

Titre : Conduction électrique dans les solides

Présentée par :

Rapport écrit par :

Correcteur :

Date : 13/12/2019

Bibliographie de la leçon :

Titre	Auteurs	Éditeur	Année
Physique des solides (pour une grande partie de la leçon)	Ashcroft et Mermin		
Physique du solide (pour la fin)	Kittel		
Dictionnaire de physique, voir refs plus bas			

Plan détaillé

Niveau L3

Prérequis

- Mécanique classique
- Électromagnétisme
- Statistiques quantiques

Message

Bibliographie

- [1] Neil ASHCROFT et David MERMIN. *Physique des solides*. EDP Sciences, 2002.
- [2] Bernard DIU et al. *Physique statistique*. Editions Hermann, 1989.
- [3] André GUINIER, Étienne GUYON, Jean MATRICON et al. « Propriétés électroniques des solides ». In : *Bulletin de l'union des physiciens* 550 (1972).
- [4] Charles KITTEL. *Physique de l'état solide, 7ème édition*. Dunod, 2005.

Prerequis supplementaires :

- loi d'ohm locale
- statistique boltzman, fermi-dirac, equipartition, Principe de Pauli,
- Mcanique quantique : solution pour électron libre. électronvolt
- PFD + force frottement fluide + complexes
- espace reciproque

[5] On peut aussi regarder le cours de Jeremy sur les moteurs p. 4-6

[6] MP/MP* dunod tout en un pour théorème equipartition (ou TD de jules)

http://bupdoc.udppc.asso.fr/consultation/article-bup.php?ID_fiche=14164

[7] Dictionnaire de physique

Intro On s'intéresse à la conductivité électrique, capacité d'un matériau à conduire l'électricité. Cette propriété varie beaucoup de solide à solide. Montrer à l'écran un slide avec différentes conductivités. Comment peut-on comprendre cette diversité ?.

1 Description classique : modèle de Drude

1.1 Hypothèses du modèle

- Hypothèses et approximations : [1] p 4
 - On ne s'intéressera qu'à la contribution des électrons : les ions sont supposés fixes, car leur masse est largement supérieure.
 - **électrons libres** : on néglige les interactions électron-ion.
 - **électrons indépendants** : on néglige les interactions des électrons entre eux entre deux collisions.
 - **temps de relaxation** : temps τ entre les collisions (on ne dit pas sur quoi), indépendant de la position et de la vitesse de l'électron. On peut le ramener à une force de frottements fluides.
- ODG de la densité électronique n . [1] p 5
- Donner l'équation du mouvement, remonter au résultat en régime stationnaire.

On commence par s'intéresser aux métaux, un des conducteurs le plus connus. En 1897 J.J. Thompson découvre l'électron ce qui a conduit à P. Drude à proposer un modèle de conduction dans les métaux en modélisant les électrons de valence du métal comme un « gaz ».

1.1

Modèle utilise l'approche cinétique des gaz parfait appliqué au « gaz d'électrons ».

Hypothèse supplémentaires :

- collision instantanées qui changent la vitesse de manière abrupte des électrons de valence.
- équilibre établi uniquement par le biais des collisions (notamment équilibre thermique).
- Quand on présente les chocs, **introduire le libre parcours moyen et la vitesse moyenne aussi, ça servira par la suite.**

Lire [1] p. 7 point 3 pour l'hypothèse des collisions pour les questions.

On ne considère aucun champ magnétique pour le moment. **Suivre [5] p. 5** pour établir le PFD à l'électron en énonçant les hypothèses pour le faire (ref galileen, champ E donc force de lorentz).

du réseau cristallin, en s'inspirant de la théorie cinétique des gaz. On ne considère aucun champ magnétique pour le moment. On note τ le temps de libre parcours moyen des électrons entre deux collisions avec des ions du réseau métallique ou des défauts. C'est donc le temps typique d'interaction entre le gaz d'électrons et son support, de l'ordre de 10^{-14} s. Si on étudie le comportement des électrons libres, de masse m , soumis à un champ électrique \vec{E} en régime sinusoïdal, dans le référentiel du conducteur, le bilan de ces déplacements sur une échelle mésoscopique, permet d'aboutir à une équation différentielle sur la vitesse moyenne \vec{u} du fluide électronique dans le métal :

$$\frac{d\vec{u}}{dt} = -\frac{e}{m}\vec{E} - \frac{\vec{u}}{\tau} \quad (1.1)$$

Suivre plutôt l'idée de Hugo :

Remarques

Comment écrire l'équation du mouvement pour le modèle de Drude?

- L'équation du mouvement pour un électron, entre deux collisions, est

$$m \frac{d\vec{v}}{dt} = -e\vec{E}.$$

- On peut montrer ([1] p 12) que si la probabilité de choc est de dt/τ , la vitesse moyenne $\langle \vec{v} \rangle$ vérifie l'équation

$$m \frac{d\langle \vec{v} \rangle}{dt} = -e\vec{E} - \frac{m}{\tau} \langle \vec{v} \rangle.$$

Cependant cette formule est un peu plus longue à démontrer, et seul le régime stationnaire est intéressant ici.

- On peut donc plutôt dire que la vitesse entre deux chocs vaut, par intégration, $\vec{v}(t) = -et\vec{E}/m$. En moyenne, le temps entre deux chocs est τ , donc la vitesse moyenne est atteinte lorsque $t = \tau$, soit

$$\langle \vec{v} \rangle = -\frac{e\tau}{m}\vec{E}$$

La démonstration de ceci est faite dans [1] p. 12-13 mais c'est des maths pour rien.

Donner la vitesse moyenne en régime permanent comme fait ci-dessus, ceci est expliqué [1] p.8.

1.2 Résultats

— Conductivité en courant continu :

$$\sigma = \frac{ne\tau}{m}$$

[1] p 8

— Ordres de grandeur de τ

[1] p 11

ATTENTION LE e EST AU CARRÉ DANS LA CONDUCTIVITÉ

Utiliser la loi d'ohm en pre-requis directement $\mathbf{j} = \sigma \mathbf{E}$ en vecteur et $J = n \cdot q \cdot v_{\text{moy}}$ en regime permanent. Avec n la densité électronique dans le métal. Cette densité est de l'ordre de 10^{29} électrons libres par m^3 .

Vérifions nos résultats expérimentalement, on se place à T_{amb} et on veut calculer la conductivité. On commence par estimer τ : On suppose que les collisions sont dues aux ions métalliques.

Faire calcul d'ordre de grandeur de conductivité du métal à T_{amb} . Pour cela on regarde τ dans un premier temps.

Dans notre modèle v_{moy} proportionnel à $\sqrt{k_B T/m}$ d'après le théorème de l'équipartition. (on a le droit car on se place à l'éq thermodynamique pour un système en contact avec un thermostat à T) [*peut être fermé aussi mais ne pas le dire*].

Ensuite on regarde la conductivité du fer et de l'argent, bons ordres de grandeur ! (sur slide).

Rq : le succès du modèle repose sur l'explication de la dépendance de la conductivité thermique des métaux [1] p. 23-28 les lire en diagonal au cas où. Ne pas rentrer en détail mais c'est important de le souligner car on va critiquer ce modèle juste après.

1.3 Limites du modèle

— Libre parcours moyen ℓ constant (par l'expérience), vitesse moyenne v en \sqrt{T} : on a $\tau = \ell / v \propto 1/\sqrt{T}$.

[3] p 291

— On observe plutôt $\sigma \propto 1/T$.

— On peut évaluer ℓ expérimentalement : il atteint facilement 100, c'est bien plus grand que la distance entre les ions ! Ce résultat est peu réaliste étant donné le modèle de Drude : imaginons un être humain qui court dans une forêt, la distance typique entre deux collisions sera la distance entre deux arbres. Ce modèle nous donnerait donc envie de dire que les électrons collisionnent sur les ions, ce qui n'est apparemment pas le cas. Et si on corrige le libre parcours moyen sans changer la vitesse, on n'a plus le bon τ donc plus le bon σ !

Transition : Cette description classique du gaz d'électrons n'explique pas vraiment les observations. Pour aller plus loin, on prend en compte les statistiques quantiques.

On regarde le modèle plus en détail. Ex. variation de la conductivité en fonction de T . On constate variation en $1/T$ expérimentalement ! alors que nous on est en $1/T$ (sic).

- Dépendance de la température, comment varie σ en fonction de T ? [3] p. 291. Monter les résultats sur slide, proportionnel à T . problème.

- D'où vient le problème ? Drude a eu de la chance et trouva des valeurs correctes à T ambiante, par contre à faible T on commence à avoir des problèmes ! Montrer slide avec T relaxation (τ) qui est toujours du même ordre de grandeur ! Ceci implique que le libre parcours moyen à basse T est plus important que la distance interatomique.

En fait Drude avait la bonne intuition mais a fait une double erreur qui se compense sur v et sur l . Il faut traiter le problème d'un point de vue quantique.

Manip possible: Mesure de la conductivité électrique d'une barre de cuivre en fonction de la température, vérification de la loi de Matthiessen. Remarque : la loi de Matthiessen est en désaccord avec le modèle de Drude, car en réalité la dépendance de la conductivité en T est due à la présence d'impuretés et de phonons. A voir si on la laisse il faudrait avoir la référence de la manip.

t = 10 min, si on est court éviter de parler du double erreur et passer vite sur le temps de relaxation.

2 Modèle de Sommerfeld : gaz parfait de fermions

2.1 Description des états électroniques

- Conditions aux limites périodiques, quantification. [1] p 36
- Rappel de la distribution de Fermi-Dirac. [1] p 47
- Sphère de Fermi, calcul du vecteur d'onde de Fermi si on est à température nulle. Calcul de T_F , v_F (très élevée alors qu'on s'est placé à $T = 0$!). Ordres de grandeur. En fait on a bien fait de supposer T nulle car $T \ll T_F$ et le gaz de fermions se comporte comme s'il était à température nulle! [2] p 838, [1] p 40

193

47 Mécanismes de la conduction électrique dans les solides.

- Nouveau libre parcours moyen, en utilisant la vitesse de Fermi comme vitesse moyenne : on atteint facilement les centaines d'angströms, ce qui correspond à l'expérience, et à des collisions sur des impuretés. [1] p 60

On ajoute comme hypothèse que les électrons suivent une statistique quantique, celle de fermi-dirac. **ON NE PARLE PAS ENCORE DE LA TEMPERATURE.**

Hypothèse : les électrons sont des objets quantiques et obéissent à la distribution de fermi dirac et non pas la distribution de boltzman.

- Hypothèse électrons indépendants \Rightarrow pas d'interactions entre électrons, il suffit d'étudier les niveaux d'énergie d'un seul électron dans le solide de volume V , ensuite on les remplit en suivant le pp d'exclusion de Pauli [1] p.36. [7] pour énoncer le pp.

Pour des raisons pratiques on suppose que le volume est un cube de longueur $L = \sqrt[3]{V}$

Électron libre : Pour trouver les niveaux d'énergie on écrit schrodinger stationnaire (prerequis), pour résoudre il nous faut condition aux limites. Ecrire l'équation. (si pas le temps oublier équation t donner juste les solutions et passer rapidement la quantification)

Donner directement la forme du résultat eq. 2.6 [1] p. 37, avec l'énergie associée de l'électron libre.

Voir [1] p. 36-37 pour explication : en gros on ne s'intéresse pas à ce qui se passe proche de la surface du métal. On enlève mathématiquement la surface en faisant comme-ci un électron qui arrive à un bout du crystal re-rentre dans celui-ci dans la face opposée.

Conditions aux limites de Born-Von Karman, les écrire au tableau [1] p. 37.

Ecrire au tableau les conséquences de ces conditions aux limites [1] p. 38 2.15 et 2.16. Nous venons de quantifier le vecteur d'onde k et par conséquent l'énergie. Il ne reste plus qu'à déterminer le nombre de niveau d'énergie que peut prendre un électron dans le volume V . Ces niveaux sont liés aux états du système, que nous remplirons ensuite en suivant le principe de Pauli (à énoncer).

On se place à $T = 0$, alors les électrons du metal sont dans leur état fondamental.

On appelle le niveau d'énergie rempli le plus élevée le niveau de fermi E_f , on peut ainsi introduire le vecteur d'onde de fermi k_f . Et la vitesse de fermi v_f . [4] p. 135 [1] p. 41.

Rq : nous avons introduit l'énergie de fermi, le vecteur d'onde de fermi et la vitesse de fermi de façon naturelle du moment où nous avons fait appel au pp d'exclusion de Pauli. Il nous reste plus qu'à relier le tout avec la physique et leur donner un sens, pour cela on fait le dénombrement du nombre d'états qu'on peut aussi relier au nombre d'électrons pour donner des valeurs à ces grandeurs.

Or ces paramètres sont reliées à la valeur maximale k_f que peut prendre le vecteur d'onde de fermi. Nous allons relier cette valeur aux nombre d'électrons dans le métal N avec le principe de Pauli. En effet, on sait que à chaque valeur possible k , on peut associer deux électrons de spin opposées.

Combien de valeurs peut prendre k ? On se place dans l'espace de k et on étudie le volume de la sphère de rayon k_f . On divise par le volume que prend un état possible du système ([1] p. 39-40, arriver au résultat 2.19). Puis multiplier par 2 à cause du spin (eq 2.20). On a un slide qui montre le niveau de fermi.

Relier le tout à la densité électronique. Donner des ODG :

- Pour les unités on utilise l'électronvolt

Rayon de Bohr (a_0) : $5 \cdot 10^{-11}$ m

$$a_0 = \frac{\hbar}{\alpha m_e c} = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{m_e e^2}$$

Rappel $n \sim 10^{29}$ e-/m³.

$k_f \sim 10^{-10}$ m⁻¹ (c.f. eq 2.21 dans [1] p 40)

$E_f \sim (e^2/2 \cdot a_0) \cdot (k_f \cdot a_0)^2 \sim 13,6 \cdot 1 \sim 13,6$ eV (ne pas donner rayon de Bohr juste le résultat de l'ODG)

$v_f \sim (\hbar/m_e) \cdot k_f \sim 10^6$ m/s (1000 km par seconde) on commence à se rapprocher de c !

On est à très basse T ($T \sim 0$). Libre parcours moyen devrait être ~ 100 Å. Calcul du libre parcours moyen en utilisant v_f : $l = 10^{-14} \cdot 10^6 \sim 10$ nM donc mieux et de l'ordre de grandeur attendu.

Or hypothèse de basse T !! que ce passe t'il à T amb ?

B) Distribution des électrons en fonction de T.

Hyp, e- suivent distribution de fermi-dirac. Il vaut quoi le potentiel chimique ? à T = 0, nous avons rangé les électrons 2 à 2 dans chaque niveau jusqu'au niveau de Fermi qui correspond à l'énergie de fermi. Il n'y a plus aucun électron à des énergies supérieures ! Donc $\mu = E_f$ (discontinuité de la marche). [4] p. 136. (slide)

Si on augmente T on donne de l'énergie aux électrons (agitation thermique), on compare cette énergie à E_f :

- On compare 13,6 eV v/s 0.025eV. C'est négligeable, à T ambiante tout ce passe comme si on était T = 0, finalement on peut s'intéresser que aux électrons proches du niveau de fermi !

Si on a le temps on peut définir la température de fermi $T_f = E_f/k_B$, pour comparer températures et non énergies. Tant que T ne se rapproche pas de T_f on peut s'intéresser que à ce qui ce passe au niveau de fermi seulement.

Rq T_f métaux $\sim 10^4$ -5, le tungstène métal avec le plus haut point de fusion $T_f \sim 3695 \sim 3700$ K. On est larges.

Rq2. Si $T \gg T_f$ on retrouve distribution de dirac (ne pas le dire).

Donc finalement notre étude à T = 0 est valable.

C) Conduction électrique

- Sphère de Fermi, déplacement lorsqu'on applique un champ \vec{E} . [4] p 144
- **En moyenne** (car on considère tous les électrons à la fois), le temps entre deux collisions est τ , et la sphère se décale donc de $\delta \vec{k} = -e \vec{E} \tau / \hbar$, ce qui permet de remonter à $\delta \vec{v}$ puis σ .
- Noter que désormais τ est le temps entre deux collisions *sur les défauts*!
- Défauts du modèle des électrons libres : essentiellement, il ne permet pas de prévoir pourquoi certains matériaux sont des métaux, et d'autres des isolants ou des semi-conducteurs. [1] p 65

Transition : On réfléchit aux hypothèses à remettre en cause : essentiellement l'approximation des électrons libres.

Insister sur $p = \hbar k$

Slide sur la sphère de fermi, centrée en $k = 0$ donc en moyenne $p = 0$ si on n'a pas de champ extérieur, pas de mouvement d'ensemble des électrons.

O ajoute champ E, PFD pour un électron du metal dans R galileen.

$$\hbar \frac{d\mathbf{k}}{dt} = -e \left(\mathbf{E} \cdot \right.$$

Si on intègre à champ constant, on trouve :

$$\mathbf{k}(t) - \mathbf{k}(0) = -e\mathbf{E}t/\hbar.$$

est appliqué à l'instant $t = 0$ au gaz d'électrons
à l'origine de l'espace \mathbf{k} , à l'instant t , la sphère

$$\delta\mathbf{k} = -e\mathbf{E}t/\hbar.$$

Tous les électrons voient leur vecteur \mathbf{k} déplacé de $\delta\mathbf{k}$ (et donc leur impulsion aussi). Or il y a des collisions à $t = \tau$, donc en moyenne on a déplacement de la sphère de Fermi de :

$$\delta\vec{k} = -e\vec{E}\tau/\hbar,$$

On peut remonter alors à v , j et σ comme fait dans [4] p. 145. On retrouve même conductivité que avec Drude mais cette fois-ci avec les bonnes valeurs.

t = 30 min grand max

t = 40 min

2) Structure de bande

On rajoute au modèle la condition de périodicité de la maille cristalline, qui doit donc se retrouver dans une invariance du hamiltonien par translation selon les vecteurs décrivant la maille \rightarrow « états de Bloch »

Cette invariance a pour conséquence l'apparition d'une structure de bande avec des régions « interdites », les gaps. On a alors une explication de la différence entre matériaux conducteurs et isolants et semi-conducteurs (bande de valence remplie ou non, bande de conduction accessible à des énergies de l'ordre de l'eV ou non).

Plus de temps...

Questions posées par l'enseignant

Dans le modèle du gaz d'e- libres, qu'est-ce qui cause les collisions ?

→ Dans le modèle de Drude, on pourrait penser aux ions, mais en fait se sont les défauts dans la maille cristalline et les phonons qui donnent l'échelle des collisions

Autres questions possibles :

-quelle est la dépendance en température de la conductivité d'un métal, d'un semiconducteur (attention dans le cas du semi-conducteur, cela dépend du régime de température cf ...). Quelle est l'origine de cette dépendance en température (phonons dans un métal, variation du nombre de porteurs dans un semi-conducteur en régime intrinsèque).

-qu'est ce que la mobilité ? Comment peut on la mesurer ? Comment mesurer la densité de porteurs dans un conducteur ?

-qu'est ce que le dopage ?

-quelle est la valeur du gap du Silicium ?

-qu'est ce qu'un trou dans un semi-conducteur ?

Commentaires donnés par l'enseignant

Pas important de redémontrer le théorème de Bloch, en rester à une description phénoménologique.

Donner des ordres de grandeur des énergies de gaps

Donner une définition d'un métal en termes de leur énergie de Fermi (schéma explicatif de la distribution de Fermi-Dirac) → seuls les e- ayant $E \sim E_f$ participent à la conduction

Partie réservée au correcteur

Avis général sur la leçon (plan, contenu, etc.)

Le plan de la leçon convenait mais le contenu n'était pas adapté à la durée de la leçon de physique. Le contenu était beaucoup trop détaillé sur la partie du traitement quantique : théorème de Bloch, structure de bande.... Il n'est pas possible dans le temps de la leçon de faire un exposé détaillé de ces notions qui occupent plusieurs heures d'un cours de physique des solides.

Je conserverais un plan en deux parties avec une première partie sur une approche classique suivant Drude. Avant de décrire le modèle de Drude, il est important d'introduire la notion de conductivité qui permet de décrire le transport localement à la différence de la loi d'Ohm $U=RI$ qui décrit le conducteur globalement.

En ce qui concerne la partie Drude, deux solutions sont possibles. Dans l'approche de Drude lui-même, ce sont les collisions avec les atomes du solide qui sont à l'origine de la résistivité des conducteurs. L'ordre de grandeur en considérant la vitesse moyenne d'un gaz parfait classique d'électrons et les temps caractéristiques de collisions est compatible avec la distance interatomique. Le traitement quantique montre en fait que les électrons ne subissent pas de collisions dans cristal périodique parfait. Les collisions proviennent des impuretés et des défauts du réseau ainsi que des vibrations des atomes (phonons). Le libre parcours moyen est en fait plus grand que celui obtenu par Drude car le gaz d'électrons n'est pas un gaz parfait classique mais un gaz de Fermions dégénéré (régime $T \ll T_F$ la température de Fermi). La vitesse des électrons (vitesse de Fermi) est donc plus élevée que le résultat du gaz parfait classique et le libre parcours moyen plus grand pour un temps de collision donné. Je suggère de faire une présentation qui suit le cheminement historique c'est-à-dire en présentant dans la partie 1 ce que Drude croyait correct. Puis de présenter le modèle quantique et de revenir sur Drude en en donnant la compréhension moderne (collisions avec impuretés, défauts et phonons) d'électrons se déplaçant à la vitesse de Fermi.

Pour la partie quantique, il faut privilégier des explications et une présentation sans calculs et sans faire un cours de physique des solides (pas le temps). On peut commencer par parler de théorie quantique pour décrire la structure électronique des atomes. Comment les niveaux d'énergie sont remplis par les électrons en appliquant le principe d'exclusion de Pauli. Puis passer à la description de la théorie quantique des solides par Bloch vers 1930. Les niveaux d'énergie d'un solide forment des bandes, leur remplissage obéit aux mêmes règles que pour un atome. Plusieurs solutions sont possibles, soit le dernier niveau occupé est dans une bande à demi-remplie et on a un métal (les électrons peuvent être mis en mouvement par une excitation aussi faible que l'on souhaite), soit on n'a que des bandes complètement remplies ou vides et on a un isolant ou un semiconducteur. Parler ensuite de distribution de Fermi, d'énergie de Fermi et de surface/ sphère de Fermi. Expliquer que dans un champ électrique nul, la vitesse moyenne du gaz d'électrons est nulle, en présence d'un champ électrique, on a un déplacement de la surface de Fermi entraînant une vitesse moyenne non-nulle (cf page 141 Kittel par exemple). Parler également de semi-conducteurs et donner des variations de résistivité/conductivité des métaux/semi-conducteurs en fonction de la température.

Notions fondamentales à aborder, secondaires, délicates

Notions fondamentales :

-approche locale du transport électrique : notion de conductivité, résistivité et lien avec un modèle microscopique : temps de collision, mobilité.

-bandes d'énergie dans un solide, différence entre métal, isolant et semi-conducteur. Donner des ordres de grandeurs de gap pour différents matériaux (comme Silicium, diamant).

-Un métal peut être décrit comme un gaz parfait de fermions dégénéré. Montrer la distribution de Fermi Dirac, donner des ordres de grandeur de la température de Fermi et de la vitesse de Fermi.

-Qu'est ce qui limite le transport dans un métal : les collisions avec les impuretés et les défauts ainsi qu'avec les phonons. La dépendance de la résistivité avec la température est reliée aux collisions avec les phonons. Montrer des courbes de variation de résistivité/conductivité en fonction de la température (p 148 Kittel pour les métaux, p 127,128 129 Alloul, p565 Ashcroft et Mermin pour les semi-conducteurs).

-Dans un semiconducteur intrinsèque, la variation de la résistivité ou conductivité avec la température est reliée à la variation de la densité de porteur dans la bande de conduction et dans la bande de valence avec la température (variation exponentielle).

Notion secondaire :

-dopage des semi-conducteurs : la variation exponentielle du nombre de porteurs dans un semi-conducteur est obtenue dans le régime intrinsèque (pas de dopage par des impuretés ou par une électrode/grille électrostatique). En pratique, on peut contrôler le nombre de porteurs par dopage (impuretés= atomes donneurs ou accepteurs d'électrons ou bien avec des tensions appliquées à des électrodes). Ce phénomène est essentiel à l'électronique moderne.

Expériences possibles (en particulier pour l'agrégation docteur)

L'expérience présentée convient. Bien la discuter, présenter le schéma de l'expérience sur transparent. Expliquer brièvement pourquoi on fait une mesure 4 points.

Bibliographie conseillée

Kittel, Ashcroft et Mermin ou encore Physique des électrons dans les solides de Henri Alloul.