

4- Concept de la masse effective :

Considérons un cristal soumis à une différence de potentiel, un électron de conduction du cristal est soumis d'une part à une force interne \vec{F}_i résultant du champ cristallin et d'autre part une force d'origine externe \vec{F}_{ext} résultant du champ électrique appliqué. L'équation de la dynamique s'écrit pour l'électron :

$$m_0 \vec{\gamma} = m_0 \frac{d\vec{V}}{dt} = \vec{F}_i + \vec{F}_{ext}$$

d'où ;

$$\vec{F}_{ext} = \vec{\gamma} \left(m_0 - \frac{F_i}{\gamma} \right) = m^* \vec{\gamma}$$

On introduit une particule fictive de masse m^* (seulement intervient la force extérieure).

La masse effective m^* contient en quelque sorte l'inertie additionnelle que donne à l'électron le potentiel cristallin (contient l'effet global du potentiel cristallin sur l'électron).

L'électron dans un état \vec{k} est représenté par un paquet d'onde centré sur la pulsation ω_k . La vitesse de cet électron est :

$$\vec{V}_g = \frac{d\omega}{dk} \vec{u} \Rightarrow V_g = \frac{1}{\hbar} \frac{dE}{dk}, \text{ avec } E = \hbar \omega_k$$

L'accélération de cet électron est alors donné par :

$$\gamma = \frac{dV}{dt} = \frac{1}{\hbar} \frac{d}{dt} \left(\frac{dE}{dk} \right) = \frac{1}{\hbar} \frac{d}{dk} \left(\frac{dE}{dt} \right)$$

En mécanique classique, si une particule est soumise à une force F pendant un intervalle de temps dt , la variation de son énergie cinétique est donnée par :

$$dE = \vec{F} \cdot \vec{V} dt \Rightarrow \frac{dE}{dt} = \vec{F} \cdot \vec{V}$$

On obtient,

$$\gamma = F \frac{1}{\hbar^2} \frac{d^2 E}{dk^2}$$

Ce qui s'écrit : $\vec{F} = m^* \vec{\gamma}$,

avec,

$$m^* = \frac{\hbar^2}{\frac{d^2 E}{dk^2}}$$

¹ Le paquet d'ondes est constitué par la superposition d'ondes de longueurs d'onde différentes centrée sur une valeur particulière de $\lambda = \lambda_0$.

La masse effective des électrons apparaît donc comme inversement proportionnelle à la dérivée seconde de la courbe de dispersion $E(k)$, c'est-à-dire à la courbure des bandes d'énergies dans l'espace des k .

Dans le cas d'un cristal tridimensionnels, les résultats se compliquent, la masse effective devient un tenseur :

$$\left(\frac{1}{m^*}\right)_{ij} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E(k)}{\partial k_j \partial k_i}$$

Soit explicitement ;

$$\frac{1}{m^*} = \frac{1}{\hbar^2} \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 E}{\partial k_x^2} & \frac{\partial^2 E}{\partial k_x \partial k_y} & \frac{\partial^2 E}{\partial k_x \partial k_z} \\ \frac{\partial^2 E}{\partial k_y \partial k_x} & \frac{\partial^2 E}{\partial k_y^2} & \frac{\partial^2 E}{\partial k_y \partial k_z} \\ \frac{\partial^2 E}{\partial k_z \partial k_x} & \frac{\partial^2 E}{\partial k_z \partial k_y} & \frac{\partial^2 E}{\partial k_z^2} \end{pmatrix}$$

Ce concept de masse effective est très utile puisqu'il permet de traiter la dynamique de l'électron quasi-libre dans un cristal en utilisant les lois de la mécanique classiques, à condition de remplacer la masse au repos de l'électron par sa masse effective. On peut interpréter cette grandeur comme représentant toutes les interactions de l'électron avec son environnement cristallin. On notera que, alors que la vitesse de groupe était proportionnelle à la **pente** de la courbe $E(k)$, la masse effective est inversement proportionnelle à la **courbure** de cette bande. Ainsi,

- ✓ $m^* < 0$ au voisinage d'un maximum de $E(k)$,
- ✓ $m^* > 0$ au voisinage d'un minimum de $E(k)$.

Autrement dit, dans un cristal, l'accélération de l'électron n'est pas forcément colinéaire à la force appliquée, et peut même être de sens opposé.

Remarque :

En général, on exprime la masse effective m^* d'un porteur en fonction de la masse m_e ($\approx 9.1 \cdot 10^{-31}$ kg) de l'électron.

Ex : Pour le GaAs, la masse effective de l'électron vaut : $m^* = 0.067 m_e$