

Détection de rayonnement à très basses Température

4^{ème} Ecole d'Automne D'Aussois : Balaruc les Bains 14- 20 Novembre 1999

Interaction electron - phonon

Nicole Perrin

Interaction Electron-Phonon

**Ecole d'automne sur la détection de rayonnement
à très basse température**

Novembre 1999

Nicole PERRIN

**Laboratoire de Physique de la Matière Condensée
Département de Physique de L'Ecole Normale Supérieure
24, rue Lhomond, 75231 Paris Cedex 05**

I - Introduction

Houston¹ (1928) fut le premier à souligner que le libre parcours d'un électron dans un cristal parfait au repos est infini. En fait ces conditions idéales ne sont jamais satisfaites dans un cristal ordinaire, d'une part parce qu'il contient des imperfections (impuretés ; défauts de réseau) et d'autre part parce qu'il subit des oscillations thermiques. Ce sont ces dernières qui nous intéressent ici.

L'interaction entre les électrons de conduction et les ondes élastiques de vibration de réseau d'un solide cristallin est un problème dynamique d'une grande complexité au centre de toute la théorie des propriétés de transport des solides. Cette interaction s'avère très importante dans la détermination de propriétés telles que la conductivité électrique dans les métaux et les semiconducteurs, la conductivité thermique aux températures ordinaires, la supraconductivité classique à basse température dans les métaux. Elle est difficile à calculer ; elle fait en effet intervenir un système avec un grand nombre de degrés de liberté, composé

- du système des N_e électrons
- du système des N_i ions en mouvement autour de leur position d'équilibre sur un réseau quasi-infini, les électrons et les ions interagissant par des forces de Coulomb à grande portée.

Afin d'obtenir un problème soluble, la théorie initiale a dû être considérablement simplifiée²⁻³ au point de ne pouvoir rendre compte de la supraconductivité. Différentes approches ont été utilisées (modèle de Bloch², modèle de l'ion rigide de Nordheim³, potentiels de déformation de Parmenter⁴ et de Bardeen et Shockley⁵) ; elles conduisent finalement au même résultat ce qui est remarquable.

II - Système d'électrons et système de phonons

1 - Phonons

Les modes propres de vibration $\mathbf{u}(\mathbf{r},t)=A_0 \exp(i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}-\omega t)$ sont des ondes pseudo-progressives définies uniquement en $\mathbf{r}=\vec{R}_l$ (position d'équilibre de l'ion l) de fréquence $\omega_{\mathbf{q}}$ reliée au vecteur d'onde \mathbf{q} par une relation de dispersion. En fonction de ces modes, le hamiltonien du système est un hamiltonien d'oscillateurs harmoniques couplés⁶. Nous considérerons ici un réseau de Bravais avec un atome par maille élémentaire.

On peut introduire les opérateurs de coordonnées normales et déterminer les modes normaux de vibration. Les déplacements des ions par rapport à leur position d'équilibre \vec{R}_l s'expriment en fonction de modes normaux :

$$\vec{u}_{\vec{q}} = \sum_{\vec{q}} \alpha_{\vec{q}} \mathbf{e}_{\vec{q}} \exp(i\vec{q} \cdot \vec{R}_i) \quad (1)$$

où l'amplitude $\alpha_{\vec{q}}$ est donnée en termes d'opérateurs création a_q^+ et annihilation a_q de phonon dans l'état \vec{q} par :

$$\alpha_{\vec{q}} = i \left(\frac{\hbar}{2MN_i\omega_q} \right)^{1/2} (a_{-q} - a_q^+) \quad (2)$$

\mathbf{e}_q est le vecteur polarisation. M est la masse de l'ion et N_i est le nombre d'ions dans le cristal.

Le hamiltonien du système est alors le hamiltonien d'un ensemble d'oscillateurs harmoniques indépendants. La fréquence du q ème oscillateur est ω_q et son énergie d'excitation est $N_q \hbar \omega_q$: on a N_q quanta de vibration dans le mode q . Ces quanta sont les phonons. L'état de phonons correspondant sera noté $|n_q\rangle$.

L'amplitude carré moyenne du q ème mode se calcule en mécanique statistique⁷:

$$\overline{\alpha_q^2} = \frac{\hbar N_q}{2MN_i\omega_q} \quad \text{avec} \quad N_q = \frac{1}{\exp\left(\frac{\hbar\omega_q}{k_B T}\right) - 1} \quad (\text{les phonons sont des bosons}) \quad (3)$$

2 - Electrons

Dans le formalisme de Hartree-Fock, la fonction d'onde électronique totale ψ_e est bien représentée par un déterminant de fonctions d'onde à un électron : c'est une fonction d'onde antisymétrique. Cependant pour des raisons de simplicité, on peut utiliser l'approximation de Hartree pour la fonction d'onde électronique totale et écrire $\psi_e = \prod_i \varphi_e(\vec{r}_i)$ produit de fonctions d'onde à un électron. Le principe de Pauli devra compenser la symétrie de la fonction spatiale.

Dans l'approximation des électrons indépendants, les états à un électron dans un potentiel périodique sont des états de Bloch :

$$\psi_k(\vec{r} + \vec{R}_i) = \exp(i\mathbf{k} \cdot \vec{R}_i) \psi_k(\vec{r}) \quad (4)$$

Les états les plus simples que l'on pourra considérer sont des états d'onde plane (états d'électrons libres) :

$$\psi_k(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} \exp(i\mathbf{k} \cdot \vec{r}) \quad (V \text{ est ici le volume du cristal})$$

Dans un semiconducteur, les porteurs de charge peuvent être des trous ; nous verrons plus loin comment l'interaction électron-phonon fait intervenir les trous.

III - Approximation adiabatique

Le hamiltonien \mathcal{H} du système comprend^{6,8}:

- l'énergie cinétique des électrons T_e
- l'énergie cinétique des ions T_i
- l'énergie potentielle d'interaction des électrons V_{ee}
- l'énergie potentielle d'interaction des ions V_{ii}
- l'énergie potentielle d'interaction des électrons et des ions V_{ei}

$$\mathcal{H} = T_e + T_i + V_{ee} + V_{ii} + V_{ei}$$

et $\mathcal{H}\Psi_{ei}(\mathbf{R}, \mathbf{r}) = E\Psi_{ei}(\mathbf{R}, \mathbf{r})$

$\Psi_{ei}(\mathbf{R}, \mathbf{r})$ est la fonction d'onde totale du système électron-ions.

Les coordonnées \mathbf{R} des ions étant considérées comme des paramètres fixes, on résout l'équation de Schrödinger pour les électrons \Rightarrow base d'états :

$$H_e \psi_e(\mathbf{R}, \mathbf{r}) = E_e(\mathbf{R})\psi_e(\mathbf{R}, \mathbf{r}) \text{ avec } H_e = T_e + V_{ee} + V_{ei}$$

La fonction d'onde totale (électrons + ions) $\Psi_{ei}(\mathbf{R}, \mathbf{r})$, est développée sur la base des $\psi_e(\mathbf{R}, \mathbf{r})$:

$$\Psi_{ei}(\mathbf{R}, \mathbf{r}) = \sum \Phi_N(\mathbf{R})\psi_e(\mathbf{R}, \mathbf{r})$$

Dans l'approximation adiabatique, les coefficients $\Phi_N(\mathbf{R})$ de ce développement sont solutions de l'équation de Schrödinger pour le mouvement des ions, l'énergie potentielle de cette équation étant l'énergie $E_e(\mathbf{R})$ des électrons dans l'état $\psi_e(\mathbf{R}, \mathbf{r})$. Les termes d'interaction sont négligés :

$$H_{ep} \Phi_N(\mathbf{R})\psi_e(\mathbf{R}, \mathbf{r}) = 0$$

Les modes de vibration que l'on calculerait si seules étaient considérées les interactions directes entre les ions sont renormalisés en présence du gaz d'électrons qui contribue en fait à l'élasticité du solide⁹.

Sans la présence des électrons, les ions nus considérés comme des charges ponctuelles vont osciller comme un plasma avec une haute fréquence. L'introduction du gaz des électrons interagissant entre eux et aussi couplé aux ions par V_{ei} écrante l'interaction de Coulomb entre les ions nus à grande distance et diminue la fréquence des modes de grande longueur d'onde.

Au delà de l'approximation adiabatique, un couplage entre les états électroniques apparaît dans l'équation du mouvement des ions ; c'est l'interaction *électron-phonon* :

$$H_{ep} \Phi_N(\mathbf{R})\psi_e(\mathbf{R}, \mathbf{r}) \neq 0 \tag{5}$$

IV- Modèle de Bloch

L'opérateur d'interaction H_{ep} n'est pas facile à manipuler. Un modèle plus simple dû à Bloch² (1928) est généralement utilisé.

Les vibrations de réseau déplacent les ions ; il en résulte une variation de l'énergie potentielle du réseau δU relativement à sa valeur dans le cristal non déformé. Cette variation d'énergie potentielle agit sur les électrons comme une perturbation qui a pour effet de les diffuser dans un autre état.

L'opérateur de perturbation δU , équivalent à H_{ep} , est une fonction linéaire du déplacement \vec{u}_i de l'ion dont la position d'équilibre est \vec{R}_i . Il agit sur les états du réseau non déformé :

$$\delta U = \sum_i \vec{u}_i \cdot \frac{\partial U(\vec{r}_i)}{\partial \vec{u}_i} \quad (6)$$

Comme nous l'avons vu, \vec{u}_i est un opérateur agissant sur les états de phonons.

$\frac{\partial U(\vec{r}_i)}{\partial \vec{u}_i}$ agit sur les états d'électrons.

Le couplage entre les mouvements des électrons et les noyaux résulte de la modification de l'énergie potentielle due au déplacement du réseau

V - Élément de matrice pour l'interaction électron-phonon

1 - Première approche par la théorie de la diffraction des électrons

D'un point de vue ondulatoire, on peut dire que les atomes d'un cristal parfait diffractent les électrons de façon cohérente selon la loi de Laue comme pour les rayons X. De même, la diffusion par les vibrations thermiques peut être considérée comme la diffraction cohérente par un réseau périodiquement déformé par une onde de vibration ; le réseau déformé se comporte comme une grille de pas égal à la longueur d'onde de l'onde de vibration (soit quelques Å à température ordinaire et ~700 Å à 1K pour les modes acoustiques). Ce type de diffraction obéit aussi à la loi de Laue ; un mode donné de vibration ne peut donc dévier un électron que selon des angles bien définis.

Rappelons ici l'expression de l'élément de matrice $\mathcal{M}_{kk'}$ de la transition de $|\mathbf{k}\rangle$ vers $|\mathbf{k}'\rangle$, états d'onde plane, en présence d'un potentiel perturbateur $\mathcal{V}(\mathbf{r})$ ¹⁰ :

$$\mathcal{M}_{kk'} = \langle \vec{k} | \mathcal{V}(\mathbf{r}) | \vec{k}' \rangle$$

Pour un potentiel **périodique** développable en séries de Fourier sur les vecteurs \mathbf{g} du réseau réciproque d'un **crystal parfait** où les positions des ions à l'équilibre sont \vec{R}_l , on peut montrer que l'élément de matrice s'écrit :

$$\mathcal{M}_{kk'} = \mathcal{V}_g \delta_{\mathbf{k}-\mathbf{k}',\mathbf{g}}$$

Pour un potentiel résultant de la superposition des potentiels atomiques, les ions étant déplacés de \vec{u}_l par rapport à leur position d'équilibre :

$$\mathcal{V}(\mathbf{r}) = \sum_l V_a(\mathbf{r} - \vec{R}_l - \vec{u}_l)$$

on montre que l'élément de matrice se réduit à un produit de deux facteurs :

- le facteur de forme atomique $\mathcal{V}_a(\vec{K})$ qui dépend uniquement du champ de l'ion ; $\mathcal{V}_a(\vec{K})$ est le coefficient en \vec{K} du développement de Fourier de $\mathcal{V}(\mathbf{r})$.

$\vec{K} = \vec{k}' - \vec{k}$ est le vecteur de diffusion.

- le facteur de structure $S(\vec{K})$ qui dépend uniquement de l'arrangement des ions dans le cristal.

En utilisant le développement, en fonction des modes propres, du déplacement \vec{u}_l de l'ion par rapport à sa position d'équilibre, on trouve ¹⁰:

$$\mathcal{M}_{kk'} = -i\vec{K} \cdot \mathcal{U}_q \mathcal{V}_a(\vec{K}) \delta_{\mathbf{k}-\mathbf{q},\mathbf{g}}$$

où \mathcal{U}_q est l'amplitude du mode de vecteur d'onde \mathbf{q} .

Le potentiel de l'ion est supposé décroître très rapidement avec la distance à l'ion ; les effets de bord sont négligeables.

2 - Transitions électroniques d'un état $|\mathbf{k}\rangle$ vers un état $|\mathbf{k}'\rangle$ dans l'interaction électron-phonon.

La probabilité de transition par unité de temps d'un état $|1\rangle$ d'énergie totale ε_1 vers un état $|2\rangle$ d'énergie totale ε_2 est donnée par la théorie des perturbations dépendant du temps¹¹ :

$$P_{12}(t) = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle 1|H_{ep}|2\rangle|^2 \delta(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)$$

La probabilité de transition dépend donc du carré de l'élément de matrice du potentiel perturbateur entre les états initial $|1\rangle$ et final $|2\rangle$ et de la possibilité de satisfaire la conservation de l'énergie.

La formulation de Hartree pour la fonction d'onde impose que le seul type de transition électronique possible est la transition d'un électron particulier d'un état $|\mathbf{k}\rangle$ vers un état $|\mathbf{k}'\rangle$.

Pour les états de réseau, le déplacement \vec{u}_l exprimé en fonction des opérateurs création et annihilation de phonons (éqs.1 et 2) ne peut agir qu'entre des états où le nombre de phonons dans un mode particulier \mathbf{q} ne peut différer que d'une unité. Nous choisissons donc un mode particulier de vecteur d'onde \mathbf{q} et de polarisation p .

La polarisation ne sera pas explicitée dans la notation, mais elle sera comprise dans le mode \mathbf{q} ($\mathbf{q} \equiv \mathbf{q}, p$).

Nous voulons calculer l'élément de matrice de la transition $M_{kk'}$:

$$M_{kk'} = \langle n_{\mathbf{q}} | \int \psi_k^*(\vec{r}) H_{ep} \psi_{k'}(\vec{r}) d\vec{r} | n_{\mathbf{q}} - 1 \rangle = \langle n_{\mathbf{q}} | \int \psi_k^*(\vec{r}) \left\{ \sum_l \vec{u}_l \cdot \frac{\partial U}{\partial \vec{u}_l} \right\} \psi_{k'}(\vec{r}) d\vec{r} | n_{\mathbf{q}} - 1 \rangle \quad (7)$$

$$M_{kk'} = i \sum_l \left(\frac{\hbar N_{\mathbf{q}}}{2N_l M \omega_{\mathbf{q}}} \right)^{1/2} \exp(-i\mathbf{q} \cdot \vec{R}_l) \int \psi_k^*(\vec{r}) \left(\mathbf{e}_{\mathbf{q}} \cdot \frac{\partial U}{\partial \vec{u}_l} \right) \psi_{k'}(\vec{r}) d\vec{r}$$

En utilisant le théorème de Bloch (éq.4), on obtient :

$$M_{kk'} = N_{\mathbf{q}}^{1/2} \left(\frac{\hbar}{2N_l M \omega_{\mathbf{q}}} \right)^{1/2} \delta_{\mathbf{g}, \mathbf{k}' - \mathbf{k} - \mathbf{q}} \mathfrak{S}(\vec{K})$$

$$\text{avec} \quad \mathfrak{S}(\vec{K}) = \int \psi_k^*(\vec{r}) \left(\mathbf{e}_{\mathbf{q}} \cdot \frac{\partial U}{\partial \vec{u}_l} \right) \psi_{k'}(\vec{r}) d\vec{r} \quad (8)$$

en utilisant le vecteur de diffusion $\vec{K} = \vec{k}' - \vec{k}$.

Avant de calculer l'intégrale $\mathfrak{S}(\vec{K})$, qui est *le centre de toutes les formules conventionnelles de l'interaction électron-phonon*, considérons les conséquences des calculs ci-dessus.

3 - Caractéristiques de la transition

On peut déduire les règles générales suivantes :

a - étant donnés les états électroniques $|\mathbf{k}\rangle$ et $|\mathbf{k}'\rangle$, un seul mode de réseau de vecteur d'onde \mathbf{q} est impliqué : $\vec{K} = \vec{q} + \vec{g}$ soit $\vec{q} = \vec{k}' - \vec{k} - \vec{g}$

On distingue les processus *normaux* pour lesquels $\vec{g} = 0$ et les processus *Umklapp* pour lesquels $\vec{g} \neq 0$ est un vecteur quelconque du réseau réciproque.

b - l'élément de matrice précédent correspond à un processus où un phonon est absorbé : il contient le facteur $(N_{\mathbf{q}})^{1/2}$. Pour un processus correspondant à une émission d'un phonon, on aurait le facteur $(N_{\mathbf{q}} + 1)^{1/2}$.

La probabilité de transition est donc proportionnelle à :

N_q dans le cas de l'absorption

$N_q + 1$ dans le cas de l'émission

c - la probabilité de transition de l'électron, calculée par la théorie des perturbations dépendant du temps, fait intervenir la conservation de l'énergie $\delta(E_{\vec{k}\pm\vec{q}} - E_{\vec{k}} \mp \hbar\omega_q)$.

Il en résulte une règle de sélection sur l'énergie de l'électron:

$$E(\vec{k}') = E(\vec{k}) \pm \hbar\omega_q$$

Dans l'équation précédente : le signe + correspond à l'absorption

le signe - correspond à l'émission

le nombre d'occupation du q ème mode normal de vibration du réseau augmente d'une unité (-) ou décroît d'une unité (+) ;

⇒ un phonon a été absorbé (+) ou émis (-).

d - la contribution des modes dépend de leur polarisation \mathbf{e}_q . On verra plus loin que c'est le facteur $(\vec{K} \cdot \mathbf{e}_q)^2$ qui intervient dans la transition. Il en résulte que :

- pour les processus normaux, seuls les modes *longitudinaux* interviennent
- pour les processus Umklapp, les électrons peuvent interagir avec les modes

transverses.

VI - Expressions de $\mathfrak{Z}(\vec{K})$: les différentes approches

1 - Approximation de l'ion rigide : modèle de Nordheim³ (1931)

Le potentiel entourant chaque ion se déplace avec lui : il lui est rigidement attaché.

Le potentiel $U(\vec{r})$ peut donc s'écrire sous la forme d'une somme de potentiels atomiques centrés sur les positions des ions dans le cristal déformé, voisines des positions à l'équilibre \vec{R}_l :

$$U(\vec{r}) = \sum_l U_a(\vec{r} - \vec{R}_l - \vec{u}_l)$$

ce qui donne :
$$\frac{\partial U(\vec{r})}{\partial \vec{u}_l} = -\frac{\partial U_a}{\partial \vec{r}} = -\vec{\nabla} U_a \quad (9)$$

et
$$\mathfrak{Z}(\vec{K}) = -\mathbf{e}_q \cdot \int \psi_k^*(\vec{r}) \vec{\nabla} U_a \psi_k(\vec{r}) d\vec{r} \quad (10)$$

En toute rigueur, l'intégrale s'étend à tout le cristal. Mais le potentiel atomique n'est important qu'à l'intérieur d'une cellule de Wigner-Seitz (il est rapidement écranté par les électrons de conduction à l'extérieur de la cellule) ; on a donc un électron de conduction dans la

cellule, soumis au potentiel atomique. Ce potentiel est supposé nul à l'extérieur de la cellule : c'est l'approximation de *la méthode de Wigner-Seitz* (référence 6, p. 86).

Dans cette approximation, une méthode de calcul due à Mott et Jones (1936)⁶ permet de calculer $\mathfrak{S}(\vec{K})$. Avec quelques approximations, on obtient l'estimation suivante de $\mathfrak{S}(\vec{K})$:

$$\mathfrak{S}(\vec{K}) = -ie_q \cdot (\vec{k}' - \vec{k}) \{U(\vec{r}_c) - \mathcal{E}_0\} \int \psi_k^*(\vec{r}) \psi_{k'}(\vec{r}) d\vec{r}$$

\vec{r}_c est le rayon de la cellule de Wigner-Seitz et \mathcal{E}_0 est l'énergie du bas de bande correspondant à $\mathbf{k}=0$.

⇒ le vecteur de diffusion $\vec{K} = \vec{q}$ et le préfacteur montrent que seuls les phonons longitudinaux diffusent les électrons dans les processus normaux.

⇒ le facteur d'énergie peut être relié à la dilatation Δ (Hunter et Nabarro-1953)¹². On peut écrire :

$$\delta\mathcal{E}_0 \approx \{U(\vec{r}_c) - \mathcal{E}_0\} \Delta \quad (11)$$

⇒ $\{U(\vec{r}_c) - \mathcal{E}_0\}$ est le *taux de variation de l'énergie du bas de bande de conduction avec la dilatation*.

On peut l'estimer pour une bande parabolique et des électrons presque libres et donc de masse effective peu sensible à la déformation, à partir de l'énergie de cohésion supposée purement électronique :

$$\{U(\vec{r}_c) - \mathcal{E}_0\} \approx \frac{2}{3} \mathcal{E}_c$$

⇒ enfin, l'intégrale de recouvrement implique que la diffusion à grand angle est prohibée.

Ce modèle, dû à Nordheim(1930), est bien adapté aux **métaux simples**.

Cependant il semble artificiel de pouvoir supposer que près d'une limite de cellule de Wigner-Seitz, le potentiel dépend seulement du mouvement de l'ion dans la cellule et non du mouvement de l'ion dans une cellule adjacente. Le modèle suivant remédie à ce problème.

2 - Approximation de l'ion déformable : modèle de Bloch²(1931)

Au lieu de relier la variation d'énergie potentielle en \vec{r} au mouvement \vec{u}_i de l'ion en \vec{R}_i et d'écrire :

$$\delta U(\vec{r}) = U_a(\vec{r} - \vec{u}_i) - U_a(\vec{r})$$

on suppose que la variation d'énergie potentielle est proportionnelle au déplacement local en \vec{r} , $\vec{u}(\vec{r})$, qui n'est bien sûr rigoureusement défini que sur les sites du réseau :

$$\delta U(\vec{r}) = U\{\vec{r} - \vec{u}(\vec{r})\} - U(\vec{r})$$

Ainsi pour un déplacement de la forme :

$$u(\vec{r}) \propto \mathbf{e}_q \exp(i\mathbf{q} \cdot \vec{r})$$

on obtient :

$$\delta U(\vec{r}) \propto \exp(i\mathbf{q} \cdot \vec{r}) \mathbf{e}_q \cdot \vec{\nabla} U(\vec{r})$$

Il en résulte l'expression de l'intégrale $\mathfrak{S}(\vec{K})$:

$$\mathfrak{S}(\vec{K}) = -\mathbf{e}_q \cdot \int \psi_k^*(\vec{r}) \left\{ \exp(i\mathbf{q} \cdot \vec{r}) \vec{\nabla} U \right\} \psi_k(\vec{r}) d\vec{r} \quad (12)$$

En utilisant comme précédemment l'approximation de *la méthode de Wigner-Seitz*, on peut estimer l'intégrale $\mathfrak{S}(\vec{K})$.

Pour les **processus normaux**, on obtient finalement :

$$\mathfrak{S}(\vec{K}) = -i\mathbf{e}_q \cdot \mathbf{q} \frac{2}{3} \int \psi_0^*(\vec{r}) \{U_a(\vec{r}) - \mathcal{E}_0\} \psi_0(\vec{r}) d\vec{r} \quad (13)$$

ψ_0 est la fonction d'onde⁶ ψ_k pour $\mathbf{k}=0$.

⇒ on retrouve le même facteur de polarisation que précédemment : les phonons longitudinaux seuls diffusent les électrons pour les processus normaux.

⇒ le facteur d'énergie est différent : il est égal aux 2/3 de la valeur moyenne de $U_a(\vec{r}) - \mathcal{E}_0$ sur toute la cellule. On peut interpréter ce terme comme l'énergie cinétique d'un électron lié dans la cellule par le potentiel de l'ion. Sa valeur peut être estimée comme égale à la valeur moyenne de l'énergie de Fermi d'un électron dans un solide soit $\frac{3}{5} \mathcal{E}_F$, ce qui conduit à un facteur d'énergie $\frac{2}{5} \mathcal{E}_F$.

⇒ le vecteur de diffusion n'apparaît pas.

3 - Potentiel de déformation : Hunter et Nabarro¹² (1953)

Dans ce modèle plus réaliste, on tient compte du changement de volume de chaque cellule, proportionnel à la dilatation locale du réseau et de la variation d'énergie potentielle en résultant (cf éq.13) :

$$\delta \mathcal{E}_0 \approx \{U(\vec{r}_c) - \mathcal{E}_0\} \Delta$$

Mais contrairement au modèle de l'ion rigide, qui suppose que chaque cellule contient exactement le *seul électron* avec lequel elle interagit, on tient compte ici de la redistribution de la charge électronique dans le réseau déformé.

Le déplacement des charges domine la perturbation dans la limite **des grandes longueurs d'onde** : il en résulte que le potentiel de déformation dépend uniquement de la densité d'états $N(\mathcal{E}_f)$ au niveau de Fermi \mathcal{E}_f . $N(\mathcal{E}_f)d\mathcal{E}_f$ est le nombre d'électrons d'énergie comprise entre \mathcal{E}_f et $\mathcal{E}_f + d\mathcal{E}_f$, par unité de volume.

Dans un solide sous contrainte, outre la variation d'énergie due au changement de volume de chaque cellule, le niveau de Fermi varie. Pour conserver :

- le même nombre d'états qu'à l'intérieur de la surface de Fermi du réseau non déformé
- la neutralité de charge correspondant à la densité d'ions dans le réseau déformé
- un niveau de Fermi constant dans le cristal

le niveau de Fermi doit être modifié.

De plus le champ électrostatique de la nouvelle distribution de charges modifie le système de bandes (et donc le niveau de Fermi).

En tenant compte de toutes ces variations, l'énergie de perturbation résulte donc de la variation d'énergie électrostatique due au déplacement des charges électroniques et de la variation d'énergie due directement à la contrainte, écrantée par le déplacement des charges électroniques.

Dans la limite des grandes longueurs d'onde ($q \rightarrow 0$) et pour une surface de Fermi sphérique, soumise à une onde de compression pure, on trouve :

$$\mathfrak{I}(\vec{K}) \rightarrow i\mathbf{q} \cdot \mathbf{e}_q \frac{n}{N(\mathcal{E}_f)} \quad (14)$$

⇒ seuls les phonons longitudinaux diffusent les électrons

⇒ le facteur d'interférence → 1

⇒ le facteur d'énergie se réduit au rapport du nombre total d'électrons à la densité de niveaux d'énergie électroniques à la surface de Fermi. Il n'est pas déduit d'un modèle particulier comme dans les deux cas précédents (n est la densité d'électrons).

Pour une bande parabolique, on trouve :

$$\frac{n}{N(\mathcal{E}_f)} = \frac{2}{3} \mathcal{E}_f \quad (15)$$

4 - Modèle self-consistant de Bardeen¹³ (1937)

Ce modèle est une extension de l'approximation de l'ion rigide qui prend en compte les déplacements des électrons de conduction. C'est certainement le modèle le plus rigoureux.

Le résultat de Bardeen donne exactement le résultat obtenu avec le potentiel de déformation pour les grandes longueurs d'onde : il est donc en accord avec le potentiel de déformation pour des angles de diffusion petits. Il donne l'élément de matrice de la transition en fonction du module du vecteur de diffusion $|\vec{K}|$.

Nous admettons que le résultat peut s'écrire :

$$\mathfrak{S}(\vec{K}) = \mathbf{e}_q \cdot (\vec{k}' - \vec{k}) \xi(|\vec{k}' - \vec{k}|) \quad (16)$$

$\xi(|\vec{k}' - \vec{k}|)$ a les dimensions d'une énergie et contient un *paramètre d'écrantage*.

VII - Conséquences de l'expression de $\mathfrak{S}(\vec{K})$ pour les métaux et les semiconducteurs

1 - Interaction électron-phonon dans les métaux

On peut tirer des informations des calculs précédents.

a - les électrons interagissent essentiellement avec les phonons longitudinaux.

- les phonons transverses peuvent contribuer à l'interaction :

- par des processus Umklapp

- par des processus normaux **si la surface de Fermi n'est pas sphérique.**

b - l'importance de l'interaction est déterminée par le facteur d'énergie qui dépend

essentiellement de $\frac{n}{N(\mathcal{E}_\gamma)}$. Pour des électrons libres, sa valeur est $\frac{2}{3} \mathcal{E}_\gamma$.

- l'effet de la déformation initiale du réseau est fortement écranté.

c - L'élément de matrice varie avec l'angle de diffusion.

d - Le cas des métaux de transitions est particulièrement difficile.

2 - Interaction électron-phonon dans les semiconducteurs et les isolants

a - il n'y a pas d'écrantage par les porteurs libres, trop peu nombreux pour avoir un effet sur l'interaction électron-phonon.

b - la méthode du potentiel de déformation prend ici toute son importance. Les porteurs étant de faible énergie, les longueurs d'ondes mises en jeu dans les collisions entre électrons et phonons sont toujours grandes : l'approximation du potentiel de déformation est alors

phonons sont toujours grandes : l'approximation du potentiel de déformation est alors pleinement justifiée¹⁴.

La théorie a été étendue pour tenir compte de la complexité de la structure de bande dans certains semiconducteurs :

- l'effet des contraintes de cisaillement a été discuté par Brooks¹⁴, Dumke¹⁵ et par Herring et Vogt¹⁶

- dans le cas le plus général de surfaces d'énergie constante de forme quelconque, le déplacement du bas de bande dû à une contrainte dépend des six composantes du tenseur des contraintes.

Quand les vallées sont centrées sur les axes [100] ou [111] de la zone de Brillouin (cas de cristaux à symétrie cubique, germanium et silicium), le déplacement en énergie d'un ellipsoïde est dû à deux types de contraintes seulement :

- une dilatation pure (considérée précédemment)

- un cisaillement avec tension suivant l'axe de l'ellipsoïde et compression symétrique dans les deux directions perpendiculaires.

La symétrie permet alors d'exprimer toutes les constantes du potentiel de déformation en fonction de deux constantes \mathcal{E}_1 et \mathcal{E}_2 . On obtient un potentiel de déformation de la forme¹⁷ (réf. 6 p. 205):

$$\delta\mathcal{E} = \mathcal{E}_1\Delta + \mathcal{E}_2\left\{\hat{\mathbf{k}} \cdot \bar{\mathbf{Y}} \cdot \hat{\mathbf{k}} - \frac{1}{3}\Delta\right\} \quad (17)$$

$\bar{\mathbf{Y}}$ est le tenseur de déformation.

⇒ pour du germanium ou du silicium type-n, le vecteur unitaire $\hat{\mathbf{k}}$ a la direction de l'axe de symétrie de l'un des ellipsoïdes d'énergie constante¹⁷.

⇒ pour du germanium ou du silicium type-p¹⁷, les trous appartiennent à des bandes de masses différentes pour lesquelles les valeurs de \mathcal{E}_2 peuvent être différentes.

La différence des valeurs de \mathcal{E}_1 pour les électrons et les trous est de l'ordre de 30 eV pour le silicium et de 5eV pour le germanium.

Nous n'avons considéré ici que les modes acoustiques. Dans les semiconducteurs avec une structure type diamant ou blende, les deux atomes non-équivalents par maille élémentaire permettent l'existence de modes optiques, qui peuvent aussi interagir avec les électrons.

VIII -Interaction électron-phonon et supraconductivité

Dans un métal supraconducteur, il n'est plus possible de considérer chaque électron comme une particule indépendante : il y a des corrélations entre les électrons. La

supraconductivité résulte en effet d'une interaction électron-électron due à deux phénomènes de même ordre de grandeur en compétition¹⁸ :

- d'une part la répulsion coulombienne écrantée
- d'autre part à une attraction via les phonons.

Ceci est immédiatement visible dans le modèle du jellium¹⁸.

On peut traiter le système comme un ensemble de fermions indépendants, les **quasiparticules** :

- qui obéissent à une statistique de Fermi-Dirac avec un potentiel chimique nul
- et qui ont un spectre d'excitation bien connu¹⁹:

$$E^2(\vec{k}) = \varepsilon^2(\vec{k}) + \Delta^2(\vec{k})$$

une densité d'états :

$$D_s(E) = \pm D_n(0) \frac{E}{E^2 - \Delta^2} \quad + (-) \text{ si } E > \Delta \text{ (} E < -\Delta \text{)}$$

$$= 0 \text{ sinon}$$

$D_n(0)$ est la densité d'états dans l'état normal supposée constante au voisinage du gap Δ

Un calcul détaillé de l'interaction électron-phonon est donné par Eliashberg²⁰⁻²¹. Il définit en particulier une constante de couplage effective électron-phonon $\alpha^2(\omega)$, caractéristique de l'état initial $|\mathbf{k}\rangle$ de l'électron diffusé dans un état $|\mathbf{k}'\rangle$, et également de la fréquence de phonon ω , en intégrant le carré de l'élément de matrice de l'interaction sur les différentes directions de \mathbf{k}' . En introduisant également de la densité d'états des phonons, $F(\omega)$, il caractérise l'interaction électron-phonon par la quantité :

$$\alpha^2(\omega)F(\omega)$$

et par la grandeur sans dimension¹⁸ :

$$\lambda = 2 \int_0^{\infty} \frac{d\omega \alpha^2(\omega)F(\omega)}{\omega}$$

L'interaction électron-phonon est particulièrement importante dans les phénomènes hors d'équilibre. Les collisions électron-phonon se manifestent :

- dans la diffusion inélastique de quasiparticules par les phonons
- dans les processus de recombinaison de quasiparticules et de cassure de paires.

Les temps de vie des quasiparticules et des phonons dans les supraconducteurs ont été étudiés par S. B. Kaplan *et al*²² en termes de $\alpha^2(\omega)F(\omega)$ et de sa forme à basse fréquence $b\omega^2$.

Le calcul des probabilités de transition peut se faire par la théorie des perturbations et fait intervenir le carré de l'élément de matrice du potentiel perturbateur entre ces états. Du fait des corrélations entre électrons, le passage d'une excitation d'un état $|\mathbf{k} \uparrow\rangle$ à un état $|\mathbf{k}' \uparrow\rangle$, mettant en jeu des configurations initiales différentes, conduit à l'existence d'un facteur dit de cohérence dans l'expression de la probabilité de transition totale.

La diffusion d'une quasiparticule d'un état $|\mathbf{k}\sigma\rangle$ vers un état $|\mathbf{k}'\sigma\rangle$ avec absorption d'un phonon de vecteur d'onde \mathbf{q} ($\mathbf{q} = \bar{\mathbf{k}}' - \bar{\mathbf{k}}$) et d'énergie $\hbar\omega$ apportera une contribution à l'inverse du temps de vie de l'état $|\mathbf{k}\sigma\rangle$, donnée par une expression analogue à l'équation (6) :

$$P_{12}(t) = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle 1|H_{ep}|2\rangle|^2 \delta(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)$$

pondérée par le facteur de cohérence :

$$\frac{1}{2} \left\{ 1 + \frac{\varepsilon\varepsilon' - \Delta^2}{EE'} \right\}.$$

La création de deux quasiparticules par brisure d'une paire et absorption d'un phonon, et le processus inverse de recombinaison font intervenir le facteur de cohérence :

$$\frac{1}{2} \left\{ 1 - \frac{\varepsilon\varepsilon' - \Delta^2}{EE'} \right\}$$

Avec l'expression des facteurs de cohérence, et la connaissance des éléments de matrice de transition, on est à même de calculer les temps de vie :

- dans la diffusion inélastique de quasiparticules par les phonons
- dans les processus de recombinaison de quasiparticules et de cassure de paires.

Références

- 1 - W. V. HOUSTON, Z.Physik **48**,449 (1928) ; Phys.Rev., **34**, 279 1929)
- 2 - F. BLOCH, Z. Physik **52**, 555 (1928) ; **59**, 208 (1930)
- 3 - L. NORDHEIM, Ann. Physik **9**, 607 (1937)
- 4 - R. H. PARMENTER, Phys.Rev. **99**, 1767 (1955)
- 5 - J. BARDEEN and W. SHOCKLEY, Phys. Rev. **80**, 72 (1950)
- 6 - J. M. ZIMAN, *Electrons and Phonons*, Oxford (1960)
- 7 - B. DIU *et al*, *Physique Statistique*, Hermann (1989)
- 8 - J. CALLAWAY, *Quantum Theory of the Solid State* , Academic (1991) p.612
- 9 - L. J. SHAM and J. M. ZIMAN, *Solid State Physics*, Vol. **15**, (1963) p.223
- 10 - J.M. ZIMAN, *Principles of the Theory of Solids*, Cambridge (1964) p. 54
- 11 - L. I. SCHIFF, *Quantum Mechanics*, McGraw-Hill (1968)
- 12 - S.C. HUNTER and F. R. N. NABARRO, Proc. Roy. Soc.A **220**, 542, (1953)
- 13 - J. BARDEEN, Phys. Rev. **52**, 688 (1937)
- 14 - H. BROOKS, Adv. in Electronics **7**, 85 (1955)
- 15 - W. P. DUMKE, Phys. Rev. **101**, 531 (1956)
- 16 - C. HERRING and E. VOGT, Phys. Rev. **101**, 944 (1956)
- 17 - E. M. CONWELL, *Solid State Physics*, Suppl. **9**, Ed. F. Seitz, D. Turnbull et H. Ehrenreich, Academic, (1967) p.112
- 18 - R. M. WHITE and T. H. GEBALLE, *Solid State Physics*, Suppl.**15**, Ed. H. Ehrenreich, F. Seitz et D. Turnbull, Academic, (1979) p.100
- 19 - C. P. POOLE, H. A. FARACH, R. J. CRESWICK, dans *Superconductivity*, Academic, (1995)
- 20 - G. M. ELIASHBERG, Sov. Phys. JETP **11**, 696 (1960)
- 21 - M. CARBOTTE, Rev. Mod. Phys. **62**, 1027 (1990)
- 22 - S. B. KAPLAN *et al* , Phys. Rev. **14**, 4854 (1976)