

Résumé de cours M1 Microélectronique

Module : Physique des composants semi-conducteurs 1

Prof. Abdelhamid BENHAYA

Directeur du Laboratoire d'Electronique Avancée
Responsable Salle Blanche

Département d'Electronique
Faculté de Technologie
Université Batna 2

Lien cours sur youtube

<https://youtu.be/sOrKMNNNh0I>

Domaines d'intérêt:

Technologie des semi-conducteurs
(Matériaux et dispositifs photovoltaïques)

e-mail: a.benhaya@univ-batna2.dz
benhaya_abdelhamid@yahoo.fr

Tel: +213 (0)7 73 87 37 84



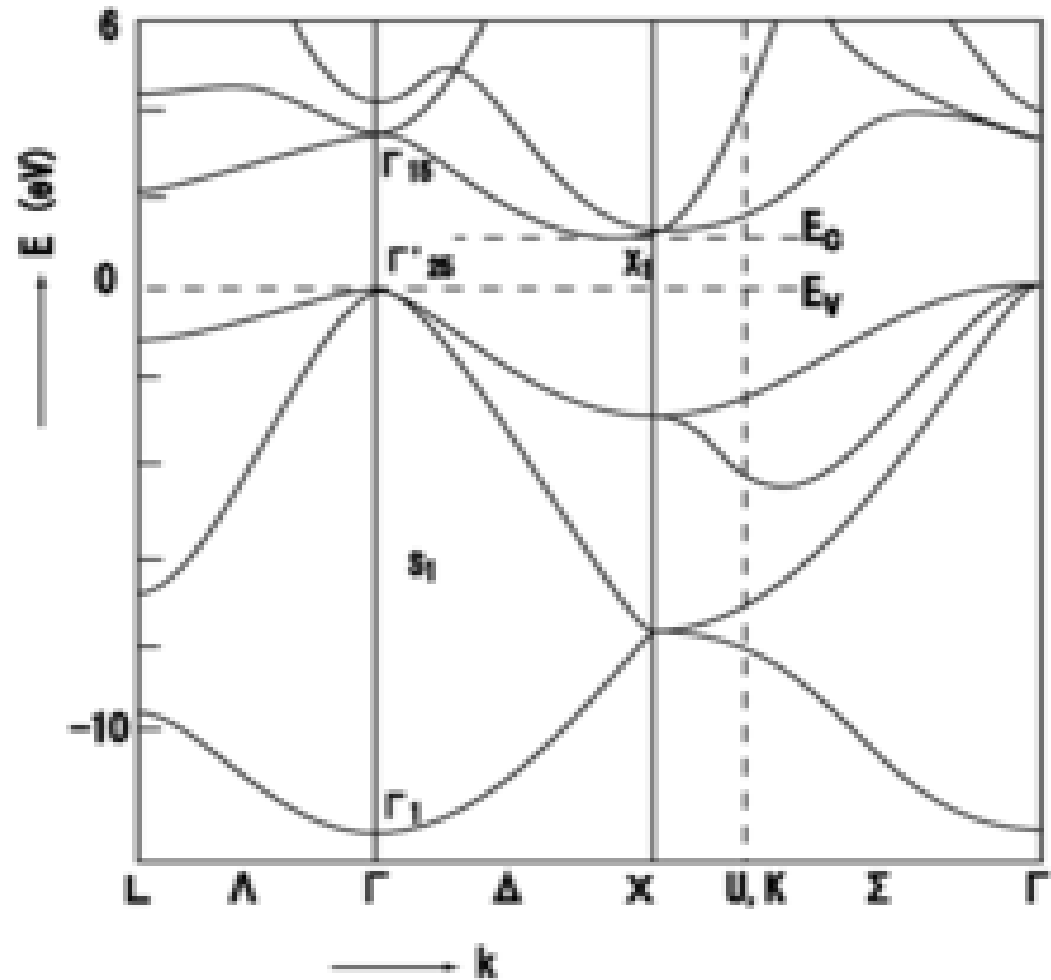
BIBLIOGRAPHIE

Langue Anglaise

1. Marius Grundmann, The Physics of Semiconductors, Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2006.
2. S. M. Sze, Physics of Semiconductor Devices, JOHN WILEY & SONS, 2007.
3. <http://ecee.colorado.edu/~bart/book/book/contents.htm>

Langue Française

1. A. Vapaille et R. Castagné, Dispositifs et circuits semi-conducteurs, Physique et technologie, dunod, 1987.
2. CHRISTIAN ET HELENE NGÖ, Introduction à la physique des semi-conducteurs, Dunod, 1998.
3. H. MATHIEU, physique des semi-conducteurs et des composants électroniques, Dunod, 2001.
4. <https://www.polytech-lille.fr/cours-atome-circuit-integre/>
5. <http://koeniguer.perso.cegetel.net/ips/ips.html>



**Théorie des bandes d'énergie
d'un semi-conducteur**

PLAN DE L'EXPOSÉ

Partie I: Notions de base

Notions de base

Caractère discontinu de la matière

Comportement des atomes et des molécules

Dualité onde-corpuscule

Relation de de Broglie

Etude des systèmes dans le cadre de la mécanique quantique

Equation de Schrödinger pour les systèmes stationnaires

Etats liés et états libres (non liés)

L'atome et la matière

Exemple: Atome d'Hydrogène (H) et les différents modèles

Partie II: Introduction au calcul des bandes d'énergie

Hamiltonien du cristal parfait

Equation de Schrödinger pour un cristal

A) Approximations de base

B) Méthodes de résolution

Bandes essentielles

Nature du gap et effet de la température et de la composition

Première zone de Brillouin et la symétrie

Théorème de Bloch

Niveau de Fermi

Notion de masse effective

Partie III: Aperçu sur le rayonnement





**CHAPITRE 2.
THÉORIE DES BANDES D'ÉNERGIE
D'UN SEMI-CONDUCTEUR**

Partie 1: Notions de base

NOTIONS DE BASE

Caractère discontinu de la matière

La matière est constituée d'une entité élémentaire qui est l'atome.

- Dans le cas où l'entité de base est l'atome, on parle d'une structure atomique ou de corps simples

Exemple: Cu , Ag,....

- Dans le cas où l'entité de base est un groupe d'atomes (au moins deux), on parle d'une structure moléculaire ou corps composés

Exemple: H₂, NaCl, CH₄, CH₃CH₂OH,....



NOTIONS DE BASE

Comportement des atomes et des molécules

- Les **atomes** et les **molécules**, comme toute autre particule à **l'échelle microscopique**, obéissent à des **lois physiques différentes** de celles qu'on applique aux corps à **l'échelle macroscopique**.
- Les **atomes** et les **molécules**, ou toute autre particule microscopique, obéissent à **une théorie plus générale** appelée "**la mécanique quantique**".

Remarque

la **mécanique classique** est la **limite** vers laquelle tend **la mécanique quantique** à l'échelle macroscopique; cela veut dire que la **mécanique quantique** englobe la **mécanique classique**.



NOTIONS DE BASE

Dualité onde-corpuscule

- Lors de l'interaction avec la matière, les ondes (ondes électromagnétiques par exemple) peuvent se comporter comme des corpuscules (effet photoélectrique).
- De même, des corpuscules (électrons par exemple) peuvent se comporter comme des ondes (diffraction d'un faisceau d'électron sur un cristal).
- Ces deux aspects complémentaires de corpuscules et d'ondes, qui d'ailleurs ne peuvent pas avoir lieu en même temps, sont connus sous le nom de “**dualité onde-corpuscule**”.
- **Conclusion**
En mécanique quantique, la particule ne peut être ni une particule ni une onde, mais elle peut avoir l'un ou l'autre de ces deux comportements et ce selon les conditions de la situation dans laquelle elle se trouve.



NOTIONS DE BASE

Relation de de Broglie

A la lumière de la **dualité onde-corpuscule**, on associe à **chaque particule** de quantité de mouvement **p**, une longueur d'onde donnée par la **relation de de Broglie**:

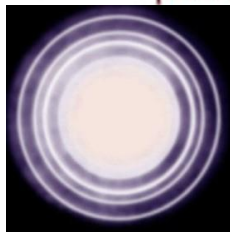
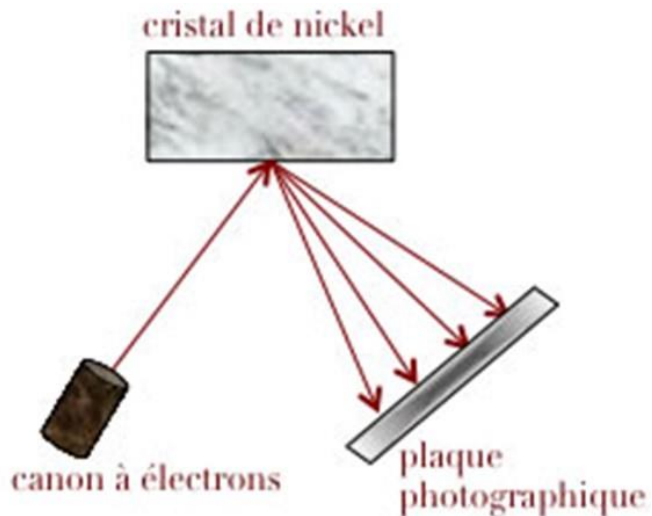
$$\lambda = \frac{h}{p}$$

h: Constante de Planck, $h=6.62 \cdot 10^{-34}$ J.s

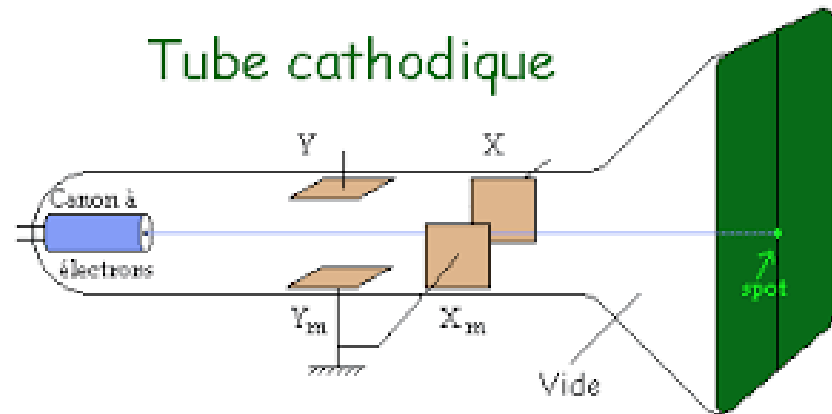


NOTIONS DE BASE

Expérience de Davisson et Germer



Electrons montrent
un comportement
Ondulatoire



Electrons montrent
un comportement
Corpusculaire

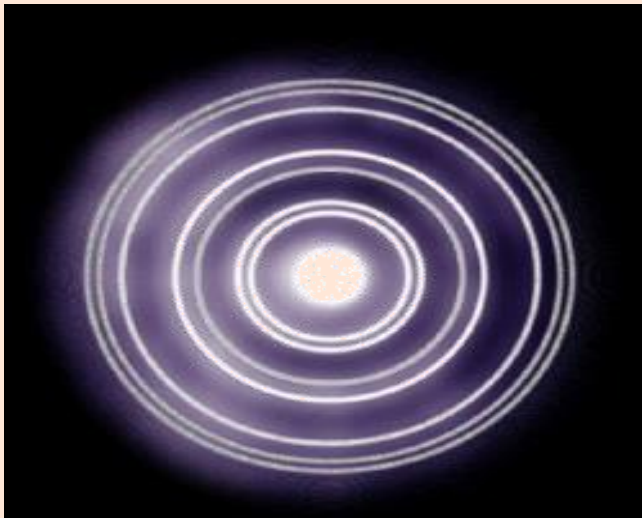


NOTIONS DE BASE

VALIDATION L'HYPOTHÈSE DE LOUIS DE BROGLIE

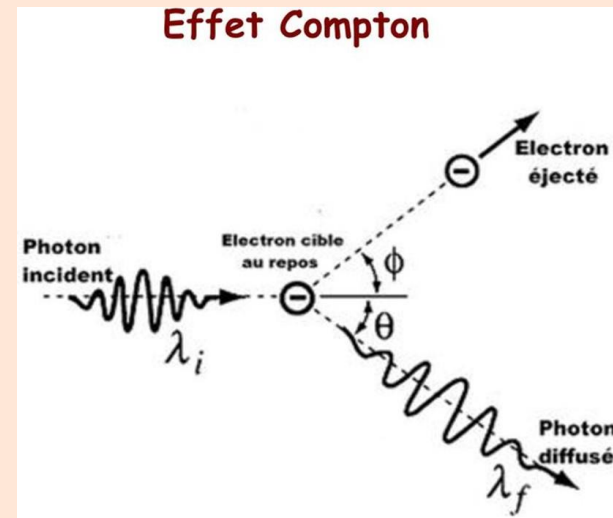
Figure de **diffraction** obtenues sur un **crystal d'argent** (poudre) avec des **RX** de longueur d'onde **0,71 Å**.

Photons ont un comportement ondulatoire



Des photons expulsent des électrons d'un matériau

Photons ont un comportement corpusculaire



NOTIONS DE BASE

Eude des systèmes

- Pour décrire l'évolution des systèmes en mécanique classique, on applique les lois de Newton et les équations de Maxwell.
 - Pour décrire un système classique, il suffit de connaître ses variables dynamiques (les composantes du vecteur position et les composantes du vecteur vitesse de chaque sous système).
 - Dans le cas où le système contient des charges électriques, il faut connaître aussi les composantes du vecteur champ électrique et du vecteur champ magnétique en tout point de l'espace.
- En mécanique quantique, on applique l'équation de Schrödinger pour déterminer la fonction d'onde qui remplace les notions de position et de vitesse utilisées en mécanique classique.



NOTIONS DE BASE

Laquelle des deux mécaniques peut-on appliquer?

- Les lois de la **mécanique classique** nous permettent de décrire correctement **les phénomènes physiques à l'échelle macroscopique** (chute des corps, projectiles, mouvement des planètes, etc.).
- Cependant, **ces mêmes lois restent incapables de décrire et d'interpréter correctement certains phénomènes physiques** (rayonnement du corps noir, spectre de raies, etc.); il faut, dans ce cas, **utiliser la mécanique quantique**.



NOTIONS DE BASE

Laquelle des deux mécaniques peut-on appliquer **(suite)**?

La **longueur d'onde** associée à une particule s'avère un **paramètre important** pour savoir si cette particule se comporte **comme une onde** ou **comme une particule**.

- Le **comportement ondulatoire** des **particules** se manifeste lorsque **la longueur d'onde** associée à ces particules **est comparable** aux **dimensions caractéristiques du système étudié**.
- Dans le cas où **la longueur d'onde** associée à la particule est **très faible** par rapport **aux dimensions caractéristiques du système étudié**, c'est **le comportement classique** qui l'emporte.
- Dans le cas où nous considérons **une onde** (une onde électromagnétique par exemple), nous dirons alors que les **phénomènes quantiques** se manifestent quand **l'onde présente un comportement corpusculaire** (effet Compton, diffusion Raman, effet photoélectrique).



NOTIONS DE BASE

Laquelle des deux mécaniques peut-on appliquer (suite)?

*Il existe **une autre méthode pratique** pour savoir si on est en présence d'un comportement **classique** ou **quantique**.*

Il s'agit d'évaluer :

***le produit** d'un **travail (énergie) par un temps** ou le produit d'une **quantité de mouvement par une longueur** qui ont la même dimension que la constante de Planck.*

$$\Delta E \cdot \Delta t \geq \hbar/2 \quad \Delta p \cdot \Delta x \geq \hbar/2$$

*Dans le cas où le résultat correspond à **quelques multiples de \hbar** , on a alors un **comportement quantique** et il faut **utiliser la mécanique quantique**.*

*Dans le cas contraire i.e. le résultat correspond à **un très grand nombre de fois \hbar** , on a alors un **comportement plutôt classique** et l'application des lois de **la mécanique classique suffit** pour décrire correctement le système étudié.*



NOTIONS DE MASSE

Etude des systèmes dans le cadre de la mécanique quantique

Pour **décrire correctement** un **système** qui a un **comportement quantique**, il faut lui appliquer **les lois** de la **mécanique quantique** qui est fondée sur 4 postulats

Postulat 1: *L'état d'un système physique est complètement défini à tout instant t par la connaissance de son vecteur d'état:*

$$|\psi(t)\rangle$$

Remarque:

Par analogie à la mécanique classique, on voit que la **notion** de **vecteur position** et de **vecteur vitesse** est remplacée par un **vecteur d'état** qui est un objet mathématique défini dans l'espace de Hilbert et contenant toute l'information sur le système.



NOTIONS DE BASE

Postulat 2: *On associe à toute grandeur physique G un opérateur hermétique appelé observable. Le résultat d'une mesure de G ne peut conduire qu'à une valeur propre de l'opérateur .*

Immédiatement après la mesure, le vecteur d'état du système est modifié. Il se réduit à sa projection sur le sous-espace propre associé à la valeur propre mesurée.

Remarque

*On constate ici, à la différence de la mécanique classique où l'on manipule directement les grandeurs physiques, que ces dernières sont remplacées par des opérateurs (**opérations mathématiques**) qui agissent sur le vecteur d'état pour avoir la valeur de la grandeur concernée.*



NOTIONS DE BASE

Postulat 3: *L'évolution au cours du temps du vecteur d'état est gouvernée par l'équation de Schrödinger dépendant du temps:*

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = \hat{H}(t) |\psi(t)\rangle$$

où H est l'opérateur hamiltonien associé au système étudié.

Remarque

Si l'on compare avec la mécanique classique, nous avons ici quelque chose qui ressemble à la deuxième loi de Newton ou aux équations de Lagrange ou celles de Hamilton,



NOTIONS DE BASE

Postulat 4: Les opérateurs sont obtenus par la substitution:

$$\hat{x} = x \qquad \hat{y} = y \qquad \hat{z} = z$$

et les opérateurs $\hat{p}_x, \hat{p}_y, \hat{p}_z$ par:

- $\hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}, \qquad \hat{p}_y = -i\hbar \frac{\partial}{\partial y}, \qquad \hat{p}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial z}$

Remarque :

L'opérateur associé à une fonction plus compliquée des coordonnées et des quantités de mouvement est obtenu en faisant les substitutions précédentes dans l'expression convenablement symétrisée de la fonction.



NOTIONS DE BASE

Grandeur physique	Opérateur associé
Quantité de mouvement P	$\begin{pmatrix} \hbar \frac{\partial}{\partial x} \\ \hbar \frac{\partial}{\partial y} \\ \hbar \frac{\partial}{\partial z} \end{pmatrix}$
Energie Cinétique E_C	$\frac{P_{op}^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right)$
Energie E (Hamiltonien H) (Système stationnaire)	$\frac{P_{op}^2}{2m} + V = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + V$
Energie E (Hamiltonien H) (Système dépendant du temps)	$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$
Moment cinétique (Composante Z du moment angulaire)	$-i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi}$



PHYSIQUE DES SEMI-CONDUCTEURS

NOTIONS DE BASE

Equation de Schrödinger pour les systèmes stationnaires

L'énergie totale d'un système joue un rôle important, notamment dans le cas des systèmes conservatifs où elle devient une constante du mouvement. On dit, dans une telle situation, que le système est dans un état stationnaire.

Dans ce cas, l'énergie E est une valeur propre du Hamiltonien et l'équation de Schrödinger s'écrit:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi(\mathbf{r}) + V\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r})$$



NOTIONS DE BASE

Etats liés et états libres (non liés)

Lorsqu'une **particule est astreinte** à se déplacer dans une **région finie de l'espace**, on dit qu'elle est dans un **état lié**.

Dans une telle situation, **l'énergie est quantifiée** (elle dépend d'un ou plusieurs nombres quantiques) et **le spectre en énergie est discret** (constitué de valeurs séparées par des domaines appelés bandes interdites).

Dans le cas où **la particule est libre** de se déplacer dans **tout l'espace**, on dit que la particule se trouve dans un **état libre** ou non lié ou encore continu.

Dans ce cas, l'énergie n'est pas quantifiée et **le spectre est continu**.

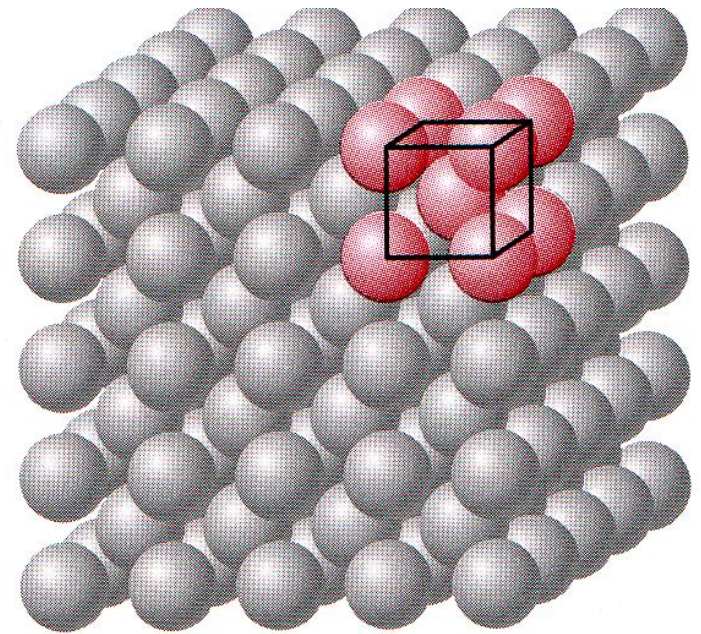


PHYSIQUE DES SEMI-CONDUCTEURS

NOTIONS DE BASE

L'atome et la matière

L'unité structurale de base de la matière est **l'atome** défini comme étant **la plus petite quantité d'un corps simple ou élément** susceptible d'entrer en **combinaison chimique**.

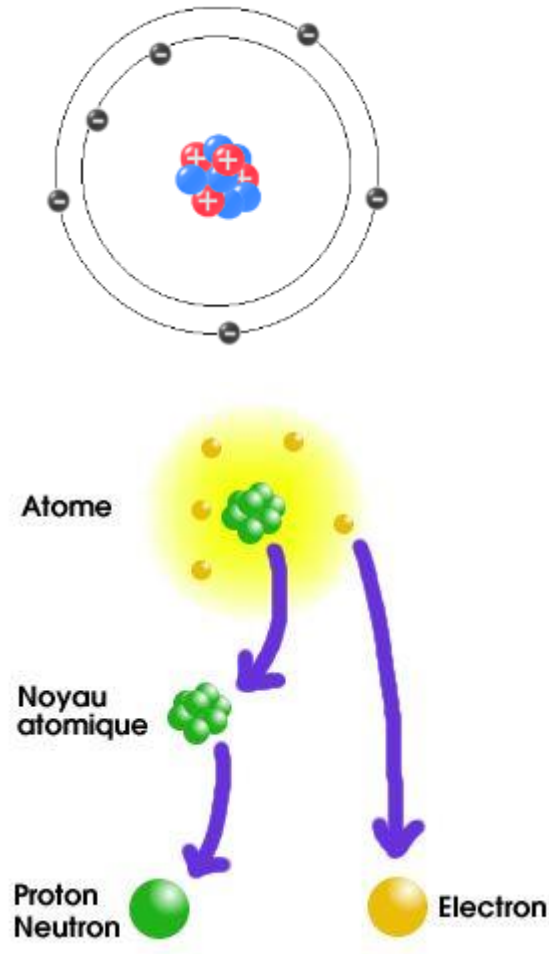


NOTIONS DE BASE

Structure de l'atome

Un **atome**, caractérisé par un **numéro Z** dans la **classification périodique**, est constitué par:

- Un **noyau de charge positive Ze** comprenant **Z protons**, chacun, de charge **e** et un **certain nombre de neutrons**.
- Un **nuage électronique** formé par **Z électrons**, chacun, de charge **$-e$** répartis dans des **orbitales** (volume dans l'espace).



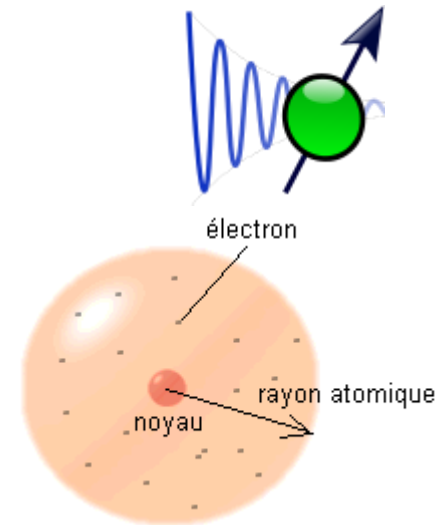
NOTIONS DE BASE

Répartition des électrons

- La mécanique quantique permet de déterminer la répartition des électrons dans le nuage électronique par la résolution de l'équation de Schrödinger indépendante du temps:

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

- C'est l'équation de l'onde associée à un électron dans un état stationnaire; elle s'applique aussi bien à la propagation des électrons dans l'espace qu'à celle des électrons dans un atome.



$$-\frac{\hbar^2}{8\pi^2m}\left(\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial z^2}\right) - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}\psi = E\psi$$

Equation de Schrödinger d'un électron sous l'influence du potentiel d'un noyau de numéro atomique Z (Z protons)



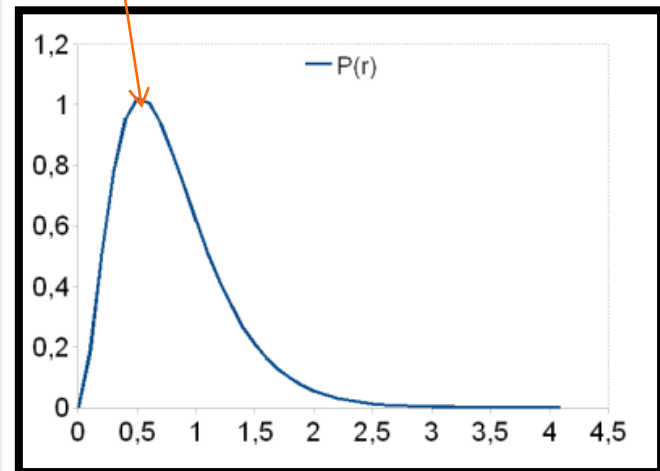
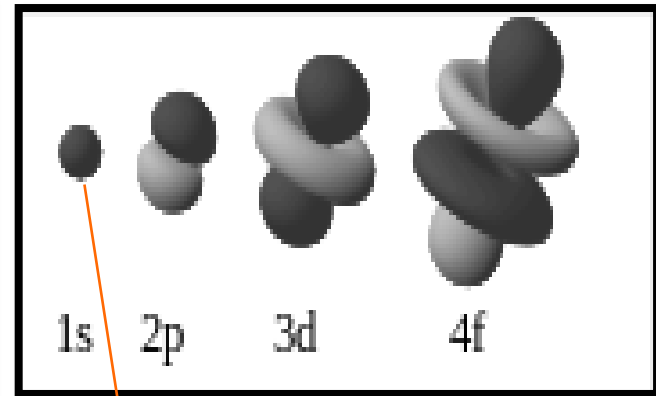
NOTIONS DE BASE

Orbitales atomique et moléculaire

La **fonction d'onde Ψ** (solution de l'équation de Schrödinger) des coordonnées d'un électron est appelée **orbitale atomique** dans le cas d'un **électron lié à un atome** et **orbitale moléculaire** si l'électron est lié à une **molécule**.

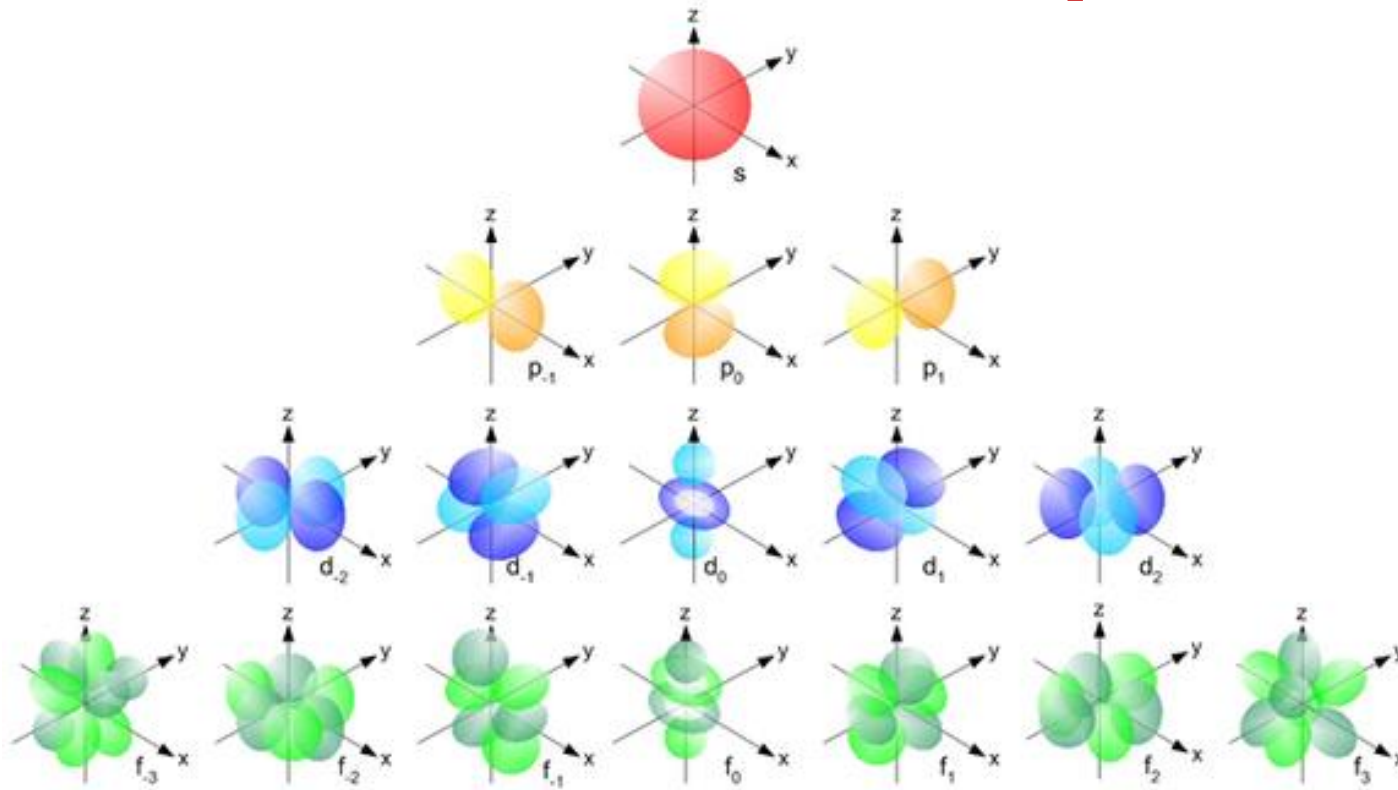
Orbitale atomique?

Région de l'espace où l'électron a une grande probabilité de s'y trouver



NOTIONS DE BASE

Formes des orbitales atomiques



NOTIONS DE BASE

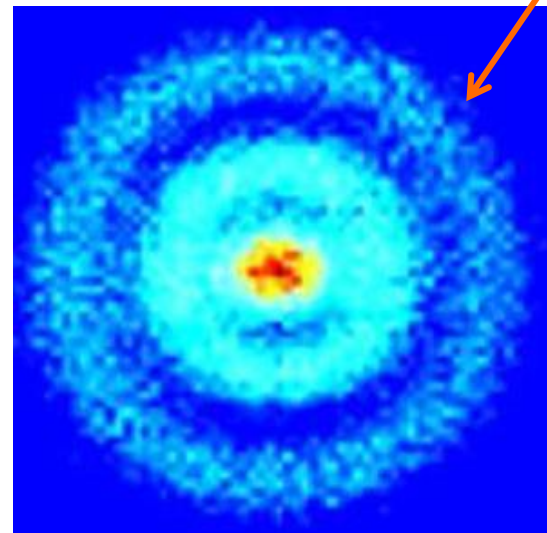
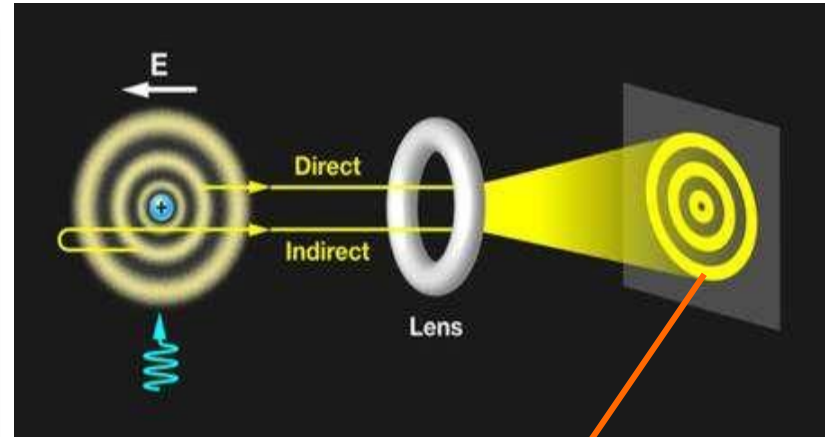
Principe de la microscopie de photoionisation

Un atome d'hydrogène plongé dans un champ électrique E possède des orbitales atomiques similaires à celles des atomes de Rydberg quand on l'excite avec un laser (flèche bleue).

En ionisant les électrons de paquets d'atomes d'hydrogène dans ces orbitales, on produit un flux électronique (symbolisé par les flèches jaunes). Ce flux peut être modifié par une lentille pour former une image agrandie.

L'image donne directement une représentation des densités de probabilité de présence des électrons dans les orbitales atomiques, avant ionisation.

Les oscillations dans les densités de probabilité de présence des électrons dans l'atome H obtenues par microscopie de photoionisation















































NOTIONS DE BASE

Les nombres quantiques

- **n**: Nombre quantique principal correspondant aux valeurs possibles de la distance au noyau. Le nombre n définit la couche électronique. Les couches successives en partant du noyau sont notés K, L, M, N, O, pour les valeurs respectives $n=1, 2, 3, 4$, etc.
- **l**: Nombre quantique azimutal correspondant aux valeurs possibles du moment angulaire L de l'électron par rapport au noyau. Le nombre l prend les valeurs $0, 1, 2, \dots, n-1$. Ce nombre définit la sous-couche. Les différentes sous-couches sont notés s, p, d, f, ... pour des valeurs respectives $l=0, 1, 2, 3, 4, \dots$; autrement dit, l détermine la forme de l'orbitale.
- **m**: nombre quantique magnétique correspondant aux valeurs possibles du moment magnétique m de l'électron dans un champ magnétique. Le nombre m ne peut prendre que les valeurs données par la relation $-l \leq m \leq l$.
- **s**: Outre les nombres quantiques n, l et m , chaque électron dans une orbitale, est caractérisé par son nombre quantique de spin s correspondant au moment cinétique propre S de l'électron ou spin. Ce nombre ne peut prendre que la valeur $s=1/2$ (c'est sa projection m_s qui prend les deux valeurs $\pm 1/2$).

NOTIONS DE BASE

Remplissage des différentes couches

	$s (l=0)$	$p (l=1)$	$d (l=2)$	$f (l=3)$
$n=1$	 $m=0$			
$n=2$	 $m=0$	 $m=-1$  $m=0$  $m=1$		
$n=3$	 $m=0$	 $m=-1$  $m=0$  $m=1$	 $m=-2$  $m=-1$  $m=0$  $m=1$  $m=2$	
$n=4$	 $m=0$	 $m=-1$  $m=0$  $m=1$	 $m=-2$  $m=-1$  $m=0$  $m=1$  $m=2$	 $m=-3$  $m=-2$  $m=-1$  $m=0$  $m=1$  $m=2$  $m=3$
$n=5$	 $m=0$	 $m=-1$  $m=0$  $m=1$	 $m=-2$  $m=-1$  $m=0$  $m=1$  $m=2$	
$n=6$	 $m=0$	 $m=-1$  $m=0$  $m=1$		
$n=7$	 $m=0$			



NOTIONS DE BASE

Couches électroniques

Elles sont **symbolisées** par des **lettres**, successivement, **en partant de la plus proche du noyau** :

- la 1^{ère} couche est la couche **K**, capacité : **2** ;
n = 1 ;
- La 2^{ème} couche est la couche **L**, capacité : **8** ;
n = 2 ;
- la 3^{ème} couche est la couche **M**, capacité : **18** ; **n = 3** ;
- La 4^{ème} couche est la couche **N**, capacité : **32** ; **n = 4** ;
- La 5^{ème} couche est la couche **O**, capacité : **50** ; **n = 5** ;
- La 6^{ème} couche est la couche **P**, capacité : **72** ; **n = 6** ;
- La 7^{ème} couche est la couche **Q**, capacité : **98** ; **n = 7**.

○ Exemples :

- **Oxygène** (Z = 8) : $(K)^2(L)^6$
- **Aluminium** (Z = 13) : $(K)^2(L)^8(M)^3$
- **Argon** (Z = 18) : $(K)^2(L)^8(M)^8$
- **Potassium** (Z = 19) :
 $(K)^2(L)^8(M)^8(N)^1$
- **Calcium** (Z = 20) : $(K)^2(L)^8(M)^8(N)^2$
- **Scandium** (Z = 21) : $(K)^2(L)^8(M)^9(N)^2$
- **Titane** (Z = 22) : $(K)^2(L)^8(M)^{10}(N)^2$
- **Cobalt** (Z = 27) : $(K)^2(L)^8(M)^{15}(N)^2$
- **Cuivre** (Z = 29) : $(K)^2(L)^8(M)^{18}(N)^1$
- **Zinc** (Z = 30) : $(K)^2(L)^8(M)^{18}(N)^2$
- **Gallium** (Z = 31) : $(K)^2(L)^8(M)^{18}(N)^3$

NOTIONS DE BASE

Notions de cases quantiques

Les **cases quantiques** sont les places dans les orbitales atomiques qui peuvent être occupées par un électron, ou par une paire d'électrons de spins complémentaires.

		l =	0	1	2	3
		m =	0	-1 0 +1	-2 -1 0 +1 +2	-3 -2 -1 0 +1 +2 +3
K	n = 1		□			
L	n = 2		□	□ □ □		
M	n = 3		□	□ □ □	□ □ □ □ □	
N	n = 4		□	□ □ □	□ □ □ □ □ □ □	□ □ □ □ □ □ □ □ □
			s	p	d	f



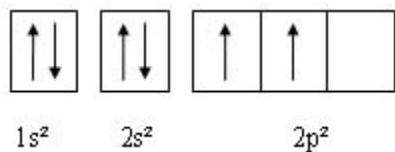
NOTIONS DE BASE

Structure électronique des atomes

La distribution des électrons autour des noyaux n'est pas aléatoire, elle obéit aux principes et règles suivants:

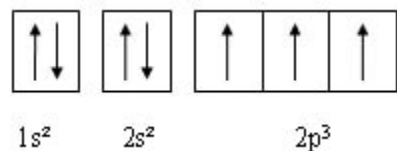
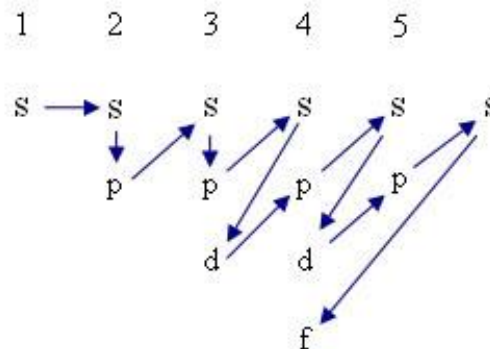
- **1. Le principe d'exclusion de PAULI:** Quand un atome contient plusieurs électrons, leur comportement obéit au principe de Pauli dont l'énoncé est: **Deux électrons d'un atome ne peuvent pas avoir deux fonction d'onde identiques** (i.e. deux électrons ne peuvent avoir les mêmes nombres quantiques n , m , l , m_s).
- **2. Le principe de stabilité:** Les électrons **occupent les niveaux les plus bas** dans la limite des places disponibles.
- **3. Règle de HUND**
 - Quand des électrons se placent **dans une sous-couche multiple, ils occupent le maximum d'orbitales.**
 - Dans une **même sous-couche**, des **électrons célibataires** ont **des spins parallèles** (mêmes valeurs de m_s).
- **4. Règle de KLECHKOWSKY:** À quelques exceptions près, **le remplissage** des couches électroniques **se fait dans l'ordre $(n+l)$ croissant.**
- **N.B:** Si 2 valeurs de $n+l$ sont égales, le remplissage de la case ayant la valeur de n la plus faible est prioritaire

NOTIONS DE BASE

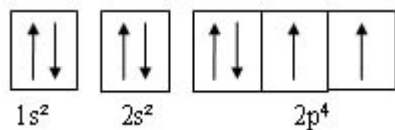


${}^6\text{C}$:

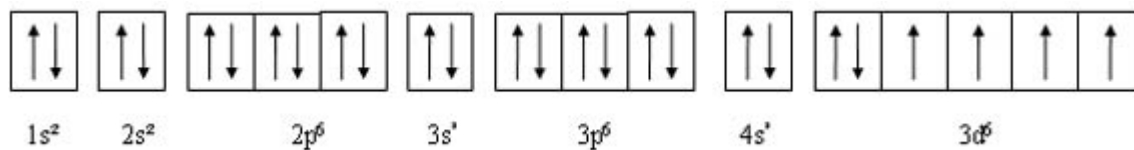
Diagramme donnant l'ordre de remplissage



${}^7\text{N}$:



${}^8\text{O}$:



${}^{26}\text{Fe}$:





NOTIONS DE BASE

Exemple
Atome d'Hydrogène (H)

NOTIONS DE BASE

Atome H: Modèle de Bohr

Par analogie avec le **modèle planétaire de Kepler**, Bohr émit l'hypothèse **d'orbites circulaires** avec les postulats suivants :

1^{er} postulat de Bohr

L'électron en **mouvement autour du proton** dans l'atome d'hydrogène **ne peut avoir comme trajectoires que certaines orbites** répondant à **une relation de quantification** du moment cinétique.

2^{ème} postulat de Bohr

Dans ces orbites, l'électron **ne perd pas d'énergie**. Ces orbites sont **stables**.

Une **radiation est émise** seulement si **un électron transite** d'un état d'énergie noté **n_i** vers un **état d'énergie n_f** avec **n_i supérieure à n_f** .

L'énergie de la radiation émise est **$\Delta E = hu$** , égale à **la différence d'énergie** entre les **deux états**.



NOTIONS DE BASE

Atome H: Modèle de Bohr (suite)

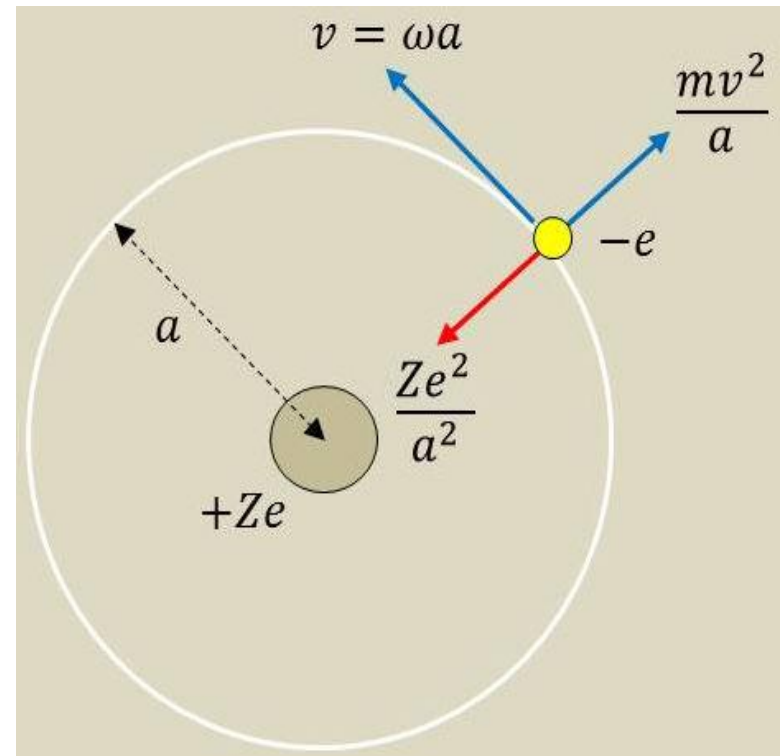
Sur son orbite privilégiée, l'électron trouve son équilibre entre deux forces :

- l'attraction électrostatique : $\frac{Ze^2}{a^2}$ (charge positive Ze du noyau) ;
- la force d'inertie : $\frac{mv^2}{a}$.

Ce qui donne le rayon de Bohr de l'électron et son énergie:

$$a = \frac{h^2}{4\pi^2} \frac{n^2}{m Z e^2} = \frac{n^2}{Z} (0,528 \times 10^{-8} \text{ m})$$

$$E_n = - \frac{2\pi^2 m Z^2 e^4}{n^2 h^2}$$



NOTIONS DE BASE

Atome H: Modèle de Sommerfeld

Le **modèle de Bohr** ne prend pas en compte **deux éléments** :

- orbite réelle **elliptique** donc non circulaire ;
- noyau **non ponctuel**, en mouvement par rapport à un centre de gravité.

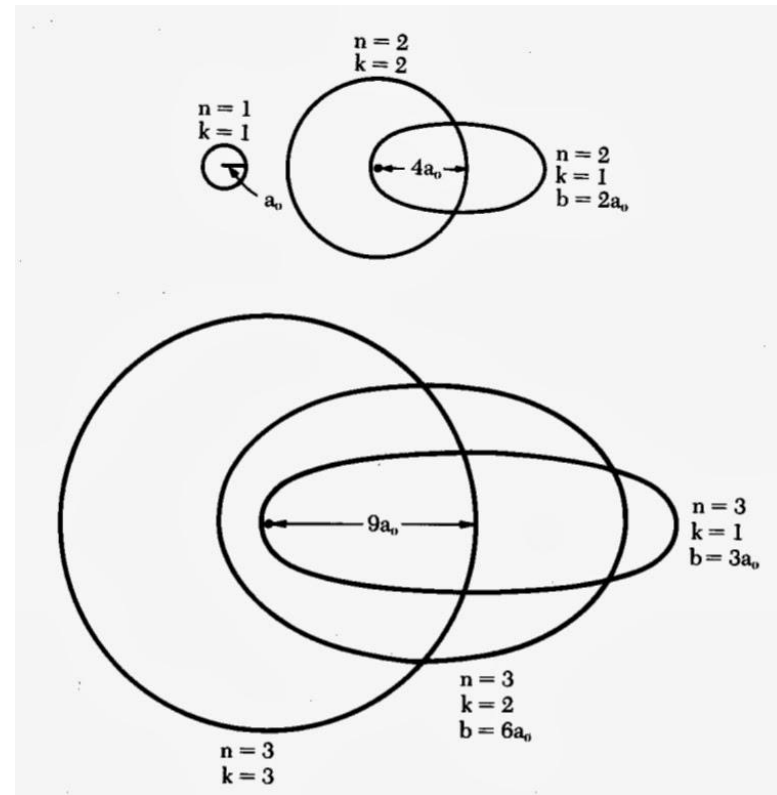
Moyennant deux opérations :

- Quantification des orbites elliptiques ;
- introduction de la mécanique relativiste.

Sommerfeld est parvenu à une expression **plus complexe** :

$$E_{n,l} = E_n \left\{ 1 + \frac{\alpha^2 Z^2}{n^2} \left(\frac{n}{l+1} - \frac{3}{4} \right) \right\}$$

- E_n : énergie de Bohr
- α : constante de structure fine



NOTIONS DE BASE

Atome H: Modèle quantique

L'équation de Schrödinger en **coordonnées sphériques** est donnée par :

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2m_e r^2} \left(\frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{\sin(\theta)} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin(\theta) \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2(\theta)} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right) - \frac{Z \cdot e^2}{4 \cdot \pi \cdot \epsilon_0 \cdot r} \right] \varphi(r, \theta, \phi) = E \cdot \varphi(r, \theta, \phi)$$

La **fonction d'onde totale**, solution de l'équation totale, peut s'écrire :

$$\varphi(r, \theta, \phi) = R(r) \cdot Y_l^m$$

R(r): **Fonction radiale**

$Y_l^m(\theta, \phi)$: **Harmoniques sphériques**



NOTIONS DE BASE

Atome H: Modèle quantique(suite)

L'opérateur quantique: $\Delta = -\hbar^2 \left(\frac{1}{\sin(\theta)} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin(\theta) \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2(\theta)} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \right)$

Correspond au carré du moment cinétique qui vérifie:

$$\Delta \cdot Y_l^m + l(l+1) \cdot Y_l^m = 0$$

Ce qui donne l'équation:

$$\frac{-\hbar^2}{2m_e r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR(r)}{dr} \right) + \left[\frac{l(l+1)\hbar^2}{2m_e r^2} - \frac{Z \cdot e^2}{4 \cdot \pi \cdot \epsilon_0 \cdot r} \right] R(r) = E \cdot R(r)$$

La résolution de cette équation différentielle nous permet d'accéder aux **fonctions radiales**, qui par ailleurs doivent être normalisables, et à l'expression de l'énergie de l'atome H (Z=1)



NOTIONS DE BASE

Atome H: modèle quantique (suite)

Niveaux énergétiques de l'hydrogène :

$$E_n = - \frac{2mq^4}{16\pi\epsilon_0^2 h^2 n^2}$$

La transition du niveau m au niveau n s'accompagne de l'émission d'une radiation électromagnétique de longueur d'onde λ telle que :

$$E_n - E_m = \frac{hc}{\lambda} \quad (n < m)$$

m : masse de l'électron

q : charge de l'électron

ϵ_0 : permittivité du vide

h : constante de Planck

n : entier représentant le niveau énergétique de l'électron

c : célérité de la lumière dans le vide

Rayon des orbites
de Bohr

$$r = \frac{n^2 h^2 \epsilon_0}{\pi m e^2}$$

$$E_0 = -13.6 \text{ eV} = 109737 \text{ cm}^{-1}$$



NOTIONS DE BASE

Atome H: modèle quantique (suite)

Fonctions d'onde (orbitales atomiques)

$$\Psi_{1s} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a} \right)^{3/2} e^{-Zr/a}$$

$$\Psi_{2s} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \left(\frac{Z}{a} \right)^{3/2} \left(2 - \frac{Zr}{a} \right) e^{-Zr/2a}$$

$$\Psi_{2pz} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \left(\frac{Z}{a} \right)^{5/2} r \cdot e^{-Zr/2a} \cdot \cos(\theta)$$

$$\Psi_{2px} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \left(\frac{Z}{a} \right)^{5/2} r \cdot e^{-Zr/2a} \cdot \cos(\phi) \sin(\theta)$$

$$\Psi_{2py} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \left(\frac{Z}{a} \right)^{5/2} r \cdot e^{-Zr/2a} \cdot \sin(\phi) \sin(\theta)$$

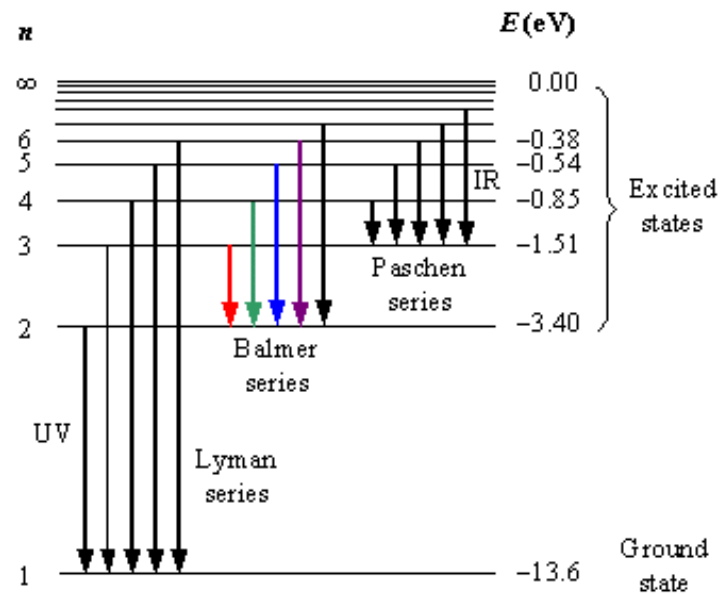
$$\Psi_{3s} = \frac{1}{81\sqrt{3\pi}} \left(\frac{Z}{a} \right)^{5/2} \left(27 - 18 \frac{Zr}{a} + \frac{Z^2 \cdot r^2}{a^2} \right) e^{-Zr/3a}$$

$$\Psi_{3pz} = \frac{\sqrt{2}}{81\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a} \right)^{5/2} \left(6 - \frac{Zr}{a} \right) r \cdot e^{-Zr/3a} \cdot \cos(\theta)$$

$$\Psi_{3px} = \frac{\sqrt{2}}{81\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a} \right)^{5/2} \left(6 - \frac{Zr}{a} \right) r \cdot e^{-Zr/3a} \cdot \cos(\phi) \cdot \sin(\theta)$$

$$\Psi_{3py} = \frac{\sqrt{2}}{81\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a} \right)^{5/2} \left(6 - \frac{Zr}{a} \right) r \cdot e^{-Zr/3a} \cdot \sin(\phi) \cdot \sin(\theta)$$

Niveaux d'énergie



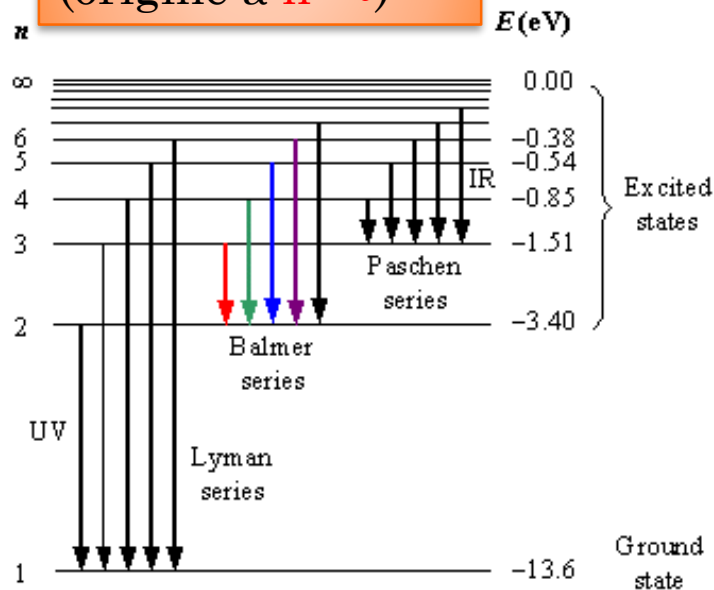
Energy levels of the hydrogen atom with some of the transitions between them that give rise to the spectral lines indicated.



NOTIONS DE BASE

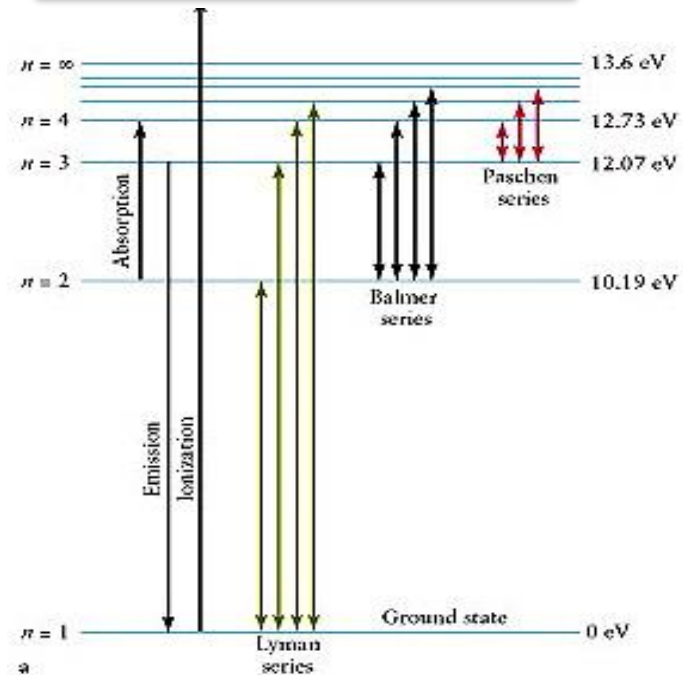
Atome H (suite)

Niveaux d'énergie (origine à $n=\infty$)



Energy levels of the hydrogen atom with some of the transitions between them that give rise to the spectral lines indicated.

Energies de transition (origine à $n=1$)



NOTIONS DE BASE

1 atome, 1 niveau



Deux atomes éloignés
même niveau d'énergie
Pour cet électron.

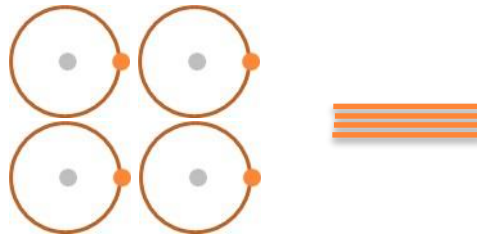
1 atome, 1 niveau



2 atomes rapprochés
2 niveaux proches



4 atomes rapprochés
4 niveaux plus proches



Conclusion: Plus il y a d'atomes très proches, plus il y a de niveaux très proches \Rightarrow Formation d'une "bande d'énergie"



NOTIONS DE BASE

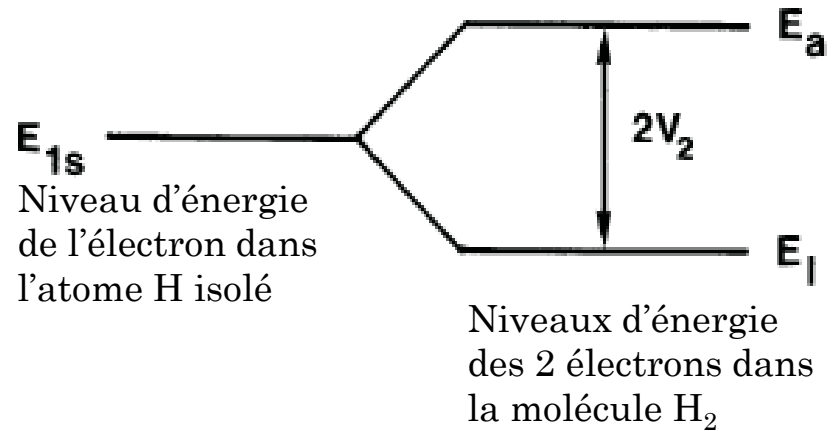
Molécule H₂ modèle quantique

$$|\psi\rangle_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} [|1s\rangle_1 + |1s\rangle_2]$$

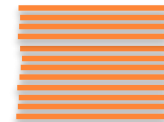
$$|\psi\rangle_a = \frac{1}{\sqrt{2}} [|1s\rangle_1 - |1s\rangle_2]$$

Orbitales
moléculaires

Orbitales
atomiques

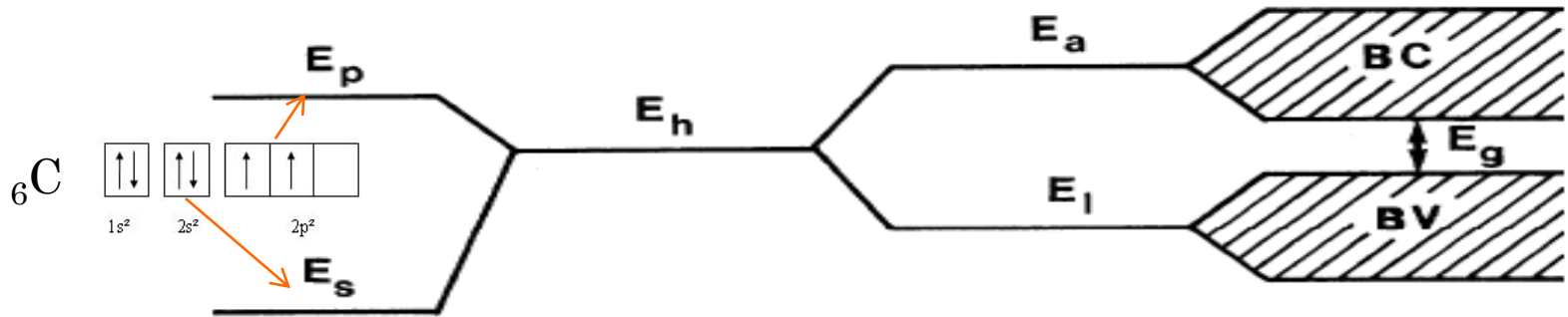


Un amas d'atomes

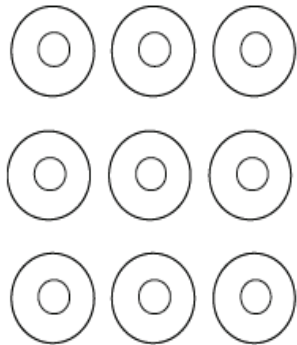


NOTIONS DE BASE

De l'atome de Carbone (C) aux atomes de Carbone dans le cristal



**Etats
atomiques**

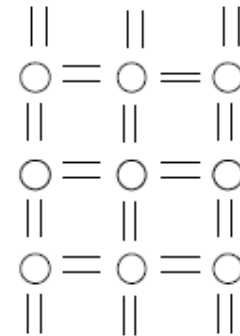


**Atomes de C distants
(isolés)**

**Etats
hybrides**

**Etats d'une
liaison**

**Etats
cristallins**

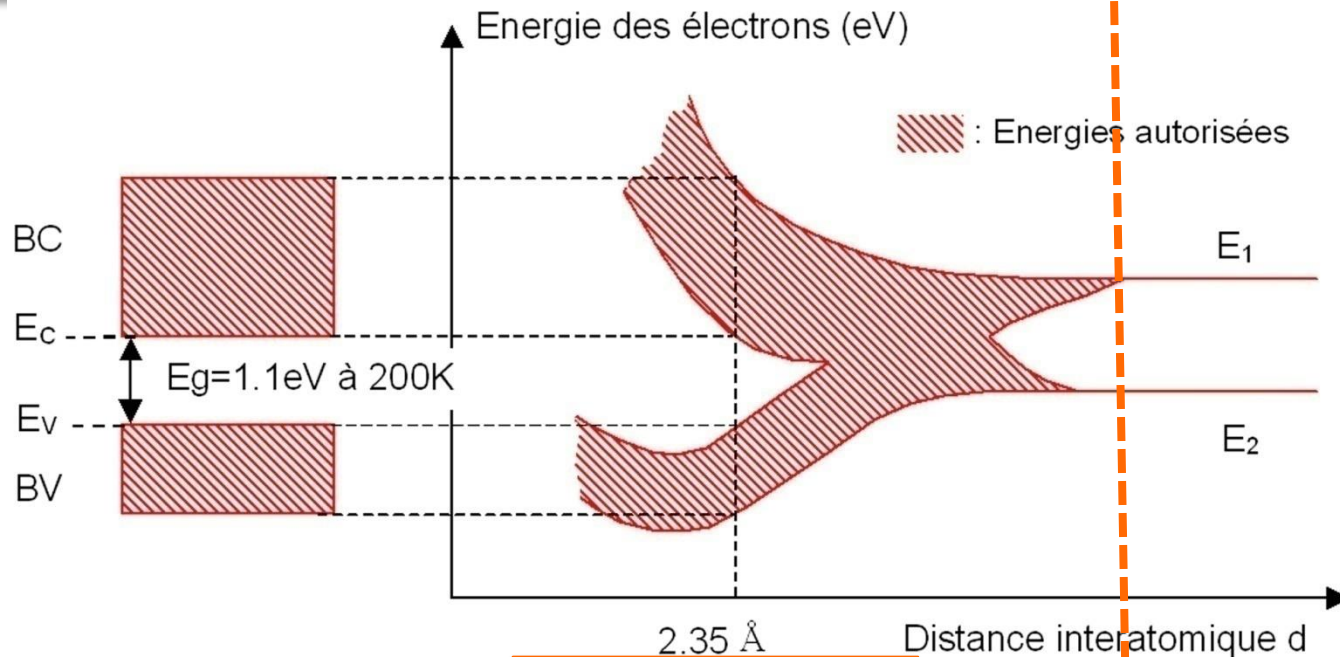


**Atomes de C couplés
(cristal)**



NOTIONS DE BASE

1) Différences du point de vue énergétique Entre atomes isolés et solides (atomes très rapprochés)



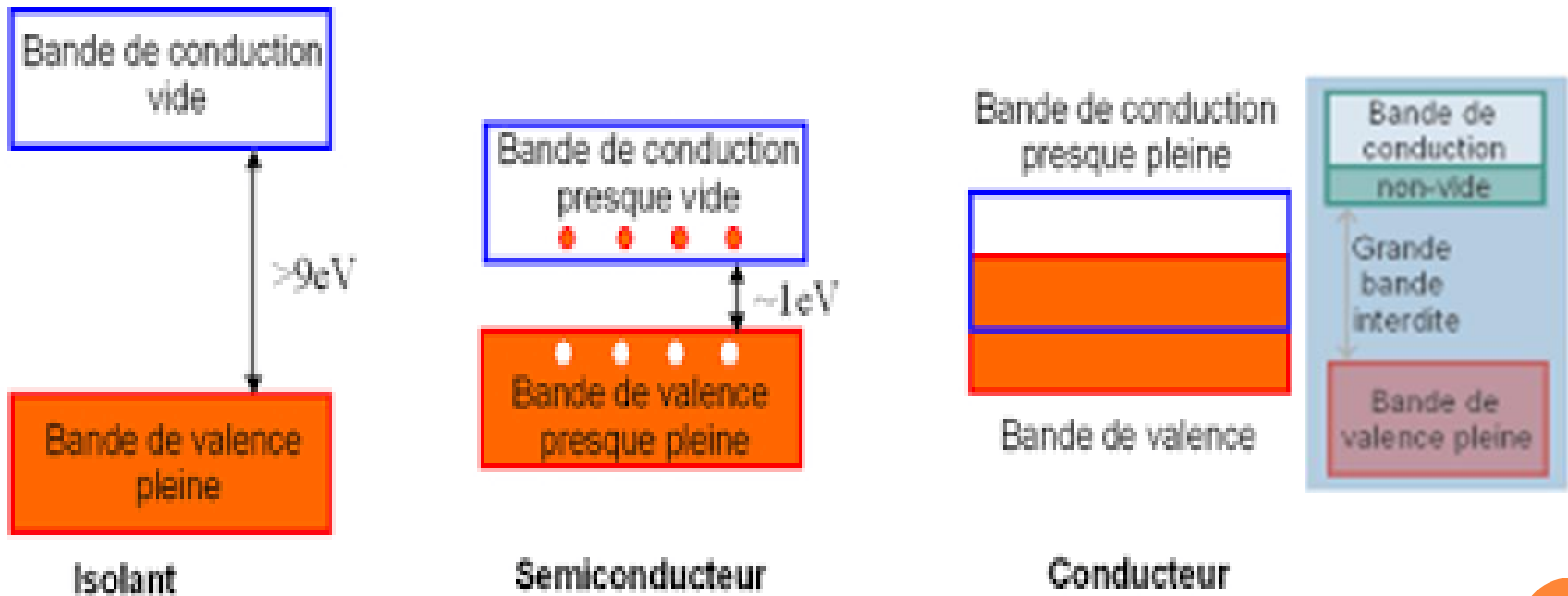
Solide
(Atomes très rapprochés)

Atomes
isolés



DIFFÉRENCES DU POINT DE VUE ÉNERGÉTIQUE

2) Différences du point de vue énergétique Entre matériaux conducteurs, semi-conducteurs et isolants





**CHAPITRE 2.
THÉORIE DES BANDES D'ÉNERGIE
D'UN SEMI-CONDUCTEUR**

**Partie 2: Introduction au calcul
des bandes d'énergie**

INTRODUCTION AU CALCUL DES BANDES D'ÉNERGIE

Hamiltonien du cristal parfait

$$\hat{H} = \sum_i \frac{P_i^2}{2m} + \sum_j \frac{P_j^2}{2M_j}$$

énergie cinétique des électrons *énergie cinétique des noyaux*

$$+ \frac{1}{2} \frac{1}{4\pi \epsilon_0} \sum_{j, j'} \frac{Z_j Z_{j'} e^2}{|R_j - R_{j'}|} + \frac{1}{2} \frac{1}{4\pi \epsilon_0} \sum_{i, i'} \frac{e^2}{|r_i - r_{i'}|}$$

énergie de répulsion coulombienne entre les noyaux *énergie de répulsion coulombienne entre les électrons*

$$- \frac{1}{4\pi \epsilon_0} \sum_{i, j} \frac{Z_j e^2}{|r_i - R_j|}$$

énergie d'interaction coulombienne entre les noyaux et les électrons



INTRODUCTION AU CALCUL DES BANDES D'ÉNERGIE

Paramètres de l'hamiltonien

- r_i et P_i la position et l'impulsion de l'électron i ;
 - R_j et P_j la position et l'impulsion du noyau j ;
 - Les électrons ont tous une masse m et une charge $-e$;
 - le noyau j de numéro atomique Z_j a une masse M_j et une charge $Z_j e$ (le cristal peut être composé d'atomes différents).
-
- **Remarque 1 :** *Le rôle du $\frac{1}{2}$ qui apparaît dans les 3^{ème} et 4^{ème} termes de l'expression de l'hamiltonien est d'éviter de les comptabiliser deux fois quand on fait varier l'indice correspondant.*
 - **Remarque 2 :** *Les deux premières sommes doivent se faire sur tous les électrons et tous les noyaux ;*
 - **Remarque 3 :** *Les deux sommes suivantes où apparaît le $\frac{1}{2}$ doivent se faire sur toutes les paires (i, i') et (j, j') sauf les paires pour lesquelles $i=i'$ et $j=j'$.*



INTRODUCTION AU CALCUL DES BANDES D'ÉNERGIE

Equation de Schrödinger pour un cristal

- L'équation de Schrödinger indépendante du temps, pour un cristal dont l'hamiltonien est du type décrit ci-dessus, s'écrit :

$$\hat{H}\Psi(r_1, r_2, r_3, \dots, R_1, R_2, R_3, \dots) = E\Psi(r_1, r_2, r_3, \dots, R_1, R_2, R_3, \dots)$$

- C'est une **équation aux valeurs propres** qui permet d'obtenir **la fonction d'onde stationnaire ψ** et les **niveaux d'énergie E** du cristal. Cependant, la résolution de cette équation à l'échelle macroscopique pour un cristal qui contient plus de **10^{22} atomes /cm³** (**5×10^{22} cm⁻³ pour Si**) est pratiquement **impossible**; c'est la raison pour laquelle on **utilise des modèles d'approximation**.



INTRODUCTION AU CALCUL DES BANDES D'ÉNERGIE

A) Approximations de base

Les différents modèles proposés ont en commun les trois approximations suivantes :

1. Séparation des électrons : Cette première approximation consiste à **séparer les électrons** en **deux groupes** :

- Les électrons **de valence**
 - Les électrons **du cœur**.
- Les **électrons du cœur** appartiennent à des **orbitales complètement remplies** et sont **localisés près du noyau** auquel ils appartiennent. On les **associe donc aux noyaux** pour **former des ions** qui occupent **les nœuds du réseau** cristallin
- Les **électrons de valence**, qui appartiennent aux **orbitales de valence non complètement remplies**, sont **les seuls électrons à considérer** dans l'Hamiltonien . Par conséquent, **le domaine de variation des indices i et i' , j et j'** se réduit respectivement à celui **des électrons de valence** et celui **des noyaux** avec leurs **électrons du cœur**.



INTRODUCTION AU CALCUL DES BANDES D'ÉNERGIE

A) Approximations de base (suite)

2. Approximation adiabatique ou de Born Oppenheimer :

Cette approximation est basée sur l'idée de l'inertie des noyaux par rapport aux électrons au point qu'on peut considérer les noyaux fixes.

L'hamiltonien du cristal dans le cadre de cette approximation s'écrit :

$$\hat{H} = \hat{H}_{ions}(R_j) + \hat{H}_{électrons}(r_i, R_{j0}) + \hat{H}_{électrons-ions}(r_i, \delta R_j)$$

Dans le cas où on ignore le mouvement des noyaux et on ne s'intéresse qu'au mouvement des électrons, l'hamiltonien de ces électrons s'écrit

$$\hat{H}_e = \sum_i \frac{P_i^2}{2m} + \frac{1}{2} \frac{1}{4\pi \epsilon_0} \sum_{i,i'} \frac{e^2}{|r_i - r_{i'}|} - \frac{1}{4\pi \epsilon_0} \sum_{i,j} \frac{Z_j e^2}{|r_i - R_{j0}|}$$



INTRODUCTION AU CALCUL DES BANDES D'ÉNERGIE

A) Approximations de base (suite)

3. Approximation du champ moyen : Dans cette approximation, on globalise les interactions en remplaçant toutes les interactions à deux corps par un potentiel moyen $V(r)$ dans lequel baignent les particules.

Ainsi, on ramène le problème à N corps (N électrons) à N problèmes à un corps (1 électron). L'hamiltonien est ramené à celui d'un électron qui s'écrit:

$$\hat{H} = \left(\frac{P^2}{2m} + V(r) \right)$$

L'équation de Schrödinger associée à cet hamiltonien est :

$$\left(\frac{P^2}{2m} + V(r) \right) \varphi(r) = E \varphi(r)$$



INTRODUCTION AU CALCUL DES BANDES D'ÉNERGIE

B) Méthodes de résolution

1. Méthode des liaisons fortes: Cette méthode, appelée aussi méthode **LCAO (linear combinations of atomic orbitals)**, consiste à **développer la fonction d'onde du cristal** sous forme de **combinaisons linéaires d'orbitales atomiques** en tenant compte du **théorème de Bloch** auquel doivent satisfaire les fonctions d'onde du cristal.

Cette méthode est basée sur l'idée que **les états électroniques sont essentiellement des états atomiques** plus au moins perturbés par la nature du potentiel périodique du cristal.

Cette technique est **bien adaptée au calcul des bandes profondes correspondant aux états du cœur** (ces états sont très peu perturbés lors de la formation du cristal), **un peu moins adaptés au calcul des bandes associées aux états de valence** (ces états sont relativement perturbés) et **peu adaptée au calcul relatif à la bande de conduction** (états délocalisés).



INTRODUCTION AU CALCUL DES BANDES D'ÉNERGIE

B) Méthodes de résolution (suite)

2. Méthode des liaisons faibles : La méthode des liaisons faibles appelée aussi **méthode OPW (orthogonalized plane waves)** considère que, à l'opposée de la méthode **LCAO**, **les états électroniques dans le cristal sont essentiellement les états de l'électron libre plus au moins perturbés par la périodicité du potentiel du cristal.**

On **développe** donc la **fonction d'onde** des électrons dans le cristal sur la base **des fonctions d'onde** des électrons **libres** qui sont des **ondes planes**.

Cette **méthode est bien adaptée aux calculs relatifs à la bande de conduction**, un **peu moins** pour **la bande de valence** et **pas du tout** pour **les états du cœur**.



INTRODUCTION AU CALCUL DES BANDES D'ÉNERGIE

B) Méthodes de résolution (suite)

3. Autres méthodes : Il existe d'autres méthodes pour résoudre l'équation de Schrödinger précédente à savoir :

- Méthode du pseudo potentiel qui revient en fin de compte à un calcul de perturbation.
- Méthode APW (augmented plane waves) qui nécessite des techniques numériques très sophistiqués et des machines puissantes pour effectuer les calculs lourds qui résultent de la complexité du formalisme utilisé.



INTRODUCTION AU CALCUL DES BANDES D'ÉNERGIE

Bandes essentielles

1. Bande de valence

La dernière bande d'énergie remplie est appelée la **bande de valence**, car les électrons de cette bande jouent un rôle important dans les phénomènes électriques, chimiques et optiques.

2. Bande de conduction

La première bande inoccupée située juste au dessus de la bande de valence est appelée **bande de conduction**.

3. Bande interdite

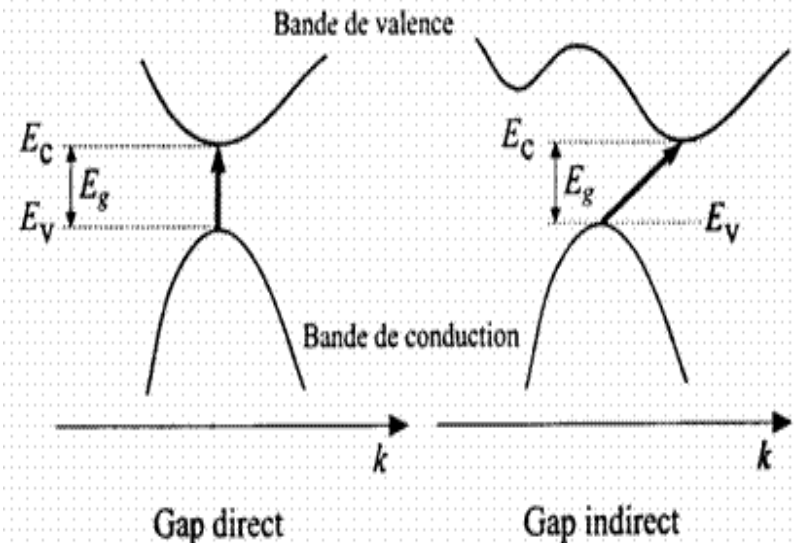
La différence d'énergie entre le sommet de la bande de valence et le bas de la bande de conduction est appelée la **bande interdite** ou le gap (mot anglais). Ce dernier paramètre, le gap, est très important, car il conditionne les propriétés électriques et optiques du cristal.



INTRODUCTION AU CALCUL DES BANDES D'ÉNERGIE

Nature du gap

- Si le **maximum** d'énergie de la **bande de valence** et le **minimum** d'énergie de la **bande de conduction** correspondent pour **la même valeur de k** , cas de GaAs, On a **un gap direct**.
- Dans le cas contraire (pour **différentes valeurs de k**), cas de Si, on a **un gap indirect**



INTRODUCTION AU CALCUL DES BANDES D'ÉNERGIE

Effet de la température et de la composition sur le gap

- Le gap varie avec la température et la composition chimique (pour les matériaux composés).
- La variation due à la température a deux origines :
 - La dilatation thermique du réseau cristallin qui modifie le potentiel périodique donc la structure de bande et ainsi la valeur de la bande interdite ;
 - Les vibrations du réseau qui dépendent de la température donc affectation de la structure de bande.

Matériau	Ge		SI		GaAs	
	0	300	0	300	0	300
T (K)	0	300	0	300	0	300
Eg (eV)	0.75	0.66	1.16	1.12	1.52	1.43

INTRODUCTION AU CALCUL DES BANDES D'ÉNERGIE

Importance du gap

La **valeur du gap** et sa **nature** gouvernent les performances **électroniques** et **optiques** d'un dispositif électronique à base de matériaux semi-conducteur.

- La **valeur du gap** fixe la **température maximale** de fonctionnement.
- La **nature du gap** fixe l'**efficacité** des **transitions radiatives**, donc la performance pour les applications optoélectroniques.

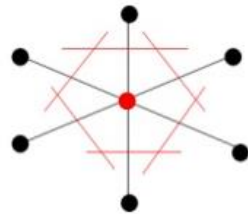
INTRODUCTION AU CALCUL DES BANDES D'ÉNERGIE

Première zone de Brillouin (espace 2D)

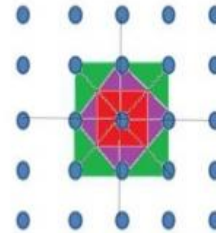
En physique du solide, la **première zone de Brillouin** est définie de manière unique comme **la maille primitive** dans **l'espace réciproque**. Elle est définie **par la même méthode** que la maille **de Wigner-Seitz** dans le réseau de Bravais, et s'identifie à celle-ci dans l'espace réciproque.

Brillouin Zone in 2D

Wigner -Seitz cell in reciprocal space is known as brillouin zone. Wigner cell is a region in space that is closest to a given lattice point, than to any other lattice point in reciprocal space.



Wigner -Seitz cell for a 2D crystal



1 st, 2 nd and 3 rd Brillouin zone



INTRODUCTION AU CALCUL DES BANDES D'ÉNERGIE

Première zone de Brillouin (espace 3D)

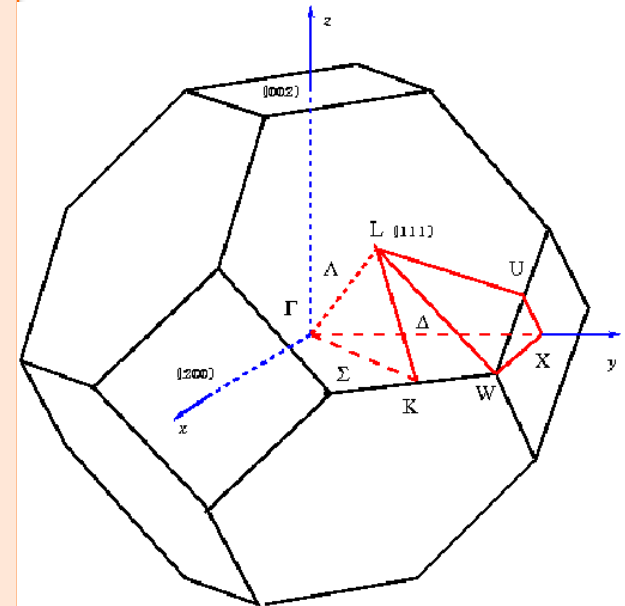
On choisit un nœud du réseau réciproque comme origine.

Ensuite, on trace les plans médians par rapport aux nœuds premiers plus proches voisins, deuxièmes plus proches voisins etc.

Le nœud d'origine se trouve entouré de polyèdres fermés.

Le polyèdre avec le plus petit volume est la 1^{ère} zone de Brillouin

Le volume entre ce polyèdre et le 2^{ème} plus petit polyèdre est la 2^{ème} zone de Brillouin etc.



INTRODUCTION AU CALCUL DES BANDES D'ÉNERGIE

Symétrie dans le cristal et la première zone de Brillouin :

La **symétrie** dans les cristaux joue **un rôle important**, car elle permet de **simplifier le calcul** des bandes d'énergie.

Comme l'étude se fait dans l'espace de Fourier (espace des k), **on préfère ramener l'étude** à la **première zone de Brillouin** dont **la symétrie** dépend de **celle du cristal d'origine**.



INTRODUCTION AU CALCUL DES BANDES D'ÉNERGIE

Points et directions importants

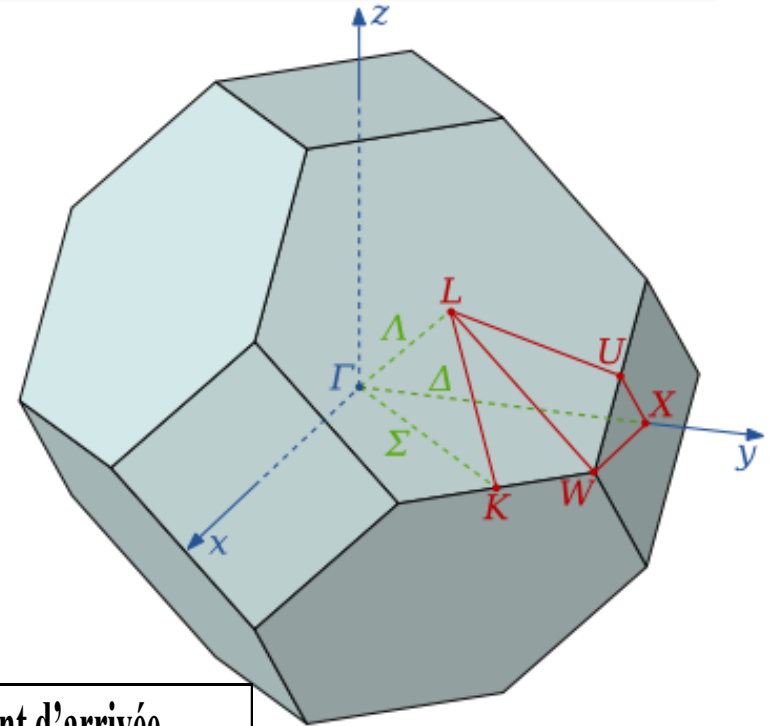
Pour tirer profit de la symétrie du cristal, on définit les points X , Γ , et L et les lignes Δ , Λ et Σ qui apparaissent dans la Fig.1. et sont résumés dans le tableau ci-dessous.

Direction	Point de départ	Ligne	Point d'arrivée
[100]	Γ	Δ	X
[110]	Γ	Σ	K
[111]	Γ	Λ	L



INTRODUCTION AU CALCUL DES BANDES D'ÉNERGIE

Points et directions importants



Direction	Point de départ	Ligne	Point d'arrivée
[100]	Γ	Δ	X
[110]	Γ	Σ	K
[111]	Γ	Λ	L



INTRODUCTION AU CALCUL DES BANDES D'ÉNERGIE

Conséquence de la symétrie

Les propriétés de symétrie permettent de déduire pas mal de propriétés sans avoir recours aux calculs.

Dans ce contexte, rappelons les deux points suivants :

- Lorsque deux vecteurs d'onde k et k' peuvent être transformés l'un en l'autre par une opération de symétrie du réseau réciproque, les niveaux d'énergie électroniques correspondant sont égaux ; autrement dit **les points et les axes qui se transforment l'un en l'autre par une opération de symétrie sont équivalents ($E=E'$)**.
- Les **fonctions d'onde** des électrons **peuvent être construites** en **tenant compte des propriétés de symétrie** du cristal. C'est d'ailleurs la raison pour laquelle **la probabilité de transition** entre des états quantiques **de symétries différentes s'annule**, ce qui permet de **déduire des règles de sélection** dans le processus **d'excitation**.



INTRODUCTION AU CALCUL DES BANDES D'ÉNERGIE

Théorème de Bloch : Lorsque le potentiel a la **périodicité du réseau**, il satisfait à **l'équation d'invariance** :

$$V(\vec{r}) = V(\vec{r} + \vec{R})$$

Le **théorème de Bloch** permet en fait de **simplifier la recherche des solutions de l'équation de Schrödinger** d'une particule placée **dans un potentiel périodique**.

Ce théorème stipule que la solution de l'équation de Schrödinger d'une particule placée dans un potentiel périodique est de la forme :

$$\Psi_{n,\vec{k}}(\vec{r}) = e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} u_{n,\vec{k}}(\vec{r})$$

Où $u_{n,\vec{k}}(\vec{r})$ est une fonction qui a la périodicité du réseau direct :

$$u_{n,\vec{k}}(\vec{r}) = u_{n,\vec{k}}(\vec{r} + \vec{R})$$



INTRODUCTION AU CALCUL DES BANDES D'ÉNERGIE

Niveau de Fermi

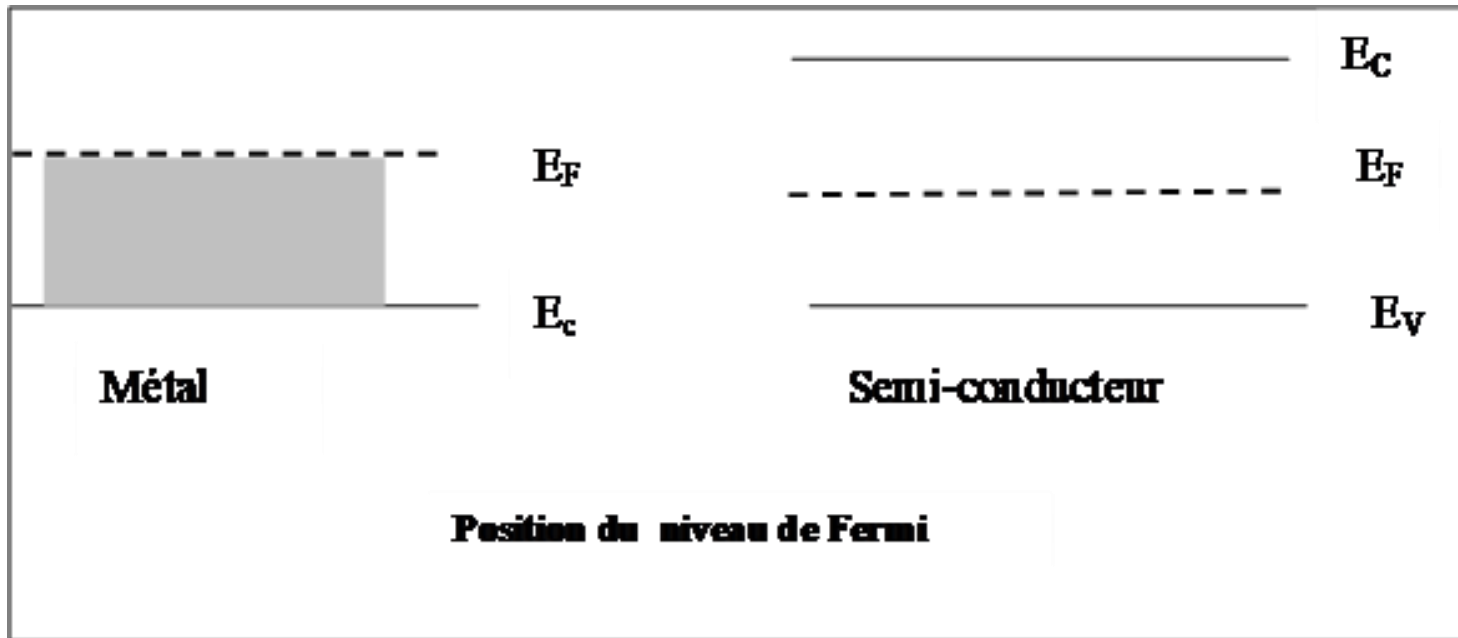
1. Dans un **métal** : C'est le **niveau le plus élevé** de la **bande de conduction occupé par les électrons**. Son énergie a pour expression :

$$E_F(0) = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{3N\pi^2}{V} \right)^{\frac{2}{3}} = \frac{\hbar^2}{2m} (3n\pi^2)^{\frac{2}{3}}$$

2. Dans un **solide (autre que le métal)** : C'est un **niveau d'énergie** électronique quantifié dont la **probabilité d'occupation** par un électron, calculée par la **statistique de fermi Dirac**, est égale à $\frac{1}{2}$.



INTRODUCTION AU CALCUL DES BANDES D'ÉNERGIE



INTRODUCTION AU CALCUL DES BANDES D'ÉNERGIE

Notion de masse effective : Dans le vide, un électron a une masse m . Si on lui applique un champ électrique ou un champ magnétique, les équations du mouvement feront intervenir la masse de l'électron m qui est une grandeur scalaire.

Dans le cristal, un électron est soumis à l'influence d'un potentiel périodique créé par les ions occupant les nœuds du réseau cristallin. Si on lui applique, dans ce cas, un champ électrique ou magnétique, il sera accéléré par rapport au réseau comme s'il a une masse m^* , appelée **masse effective**, dont la valeur est différente de celle de l'électron libre m . Cette masse peut être très différente de m et peut être positive ou négative et elle peut être une grandeur tensorielle et non une grandeur scalaire.



INTRODUCTION AU CALCUL DES BANDES D'ÉNERGIE

Définition de la masse effective

La **masse effective** est définie par la relation :

$$\frac{1}{m_e^*} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{d^2 E(\mathbf{k})}{d\mathbf{k}^2}$$

On constate, d'après la définition de la masse effective, que cette grandeur est **reliée à la courbure de $E(\mathbf{k})$** au voisinage du **minimum**.

Si **cette courbure**, qui représente **la rigidité** dans le cas d'un **oscillateur harmonique**, est **grande**, la **masse effective** est **petite** et vice versa.





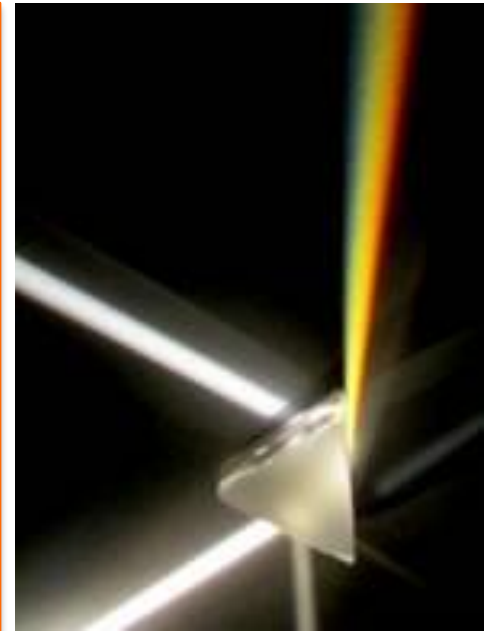
PARTIE III

Aperçu sur le rayonnement

APERÇU SUR LE RAYONNEMENT

Rayonnement

Le rayonnement est le transport d'énergie et de quantité de mouvement dans le vide ou dans un milieu matériel



APERÇU SUR LE RAYONNEMENT

Nature des rayonnements

Suivant leur nature, on peut distinguer deux types de rayonnements

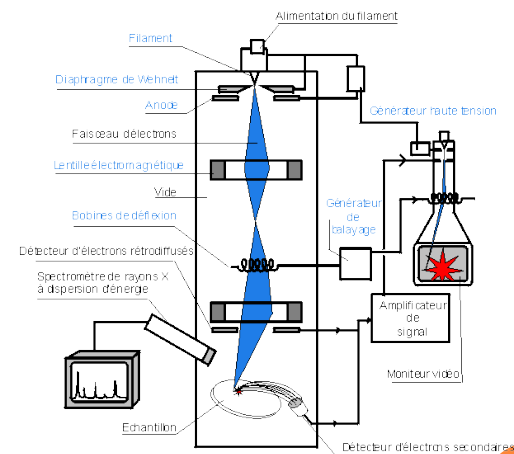
1. Rayonnements ondulatoires

- Ils sont caractérisés par leurs **fréquences** et leurs **vecteurs d'onde**;
- Ils **ne s'accompagnent pas** de **transport de matière**.
- Les rayonnements ondulatoires les plus fréquents sont les **rayonnements électromagnétiques** (constitués par un champ électromagnétique sinusoïdal de **fréquence ν** ou **longueur d'onde λ** se propageant **dans le vide** à la vitesse de **la lumière c**).
- L'énergie de ce type de rayonnement est quantifiée.
- Son transport a lieu sous forme de **grains d'énergie** appelés **photons** où chaque photon transporte une énergie $E=h\nu$.

Exemple: Rx, lumière,...

2. Rayonnements corpusculaires

- Ils sont constitués par des corpuscules de **masse m** ayant:
 - une **vitesse v** , donc une **énergie cinétique $E_c=1/2mv^2$** ;
 - une **quantité de mouvement $P=mv$** ;
 - une **longueur d'onde** donnée par la relation de De Broglie $\lambda=h/(mv)$.
- **Exemple:** Electrons, protons,...

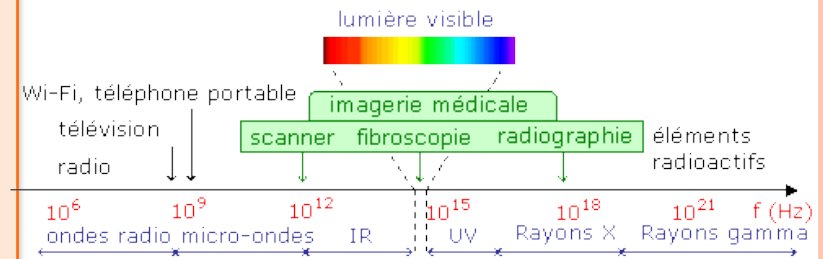


APERÇU SUR LE RAYONNEMENT

Grandeurs caractérisant un rayonnement

Les principales grandeurs physiques qui vont apparaître dans l'étude des rayonnements sont les suivantes:

- **1. Longueur d'onde λ :** Distance λ dont une onde sinusoïdal progresse pendant une période T ($\lambda=vT$ où v est la vitesse, [λ]= mètre)
- **2. Fréquence ν :** C'est le nombre de périodes par seconde ($\nu=1/T$, [ν]=Hertz)
- **3. Energie E :** Propriété d'un système capable de fournir du travail ([E]=Joule)
- **4. Intensité I :** L'intensité d'un rayonnement émis d'un point (la source supposée ponctuelle) est l'énergie traversant l'unité d'angle solide par unité de temps (, [I]=Watt/stéradian)



APERÇU SUR LE RAYONNEMENT

- **Relations entre énergie et longueur d'onde**
- Les relations donnant la longueur d'onde pour chaque type de rayonnement sont résumées dans le tableau ci-contre

Le rayonnement	Expression de la longueur d'onde
Le rayonnement électromagnétique	$\lambda(\text{Å}^\circ) = \frac{12400}{E(\text{eV})}$
Le rayonnement électronique $v \ll c$ (sans correction relativiste)	$\lambda(\text{Å}^\circ) = \frac{12.26}{\sqrt{E_c(\text{eV})}}$
$v \approx c$ (avec correction relativiste)	$\lambda(\text{Å}^\circ) = \frac{12.26}{\sqrt{E_c(\text{eV})(1 + 0.979 \cdot 10^{-6} E_c(\text{eV}))}}$
Le rayonnement neutronique	$\lambda(\text{Å}^\circ) = \frac{25.14}{\sqrt{T(\text{K})}}$



APERÇU SUR LE RAYONNEMENT

Le spectre électromagnétique

Rayonnement	Fréquence min. (Hz)	Fréquence max. (Hz)	Longueur d'onde max	Longueur d'onde min.
Ondes hertziennes	0	$3 \cdot 10^{12}$	∞	0.1 mm
Infrarouge	$3 \cdot 10^{12}$	$3.7 \cdot 10^{14}$	100 μm	0.8 μm
Visible	$3.7 \cdot 10^{14}$	$7.5 \cdot 10^{14}$	0.8 μm	0.4 μm
Ultraviolet	$7.5 \cdot 10^{14}$	$9 \cdot 10^{16}$	0.4 μm	100 \AA
Rayon X	$9 \cdot 10^{16}$	$6 \cdot 10^{19}$	100 \AA	0.05 \AA
Rayons γ	$6 \cdot 10^{19}$	$9 \cdot 10^{22}$	0.05 \AA	10^{-3}\AA
Rayons cosmiques	$9 \cdot 10^{22}$	-	10^{-3}\AA	-

