

# LP47 – MÉCANISMES DE LA CONDUCTION ÉLECTRIQUE DANS LES SOLIDES

29 mai 2019

Lagoin Marc & Ramborghi Thomas

## Niveau : L3

## Commentaires du jury

- Ne pas restreindre uniquement la leçon à l'étude de la convection dans les métaux.
- Il est important de discuter des hypothèses dans le modèle de Drude ainsi que ces limites.

## Bibliographie

- ♣ *Physique des solides*, Neil W. Ashcroft et N. David Mermin Bible de la physique du solide. Voir chapitre 1.
- ♣ *Mécanique quantique*, C. Cohen-Tannoudji, B Diu et F Laloë Bible de la MQ. Voir complément *O<sub>III</sub>* p 366.

## Prérequis

- Modèle de l'atome
- Force de Lorentz
- Loi d'Ohm
- Bases en mécanique quantique (eq de Schrödinger, particule dans un puits, courant de probabilité)

## Table des matières

|          |                                                                           |          |
|----------|---------------------------------------------------------------------------|----------|
| <b>1</b> | <b>Théorie de Drude des métaux</b>                                        | <b>2</b> |
| 1.1      | Positionnement du modèle . . . . .                                        | 2        |
| 1.2      | Étude de la conductivité en courant continu . . . . .                     | 3        |
| 1.3      | Effet Hall . . . . .                                                      | 4        |
| <b>2</b> | <b>Traitement quantique d'une particule dans une structure périodique</b> | <b>6</b> |
| 2.1      | Mise en équation . . . . .                                                | 6        |
| 2.2      | Notion de bande d'énergie et quantification des niveau . . . . .          | 8        |
| 2.3      | Distinction conducteur -isolant . . . . .                                 | 9        |

## Introduction

Nous partons d'un constat expérimental : nous remarquons que certains matériaux conduisent bien le courant et la chaleur alors que d'autres non. Quels sont les propriétés microscopiques à l'origine de ces différences ? Nous nous intéresserons seulement au cas de la conduction électrique dans cette leçon. Elle se définit comme l'aptitude d'un matériau (ou d'une solution) à laisser les charges électriques se déplacer librement et donc permettre le passage d'un courant électrique. Voici un tableau donnant les conductivités électriques pour différents matériaux permettant de voir la large gamme de valeur que cette grandeurs peut prendre.

| Matériaux     | Conductivité électrique (en $\text{S.m}^{-1}$ ) |
|---------------|-------------------------------------------------|
| Cuivre        | $5,8 \cdot 10^7$                                |
| Tungstène     | $1,8 \cdot 10^7$                                |
| Plomb         | $4,5 \cdot 10^6$                                |
| Porcelaine    | $1 \cdot 10^{-16}$                              |
| Verre sodique | $1 \cdot 10^{-17}$                              |
| Polystyrène   | $1 \cdot 10^{-20}$                              |

Nous commençons par une approche classique de la conduction dans les métaux. Puis, après avoir montré les limites de notre modèle, nous proposerons un modèle quantique plus riche et plus proche des observations. Finalement, nous verrons comment expliquer la conduction dans les matériaux semi-conducteur à partir des connaissances établies préalablement.

## 1 Théorie de Drude des métaux

### 1.1 Positionnement du modèle

La découverte de l'électron en 1897 par J.J. Thomson eu un impact important dans l'étude de la conduction électrique. En effet, trois ans seulement après, Drude proposa son modèle en considérant le système comme un gaz d'électron. Ce traitement par analogie à la théorie cinétique des gaz peut sembler osé puisque le nombre typique d'électron par  $\text{cm}^3$  est de l'ordre de  $10^{22}$  soit 1000 fois plus dense qu'un gaz classique dans des conditions normales de température et de pression.

Malgré que le modèle de l'atome n'était pas encore établis (premier modèle proposé par Thomson en 1904 : le pudding!), Drude supposa que la charge positive soit portée par des particules de grandes masses devant celle des électrons, et qui seront ainsi considérées comme immobile.

Dans ce modèle, nous considérons que les électrons libre dit de conduction sont délocalisés et se meut librement dans le métal. Un schéma explicatif est donné en figure 1.

Les hypothèses fondamentales du modèle sont :

- *L'approximation des électrons indépendants* qui stipule que les interactions entre électrons sont négligées entre deux collisions ainsi que *l'approximation des électrons libres* qui considère que les interactions avec les noyaux le sont également. Par conséquent, les électrons sont considérés comme des particules ne subissant aucune force dans ce modèle. La première approximation reste très bonne pour des études plus sophistiquées ; ce qui n'est pas le cas de la seconde qui sera vite mise à défaut.
- *Les électrons libres subissent des collisions avec les noyaux. Elles sont considérées comme instantanées et variant de manière abrupte la vitesse des électrons.*
- *La probabilité qu'un électron subisse une collision durant un intervalle  $dt$  est :  $\frac{dt}{\tau}$  où  $\tau$  est le temps de relaxation ou temps de libre parcours moyen.*
- *Nous supposons que les électrons sont à l'équilibre thermique avec l'environnement via leurs collisions. Après collision, les électrons repartent avec une direction aléatoire et une vitesse correspondant à la température où a lieu la collision.*

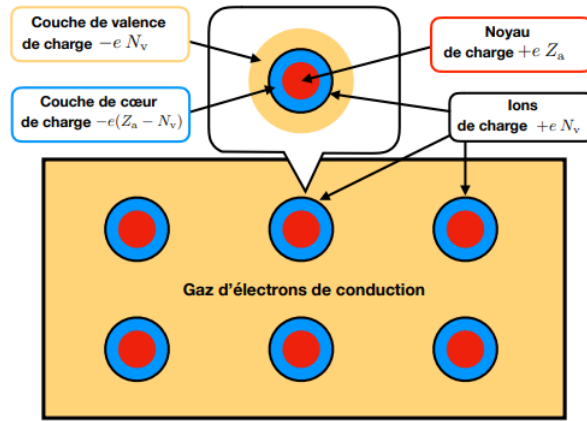


FIGURE 1 – Représentation schématique des électrons de conduction libre de se mouvoir entre différents sites fixes et chargés positivement. Ce schéma est pris du poly d'Anthony Garcia.

### Transition :

Maintenant que les bases du modèle ont été posé, nous allons voir si ce dernier est en accord avec les constations expérimentales et les lois déjà établis.

## 1.2 Étude de la conductivité en courant continu

Nous allons commencer par montrer que ce modèle permet d'expliquer le comportement énoncé par la fameuse loi d'Ohm et de donner une estimation de la résistance d'un morceau de métal (ici un fil).

Si nous appliquons un champ électrique en un point d'un métal, il apparaît un courant relié au champ exciteur par :

$$\vec{j} = \sigma \vec{E} \quad \text{avec } \sigma \text{ la conductivité.} \quad (1)$$

La densité de courant peut être exprimée en fonction de la densité d'électron libre  $n$  ainsi que de leur vitesse moyenne  $\langle \vec{v} \rangle$  par la relation :

$$\vec{j} = -n e \langle \vec{v} \rangle \quad (2)$$

Prenons le cas d'un électron de masse  $m_e$  et définissons l'origine des temps suite à l'une de ces collisions. Sa vitesse à un temps ultérieur  $t$  est donnée grâce au principe fondamental de la dynamique :

$$m \frac{d}{dt} \vec{v} = -e \vec{E} \quad (3)$$

Si nous choisissons l'axe Ox parallèle au champ  $\vec{E}$  nous obtenons :

$$\int_{v(0)}^{v(\tau)} d\vec{v} \cdot \vec{e}_x = \int_0^\tau -\frac{e}{m_e} \vec{E} \cdot \vec{e}_x dt \quad (4)$$

La vitesse  $v_0$  correspond à la vitesse de l'électron juste après la collision. Nous allons résonner de nouveau en valeur moyenne sur un grand nombre d'électron et cette dernière devient donc nulle (direction aléatoire après collision). Nous obtenons alors :

$$\langle \vec{v} \rangle = -\frac{e E \tau}{m_e} \quad (5)$$

Nous trouvons ainsi une conductivité de la forme :

$$\sigma = \frac{n e^2 \tau}{m_e} \quad (6)$$

Par intégration sur la section d'un fil, nous obtenons la loi ohm. La résistance obtenu est indépendante de l'intensité du courant ou de la chute de tension.

Pour voir si les résultats sont cohérents avec les hypothèses du modèle, nous pouvons calculer le temps typique de relaxation qui est la seule grandeur inconnue dans l'expression de la conductivité (donc de la résistance). Pour cela, nous allons reprendre la formule précédente en introduisant la résistivité  $\rho$  qui est simplement l'inverse de la conductivité. Il s'agit d'une grandeur qui peut être mesurée expérimentalement puisqu'elle est reliée à la résistance  $R$  du métal de longueur  $d$  et de section  $S$  par :

$$R = \rho \frac{d}{S} \quad (7)$$

Nous obtenons, à température ambiante, des temps de relaxations de l'ordre de  $10^{-14}$ s à  $10^{-15}$ s suivant le métal considéré. Pour voir si ces résultats semblent cohérents avec le modèle ou non, nous calculons le libre parcours moyen  $l = \tau \langle \vec{v} \rangle$  en utilisant l'équipartition de l'énergie pour déterminer  $\langle \vec{v} \rangle$  :

$$\frac{1}{2} m \langle \vec{v} \rangle^2 = \frac{3}{2} k_B T \quad (8)$$

Nous trouvons que le libre parcours moyen  $l$  varie entre 1 et 10 Å. Cette distance est en accord avec le modèle puisqu'il s'agit de l'échelle typique atomique et nous avons supposé que les électrons subissaient des collisions avec les noyaux.

Notons qu'aujourd'hui, nous obtenons à basse température et avec des échantillons soigneusement préparés, des libre parcours moyens de l'ordre du centimètre ! Il s'agit ici d'une première limite du modèle de Drude. Les électrons ne se contentent pas de se collisionner sur les noyaux fixes. Il peut être seulement tout à fait pertinent d'avoir recours à ce modèle dans certains cas, notamment quand les prédictions physiques ne dépendent pas de ce temps de relaxation.

### Transition :

Avant de pouvoir appliquer cette théorie à un résultat expérimental tout à fait remarquable, il nous faut définir rapidement notre PFD dans le cas non stationnaire (présence d'un champ magnétique statique et uniforme ou champ électrique uniforme mais dépendant du temps).

Nous pouvons relier notre densité de courant à la quantité de mouvement totale par électron :

$$\vec{j} = - \frac{n e}{m_e} \vec{p}(t) \quad (9)$$

Il est alors possible d'étudier la quantité de mouvement à un temps  $t + dt$  la connaissant à un instant  $t$  et en nous rappelant la probabilité de collision énoncée lors des hypothèses. Nous obtenons :

$$\frac{d}{dt} \vec{p}(t) = - \frac{\vec{p}(t)}{\tau} + f(t) \quad (10)$$

où  $f(t)$  représente la force subie par l'électron (champ électrique ou magnétique).

*Nota Bene* : Si le calcul pour obtenir le résultat ne semble pas facile, il faut alors le relire p12 dans le Ashcroft.

Nous voyons apparaître un terme d'amortissement traduisant les collisions individuelles des électrons.

## 1.3 Effet Hall

En 1879, E. Hall découvrit un effet qui porte aujourd'hui son nom. Il cherchait à comprendre si la force subie par un conducteur plongé dans un champ  $\vec{B}$  était exercée sur la totalité du matériau ou uniquement sur les électrons mobiles. Un schéma du montage est donné en figure 2.

Un matériau électrique est soumis à un champ électrique  $\vec{E} = E \vec{e}_x$  orienté suivant  $\vec{e}_x$ . Comme nous l'avons vu précédemment, ce champ génère un courant  $j_x$ . De plus, nous appliquons également un champ magnétique  $\vec{B} = B \vec{e}_z$  orienté suivant  $\vec{e}_z$ . Le flux d'électrons subit donc une force de Lorentz  $\vec{F}_L$  suivant les  $y$  négatif qui tend à les dévier. Si la largeur du matériau est suffisamment faible, les électrons vont s'accumuler sur un des bords du matériau.

*Nota Bene* : Si le matériau est suffisamment large les électrons vont suivre un mouvement circulaire.

Cette accumulation va se traduire par l'apparition d'un champ  $E_H$  dit de Hall dont la force associée va venir petit à petit compenser la force de Lorentz. Le courant se mettra alors de nouveau à circuler suivant Ox.

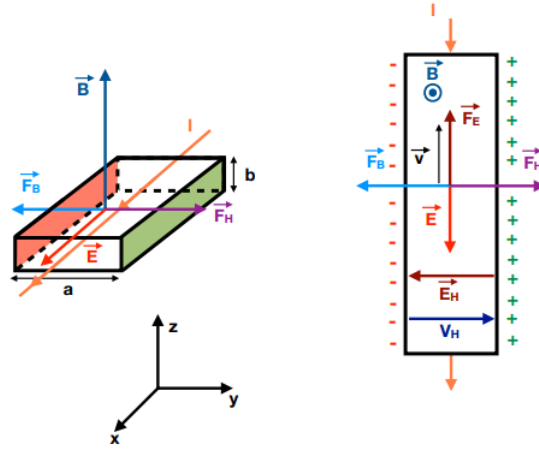


FIGURE 2 – Représentation schématique de l'effet Hall. Ce schéma est pris du poly d'Anthony Garcia.

Nous définissons alors 2 grandeurs caractéristique de l'effet Hall. La première est la magnétorésistance  $\rho_H$  qui est le rapport du champ suivant  $E_x$  sur la densité de courant suivant cette même direction. Hall montra que cette grandeur est indépendante du champs  $\vec{B}$ . La seconde est la constante de Hall  $R_H$  définit par :

$$R_H = \frac{E_y}{j_x B} \quad (11)$$

Pour calculer ces grandeurs, écrivons le PFD donné précédemment appliqué à notre problème :

$$\frac{d}{dt} \vec{p}(t) = -\frac{\vec{p}(t)}{\tau} - e \left( \vec{E} + \frac{\vec{p}}{m_e} \wedge \vec{B} \right) \quad (12)$$

Une fois le régime permanent établis, notre équation projetée sur les axes Ox et Oy nous donne le système :

$$\begin{cases} 0 = -e E_x - \omega p_y - \frac{p_x}{\tau} \\ 0 = -e E_y - \omega p_x - \frac{p_y}{\tau} \end{cases} \quad \text{où : } \omega = \frac{eB}{m_e} \quad (13)$$

Si nous voulons obtenir une formule similaire à la loi d'Ohm, nous sommes invités à multiplier chaque équation par :  $-\frac{n e \tau}{m_e}$  pour faire apparaître la conductivité électrique  $\sigma$ . Nous obtenons alors :

$$\begin{cases} \sigma E_x = \omega \tau j_y + j_x \\ \sigma E_y = -\omega \tau j_x + j_y \end{cases} \quad (14)$$

Lorsque la force associée au champ de Hall compense exactement la force de Lorentz la composante suivant Oy du courant doit être nulle. Nous en déduisons l'expression du champ de Hall :

$$E_y = -\left(\frac{\omega \tau}{\sigma}\right) j_x \quad (15)$$

Nous en déduisons alors la constante de Hall :

$$R_H = -\frac{1}{n e} \quad (16)$$

Nous obtenons une expression qui ne dépend que de la densité de porteur de charge. Il s'agit d'une hypothèse facile à vérifier expérimentalement pour tester le model de Drude à première vu. Il prévoit notamment une constante  $R_H$  négative pour des porteur de charge négative tel que les électrons.

Cependant nous constatons expérimentalement que la densité de porteur de charge calculé à partir de la mesure de la constante de Hall dépend du champ appliqué et de la température ; ce qui n'est pas prédit par le modèle. par ailleurs, nous trouvons des valeurs de  $R_H$  positives pour certains métaux, notamment l'aluminium indiquant des porteurs de charge positive.

### Transition :

Nous avons vu que le modèle de Drude permettait une première approche de la conduction dans les métaux mais certains résultats expérimentaux ne semblent pas concorder à la théorie. Nous pouvons citer comme autre limite la vitesse d'agitation des électrons qui est sous-estimée. Nous ne comprenons pas non-plus très bien pourquoi les électrons ne ressentent aussi peu les effets des ions immobiles et des autres électrons. Pour aller plus loin, nous devons passer à un modèle plus sophistiqué.

## 2 Traitement quantique d'une particule dans une structure périodique

Nous allons dans cette partie proposer un traitement quantique de nos électrons mobiles. Nous considérons donc des électrons se déplaçant dans un potentiel imposé par les noyaux qui sont toujours considérés fixes. nous prendrons le cas simple d'un matériau pur et ordonné (cristal) et nous pouvons donc considérer un potentiel  $V(x)$  périodique de période  $l$  comprenant  $N$  motifs. Nous limiterons l'étude à une seule dimension. Un schéma la fonction  $V(x)$  pour  $N = 3$  est donné en figure 3.

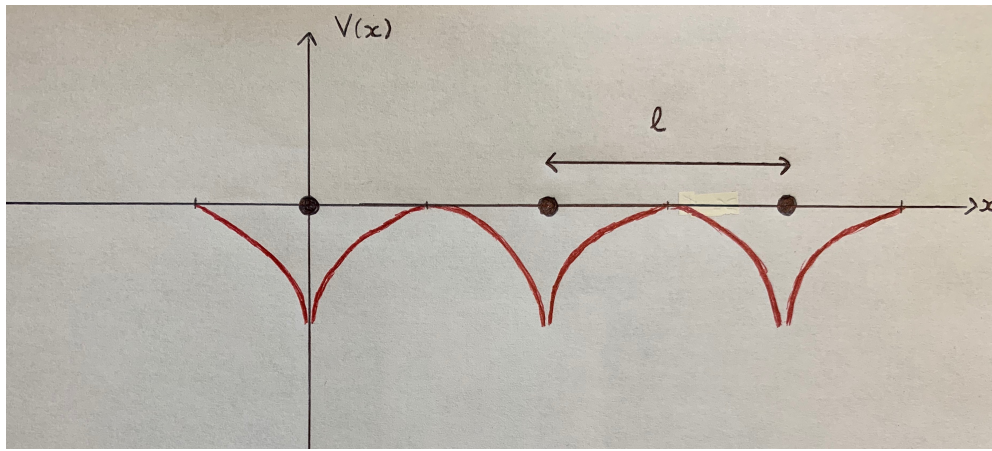


FIGURE 3 – Schéma donnant l'allure du potentiel  $V(x)$  provoqué par 3 noyaux régulièrement espacés.

### 2.1 Mise en équation

Nous appelons  $\mathcal{H}$  l'hamiltonien du problème et  $\varphi_\alpha(x)$  les fonctions propres associées. Pour rappel, l'équivalent du PFD en mécanique quantique est l'équation de Schrödinger :

$$\mathcal{H} |\varphi_\alpha\rangle = E |\varphi_\alpha\rangle \quad (17)$$

Pour notre système d'intérêt, une fois projetée sur le vecteur position  $|x\rangle$ , nous obtenons :

$$\left( \frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{d^2}{dx^2} + (E - V(x)) \right) \varphi_\alpha(x) = 0 \quad \text{où :} \quad E = \frac{\hbar^2 \alpha^2}{2m_e} \quad (18)$$

Appliquons la même méthode que celle que nous avons utilisée pour l'étude d'une particule dans un puit : donnons la forme des solutions dans différents domaines et raccordons les solutions.

- Dans le premier puits, nous pouvons écrire la solution générale comme une combinaison de 2 fonctions  $v_\alpha(x)$  et  $v_\alpha^*(x)$ <sup>1</sup> :

$$\text{Si } -\frac{l}{2} \leq x \leq \frac{l}{2} : \varphi_\alpha(x) = A_1 v_\alpha(x) + B_1 v_\alpha^*(x) \quad (19)$$

- Par conséquent, la solution générale dans le  $n^{\text{ème}}$  puits nous donne :

$$\text{Si } (n-1)l - \frac{l}{2} \leq x \leq (n-1)l + \frac{l}{2} : \varphi_\alpha(x) = A_n v_\alpha(x - (n-1)l) + B_n v_\alpha^*(x - (n-1)l) \quad (20)$$

1. si  $v_\alpha(x)$  est solution alors  $v_\alpha^*(x)$  est solution également car l'équation de Schrödinger stationnaire est invariante par renversement du temps. Nous pouvons donc proposer une combinaison linéaire comme solution générale.

Nous devons préciser maintenant la forme de la fonction  $v_\alpha$ . Considérons que l'électron se situe dans le premier puits et que sa fonction d'onde est une combinaison linéaire d'onde plane. S'il parvient à aller dans le puits suivant, sa fonction d'onde sera alors une combinaison linéaire d'une onde plane se déplaçant suivant les  $x$  positifs et d'une onde plane se déplaçant suivant les  $x$  négatifs comme nous l'avons vu dans l'exemple d'une onde plane arrivant sur une marche de potentiel finit. D'où :

$$v_\alpha(x) = F(\alpha)e^{i\alpha x} + G^*(\alpha)e^{-i\alpha x} \quad (21)$$

Les coefficients  $A_2$  et  $B_2$  sont reliés aux coefficients  $A_1$  et  $B_1$  par :

$$\begin{pmatrix} A_2 \\ B_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{i\alpha l} F(\alpha) & e^{i\alpha l} G^*(\alpha) \\ e^{-i\alpha l} G(\alpha) & e^{-i\alpha l} F^*(\alpha) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} \quad (22)$$

La matrice reliant les coefficients est appelé matrice d'itération et sera noté  $Q(\alpha)$  par la suite. Soit  $\lambda$  les valeurs propres de cette dernière. Son équation caractéristique s'écrit :

$$(e^{i\alpha l} F(\alpha) - \lambda)(e^{-i\alpha l} F^*(\alpha) - \lambda) - |G(\alpha)|^2 = 0 \quad (23)$$

$$|F(\alpha)|^2 - \lambda(e^{i\alpha l} F(\alpha) + e^{-i\alpha l} F^*(\alpha))\lambda^2 - |G(\alpha)|^2 = 0 \quad (24)$$

Pour un état stationnaire  $|F(\alpha)|^2 - |G(\alpha)|^2 = 1$ . Montrons ce résultat.

Nous pouvons noter que la démonstration qui va suivre se réalise à partir d'un simple puits et peut donc être considéré comme un prérequis si nous manquons de temps. Nous pouvons dire par exemple qu'il s'agissait d'un exercice de TD.

Rappel : le courant associé à une fonction d'onde  $\varphi(x)$  s'écrit :

$$J(x) = \frac{\hbar}{2mi} \left( \varphi^*(x) \frac{d\varphi}{dx} - \varphi(x) \frac{d\varphi^*}{dx} \right) \quad (25)$$

En dérivant, nous obtenons :

$$\frac{d}{dx} J(x) = \frac{\hbar}{2mi} \left( \varphi^*(x) \frac{d^2\varphi}{dx^2} - \varphi(x) \frac{d^2\varphi^*}{dx^2} \right) \quad (26)$$

$$= 0 \quad \text{en utilisant l'équation de Schrödinger.} \quad (27)$$

Si la fonction d'onde  $\varphi(x)$  est de la forme :

$$\varphi(x) = A_i e^{ikx} + B_i e^{-ikx} \quad (28)$$

avec  $i$  l'indice repérant la région étudiée, alors nous obtenons la relation :

$$\frac{\hbar k}{m} (|A_1|^2 - |B_1|^2) = \frac{\hbar k}{m} (|A_2|^2 - |B_2|^2) \quad (29)$$

Or, nous avons vu que les coefficients  $A_2$  et  $B_2$  étaient reliés aux coefficients  $A_1$  et  $B_1$  par la matrice d'itération  $Q$ . D'où :

$$|A_2|^2 - |B_2|^2 = (FA_1 + G^*B_1)(F^*A_1^* + G^*B_1^*) - (GA_1 + F^*B_1)(G^*A_1^* + F^*B_1^*) \quad (30)$$

$$= (|F|^2 - |G|^2)(|A_1|^2 - |B_1|^2) \quad (31)$$

Nous en déduisons donc bien que

$$|F(\alpha)|^2 - |G(\alpha)|^2 = 1 \quad (32)$$

Ainsi, l'équation 24 devient :

$$-2\lambda\chi(\alpha) + \lambda^2 + 1 = 0 \quad (33)$$

où  $\chi(\alpha)$  est la partie réel du nombre complexe  $e^{i\alpha l}F(\alpha)$ . Notons que l'équation 32 nous indique que  $|F(\alpha)|^2 \geq 1$ .

Le discriminant de l'équation précédente est :

$$\Delta = 4(\chi^2(\alpha) - 1) \quad (34)$$

2 cas de figure :

- Si l'énergie est telle que  $\chi(\alpha) < 1$ , alors nous pouvons écrire :

$$\chi(\alpha) = \cos(k(\alpha)l) \quad \text{avec} \quad 0 \leq k(\alpha) \leq \frac{\pi}{l} \quad (35)$$

Dans ce cas, les valeurs propres sont  $\lambda = e^{\pm i k(\alpha)l}$ . Il s'agit de 2 valeurs complexe conjuguées et de module 1.

- Si au contraire, l'énergie nous donne une valeur de  $\alpha$  tel que  $\chi(\alpha) > 1$ , alors nous pouvons écrire :

$$\chi(\alpha) = \epsilon \cosh(\rho(\alpha)l) \quad \text{avec} \quad \rho(\alpha) \geq 0 \quad (36)$$

$\epsilon = 1$  si  $\chi(\alpha) > 0$  et  $\epsilon = -1$  si  $\chi(\alpha) < 0$ . Dans ce cas, les valeurs propres sont  $\lambda = \epsilon e^{\pm \rho(\alpha)l}$ . Il s'agit de 2 valeurs réelles et inverse l'une de l'autre.

Nous appelons  $\Lambda_1(\alpha)$  et  $\Lambda_2(\alpha)$  les vecteurs propres associées aux valeurs propres précédemment calculées. Nous décomposons alors le vecteur d'onde dans le puits 1 selon :

$$\begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} = c_1(\alpha) \Lambda_1(\alpha) + c_2(\alpha) \Lambda_2(\alpha) \quad (37)$$

Nous pouvons alors calculer facilement les coefficients associés au vecteurs d'onde des autres puits par application successive de la matrice d'itération  $Q$ . Nous obtenons :

$$\begin{pmatrix} A_n \\ B_n \end{pmatrix} = \lambda_1^{n-1} c_1(\alpha) \Lambda_1(\alpha) + \lambda_2^{n-1} c_2(\alpha) \Lambda_2(\alpha) \quad (38)$$

## 2.2 Notion de bande d'énergie et quantification des niveau

Nous constatons alors des effets très différents suivant que  $|\chi(\alpha)|$  soit inférieur ou supérieur à 1.

- Dans le premier cas, le passage d'un puits à l'autre se traduit par un simple déphasage des composantes de la matrice colonne exprimé dans la base  $\Lambda_1(\alpha)$ ,  $\Lambda_2(\alpha)$ .
- Dans l'autre cas, l'une des valeurs propres va s'atténuer très fortement et tendre vers 0. Ainsi pour un nombre suffisamment grand de puits, nous avons :

$$\begin{pmatrix} A_n \\ B_n \end{pmatrix} \simeq \epsilon^{n-1} e^{(n-1)\rho(\alpha)l} c_1(\alpha) \Lambda_1(\alpha) \quad (39)$$

Les coefficients vont donc cloître exponentiellement avec  $n$  ! Il ne s'agit pas d'un résultat et les valeurs correspondantes de l'énergie doivent donc être rejeté.

Pour obtenir les niveaux d'énergie nous effectuons une résolution graphique. Nous commençons par tracer l'évolution de la fonction  $\chi(\alpha) \Re(e^{i\alpha l}F(\alpha))$  en fonction de  $\alpha$ . Le facteur exponentiel nous indique que la courbe doit osciller. De plus nous avons remarquons remarquer que la norme de  $F(\alpha)$  était supérieur à 1. Par conséquent la courbe coupe les droite d'équation  $y = \pm 1$ . Nous pouvons éliminer les régions pour lesquelles la condition  $\chi(\alpha) < 1$  n'est pas vérifié.

Nous savons par ailleurs que la nature finie du matériau conduit à une quantification des valeurs de  $k$  possibles donc des niveaux d'énergie. Cependant du fait du nombre très important d'atome présent dans un matériau, les niveaux se retrouvent en réalité très rapproché et nous pouvons considéré que nous avons des bandes d'énergie permises plutôt que des valeurs discrètes. Les évolutions de  $\chi(\alpha)$  et de  $k(\alpha)$  en fonction de  $\alpha$  sont données en figure 4.

L'énergie en fonction de  $k$  est alors facilement obtenu grâce à la relation 18.

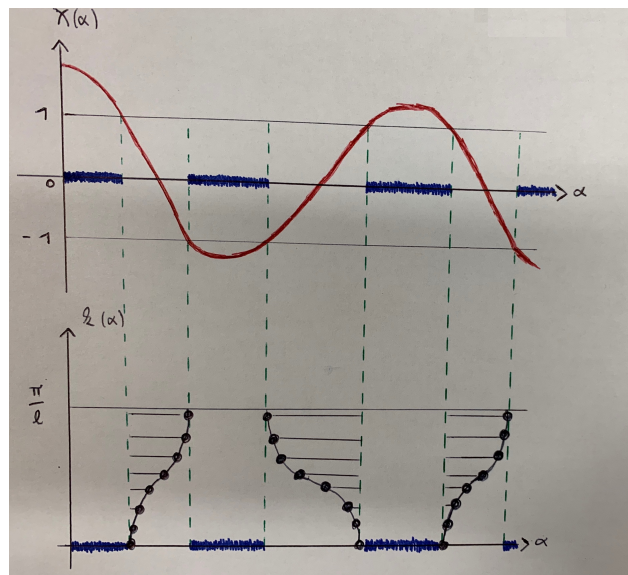


FIGURE 4 – Variation de  $\chi(\alpha)$  et de  $k(\alpha)$  en fonction de  $\alpha$ . Nous voyons apparaître des bandes interdite (en bleu) et des bandes permises constituées de 8 niveaux ici. En réalité ce nombre est le l'ordre du nombre d'Avogadro ; ce qui justifie que les niveaux d'énergie peuvent assimilés à des bandes.

### Transition :

Si nous regardons bien, cette étude quantique des électrons est à priori aussi valable pour les métaux que pour les isolants. Cependant nous remarquons qu'ils ne possèdent pas les même propriétés macroscopique. En effet les premiers conduisent bien l'électricité contrairement au second. Comment expliqué que cette différence n'est pas apparu dans notre modèle ? la réponse à cette question fera l'objet de notre dernière sous-partie.

## 2.3 Distinction conducteur -isolant

La réponse a cette question est que nous n'avons pas regarder comment se remplissait les niveaux d'énergie précédemment déterminés. Comme nous l'avons dit, nous avons un très grand nombre d'électrons (typiquement  $N_A$  et nous remplissons les bandes d'énergie avec la statistique de Fermi-Dirac jusqu'à l'énergie de Fermi, valeur max de l'énergie lorsque tous les niveaux sont occupés à  $T = 0K$  (faire un dessin et placer l'énergie de Fermi).

Nous définissons alors plusieurs bandes :

- la bande de valence : dernière bande remplie entièrement.
- la bande de conduction : première bande partiellement ou totalement vide.

Nous pouvons distinguer alors trois cas, ce qui nous permet de définir les trois types de matériaux.

- les conducteurs d'une part : ils ont une bande partiellement remplie, les électrons peuvent gagner de l'énergie et donc conduire le courant.
- d'autre part : les isolants et les semi-conducteurs ont une bande de valence pleine et une bande de conduction vide. La différence entre les deux va se faire grâce à la valeur de la différence d'énergie entre la bande de valence et la bande de conduction appelée énergie de gap  $E_g$ . Si  $E_g < 4eV$ , nous parlons de semi-conducteur. Si  $E_g > 4eV$ , nous parlons d'isolant. Par exemple, le Germanium a une énergie de gap de 0,66eV, le Silicium 1,12eV

## Conclusion

Au cours de cette leçon, nous avons vu un modèle classique de la conduction électrique avec le modèle de Drude qui nous permet de définir une conductivité électrique via la loi d'Ohm. Puis nous avons vu qu'un champ magnétique pouvait créer une différence de potentiel perpendiculairement avec l'effet Hall et que nous pouvions utiliser cet effet pour déterminer un champ magnétique ou caractériser un matériau. Cependant la version classique est limitée et est

loin de pouvoir expliquer toutes les constatations expérimentales. Pour cela, nous avons fait appel à une approche quantique avec la théorie des bandes qui montre que l'énergie se répartit sur des bandes et que certaines plages d'énergie sont interdites. En tenant compte du remplissage de ces bandes, nous avons pu expliquer pourquoi certains matériaux étaient des conducteurs et d'autres des isolants.

Il faut noter que nous avons parlé ici de semi-conducteurs intrinsèques. Il existe un autre type de semi-conducteur qui mérite notre attention. Il s'agit d'isolant dans lesquels nous avons fait varier la concentration électronique. Cette technique est appelée le dopage. Leur étude fera l'objet de notre prochaine leçon.