# Réseaux cristallins et réciproques

## Réseau de Bravais : (RB)

$\vec{R} = n_1\vec{a_1} + n_2\vec{a_2} + n_3\vec{a_3}$ + une origineavec $n_i \in \mathbb{Z}$

Où $\vec{a_i}$ est un vecteur primitif, non unique.

Rien ne change d'un point à un autre → points équivalents.

## Maille primitive :

Volume de l'espace qui remplit tout l'espace sans chevauchement après avoir été translaté par tous les vecteurs du RB, non unique.

De volume $V_{MP} = \left|\vec{a_1}.\left(\vec{a_2}\times\vec{a_3}\right)\right|$.

$n\,v = 1$ où $n$ est le # de points par volume, donc il n'ya qu'un point par maille primitive.

## Maille conventionnelle :

Contient plus d'un point par volume.

## Maille de Wigner-Seitz :

Maille primitive dont chaque point est plus proche d'un point particulier du RB que d'un autre.

## Motif :

Donnée qui se reproduit de maille en maille. On compte le # de points dans la maille pour trouver le # de points d'un motif.

## Structure cristalline :

RB + un motif.

## Réseau réciproque : (RR)

$\vec{K} = m_1\vec{b_1} + m_2\vec{b_2} + m_3\vec{b_3}$ avec $m_i \in \mathbb{Z}$

$\vec{K}.\vec{R} = 2\pi N$ car $e^{i\,\vec{K}.\vec{R}} = 1\ \forall\ \vec{R} \in \mathrm{RDB}$ donc $\vec{b_i}.\vec{a_j} = 2\pi\delta_{ij}$

$\vec{b_i}$ un vecteur primitif du RR, non unique, avec

$$\begin{cases} \vec{b_1} = \dfrac{2\pi}{V_{MP}}\vec{a_2}\times\vec{a_3} \\ \vec{b_2} = \dfrac{2\pi}{V_{MP}}\vec{a_3}\times\vec{a_1} \\ \vec{b_3} = \dfrac{2\pi}{V_{MP}}\vec{a_1}\times\vec{a_2} \end{cases}$$

On peut faire $\vec{b_1'} = \alpha\vec{b_1} + \beta\vec{b_2} + \gamma\vec{b_3}$ si $\alpha = 1$ et $\beta, \gamma \in \mathbb{Z}$

RR = RB dans l'espace réciproque. RB= RR du RR.

RR du cc = cfc ; RR du cfc = cc ; RR du hexagonal = hexagonal tourné de 30°

Equivalent de la maille de Wigner-Seitz : 1° zone Brillouin : $V_{ZB} = \dfrac{(2\pi)^3}{V_{MP}}$

On index les plans réticulaires (PR) séparés de d par les indices de Miller : $(h,k,l)$ (axe)

$\vec{K} = h\vec{b_1} + k\vec{b_2} + l\vec{b_3}$ parallèle à $\hat{n}$ qui est perpendiculaire aux plans réticulaires, et le plus petit $\vec{K}$ est de longueur $\dfrac{2\pi}{d}$.

Où $h,k,l$ sont le # d'intervalles entre les différents plans sur la distance du vecteur $\vec{a_i}$. Si le cristal a une symétrie cubique, on définit les indices de Miller sur la base du sc.

Dans le plan direct : $\vec{R} = h\vec{a_1} + k\vec{a_2} + l\vec{a_3}$ noté $[h,k,l]$ (plan)

Famille de PR : $\{h,k,l\}$ où $h,k,l$ sont dans n'importe quel ordre.

Famille de direction : $\langle h,k,l\rangle$

Cubique simple de maille a : (sc)  1 point par cube

1) $\begin{cases} \overrightarrow{a_1} = a\hat{x} \\ \overrightarrow{a_2} = a\hat{y} \\ \overrightarrow{a_3} = a\hat{z} \end{cases}$  2) RR : sc de maille $\frac{2\pi}{a}$ et $\vec{K} = \frac{2\pi}{a}\left(h\hat{x} + k\hat{y} + l\hat{z}\right)$  3) $V_{MP} = a^3$.

$K_1 = \frac{2\pi}{a}$, $K_2 = \frac{2\pi}{a}\sqrt{2}$, $K_3 = \frac{2\pi}{a}\sqrt{3}$, $K_4 = \frac{2\pi}{a}2$, $K_5 = \frac{2\pi}{a}\sqrt{5}$, $K_6 = \frac{2\pi}{a}\sqrt{6}$.

Cubique centré de maille a : (cc)  2 points par cube

1) $\begin{cases} \overrightarrow{a_1} = a\hat{x} \\ \overrightarrow{a_2} = a\hat{y} \\ \overrightarrow{a_3} = \frac{a}{2}\left(\hat{x} + \hat{y} + \hat{z}\right) \end{cases}$ ou $\begin{cases} \overrightarrow{a_1} = \frac{a}{2}\left(-\hat{x} + \hat{y} + \hat{z}\right) \\ \overrightarrow{a_2} = \frac{a}{2}\left(\hat{x} - \hat{y} + \hat{z}\right) \\ \overrightarrow{a_3} = \frac{a}{2}\left(\hat{x} + \hat{y} - \hat{z}\right) \end{cases}$  2) RR : cfc de maille $\frac{4\pi}{a}$  3) $V_{MP} = \frac{a^3}{2}$.

$K_1 = \frac{4\pi}{a}\frac{\sqrt{2}}{2}$, $K_2 = \frac{4\pi}{a}$, $K_3 = \frac{4\pi}{a}\frac{\sqrt{3}}{2}$, $K_4 = \frac{4\pi}{a}\sqrt{2}$.

Cubique face centré de maille a : (cfc)  4 points par cube  cfc = sc + motif du 1)

1) $\begin{cases} \overrightarrow{a_1} = \frac{a}{2}\left(\hat{y} + \hat{z}\right) \\ \overrightarrow{a_2} = \frac{a}{2}\left(\hat{z} + \hat{x}\right) \\ \overrightarrow{a_3} = \frac{a}{2}\left(\hat{x} + \hat{y}\right) \end{cases}$  2) RR : cc de maille $\frac{4\pi}{a}$ et $\vec{K} = \frac{4\pi}{a}\left(h\hat{x} + k\hat{y} + l\hat{z}\right)$  3) $V_{MP} = \frac{a^3}{4}$.

$K_1 = \frac{4\pi}{a}\frac{\sqrt{3}}{2}$, $K_2 = \frac{4\pi}{a}$, $K_3 = \frac{4\pi}{a}\sqrt{2}$, $K_4 = \frac{4\pi}{a}\frac{\sqrt{11}}{2}$.

Hexagonal simple :  2 points par volume

1) $\begin{cases} \overrightarrow{a_1} = a\hat{x} \\ \overrightarrow{a_2} = \frac{a}{2}\hat{x} + \frac{a\sqrt{3}}{2}\hat{y} \\ \overrightarrow{a_3} = \sqrt{\frac{8}{3}}a\hat{z} \end{cases}$  2) RR : hexagonal simple tourné de 30°  3) $V_{MP} = \sqrt{2}a^3$.

Diamant :  8 points par volume

1)  RB : cfc de maille a + motif $\begin{cases} \overrightarrow{d_1} = 0 \\ \overrightarrow{d_2} = \frac{a}{4}\left(\hat{x} + \hat{y} + \hat{z}\right) \end{cases}$

2) RR : cc de maille $\frac{4\pi}{a}$ et $\vec{K} = \frac{4\pi}{a}\left(h\hat{x} + k\hat{y} + l\hat{z}\right)$.

$K_2$ et $K_5$ =0 si monoatomique donc $K_1 = \frac{4\pi}{a}\frac{\sqrt{3}}{2}$, $K_2 = \frac{4\pi}{a}\sqrt{2}$, $K_3 = \frac{4\pi}{a}\frac{\sqrt{11}}{2}$, $K_4 = \frac{4\pi}{a}2$.

Taux de remplissage : $\frac{\text{\# atomes par maille * volume atome}}{\text{volume maille}}$

# Diffraction x

Bragg :

Interférences constructives pour $2d\sin(\theta) = n\lambda$ avec $n \in \mathbb{Z}$

Von Laue :

Interférences constructives pour $\vec{d}.\left(\vec{k}-\vec{k}'\right) = 2\pi m$ avec $m \in \mathbb{Z}$

Si on cherche pour tout le cristal : $\vec{R}.\left(\vec{k}-\vec{k}'\right) = 2\pi m$ avec $\forall \vec{R} \in RB$ et $\vec{k}-\vec{k}' = \vec{K} \in RR$

Si $\lambda_{incident} = \lambda_{sort}$ alors $\left|\vec{k}\right| = \left|\vec{k}'\right|$. $K = 2k\sin(\theta) = 2k\sin(\frac{\phi}{2})$.

Facteur de Structure :

$S\left(\vec{K}\right) = \sum_j e^{i\vec{K}.\vec{d_j}} * \text{amplitude(j)}$. Si monoatomique alors amplitude = 1 et l'intensité $I\alpha\left|S\left(\vec{K}\right)\right|^2$.

Exemples :

$$S\left(\vec{K}\right) = 1 + e^{i\pi(n_1+n_2+n_3)} = \begin{cases} 2 & si\ n_1+n_2+n_3 \text{ pair} \\ 0 & si\ n_1+n_2+n_3 \text{ impair} \\ 1 \pm i & si\ n_1+n_2+n_3 \text{ demi-entier} \end{cases}$$ pour le diamant

$$S\left(\vec{K}\right) = 1 + e^{i\frac{\pi}{2}(n_1+n_2+n_3)} = \begin{cases} 2 & si\ n_1+n_2+n_3 = 4p \\ 1 \pm i & si\ n_1+n_2+n_3 = 4p+2 \\ 0 & si\ n_1+n_2+n_3 = 4p+1 \end{cases}$$ avec $p \in \mathbb{Z}$

$$S\left(\vec{K}\right) = 1 + e^{i\pi(h+k)} + e^{i\pi(k+l)} + e^{i\pi(l+h)} = \begin{cases} 4 & \text{si h,k,l de même parité} \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}$$

Différence de phase entre 2 rayons diffractés en $d_i$ et $d_j$ dans la même direction : $\left(\vec{k}' - \vec{k}\right).\left(\vec{d_j} - \vec{d_i}\right)$.

# Divers

$D_k = \left(\frac{L}{2\pi}\right)^{\dim} * \textit{dégénérescence}$ $N(E_0) = \int d\vec{k}\, D_k \;\; \theta(\mathrm{k_0}\text{-}|\mathrm{k}|)$ $f_{FD}(E) = \frac{1}{e^{\beta(E-\mu)}+1}$

$T \to 0$ ie $\mu \to \varepsilon_\mathrm{F}$ $k = \frac{2\pi}{\lambda}$ Solutions non triviales d'un système : $M\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = 0 \;\Rightarrow\; \det \mathrm{M} = 0$.

$\cos(n\pi+\varepsilon) = (-1)^n\left(1-\frac{\varepsilon^2}{2}+\frac{\varepsilon^4}{4!}\right)$ $\cos(x) = \frac{1}{1+\tan^2(x)}$ $\cos^2(x) = \frac{\cos\left(\frac{x}{2}\right)+1}{2}$

Equation d'un cercle : $(x-x_0)^2+(y-y_0)^2 = R^2$

$\gamma = \left|\int \psi^*(\vec{r})\Delta v \;\psi(\vec{r}-\vec{R})\right|$ le couplage entre les orbites et les plus proches voisins.

Largeur d'un gap : $2|U_K|$. Largeur de bande : $E_{\max}-E_{\min} = 4|\gamma|$.

# Structure de bandes

## Théorème de Bloch-Floquet :

- $\Psi_{n\vec{k}}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}.\vec{r}}u_{n\vec{k}}(\vec{r})$ avec $\forall \vec{R} \in RB$ : $u_{n\vec{k}}(\vec{r}+\vec{R}) = u_{n\vec{k}}(\vec{r})$. Il existe une normalisation $\frac{1}{\sqrt{V}}$.
- $\psi(\vec{r}+\vec{R}) = e^{i\vec{k}.\vec{R}}\psi(\vec{r})$

## Densité d'états :

$D_k = \frac{V}{(2\pi)^3}$ or $V_{ZB} = \frac{(2\pi)^3}{V_{MP}}$ donc $D_k V_{ZB} = \frac{V}{V_{MP}} = N$ le nombre de mailles primitives.

Avec la dégénérescence de spins, $D_k = \frac{2V}{(2\pi)^3}$ donc $D_k V_{ZB} = \frac{2V}{V_{MP}} = 2N$ états par maille. (Du fait qu'il y a autant de vecteurs de Bloch $\vec{k}$ dans la 1° ZB que de mailles primitives dans le réseau direct dans un cristal)

## Structure de bande en énergie :

- $E_n(\vec{k})$ est périodique dans l'espace réciproque.
- Toutes les solutions peuvent être représentées dans la 1° zone de Brillouin par translation.
- Les intervalles peuvent se chevaucher ou êtres séparés d'un gap d'énergies interdites.
- Le nombre d'e$^-$ dans un cristal avec Z le nombre d'e$^-$ par $V_{MP}$ (entier) est $ZN = Z\frac{V}{V_{MP}}$, donc le nombre moyen de bandes occupées est $\frac{ZN}{2N} = \frac{Z}{2}$.

- On remplit les états de plus basses énergie en premier. Les derniers $e^-$ ont une énergie $E_F$ de Fermi et définissent la surface de Fermi (2N états → bande pleine pour un # d'$e^-$ pair).

$$\begin{cases} Z \text{ pair} \rightarrow \begin{cases} \text{il existe un gap entre la dernière bande pleine et la première vide} \rightarrow \text{ISOLANT} \\ \text{il existe un chevauchement entre bandes partiellement remplies jusqu'au niveau de Fermi} \rightarrow \text{CONDUCTEUR} \end{cases} \\ Z \text{ impair} \rightarrow \text{il existe toujours une bande partiellement remplie} \rightarrow \text{CONDUCTEUR} \end{cases}$$

## Wronskien :

$\omega(\phi_1,\phi_2)=\phi_1'(x)\phi_2(x)-\phi_1(x)\phi_2'(x)$ ne dépend pas de x et donc

$$\left.\begin{aligned} \omega\left(\psi_g,\psi_g^*\right)\Big|_{-\frac{a}{2}} &= 2iK\left(1-|r|^2\right) \\ \omega\left(\psi_g,\psi_g^*\right)\Big|_{+\frac{a}{2}} &= 2iK|t|^2 \end{aligned}\right\} 1-|r|^2=|t|^2 \quad \text{et} \quad \left.\begin{aligned} \omega\left(\psi_g,\psi_d^*\right)\Big|_{-\frac{a}{2}} &= 2iKrt^* \\ \omega\left(\psi_g,\psi_d^*\right)\Big|_{+\frac{a}{2}} &= 2iKtr^* \end{aligned}\right\} -rt^*=tr^* \text{ donc}$$

imaginaire pur donc $r=\pm i|r|e^{i\delta}$.

# Potentiel périodique faible

## Equations :

On a $\psi\left(\vec{r}\right)=\sum_{\vec{q}} c_{\vec{q}}\, e^{i\vec{q}.\vec{r}}$, le potentiel $U(r)=\sum_{\vec{K}} U_{\vec{K}} e^{i\vec{K}.\vec{r}}$ et sa transformée de Fourier $U_{\vec{K}}=\frac{1}{v}\int_{maille} dr\; e^{-i\vec{K}.\vec{r}}\; U(r)$. Si U est réel alors $U_{-\vec{K}}=U_{\vec{K}}^*$.

D'où l'équation de Schrödinger : $\left(\frac{\hbar^2}{2m}q^2-\varepsilon\right)c_{\vec{q}}+\sum_{\vec{K}'} U_{\vec{K}'}c_{\vec{q}-\vec{K}'}=0$ et $\begin{cases}\vec{q}=\vec{k}-\vec{K} \\ \vec{K}'=\vec{K}'-\vec{K}\end{cases}$

donnent : $\psi_{\vec{q}}\left(\vec{r}\right)=\sum_{\vec{K}'} c_{\vec{q}-\vec{K}'}e^{i\left(\vec{q}-\vec{K}'\right).\vec{r}}$ et si $\frac{\hbar^2\vec{q}^{\,2}}{2m}\approx\frac{\hbar^2\left(\vec{q}-\vec{K}\right)^2}{2m}$ alors $\psi_{\vec{q}}\approx c_{\vec{q}}e^{i\vec{q}.\vec{r}}+c_{\vec{q}-\vec{K}'}e^{i\left(\vec{q}-\vec{K}'\right).\vec{r}}$ (approximation à 2 ondes). $\left|\psi_{\vec{q}}\right\rangle\approx c_{\vec{q}}\left|\vec{q}\right\rangle+c_{\vec{q}-\vec{K}'}\left|\vec{q}-\vec{K}\right\rangle$

## Résolution :

i) $$\begin{array}{c|cc} & |q\rangle & \left|q-\frac{2\pi}{a}\right\rangle \\ \hline \langle q| & E_{\vec{q}}^{(0)}+\langle u\rangle & U_{\vec{K}} \\ \left\langle q-\frac{2\pi}{a}\right| & U_{-\vec{K}} & E_{\vec{q}-\frac{2\pi}{a}}^{(0)}+\langle u\rangle \end{array} = H$$ avec $E_{\vec{q}}^{(0)}=\frac{\hbar^2q^2}{2m}$, puis $\det\left(H-E_qI\right)=0$.

ii) $\left\langle\vec{q}\left|U\right|\vec{q}-\vec{K}\right\rangle=\frac{1}{V_{MP}}\int e^{-i\vec{q}.\vec{r}}U\left(\vec{r}\right)e^{i\left(\vec{q}-\vec{K}\right).\vec{r}}=\frac{1}{V_{MP}}\int U\left(\vec{r}\right)e^{-i\vec{K}.\vec{r}}=U_{\vec{K}}$ et $\left\langle\vec{q}-\vec{K}\left|U\right|\vec{q}\right\rangle=U_{-\vec{K}}$.

iii) La surface d'iso énergie arrive $\perp$ au plan de Bragg. Une surface de f=cste est $\perp$ à $\nabla$f.

# Liaisons fortes

$\psi_{n\vec{k}}(\vec{r}) = \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k}.\vec{R}} \psi_n(\vec{r}-\vec{R})$ mais en fait il n'est pas nécessaire d'avoir une fonction d'onde exacte de l'état stationnaire, ie $\psi_{n\vec{k}}(\vec{r}) = \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k}.\vec{R}} \phi(\vec{r}-\vec{R})$ avec $\phi(\vec{r}) = \sum_n b_n \psi_n(\vec{r})$ des petites fonctions d'ondes localisées.

# Dynamique des e⁻

Vitesses de phase et de groupe : $v_p = \frac{\omega}{k}$ $\qquad$ $v_g = \frac{\partial \omega}{\partial k}$

Equation du mouvement : $\frac{d\vec{r}}{dt} = \vec{v_{\vec{k}}} = \frac{\vec{P}}{m} = \frac{1}{\hbar} \vec{\nabla}_{\vec{k}} E(\vec{k})$ $\qquad$ $\frac{d(\hbar\vec{k})}{dt} = -e(\vec{F} + \vec{v_{\vec{k}}} \wedge \vec{B})$

Courant total : $2. \sum_{\vec{k} \in \text{bandes occupées}} \text{-e}\vec{v_{\vec{k}}} = -2e \sum_{\vec{k} \in \text{bandes occupées}} \vec{\nabla}_{\vec{k}} E$ Pour un cristal de volume $V \to \infty$ on a $\sum_{\vec{k}} \to \frac{V}{(2\pi)^3} \int d^3k \text{ f}$. Si f=1 donc la bande est pleine, alors $\int_{1°ZB} d^3k \, .\vec{\nabla}_{\vec{k}} E.\text{f} = 0$ donc courant nul. Donc bande pleine = pas de courant, pas de flux d'énergie = isolant.

Equation de Boltzmann : $\frac{\partial f}{\partial t} + \vec{v}(\vec{k}).\vec{\nabla}_{\vec{r}} f + \frac{\vec{F}}{\hbar}.\vec{\nabla}_{\vec{k}} f = \left.\frac{\partial f}{\partial t}\right|_{collisions}$

Masse effective : $\overline{\overline{M}}$ avec $\overline{\overline{M}}_{ij}^{-1} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial}{\partial k_i} \frac{\partial E}{\partial k_j}$ et on a toujours $E \approx E_0 + \frac{\hbar^2}{2}\left(\frac{k_1^2}{m_1} + \frac{k_2^2}{m_2} + \frac{k_3^2}{m_3}\right)$, avec

$$\overline{\overline{M}}^{-1} = \begin{pmatrix} \frac{1}{m_1} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{m2} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{m_3} \end{pmatrix}$$

dans le système d'axes propres. On a $\vec{a} = \overline{\overline{M}}^{-1} \hbar \frac{d\vec{k}}{dt}$.

Temps de faire un orbite :

$T = \oint dt = \oint \frac{dk}{\dot{k}} = \oint \frac{dk}{\frac{1}{\hbar} e\, v_\perp B} = \frac{\hbar^2}{eB} \frac{dA}{dE_\perp}$ avec l'aire élémentaire $dA = \oint_E dk\, \delta k = \oint_E \frac{dk\, dE}{\hbar\, v_\perp}$

$\omega_c = \frac{2\pi}{T} = \frac{eB}{m_c} = 2\pi \upsilon_c$ où $\omega_c =$ pulsation cyclotron et $\upsilon_c$ la fréquence cyclotron.

$m_c = \frac{\hbar^2}{2\pi} \frac{\partial A(E, k_{//})}{\partial E_\perp}$ la masse cyclotron.

Autres :

A température basse les e⁻ qui contribuent sont sur la surface de Fermi.

# Classification des solides

Les e$^-$ qui comptent sont ceux de valence.

Isolant : Cristaux moléculaire (ex : Ar) ; cristaux ioniques (ex : Na Cl) et cristaux covalents = les e$^-$ de valences se reconfigurent pour former des liaisons chimiques entre 2 atomes (ex : Si).

# Energie de cohésion

Potentiel entre 2 atomes distant de $\vec{r}$ : $\phi(\vec{r}) = -\frac{A}{r^6} + \frac{B}{r^{12}} = 4\varepsilon\left[\left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r}\right)^6\right]$ (Cristaux moléculaires).

Energie totale par atome : $u = \frac{U}{N} = \frac{1}{2}\sum_{\substack{\vec{R}\in RB \\ \vec{R}\neq 0}} \phi(\vec{R})$

On peut admettre u proportionnelle au # d'ions. A l'équilibre $\left.\frac{du}{dr}\right|_{r=r_0} = 0$.

Module de compression :

$B = -V\left(\frac{\partial P}{\partial V}\right)_T$ or à T=0 $dU = -PdV$ donc $B = V\frac{\partial^2 U}{\partial V^2} = v\frac{\partial}{\partial v}\frac{\partial u}{\partial v}$

# Semi-conducteur

Ellipsoïde : $1 = \frac{X^2}{a^2} + \frac{Y^2}{b^2} + \frac{Z^2}{c^2}$ de volume $\frac{4\pi}{3}abc$.

Densité d'état : en 3D : $n = \frac{2V}{(2\pi)^3} = \frac{2\sqrt{2}}{3\pi^2\hbar^2}(m_1m_2m_3)^{1/2}(E-E_C)^{3/2}$

Densité par énergie : $g_C(E) = \frac{dn(E)}{dE} = \frac{m_C^{3/2}}{\pi^2\hbar^3}\sqrt{2(E-E_C)}$ et $g_V(E) = \frac{dn(E)}{dE} = \frac{m_V^{3/2}}{\pi^2\hbar^3}\sqrt{2(E_V-E)}$.

Avec $m_C = (m_1m_2m_3)^{1/3}$ et $m_V = \left(m_{hh}^{3/2} + m_{lh}^{3/2}\right)^{2/3}$.

Probabilité d'exciter un e- dans BC : $e^{-\frac{E_g}{k_BT}}$

Nombre d'e- dans BC : $n = \int_{\varepsilon_c}^{\infty} d\varepsilon\ \mathrm{g_c}(\varepsilon)\ \mathrm{f_D} = N_C\ e^{-\frac{\varepsilon_c-\mu}{k_BT}}$ avec la densité effective d'état dans BC :

$$N_C = \int_{\varepsilon_c}^{\infty} d\varepsilon\ \mathrm{g_c}(\varepsilon)\ e^{-\frac{\varepsilon-\varepsilon_c}{k_BT}} = 2\left(\frac{2\pi m_C k_BT}{h^2}\right)^{\frac{3}{2}} = \frac{1}{4}\left(\frac{2m_c k_BT}{\pi\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}} = 2{,}5\left(\frac{m_c}{m}\right)^{\frac{3}{2}}\left(\frac{T}{300K}\right)^{\frac{3}{2}} 10^{19}\ \mathrm{cm^{-3}}$$

$n \ll N_C$ ie $E_c - \mu \gg k_BT$ ie SC non dégénéré et $n \approx N_C$ ie à $T \neq 0$ on a $\mu$ trop proche de Ec ie SC dégénéré.

Nombre de trous dans BV : $p = \int_{-\infty}^{\varepsilon_V} d\varepsilon\ \mathrm{g_V}(\varepsilon)(1-f_D) = N_V\ e^{-\frac{\mu-\varepsilon_V}{k_BT}}$ avec la densité effective de trous dans BV : $N_V = \int_{-\infty}^{\varepsilon_V} d\varepsilon\ \mathrm{g_V}(\varepsilon)\ e^{-\frac{\varepsilon_V-\varepsilon}{k_BT}} = 2\left(\frac{2\pi m_V k_BT}{h^2}\right)^{\frac{3}{2}} = \frac{1}{4}\left(\frac{2m_V k_BT}{\pi\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}} = 2{,}5\left(\frac{m_V}{m}\right)^{\frac{3}{2}}\left(\frac{T}{300K}\right)^{\frac{3}{2}} 10^{19}\ \mathrm{cm^{-3}}$

<u>Loi d'action de masse</u> : $n\,p = \mathrm{N_C}\ \mathrm{N_V}\ e^{-\frac{E_g}{k_BT}} = n_i^2$ avec $E_g = E_C - E_V$ et $n_i$ la densité intrinsèque.

Pour un SC intrinsèque $n = p = n_i$ et avec l'expression de p on trouve $\mu = \frac{E_C + E_V}{2} - \frac{k_BT}{2}\ln\left(\frac{N_C}{N_V}\right)$.

<u>Dopage</u> : <u>Occupation moyenne</u> : $\langle n\rangle = \frac{\sum_j N_j e^{-\beta(E_j - \mu N_j)}}{\sum_j e^{-\beta(E_j - \mu N_j)}}$ avec N=2 impossible à cause de la répulsion Coulombienne. Donc $\langle n\rangle = \frac{0 + 2e^{-\beta(E_D - \mu)}}{1 + 2e^{-\beta(E_D - \mu)}} = \frac{1}{1 + \frac{1}{2}e^{\frac{E_D - \mu}{k_BT}}}$ pour les donneurs et

$\langle n\rangle = 1 - \langle p\rangle = 1 - \frac{1}{1 + \frac{1}{2}e^{\frac{\mu - E_A}{k_BT}}} = \frac{1}{1 + 2e^{\frac{E_A - \mu}{k_BT}}}$ pour les accepteurs.

<u>Donneurs ionisés</u> : $N_D^+ = N_D - N_D^0 = N_D\left(1 - \langle n\rangle\right) = \frac{N_D}{1 + 2e^{-\frac{E_D - \mu}{k_BT}}}$ avec $N_D$ la concentration en impureté de type donneur. $N_D^+ \to N_D\ si\ E_D - \mu >> K_BT$ et $N_D^+ \to \frac{N_D}{2}e^{-\beta(\mu - E_D)}\ si\ \mu - E_D >> K_BT$.

<u>Accepteurs ionisés</u> : $N_A^- = N_A\langle n\rangle = \frac{N_A}{1 + 2e^{\frac{E_A - \mu}{k_BT}}}$ avec $N_A$ la concentration en impureté de type accepteurs. <u>Neutralité</u> : $n^- = n + N_A^- = p + N_D^+ = n^+$

<u>Relation d'Einstein</u> : $\overline{\overline{D}} = \frac{k_BT}{e}\overline{\overline{\mu}}$ avec $\mu$ la mobilité et $\mu_e = \frac{e\tau}{m_e}$.

<u>Courants</u> : $\overrightarrow{j_n}\left(\vec{r}\right) = -en\left(\vec{r}\right)\left\langle\vec{v}\right\rangle = eD_n\vec{\nabla}_r n + e\mu_n n\vec{F}$ et $\overrightarrow{j_p}\left(\vec{r}\right) = ep\left(\vec{r}\right)\left\langle\vec{v}\right\rangle = -eD_p\vec{\nabla}_r p + e\mu_p p\vec{F}$

avec $\sigma_n = ne\mu_n$ la conductivité des e$^-$. Pour les métaux $\sigma = \frac{n_e e^2\tau}{m_e}$. $\sigma_{total} = \frac{\overrightarrow{j_n} + \overrightarrow{j_p}}{\vec{F}} = e\left(n\mu_n + p\mu_p\right)$.

<u>Autres</u> :

On ne peut pas mettre 2 e$^-$ dans un même niveau, même si les spins sont up et down à cause de la répulsion électrostatique.

Pour les donneurs : $-\frac{\hbar^2}{2m^*}\Delta\psi + V_{imp}\ \psi = \left(E - E_C\right)\psi$ avec $V_{imp} = -\frac{q^2}{4\pi\varepsilon_0\varepsilon_r r}$ donc $\left(E - E_C\right) < 0$ <u>ie</u> $E < E_C$.

Pour les accepteurs : $\frac{\hbar^2}{2m^*}\Delta\psi + V_{imp}\ \psi = \left(E - E_v\right)\psi$ donc $-\frac{\hbar^2}{2m^*}\Delta\psi - V_{imp}\ \psi = \left(E_v - E\right)\psi$ avec $V_{imp} = \frac{q^2}{4\pi\varepsilon_0\varepsilon_r r}$ donc $\left(E_v - E\right) < 0$ donc $E_v < E$.

$E_I = \frac{q^2}{8\pi\varepsilon_0 a_0}$ ; $a_0 = \frac{\hbar^2 4\pi\varepsilon_0}{mq^2}$ donc avec $\varepsilon_0 = \varepsilon_0\varepsilon_r$ et $m = m^*$ on a $E_I^D = E_C - E_D = \frac{q^4 m^*}{32\pi^2\varepsilon_0^2\varepsilon_r^2\hbar^2}$.