 0.06	4 Be beryllium 9.0122 ± 0.0001	21 Si silicon 28.085 ± 0.001
11 Na sodium 22.980 ± 0.001	12 Mg magnesium 24.305 ± 0.002	22 P phosphorus 30.974 ± 0.001
19 K potassium 39.098 ± 0.001	20 Ca calcium 40.078 ± 0.004	23 Ge germanium 72.630 ± 0.008
37 Rb rubidium 85.468 ± 0.01	38 Sr strontium 87.62 ± 0.01	24 As arsenic 74.922 ± 0.001
55 Cs caesium 132.91 ± 0.01	56 Ba barium 137.33 ± 0.01	25 Se selenium 78.971 ± 0.008
87 Fr francium [223]	88 Ra radium [226]	26 Br bromine 79.94 ± 0.003
1 H hydrogen 1.0080 ± 0.0002	2 He helium 4.0026 ± 0.0001	27 Ge germanium 76.973 ± 0.001
3 Li lithium 6.94 ± 0.06	4 Be beryllium 9.0122 ± 0.0001	28 Zn zinc 65.38 ± 0.02
11 Na sodium 22.980 ± 0.001	12 Mg magnesium 24.305 ± 0.002	29 Cd cadmium 112.41 ± 0.02
19 K potassium 39.098 ± 0.001	20 Ca calcium 40.078 ± 0.004	30 Ag silver 107.87 ± 0.01
37 Rb rubidium 85.468 ± 0.01	38 Sr strontium 87.62 ± 0.01	31 In indium 114.82 ± 0.01
55 Cs caesium 132.91 ± 0.01	56 Ba barium 137.33 ± 0.01	32 Ga gallium 69.723 ± 0.001
87 Fr francium [223]	88 Ra radium [226]	33 Ge germanium 72.630 ± 0.008
1 H hydrogen 1.0080 ± 0.0002	2 He helium 4.0026 ± 0.0001	34 As arsenic 74.922 ± 0.001
3 Li lithium 6.94 ± 0.06	4 Be beryllium 9.0122 ± 0.0001	35 Se selenium 78.971 ± 0.008
11 Na sodium 22.980 ± 0.001	12 Mg magnesium 24.305 ± 0.002	36 Kr krypton 83.798 ± 0.002
19 K potassium 39.098 ± 0.001	20 Ca calcium 40.078 ± 0.004	37 Te tellurium 127.60 ± 0.03
37 Rb rubidium 85.468 ± 0.01	38 Sr strontium 87.62 ± 0.01	38 Sn tin 118.71 ± 0.01
55 Cs caesium 132.91 ± 0.01	56 Ba barium 137.33 ± 0.01	39 Cd cadmium 112.41 ± 0.01
87 Fr francium [223]	88 Ra radium [226]	40 Pd palladium 108.42 ± 0.01
1 H hydrogen 1.0080 ± 0.0002	2 He helium 4.0026 ± 0.0001	41 Rh rhodium 102.91 ± 0.01
3 Li lithium 6.94 ± 0.06	4 Be beryllium 9.0122 ± 0.0001	42 Ir iridium 192.22 ± 0.01
11 Na sodium 22.980 ± 0.001	12 Mg magnesium 24.305 ± 0.002	43 Os osmium 190.23 ± 0.03
19 K potassium 39.098 ± 0.001	20 Ca calcium 40.078 ± 0.004	44 Re rhenium 186.21 ± 0.01
37 Rb rubidium 85.468 ± 0.01	38 Sr strontium 87.62 ± 0.01	45 Pt platinum 195.08 ± 0.02
55 Cs caesium 132.91 ± 0.01	56 Ba barium 137.33 ± 0.01	46 Au gold 196.97 ± 0.01
87 Fr francium [223]	88 Ra radium [226]	47 Pt platinum 195.08 ± 0.02
1 H hydrogen 1.0080 ± 0.0002	2 He helium 4.0026 ± 0.0001	48 Tl thallium 204.38 ± 0.01
3 Li lithium 6.94 ± 0.06	4 Be beryllium 9.0122 ± 0.0001	49 Hg mercury 200.59 ± 0.01
11 Na sodium 22.980 ± 0.001	12 Mg magnesium 24.305 ± 0.002	50 Pb lead 207.27 ± 1.1
19 K potassium 39.098 ± 0.001	20 Ca calcium 40.078 ± 0.004	51 Bi bismuth 208.98 ± 0.01
37 Rb rubidium 85.468 ± 0.01	38 Sr strontium 87.62 ± 0.01	52 Po polonium 208.98 ± 0.01
55 Cs caesium 132.91 ± 0.01	56 Ba barium 137.33 ± 0.01	53 At astatine 210.90 ± 0.01
87 Fr francium [223]	88 Ra radium [226]	54 Xe xenon 131.25 ± 0.01
1 H hydrogen 1.0080 ± 0.0002	2 He helium 4.0026 ± 0.0001	55 Rn radon 222.00 [222]
3 Li lithium 6.94 ± 0.06	4 Be beryllium 9.0122 ± 0.0001	56 Fr francium [223]
11 Na sodium 22.980 ± 0.001	12 Mg magnesium 24.305 ± 0.002	57 Mc moscovium 209.00 [230]
19 K potassium 39.098 ± 0.001	20 Ca calcium 40.078 ± 0.004	58 Tb terbium 158.93 ± 0.01
37 Rb rubidium 85.468 ± 0.01	38 Sr strontium 87.62 ± 0.01	59 Dy dysprosium 162.50 ± 0.01
55 Cs caesium 132.91 ± 0.01	56 Ba barium 137.33 ± 0.01	60 Ho holmium 164.93 ± 0.01
87 Fr francium [223]	88 Ra radium [226]	61 Er erbium 167.26 ± 0.01
1 H hydrogen 1.0080 ± 0.0002	2 He helium 4.0026 ± 0.0001	62 Sm samarium 150.86 ± 0.02
3 Li lithium 6.94 ± 0.06	4 Be beryllium 9.0122 ± 0.0001	63 Gd gadolinium 157.25 ± 0.03
11 Na sodium 22.980 ± 0.001	12 Mg magnesium 24.305 ± 0.002	64 Eu europium 151.96 ± 0.01
19 K potassium 39.098 ± 0.001	20 Ca calcium 40.078 ± 0.004	65 Tb terbium 158.93 ± 0.01
37 Rb rubidium 85.468 ± 0.01	38 Sr strontium 87.62 ± 0.01	66 Dy dysprosium 162.50 ± 0.01
55 Cs caesium 132.91 ± 0.01	56 Ba barium 137.33 ± 0.01	67 Ho holmium 164.93 ± 0.01
87 Fr francium [223]	88 Ra radium [226]	68 Er erbium 167.26 ± 0.01
1 H hydrogen 1.0080 ± 0.0002	2 He helium 4.0026 ± 0.0001	69 Tm thulium 168.93 ± 0.01
3 Li lithium 6.94 ± 0.06	4 Be beryllium 9.0122 ± 0.0001	70 Yb ytterbium 173.65 ± 0.02
11 Na sodium 22.980 ± 0.001	12 Mg magnesium 24.305 ± 0.002	71 Lu lutetium 174.97 ± 0.01
19 K potassium 39.098 ± 0.001	20 Ca calcium 40.078 ± 0.004	72 Y yttrium 173.65 ± 0.01
37 Rb rubidium 85.468 ± 0.01	38 Sr strontium 87.62 ± 0.01	73 Y yttrium 173.65 ± 0.01
55 Cs caesium 132.91 ± 0.01	56 Ba barium 137.33 ± 0.01	74 Y yttrium 173.65 ± 0.01
87 Fr francium [223]	88 Ra radium [226]	75 Y yttrium 173.65 ± 0.01
1 H hydrogen 1.0080 ± 0.0002	2 He helium 4.0026 ± 0.0001	76 Y yttrium 173.65 ± 0.01
3 Li lithium 6.94 ± 0.06	4 Be beryllium 9.0122 ± 0.0001	77 Y yttrium 173.65 ± 0.01
11 Na sodium 22.980 ± 0.001	12 Mg magnesium 24.305 ± 0.002	78 Y yttrium 173.65 ± 0.01
19 K potassium 39.098 ± 0.001	20 Ca calcium 40.078 ± 0.004	79 Y yttrium 173.65 ± 0.01
37 Rb rubidium 85.468 ± 0.01	38 Sr strontium 87.62 ± 0.01	80 Y yttrium 173.65 ± 0.01
55 Cs caesium 132.91 ± 0.01	56 Ba barium 137.33 ± 0.01	81 Y yttrium 173.65 ± 0.01
87 Fr francium [223]	88 Ra radium [226]	82 Y yttrium 173.65 ± 0.01
1 H hydrogen 1.0080 ± 0.0002	2 He helium 4.0026 ± 0.0001	83 Y yttrium 173.65 ± 0.01
3 Li lithium 6.94 ± 0.06	4 Be beryllium 9.0122 ± 0.0001	84 Y yttrium 173.65 ± 0.01
11 Na sodium 22.980 ± 0.001	12 Mg magnesium 24.305 ± 0.002	85 Y yttrium 173.65 ± 0.01
19 K potassium 39.098 ± 0.001	20 Ca calcium 40.078 ± 0.004	86 Y yttrium 173.65 ± 0.01
37 Rb rubidium 85.468 ± 0.01	38 Sr strontium 87.62 ± 0.01	87 Y yttrium 173.65 ± 0.01
55 Cs caesium 132.91 ± 0.01	56 Ba barium 137.33 ± 0.01	88 Y yttrium 173.65 ± 0.01
87 Fr francium [223]	88 Ra radium [226]	89 Y yttrium 173.65 ± 0.01
1 H hydrogen 1.0080 ± 0.0002	2 He helium 4.0026 ± 0.0001	90 Y yttrium 173.65 ± 0.01
3 Li lithium 6.94 ± 0.06	4 Be beryllium 9.0122 ± 0.0001	91 Y yttrium 173.65 ± 0.01
11 Na sodium 22.980 ± 0.001	12 Mg magnesium 24.305 ± 0.002	92 Y yttrium 173.65 ± 0.01
19 K potassium 39.098 ± 0.001	20 Ca calcium 40.078 ± 0.004	93 Y yttrium 173.65 ± 0.01
37 Rb rubidium 85.468 ± 0.01	38 Sr strontium 87.62 ± 0.01	94 Y yttrium 173.65 ± 0.01
55 Cs caesium 132.91 ± 0.01	56 Ba barium 137.33 ± 0.01	95 Y yttrium 173.65 ± 0.01
87 Fr francium [223]	88 Ra radium [226]	96 Y yttrium 173.65 ± 0.01
1 H hydrogen 1.0080 ± 0.0002	2 He helium 4.0026 ± 0.0001	97 Y yttrium 173.65 ± 0.01
3 Li lithium 6.94 ± 0.06	4 Be beryllium 9.0122 ± 0.0001	98 Y yttrium 173.65 ± 0.01
11 Na sodium 22.980 ± 0.001	12 Mg magnesium 24.305 ± 0.002	99 Y yttrium 173.65 ± 0.01
19 K potassium 39.098 ± 0.001	20 Ca calcium 40.078 ± 0.004	100 Y yttrium 173.65 ± 0.01
37 Rb rubidium 85.468 ± 0.01	38 Sr strontium 87.62 ± 0.01	101 Y yttrium 173.65 ± 0.01
55 Cs caesium 132.91 ± 0.01	56 Ba barium 137.33 ± 0.01	102 Y yttrium 173.65 ± 0.01
87 Fr francium [223]	88 Ra radium [226]	103 Y yttrium 173.65 ± 0.01
1 H hydrogen 1.0080 ± 0.0002	2 He helium 4.0026 ± 0.0001	104 Y yttrium 173.65 ± 0.01
3 Li lithium 6.94 ± 0.06	4 Be beryllium 9.0122 ± 0.0001	105 Y yttrium 173.65 ± 0.01
11 Na sodium 22.980 ± 0.001</td		

1. Vibrations hors-plan d'un réseau carré

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

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

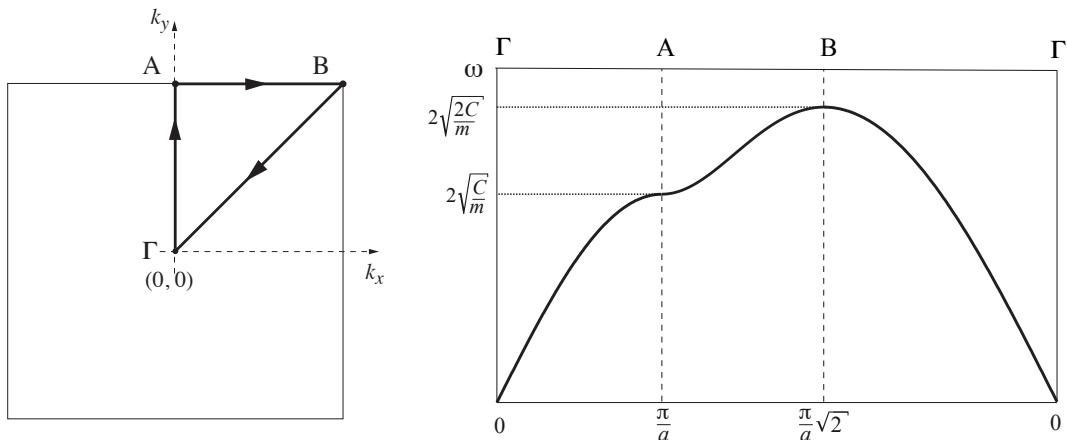
Selon $B\Gamma$ on a : $k_x = k_y = \frac{k}{\sqrt{2}}$, avec $k_{max} = \sqrt{2}\frac{\pi}{a}$

Pour $\omega(k)$ on obtient :

$$\begin{aligned} \omega^2(k) &= \frac{8C}{m} \sin^2 \frac{ka}{2\sqrt{2}} \\ \omega(k) &= 2\sqrt{\frac{2C}{m}} \left| \sin \frac{ka}{2\sqrt{2}} \right|, \quad \text{et} \quad \omega_{max} = 2\sqrt{\frac{2C}{m}} \end{aligned}$$

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

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

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

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

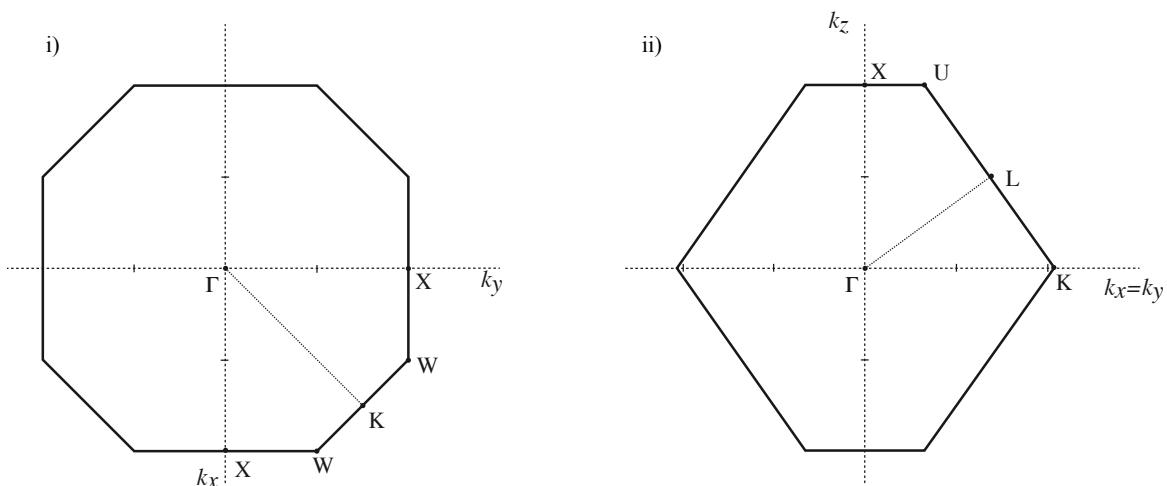
$$|\overline{\Gamma W}| = \frac{5}{2} \frac{2\pi}{a} \approx 1.118 \frac{2\pi}{a}$$

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

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 un 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

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

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

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

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

AlSb

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

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

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

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.

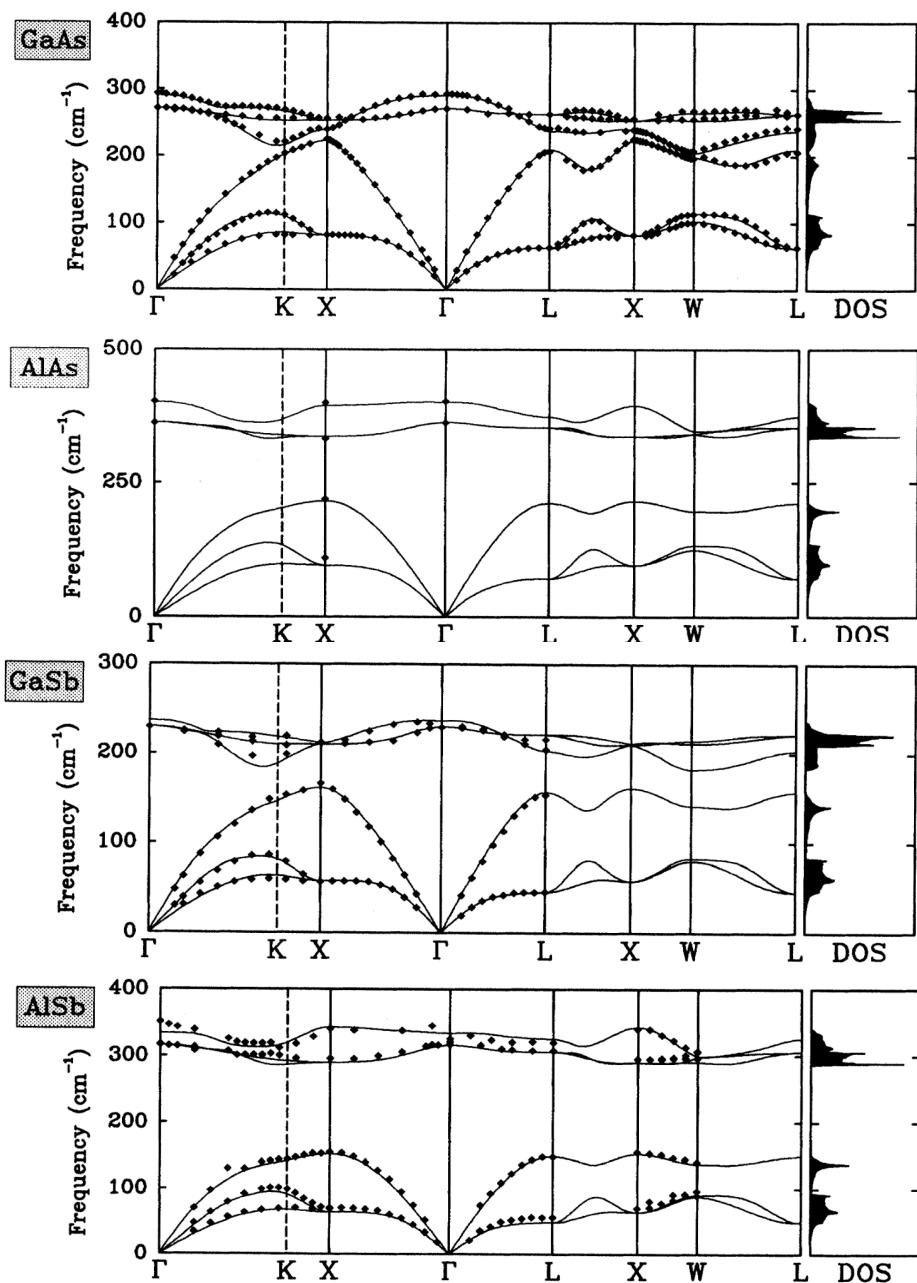


FIGURE 1 – Courbes de dispersion calculées pour une sélection de semiconducteurs binaires. Les symboles correspondent à des données expérimentales. Pris de Phys. Rev. B **43**, 7231 (1991).

- (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.

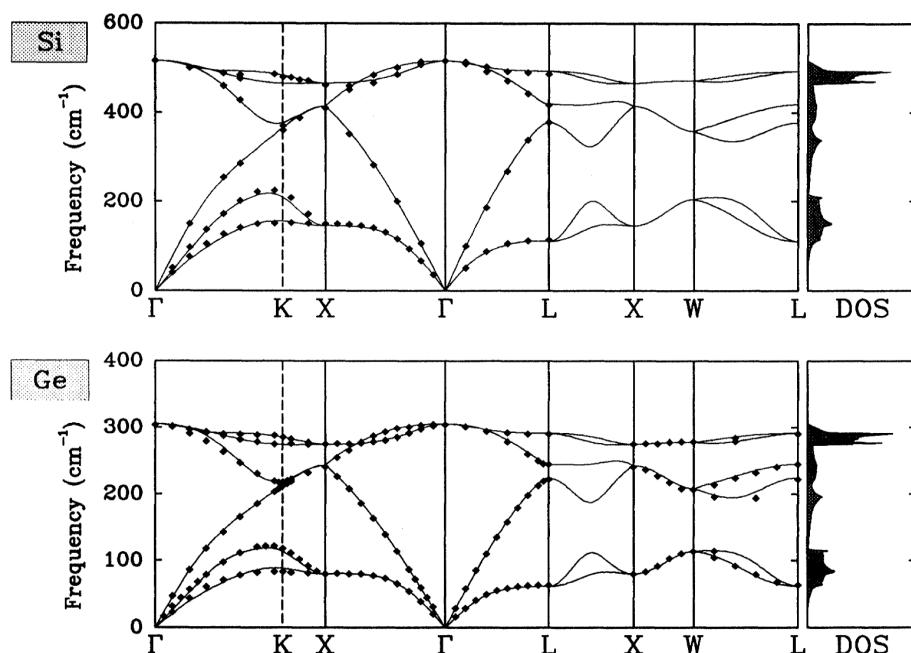


FIGURE 2 – Courbes de dispersion calculées pour des semiconducteurs élémentaires. Les symboles correspondent à des données expérimentales. Tirée de Phys. Rev. B **43**, 7231 (1991).