



REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE
MINISTRE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE



UNIVERSITE ABOU-BEKR BELKAID - TLEMCEEN

MEMOIRE

Présenté à :

FACULTE DES SCIENCES – DEPARTEMENT DE PHYSIQUE

Pour l'obtention du diplôme de :

MASTER EN PHYSIQUE

Spécialité : Physique Computationnelle

Par :

Mr SAIDI Mohammed

Sur le thème

Calcul de la masse effective des semi-conducteurs

Soutenue publiquement le 29/06/2019 devant le jury composé de :

Dr CHIKHAOUI Abdelhak	MCA à l'Université de Tlemcen	Président
Dr BOUFATAH Mohammed Réda	MCB à l'Université de Tlemcen	Encadreur
Dr MERAD Souheyla	MCB à l'Université de Tlemcen	Examinatrice

DEDICACES

Avec l'expression de ma reconnaissance, je dédie ce modeste travail à ma famille, elle qui m'a doté d'une éducation digne, son amour à fais de moi ce que je suis aujourd'hui particulièrement:

A ma chère mère

Autant de phrases aussi expressive soient-elles ne sauraient montrer le degré d'amour et d'affection que j'éprouve pour toi. Tu m'as comblé avec ta tendresse et affection tout au long de mon parcours. Tu n'as cessé de me soutenir et de m'encourager durant toutes les années de mes études, tu as toujours été présente à mes cotés pour me consoler quand il fallait. En ce jour mémorable, pour moi ainsi que pour toi, reçoit ce travail en signe de ma vive reconnaissance et mon profond estime. Puisse le tout puissant te donner santé, bonheur et longue vie afin que je puisse a combler à mon tour.

A mon cher père

Autant de phrases et d'expressions aussi éloquente soit-elles ne saurait exprimer ma gratitude et ma reconnaissance. Tu as su m'inculquer le sens de la responsabilité, de l'optimisme et de la confiance en soi face aux difficultés de la vie. Tes conseils ont toujours guidé mes pas vers la réussite. Ta patience sans fin, ta compréhension et ton encouragement sont pour moi le soutien indispensable que tu as toujours su m'apporter. Je te dois ce que je suis aujourd'hui et ce que je serai demain et je ferai toujours de mon mieux pour rester ta fierté et ne jamais te décevoir. Que Dieu le tout puissant te préserve, t'accorde santé, bonheur, quiétude de l'esprit et te protège de tout mal.

A mes frères et sœurs

qui m'avez toujours soutenu et encouragé durant ces années d'études.

REMERCIEMENTS

En tout premier lieu, je remercie le bon Dieu, tout puissant, de m'avoir donné la force pour survivre, ainsi que le courage pour dépasser toutes les difficultés.

*Je tien à exprimer ma reconnaissance à Monsieur **BOUFATAH Mohammed Réda**, MCB à l'université de Tlemcen pour avoir accepté de m'encadrer dans cette étude, je le remercie pour son implication, son soutien et ses encouragements tout au long de ce travail.*

*Je tien à remercier avec grande gratitude Monsieur **CHIKHAOUI Abdelhak**, MCA à l'université de Tlemcen, pour m'avoir fait l'honneur de présider le jury de ce mémoire.*

*Je tiens également à présenter mes remerciements à Madame **MERAD Souheyla née Mamoun**, MCB à l'université de Tlemcen, d'avoir accepté d'être examinatrice et membre de ce jury.*

J'adresse mes sincères remerciements à tout les professeurs, et toutes les personnes qui par leurs paroles, leurs écrits, leurs conseils et leurs critiques ont guidé mes réflexions et ont accepté à me rencontrer et répondre à mes questions durant mes études.

Enfin, je remercie tous mes ami(e)s, mes collègues, pour leur sincère amitié et confiance, et à qui je dois ma reconnaissance et mon attachement.

À tous ces intervenants, je présente mes remerciement, mon respect et ma gratitude.

Table des matières

Introduction Générale	2
Chapitre I : Etude Théorique	5
I. Equation de Schrödinger	6
I.I. Méthode de la DFT	6
I.I.I. Approche ab-initio	6
I.I.II. Principes des calculs DFT:	7
I.I.III. Résolution numérique des équations de Kohn-Sham	9
I.II. Méthode kp	12
I.II.I. Principe de la théorie kp	12
I.III. Zones de Brillouin	14
I.IV. Structure de bande	18
I.V. References	19
Chapitre II : Théorie de la Masse Effective	20
II.I. Masse effective	21
II.II. Base physique de la masse effective	25
II.III. Approximation de la masse effective	26
II.IV. Détermination expérimentale de la masse effective	27
II.V. References:	29
Chapitre III : Résultats	30
III.I. Objectif	31
III.II. Méthodologie	31
III.III. Script python pour la structure Zinc-blende	33
III.IV. Référence	38
Conclusion et Perspective	39

Introduction Générale

Introduction Générale

Un semiconducteur est défini généralement comme un matériau dont la résistivité électrique est comprise entre 10^{-2} à $10^9 \Omega \text{ cm}$. Alternativement, il peut être défini comme un matériau dont le gap d'énergie est compris entre zéro et environ 4 électronvolts (eV). Les matériaux à bande interdite nulle sont des métaux ou des semi-métaux, tandis que ceux dont le gap énergétique est supérieur à 4 eV sont plus fréquemment appelés isolants. Le semiconducteur le plus connu est sans aucun doute le silicium (Si). Cependant, il existe de nombreux semiconducteurs en plus du silicium. De nombreux minéraux présents dans la nature, tels que le zinc-blende (ZnS), la cuprite (Cu_2O) et la galène (PbS), pour n'en nommer que quelques-uns, sont des semiconducteurs naturels. Ainsi, la famille des semiconducteurs constitue l'une des classes de matériaux les plus polyvalentes connues par l'homme.

Les semiconducteurs apparaissent dans de nombreuses compositions chimiques différentes avec une grande variété de structures cristallines. Ils peuvent être des semiconducteurs élémentaires, tels que le silicium, le sélénium, le carbone (sous forme C_{60} ou nanotube) ou des composés binaires tels que l'arséniure de gallium (GaAs). Beaucoup de composés organiques, par exemple le poly-acétylène $(\text{CH})_n$, sont des semiconducteurs. Certains semiconducteurs présentent un comportement magnétique ($\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}$) ou ferroélectrique (SbSI). D'autres deviennent supraconducteurs lorsqu'ils sont dopés avec des porteurs (GeTe et SrTiO_3). Un grand nombre des supraconducteurs à haute température récemment découverts ont des phases non métalliques qui sont des semi-conducteurs. Par exemple, $(\text{La}_2\text{CuO}_4)$ est un semi-conducteur ($\approx 2\text{eV}$) mais devient un supraconducteur lorsqu'il est dopé avec Sr pour former $(\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x)_2\text{CuO}_4$.

Le semiconducteur est devenu un dispositif nécessaire et incontournable pour l'homme du vingt-unième siècle, comme l'air qui le respire ou l'eau qui la boit. Nous pouvons donner une liste non exhaustive de l'impact des semiconducteurs dans la vie quotidienne :

- Ils sont utilisés dans la technologie solaire pour la génération quotidienne de l'électricité.
- Ils sont utilisés dans les machines d'impression 3D.
- Ils sont utilisés par les capteurs de température dans les climatiseurs.

Introduction Générale

- Ils Jouent un rôle central dans le fonctionnement des guichets automatiques bancaires, des trains, d'Internet, des communications et d'autres éléments de l'infrastructure sociale, tels que le réseau médical utilisé pour les soins aux personnes âgées.
- Ils sont utilisés dans les voitures autonomes.
- Ils sont utilisés dans les ordinateurs, les calculatrices, les plaques solaires et autres dispositifs électroniques.

La communauté scientifique est toujours entrain d'étudier les semiconducteurs sur tous ces aspects à fin de déterminer de nouvelles propriétés et applications. Ainsi dans ce mémoire, nous nous intéressons à la masse effective des semiconducteurs qui est une propriété importante pour le transport électronique.

Ce mémoire est divisé en Deux parties principales :

La première partie est dédiée à l'aspect théorique pour le calcul de la masse effective à partir de la courbe de dispersion $E(k)$ obtenue par un calcul ab-initio. Cette partie englobe les chapitres I et II.

Dans la deuxième partie, plus précisément le chapitre III, nous présentons des résultats obtenus de la masse effective à partir d'un script que nous avons développé sous python.

Chapitre I : Etude Théorique

I. Equation de Schrödinger

L'équation de Schrödinger est l'équation de base pour étudier les propriétés physico-chimiques de la matière. Elle permet de trouver les énergies et les fonctions d'onde associées aux régimes stationnaires [1] d'un système donné. Cette équation, dans le cas non relativiste, pour un système composé de N_e électrons liés, de coordonnées d'espace r_i , et de N_N noyaux de charge Z_N , de masse m_N et de coordonnées d'espace R_I s'écrit sous la forme:

$$H\Psi_n(\{R_I\}, \{r_i\}) = E_n\Psi_n(\{R_I\}, \{r_i\}) \quad (1.1)$$

Ou sous sa forme dépendante du temps :

$$H\Psi(\{R_I\}, \{r_i\}, t) = i\frac{\partial\Psi(\{R_I\}, \{r_i\}, t)}{\partial t} \quad (1.2)$$

avec

- H est l'Hamiltonien du système,

$$H = \sum_i -\frac{\nabla_i^2}{2M_i} + \sum_i \frac{\nabla_i^2}{2} + \hat{V}(\{R_I\}, \{r_i\}) \quad (1.3)$$

- Ψ_n la fonction d'onde associée au niveau d'énergie E_n , avec n un nombre entier introduisant la quantification de l'énergie du système.

I.I. Méthode de la DFT

I.I.I. Approche ab-initio

Le système étant décrit à l'aide d'une fonction d'onde multi-particulaire $\Psi(\{R_I\}, \{r_i\}, t)$, où l'ensemble $\{R_I\}$ contient les variables décrivant la position des noyaux de masse M_I , et $\{r_i\}$ celles décrivant la position des électrons. \hat{V} est l'opérateur associé à l'énergie potentielle et prend en compte les interactions noyau-noyau, électron-électron, et noyau-électron.

Il existe des solutions exactes à cette équation pour certains systèmes très simples. Toutefois, dans la plupart des cas, l'utilisation d'un certain nombre d'approximations est inévitable. C'est pourquoi les nombreuses approches visant à obtenir des informations fiables sur tous ces systèmes sont en cours de développement [2]. Nous nous intéressons ici à la théorie fonctionnelle de la densité (DFT, Density Functional Theory) qui est actuellement, et probablement, la plus efficace pour traiter ce type de problèmes qui nous intéresse.

Chapitre I : Etude Théorique

I.I.II. Principes des calculs DFT:

La DFT consiste à déterminer à partir de la densité électronique, les propriétés de l'état fondamental d'un système composé d'un nombre donné d'électrons en interaction coulombienne avec des noyaux fixes. Il est basé sur deux théorèmes fondamentaux démontrés par Hohenberg et Kohn [3] :

- L'énergie de l'état fondamental est une fonctionnelle unique de la densité électronique $\rho(r)$.
- Pour un potentiel \hat{V} et un nombre donné d'électrons N_e , le minimum de l'énergie totale du système correspond à la densité exacte de l'état fondamental (principe variationnel).

Tout le problème consiste à déterminer cette fonctionnelle.

Peu après la formulation des lois de la mécanique quantique, Thomas et Fermi ont donné une expression approximative de l'énergie totale en fonction de la densité électronique ρ [4,5]. Quarante ans plus tard, Kohn et Sham [6] ont introduit une expression formelle de l'énergie totale du système en fonction de la densité électronique. Il comporte deux étapes :

- Les orbitales sont remises en place afin de traiter avec précision le terme d'énergie cinétique T_e .
- Le système étudié est redéfini par rapport à un système électronique sans interaction et de même densité $\rho(r)$, afin de considérer les termes d'interaction comme des corrections aux autres termes.

Si l'on ne tient pas compte du spin des électrons, la densité s'écrit comme une somme sur les N_{occ} états occupés :

$$\sum_{i=1}^{N_{occ}} f_i = N_e, \text{ avec } \rho(r) = \sum_{i=1}^{N_{occ}} f_i |\psi_i(r)|^2 \quad (1.4)$$

Où f_i , qui peut être fractionnaire [7], est le nombre d'occupation de l'orbite i . Pour traiter les systèmes avec polarisation de spin, il suffit de séparer la somme de l'équation (1.4) en deux parties, l'occupation de chaque orbite étant maintenant fixée à 1 [8] :

$$\rho(r) = \rho_{\downarrow}(r) + \rho_{\uparrow}(r) = \sum_{i=1}^{N_e^{\downarrow}} |\psi_i^{\downarrow}(r)|^2 + \sum_{i=1}^{N_e^{\uparrow}} |\psi_i^{\uparrow}(r)|^2 \quad (1.5)$$

Chapitre I : Etude Théorique

où ρ_{\downarrow} et ρ_{\uparrow} désignent respectivement les densités associées aux états de spin down (\downarrow) et up (\uparrow).

avec:

$$N_e^{\downarrow} + N_e^{\uparrow} = N_t$$

La prise en compte de la rotation permet de prendre en considération les propriétés magnétiques. Il modifie seulement la forme analytique du terme d'échange-corrélation, car c'est le seul qui dépend du spin.

L'énergie totale du système peut s'exprimer de la manière suivante :

$$E_{tot}^{KS} = \underbrace{\sum_i \langle \Psi_i | \frac{-\nabla^2}{2} | \Psi_i \rangle}_{T_e} + \underbrace{\frac{1}{2} \int dr dr' \frac{\rho(r)\rho(r')}{|r-r'|}}_{E_H} - \underbrace{\int dr \rho(r) \sum_{i=1}^{N_e} \frac{Z_i}{|r_i - R_i|} - \sum_{I < J} \frac{Z_I Z_J}{|R_I - R_J|}}_{E_{ext}} + E_{xc}[\rho] \quad (1.6)$$

ou T_e est l'énergie cinétique du système sans interaction, E_H le terme de Hartree, E_{ext} inclut l'interaction coulombienne des électrons avec les noyaux et celle des noyaux entre eux, et le terme d'échange-corrélation $E_{xc}[\rho]$ comprend la déviation à l'énergie cinétique et les corrections au terme de Hartree, toutes deux dues à la corrélation entre électrons. Z_I et Z_J désignent la charge des noyaux I et J .

Déterminer l'état fondamental du système revient alors à résoudre, de manière auto-cohérente, un ensemble d'équations aux valeurs propres appelées équations de Kohn-Sham:

$$\underbrace{\left[-\frac{\nabla^2}{2} + V_H(r) + V_{ext}(r) + V_{xc}(r) \right]}_{H^{KS}} |\Psi_i\rangle = E_i |\Psi_i\rangle, \quad i = 1, \dots, N_e \quad (1.7)$$

Chapitre I : Etude Théorique

avec:

$$V_H(r) = \frac{\partial E_H}{\partial \rho(r)} = \int dr' \frac{\rho(r')}{|r-r'|} \quad (1.8)$$

$$V_{ext}(r) = \frac{\partial E_{ext}}{\partial \rho(r)} = - \sum_{I=1}^{N_e} \frac{Z_I}{|r-R_I|} \quad (1.9)$$

$$V_{xc}(r) = \frac{\partial E_{xc}}{\partial \rho(r)} \quad (1.10)$$

Dans l'équation (1.8), E_i représente l'énergie propre associée à l'orbital Ψ_i .

Lorsque le spin est pris en compte, l'énergie d'échange-corrélation $E_{xc}[\rho]$ devient $E_{xc}[\rho^\downarrow, \rho^\uparrow]$ et pour chaque valeur de $\sigma \in \{\uparrow, \downarrow\}$ du spin, le potentiel correspondant s'écrit :

$$V_{xc}^\sigma = \frac{\partial E_{xc}}{\partial \rho(r)} \quad (1.11)$$

Les équations de Kohn-Sham sont résolues en respectant l'ortho-normalisation des fonctions d'ondes :

$$\int dr \Psi_i^*(r) \Psi_j(r) = \delta_{ij} \quad (1.12)$$

La somme des trois termes $V_H + V_{ext} + V_{xc}$ représente un potentiel effectif V_{eff} local.

Le problème lié à la self-interaction qui résulte de l'utilisation de fonctions d'ondes indépendantes, doit être également pris en compte. Ce problème peut être résolu dans de très nombreux cas [9], mais pas toujours de manière satisfaisante pour les atomes et les molécules [10].

I.I.III. Résolution numérique des équations de Kohn-Sham

Pour résoudre numériquement les équations de Kohn-Sham [11], on développe les fonctions d'onde mono-électroniques Ψ_i sur des fonctions de base. La décomposition exacte des fonctions d'onde mono-électroniques implique que le nombre de fonctions de base doit être infini. Nous serons donc amenés à limiter le développement en utilisant certains critères

Chapitre I : Etude Théorique

pour pouvoir mener le calcul numérique. On peut choisir différentes bases de fonctions dont on retient généralement deux classes :

1. les bases dites « localisées ». Ce sont souvent des bases construites sur des gaussiennes centrées sur les atomes du système ayant pour vocation de représenter les orbitales atomiques.
2. les bases dites « systématiques ». Ce sont des bases dont chaque fonction n'a pas nécessairement de réalité physique pour le problème étudié mais qui simplifient le traitement mathématique du problème. Elles ont par ailleurs l'avantage de pouvoir être facilement étendues afin d'améliorer la description de la fonction d'onde globale. Nous utiliserons par la suite des bases d'ondes planes. Suivant cette formulation, les fonctions d'onde mono électroniques s'écrivent comme une somme continue d'ondes planes, ce qui revient à calculer la transformée de Fourier des Ψ_i .

L'utilisation de bases continues n'est pas possible numériquement, il faut avoir une base discrète. Ceci peut être réalisé en travaillant sur des systèmes périodiques, en passant ainsi de la transformée de Fourier à des séries de Fourier. Par ailleurs, pour les systèmes périodiques, le théorème de Bloch permet décrire toute fonction d'onde comme le produit d'une onde plane de vecteur d'onde k (vecteur de la première zone de Brillouin) et d'une fonction radiale F ayant la périodicité du système. Cette fonction F se décompose en série de Fourier, ce qui permet d'écrire :

$$\Psi_{i,k}(r) = e^{ik \cdot r} F(r) = \sum_G C_{i,k,G} e^{i(k+G) \cdot r} \quad (1.13)$$

Où G un vecteur du réseau réciproque, c'est-à-dire tel que $G \cdot r = 2\pi m$ avec r un vecteur du réseau direct et m un nombre entier quelconque.

La discrétisation des fonctions d'onde de Kohn-Sham est une conséquence de la périodicité du système. Ce qui implique l'existence d'artéfacts mathématiques non physique, comme par exemple, la présence d'un défaut dans une boîte reproduite par périodicité. La périodicité des répliques de ce défaut et l'énergie calculée n'est proche de l'énergie réelle de formation du défaut isolé que si les interactions entre répliques restent négligeables, comme illustré sur la Figure 1.1.

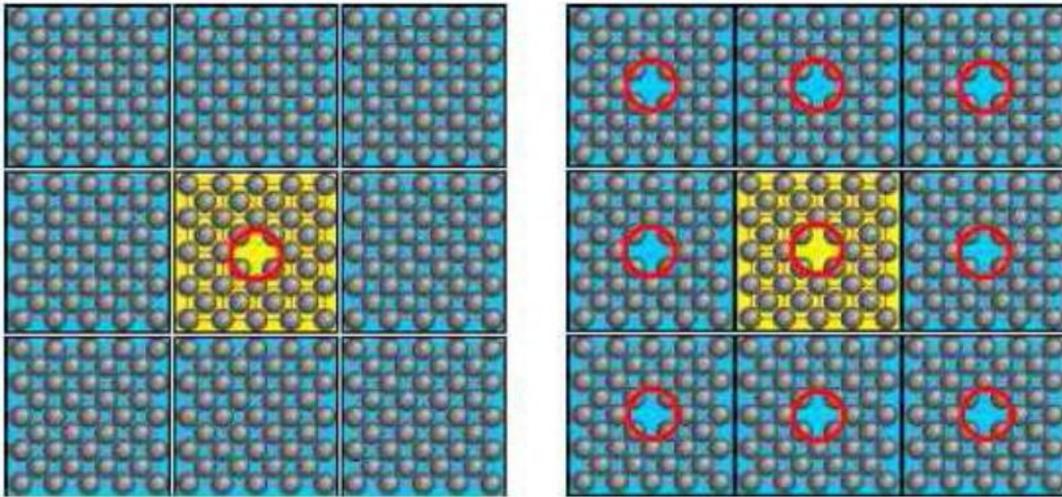


Figure 1-1 A gauche, le cas réel d'un défaut (lacune) dont on veut calculer l'énergie de formation. On isole une super-cellule autour de ce défaut. Lors du calcul ab-initio, la super-cellule est reproduite dans les trois directions de l'espace (à droite), ce qui amène à créer des répliques du défaut.

Les équations de Kohn-Sham exprimées dans la base des vecteurs G pour un vecteur k donné s'écrivent :

$$\sum_{G'} \left\{ \frac{1}{2} (k + G)^2 \delta_{GG'} + TF(F)(G - G') \right\} C_{i,k,G'} = E_i C_{i,k,G} \quad (1.14)$$

où $\delta_{GG'}$ représente le symbole de Kronecker et $TF(F)(G)$ la transformée de Fourier de la fonction F prise en G .

Pour résoudre numériquement ce problème, on coupe la base des vecteurs G au-delà d'un certain vecteur de coupure G_c . on peut alors écrire l'équation (1.14) sous forme matricielle et associer aux valeurs propres E_i les vecteurs propres de composantes $C_{i,k,G}$. Le choix de G_c est un autre paramètre important des calculs qui seront présentés par la suite.

On associe à ce vecteur une énergie, que nous appellerons énergie de coupure E_c définie par :

$$E_c = \frac{\hbar^2 (k + G_c)^2}{2} \quad (1.15)$$

Chapitre I : Etude Théorique

Plus cette énergie est grande, plus la base utilisée pour le calcul est grande. Les ondes planes de grande énergie correspondent aux variations rapides des fonctions d'ondes. Il s'avère que les contributions des ondes planes de grande énergie deviennent négligeables quand G_2 devient grand (les C_i, k, G tendent vers 0). Ceci justifie l'introduction d'une coupure. Il conviendra tout de même de vérifier la convergence en énergie de coupure en testant l'évolution de l'énergie avec l'augmentation de E_c .

La diagonalisation donne les solutions des équations de Kohn-Sham pour un vecteur donné k de la zone de Brillouin. L'énergie totale du système s'obtient en intégrant sur la zone de Brillouin, mais il faut discrétiser le problème pour pouvoir réaliser numériquement l'intégration. On notera que plus la super-cellule est grande, plus la zone de Brillouin est petite, donc plus la discrétisation pourra être limitée (voire réduite au seul point Γ pour certains cas). Cette opération de discrétisation s'appelle le maillage au point k de la zone de Brillouin.

I.II. Méthode kp

I.II.I. Principe de la théorie kp

Construction de l'Hamiltonien kp en trois dimensions sans spin

La théorie kp est une méthode de résolution de l'équation de Schrödinger qui s'apparente à un développement limité de la structure de bande à partir du centre de la zone de Brillouin. Plus on considère de bande, c'est à dire plus l'ordre du développement limité est grand, plus le domaine de validité de la méthode s'accroît [12].

Le point de départ est l'équation de Schrödinger indépendante du temps:

$$H\Psi = \left[\frac{p^2}{2m_0} + V(\vec{r}) \right] \Psi = E\Psi \quad (1.16)$$

dont les solutions sont les fonctions de Bloch, qui sont constituées de deux fonctions : une périodique $u_{n,k}(\vec{r})$ et une onde plane $e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$.

L'équation vérifiée par les parties périodiques des fonctions de Bloch est la suivante:

$$H_{kp}u_{n,k}(\vec{r}) = \left[\frac{p^2}{2m} + V(\vec{r}) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + \frac{\hbar}{m_0} \vec{k} \cdot \vec{p} \right] u_{n,k}(\vec{r}) = E_{n,k} u_{n,k}(\vec{r}) \quad (1.17)$$

Chapitre I : Etude Théorique

Pour résoudre cet Hamiltonien kp , on suppose que les fonctions $u_{n,0}(\vec{r}) = u_n(\vec{r})$ sont connues, ainsi que les énergies propre au point $k = 0$: $\langle u_{n'} | H_{kp} | u_n \rangle = E_n$ et les éléments de la matrice $\langle u_{n'} | \vec{p} | u_n \rangle$.

On projette alors l'Hamiltonien kp sur la base des $u_{n,0}(\vec{r})$. Les éléments de la matrice Hamiltonien s'écrivent alors:

$$\langle u_{n'} | H_{kp} | u_n \rangle = \left(E_n + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \right) \delta_{n,n'} + \langle u_{n'} | \frac{\hbar}{m_0} \vec{k} \cdot \vec{p} | u_n \rangle \quad (1.18)$$

Comme la base des $u_n(\vec{r})$ est infinie, la résolution des états propres de cet Hamiltonien ne peut être qu'approchée: on projette cet Hamiltonien sur une base restreinte des $u_n(\vec{r})$. Les valeurs propres de cet Hamiltonien fourniront les énergies propres $E_{n,\vec{k}}$ et les vecteurs propres fourniront les coefficients c_i tel que : $u_{n,k}(\vec{r}) = \sum_i c_i u_{i,0}(\vec{r})$.

En pratique, les éléments $\langle u_{n'} | H_{kp} | u_n \rangle = E_n$ sont les énergies des bandes en $k = 0$, souvent connues expérimentalement. Par exemple, l'énergie de bande interdite fournit les positions relatives des bandes de conduction et de valence. D'autres différences d'énergie sont connues parce qu'elles sont mesurables optiquement, comme par exemple le couplage spin-orbite de la bande de valence.

La dimension de la base, soit le nombre de bandes prises en compte, détermine le domaine de validité de la méthode.

modèle de la masse effective à la théorie kp à 8 bandes

Le modèle de la masse effective peut être considéré comme une théorie kp à une bande, l'influence des autres bandes étant traitée comme perturbation.

- **Hamiltonien à une bande**

La matrice kp se réduit à un seul élément : $\langle u_0 | H_{kp} | u_0 \rangle = E_0 + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0}$

Si on ne prend pas en compte l'influence des autres bandes, on retrouve la relation de dispersion de l'électron libre. Eu cas où le terme $\frac{\hbar}{m_0} \vec{k} \cdot \vec{p}$ est très faible devant les différences

Chapitre I : Etude Théorique

d'énergie entre bandes, on peut traiter l'influence des autres bandes par perturbation sur la bande i . On obtient alors:

$$E_i(k) = E_{i,0} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + \left(\frac{\hbar}{m_0}\right)^2 \sum_{u,v} \sum_{n \neq i} \frac{\langle u_i | p_u | u_n \rangle \langle u_n | p_v | u_i \rangle}{E_i - E_n} k_u k_v \quad (1.19)$$

où $u, v = x, y, z$. Cette méthode fait simplement varier la masse effective des bandes, qui reste parabolique

- **Hamiltonien à deux bandes**

En considérant deux bandes u_c, u_v de symétrie s , d'énergies respectives E_c et E_v séparées par une énergie E_G , on obtient l'Hamiltonien suivant, où l'on peut prendre P réel:

$$H_{kp} = \begin{bmatrix} E_G + \check{k}^2 & Pk \\ Pk & \check{k}^2 \end{bmatrix} \text{ avec } \check{k}^2 = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \text{ et } P = \frac{\hbar}{m_0} \langle u_v | p | u_c \rangle \quad (1.20)$$

Les énergies que l'on souhaite calculer sont les valeurs propres de cette matrice. Il suffit donc de la diagonaliser pour les valeurs de k qui nous intéressent

On définit l'énergie E_p de la manière suivante:

$$E_p = \frac{2}{m_0} |\langle u_v | p | u_c \rangle|^2 \text{ de sorte que } P^2 k^2 = E_p \check{k}^2 = E_p \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \quad (1.21)$$

Si on considère l'influence de la bande de valence comme une perturbation sur la bande de conduction, on obtient l'expression suivante de E_c :

$$E_c(k) = E_G + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + \frac{P^2 k^2}{E_G} = E_G + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \left(1 + \frac{E_p}{E_G}\right) = E_G + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0^*} \quad (1.22)$$

I.III. Zones de Brillouin

Le concept de zone a été introduit par Brillouin en 1930 [13], la division de l'espace k , identique à l'espace du réseau réciproque du cristal, en zones s'introduit automatiquement lors de la résolution de l'équation de Schrödinger (1.23) par la fonction de Bloch (1.24)

$$\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi + (E - V) \Psi = 0 \quad (1.23)$$

Chapitre I : Etude Théorique

$$\Psi_{k,n}(r) = e^{ikr} \cdot u_k(r) \quad (1.24)$$

où la fonction $u(r)$ qui dépend généralement de k à la même période que le réseau cristallin (a_1, a_2, a_3) , la solution (1.24) n'est pas définie de façon univoque pour toute valeur de k . En effet, la translation (1.25) où les composantes de m sont entières conduit à une solution équivalente:

$$k = k_0 + \frac{2\pi}{a} m \quad (1.25)$$

Le vecteur k ne peut donc varier de façon univoque que dans un domaine de longueur $2\pi/a$. En général, on écrit cette condition sous la forme:

$$\frac{-\pi}{a} \leq |k| \leq \frac{\pi}{a} \quad (1.26)$$

Le vecteur k ainsi défini est appelé vecteur k réduit, grâce à la symétrie de translation du réseau, on peut se limiter lors de la résolution de l'équation de Schrödinger à une seule cellule élémentaire du réseau cristallin, et que le plus, on peut limiter la variation de k à l'intérieur d'une seule cellule élémentaire du réseau réciproque.

Définition:

Le domaine dans lequel le vecteur k réduit peut varier est appelé première zone de Brillouin. Cette zone de l'espace réciproque peut être choisie d'un grand nombre de façons. On a l'avantage à choisir une zone symétrique autour d'un point $k=0$ et à travailler avec les plus petites valeurs possibles de $|k|$. Ceci conduit à limiter la zone de Brillouin par des plans répondant à l'équation générale où n est un vecteur du réseau réciproque à composante entières.

$$nx + \frac{1}{2}|n|^2 = 0 \quad (x = \frac{k}{2\pi}) \quad (1.27)$$

On peut dans certains cas être amené à introduire des zones de Brillouin d'un ordre supérieur. Un raisonnement géométrique montrerait que toutes ces zones ont le même volume.

Chapitre I : Etude Théorique

A titre d'exemple, la Figure 1.2 montre les structures cristallines du zincblende ainsi que du cubique à face centré. Les points spéciaux de haute symétrie sont désignés par Γ , X et L, tandis que les lignes de haute symétrie joignant certains de ces points sont appelées Λ et Δ .

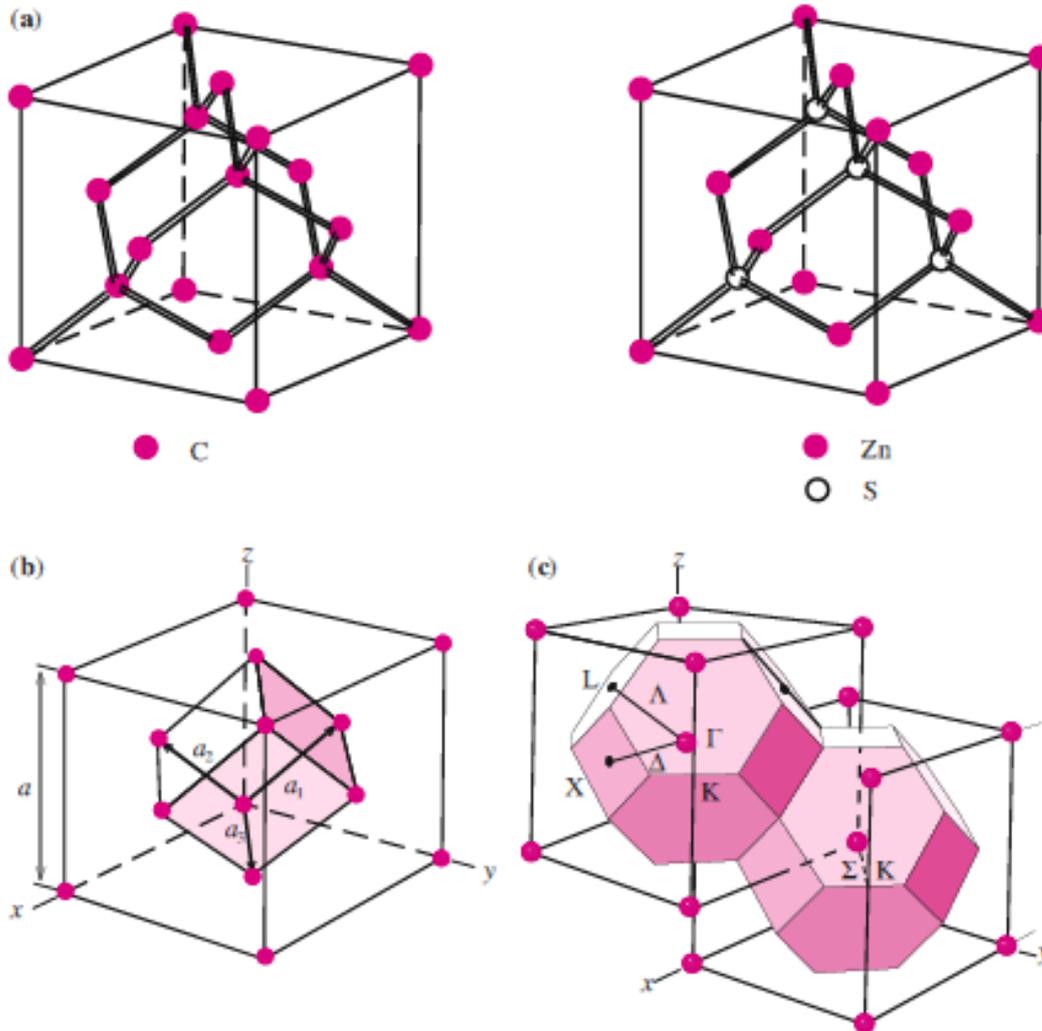


Figure. 1.2. (a) Structure cristalline du diamant et du zinc-blende (ZnS). (b) Réseau cubique à face centrée (cfc) montrant un ensemble de vecteurs de réseau primitifs. (c) Réseau réciproque du réseau cfc avec la première zone de Brillouin.

Les trois directions de haute symétrie [100], [110] et [111] dans la zone de Brillouin du réseau cfc sont désignées par:

- [100] direction: $\Gamma \rightarrow X$
- [111] direction: $\Gamma \rightarrow L$
- [110] direction: $\Gamma \rightarrow K$

Chapitre I : Etude Théorique

La zone de Brillouin du réseau cfc est très symétrique. Un examen attentif de cette zone de Brillouin montre qu'elle n'est pas modifiée par diverses opérations de rotations, telles qu'une rotation de 90 ° autour d'axes parallèles aux bords du cube centré. De plus, il est invariant lors de la réflexion sur certains plans contenant le centre du cube. Ces opérations sont appelées opérations de symétrie de la zone de Brillouin. La symétrie de la zone de Brillouin résulte de la symétrie du réseau direct et est donc liée à la symétrie du cristal. Le tableau 1.1 résume les différents points de haute symétrie de quelques réseaux cristallins

Symbole	Description
Γ	Centre de la zone de Brillouin
Cubique simple	
M	Milieu d'une arête
R	Sommet
X	Centre d'une face
Cubique à faces centrées	
K	Milieu d'une arête joignant deux faces hexagonales
L	Centre d'une face hexagonale
U	Milieu d'une arête joignant une face hexagonale et une face carrée
W	Sommet
X	Centre d'une face carrée
Cubique centré	
H	Sommet joignant 4 arêtes
N	Centre d'une face
P	Sommet joignant trois arêtes
Hexagonal	
A	Centre d'une face hexagonale
H	Sommet
K	Milieu d'une arête joignant deux faces rectangulaires
L	Milieu d'une arête joignant une face hexagonale et une face rectangulaire
M	Centre d'une face rectangulaire

Tableau 1.1. Points de haute symétrie de quelques réseaux cristallins

I.IV. Structure de bande

La structure des bandes est l'un des concepts les plus importants de la physique des solides. Elle fournit une information sur les niveaux électroniques dans les structures cristallines. De nombreuses propriétés électriques, optiques et même certaines propriétés magnétiques des cristaux peuvent être expliquées en termes de structure de bande. La localisation de l'énergie de Fermi, jusqu'à laquelle tous les niveaux sont occupés à une température nulle, revêt une importance particulière. Si l'énergie de Fermi est située dans une bande interdite, le matériau est isolant ou semiconducteur alors qu'il est métallique autrement.

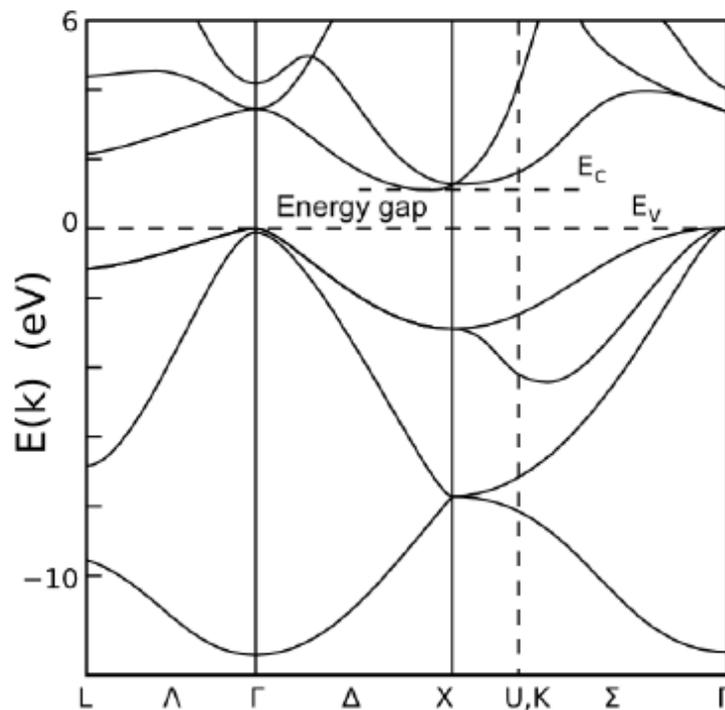


Figure. 1.3. Structure de bande d'un réseau cfc (cette figure est prise de Wikimedia Commons qui se trouve dans le domaine publique)

I.V. References

- [1] G.Noria, Etude par la théorie DFT des propriétés structurales, électroniques et magnétiques du MnAs comme matériau magnétocalorique, Mémoire Master en physique, univ.Abou-Bekr Belkaid - Tlemcen, 55 p, Soutenue 01/07/2018.
- [2] E. Vimmer. 'Computational methods for atomistic simulations of materials'. Accelrys, <http://www.accelrys.com/technology/qm/erich/>, 2000.
- [3] P. Hohenberg, W. Khon, Phys. Rev., 136, pp B864-B870, 1964.
- [4] L.H. Thomas, Proc.. Camb. Phil. Soc., 23, p 542, 1927.
- [5] E. Fermi, Rend. Accad. Lincei, 6, p 602, 1927.
- [6] W. Khon, L.J. Sham, Phys. Rev., 140, pp A1133-A1133, 1965.
- [7] J.C. Slater, J.B. Mann, T.M. Wilson, J.H. Wood, Phys. Rev., 184, pp 672-694, 1969.
- [8] D.J. Singh. Planewaves, Pseudopotentials and the LAPW Method. Kluwer Academic Publishers, Boston (USA), 1994.
- [9] J.P. Perdew, A. Zunger, Phys. Rev. B 45, 5048 (1981).
- [10] A.D. Becke, Phys. Rev. A 38, 3098 (1988).
- [11] M.C. Payne, M.P. Teter, D.C. Allan, et al, Rev. Mod. Phys., 64, 1045 (1992).
- [12] R.Soline, Modélisation physique de la structure électronique, du transport et de l'ionisation par choc dans les matériaux IV-IV massifs, contraints et dans les puits quantiques,Th. Doc. Univ. Paris XI ufr Scientifique D'orsay, 219 p, Soutenue 14/12/2004.
- [13] L. Brillouin, C. R. Ac. Sci. 191, 198 (1930).

Chapitre II : Théorie de la Masse Effective

Chapitre II : Théorie de la Masse Effective

II.I. Masse effective

Si une force F agit sur une masse de l'électron, par exemple par l'intermédiaire d'un champ électrique E , les lois de Newton de la mécanique classique s'appliquent et nous pouvons écrire :

$$F = -e \cdot E = m \cdot \frac{d^2 r}{dt^2} \quad (2.1)$$

Avec:

- r : vecteur de position de l'électron

Une description tout aussi valable est possible en utilisant la quantité de mouvement p qui nous donne :

$$p = m \cdot \frac{dr}{dt} \quad (2.2.A)$$

$$F = -e \cdot E = \frac{dp}{dt} \quad (2.2.B)$$

La relation essentielle à l'utilisation est l'identité de la vitesse des particules avec la vitesse de groupe (V_{groupe}) du paquet d'ondes qui décrit la particule en mécanique quantique. L'équation est :

$$V_{\text{groupe}} = \frac{1}{\hbar} \cdot \nabla_k E(K) \quad (2.3)$$

En utilisant l'approximation du modèle du gaz d'électrons libres. Nous avons eu l'expression suivante pour l'énergie d'une particule :

$$E = E_{\text{cin}} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad (2.4)$$

Pour V_{groupe} on obtient alors :

$$V_{\text{groupe}} = \frac{1}{\hbar} \cdot \nabla_k \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar k}{m} = \frac{p}{m} = V_{\text{classique}} \quad (2.5)$$

Puisque $\hbar k$ était égal à la quantité de mouvement $p = m V_{\text{classique}}$ de la particule, nous avons en effet $V_{\text{groupe}} = V_{\text{classique}} = V_{\text{phase}}$.

Chapitre II : Théorie de la Masse Effective

En d'autres termes : tant que la courbe $E(k)$ est une parabole, toute l'énergie peut être interprétée comme une énergie cinétique pour une particule de masse (constante) m . A l'inverse, si la courbe de dispersion n'est pas une parabole, alors toute l'énergie n'est pas de l'énergie cinétique.

Comment cela s'applique-t-il à un électron dans un potentiel périodique?

Nous avons toujours le vecteur d'onde k , mais $\hbar k$ n'est plus identique à la quantité de mouvement d'un électron (ou d'un trou), mais il est considéré comme une quantité de cristal.

$E(k)$ n'est plus une parabole, mais une fonction plus compliquée. Puisque nous ne connaissons généralement pas la relation exacte $E(k)$, nous semblons être bloqués. Cependant, nous pouvons encore faire valoir quelques points. Les électrons situés dans (ou proches de) la zone de Brillouin dans chaque bande sont diffractés et forment des ondes stationnaires, c'est-à-dire qu'ils sont décrits par des superpositions d'ondes de vecteur d'onde k et $-k$. Leur vitesse de groupe est nécessairement proche de zéro!

Cela implique que $\nabla_k E(k)$ à la ZB doit également être proche de zéro, ce qui exige que la courbe de dispersion soit presque horizontale à cet endroit. Le point le plus important est le suivant: nous ne sommes pas intéressés par les électrons (ou les trous) éloignés des bords de la bande. Ces électrons sont juste "assis là" (dans l'espace k) et ne font pas beaucoup d'intérêt; seuls les électrons et les trous aux bords de la bande (caractérisés par un vecteur d'onde k_{ex}) participent au processus de génération-recombinaison qui caractérise les semi-conducteurs.

Nous ne nous intéressons donc qu'aux propriétés de ces électrons et de ces trous, et par conséquent, seule la partie de la courbe de dispersion définissant les maxima ou les minima de la bande de valence ou de la bande de conduction, respectivement, est importante. La chose à faire est alors d'étendre la courbe $E(k)$ autour des points k_{ex} des extrema en une série de Taylor, écrite, pour simplifier, comme une équation scalaire et avec les termes après k^2 négligés.

$$E_n(k) = E_{V,C} + k \cdot \left. \frac{\partial E_n}{\partial k} \right|_{k_{ex}} + \frac{k^2}{2} \cdot \left. \frac{\partial^2 E_n}{\partial k^2} \right|_{K_{ex}} \quad (2.6)$$

Chapitre II : Théorie de la Masse Effective

Depuis que nous avons choisi les extrema de la courbe de dispersion, nous avons nécessairement :

$$\left. \frac{\partial E_n}{\partial k} \right|_{K_{ex}} = 0 \quad E_n(K_{ex}) = E_v \quad \text{où } E_c \quad (2.7)$$

c'est-à-dire que nous regardons au sommet de la bande de valence et au bas de la bande de conduction. Nous pouvons ainsi écrire :

$$E_n(k) = E_{v,c} + \frac{k^2}{2} \cdot \left. \frac{\partial^2 E_n}{\partial k^2} \right|_{K_{ex}} \quad (2.8)$$

Si nous ne considérons maintenant que la bande de conduction et utilisons son fond comme point zéro de l'échelle d'énergie, nous avons la même relation quadratique en k que pour le gaz d'électrons libres, à condition de modifier la définition de la masse de la manière suivante :

$$\frac{1}{2} \cdot \left. \frac{\partial^2 E_n}{\partial k^2} \right|_{K_{ex}} = \frac{\hbar^2}{m^*} \quad (2.9)$$

ce qui permet de réécrire l'expression de Taylor pour la bande de conduction comme suit :

$$E_c(k) = 0 + \frac{\hbar^2}{m^*} \cdot k^2 = \frac{\hbar^2}{m^*} \cdot k^2 \quad (2.10)$$

Et c'est la même forme que la relation de dispersion pour le gaz d'électrons libres !

Cependant, comme $\partial^2 E_n / \partial k^2$ peut avoir des valeurs arbitraires, la masse effective m^* de la particule sera en général différente de la masse régulière de l'électron m au repos.

Nous allons utiliser le symbole m^* , que nous appelons la *masse effective du porteur*. Il est défini par :

$$m^* = \frac{\hbar^2}{K_{ex}} \cdot \frac{1}{\partial^2 E_n / \partial k^2} \quad (2.11)$$

Chapitre II : Théorie de la Masse Effective

Le facteur décisif pour la masse effective est donc la courbure de la courbe de dispersion au niveau des extrema, comme dans la dérivée seconde. Les grandes courbures (grande dérivée seconde = petit rayon de courbure) donnent des petites valeurs de la masses effective. Par contre, les petites courbures (petite dérivée de seconde = grand rayon de courbure) donnent de grandes valeurs de la masse effective. L'illustration ci-dessous (Figure 2.1) résume ce que nous avons décrit précédemment.

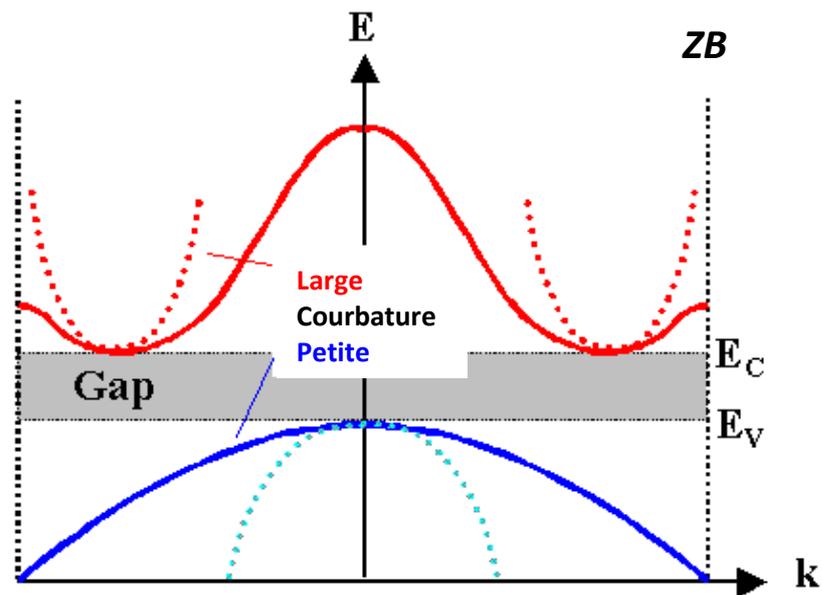


Figure 2.1: Courbe de dispersion de silicium

La courbe de dispersion a été approximée dans les extrema par une parabole résultant de l'expression de Taylor (lignes en pointillés). Les rouges ont une courbure plus grande (le rayon d'un cercle inscrit est petit); nous nous attendons donc à ce que la masse effective des électrons soit inférieure à la masse effective des trous.

La masse effective n'a rien à voir avec la masse réelle; c'est un outil mathématique. Cependant, si nous connaissons les courbes de dispersion (à partir des calculs impliqués ou des mesures), nous pouvons attribuer un nombre aux masses effectives et constater qu'elles ne sont pas trop différentes des masses réelles. Cela donne un peu de confiance à l'interprétation suivante (qui peut être pleinement justifiée théoriquement):

Chapitre II : Théorie de la Masse Effective

Si nous utilisons la masse effective m^* des électrons et des trous au lieu de leur masse réelle m , nous pouvons considérer que leur comportement est identique à celui des électrons (ou des trous) dans le modèle de gaz à électrons libres.

Cela s'applique en particulier à leur réaction aux forces. Dans ce cas, la déviation par rapport à la masse réelle prend en charge la partie réseau.

Pris à l'extrême, cela peut même impliquer des masses effectives nulles ou négatives (par exemple, exactement à ou près de la ZB, où une force dans la direction $+x$ peut amener un électron à se déplacer dans la direction $-x$ en raison de la diffraction).

II.II. Base physique de la masse effective

Comment se fait-il qu'un électron de masse m placé dans un cristal réagisse à un champ électrique comme s'il avait une masse m^* ? il est utile de penser au phénomène de réflexion de Bragg des ondes électroniques dans un réseau. Considérons l'approximation habituelle d'une liaison faible. Près du bas de la bande inférieure, l'état est assez bien représenté par une onde plane $\exp(ikx)$ de quantité de mouvement $\hbar k$: la composante $\exp[i(k - G)x]$ dont la quantité de mouvement est $\hbar(k - G)$, est petite et n'augmente que lentement lorsque k augmente, et dans cette région $m^* \simeq m$. Une augmentation de la composante réfléchie $\exp[i(k - G)x]$ lorsque k augmente, représente un transfert de quantité de mouvement entre le réseau et l'électron. Près de la limite de zone, la composante réfléchie est assez grande ; à la limite elle atteint la même amplitude que $\exp(ikx)$; les fonctions propres deviennent alors des ondes stationnaires. Alors la composante de quantité de mouvement $\hbar(-\frac{1}{2}G)$ annule la composante de la quantité de mouvement $\hbar(\frac{1}{2}G)$ [2].

Il n'est pas surprenant de trouver pour m^* des valeurs négatives juste en dessous de la limite de zone. Un électron dans une bande d'énergie peut avoir une masse effective positive ou négative : les états correspondant à une masse effective positive se trouvent au voisinage de la limite inférieure de la bande puisque la courbure γ est dirigée vers le haut (d^2E/dk^2 est positif). Les états correspondant à une masse effective négative signifie que, lors du passage d'un état k à un état $k + \Delta k$, le transfert de quantité de mouvement du réseau à l'électron est supérieur au transfert de quantité de mouvement de la force appliquée à l'électron. Bien que k soit augmenté de Δk par le champ électrique appliqué, la réflexion de Bragg qui en

Chapitre II : Théorie de la Masse Effective

découle a pour effet de diminuer la quantité de mouvement de l'électron dans cette direction, de sorte que la masse effective doit être négative

Quand nous présenterons dans la deuxième bande, l'amplitude de $\exp[i(k - G)x]$ décroît rapidement et m^* prend une petite valeur positive. Dans ce cas l'augmentation de vitesse d'un électron provoquée par une impulsion donnée est supérieure à celle qui en résulte pour un électron libre. Le réseau fournit la différence par le recul qu'il subit quand l'amplitude $\exp[i(k - G)x]$ diminue.

Si l'énergie dans une bande ne dépend que faiblement de k , la masse effective sera très importante. C'est-à-dire $m^*/m \gg 1$ car d^2E/dk^2 est très faible. L'approximation des liaisons fortes donne un rapide aperçu sur la formation des bandes étroite. Si les fonctions d'ondes centrées sur des atomes voisins se recouvrent très peu, alors l'intégrale de recouvrement sera petite ; la largeur de la bande sera faible ; et la masse effective sera grande. L'interpénétration des fonctions d'ondes d'atomes voisins est faible pour les électrons internes. Les électrons 4f des métaux de terres rares, par exemple, se recouvrent très peu. L'intégrale de recouvrement détermine la vitesse de passage d'un électron d'un ion à l'autre par effet tunnel quantique. Quand la masse effective est élevée, ce passage se fait lentement.

II.III. Approximation de la masse effective

La description des bords de bande (voisinage d'un maximum ou d'un minimum) en termes de masse effective permet d'une interprétation simple du mouvement d'un électron : en remplaçant m_0 par m^* , on peut négliger les forces intérieures dues à la présence des atomes du cristal. On peut aller plus loin, et prévoir que l'équation de Schrödinger

$$\Delta\Psi + \frac{2m_0}{\hbar^2}(E - V)\Psi = 0 \quad (2.12)$$

Pourrait être remplacée par l'équation

$$\Delta\Psi + \frac{2m^*}{\hbar^2}E\Psi = 0 \quad (2.13)$$

Chapitre II : Théorie de la Masse Effective

Où l'introduction de m^* , au lieu de m_0 , permet de ne pas tenir compte du potentiel V appliqué à l'électron. L'approximation définie par (2.12) s'appelle l'approximation de la masse effective. Elle a permis aussi de résoudre deux problèmes :

- Le calcul des niveaux d'énergie d'un électron lié à une impureté (niveaux donneurs et accepteurs) [3]
- Le calcul des niveaux d'énergie d'un électron dans un fort champ magnétique (niveau de Landau) [4]

Dans ces deux cas l'équation de Schrödinger convenable où on a ajouté au premier membre de (2.12) les termes décrivant le potentiel de l'ion-impureté ou le potentiel-vecteur de l'induction magnétique, reste soluble exactement.

II.IV. Détermination expérimentale de la masse effective

Dans un certain nombre de semiconducteurs, il a été possible de déterminer, par résonance cyclotron, la forme des surfaces d'énergie des bandes de conduction et de valence près de limites des bandes. La détermination de la surface d'énergie est équivalente à la détermination du tenseur de masse effective [2]. La résonance cyclotron peut être réalisée à l'aide d'ondes centimétriques ou millimétriques pour de faibles concentrations de porteurs.

Les porteurs sont accélérés sur des orbites hélicoïdales autour de l'axe d'un champ magnétique statique. La fréquence angulaire de rotation ω_c est égale à :

$$(CGS) \quad \omega_c = eB/m^*c, \quad (SI) \quad \omega_c = eB/m^*$$

où m^* est la masse effective. L'absorption résonante de l'énergie d'un champ électrique rf perpendiculaire au champ magnétique statique (Fig. 2.1) a lieu quand la fréquence du champ rf est égale à la fréquence cyclotron. Les trous et les électrons tourneront en sens opposés dans un champ magnétique.

Considérons l'ordre de grandeur de plusieurs quantités physiques se rapportant à cette expérience, pour $m^*/m \approx 0,1$. Pour

$$f_c = 24 \text{ GHz}, \quad \text{ou} \quad \omega_c = 1,5 \times 10^{11} \text{ rad s}^{-1}$$

Chapitre II : Théorie de la Masse Effective

-*nous avons $B \approx 860 \text{ G}$ à la résonance. La largeur de raie est déterminée par le temps de relaxation de collision τ , et pour obtenir une résonance décelable il faut que $\omega_c \tau \geq 1$. En d'autres termes, le libre parcours moyen doit être assez long pour permettre au porteur moyen de parcourir $1/2\pi$ sur un cercle entre deux collisions successives.

À température ambiante, les temps de relaxation des porteurs dans les cristaux sont de l'ordre de 10^{-13} à 10^{-15} s. Il faut en général travailler sur des cristaux de haute pureté à la température de l'hélium liquide pour obtenir des temps de relaxation suffisamment longs. Ces conditions sont moins sévères avec un rayonnement à haute fréquence, mais il faut alors des champs magnétiques plus élevés.

Les semi-conducteurs possédant une transition directe, avec des extrema de bandes situés au centre de la zone de Brillouin, présentent une structure de bande. L'extrémité de la bande de conduction est sphérique, la masse effective est notée m_e ou m^*

$$E_c = E_g + \hbar^2 k^2 / 2m^*$$

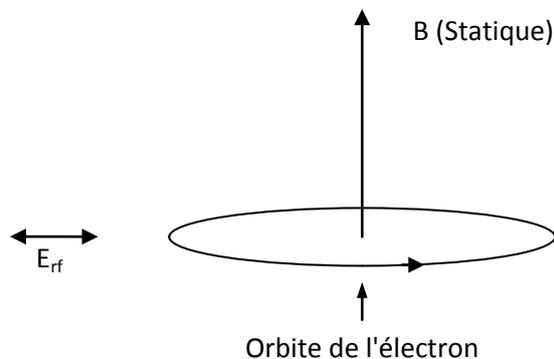


Figure 2.2: disposition des champs dans une expérience de résonance cyclotron dans un semi conducteur. Le sens de parcours de l'orbite est opposé pour les électrons et pour les trous.

Chapitre II : Théorie de la Masse Effective

II.V. References:

- [1] https://www.tf.uni-kiel.de/matwis/amat/semi_en/kap_2/backbone/r2_3_1.html
- [2] C. Kittel, Physique de l'état solide, 7^e éd. Dunod, paris, 610 p, 1998
- [3] W. KOHN, Solid State Physics 5, 258, Academic Press, New York 1957
- [4] R. B. DINGLE, Proc. Roy. SOC. A 212, 38 (1052).

Chapitre III : Résultats

III.I. Objectif

Dans cette partie, nous allons essayer de développer un script sous python version 3.7 qui calcule les valeurs des masses effectives des électrons et des trous. De ce fait, nous nous sommes basés sur le travail de Y. Wang et *al.* [1]. Le choix de cette source est dicté par l'approximation du potentiel utilisé pour résoudre l'équation de Kohn-Sham, qui est basé sur la LDA-MBJ implémentée dans le code NANODSIM[2].

III.II. Méthodologie

Le calcul de la masse effective se fait à partir de la courbe de dispersion $E(k)$, décrites au chapitre précédent. Ces courbes ont été obtenues à partir du fichier de calcul de la structure de bande du code Wien2k [2].

Nous avons utilisé les paramètres de maille de Y. Wang et *al.* [1]. Les composés sont des semiconducteurs de la famille III-V avec la symétrie zinc-blende. Le Tableau 3.1 résume les paramètres de mailles des binaires utilisés.

Tableau 3.1 Paramètres de maille a_0 de binaires III-V

Composé	a_0 (Ang)
GaAs	5.6533
AlAs	5.6611
InAs	6.0583
GaSb	6.0959
AlSb	6.1355
InSb	6.4794
GaP	5.4505
AlP	5.4672
InP	5.8697
GaN	4.5
AlN	4.38
InN	4.98

Pour le calcul des propriétés électroniques des composés nous avons utilisé le code ab-initio Wien2k avec un échantillonnage de $10 \times 10 \times 10$ de vecteur d'onde dans la zone de Brillouin. Ainsi le script va lire directement le fichier de sortie `case.spaghetti_ene` du

Chapitre III : Résultats

code Wien2k pour calculer les valeurs des masses effectives. Le Tableau 3.2 résume tous les résultats obtenus.

Tableau 2.2 Masses effectives des électrons et des trous en unité de la masse de l'électron au repos ainsi que l'erreur relative représentant la déviation entre la valeur calculée et celle de Y. Wang [1]

Composé	m_h^*			m_e^*		
	Y. Wang [1]	Notre Script	Erreur (%)	Y. Wang [1]	Notre Script	Erreur (%)
GaAs	0.355	0.362	1.97	0.076	0.072	5.26
AlAs	0.51	0.541	6.08	0.149	0.148	0.67
InAs	0.373	0.400	7.24	0.029	0.0576	98.62
GaSb	0.265	0.280	5.66	0.041	0.062	51.22
AlSb	0.367	0.288	21.53	0.118	0.0601	49.07
InSb	0.263			0.018		
GaP	0.411	0.412	0.24	0.163	0.651	299.39
AlP	0.595	0.630	5.88	0.209	0.313	49.76
InP	0.45	0.407	9.56	0.094	0.068	27.66
GaN	0.927			0.232		
AlN	1.587	1.837	15.75	0.319	0.263	17.55
InN	0.977		1.97	0.085		5.26

D'après les résultats du Tableau 3.2, les valeurs de la masse effective des trous sont en bon accord avec ceux de Wang [1]. Par contre, il existe une grande dispersion dans les valeurs de la masse effective de l'électron. Ce point de divergence sera traité ultérieurement.

L'erreur calculée dans le Tableau 3.2 représente l'erreur relative de la déviation du résultat obtenu par notre script et celui de Wang [1].

III.III. Script python pour la structure Zinc-blende

Effective Mass Calculation

Le script utilise le fichier spaghetti de Wien2k (Structure cristalline zincblende)

```
Entrée [1]: 1 import os,stat,sys
2 import numpy as np
3 import itertools as it
4 #import matplotlib.pyplot as plt
5 import scipy.constants as sc
6 import scipy.optimize as opt
7 import seaborn as sns
```

Vérification du Fichier de données

```
Entrée [2]: 1 def verifFichierExist(fic_nom):
2     ret = False
3     if os.path.exists(fic_nom+".spaghetti_ene"):
4         ret = True
5         print ("Le fichier [%s.spaghetti_ene] existe"%(fic_nom))
6     else:
7         ret = False
8         print ((u"Fichier [%s.spaghetti_ene] introuvable!!!\n"%(fic_nom))
9     return ret
```

Vérification du répertoire de Travail

```
Entrée [3]: 1 def verifEspaceTravail(fic_nom):
2     """
3     Vérifier l'espace de Travail
4     """
5     if(not verifFichierExist(fic_nom)):
6         print ("1- Vérifiez le nom de votre fichier")
7         print ("2- Mettez le bon fichier dans le répertoire:")
8         print ("\t", os.getcwd())
9         print ("3- Ré-exécutez le script")
10        sys.exit(1)
11
12    dir_work = fic_nom+"_work"
13    if (not os.path.exists(dir_work)):
14        print ((u"Création du répertoire de travail %s" % (dir_work))
15        os.mkdir(dir_work)
16    else:
17        print ("Le répertoire de travail %s existe"%(dir_work))
18
19    return dir_work
```

Standardisation du fichier spaghetti pour le traitement

```
Entrée [4]: 1 def paragraphes(ficobj, separateur='\n'):
2     """Iterer le ficobj par paragraphe"""
3     lignes = []
4     for ligne in ficobj:
5         if ligne == separateur and lignes:
6             yield ''.join(lignes)
7             lignes = []
8         else:
9             lignes.append(ligne)
10    yield ''.join(lignes)
```

Chapitre III : Résultats

```
Entrée [5]: 1 def read_spag(fic_nom, dir_work):
2           """
3           Extraction des structures de bandes:
4           1- Trous lourds
5           2- Trous légers
6           3- Electrons
7           """
8           paragraphe_listes = [[]]
9           with open(fic_nom+".spaghetti_ene") as f:
10            paras = paragraphes(f)
11            for para, group in zip(paras, it.cycle(paragraphe_listes)):
12                group.append(para)
13
14            d = paragraphe_listes[0][0].split('\n')
15            ii = 0
16            iii = 0
17            position = []
18            for i in d:
19                if i[:11] == ' bandindex':
20                    ii = ii + 1
21                    position.append(iii)
22                    iii = iii + 1
23            band_pt = position[1]-1
24            print (('Nombre de bandes: %d')%(ii))
25            print (('Nombre de points par bande: %d')%(band_pt))
26            val_band_ind = None
27            for i in range(len(position)):
28                band = []
29                pos1 = position[i]+1
30                pos2 = position[i]+band_pt
31                for j in range(position[i]+1, position[i]+band_pt):
32                    element = " ".join(d[j][:].split())
33                    band.append(element.split())
34                band = np.array(band, dtype=np.float32)
35                if np.max(band[:,4]) == 0.0:
36                    val_band_ind = i
37            del band
38
39            if (val_band_ind == None):
40                print ("\n")
41                print (u"!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!")
42                print (u"          !!Problème!!")
43                print (u"!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!\n")
44                print (u"Je n'arrive pas à détecter la dernière bande de valence")
45                print (u"Peut être que ce n'est pas un semiconducteur???!")
46                print (u"Programme Terminé ")
47                sys.exit(1)
48
49            band_val_hh = []
50            for i in range(position[val_band_ind]+1, position[val_band_ind]+band_pt):
51                element = " ".join(d[i][:].split())
52                band_val_hh.append(element.split())
53            band_val_hh = np.array(band_val_hh, np.float32)
54            np.savetxt(os.path.join(dir_work, fic_nom+'_hh.dat'), band_val_hh, fmt='% .10f', delimiter=' ', newline='\n',
55                    header='', footer='', comments='#')
56
57            band_val_lh = []
58            for i in range(position[val_band_ind-1]+1, position[val_band_ind-1]+band_pt):
59                element = " ".join(d[i][:].split())
60                band_val_lh.append(element.split())
61            band_val_lh = np.array(band_val_lh, np.float32)
62            np.savetxt(os.path.join(dir_work, fic_nom+'_lh.dat'), band_val_lh, fmt='% .10f', delimiter=' ', newline='\n',
63                    header='', footer='', comments='#')
64
65            band_cond = []
66            for i in range(position[val_band_ind+1]+1, position[val_band_ind+1]+band_pt):
67                element = " ".join(d[i][:].split())
68                band_cond.append(element.split())
69            band_cond = np.array(band_cond, np.float32)
70            np.savetxt(os.path.join(dir_work, fic_nom+'_cond.dat'), band_cond, fmt='% .10f', delimiter=' ', newline='\n',
71                    header='', footer='', comments='#')
```

Chapitre III : Résultats

```
Entrée [6]: 1 def Extraction_point(x,y,chaine,nb_pt):
2
3     if chaine == 'minimum':
4         y_critique = np.min(y)
5     elif chaine == 'maximum':
6         y_critique = np.max(y)
7     else:
8         print("Erreur de recherche du point extremum de l'energie")
9         sys.exit(1)
10    index = list(y).index(y_critique)
11    k_cri = x[index]
12    E_cri = y[index]
13    Tab1 = []
14    Tab2 = []
15    Tab3 = []
16    Tab4 = []
17    for i in range(nb_pt):
18        Tab1.append(y[index+i])
19        Tab2.append(x[index+i])
20        Tab3.append(y[index-i])
21        Tab4.append(x[index-i])
22    return Tab1, Tab2,Tab3, Tab4, k_cri, E_cri
```

```
Entrée [7]: 1 def calcul_masse_effective(y,x):
2     """
3     Calcul de la masse effective par interpolation de degré 2
4     """
5     hbar = sc.hbar
6     masse_e = sc.m_e
7     eV_J = sc.e
8     bohr_m = sc.physical_constants['Bohr radius'][0]
9
10    foncQuad=lambda tpl,x1 : tpl[0]*x1*x1+tpl[1]*x1+tpl[2]
11    ErreurFonc=lambda tpl,x1,y1: foncQuad(tpl,x1)-y1
12    Valeur_initial=(1,0,0)
13    Valeur_inter,success=opt.leastsq(ErreurFonc,Valeur_initial[:,
14                                     args=(np.array(x),np.array(y)))
15
16    m_eff = hbar*hbar/(Valeur_inter[0]*eV_J*1.E-20*masse_e)
17    return m_eff,Valeur_inter
```

Sauvegarde des résultats

```
Entrée [8]: 1 def save_data(data, fic_nom, dir_work):
2     completeName = os.path.join(dir_work, fic_nom+'_masseff.dat')
3     fic_out = open(completeName,"w+")
4     if np.abs(data[6]-data[7])<=1.E-6:
5         fic_out.write(u"Le semiconducteur est de Gap Directe\n")
6     else:
7         fic_out.write(u"Le semiconducteur est de Gap Indirecte\n")
8     fic_out.write(u"Valeur du Gap: %.6f eV\n" %(np.abs(data[8]-data[9])))
9     fic_out.write(u"")
10    fic_out.write(u"La masse effective des électrons dans la direction [100]: %.6f*m_0\n" %data[0])
11    fic_out.write(u"La masse effective moyenne des électrons: %.6f*m_0\n"%((data[0]+data[1])/2.))
12    fic_out.write(u"La masse effective des trous lourds dans la direction [100]: %.6f*m_0\n" %-data[2])
13    fic_out.write(u"La masse effective moyenne des trous lourds: %.6f*m_0\n"%(-(data[2]+data[3])/2.))
14    fic_out.write(u"La masse effective des trous légers dans la direction [100]: %.6f*m_0\n" %-data[4])
15    fic_out.write(u"La masse effective moyenne des trous légers: %.6f*m_0\n"%(-(data[4]+data[5])/2.))
16
```

Chapitre III : Résultats

Programme Principal

```
Entrée [9]: 1 if __name__ == '__main__':
2
3     print ("\t*****")
4     print ("\t* Calcul des masses effectives à partir du fichier **")
5     print ("\t*      case.spaghetti_ene de 0ien2k      **")
6     print ("\t*****\n")
7
8     fic_nom = input("Donnez le nom du fichier: ")
9     print ("\n")
10    dir_work = verifEspaceTravail(fic_nom)
11    read_spag(fic_nom, dir_work)
12    print (" ")
13    ldk_val_hh,Eng_val_hh = np.loadtxt(os.path.join(dir_work, fic_nom+"_hh.dat"),
14                                     usecols=(3,4),
15                                     unpack=True)
16    ldk_val_lh,Eng_val_lh = np.loadtxt(os.path.join(dir_work, fic_nom+"_lh.dat"),
17                                     usecols=(3,4),
18                                     unpack=True)
19    ldk_con,Eng_con = np.loadtxt(os.path.join(dir_work, fic_nom+"_cond.dat"),
20                                 usecols=(3,4),
21                                 unpack=True)
22
23    nb_pt = 3
24
25    print ("")
26    print("Masse Effective moyenne de l'électron")
27    print(u"-----")
28    pt1, pt2, pt3, pt4, k_e, E_e = Extraction_point(ldk_con,Eng_con,'minimum', nb_pt)
29    m_eff_l_e,coeff_interp_cond = calcul_masse_effective(pt1,pt2)
30    m_eff_l_e,coeff_interp_cond = calcul_masse_effective(pt3,pt4)
31    print (u"La masse effective des électrons dans la direction [100] est %.6f*m_0\n"%m_eff_l_e)
32    print (u"La masse effective moyenne des électrons est %.6f*m_0\n"%(m_eff_l_e+m_eff_l_e)/2.))
33    print(u"-----")
34    pt1, pt2,pt3, pt4, k_hh, E_hh = Extraction_point(ldk_val_hh,Eng_val_hh,'maximum', nb_pt)
35    m_eff_l_hh,coeff_interp_cond = calcul_masse_effective(pt1,pt2)
36    m_eff_l_hh,coeff_interp_cond = calcul_masse_effective(pt3,pt4)
37    print (u"La masse effective des trous lourds dans la direction [100] est %.6f*m_0\n"%m_eff_l_hh)
38    print (u"La masse effective moyenne des trous lourds est %.6f*m_0\n"%(-(m_eff_l_hh+m_eff_l_hh)/2.))
39
40    print("Masse Effective des trous légers")
41    print(u"-----")
42    pt1, pt2, pt3, pt4, k_lh, E_lh = Extraction_point(ldk_val_lh,Eng_val_lh,'maximum', nb_pt)
43    m_eff_l_lh,coeff_interp_cond = calcul_masse_effective(pt1,pt2)
44    m_eff_l_lh,coeff_interp_cond = calcul_masse_effective(pt3,pt4)
45    print (u"La masse effective des trous légers dans la direction [100] est %.6f*m_0\n"%m_eff_l_lh)
46    print (u"La masse effective moyenne des trous légers est %.6f*m_0\n"%(-(m_eff_l_lh+m_eff_l_lh)/2.))
47    if np.abs(k_lh-k_e)<=1.E-6:
48        print(u"Le semiconducteur est de Gap Directe")
49    else:
50        print(u"Le semiconducteur est de Gap Indirecte")
51    print(u"Valeur du Gap: %.6f eV\n"% (np.abs(E_lh - E_e)))
52    data = [m_eff_l_e, m_eff_l_e, m_eff_l_hh, m_eff_l_hh, m_eff_l_lh, m_eff_l_lh, k_lh, k_e, E_lh, E_e]
53    save_data(data, fic_nom, dir_work)
54    print(u"Les résultats sont sauvegardés dans le répertoire %s"% (fic_nom+"_work"))
```

Chapitre III : Résultats

Résultat de l'exécution du script

```
*****
* Calcul des masses effectives à partir du fichier *
* case.spaghetti_ene de Wien2k *
*****

Donnez le nom du fichier: cAlN2

Le fichier [cAlN2.spaghetti_ene] existe
Le répertoire de travail cAlN2_work existe
Nombre de bandes: 11
Nombre de points par bande: 111

Masse Effective moyenne de l'électron
-----
La masse effective des électrons dans la direction [100] est 0.217517*m_0

La masse effective moyenne des électrons est 0.263496*m_0

Masse Effective des trous lourds
-----
La masse effective des trous lourds dans la direction [100] est 0.920321*m_0

La masse effective moyenne des trous lourds est 1.837429*m_0

Masse Effective des trous légers
-----
La masse effective des trous légers dans la direction [100] est 0.920321*m_0

La masse effective moyenne des trous légers est 1.837429*m_0

Le semiconducteur est de Gap Indirecte
Valeur du Gap: 5.124260 eV

Les résultats sont sauvegardés dans le répertoire cAlN2_work
```

III.IV. Référence

- [1] Y. Wang. H. Yin. R. Cao. F. Zahid. Y. Zhu. L. Liu. J. Wang and H. Guo. Phys. Rev. B 87. 235203. (DOI: [10.1103/PhysRevB.87.235203](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.87.235203))
- [2] J. Maassen. M. Harb. V. Michaud-Rioux. Y. Zhu. and H. Guo. Proc. IEEE 101. 518 (2013); Y. Zhu. L. Liu. and H. Guo. arXiv:1305.2515
- [3] <http://www.wien2k.at>

Conclusion et Perspective

Conclusion et Perspective

Dans ce mémoire nous avons essayé de répondre à un besoin pour calculer une propriété physique importante dans le transport électronique dans les semiconducteurs. Nous avons écrit un script sous python en version 3 qui lie directement le fichier de sortie de la structure de bande du code Wien2k. Les résultats obtenus pour les semiconducteurs III-V en phase zincblende sont en bon accord avec la plus récente documentation qui traite les masses effectives.

Les résultats probants de ce travail. nous encouragent à étendre ce script pour englober d'autres symétries cristallines à l'exemple du cubique simple et du wurtzite. et aussi de déduire d'autres paramètres comme les paramètres de Luttinger.

Résumé :

La masse effective est utilisée dans les calculs de transport, tels que le transport d'électrons, la densité d'états mais elle est également utilisée pour calculer la densité de porteurs dans les semi-conducteurs. Cette grandeur physique est liée à la notion d'inertie et à la dynamique Newtonienne des électrons dans les bandes d'énergie.

Dans ce mémoire, nous avons développés un petit code de post-traitement pour le calcul de la masse effective des semi-conducteurs cubiques et hexagonaux à partir de la structure de bande, généré par le code Wien2k. Jusqu'à présent, ce code n'a pas de script ou de programme pour déterminer cette quantité physique importante.

Mots-clés :

Masses effective, semi-conducteur, python, Wien2k

ملخص:

الكتلة الفعالة تستخدم في حسابات النقل، مثل نقل الإلكترونات، كثافة المادة و لكنها تستخدم أيضا لحساب كثافة الناقل في أشباه الناقل في طبقات الطاقة.

ترتبط هذه الكمية الفيزيائية بمفهوم القصور الذاتي و الديناميكيات النيوتونية للإلكترونات في طبقات الطاقة.

في هذه المذكرات سيتعين على المرشح تطوير رمز صغير لمعالجة حساب الكتلة الفعالة لأشباه الناقل المكعبة و السداسية من بنية الطوابق، التي تم إنشاؤها بواسطة برنامج Wien2k.

حتى الآن، لا يحتوي هذا الرمز على برنامج نصي أو برنامج لتحديد هذه الكمية الفيزيائية الهامة.

الكلمات المفتاحية:

الكتلة الفعالة، أشباه الناقل، برنامج python، برنامج Wien2k .

Abstract :

The effective mass is used in transport calculations, such as electron transport, state density but it is also used to calculate the carrier density in semiconductors. This physical quantity is related to the notion of inertia and the Newtonian dynamics of electrons in the energy bands.

In this thesis, the candidate will develop a small post-processing code for the calculation of the effective mass of cubic and hexagonal semiconductors from the band structure, generated by the Wien2k code. To this moment, this code has no script or program to determine this important physical quantity.

Key words :

Effective masses, semiconductor, python, Wien2k