

SÉMINAIRE L. DE BROGLIE. THÉORIES PHYSIQUES

P. AIGRAIN

**Résumé application de la mécanique ondulatoire aux solides
calculs récents relatifs au germanium et silicium**

Séminaire L. de Broglie. Théories physiques, tome 25 (1955-1956), exp. n° 7, p. 1-2

http://www.numdam.org/item?id=SLDB_1955-1956__25__A5_0

© Séminaire L. de Broglie. Théories physiques
(Secrétariat mathématique, Paris), 1955-1956, tous droits réservés.

L'accès aux archives de la collection « Séminaire L. de Broglie. Théories physiques » implique l'accord avec les conditions générales d'utilisation (<http://www.numdam.org/conditions>). Toute utilisation commerciale ou impression systématique est constitutive d'une infraction pénale. Toute copie ou impression de ce fichier doit contenir la présente mention de copyright.

NUMDAM

Article numérisé dans le cadre du programme
Numérisation de documents anciens mathématiques
<http://www.numdam.org/>

RESUME

APPLICATION DE LA MÉCANIQUE ONDULATOIRE AUX SOLIDES

Calculs récents relatifs au Germanium et silicium

par P. AIGRAIN.

On rappelle tout d'abord que le problème des propriétés d'un solide peut se ramener, par la méthode de Hartree-Fock, à celui du mouvement d'un électron dans un potentiel moyen périodique.

L'Hamiltonien commute avec les opérateurs "translation du réseau", d'où l'on tire que les fonctions d'ondes sont de la forme :

$$\psi_{nk} = e^{ik \cdot \vec{r}} v_k(r)$$

où $v_k(r)$ est triplement périodique. On a d'ailleurs :

$$H_F \psi_{nk} = E_n(k) \psi_{nk}$$

ce qui définit les courbes $E_n(k)$ donnant l'énergie en fonction du vecteur d'onde k .

Comme il y a plusieurs branches (repérées par l'indice n) le spectre d'énergie se décompose finalement en bandes permises et bandes interdites.

Dans le cas des semi-conducteurs (par exemple Ge et Si) la simple connaissance des fonctions $E_n(k)$ pour les branches proches du niveau de Fermi permet de comprendre la plupart des propriétés importantes.

Herman a calculé ces courbes par la méthode dite des ondes planes orthogonalisées (OPW) due à Herring. On approxime ψ_{nk} par une somme d'ondes planes $e^{ik' \cdot r}$, en nombre élevé, mais fini (92).

$$\psi_{nk} = \sum_{k'} a_{kk'} e^{ik' \cdot \vec{r}}$$

Les ψ_{nk} relatifs aux bandes intéressantes doivent être orthogonales aux $\psi_{n'k}$ des bandes inférieures. On peut approximer celles-ci par :

$$\psi_{n'k} = \sum e^{ik \cdot R_j} w_{n'}(\vec{r} - \vec{R}_j)$$

où $W_n(\vec{r} - \vec{R}_j)$ est la fonction d'ondes relatives à l'atome en position $\vec{R}_j$ considéré comme isolé.

On commence donc par réaliser des combinaisons linéaires des $e^{i\vec{k}' \cdot \vec{r}}$ qui sont orthogonales aux $\psi_{n'k}$.

$$\begin{aligned}\psi_{nk} &= \sum b_{kk'} \varphi_{k'} \\ \varphi_{k'} &= \sum c_{k'k''} e^{i\vec{k}'' \cdot \vec{r}} \\ \int \varphi_k^+ \psi_{n'k} d\tau &= 0\end{aligned}$$

L'équation séculaire qui donne les $b_{kk'}$, et E_{nk} , peut se factoriser si l'on tient compte de la symétrie du cristal en équations de degré faible (3 ou 4).

Les résultats de ces calculs révèlent une dégénérescence complexe des limites de bande (minima et maxima de $E_n(k)$) qui est en bon accord avec l'expérience.
