

Le calcul permettant d'établir la densité de porteurs dans les bandes permises s'entend dans des conditions d'équilibre thermodynamique, c'est-à-dire pour un matériau homogène et une température constante.

En mécanique quantique, on associe une onde à une particule. La fonction caractéristique correspondante s'écrit, dans le cas d'un modèle unidimensionnel:

$$\Psi_{(x,t)} = A e^{i(kx - \omega t)}$$

dans lequel: $\omega = 2\pi\nu$ est la pulsation, $k = 2\pi/\lambda$ est le vecteur d'onde.

La relation de Planck permet d'associer la pulsation à l'énergie par:

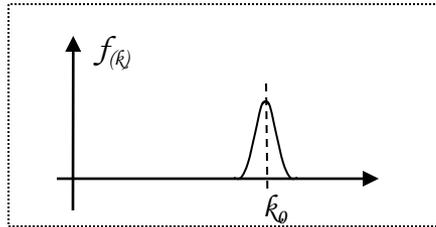
$$E = h\nu = \frac{h\omega}{2\pi} = \hbar\omega$$

Pour une particule libre, son énergie est purement cinétique et vaut: $E = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{p^2}{2m}$ On en déduit la vitesse: $v = \frac{p}{m} = \frac{dE}{dp}$

Or, d'après le principe d'incertitude de Heisenberg, on peut écrire: $\Delta x * \Delta k \geq \frac{1}{2}$ donc, si k est constant, $\Delta k = 0$ et donc Δx est infini. La particule n'est alors pas localisable. Il est donc nécessaire d'associer à la particule non pas une onde monochromatique mais un « paquet d'ondes » de fréquences très voisines. On dit que le milieu est dispersif. La fonction d'onde s'écrit alors:

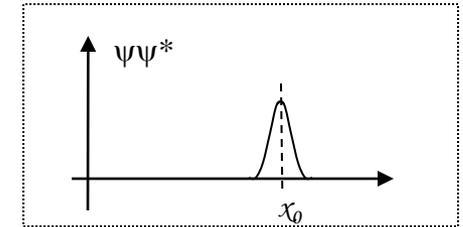
$$\Psi_{(x,t)} = \int f_{(k)} e^{i(kx - \omega(k)t)} dk$$

dans laquelle $f_{(k)}$ est représentée ci contre



La position de la particule correspond au maximum de la fonction $\Psi\Psi^*$ défini par:

$$\frac{d}{dk}(kx - \omega(k)t) = 0 \text{ soit, } x_0 = \frac{d\omega}{dk}t$$



La vitesse du paquet d'ondes vaut: $v = \frac{dx_0}{dt} = \frac{d\omega}{dk}$ or: $E = \hbar\omega$ soit: $v = \frac{d}{dk}\left(\frac{E}{\hbar}\right) = \frac{1}{\hbar} \frac{dE}{dk}$ comme $v = \frac{dE}{dp}$ il s'en suit: $\frac{dE}{dp} = \frac{1}{\hbar} \frac{dE}{dk}$ soit, $dp = \hbar dk$

En intégrant cette relation on obtient: $p = \int \hbar dk = \hbar k$

Cette relation est connue sous le nom de **Relation de De Broglie**

On peut tirer de tout cela la relation liant l'énergie et le vecteur d'onde. $v = \frac{p}{m} = \frac{d\omega}{dk} = \frac{\hbar k}{m}$ soit $d\omega = \frac{\hbar}{m} k * dk \Rightarrow \omega = \frac{\hbar}{m} \int k * dk \Rightarrow \omega = \frac{\hbar k^2}{2m}$

Comme: $E = \hbar\omega$ on obtient : $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$

Pour les électrons de la bande de conduction on aura $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + E_c$

•Généralisation à trois dimensions.

Dans un espace tridimensionnel, un vecteur d'onde peut se décomposer suivant les trois axes: les composantes de base s'écrivent:

$$k_x = \frac{2\pi * n(x)}{L(x)} \quad k_y = \frac{2\pi * n(y)}{L(y)} \quad k_z = \frac{2\pi * n(z)}{L(z)} \quad \text{avec: } n_{(x)}, n_{(y)}, n_{(z)} \text{ nombres entiers positifs, négatifs ou nul}$$

L'énergie s'écrit alors:

$$E_{(n(x),n(y),n(z))} = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{n(x)^2}{L_x^2} + \frac{n(y)^2}{L_y^2} + \frac{n(z)^2}{L_z^2} \right) + E_C$$

On peut donc associer 8 vecteurs d'onde à chaque état énergétique. On parlera de dégénérescence d'ordre 8 pour l'énergie.

•Calcul de la densité des états accessibles aux électrons.

Pour comptabiliser les états offerts à l'électron sur une bande d'énergie comprise entre E et $E+dE$, il est préférable de se reporter dans l'espace des vecteurs d'onde. Si nous reportons l'ensemble des points permis pour l'extrémité des vecteurs d'onde \mathbf{k} d'origine $\mathbf{0}$, ceux-ci forment un réseau périodique suivant les trois dimensions, de périodicité: $2\pi/l_x, 2\pi/l_y, 2\pi/l_z$. Compte tenu de la distribution régulière des points, le nombre d'états possibles est proportionnel au volume.

La figure ci-contre montre une représentation des sites possible pour les électrons en fonction des valeurs de k . On a noté avec des couleurs différentes les sites possibles correspondant à des plans définis par des valeurs de k_y constantes.

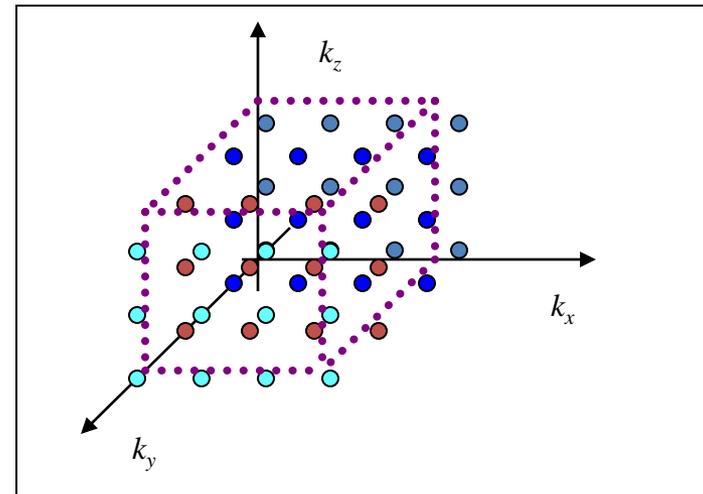
Le nombre d'états possibles peut s'exprimer par la relation:

$$N(k) = \left(\frac{L(x) * L(y) * L(z)}{2\pi * 2\pi * 2\pi} \right) = \frac{V}{8\pi^3}$$

Il est donc proportionnel au volume.

Chaque état pouvant accepter deux électrons de spin antiparallèle, la densité d'électrons s'écrit:

$$n_k = 2 * \frac{N(k)}{V} = \frac{1}{4\pi^3}$$



La probabilité de trouver un électron d'énergie comprise entre E et $E+dE$ s'écrit:

$$\frac{d\bar{n}}{dE} = n(E) * f_n(E)$$

La dualité énergie \Leftrightarrow vecteur d'onde s'écrit: $n(E)dE = n(k)dV(k)$

Le volume élémentaire, dans l'espace des vecteurs d'onde est une sphère de rayon k .

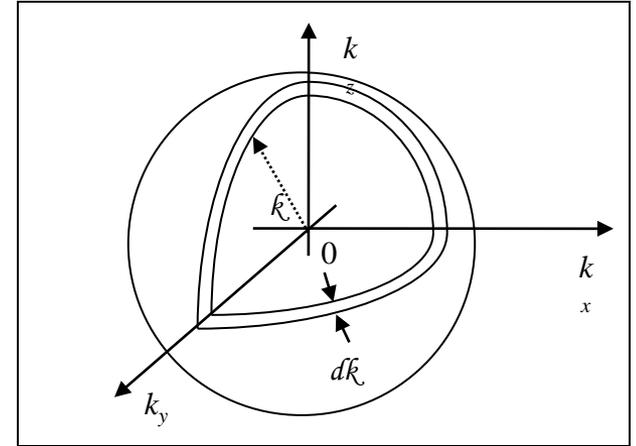
$$V(k) = \frac{4\pi}{3} k^3 \quad \text{d'ou}; \quad dV(k) = 4\pi k^2 dk \quad n(k)*dV(k) = \frac{1}{4\pi^3} * 4\pi k^2 dk = \frac{k^2 dk}{\pi^2} \quad \text{or: } k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

$$n(E)dE = \frac{(2E)^{\frac{1}{2}} m^{\frac{3}{2}} dE}{\pi^2 \hbar^3} \quad \text{en reportant dans } \bar{n} = \int_{E_c} d\bar{n} = \int_{E_c} n(E) * f_n(E) dE \quad \text{il vient:}$$

$$\bar{n} = \int_{E_c} d\bar{n} = \int_{E_c} \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E - E_F}{kT}\right)} * \frac{(2E)^{\frac{1}{2}} m^{\frac{3}{2}} dE}{\pi^2 \hbar^3}$$

Le coefficient de l'exponentielle étant toujours grand devant l'unité, on peut écrire:

$$\frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E - E_F}{kT}\right)} \Rightarrow \exp\left(-\frac{E - E_F}{kT}\right)$$



En ce qui concerne la borne supérieure de l'intégrale, on peut la prendre égale à l'infini compte tenu de la fonction exponentielle qui est décroissante. On obtient donc:

$$\bar{n} = \frac{2^{\frac{1}{2}} m^{\frac{3}{2}}}{\pi^2 \hbar^3} \int_{E_c}^{\infty} \exp\left(\frac{E - E_F}{kT}\right) (E)^{\frac{1}{2}} dE = \frac{2^{\frac{1}{2}} m^{\frac{3}{2}}}{\pi^2 \hbar^3} \exp\left(-\frac{E_c - E_F}{kT}\right) \int_{E_c}^{\infty} \exp\left(\frac{E - E_c}{kT}\right) (E)^{\frac{1}{2}} dE \quad \text{En posant } u = (E - E_c)/(kT), \text{ on obtient:}$$

$$\bar{n} = \frac{2^{\frac{1}{2}} m^{\frac{3}{2}} (kT)^{\frac{3}{2}}}{\pi^2 \hbar^3} \exp\left(-\frac{E_c - E_F}{kT}\right) \int_{E_c}^{\infty} u^{\frac{1}{2}} \exp(-u) du = \frac{2^{\frac{1}{2}} m^{\frac{3}{2}} (kT)^{\frac{3}{2}}}{\pi^2 \hbar^3} \exp\left(-\frac{E_c - E_F}{kT}\right) * \Gamma\left(\frac{1}{2}\right) \quad \Gamma(1/2) \text{ vaut } \frac{\sqrt{\pi}}{2} \quad (\text{Intégrale d'Euler}).$$

En remplaçant \hbar par $\frac{h}{2\pi}$ et en réduisant les termes, on obtient:

$$\bar{n} = \frac{2}{h^3} (2\pi m k T)^{\frac{3}{2}} \exp\left(-\frac{E_c - E_F}{kT}\right)$$

Ce résultat fait apparaître le produit de deux termes:

$$f_n(E_c) = \exp\left(-\frac{E_c - E_F}{kT}\right) \quad \text{qui représente la probabilité de présence sur le niveau } E_c$$

$$N = \frac{2}{h^3} (2\pi m k T)^{\frac{3}{2}} \quad \text{qui représente la densité d'états correspondant au niveau } E_c$$

Tout se passe comme si la bande de conduction se ramenait à un seul niveau possédant N états possibles.