

# LP47 MECANISMES DE LA CONDUCTION ELECTRIQUE DANS LES SOLIDES

23 juin 2020

MONNET Benjamin &

## Niveau : L3

## Commentaires du jury

## Bibliographie

✦ *Physique des solides*, Ashcroft

✦ BUP550

→

→ à peu près tout

## Prérequis

- Equation de Schrödinger
- Physique statistique
- Mécanique du point
- Conductivité électrique et thermique

## Expériences



## Table des matières

|          |                                                         |          |
|----------|---------------------------------------------------------|----------|
| <b>1</b> | <b>Modèle de Drude</b>                                  | <b>2</b> |
| 1.1      | Cadre de l'étude . . . . .                              | 2        |
| 1.2      | Calcul de conductivité . . . . .                        | 2        |
| 1.3      | Victoires et défaites du modèle de Drude . . . . .      | 2        |
| <b>2</b> | <b>Modèle de Sommerfeld</b>                             | <b>3</b> |
| 2.1      | Détails du modèle . . . . .                             | 3        |
| 2.2      | Victoires et défaites du modèle de Sommerfeld . . . . . | 4        |
| <b>3</b> | <b>Modèle des bandes</b>                                | <b>5</b> |
| 3.1      | Bandes énergétiques . . . . .                           | 5        |
| 3.2      | Interprétation . . . . .                                | 7        |

## Introduction

A la fin du XIXème siècle, les chercheurs essaient activement de comprendre pourquoi certains matériaux sont conducteurs et d'autres non. On va voir quels ont été les modèles proposés.

## 1 Modèle de Drude

### 1.1 Cadre de l'étude

Comme dit en introduction, le but est de tenter d'expliquer la conduction. Un **milieu conducteur** est défini comme un milieu vérifiant la **loi d'Ohm locale** :

$$\vec{j} = \sigma \vec{E}$$

Afin de retrouver cette loi Drude a proposé un modèle en 1900 basé sur certaines hypothèses :

- Les électrons sont les seuls responsables du transport électriques, les ions étant beaucoup plus massifs. On a alors  $\vec{j} = -ne \langle \vec{v} \rangle$
- On suppose que l'on a un gaz parfait d'électrons, c'est à dire sans interaction. Néanmoins, on suppose que régulièrement, les électrons s'entrechoquent on la vitesse des électrons est alors redistribuée aléatoirement. On supposera que ce choc arrive en même temps pour tous les électrons avec un temps moyen de choc  $\tau \approx 10^{-14}\text{s}$
- Les électrons sont considérés comme classique, tous à la même température et plongés dans un champ électrique  $\vec{E}$

### 1.2 Calcul de conductivité

Avec la première hypothèse, on voit que si on relie la vitesse des électrons au champ électrique, alors on retrouvera la loi d'Ohm. On va donc étudier l'évolution de la quantité de mouvement des électrons.

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{p}(t + dt) \rangle &= \frac{dt}{\tau} \mathbf{0} + \left(1 - \frac{dt}{\tau}\right) \langle \mathbf{p}(t) \rangle - e \mathbf{E} dt \\ \frac{d}{dt} \langle \mathbf{p} \rangle &= -e \mathbf{E} - \frac{1}{\tau} \langle \mathbf{p} \rangle \end{aligned}$$

On voit donc que les chocs entre les électrons sont en fait modélisés par des frottements visqueux par ce modèle. L'équation du premier ordre nous informe que la quantité de mouvement tend donc vers une valeur limite pour  $t \gg \tau$  :

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

où on appelle  $\mu = \frac{-e\tau}{m}$  la mobilité.

On trouve finalement grâce à ça la loi d'Ohm locale :

$$\vec{j} = \frac{ne^2\tau}{m} \vec{E} = \sigma \vec{E}$$

### 1.3 Victoires et défaites du modèle de Drude

On trouve grâce au modèle de Drude une expression simple de la conductivité, qui en plus de cela donne une valeur proche de la valeur expérimentale pour l'argent ou encore le cuivre. Ce modèle permet en plus de cela de retrouver la loi de Wiedeman-Franz :

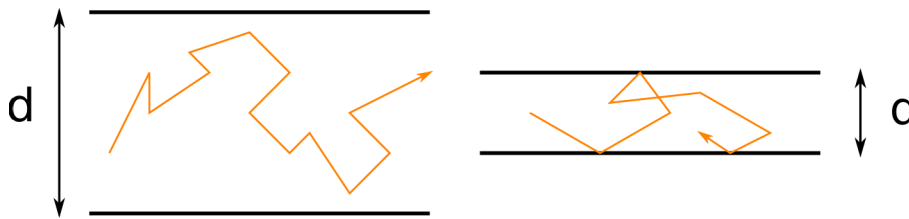
$$\frac{\kappa}{\sigma} = LT$$

| Drude                                                                                                                                                                                                                     | Sommerfeld                                                   |
|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|--------------------------------------------------------------|
| $\sigma = \frac{ne^2}{m} \tau = \frac{ne^2}{m} \underbrace{v_0}_{\propto \sqrt{\frac{k_B T}{m}}} \underbrace{l}_{\frac{\hbar k_F}{m}}$                                                                                    | $\sigma \propto \frac{1}{\sqrt{T}} \quad \textcolor{red}{1}$ |
| $\kappa = \frac{1}{3} v_0^2 c_v \tau = \frac{1}{3} \underbrace{v_0}_{\propto \sqrt{\frac{k_B T}{m}}} \underbrace{c_v}_{\frac{3}{2} n k_B} \underbrace{l}_{\frac{\pi^2}{2} \left( \frac{k_B T}{\epsilon_F} \right) n k_B}$ | $\kappa \propto \sqrt{T} \quad \textcolor{red}{T}$           |
| <div style="border: 2px solid blue; border-radius: 10px; padding: 10px; display: inline-block;"> <math>\frac{\kappa}{\sigma} \propto T</math> </div>                                                                      |                                                              |

Néanmoins, le modèle de Drude possède un gros défaut. On peut estimer à l'aide de  $n$  et  $\sigma$  la valeur de  $\tau$  et Drude trouve  $10^{-14}$ . On sait que  $\tau$  est relié à la vitesse d'agitation des électrons et au libre parcours moyen par :

$$\tau = \frac{l}{v_0}$$

Avec  $\frac{1}{2} m v_0^2 = \frac{3}{2} k_B T$ , on trouve  $v_0 \approx 10^6 \text{ m.s}^{-2}$ , ce qui donne un libre parcours moyen de l'ordre de l'Angström (valeur indépendant de  $T$  dans ce modèle). Néanmoins, on peut mesurer le libre parcours moyen de mesurer la résistivité selon l'épaisseur conductrice utilisée, une différence notable apparaissant quand on atteint le libre parcours moyen.



Et on trouve expérimentalement des valeurs de l'ordre de la centaine d'Angström. En fait, par un heureux hasard, Drude trouve avec son modèle une vitesse et un libre parcours moyen 100 fois trop élevés, ce qui permet d'avoir le bon temps caractéristique  $\tau$ .

De plus, Drude trouve presque la bonne valeur de  $L$ ... à un facteur 2 près !

↓ On va tenter un nouveau modèle.

## 2 Modèle de Sommerfeld

### 2.1 Détails du modèle

Le modèle de Drude donnant de plutôt bons résultats, on garde l'expression de la conductivité (et celle de  $\kappa$  aussi mais c'est pas important). La longueur d'onde de de Broglie des électrons est du même ordre de grandeur que la distance entre atome... il faut donc un modèle quantique ! Les électrons sont donc maintenant considérés comme des particules quantiques mais libres. On va essayer de trouver les bonnes valeurs de  $l$  et  $v_0$  avec un modèle quantique.

Un électron suit donc l'équation de Schrödinger avec un potentiel nul :

$$\begin{aligned}\mathcal{H}\psi(\vec{r}) &= -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\vec{r}) = \mathcal{E}\psi(\vec{r}) \\ -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) &= \mathcal{E}\psi(\vec{r})\end{aligned}$$

On sait que les solutions de cette équation sont des ondes planes :

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}}e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \quad \mathcal{E}(\vec{k}) = \frac{\hbar^2\vec{k}^2}{2m}$$

De plus,

$$\hat{p}\psi = -i\hbar\vec{\nabla}e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} = \hbar\vec{k}e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$$

donc on a :

$$\vec{p} = \hbar\vec{k} \quad \text{et} \quad \mathcal{E} = \frac{\vec{p}^2}{2m}$$

On suppose ensuite des conditions aux limites périodiques (dites de Born-Von Karman) :

$$\begin{aligned}\psi_{\vec{k}}(x, y, z + L) &= \psi_{\vec{k}}(x, y, z) \\ \psi_{\vec{k}}(x, y + L, z) &= \psi_{\vec{k}}(x, y, z) \\ \psi_{\vec{k}}(x + L, y, z) &= \psi_{\vec{k}}(x, y, z)\end{aligned}$$

ce qui quantifie les vecteurs d'onde possibles :

$$k_{x,y,z} = \frac{2\pi}{L}n_{x,y,z}, n_{x,y,z} \text{ entiers}$$

Autrement dit, l'espace des vecteurs d'onde est rempli de vecteurs possibles avec chaque point occupant un volume  $\frac{(2\pi)^3}{V}$ . La densité de vecteur d'onde vaut donc  $\frac{V}{(2\pi)^3}$ .

On peut ensuite remplir ces différents vecteurs d'onde avec les  $N$  électrons dont l'on dispose, sachant que l'on remplit des énergies les plus faibles aux énergies plus plus grande, en respectant le principe de Fermi. On introduit alors l'énergie  $E_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m}$  l'énergie de Fermi qui est le maximum d'énergie atteint par les électrons. On a alors :

$$N = 2 \left( \frac{4}{3}\pi k_F^3 \right) \left( \frac{V}{8\pi^3} \right)$$

on en tire  $n = \frac{N}{V}$

$$n = \frac{k_F^3}{3\pi^2}$$

Là encore, on a réussi à relier une grandeur macroscopique  $n$  à une grandeur microscopique  $k_F$ . On peut alors exprimer  $k_F$  juste avec  $n$  qui est connu ! On peut alors exprimer une vitesse typique des électrons, dite vitesse de Fermi  $v_F = p_F/m$  :

$$v_F = \left( \frac{\hbar}{m} \right) k_F$$

On peut légitimer pourquoi on prend  $k_F$  avec le déplacement de la sphère : seuls les atomes aux bords de la sphère comptent pour la conduction. OdG L'énergie de FERMI est équivalente généralement, en température à 10000K. Ce qui donne une vitesse de FERMI entre  $10^5$  et  $10^6 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$ .

## 2.2 Victoires et défaites du modèle de Sommerfeld

Le modèle de Sommerfeld permet de retrouver non seulement la loi de Wiedeman-Franz mais aussi le bon ordre de grandeur pour la vitesse et le libre parcours moyen. La valeur de la conductivité thermique ne change pas. Néanmoins les dépendances en température ne sont plus les mêmes que pour le modèle de Drude, qui ne sont toujours pas les dépendances attendues expérimentalement !

## Drude

## Sommerfeld

$$\begin{aligned}
 \sigma &= \frac{ne^2}{m} \tau = \frac{ne^2}{m} \underbrace{\underbrace{\tau_0}_{\propto \sqrt{\frac{k_B T}{m}}}}_{\propto \sqrt{\frac{k_B T}{m}}} \underbrace{\underbrace{\hbar k_F}_{\propto \sqrt{T}}}_{\propto \sqrt{T}} \\
 \kappa &= \frac{1}{3} v_0^2 c_v \tau = \frac{1}{3} \underbrace{\underbrace{v_0^2}_{\propto T}}_{\propto T} \underbrace{\underbrace{c_v}_{\propto \sqrt{T}}}_{\propto \sqrt{T}} \underbrace{\underbrace{\tau}_{\propto \sqrt{T}}}_{\propto \sqrt{T}} \\
 &\quad \underbrace{\frac{3}{2} n k_B}_{\propto T} \underbrace{\frac{\pi^2}{2} \left( \frac{k_B T}{\epsilon_F} \right) n k_B}_{\propto T}
 \end{aligned}$$

$$\sigma \propto \frac{1}{\sqrt{T}} \quad \kappa \propto \sqrt{T} \quad T$$

$$\boxed{\frac{\kappa}{\sigma} \propto T}$$

Expérimentalement,  $\sigma \propto \frac{1}{T}$ . De même, on reprend l'expression de  $\kappa$  pour laquelle il faut trouver l'expression de  $c_v$  dans le modèle du gaz de fermions. Après des calculs dont le développement ici n'aurait aucun sens, on trouve  $c_v = \frac{\pi^2}{2} \left( \frac{k_B T}{\epsilon_F} \right) n k_B$ . On a alors l'expression de  $\kappa$  pour un gaz de fermions. On peut alors exprimer le rapport  $\frac{\kappa}{\sigma T}$  et, oh miracle, on retrouve

$$\frac{\kappa}{\sigma T} = \frac{\pi^2}{3} \left( \frac{k_B}{e} \right)^2 = 2.44 \times 10^{-8} \text{W} \cdot \Omega \cdot \text{K}^{-2}$$

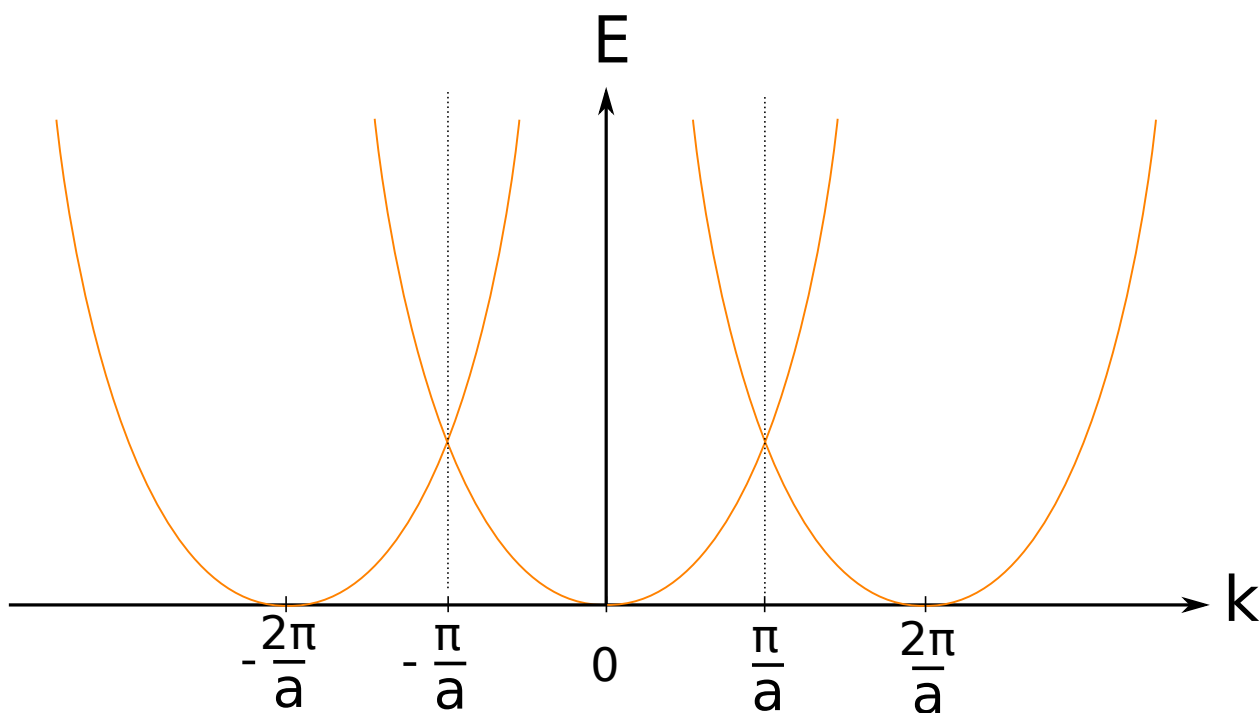
Cette fois-ci, on retrouve bien la valeur obtenue expérimentalement, sans facteur 2 parasite!

On peut néanmoins remarquer que l'on a pas résolu le problème de la différence entre les matériaux conducteurs et les matériaux isolants.

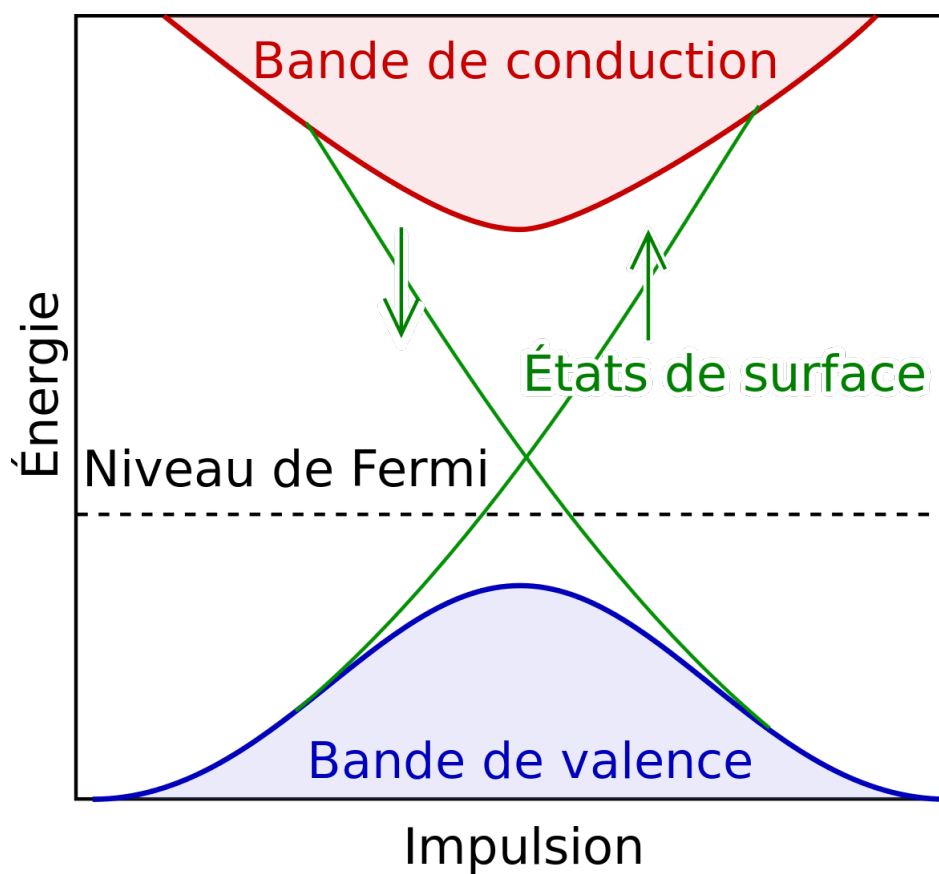
### 3 Modèle des bandes

#### 3.1 Bandes énergétiques

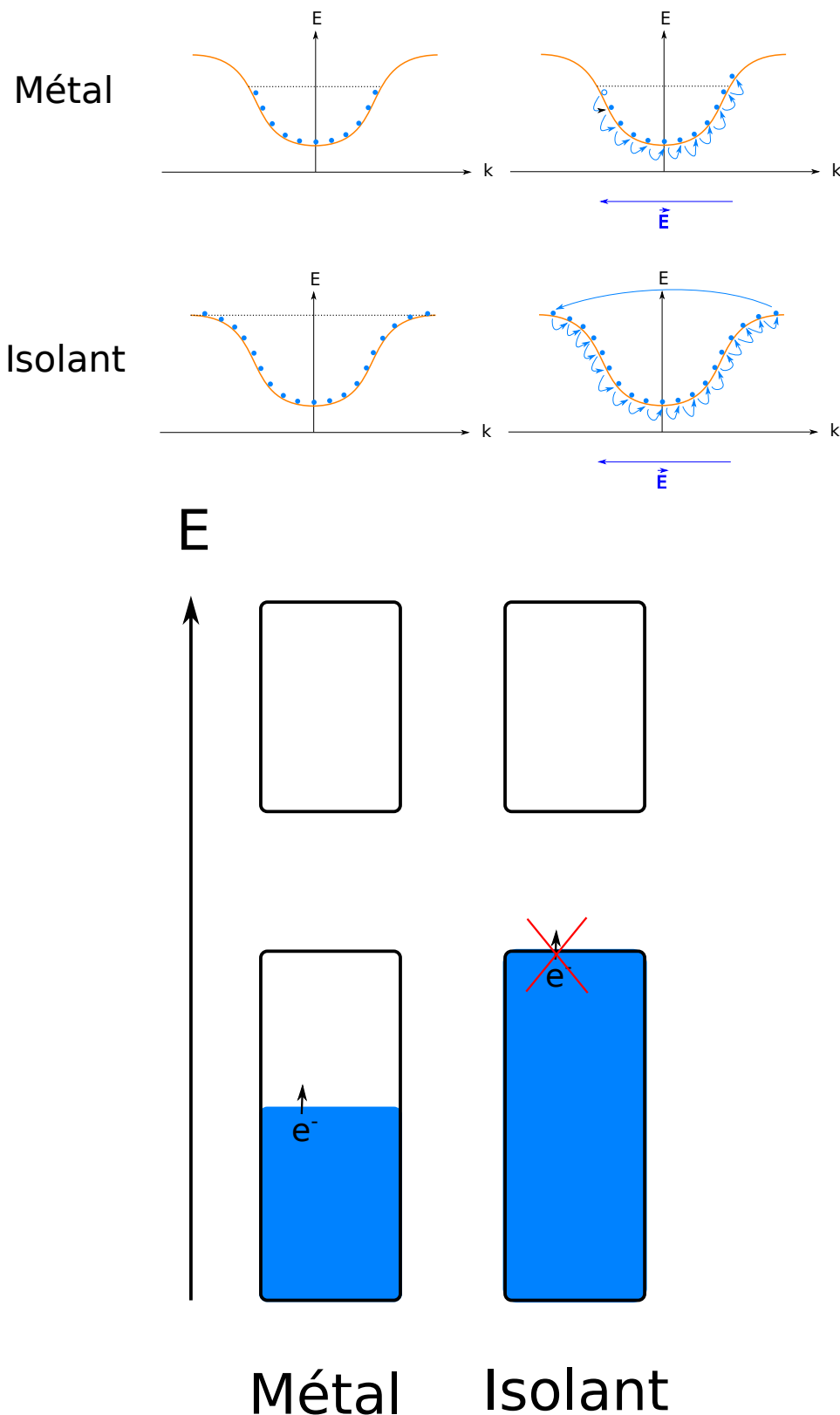
On va ici prendre en compte le fait que les électrons sont sur un réseau (que l'on considèrera en une dimension ici) d'un certain pas  $a$ . L'énergie d'un seul électron libre est de la forme  $E_0 = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ . Néanmoins, les électrons étant sur un réseau de pas  $a$ , le théorème de Bloch stipule que les énergies sont les mêmes tous les  $n \frac{2\pi}{a}$ .



On remarque donc qu'en  $\pm\frac{\pi}{a}$ , on a un problème et les électrons interagissent entre eux. les énergies sont alors modifiées :



## 3.2 Interprétation



## Questions

La loi d'Ohm reste-t-elle toujours valable en régime variable ? Conséquence ?

Pourquoi considérer qu'après le choc l'électron a une vitesse nulle ?

Signification de la distribution de Fermi Dirac ?

**Comment définir un fermion à un élève ? Particularités d'un gaz de Fermion ?**

**Appliquer une statistique de Maxwell-Boltzmann aux électrons revient-il à les assimiler à un gaz parfait ?**

**Est-il légitime de négliger les interactions électromagnétiques entre les particules dans un métal ?**

**En mécanique quantique, les électrons doivent ils être considérés comme des particules ?**

**Supraconducteur ? La loi d'Ohm est-elle encore valable ? Loi équivalente pour les supraconducteurs ?**

**Pour illustrer l'effet Hall, vous avez pris un conducteur long dans le sens du courant et étroit dans l'autre sens (un rectangle quoi). Si on fait cela dans l'autre sens en prenant quelque chose de très long pour pas avoir d'accumulation de charges et très court dans le sens du courant pour que les électrons soit absorbés de suite, qu'est-ce qui se passe ? Quel est cet effet ? Effet Hall quantique ?**

**Soudures de la sonde de Hall qui ne sont pas forcément en face, comment on fait ? Comment le constructeur fait-il pour corriger ce problème ? Vous avez un bouton réglage du zéro sur le dispositif, il sert à quoi ?**

**Quelle est la vitesse dans le modèle de Drude ? Et dans l'effet Hall ?**

**Les électrons subissent des collisions, avec quoi se produisent-elles dans un monocristal parfait ?**

**Comment peut-on mesurer le temps de relaxation tau ?**

**Connaissez-vous l'ordre de grandeur de la magnéto-résistance pour un conducteur ou un semi-conducteur ?**

**Pouvez-vous donner un ordre de grandeur pour le gap du Si ?**

**Que veut dire conduction par des trous ?**

**Comment évolue la conductivité molaire ionique en fonction de la taille de l'ion ?**

**Si on considérait les électrons dans le métal comme un gaz, comment peut-on évaluer leur vitesse ?**

**A l'époque de Drude, est-ce qu'on connaissait le noyau ? Non, Drude a fait l'hypothèse de l'existence d'un corps positif immobile pour compenser la charge des  $e^-$**

**Quelles sont les hypothèses les plus fortes/osées du modèle de Drude ? GP : en réalité, il peut y avoir des interactions entre électrons et densité très importante des électrons.(donner l'OdG).  
Hyp des collisions car on ne se donne aucun modèle.**

**Différences de conductivité entre Cuivre, Carbone, Verre,...**

**Autre limite du modèle de Drude Mauvais dépendance en température.**

**Autre victoire du modèle de Drude La conductivité est proportionnelle à T**

**CL quand écrit le thm de Bloch ? CL périodiques pour décomposer sur des ondes progressives, cohérent pour un phénomène de conduction  
Par rapport aux CL stationnaires pour décomposer sur des ondes stationnaires**

**Est-ce que tu peux justifier que le potentiel atomique est traité comme une perturbation ? Ecrantage par les autres électrons**

**Remplissage des bandes : tu l'as fait à T nulle, est-ce qu'à T ambiante, ça change beaucoup ? On remplit une bande de largeur  $kT$  qui est très petite devant l'énergie de Fermi, donc effet négligeable.**

**Différence modèle de Sommerfeld et modèle de Drude ? On passe d'une vision classique à une vision quantique de l'électron mais Sommerfeld garde quand même le modèle de Drude.**

**Comportement d'un métal avec la température ? D'un semi-conducteur ?** Métal : la conductivité diminue avec la température (l'agitation thermique prend le dessus et donc on augmente le nombre de phonons), à basse température, on ne peut pas négliger les interactions avec les défauts ce qui limite la conductivité  
Semi-conducteur : la conductivité augmente quand la température augmente car on peuple plus la bande de conduction (c'est pourquoi les semi-conducteurs étaient intrigant)

**Conductivité pour les supraconducteurs ?** Résistivité qui chute à zéro en-dessous d'une température critique

**Analogie supra en méca flu ?** Les superfluides : aucune viscosité

Supra : les électrons se déplacent sans collision

Superfluide : les particules de fluide se déplacent sans frottement

## Remarques

-