

## 6. TRANSPORT

Les propriétés de transport des solides telles que la conductivité électrique ou thermique et le pouvoir thermoélectrique sont des propriétés hors d'équilibre : le gaz de particules (électrons, phonons ) subit des forces d'entraînement provenant soit d'un champ électrique soit d'un gradient de température. Le cadre théorique pour traiter ces phénomènes est la physique statistique hors d'équilibre fondée par Boltzmann.

### 1. Conductivité électrique des métaux

L'électron étudié jusqu'à présent était censé se mouvoir dans le potentiel d'une périodicité parfaite d'un cristal idéal. En pratique, le potentiel n'est pas parfaitement périodique car les cristaux contiennent des défauts (lacunes, interstitiels, dislocations, ...) et, à température non nulle, les atomes vibrent autour de leur position d'équilibre. Il en résulte pour l'électron une série de collisions. Le mouvement de l'électron dans un métal en présence d'un champ électrique constant  $\mathbf{E}$  a été décrit au chapitre 3. En l'absence de collisions, la sphère de Fermi de l'espace  $\mathbf{k}$  est déplacée à vitesse constante. Si le champ est appliqué à l'instant  $t = 0$  au gaz d'électrons qui remplit la sphère de Fermi centrée à l'origine de l'espace  $\mathbf{k}$ , à l'instant  $t$ , la sphère est déplacée et son centre est en (cfr Eq. 3.5):

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

A cause des collisions des électrons avec les impuretés, les défauts du réseau et les phonons, la sphère déplacée peut être maintenue stationnaire dans un champ électrique. Si  $\tau$  décrit le temps moyen pendant lequel le champ agit librement sur les porteurs (temps moyen entre 2 collisions), le déplacement de la sphère de Fermi en régime continu est donné par

$$\delta\mathbf{k} = - \frac{e\mathbf{E}}{\hbar} \tau$$

Remarquons que l'effet du champ électrique sur le système global d'électrons ne se manifeste que par l'occupation d'un croissant initialement vide de la sphère de Fermi et par le dépeuplement d'un croissant initialement occupé (Fig.6.1a). Ce qui reste de la sphère n'a nullement été modifié par le champ électrique. Pour des champs électriques ordinaires, le centre de la sphère se stabilise en un point proche de l'origine par rapport au

rayon  $k_F$  de la sphère. En effet, utilisant pour le cuivre  $k_F \sim 10^8 \text{ cm}^{-1}$ ,  $\tau \sim 3 \cdot 10^{-14} \text{ s}$  (voir justification plus loin) et  $E = 20 \text{ mV/cm}$ , on obtient  $\delta k/k_F \sim 10^{-8}$ .

Dans la description semi-classique du transport électronique, on utilise la fonction de distribution hors d'équilibre  $f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t)$ . Celle-ci est telle que  $f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t) d^3\mathbf{r} d^3\mathbf{k}$  constitue le nombre de particules dans un volume  $d^3\mathbf{r}$  autour de  $\mathbf{r}$  dont le vecteur d'onde est centré dans un volume  $d^3\mathbf{k}$  autour de  $\mathbf{k}$ . Si la perturbation est supprimée à l'instant  $t = 0$ , les électrons vont progressivement retrouver leur distribution d'équilibre, c'est-à-dire la fonction de distribution de Fermi - Dirac

$$f^0(\epsilon, T) = \frac{1}{\exp [(\epsilon - \mu)/kT] + 1}$$

pour les électrons. Cette fonction de distribution à l'équilibre  $f^0$  est indépendante de  $\mathbf{r}$  car on suppose un gaz homogène. D'après la figure 6.1b, la distribution stationnaire résultant d'un champ électrique  $\mathbf{E}$  et incluant les effets des collisions (décrites par le temps de relaxation  $\tau$ ) peut être représentée par une distribution de Fermi - Dirac décalée de  $\frac{e\tau}{\hbar} \mathbf{E}$  de sa position d'équilibre dans l'espace des  $\mathbf{k}$ . On peut écrire :

$$f(\mathbf{k}) \approx f^0\left(\mathbf{k} + \frac{e\tau}{\hbar} \mathbf{E}\right)$$

En se limitant à un développement d'ordre 1 de  $f^0$  au point  $\mathbf{k} + \frac{e\tau}{\hbar} \mathbf{E}$  on obtient :

$$f(\mathbf{k}) \approx f^0(\mathbf{k}) + \frac{e\tau}{\hbar} \mathbf{E} \cdot \nabla_{\mathbf{k}} f^0(\mathbf{k}) \quad (6.1)$$

ce qui constitue une forme simplifiée de l'équation de Boltzmann.

Déduisons maintenant l'expression de la conductivité électrique. Puisque le nombre d'électrons par unité de volume compris dans un élément de volume  $d^3\mathbf{k}$  est  $\frac{f(\mathbf{k})}{4\pi^3} d^3\mathbf{k}$ , ils contribuent à la densité de courant d'une valeur  $d\mathbf{j} = \frac{-e}{4\pi^3} \mathbf{v}(\mathbf{k}) f(\mathbf{k}) d^3\mathbf{k}$ . Dès lors, la contribution de l'ensemble des électrons appartenant à la bande de conduction se met sous la forme :

$$\mathbf{j} = \frac{-e}{4\pi^3} \int \mathbf{v}(\mathbf{k}) f(\mathbf{k}) d^3\mathbf{k} \quad (6.2)$$

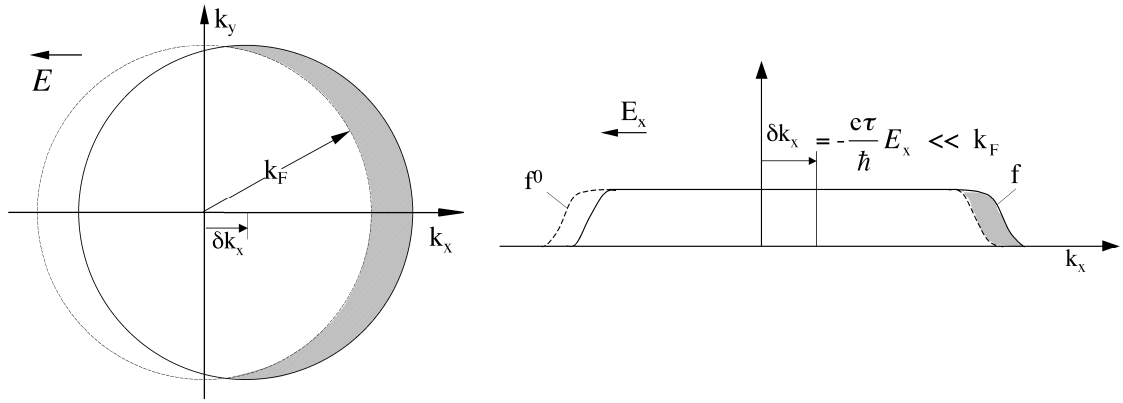


Figure 6.1 - Représentation schématique de l'effet d'un champ électrique  $E_x$  sur les états quantiques  $\mathbf{k}$  d'électrons libres (a) La sphère de Fermi de la distribution d'équilibre, centrée à l'origine, est déplacée d'une valeur  $\delta k_x = -e \tau E_x / \hbar$ . (b) La nouvelle fonction de distribution  $f$  diffère de la fonction de distribution à l'équilibre  $f^0$  uniquement au voisinage de la surface de Fermi.

Ce qui donne d'après (6.1) :

$$\mathbf{j} = \frac{-e}{4\pi^3} \int \mathbf{v}(\mathbf{k}) \left[ f^0(\mathbf{k}) + \frac{e\tau}{\hbar} \mathbf{E} \cdot \nabla_{\mathbf{k}} f^0(\mathbf{k}) \right] d^3\mathbf{k} \quad (6.3)$$

La fonction  $f^0$  ne contribue pas au courant puisque  $f^0(-\mathbf{k}) = f^0(\mathbf{k})$ . Pour un champ appliqué suivant  $x$ , la relation (6.3) devient:

$$j_x = \frac{-e^2}{4\pi^3} E_x \int v_x^2(\mathbf{k}) \tau(\mathbf{k}) \frac{\partial f^0}{\partial \varepsilon} d^3\mathbf{k} \quad (6.4)$$

puisque  $\frac{\partial f^0}{\partial k_x} = \frac{\partial f^0}{\partial \varepsilon} \hbar v_x$ .

Utilisant la loi d'Ohm  $j_x = \sigma E_x$ , on obtient l'expression de la conductivité électrique:

$$\sigma = \frac{-e^2}{4\pi^3} \int v_x^2(\mathbf{k}) \tau(\mathbf{k}) \frac{\partial f^0}{\partial \varepsilon} d^3\mathbf{k} \quad (6.5)$$

Dans la mesure où  $\tau$  ne dépend que de l'énergie et pour des électrons libres de masse  $m^*$  (bandes paraboliques:  $\varepsilon = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}$ ), l'intégration angulaire permet de remplacer  $v_x^2(\mathbf{k})$  par

$$\frac{1}{3} |\mathbf{v}(\mathbf{k})|^2 = \frac{2}{3} \frac{\varepsilon}{m^*} \text{ puisque } |\mathbf{v}(\mathbf{k})| = \frac{\hbar |\mathbf{k}|}{m^*}.$$

Dès lors:

$$\sigma = - \frac{2e^2 C}{3m^*} \int_0^\infty \frac{\partial f^0}{\partial \varepsilon} \tau(\varepsilon) \varepsilon^{3/2} d\varepsilon \quad (6.6)$$

$$\text{car } \frac{1}{4\pi^3} \int d^3\mathbf{k} = \int g(\varepsilon) d\varepsilon \text{ et } g(\varepsilon) = C \varepsilon^{1/2} \text{ avec } C = \frac{(2m^*)^{3/2}}{2\pi^2 \hbar^3} \text{ (cfr Eq.4.1)}$$

Dans le cas des métaux, la fonction de distribution de Fermi -Dirac change brusquement sur une bande étroite d'énergie de  $4kT$ . Elle est également symétrique autour du point  $(\varepsilon_F, f^0(\varepsilon_F) = 1/2)$ .

Par conséquent,

$$-\frac{\partial f^0}{\partial \varepsilon} \approx \delta(\varepsilon - \varepsilon_F)$$

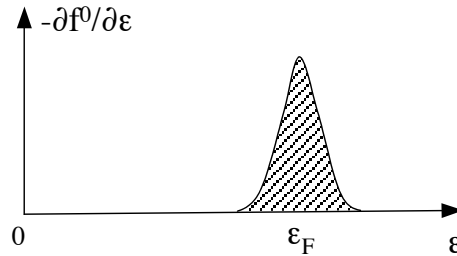


Figure 6.2 - Variation de la fonction  $-df^0/d\varepsilon$  au voisinage de l'énergie de Fermi

D'après (6.6), on obtient

$$\sigma = \frac{(2m^* \varepsilon_F)^{3/2}}{3\pi^2 \hbar^3} \frac{e^2 \tau(\varepsilon_F)}{m^*}$$

Puisque la densité électronique s'écrit

$$n = \frac{(4/3) \pi k_F^3}{4\pi^3} = \frac{(2m^* \varepsilon_F)^{3/2}}{3\pi^2 \hbar^3}$$

La *conductivité électrique* peut dès lors s'écrire sous la forme:

$$\sigma = \frac{n e^2 \tau(\varepsilon_F)}{m^*} \quad (6.7)$$

Bien que la densité électronique totale dans la bande de conduction figure dans l'expression (6.7), seul un petit nombre d'électrons effectifs, occupant les états au

voisinage du niveau de Fermi et animés d'une vitesse élevée (la vitesse de Fermi  $v_F = \hbar k_F / m^* \sim 10^8$  cm/s), est à l'origine du courant électrique appréciable dans un métal pour un champ électrique modéré. En exprimant  $\varepsilon_F$  en terme de densité électronique, on fait apparaître  $n$  dans la formule finale. Par ailleurs, seuls les électrons se trouvant à la surface de Fermi subissent des collisions. Ce dernier résultat s'explique facilement : l'électron doit passer d'un état occupé à un état inoccupé lors des collisions par les défauts et les phonons.

On peut estimer le *temps caractéristique de collision*  $\tau$  (appelé également *temps de relaxation*). Prenons l'exemple du cuivre. A température ambiante, on a  $\sigma \sim 6.5 \cdot 10^5$  ( $\Omega \cdot \text{cm}$ )<sup>-1</sup>,  $n \sim 8.5 \cdot 10^{22}$  cm<sup>-3</sup> et  $m \sim 9.1 \cdot 10^{-28}$  gr. On en déduit  $\tau \sim 3 \cdot 10^{-14}$  s. Il est possible d'obtenir des cristaux de cuivre tellement purs que leur conductivité à la température de l'hélium liquide (4.2K) est environ  $10^4$  fois celle à température ambiante; dans ces conditions,  $\tau \sim 3 \cdot 10^{-10}$  s à 4.2K.

Le *libre parcours moyen* entre 2 collisions  $\ell$  d'un électron de conduction est défini par

$$\ell = v_F \tau$$

où  $v_F$  est la vitesse de l'électron à la surface de Fermi. Utilisant  $v_F \sim 1.6 \cdot 10^8$  cm/s pour le cuivre, on obtient, à partir des valeurs du temps de relaxation reprises ci-dessus,  $\ell$  (300K)  $\sim 3 \cdot 10^{-6}$  cm et  $\ell$  (4.2K)  $\sim 0.03$  cm.

Le temps de relaxation étant un paramètre difficilement accessible expérimentalement, on préfère généralement utiliser une autre grandeur : la *mobilité*  $\mu$ . Dans ce cas, la relation (6.7) devient:

$$\sigma = n e \mu \quad (6.8)$$

où

$$\mu = \frac{e \tau (\varepsilon_F)}{m} \quad (6.9)$$

s'exprime en cm<sup>2</sup>/V.s . On voit que si on détermine  $n$  expérimentalement au moyen de l'effet Hall par exemple (cfr §3 de ce chapitre), une mesure de la *conductivité électrique* permettra de déduire la mobilité. Dans la plupart des métaux,  $\mu$  se situe entre 10 et 100 cm<sup>2</sup>/V.s à la température ambiante.

La *résistivité électrique*  $\rho$  est, par définition, l'inverse de la conductivité, d'où :

$$\rho = \frac{m^*}{n e^2 \tau (\varepsilon_F)} \quad (6.10)$$

La résistivité électrique est une propriété très "sensible" des solides. Comme le montre la figure 6.3, la résistivité électrique à température ambiante s'étale sur 24 ordres de grandeur ( $\rho \sim 10^{-6} \Omega\text{cm}$  pour les métaux à  $10^{18} \Omega\text{cm}$  pour les meilleurs isolants).

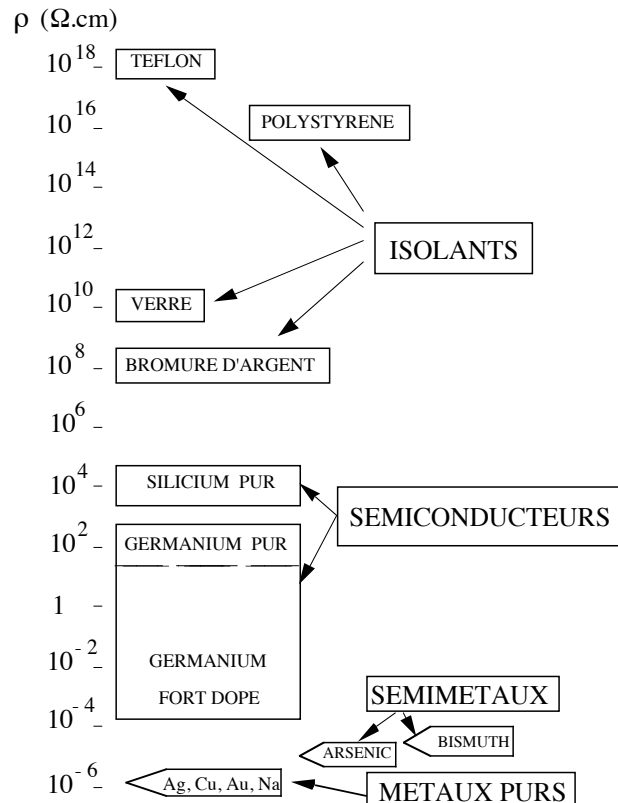


Figure 6.3 - Résistivité électrique à température ambiante de divers solides

### Remarque

On peut extraire l'expression (6.7) pour la conductivité par une approche simplifiée. L'accroissement de la quantité de mouvement pour chacun des électrons suite à l'application d'un champ électrique  $\mathbf{E}$  se traduit par un accroissement de la vitesse  $\delta\mathbf{v} = \hbar/m^* \delta\mathbf{k}$ . On peut dès lors définir une vitesse électronique moyenne, appelée vitesse de dérive  $\mathbf{v}_D$  qui n'est autre que  $\delta\mathbf{v}$  :

$$\mathbf{v}_D = - \frac{e\tau}{m^*} \mathbf{E} \quad (6.11)$$

La mobilité  $\mu$  apparaît ainsi comme la constante de proportionnalité entre la vitesse de dérive et le champ électrique externe. Notons également que  $v_D \ll v_F$ . Par conséquent, la densité de courant  $\mathbf{j}$  dans la direction du champ est

$$\mathbf{j} = -nev_D = \frac{ne^2\tau}{m^*} \mathbf{E} \quad (6.12)$$

où  $n$  est le nombre d'électrons de conduction par unité de volume. Utilisant la loi d'Ohm,  $\mathbf{j} = \sigma\mathbf{E}$ , on retrouve la relation (6.7).

## 2. Collisions électron-phonon et variation en température de la résistivité

D'après (6.7), la conductivité est proportionnelle à la densité d'électrons de conduction. Dans les métaux, la densité de porteurs  $n$  d'un métal est pratiquement indépendante de la température. La variation de la conductivité électrique avec la température est donc principalement due à la variation du temps de relaxation. On distingue essentiellement trois régimes pour les métaux:

- A très basse température, la conductivité est limitée par les impuretés et les défauts statiques du réseau cristallin (lacunes, dislocations, ...). Dans ce cas,  $\tau$  est indépendant de la température, donc également la conductivité.

- A relativement basse température ( $T \ll \theta_D$ ), c'est le domaine des collisions des électrons par les phonons. La fréquence de collision est proportionnelle au nombre de phonons qui varie en  $T^3$ . De plus, pour la conductivité, "l'efficacité" des collisions est pondérée par un facteur  $1 - \cos\theta$  où  $\theta$  est l'angle entre le vecteur d'onde de l'électron incident et celui de l'électron diffusé. Par conséquent, le temps de relaxation pour la conductivité peut s'écrire:  $\frac{1}{\tau} = \frac{1}{\tau(\theta)} (1 - \cos\theta)$  où  $\frac{1}{\tau(\theta)}$  est la fréquence des collisions pour un angle donné  $\theta$ ,

proportionnelle à  $T^3$ . La relation entre l'angle  $\theta$  et le vecteur d'onde du phonon,  $q$ , est :  $\sin \frac{\theta}{2} \sim \frac{q}{2k_F}$  (Fig. 6.4a). Lorsque  $T \ll \theta_D$ , les collisions électron - phonon sont des collisions à petit angle car  $q \ll k_F$ . On a donc :  $\frac{\theta}{2} \sim \frac{q}{2k_F}$  et

$1 - \cos\theta \sim 2 \sin^2 \frac{\theta}{2} \sim \frac{\theta^2}{2} \sim \frac{1}{2} \left( \frac{q}{2k_F} \right)^2$ . Pour les phonons thermiques en équilibre avec le réservoir,  $\hbar\omega = kT$  et  $\omega = v_s q$  où  $v_s$  est la vitesse du son. Donc :  $q = \frac{kT}{\hbar v_s}$  et

$1 - \cos\theta \sim T^2$ . En regroupant ces deux lois, on est conduit à l'expression d'une fréquence de collisions  $\tau^{-1} \sim T^5$  et finalement  $\sigma \sim T^{-5}$  ou  $\rho \sim T^5$ .

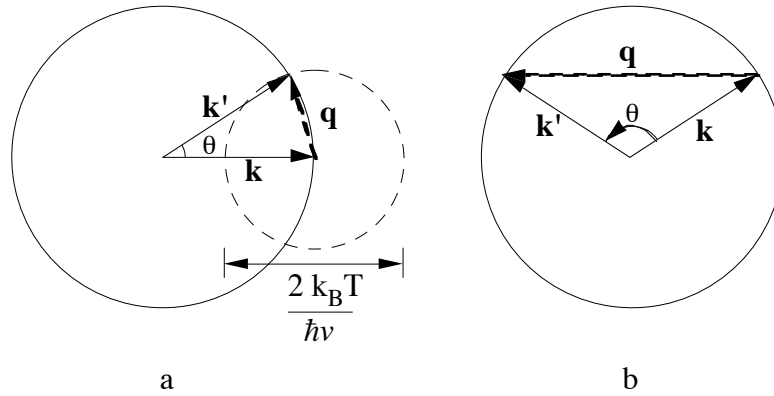


Figure 6.4 - Représentation schématique des collisions électron-phonon à petit angle (a) et à grand angle (b) dans le cas des métaux.

- A haute température ( $T > \theta_D$ ), le vecteur d'onde des phonons est égal au rayon de la sphère de Debye  $q_D$  qui est proche du vecteur d'onde au niveau de Fermi. Il en résulte des collisions à grand angle et le terme d'efficacité en  $1 - \cos \theta$  ne joue plus un rôle important (Fig. 6.4b). Le nombre de phonons varie comme  $T / \theta_D$  ce qui donne une fréquence de collisions  $\tau^{-1} \sim T$  et une loi  $\sigma \sim T^{-1}$  ou  $\rho \sim T^1$ .

Ainsi, la résistivité électrique augmente avec la température pour un métal. Ce n'est pas le cas des semi-conducteurs pour lesquels  $n$  croît rapidement avec la température, imposant ainsi une variation semblable pour  $\sigma$ . Expérimentalement, il est apparu que la résistivité totale  $\rho$  à une température donnée, peut se mettre sous la forme:

$$\rho(T) = \rho_r + \rho_i(T) \quad (6.13)$$

où  $\rho_r$  est la résistivité résiduelle due aux défauts et impuretés, indépendante de la température et  $\rho_i$  est la résistivité idéale due aux collisions électron - phonon. C'est la *loi de Matthiessen* (Fig. 6.5a). Cette loi découle du fait que les processus résistifs dus aux défauts et aux phonons interviennent de façon indépendante. Dans ce cas, la probabilité pour les électrons de subir une collision est la somme des probabilités associées aux différents processus de collisions et

$$1/\tau = 1/\tau_r + 1/\tau_i$$

On notera que contrairement à la résistivité résiduelle, la résistivité idéale est une propriété intrinsèque du solide conducteur considéré qui ne dépend généralement pas de la perfection cristalline du solide (Fig. 6.5b).



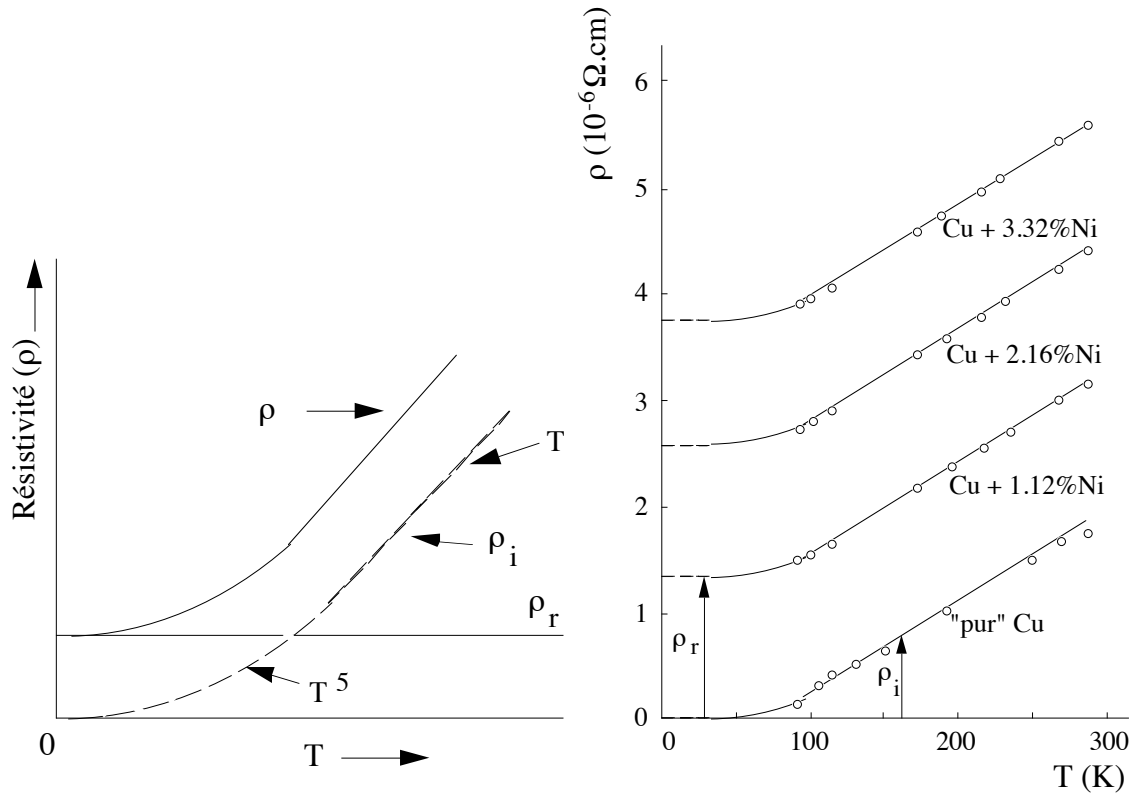


Figure 6.5 - Variation de la résistivité électrique d'un métal en fonction de la température.  
 (a) décomposition de la résistivité totale  $\rho$  en une composante résiduelle  $\rho_r$  et une composante idéale  $\rho_i$ ; (b) illustration de la loi de Matthiessen dans des alliages Cu-Ni.

Le rapport entre la résistivité à température ambiante  $\rho_{300\text{K}}$  et la résistivité à la température d'ébullition de l'hélium liquide à pression atmosphérique,  $\rho_{4.2\text{K}}$

$$\text{RRR} = \frac{\rho_{300\text{K}}}{\rho_{4.2\text{K}}}$$

où RRR est le "residual resistivity ratio" est souvent utilisé pour caractériser la perfection cristalline d'un échantillon. Le RRR peut largement dépasser  $10^3$  dans les métaux purs et est proche de l'unité dans les alliages.

Les diffusions par les défauts modifient le vecteur d'onde de l'électron sans changer son énergie: on parle de diffusion élastique. Au contraire, les diffusions électron - phonon sont inélastiques. Il faut en effet que l'énergie soit conservée lors de telles collisions. Ceci implique que  $\varepsilon(\mathbf{k}') - \varepsilon(\mathbf{k}) = \hbar \omega(\mathbf{q})$ . Egalement, la diffusion doit satisfaire la condition suivante (cfr Equ. 3.2)

$$\mathbf{k}' - \mathbf{k} = \mathbf{q} + \mathbf{G}$$

où  $\mathbf{G}$  est un vecteur du réseau réciproque. Pour rappel, l'expression ci-dessus s'apparente à une loi de conservation de la quantité de mouvement uniquement pour des électrons libres puisque dans ce cas  $\hbar\mathbf{k}$  est l'impulsion de l'électron. En réalité, l'énergie d'un phonon dans un métal est toujours négligeable par rapport à celle de l'électron ( $\epsilon_F \sim 5-10$  eV dans les métaux). En effet, l'énergie moyenne d'un phonon est de  $kT$  pour  $T \ll \theta_D$  et de  $k\theta_D$  pour  $T > \theta_D$  ce qui conduit typiquement à des valeurs maximales de  $\sim 25$  meV dans les métaux ( $\theta_D \sim 300K$ ).

### 3. Effet Hall et magnétorésistance

Afin de déterminer distinctement la densité de porteurs  $n$  et la mobilité  $\mu$  qui apparaissent dans l'expression de la conductivité  $\sigma = n e \mu$ , il convient généralement d'effectuer une autre mesure: celle de *l'effet Hall*. Le schéma du dispositif expérimental est montré à la figure 6.6. Un courant  $I_x$  circule dans le solide suivant  $x$  et un champ magnétique (induction magnétique  $\mathbf{B}$ ) est appliqué suivant  $z$ . A cause de la force de Lorentz, les électrons sont déviés par le champ magnétique dans une direction perpendiculaire au courant et au champ magnétique (c'est à dire suivant  $y$ ). Le circuit étant ouvert dans cette direction, il ne peut y avoir aucun courant. En fait, les électrons s'accumulent sur les côtés du solide jusqu'à ce qu'ils produisent une différence de potentiel  $V_H$  (tension de Hall) suffisante pour compenser la force de Lorentz et arrêter le flux de particules suivant cette direction.

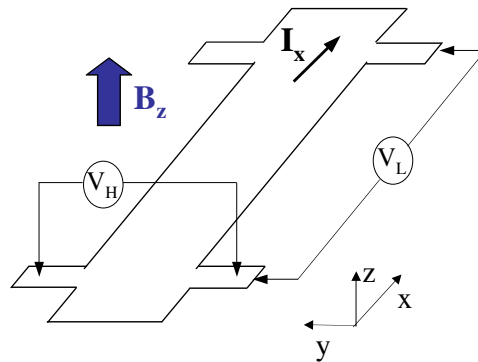


Figure 6.6 - Schéma de mesure de la magnétorésistance et de l'effet Hall.

A l'équilibre, on a donc

$$F_y = e (\mathbf{v} \wedge \mathbf{B})_y - e E_y = e v_x B_z - e E_y = 0$$

où  $E_y = \frac{V_H}{b}$  et  $b$  est la dimension du solide suivant l'axe  $y$ .

Si l'on suppose que le courant est exclusivement assuré par les électrons (métal ou semiconducteur de type n) on a ,  $j_x = - n e v_{dx}$  où  $v_{dx}$  est la vitesse de dérive (Eq. 6.12)

Par conséquent,

$$E_y = \frac{V_H}{b} = - \frac{1}{n e} j_x B_z = - \frac{1}{n e} \frac{i_x B_z}{b.d}$$

où  $i_x$  est le courant.

La quantité

$$R_H \equiv \frac{E_y}{j_x B_z} = - \frac{1}{n e} \quad (6.14)$$

est appelée la *constante de Hall*. Elle peut être déterminée expérimentalement à partir des mesures de  $V_H$ ,  $i_x$  et  $B_z$  en utilisant la relation

$$V_H = \frac{R_H i_x B_z}{d}$$

et conduit directement à la densité des porteurs de charge.

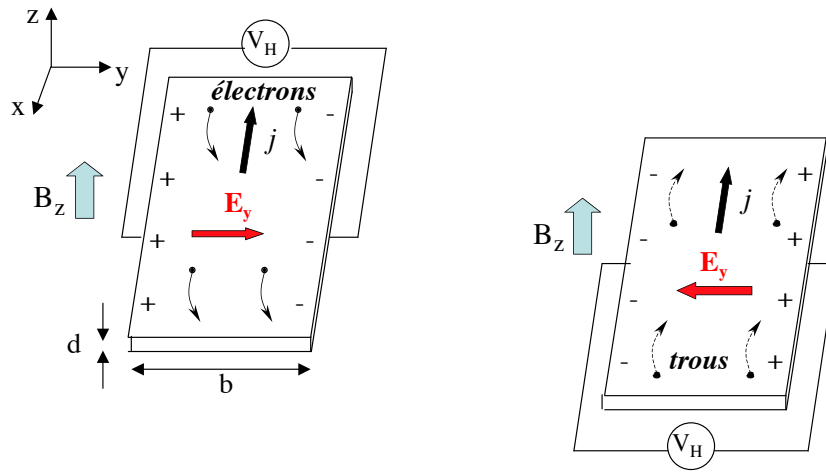


Figure 6.7 - Effet Hall pour une conduction par électrons ou par trous.

Dans les semiconducteurs, la conductivité est généralement assurée à la fois par des électrons (de densité  $n$  et de mobilité  $\mu_e$ ) et par des trous (de densité  $p$  et de mobilité  $\mu_t$ ), soit

$$\sigma = n \mu_e e + p \mu_t e$$

Dans cette expression,  $\mu_e = \frac{e \langle \tau_e \rangle}{m_e^*}$  est la mobilité des électrons et  $\mu_t = \frac{e \langle \tau_t \rangle}{m_t^*}$  celle des trous. Sous l'effet d'un champ magnétique extérieur, la figure 6.7 montre que les électrons et les trous sont déviés vers la même face du solide. Un calcul semblable à celui effectué ci-dessus conduit à la constante de Hall

$$R_H = \frac{p \mu_t^2 - n \mu_e^2}{e (p \mu_t + n \mu_e)^2} \quad (6.15)$$

Dans le cas où  $n \gg p$ , on retrouve l'expression (6.14)

Dans le cas où  $p \gg n$ , on a :

$$R_H = + \frac{1}{p e} \quad (6.16)$$

si bien que le signe de la tension de Hall (et également de la constante de Hall ) permet de déterminer le signe des charges des porteurs majoritaires dans un semiconducteur c'est à dire de vérifier s'il est de type n ou de type p. On notera cependant qu'une différence importante entre la mobilité des électrons et celle des trous peut compliquer l'interprétation des résultats.

L'application d'un champ magnétique extérieur modifie également la résistivité longitudinale. En effet, sous l'effet de la force de Lorentz, les trajectoires des électrons sont allongées parallèlement au champ électrique. Les électrons subissent alors plus de collisions avec les impuretés ou les phonons, d'où une augmentation de résistivité. La *magnétorésistance*, définie comme

$$\frac{\Delta \rho}{\rho} \equiv \frac{\rho(B) - \rho(B=0)}{\rho(B=0)} \quad (6.17)$$

est donc positive. La vitesse moyenne parallèle au champ électrique est moins affectée si les champs électrique et magnétique sont parallèles. La magnétorésistance longitudinale est donc, en général, plus faible que la magnétorésistance transverse. La magnétorésistance est d'autant plus élevée que la résistivité initiale  $\rho(B=0)$  est faible, c'est à dire que la température est basse.

#### 4. Conductivité thermique électronique

Au lieu d'appliquer un champ électrique  $\mathbf{E}$  et d'observer la densité de courant électrique  $\mathbf{j}$ , nous allons appliquer maintenant un gradient de température  $\nabla_{\mathbf{r}} T$  et observer le flux de chaleur qui en résulte. La mesure de la conductivité thermique s'effectue généralement dans des conditions de circuit ouvert ( $\mathbf{j} = \mathbf{0}$ ), empêchant tout flux net d'électrons dans une direction. Le courant thermique provient du fait que il y a plus d'électrons ayant des énergies plus élevées du "côté chaud" que du "côté froid" suite à la différence d'étalement de la fonction de distribution de Fermi-Dirac autour de  $\epsilon_F$  entre les régions chaudes et froides (fig. 6.8).

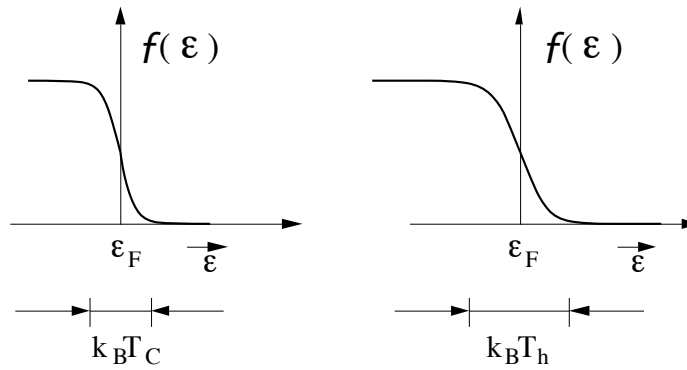


Figure 6.8- Etalement de la fonction de distribution de Fermi-Dirac à l'extrémité froide ( $T=T_C$ ) et l'extrémité chaude ( $T=T_h$ ) d'un métal.

En l'absence de champ électrique, la seule force d'entraînement provient du gradient thermique (supposé appliqué suivant  $x$ ) et l'équation de Boltzmann s'écrit:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial T} \mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} T = - \frac{f - f^0}{\tau}$$

$$\text{où } \nabla_{\mathbf{r}} f(\mathbf{k}, T(\mathbf{r})) = \left( \frac{\partial f}{\partial T} \right) \nabla_{\mathbf{r}} T.$$

Dès lors, après linéarisation, et pour un gradient thermique appliqué suivant  $x$ , on a

$$f = f^0 - \tau v_x \frac{\partial f^0}{\partial T} \frac{\partial T}{\partial x} \quad (6.18)$$

La densité de flux de chaleur est obtenue par la relation

$$\begin{aligned}
j_{Q_x} &= \frac{1}{4\pi^3} \int \varepsilon_{\mathbf{k}} v_x(\mathbf{k}) f(\mathbf{k}) d^3\mathbf{k} - \frac{\varepsilon_F}{4\pi^3} \int v_x(\mathbf{k}) f(\mathbf{k}) d^3\mathbf{k} \\
&= \frac{1}{4\pi^3} \int (\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_F) v_x^2(\mathbf{k}) \tau(\mathbf{k}) \frac{\partial f^0}{\partial T} \left(-\frac{\partial T}{\partial x}\right) d^3\mathbf{k}
\end{aligned} \tag{6.19}$$

Le terme de gauche dans (6.19) est la densité de flux d'énergie et le terme de droite, la densité de flux de particules. Puisque  $\frac{\partial f^0}{\partial T}$  est non nul uniquement pour des énergies proches de niveau de Fermi, on a

$$J_{Q_x} = \frac{1}{3} C_v v_F^2 \tau(\varepsilon_F) \left(-\frac{\partial T}{\partial x}\right)$$

où  $v_x^2 = \frac{1}{3} v_F^2$  et  $C_v = \int_0^\infty \varepsilon \frac{\partial f^0}{\partial T} g(\varepsilon) d\varepsilon$  est la densité de chaleur spécifique des électrons de conduction et  $\varepsilon_F \frac{\partial n}{\partial T} = \int_0^\infty \varepsilon_F \frac{\partial f^0}{\partial T} g(\varepsilon) d\varepsilon = 0$ .

La conductivité thermique  $\kappa$  est obtenue à partir de la définition

$$j_{Q_x} = \kappa \left(-\frac{\partial T}{\partial x}\right) \tag{6.20}$$

Elle s'exprime en W/m-K. Ainsi, on trouve l'expression de la conductivité thermique électronique

$$\kappa_e = \frac{1}{3} C_v v_F^2 \tau \tag{6.21}$$

Etablissons maintenant la *relation de Wiedemann - Franz* à partir de  $\sigma = \frac{ne^2\tau}{m^*}$ . Formons le rapport  $\kappa_e/\sigma T$ . A l'aide des relations établies pour les électrons libres, on sait que (voir chapitre 4) :

$$C_v = \frac{\pi^2}{2} n \frac{k^2 T}{\varepsilon_F}$$

On trouve que  $\varepsilon_F$ ,  $n$  et  $\tau$  s'éliminent pour ne laisser subsister que le *nombre de Lorenz*,  $L_0$ , (en supposant bien entendu que  $\tau$  est le même pour les deux coefficients) :

$$\frac{\kappa_e}{\sigma T} = \frac{\pi^2}{3} \left(\frac{k}{e}\right)^2 \equiv L_0 = 2.45 \cdot 10^{-8} \frac{V^2}{K^2} \tag{6.22}$$

La variation de  $\kappa_e$  en fonction de  $T$  est indiquée sur la figure 6.9 et comparée à celle d'un isolant électrique (cfr Fig. 2.23). A très basse température, la diffusion est dominée par les défauts et impuretés ( $\tau$  indépendant de  $T$ ) et  $\kappa_e$  croît linéairement avec  $T$ . A haute température ( $T > \theta_D$ ) par contre, les collisions électron - phonon à grand angle prédominent ( $\tau \propto T^{-1}$ ) et  $\kappa_e$  est constant.

Pour ces deux régimes de diffusion, la relation de Wiedemann - Franz est vérifiée (Fig. 6.10). Celle-ci n'est cependant pas vérifiée à température intermédiaire car le  $\tau$  de la conductivité électrique est différent du  $\tau$  de la conductivité thermique. Dans ce cas, le rapport  $\kappa_e / \sigma T$  est nettement plus faible que  $L_0$ . La raison est la suivante: les collisions électron - phonon à petit angle limitent davantage le transport thermique que le transport électrique.

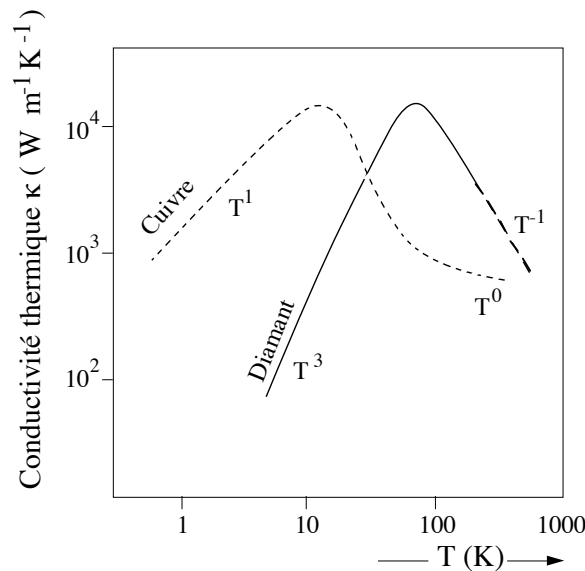


Figure 6.9- Variation de la conductivité thermique en fonction de la température pour un métal et un isolant électrique.

En effet, la relaxation d'un courant électrique demande des processus de diffusion impliquant des phonons de vecteur d'onde  $q = 2k_F$ . Par contre, la relaxation du courant thermique peut s'effectuer de deux façons différentes: soit par l'intermédiaire de diffusion modifiant considérablement la direction initiale de l'électron (diffusion à grand angle) soit par le biais de diffusion à petit angle modifiant peu le vecteur d'onde de l'électron mais impliquant une modification de l'énergie de l'ordre de  $kT$  (qui correspond à l'étalement de la fonction de distribution de Fermi-Dirac). Ce dernier processus intervient principalement lorsque  $T \ll \theta_D$  et implique des phonons de vecteur d'onde  $q \approx \frac{kT}{\hbar v_s}$  et d'énergie  $kT$  (ce sont les phonons les plus nombreux dans ce domaine de température). Ainsi, les collisions

électron - phonon à petit angle affectent de manière appréciable le courant thermique sans trop modifier le courant électrique.

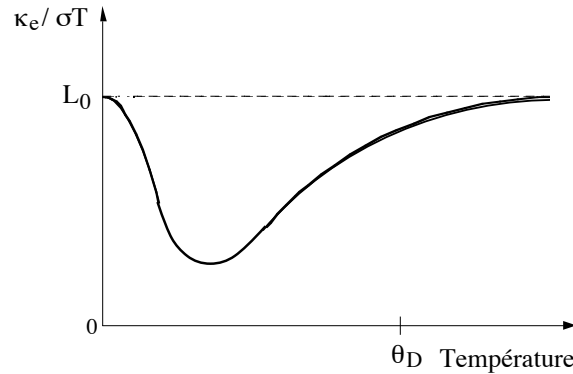


Figure 6.10 - Variation du rapport  $\kappa_e / \sigma T$  en fonction de la température;  $L_0$  est le nombre de Lorenz.

A haute température ( $T \gg \theta_D$ ) par contre,  $q_D \sim k_F$  dans la plupart des métaux et les diffusions à grand angle prédominent. Dans ce cas, le temps de relaxation est le même pour  $\kappa_e$  et pour  $\sigma$ .

En toute généralité, on peut définir la conductivité thermique  $\kappa$  d'un solide comme la somme d'une composante de réseau ( $\kappa_\ell$ ) et d'une composante électronique ( $\kappa_e$ ) soit

$$\kappa = \kappa_e + \kappa_\ell \quad (6.23)$$

Dans les métaux,  $\kappa_e \gg \kappa_\ell$  quelle que soit la température. Les meilleurs conducteurs électriques sont aussi les meilleurs conducteurs thermiques. Dans les isolants, la conduction de la chaleur s'effectue exclusivement par les vibrations du réseau. Il existe cependant des matériaux (comme les alliages) où les deux composantes contribuent de manière comparable à la conductivité thermique. A température ambiante, le meilleur conducteur thermique est un isolant : c'est le diamant ( $\kappa \sim 2 \cdot 10^3$  W/m-K). Les métaux les plus conducteurs ont une conductivité proche de 500 W/m-K. Dans les alliages, elle est voisine de 10 W/m-K. Certains matériaux, comme les polymères présentent des conductivités nettement plus basses, de l'ordre de 0.1 W/m-K. La conductivité thermique est cependant une propriété nettement moins "sensible" que la conductivité électrique. En effet, dans les solides homogènes,  $\kappa$  varie seulement de 4 - 5 ordres de grandeur alors que la conductivité électrique s'étale sur 24 ordres de grandeur à température ambiante.