

## MNP - 2ème TD de physique statistique

### Applications de la distribution de Fermi-Dirac à un gaz d'électrons bidimensionnel

On sait fabriquer en laboratoire et industriellement des "gaz d'électrons bidimensionnels" dans les semiconducteurs. Outre leur fort intérêt scientifique, lié à des propriétés physiques exceptionnelles, ces gaz 2D sont couramment exploités dans les transistors à effet de champ ultra-rapides (HEMT="High Electron Mobility Transistor"). Les performances de ces transistors résultent en particulier de la forme de la densité d'états, différente d'un gaz 3D.

On considère dans l'exercice  $N$  électrons sans interactions (donc un gaz de densité modérée), enfermés dans une boîte de dimensions  $(L_x, L_y)$  (= puits quantique infini 2D).

1/ Rappeler les niveaux d'énergie stationnaires d'une particule 1D de masse  $m$  dans un puits quantique infini. En déduire les niveaux d'énergie stationnaires d'un électron dans la boîte 2D.

2/ Montrer qu'à ces niveaux est associé un maillage discret dans un espace de vecteurs d'onde. En déduire la *densité d'états en  $\vec{k}$* , i.e. le nombre d'états quantiques stationnaires par unité de surface dans cet espace. On n'oubliera pas de tenir compte du spin de l'électron.

3/ Montrer par changement de variable que cette densité d'états à 2 variables scalaires peut se réduire à une nouvelle densité d'états à une seule variable scalaire, en l'occurrence l'intensité  $k$  du vecteur d'onde. Par un nouveau changement de variable, en déduire la densité d'états énergétique, i.e. le nombre d'états quantiques par intervalle élémentaire d'énergie de l'électron.

Quelle différence voyez-vous avec le cas 3D vu en cours ?

4/ A température  $T$  finie et à l'équilibre thermique, écrire la relation liant le nombre total de particules et le potentiel chimique. En utilisant la densité d'états énergétique, on transformera la somme discrète en intégrale, qu'on calculera explicitement.

5/ Montrer qu'à nombre d'électrons fixé, le potentiel chimique  $\mu$  dépend de la température et expliciter la relation entre  $N$  et  $\mu$ . Que devient-elle à  $T=0$  ? Le retrouver par un raisonnement graphique simple.

6/ Ecrire l'expression intégrale donnant l'énergie moyenne  $\bar{E}$  du gaz puis celle d'un électron. Effectuer le calcul à température nulle et retrouver le résultat à nouveau graphiquement.

7/ Calculer la pression du gaz  $P = -\frac{d\bar{E}}{d\mathcal{A}}$  à  $T=0$  K<sup>1</sup>, où  $\mathcal{A}$  est l'aire du gaz

8/ En reprenant le calcul de la question 4/, calculer le nombre total  $N_0$  d'électrons d'énergie supérieure à  $E_0$ , puis une approximation si  $(E_0 - \mu)/k_B T \gg 1$ . En déduire que "l'émission thermoionique" obéit à une loi d'activation thermique. Quelle est l'énergie de barrière correspondante ?

---

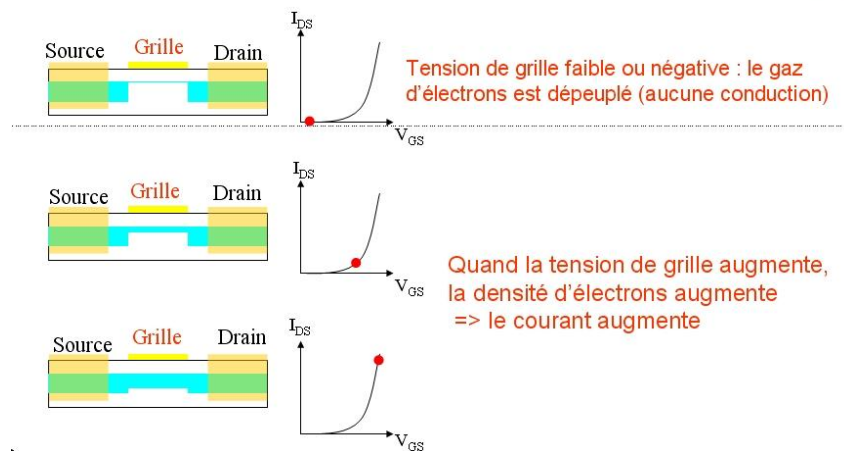
<sup>1</sup> à température constante. Ce serait bien sûr  $-d\bar{E}/dV$  pour un gaz 3D.

## Une application des gaz 2D : le transistor à effet de champ à "haute mobilité"

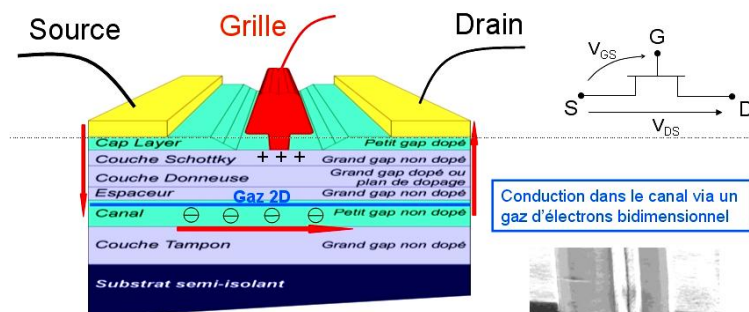
Le transistor à "effet de champ" est un transistor dont le fonctionnement, très simple à la base", consiste à moduler la conductivité électrique du "canal" en jouant sur la densité d'électrons grâce à une "grille" sur laquelle on applique une tension de commande.

Usuellement les électrons constituent un gaz 3D. Les propriétés intrinsèques d'un gaz bidimensionnel font que pour ce dernier la "mobilité" des électrons est nettement supérieure. Il s'ensuit des performances supérieures pour les transistors à effet de champ à gaz d'électrons bidimensionnel, permettant par exemple de recevoir la télévision par satellite avec des paraboles de moindre surface.

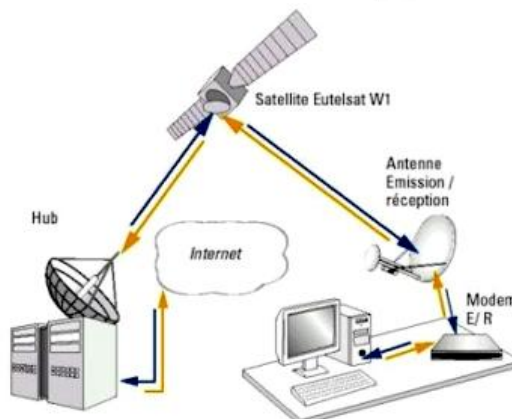
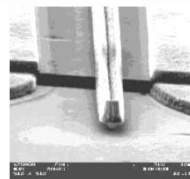
Principe général du FET : modulation de la densité d'électrons par la tension  $V_{GS}$



Le HEMT est un MESFET pour lequel les électrons forment un gaz 2D



Conduction dans le canal via un gaz d'électrons bidimensionnel



# MNP - 2ème TD de physique statistique

## Applications de la distribution de fermi-Dirac à un gaz d'électrons bidimensionnel

### Corrigé

1/ Grâce au découplage du mouvement selon  $x$  et du mouvement selon  $y$ , les niveaux d'énergie stationnaires peuvent se mettre sous la forme

$$E_{n_x, n_y} = \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\pi^2}{L_x^2} n_x^2 + \frac{\pi^2}{L_y^2} n_y^2 \right) = \frac{\hbar^2}{2m} (k_{n_x}^2 + k_{n_y}^2) = \frac{\hbar^2}{2m} \vec{k}_{n_x, n_y}^2 = \frac{\hbar^2}{2m} k^2$$

avec  $n_x, n_y = 1, 2, \dots$

2/ la réponse au début de la question résulte de la question 1/. Sachant que 2 noeuds successifs

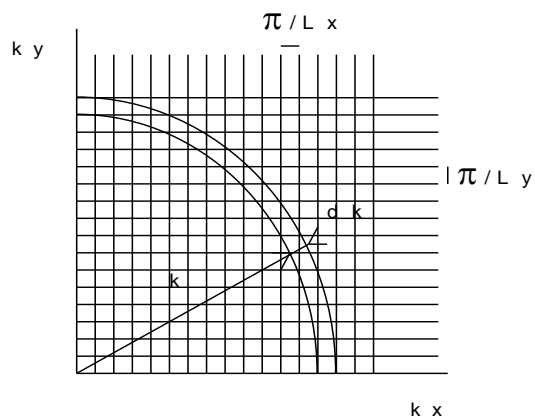
dans l'espace  $\vec{k}$  sont séparés de  $\left( \frac{\pi}{L_x}, \frac{\pi}{L_y} \right)$ , le

nombre d'états par intervalle élémentaire  $dk_x \cdot dk_y$

vaut  $L_x \cdot L_y \frac{dk_x \cdot dk_y}{\pi^2}$ , d'où la densité d'états en

vecteur d'onde  $\vec{k}$ :  $\frac{2L_x \cdot L_y}{\pi^2}$ , après avoir

multiplié par 2 puisqu'en raison du spin 1/2 de l'électron, à chacun de ces vecteurs d'ondes est associé deux états de même énergie.



3/ Il faut comptabiliser les états dans un quart de couronne circulaire d'épaisseur  $dk$ , dont la surface est  $\pi \cdot k \cdot dk / 2$ . Il y en a  $\frac{L_x \cdot L_y}{\pi^2} \cdot \pi \cdot k \cdot dk$ , d'où la densité d'états en  $k$ :  $\frac{L_x \cdot L_y}{\pi} \cdot k$  Enfin:

$$\frac{dn}{dE} = \frac{dn}{dk} \cdot \frac{dk}{dE} = \frac{L_x \cdot L_y}{\pi} \cdot k \times \frac{1}{dE/dk} = \frac{L_x \cdot L_y}{\pi} \cdot k \times \frac{m}{\hbar^2 k} = \frac{mA}{\pi \hbar^2}$$

$A$  étant l'aire de la boîte 2D. Le résultat final est donc  $\rho(E) = \frac{mA}{\pi \hbar^2} H(E)$ , où  $H(E)$  est la fonction de Heaviside (=1 si  $E \geq 0$ , 0 sinon), car on a implicitement supposé  $E \geq 0$  dans ces calculs. La densité d'états est évidemment nulle en-dessous du niveau d'énergie fondamental !

Dans le cas 3D, la densité d'états varie en  $\sqrt{E}$ . On montrerait facilement que dans le cas 1D c'est en  $1/\sqrt{E}$ . Ces différences affectent les propriétés électroniques du gaz d'électrons.

4/ Il suffit d'appliquer la contrainte sur le nombre total  $N$  d'électrons, qui est fixé et égal à la somme des populations des états.

Il est commode de passer par une somme discrète au départ, avant de faire l'approximation du quasi-continuum de la boîte macroscopique :

$$N = \sum_{\text{états } q} f_q = \sum_{\text{états } q} \frac{1}{1 + \exp(\beta(E_q - \mu))} \approx \int_0^\infty \frac{\rho(E)}{1 + \exp(\beta(E - \mu))} \cdot dE$$

$$N = \int_0^\infty \frac{m\mathcal{A} / \pi \hbar^2}{1 + \exp(\beta(E - \mu))} \cdot dE = \frac{m\mathcal{A}}{\pi \hbar^2} \cdot \int_0^\infty \frac{\exp(-\beta(E - \mu))}{1 + \exp(-\beta(E - \mu))} \cdot dE = \frac{m\mathcal{A}}{\pi \hbar^2} \cdot k_B T \cdot \text{Ln}(1 + \exp(\mu / k_B T))$$

Dans le cas du gaz 2D, on a de la chance car le résultat est analytique et simple. Pour le gaz 3D le résultat fait intervenir une fonction analytique plus compliquée.

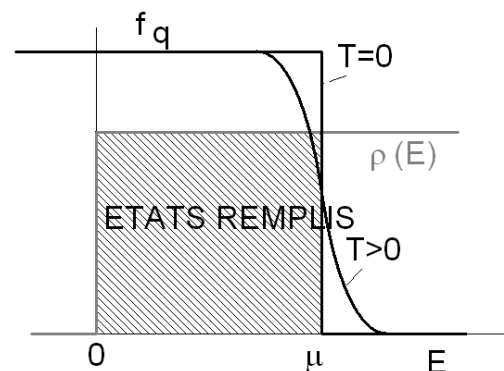
5/ Si  $N$  est fixé, on a une relation entre  $T$  et  $\mu$ , qui se résout facilement :

$$\mu = k_B T \cdot \text{Ln} \left( \exp\left(\frac{\pi \hbar^2 N}{m\mathcal{A} k_B T}\right) - 1 \right)$$

$$\# \text{ A haute température : } \mu \cong k_B T \cdot \text{Ln} \left( \frac{\pi \hbar^2 N}{m\mathcal{A} k_B T} \right)$$

Sachant que dans ce cas l'argument est suffisamment  $< 1$ , cela veut dire que  $\mu$  est négatif. En outre on voit que  $\mu$  tend doucement vers  $-\infty$  lorsque  $T$  tend vers l'infini. Dans ce régime, il est intéressant de remarquer que  $\frac{\pi \hbar^2 N}{m\mathcal{A} k_B T} < 1 \Leftrightarrow \frac{m\mathcal{A}}{\pi \hbar^2} k_B T > N$  ce qui veut dire que le nombre d'états à l'intérieur d'un intervalle énergétique  $k_B T$  est plus grand que  $N$ . On est dans une situation où la distribution de Maxwell-Boltzmann est une bonne approximation.

# A  $T=0$ , le calcul de la limite de  $N$  est immédiat, et on trouve:  $N = \frac{m\mathcal{A}}{\pi \hbar^2} \cdot E_F$ , où  $E_F$ , couramment appelé "niveau de Fermi" est le potentiel chimique à  $T=0$ . Ce résultat très simple exprime qu'à 0 K les états sont totalement remplis jusqu'au niveau de Fermi, et totalement vides au-delà.



6/ Energie totale du gaz :

$$\bar{E} = \int_0^\infty \frac{E \rho(E)}{1 + \exp(\beta(E - \mu))} \cdot dE = \frac{m\mathcal{A}}{\pi \hbar^2} \cdot \int_0^\infty \frac{E}{1 + \exp(\beta(E - \mu))} \cdot dE$$

Comme le nombre d'électrons est fixé, on divise simplement par  $N$  pour trouver l'énergie moyenne d'un électron.

A  $T=0$ , ça donne  $\bar{E} = \frac{m\mathcal{A}}{\pi \hbar^2} \cdot \int_0^{E_F} E \cdot dE = \frac{m\mathcal{A}}{\pi \hbar^2} \cdot \frac{E_F^2}{2} = N \frac{E_F}{2}$ , soit  $\frac{E_F}{2}$  pour l'énergie moyenne d'un électron. Là encore on retrouve une interprétation graphique évidente !

7/  $P = -\frac{d\bar{E}}{d\mathcal{A}}$ . Attention, il faut raisonner à nombre de particules constant, sachant que le niveau de Fermi dépend de la surface :

$$P = -\frac{d\bar{E}}{d\mathcal{A}} = -\frac{d}{d\mathcal{A}} \left( \frac{m\mathcal{A}}{\pi\hbar^2} \cdot \frac{E_F^2}{2} \right) = -\frac{d}{d\mathcal{A}} \left( \frac{m\mathcal{A}}{2\pi\hbar^2} \cdot \left( \frac{N\pi\hbar^2}{m\mathcal{A}} \right)^2 \right) = \frac{N^2\pi\hbar^2}{2m\mathcal{A}^2}$$

Cette pression se trouve être très élevée. En fait un gaz de fermions est très peu compressible, à cause du principe de Pauli qui interdit le remplissage du même état quantique par 2 fermions : il est impossible de les accumuler dans les états de basse énergie. C'est la raison pour laquelle les métaux sont peu compressibles. Ce qui évite au gaz des électrons de conduction (environ un électron libre par atome) d'exploser sous sa propre pression, c'est l'interaction coulombienne avec les noyaux, et l'impérieuse nécessité de la neutralité électrique.

**8/** Le calcul se fait à nouveau tout seul :

$$N_0 = \int_{E_0}^{\infty} \frac{m\mathcal{A} / \pi\hbar^2}{1 + \exp(\beta(E - \mu))} \cdot dE = \frac{m\mathcal{A}}{\pi\hbar^2} \cdot \int_{E_0}^{\infty} \frac{\exp(-\beta(E - \mu))}{1 + \exp(-\beta(E - \mu))} \cdot dE$$

$$N_0 = \frac{m\mathcal{A}}{\pi\hbar^2} \cdot k_B T \cdot \ln(1 + \exp(-(E_0 - \mu)/k_B T))$$

Si  $(E_0 - \mu)/k_B T \gg 1$ , il vient :

$$N_0 \cong \frac{m\mathcal{A}}{\pi\hbar^2} \cdot k_B T \cdot \exp(-(E_0 - \mu)/k_B T)$$

$N_0$  varie exponentiellement avec l'énergie  $(E_0 - \mu)$ . Cette "hauteur de barrière" n'est pas constante puisque  $\mu$  dépend de  $T$ , mais quasiment car la variation du potentiel chimique avec  $T$  est lente.

Le phénomène "thermoïonique", qui est lié à l'excitation thermique des particules au-dessus d'une barrière de potentiel  $E_0$  selon une loi d'activation thermique en  $\exp(-E_0/k_B T)$  a de nombreuses applications. Dans les bons vieux écrans cathodiques, il permettait par chauffage d'extraire du métal du filament des électrons arrivant ainsi à surmonter la barrière énergétique entre le métal et le vide extérieur.

Ce phénomène est également intrinsèque au fonctionnement des diodes Schottky et même de la jonction PN, composants élémentaires de presque toute l'électronique actuelle. C'est cette fois la hauteur de barrière entre la bande de conduction et le métal (pour la Schottky), ou la barrière d'énergie électrostatique (pour la jonction PN) qui joue le rôle du terme  $E_0$ .

