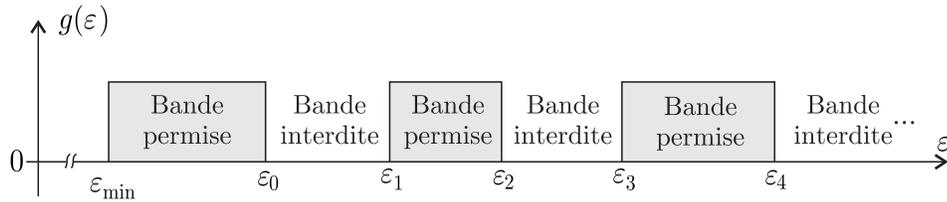


La conductivité électrique

I Préliminaires

- – 1. L'ordre de grandeur du pas d'un réseau est $a = 10^{-9}$ m, sur un mètre linéaire on a donc 10^9 atomes libérant chacun 1 électron soit $(10^9)^3$ électrons libres par mètre cube de cristal, ainsi $n_e = 10^{27}$ e^-/m^3 .
- – 2. Pour qu'un électron puisse avoir une énergie il faut que sa fonction d'onde soit bornée pour qu'elle puisse être associée à une densité de probabilité de présence dans cet état. Pour que ce soit le cas il faut que $\varepsilon > \varepsilon_{\min}$. Si $\varepsilon > \varepsilon_{\min}$ on nous dit que ces solutions bornées sont possibles dans une famille d'intervalles fermés disjoints. L'ensemble des états d'énergie accessibles aux électrons est donc de la forme $[\varepsilon_{\min}, \varepsilon_0] \cup [\varepsilon_1, \varepsilon_2] \cup [\varepsilon_3, \varepsilon_4] \dots \cup [\varepsilon_n, \varepsilon_{n+1}] \cup \dots$ avec $\varepsilon_n < \varepsilon_{n+1}$ on parle de structure en bande.



- – 3. L'énergie de Fermi d'un gaz d'électrons libre est la plus grande valeur de l'énergie accessible à un électron de ce gaz à $T = 0$ K.

- – 4. Il y a n_i cellules pleines et $g_i - n_i$ cellules vides le nombre de permutations de ces éléments combinatoires est donc

$$W_i = \frac{[(g_i - n_i) + n_i]!}{(g_i - n_i)! n_i!} = \frac{g_i!}{(g_i - n_i)! n_i!} \implies W = \prod_i W_i = \prod_i \frac{g_i!}{(g_i - n_i)! n_i!}$$

- – 5. On cherche le maximum de $S = k \ln W$ sous les contraintes $N = \sum_i n_i = cste$ et $U = \sum_i n_i \varepsilon_i = cste$. On simplifie tout d'abord l'expression de l'entropie avec la formule de Stirling

$$S = k \ln W = k \sum_i [\ln g_i! - \ln (g_i - n_i)! - \ln n_i!] = k \sum_i [g_i \ln g_i - (g_i - n_i) \ln (g_i - n_i) - n_i \ln n_i]$$

puis on prend la différentielle à $g_i = cste$ pour avoir

$$dS = k \sum_i [dn_i \ln (g_i - n_i) + dn_i - dn_i \ln n_i - dn_i] = k \sum_i dn_i \ln \left(\frac{g_i - n_i}{n_i} \right) = k \sum_i dn_i \ln \left(\frac{g_i}{n_i} - 1 \right)$$

on écrit la condition d'extremum en prenant en compte les contraintes en introduisant des multiplicateurs de Lagrange, il vient

$$dS + AdU + BdN = 0 \implies 0 = \sum_i dn_i \left[k \ln \left(\frac{g_i}{n_i} - 1 \right) + A + B\varepsilon_i \right] \implies \frac{g_i}{n_i} - 1 = \exp (b\varepsilon_i - a)$$

$$\implies n_i = \frac{g_i}{\exp [\beta (\varepsilon_i - \mu)] + 1} \quad \text{Distribution de Fermi-Dirac découverte en 1925.}$$

□ – 6. Si $n_i/g_i \ll 1$ alors $\exp \beta (\varepsilon_i - \mu) \gg 1$ ainsi

$$n_i \simeq g_i \exp [-\beta (\varepsilon_i - \mu)] = g_i \exp [-\beta \varepsilon_i] e^{\beta \mu} \text{ ainsi } N = \sum_i n_i \implies e^{\beta \mu} \sum_i g_i \exp [-\beta \varepsilon_i] = N$$

$$\implies n_i = \frac{N}{Z} g_i \exp [-\beta \varepsilon_i] \text{ avec } Z = \sum_i g_i e^{-\beta \varepsilon_i}$$

II Les semi-conducteurs

II.A Traitement classique

□ – 7. Dans la statistique de Maxwell-Boltzmann on a simplement $N_i = N g_i e^{-\beta \varepsilon_i} / Z$ et $Z = \sum_i g_i e^{-\beta \varepsilon_i}$. Avec uniquement 2 états de même dégénérescence g on trouve

$$N_0 = \frac{N}{Z} g e^{-\beta \varepsilon_0}, N_1 = \frac{N}{Z} g e^{-\beta \varepsilon_1} \text{ et } Z = g (e^{-\beta \varepsilon_0} + e^{-\beta \varepsilon_1}) = g e^{-\beta \varepsilon_0} (1 + e^{-\beta (\varepsilon_1 - \varepsilon_0)}) = g e^{-\beta \varepsilon_0} (1 + e^{-\beta \gamma})$$

soit

$$N_0 = \frac{N}{1 + e^{-\beta \gamma}} \text{ et } N_1 = \frac{N e^{-\beta \gamma}}{1 + e^{-\beta \gamma}}$$

Si $T \rightarrow 0$ K alors $\beta \rightarrow +\infty$ et $N_0 \rightarrow N$ tandis que $N_1 \rightarrow 0$ comme attendu.

□ – 8. On a tout simplement

$$U = \varepsilon_0 N_0 + \varepsilon_1 N_1 = \frac{N \varepsilon_0}{1 + e^{-\beta \gamma}} + \frac{N e^{-\beta \gamma} \varepsilon_1}{1 + e^{-\beta \gamma}} = N \frac{\varepsilon_0 e^{\beta \gamma} + \varepsilon_0 + \gamma}{1 + e^{\beta \gamma}} \implies U = N \varepsilon_0 + \frac{N \gamma}{1 + e^{\beta \gamma}}$$

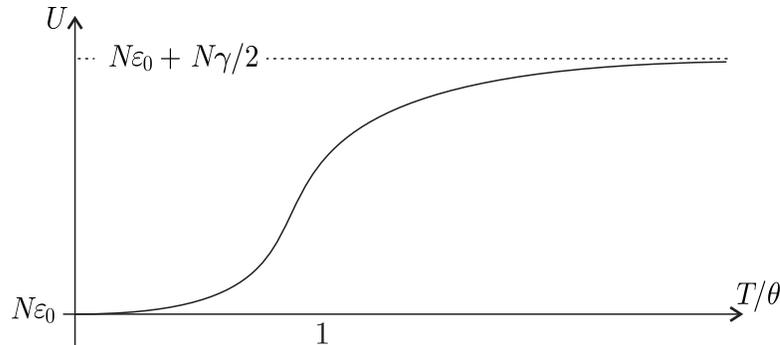
en faisant apparaître la température caractéristique $\theta = \gamma/k$ il vient

$$U = N \varepsilon_0 + \frac{N \gamma}{1 + e^{\theta/T}}$$

Etudions les deux cas limites :

- si $T \gg \theta$ alors $e^{\theta/T} = 1 + \theta/T + o(\theta/T)$ et $U = N \varepsilon_0 + \frac{N \gamma}{2 + \theta/T} \rightarrow N \varepsilon_0 + N \gamma/2$ si $T \rightarrow +\infty$.
- si $T \rightarrow 0$ alors $e^{\theta/T} \rightarrow \infty$ et $U \rightarrow N \varepsilon_0$.

On vérifie que $U'(T) = N \gamma \theta T^{-2} e^{\theta/T} / (1 + e^{\theta/T})^2 > 0$ l'énergie est donc une fonction croissante de la température. On précise que $U'(T) = N \gamma \theta \frac{e^{-\theta/T}}{T^2} \frac{1}{(1 + e^{-\theta/T})^2} \rightarrow 0$ si $T \rightarrow 0$. Graphiquement on a donc



II.B Traitement quantique

□ – 9. On fait comme plus haut mais avec la statistique de Fermi-Dirac et $g = N$:

$$N_0 = \frac{N}{\exp[\beta(\varepsilon_0 - \mu)] + 1} \text{ et } N_1 = \frac{N}{\exp[\beta(\varepsilon_1 - \mu)] + 1}$$

□ – 10. On peut déterminer μ par la condition $N = N_0 + N_1$ soit

$$\frac{1}{\exp[\beta(\varepsilon_0 - \mu)] + 1} + \frac{1}{\exp[\beta(\varepsilon_1 - \mu)] + 1} = 1 \implies \frac{1}{ax + 1} + \frac{1}{bx + 1} = 1$$

on a donc la relation $ax + 1 + bx + 1 = (ax + 1)(bx + 1) \implies 1 = abx^2$ en revenant aux variables physiques on trouve $\exp(\varepsilon_0 + \varepsilon_1 - 2\mu) = 1$ soit $\mu = \frac{1}{2}(\varepsilon_0 + \varepsilon_1)$ qui ne dépend donc pas de la température. Comme l'énergie de Fermi est le potentiel chimique à $T = 0$ K il vient $\varepsilon_F = \frac{1}{2}(\varepsilon_0 + \varepsilon_1)$. L'expression des populations est donc

$$N_0 = \frac{N}{1 + \exp[-\beta\gamma/2]} \text{ et } N_1 = \frac{N}{1 + \exp[\beta\gamma/2]} = \frac{N \exp[-\beta\gamma/2]}{1 + \exp[-\beta\gamma/2]}$$

c'est la même chose que dans le cas classique en remplaçant γ par $\gamma/2$.

□ – 11. On écrit le principe fondamental de la dynamique appliqué une charge q de masse m en mouvement dans un champ électrique E et subissant une force de frottement $-\Gamma \vec{v}$ soit

$$m \frac{d\vec{v}}{dt} = q\vec{E} - \Gamma \vec{v} = q\vec{E} - \frac{m^*}{\tau} \vec{v} : \text{ la vitesse limite } \vec{v}_\ell \text{ est telle que } \vec{v}_\ell = \frac{q\tau}{m^*} \vec{E} \implies \mu_e = \frac{q\tau}{m^*}$$

Dans un semi-conducteur la mobilité varie comme $\beta^{3/2}$ et donc décroît quand la température augmente, pour retrouver ce résultat il faut calculer la vitesse moyenne en utilisant la distribution de Fermi-Dirac et l'intégrale de Sommerfeld... On peut aussi utiliser des arguments physique pour expliquer ça mais ce n'est pas simple!

□ – 12. L'expression fournie de la conductivité et les résultats obtenus permettent d'écrire

$$\sigma = en_1(\mu_e + \mu_t) = \frac{e(\mu_e + \mu_t)n_1 \exp[-\beta\gamma/2]}{1 + \exp[-\beta\gamma/2]} = \frac{e(\mu_e + \mu_t)n_1}{1 + \exp[\beta\gamma/2]}$$

La température de fusion du silicium n'est pas censée être connue au degré près mais c'est un solide cristallin courant et l'on est en mesure d'attendre qu'ils connaissent un ordre de grandeur : de l'ordre de $T_f = 1500$ K (1683 K selon wikipedia). A température ambiante $T_a \simeq 300$ K on a $kT_a \simeq \frac{1}{40}$ eV $\ll kT_f \simeq \frac{1}{5}$ eV ainsi $\beta_a\gamma/2 \simeq 20$ et ce nombre reste assez supérieur à 1 tant que le silicium reste solide. On peut donc considérer qu'alors $\exp[\beta\gamma/2] \gg 1$ et l'expression de la conductivité devient

$$\sigma = e(\mu_e + \mu_t)n_1 \exp[-\beta\gamma/2] = \sigma_0 e^{-T_0/T} \text{ avec } \sigma_0 = e(\mu_e + \mu_t)n_1 \text{ et } T_0 = \gamma/(2k) \simeq 6000 \text{ K}$$

III Modèle de Debye pour les Métaux

□ – 13. calculs habituels... qui donnent

$$n_i = \frac{g_i}{\exp(\beta\varepsilon_i) - 1}$$

□ – 14. On écrit simplement

$$3N = \sum_i g_i \implies 3N = \int \frac{d^3x d^3p}{h^3} = \frac{V}{h^3} \int d^3p = \frac{4\pi V}{h^3} \int_0^{p_D} p^2 dp = \frac{4\pi V p_D^3}{3h^3}$$

$$\implies p_D = \left(\frac{9N}{4\pi V} \right)^{1/3} h \text{ soit } \Theta_D = \left(\frac{9N}{4\pi V} \right)^{1/3} \frac{hc}{k}$$

□ – 15. De nombreuses choses peuvent être évoquées, vous en verrez certainement d'autres plus ou moins intéressantes :

- le côté linéaire du comportement que l'on retrouve dans le modèle;
- la résistivité augmente avec la température : l'agitation du réseau cristallin nuit à la mobilité des charges ;
- les valeurs de Θ_D qui font qu'à température ambiante $T > \Theta_D$;
- le fait que tous les métaux se comportent de la même façon : les détails des organisations cristallines n'apparaissent pas macroscopiquement

IV Conclusion

□ – 16. Dans un semi-conducteur la conductivité électrique augmente avec la température car le nombre d'électrons de conduction augmente avec celle-ci : l'agitation thermique permet aux électrons de la bande de valence de passer dans la bande de conduction conformément au modèle étudié qui prévoit $\sigma = \sigma_0 e^{-T_0/T}$ qui est une fonction croissante de la température.

Dans un conducteur, il faudrait faire une étude plus précise mais on voit sur la courbe que la résistivité augmente linéairement avec la température. Il semble bien que ce soit la vibration du réseau cristallin qui soit à l'origine de ce phénomène car la loi est linéaire selon la même droite une fois que la résistivité et la température sont rapportées à la température de Debye qui est propre à chaque solide. L'agitation thermique des conducteurs métalliques et donc la vibration de son réseau cristallin est un frein à la mobilité des porteurs de charge : augmenter la température augmenter donc la résistivité ce qui diminue la conductivité.