

# LP n° 47 : Mécanismes de la conduction électrique dans les solides.

NIVEAU : LICENCE 3

## PRÉREQUIS :

- Électrocinétique
- Électromagnétisme
- Mécanique quantique (puits, notion de fonction d'onde, Équation de Schrödinger)
- Physique statistique (Théorie cinétique des gaz, Théorème d'équipartition, statistiques quantiques)

## PLAN :

1. Interprétation mécanique de la conduction : le modèle de Drude
2. Description semi-quantique de la conduction, la mer de Fermi

3. Isolant, conducteur, semi-conducteur : la structure de bande

## BIBLIOGRAPHIE :

1. [2] Physique des solides, Neil W. Ashcroft et N. Davide Mermin, édition EDP sciences 2002
2. Cours sur les moteurs de J. Neveu
3. Cours de matière condensée de P. Mendels
4. Cours de l'EPFL, éventuellement
5. [45] *Physique de l'état solide*, C. Kittel (8ème édition)
6. BUP n°550 sur les *Propriétés électriques des solides*

## IDÉES À FAIRE PASSER :

Définition des grandeurs caractérisant la conduction d'un solide à partir du modèle de Drude (conductivité, résistivité, temps de collision, mobilité des électrons...) et limites du modèle de Drude (nécessité du traitement quantique). Existence d'un gaz de Fermi d'électrons libres dans un solide conducteur. Notions de vitesse et de température de Fermi. Origine des bandes d'énergie dans un solide cristallin, remplissage des bandes. Cas des métaux, des isolants, des semi-conducteurs.

**Introduction :** Dans notre quotidien nous sommes entourés d'appareils qui conduisent le courant. L'objet de cette leçon est de comprendre quels types de matériaux conduisent le courant et quels en sont les mécanismes. Les métaux occupent une place assez particulière dans l'étude des solides conducteurs et partagent de nombreuses propriétés inexistantes dans d'autres solides comme le quartz ou le sel. Dans un premier temps nous allons étudier la théorie de la conduction métallique avancée par Drude en 1900.

## 1 Description classique de la conduction, le modèle de Drude

*Cette partie est rassurante, mais je pense qu'il ne faut pas y passer plus de dix minutes (en gros).*

### 1.1 Position du problème, hypothèses

[2], p. 2 - L'élaboration du modèle de Drude est rendue possible par la découverte de l'électron par Thomson en 1897. Hypothèses à mentionner : neutralité locale du métal (présence de charges positives, au contraire de la théorie cinétique de gaz), délocalisation des électrons DE VALENCE, DITS DE CONDUCTION, dans le métal et immobilité des noyaux et électrons de coeur, et on traite le tout comme un gaz classique. Quelle est sa densité? cf. [2], p. 4.

Voir ensuite les quatre hypothèses fondamentales entre les pages 4 et 7. Faire un schéma au tableau pour expliquer les choses de manière plus naturelles.

### 1.2 Conductivité électrique

Le modèle de Drude étudie le déplacement des électrons dans le métal, soumis à un champ électrique extérieur et aux collisions. Obtenir l'équation, passer en complexe, donner l'équation de la densité d'électrons en déduire la conductivité complexe et définir la conductivité statique (cf. cours Moteur, p. 5) + Ordre de Grandeur de la conductivité résistivité (à définir) p. 5. On retrouve la loi d'Ohm locale, voir [2], p. 8. Calcul de  $\tau$  et du libre parcours moyen, p. 9.

### 1.3 Critiques du modèle

On va regarder la dépendance de la conductivité avec la température et regarder si la prévision du modèle de Drude est cohérente avec l'expérience :

Expérience : Dépendance de la résistance d'un métal (soit la bobine de cuivre dans sa cuve soit résistance de platine, mesure 4 points) avec la température.

## 2 Description semi-quantique de la conduction, la mer de Fermi

### 2.1 La Distribution de Fermi-Dirac

Cours de Mendels, p. 16 & [45], p. 129 - On va prendre en compte l'aspect quantique du phénomène, notamment le fait que les électrons sont des fermions (redonner le principe de Pauli), mais sans considérer l'interaction des électrons avec le réseau (mer d'électrons libres).

Ensuite, le confinement des électrons dans le solide impose les conditions aux limites (périodiques), cf. [2], p. 37 et [45], p. 131. On voit alors apparaître la quantification du vecteur d'onde en modes, on peut donner l'énergie  $\varepsilon(k)$ . Remarquer que le mode  $k$  est un état propre pour la quantité de mouvement!

Déterminer la densité d'état dans l'espace des  $k$  puis la densité d'état d'énergie. Les électrons sont des fermions : ne peuvent pas occuper les mêmes états (Pauli). L'état fondamental est l'état du système à  $N$  électrons au zéro absolu. Si la température augmente le taux d'occupation des états d'énergie est donné par la fonction de distribution de Fermi Dirac. La fonction de Fermi Dirac varie dans la bande  $\pm kT$  autour du potentiel chimique + faire le schéma.

Remarque importante sur la limite du modèle de Drude (BUP, p. 293) : - Le fait que les électrons suivent cette statistique de Fermi-Dirac et non la statistique de Maxwell-Boltzmann impose que pour une forte densité d'électrons, les hauts niveaux d'énergie sont atteints quelle que soit la température ce qui correspond à des électrons à forte énergie cinétique et explique quantiquement pourquoi la vitesse mesurée expérimentalement est bien plus importante que celle prévue par le modèle de Drude.

### 2.2 Niveau de Fermi

Cours de Mendels, p. 21 & [45], p. 129 - Définition de l'énergie de Fermi à l'explicitation en fonction du nombre d'onde. Dans l'espace de  $k$ , les états occupés occupent une sphère appelée sphère de Fermi de rayon  $k_F$ . On peut exprimer l'énergie de Fermi en fonction du nombre de particule. On calcule le nombre de particule avec l'intégrale, puis l'énergie totale à 3D. Donner des O.D.G de l'énergie de Fermi, associé à une température de Fermi

[45], p. 130 - [slide](#) constater qu'à température ambiante on se rapproche de la marche; on peut donc adopter la modélisation de la sphère de Fermi à  $T_{amb}$ . A température nulle, tous les niveaux sont occupés jusqu'à l'énergie  $E_F$ , tous les niveaux d'énergie supérieure à  $E_F$  sont vides.

Cours de Mendels, p. 23 - A température finie, cette distribution s'étale sur une largeur d'ordre  $kBT$  autour de l'énergie  $E_F$  appelée énergie de Fermi. Ces électrons s'appellent électrons de la mer de Fermi. [slide](#)

Transition : relier ce modèle à la conductivité électrique?

### 2.3 Influence d'un champ électrique sur la mer de Fermi, conductivité électrique

[45], p. 138 - Dans un champ électrique la force qui s'exerce sur un électron s'écrit selon la 2ème loi de Newton. Dans le cas où l'on néglige les collisions entre les électrons et le réseau lors du déplacement de la sphère, celle-ci est déplacée à vitesse constante sous l'effet du champ. Donner l'expression intégrée ainsi que le déplacement  $\delta k$ . [slide](#) Globalement l'ensemble des électrons se déplacent dans le sens opposé au champ électrique ce qui induit un courant macroscopique : Loi d'Ohm.

Donner la résistivité électrique : ici elle est liée à la collision des électrons de conduction avec les phonons, et à température très faible aux collisions avec les impuretés, les défauts du réseau. C'est pour ça que le libre parcours moyen est bcp plus grand!

**Transition :** Jusqu'ici on a décrit le comportement des électrons d'un cristal et identifier l'origine de la conductivité électrique mais rien ne nous a permis de différencier les isolants des conducteurs, encore moins des semi-conducteurs; pourtant, la résistivité est une des grandeurs physiques dont la dynamique de variation est la plus importante d'un corps à un autre :  $10^{-10} \Omega \cdot \text{cm}$  pour un métal pu à basse température à  $10^{20} \Omega \cdot \text{cm}$  pour un bon isolant. Pour cela il faut regarder les interactions entre les électrons et les ions du réseau.

### 3 Isolant, conducteur, semi-conducteur : la structure de bande

#### 3.1 Potentiel perçu par les électrons, fonctions de Bloch

BUP, p. 306 & [45], p. 156 - Il s'agit de prendre en compte les interactions électrostatiques : électrons-ions qui sont faibles mais peuvent être résonnantes. Décrire le potentiel et répercuter la périodicité sur la fonction d'onde par théorème de Bloch pour tout ramener à la première zone de Brillouin.

#### 3.2 Résonance sur le réseau et structure de bande

[45], pp. 154-155 et [2], p. 190 - Donner l'énergie en fonction de  $k$ , puis préciser l'origine des bandes interdites. Tout ramener à la première zone de Brillouin pour voir apparaître la structure de bande. Comme les électrons sont des fermions Pauli nous impose de pouvoir en mettre au plus deux par état (polarisation). Se pose alors la question du remplissage des bandes. On appelle niveau de Fermi l'énergie du plus haut état occupé à  $T = 0$  K. On distingue alors deux types de bandes : celle de conduction qui contient des états dont l'énergie peut être supérieure à l'énergie de Fermi, et les bandes de valence dont tous les états d'énergie sont inférieurs à  $\epsilon_F$ . Le remplissage des bandes va fixer les propriétés électroniques des différents solides.

#### 3.3 Différents types de matériaux

- Conducteur **libre** remplissage : états disponibles à la conduction électrique. Ok pour appliquer Sommerfeld à la bande de conduction
- Isolant :  $\epsilon_F$  dans la bande interdite, ordre de grandeur de la résistivité  $\approx M\Omega$  et gap  $\approx 6$  eV (!) pour le diamant.
- Semi-conducteur : même schéma que pour isolant mais la taille du gap est beaucoup plus faible  $\approx 1$  eV, par exemple : 0,66 eV pour le germanium Ge, 1,12 eV pour le silicium Si, voire 2,26 eV pour le phosphore de gallium. La conductivité à température ambiante n'est pas négligeable et elle augmente avec la température!

Les SC sont séparés en 2 catégories : intrinsèques/extrinsèques. Les SC intrinsèques ont un gap énergétique de l'ordre de l'eV les électrons à  $T$  ambiante peuvent donc franchir ce gap. Un SC extrinsèque : introduction d'états disponibles dans le gap en dopant à l'aide d'impuretés (chaque impureté peut céder ou capter un électron).

[2], p. 673 - Étude de la résistivité des SC en fonction de la température et du dopage. À  $T$  fixée la résistivité peut varier de  $10^{12}$  alors que la concentration d'impuretés change seulement de  $10^3$ . À remarquer : la résistivité diminue lorsque la température augmente, contrairement aux conducteurs!

Expérience : Dépendance de la conductivité d'un semi-conducteur avec la température. Voir MP18.

**Conclusion :** La conduction est une **manifestation macroscopique de la mécanique quantique**!. C'est bien la statistique de Fermi-Dirac qui explique la conduction dans les solides conducteurs. On a vu qu'il existe différents types de matériaux qui ont des conductivités différentes et que celles-ci peuvent être expliquées grâce à la structure de bandes. On a vu les structures de plusieurs solides et notamment les SC qui peuvent avoir des propriétés très utiles : [2], p. 328 pour l'exemple des jonctions PN qu'on retrouve dans les diodes. Possible aussi d'ouvrir sur la supraconductivité ([45], p. 239)!

#### BONUS :

- Voir définition d'un phonon dans le Kittel : c'est l'onde créée par la vibration du réseau cristallin. Donc à basse température il n'y a pas de collision des électrons avec les phonons mais avec les impuretés.
- Origine des collisions dans le cours de Mendels, p. 34.
- SC : Le dopage de type N consiste à augmenter la densité en électrons dans le semi-conducteur. Pour ce faire, on inclut un certain nombre d'atomes riches en électrons dans le semi-conducteur. Par exemple du phosphore dans le silicium. Le dopage de type P consiste à augmenter la densité en trous dans le semi-conducteur. Pour ce faire, on inclut un certain nombre d'atomes pauvres en électrons dans le semi-conducteur afin de créer un excès de trous. Par exemple le bore dans le silicium.

