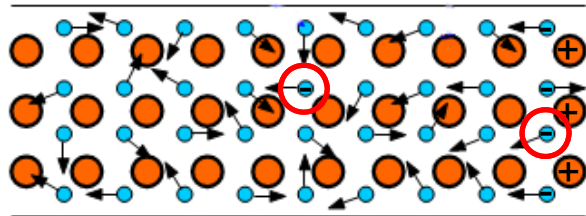


Les électrons dans les solides



Gilles Montambaux

11 mai 2020

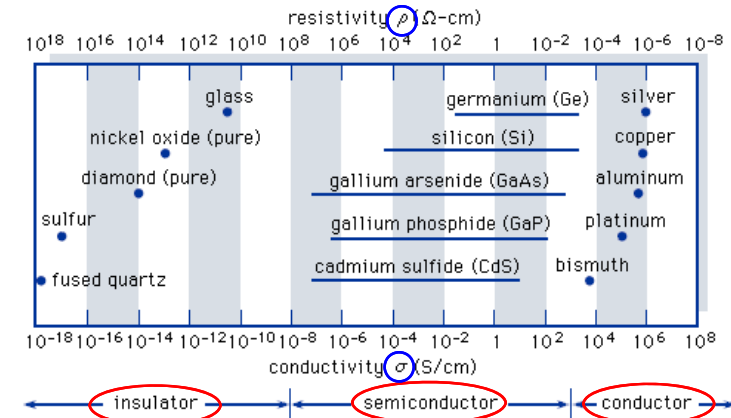


Électrons dans les solides

$$R = \rho \frac{L}{S}$$

$$\sigma = 1/\rho$$

Résistivité

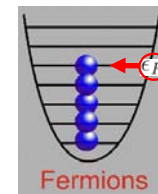


au moins 25 ordres de grandeurs entre un bon métal et un bon isolant

Électrons dans les solides

Plan du cours

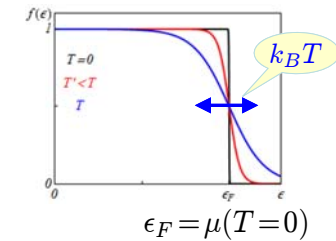
- I. Rappel sur le gaz parfait de fermions (électrons)
- II. Électrons dans un cristal, effet du réseau périodique
- III. Conducteurs et isolants
- IV. Semiconducteurs



Rappels facteur d'occupation d'un état quantique d'énergie ϵ

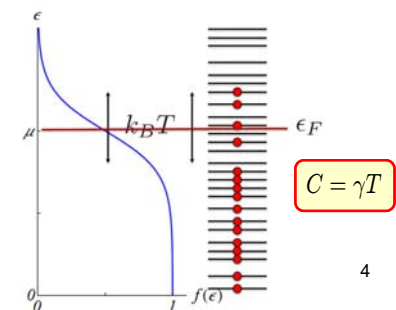
$$f(\epsilon) = \frac{1}{e^{\beta(\epsilon - \mu)} + 1}$$

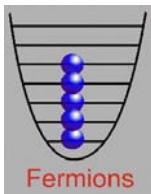
Fermi-Dirac



Les propriétés physiques dépendent de la structure du spectre au voisinage du niveau de Fermi

Les électrons situés loin du niveau de Fermi ne peuvent pas échanger d'énergie





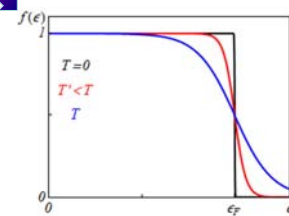
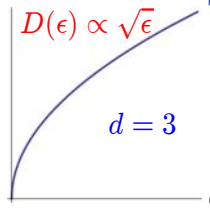
Rappels

$$N = \int D(\epsilon) f(\epsilon) d\epsilon \quad \text{Nombre de particules}$$

$$U = \int \epsilon D(\epsilon) f(\epsilon) d\epsilon \quad \text{Énergie interne}$$

densité d'états

facteur de Fermi



$$D(\epsilon) = 2 \frac{V}{4\pi^2} \frac{(2m)^{3/2}}{\hbar^3} \sqrt{\epsilon}$$

$$f(\epsilon) = \frac{1}{e^{\beta(\epsilon-\mu)} + 1}$$

$$\epsilon(\vec{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \implies D(\epsilon) \propto \epsilon^{d/2-1} \quad \text{en dimension } d \quad \text{cf. amphi 6, p. 20}$$

Pour caractériser un gaz de fermions, il faut d'abord évaluer sa température de Fermi

$$k_B T_F = (3\pi^2)^{2/3} \frac{\hbar^2 \rho^{2/3}}{2m}$$

Si $T \gg T_F$ gaz classique (non dégénéré)

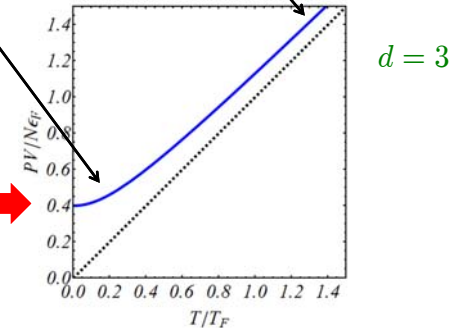
Si $T \ll T_F$ gaz « dégénéré »

T_F

gaz d'atomes ultrafroids	< 1 μ K
^3He liquide	1 K
él. dans les solides	10^4 K
él. dans les naines blanches	10^9 K

« Pression quantique »

$$U = \frac{3}{2} PV$$



Pour caractériser un gaz d'électrons, il faut d'abord évaluer son énergie (ou sa température) de Fermi

nombre d'électrons nombre d'états d'énergie inférieure à ϵ_F

$$N = \int_0^{\epsilon_F} D(\epsilon) d\epsilon = N_<(\epsilon_F)$$

$$N = 2 \frac{V}{(2\pi)^3} \frac{4\pi}{3} k_F^3 = 2 \frac{V}{(2\pi)^3} \frac{4\pi}{3} \left(\frac{2m\epsilon_F}{\hbar^2} \right)^{3/2} \quad \epsilon(\vec{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

$$k_B T_F = \epsilon_F = (3\pi^2)^{2/3} \frac{\hbar^2 \rho^{2/3}}{2m}$$

$$\rho = \frac{N}{V}$$

Dans un métal (sodium), $\rho \sim 2.5 \cdot 10^{28} m^{-3}$

$$\epsilon_F \sim 3 \text{ eV} \quad T_F \sim 36 \text{ 000 K}$$

$$eV \leftrightarrow k_B T$$

$$1 \text{ eV} \leftrightarrow 11600 \text{ K}$$

A température ambiante, $T \ll T_F$
les électrons d'un métal forment un gaz **fortement dégénéré**

Électrons dans un solide

$$4\pi\epsilon_0 = 1$$

Électrons libres ? NON ! Cette approximation est-elle valable ?

Hamiltonien des électrons

$$\mathcal{H} = \sum_i \frac{p_i^2}{2m} - \sum_{i,n} \frac{Ze^2}{|\vec{r}_i - \vec{R}_n|} + \sum_{i < j} \frac{e^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|}$$

Électrons libres

Interaction avec les noyaux fixés aux points \vec{R}_n d'un réseau périodique

Interaction entre les électrons

Conducteurs, isolants, semiconducteurs, transistors, magnétisme, (supraconducteurs) !

$$\mathcal{H} = \sum_i \frac{p_i^2}{2m} - \sum_{i,n} \frac{Ze^2}{|\vec{r}_i - \vec{R}_n|} + \sum_{i<j} \frac{e^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|}$$

Difficile !

« Problème à N corps »

Interaction entre les électrons

hamiltonien à 1 corps :
« facile »

$$\mathcal{H} = \sum_i h(i) + \sum_{i<j} V(i,j)$$

Difficile !

$$h_i = \frac{p_i^2}{2m} - \sum_n \frac{Ze^2}{|\vec{r}_i - \vec{R}_n|}$$

$$\mathcal{H} = \sum_i \frac{p_i^2}{2m} - \sum_{i,n} \frac{Ze^2}{|\vec{r}_i - \vec{R}_n|} + \sum_{i<j} \frac{e^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|}$$

Difficile !

« Problème à N corps »

Interaction entre les électrons

hamiltonien à 1 corps :
« facile »

$$\mathcal{H} = \sum_i h(i) + \sum_{i<j} V(i,j)$$

Difficile !

Dans beaucoup de situations, on peut négliger l'interaction entre électrons ou l'intégrer dans un problème à un corps effectif (champ moyen)

Il existe des situations où l'interaction e-e joue un rôle essentiel :
« physique des électrons fortement corrélés »,
un des grands challenges de la physique moderne

$$\mathcal{H} = \sum_i \frac{p_i^2}{2m} - \sum_{i,n} \frac{Ze^2}{|\vec{r}_i - \vec{R}_n|} + \sum_{i<j} \frac{e^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|}$$

Difficile !

« Problème à N corps »

Interaction entre les électrons

Ordres de grandeur :

a distance moyenne entre électrons

L'interaction coulombienne (écranée) augmente avec la densité

$$\frac{e^2}{a} \propto e^2 \rho^{1/3}$$

L'énergie cinétique typique augmente encore plus vite

$$\epsilon_F \simeq \frac{\hbar^2}{ma^2} \propto \rho^{2/3}$$

L'interaction coulombienne devient négligeable dans la limite de haute densité

$$\mathcal{H} = \sum_i \frac{p_i^2}{2m} - \sum_{i,n} \frac{Ze^2}{|\vec{r}_i - \vec{R}_n|} + \sum_{i<j} \frac{e^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|}$$

Difficile !

Approximation de champ moyen

$$\sum_j \frac{e^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} \rightarrow V_{eff}(\vec{r}_i)$$

On remplace le potentiel vu par l'électron i de la part de tous les autres, par un potentiel moyen, le même pour tous les électrons. Ce potentiel effectif dépend lui-même de la densité des autres électrons

$$\mathcal{H} = \sum_i \frac{p_i^2}{2m} - \sum_{i,n} \frac{Ze^2}{|\vec{r}_i - \vec{R}_n|} + \sum_i V_{eff}(\vec{r}_i)$$

$$\sum_i V(\vec{r}_i)$$

$V(\vec{r})$ périodique

Électrons dans un solide : potentiel effectif périodique

$$\mathcal{H} = \sum_i \frac{p_i^2}{2m} + \sum_i V(\vec{r}_i) = \sum_i h(i)$$

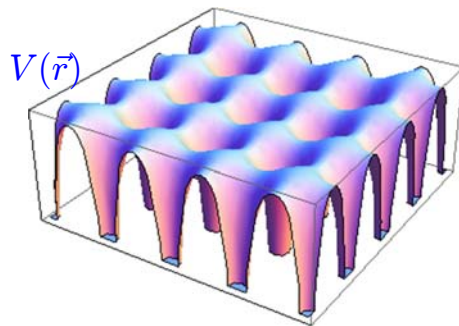
$$h = \frac{p^2}{2m} + V(\vec{r})$$

« Problème à un corps »

potentiel périodique

$$V(\vec{r}) = \sum_n v(\vec{r} - \vec{R}_n)$$

Chaque électron se déplace dans le potentiel moyen dû aux atomes et aux autres électrons



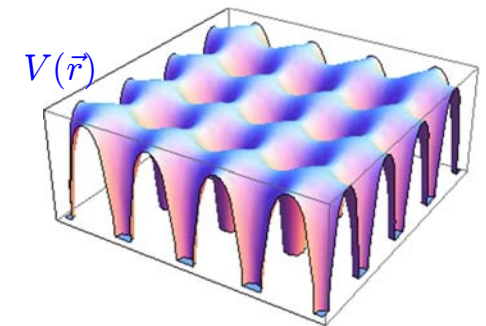
13

Un électron dans un potentiel périodique

$$h = \frac{p^2}{2m} + \sum_n v(\vec{r} - \vec{R}_n)$$

Deux approches possibles

- V faible cf. PHY430
- ➔ électron presque libre
- V fort
- ➔ électron fortement lié



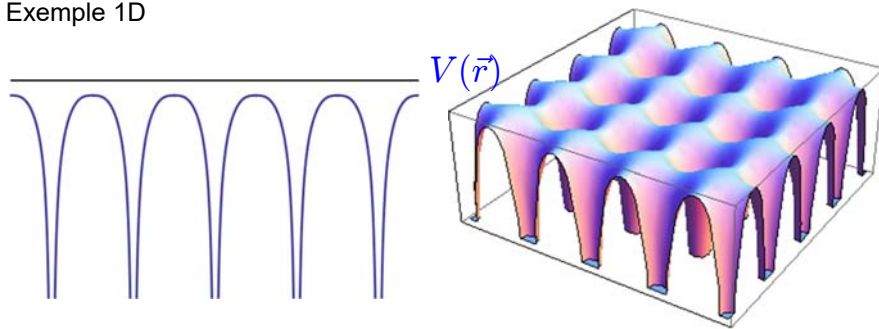
➔ la méthode des liaisons fortes

14

Un électron dans un potentiel périodique

$$h = \frac{p^2}{2m} + \sum_n v(\vec{r} - \vec{R}_n)$$

Exemple 1D



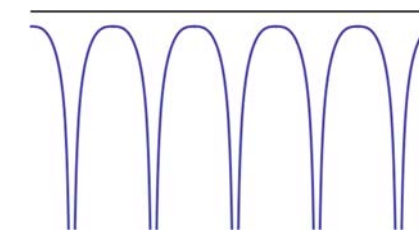
la méthode des liaisons fortes

15

Un électron dans un potentiel périodique

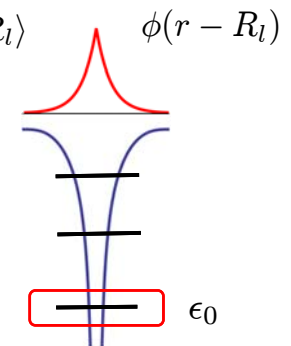
$$h = \frac{p^2}{2m} + \sum_n v(r - R_n)$$

N atomes



$$h_0 = \frac{p^2}{2m} + v(r - R_l)$$

$|R_l\rangle$ $\phi(r - R_l)$

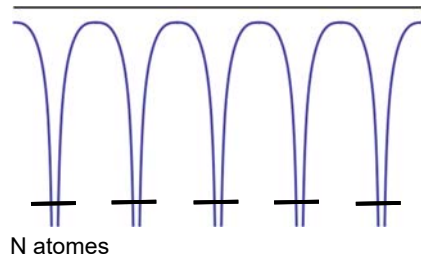


Spectre de h si on connaît les solutions de h_0 ?

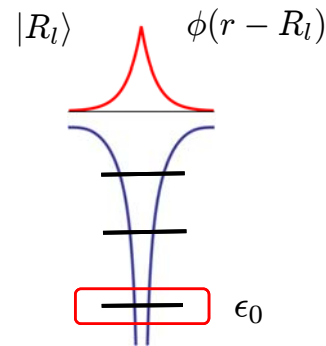
16

Un électron dans un potentiel périodique

$$h = \frac{p^2}{2m} + \sum_n v(r - R_n)$$



$$h_0 = \frac{p^2}{2m} + v(r - R_l)$$



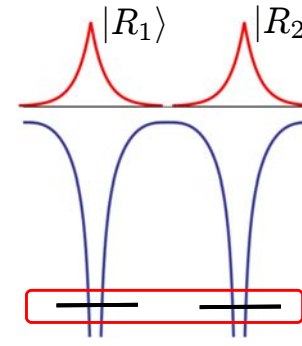
On diagonalise h dans le sous-espace des états fondamentaux
Combinaison linéaire d'orbitales atomiques

17

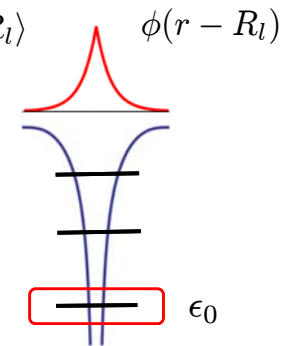
Retour sur le double puits

cf. PHY311

$$h = \frac{p^2}{2m} + v(r - R_1) + v(r - R_2)$$



$$h_0 = \frac{p^2}{2m} + v(r - R_l)$$



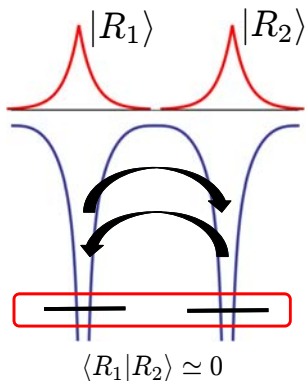
On diagonalise h dans le sous-espace des états fondamentaux
h est une matrice 2x2

18

Retour sur le double puits

$$h = \frac{p^2}{2m} + v(r - R_1) + v(r - R_2)$$

$$h = \begin{pmatrix} |R_1\rangle & |R_2\rangle \\ \epsilon & -t \\ -t & \epsilon \end{pmatrix}$$



$$h_{ii} = \langle R_i | h | R_i \rangle = \epsilon \simeq \epsilon_0$$

$$h_{12} = \langle R_1 | h | R_2 \rangle = -t$$

$t(a)$ amplitude tunnel
intégrale de transfert
intégrale de saut

dépend de la distance a
entre les atomes

On diagonalise h dans le sous-espace des états fondamentaux
h est une matrice 2x2

19



Éléments de matrice

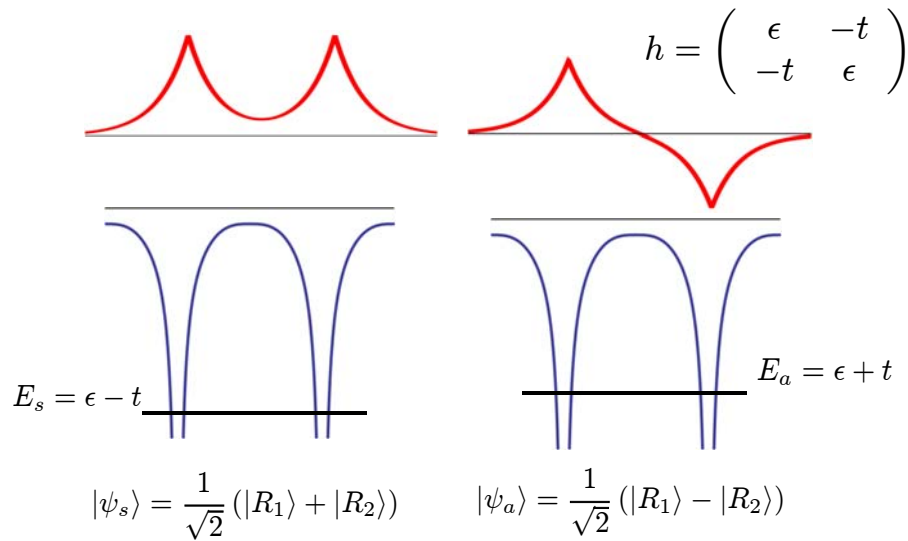
$$h = \underbrace{\frac{p^2}{2m} + v(r - R_1) + v(r - R_2)}_{h_0} \quad h = \begin{pmatrix} h_{11} & h_{12} \\ h_{21} & h_{22} \end{pmatrix}$$

$$h_{11} = \langle R_1 | h | R_1 \rangle = \underbrace{\langle R_1 | h_0 | R_1 \rangle}_{\epsilon_0} + \underbrace{\langle R_1 | v(r - R_2) | R_1 \rangle}_{-\delta\epsilon}$$

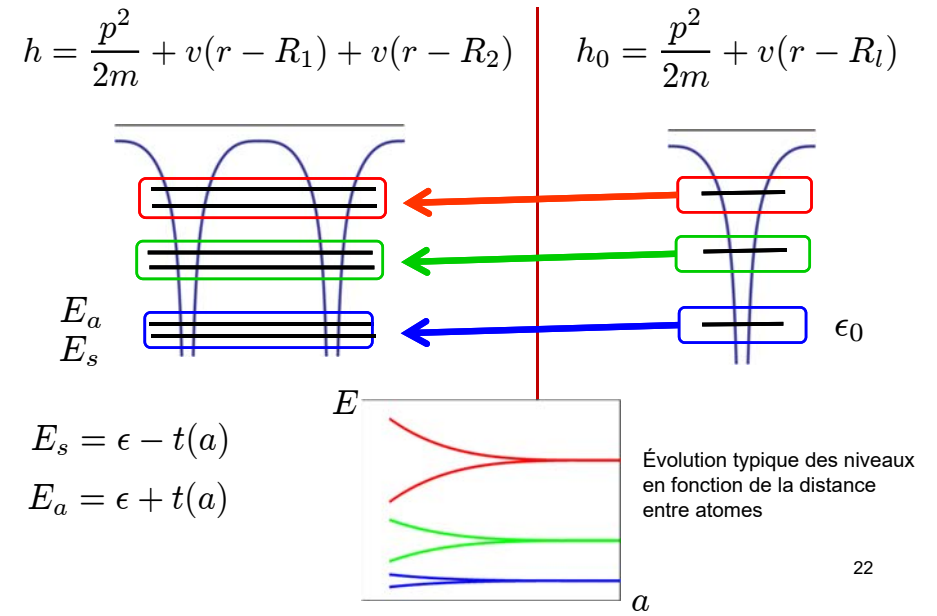
ϵ

$$h_{21} = \langle R_2 | h | R_1 \rangle = \underbrace{\langle R_2 | h_0 | R_1 \rangle}_0 + \underbrace{\langle R_2 | v(r - R_2) | R_1 \rangle}_{-t}$$

$$h_{11} = \langle R_1 | h | R_1 \rangle = \epsilon \simeq \epsilon_0 \quad h_{21} = \langle R_2 | h | R_1 \rangle = -t$$



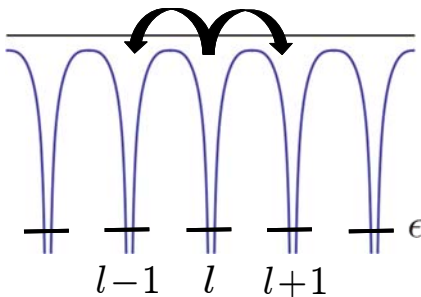
Le couplage tunnel lève la dégénérescence des niveaux atomiques



Un électron dans un potentiel périodique, d=1

$$h = \frac{p^2}{2m} + \sum_n v(r - R_n)$$

$$\langle R_n | h | R_l \rangle = \begin{cases} \epsilon \simeq \epsilon_0 & \text{si } n = l \\ -t & \text{si } n = l \pm 1 \\ 0 & \text{autrement} \end{cases}$$



On diagonalise h dans le sous-espace des états fondamentaux
Hamiltonien = matrice N x N



Éléments de matrice

$$h = \frac{p^2}{2m} + \sum_n v(\vec{r} - \vec{R}_n) = h_0 + \sum_{n \neq l} v(\vec{r} - \vec{R}_n)$$

$$h_{ll} = \langle R_l | h | R_l \rangle = \underbrace{\langle R_l | \hat{h}_0 | R_l \rangle}_{\epsilon_0} + \underbrace{\langle R_l | \sum_{n \neq l} |v(r - R_n)| | R_l \rangle}_{-\delta\epsilon}$$

$$h_{nl} = \langle R_n | h | R_l \rangle = \underbrace{\langle R_n | h_0 | R_l \rangle}_0 + \underbrace{\langle R_n | \sum_{n \neq l} v(r - R_n) | R_l \rangle}_{-t_{nl}}$$

t_{nl} décroît très vite avec la distance $n - l$, supposé nul au-delà 1^{er} voisins

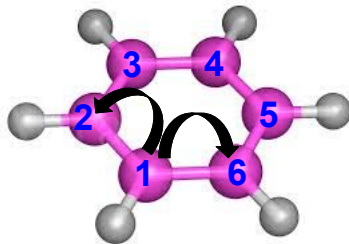
$$\langle R_l | h | R_l \rangle = \epsilon \simeq \epsilon_0 \quad \langle R_n | h | R_l \rangle = -t \quad \text{si } n = l \pm 1$$

Un électron dans un potentiel périodique, d=1 $h|\psi_k\rangle = \epsilon_k|\psi_k\rangle$

$$h = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 \\ \epsilon & -t & 0 & \cdot & \cdot & -t \\ -t & \epsilon & -t & \cdot & \cdot & 0 \\ 0 & -t & \epsilon & \cdot & \cdot & 0 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \epsilon & -t \\ -t & 0 & \cdot & \cdot & -t & \epsilon \end{pmatrix} \leftarrow \text{cal périodiques}$$

généralise $h = \begin{pmatrix} \epsilon & -t \\ -t & \epsilon \end{pmatrix}$

cf. molécule de benzène
PHY430



25

Un électron dans un potentiel périodique, d=1 $h|\psi_k\rangle = \epsilon_k|\psi_k\rangle$

$$h = \begin{pmatrix} \epsilon & -t & 0 & \cdot & \cdot & -t \\ -t & \epsilon & -t & \cdot & \cdot & 0 \\ 0 & -t & \epsilon & \cdot & \cdot & 0 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \epsilon & -t \\ -t & 0 & \cdot & \cdot & -t & \epsilon \end{pmatrix} \leftarrow \text{cal périodiques}$$

généralise $h = \begin{pmatrix} \epsilon & -t \\ -t & \epsilon \end{pmatrix}$

Vecteurs propres $|\psi_k\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=1}^N e^{ikR_j} |R_j\rangle$ $R_j = ja$

généralise le cas de deux atomes (solutions symétrique et antisymétrique)
et satisfait la périodicité du réseau (Théorème de Bloch)

+ Quantification par les cal périodiques $\rightarrow e^{ikNa} = 1$

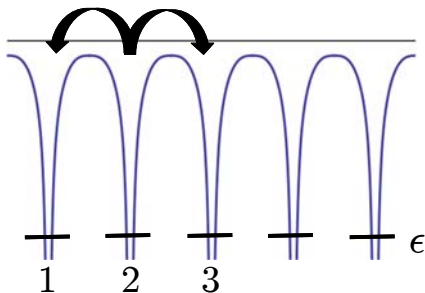
26

Un électron dans un potentiel périodique $h|\psi_k\rangle = \epsilon_k|\psi_k\rangle$

$$\begin{pmatrix} \epsilon & -t & 0 & \cdot & \cdot & -t \\ -t & \epsilon & -t & \cdot & \cdot & 0 \\ 0 & -t & \epsilon & \cdot & \cdot & 0 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \epsilon & -t \\ -t & 0 & \cdot & \cdot & -t & \epsilon \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{ika} \\ e^{2ika} \\ e^{3ika} \\ \cdot \\ \cdot \\ e^{Nika} \end{pmatrix} = \epsilon_k \begin{pmatrix} e^{ika} \\ e^{2ika} \\ e^{3ika} \\ \cdot \\ \cdot \\ e^{Nika} \end{pmatrix}$$

$$\epsilon e^{2ika} - t(e^{ika} + e^{3ika}) = \epsilon_k e^{2ika}$$

$$|\psi_k\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_j e^{ikja} |R_j\rangle$$



27

Un électron dans un potentiel périodique $h|\psi_k\rangle = \epsilon_k|\psi_k\rangle$

$$\begin{pmatrix} \epsilon & -t & 0 & \cdot & \cdot & -t \\ -t & \epsilon & -t & \cdot & \cdot & 0 \\ 0 & -t & \epsilon & \cdot & \cdot & 0 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \epsilon & -t \\ -t & 0 & \cdot & \cdot & -t & \epsilon \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{ika} \\ e^{2ika} \\ e^{3ika} \\ \cdot \\ \cdot \\ e^{Nika} \end{pmatrix} = \epsilon_k \begin{pmatrix} e^{ika} \\ e^{2ika} \\ e^{3ika} \\ \cdot \\ \cdot \\ e^{Nika} \end{pmatrix}$$

$$\epsilon_k = \epsilon - t(e^{ika} + e^{-ika})$$

$$\epsilon_k = \epsilon - 2t \cos ka$$

$$|\psi_k\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_j e^{ikja} |R_j\rangle$$

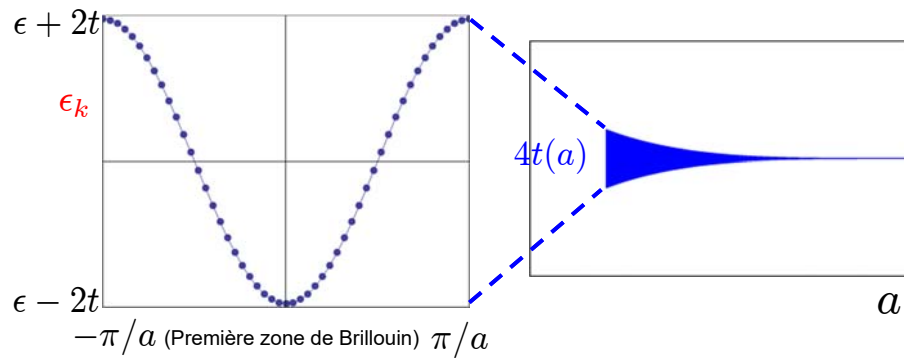
+ Quantification par les cal périodiques $\rightarrow e^{ikNa} = 1$

$$\rightarrow k = \frac{2\pi p}{Na} \quad N \text{ valeurs de } k \quad k \in \left] -\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a} \right]$$

$p \in \mathbb{Z}$

28

Un électron dans un potentiel périodique, d=1

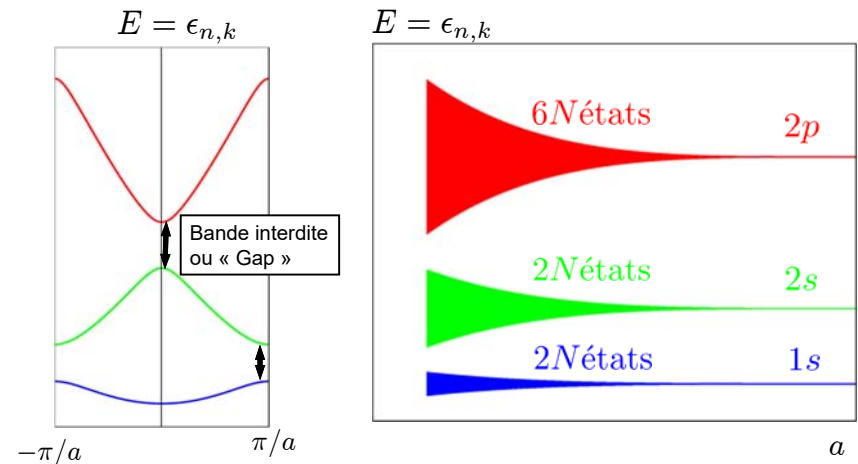


$$\epsilon_k = \epsilon - 2t \cos ka \quad k = \frac{2\pi p}{Na}$$

Quasi-continuum de $2N$ états dans une bande de largeur $4t(a)$
 SPIN ↴

29

Un électron dans un potentiel périodique, d=1



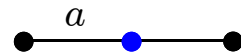
Plusieurs états atomiques → plusieurs bandes

$2(2l+1)N$ états dans chaque bande

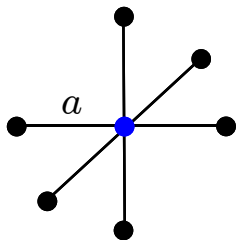
30

Un électron dans un potentiel périodique, en dimension d

$$\epsilon_k = \epsilon - 2t \cos ka$$



Généralisation : Un électron dans un potentiel périodique, dimension d
 réseau cubique



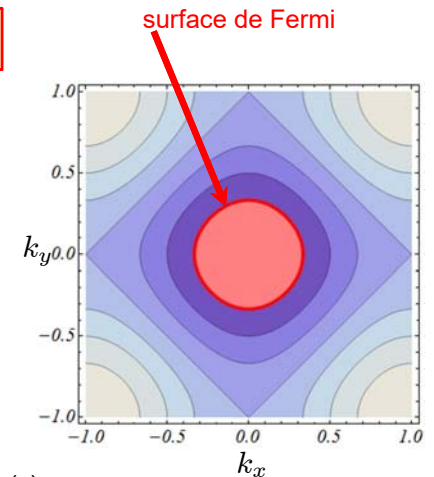
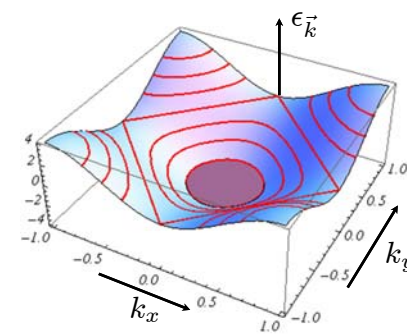
$$\epsilon_{\vec{k}} = \epsilon - 2t \sum_{\nu=1}^d \cos k_{\nu} a$$

31

Électrons sur un réseau carré

$$\epsilon(\vec{k}) \neq \epsilon(|\vec{k}|)$$

$$\epsilon_{\vec{k}} = \epsilon - 2t(\cos k_x a + \cos k_y a)$$



$2N$ états dans une bande d'énergie (s)

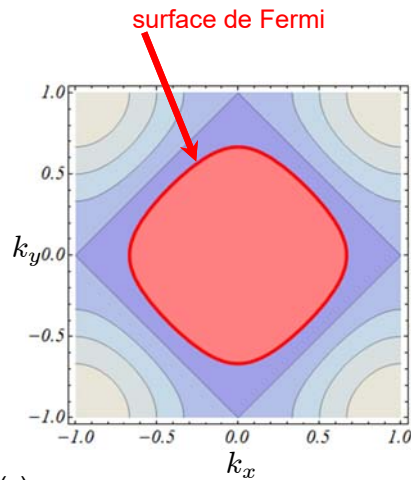
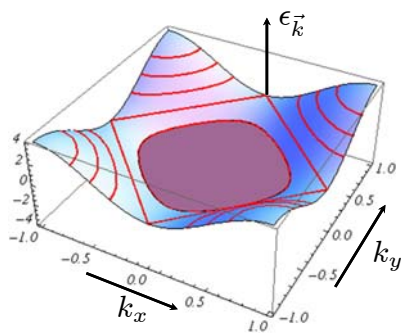
Le nombre d'électrons fixe le niveau de Fermi

32

Électrons sur un réseau carré

$$\epsilon(\vec{k}) \neq \epsilon(|\vec{k}|)$$

$$\epsilon_{\vec{k}} = \epsilon - 2t(\cos k_x a + \cos k_y a)$$



2N états dans une bande d'énergie (s)

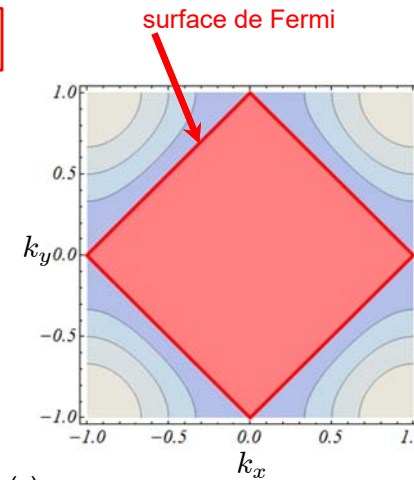
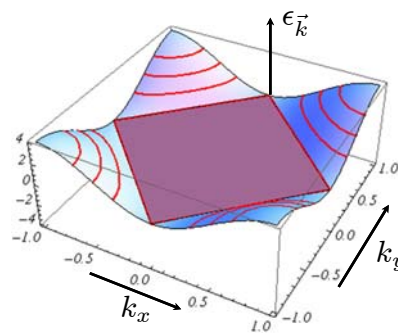
Le nombre d'électrons fixe le niveau de Fermi

33

Électrons sur un réseau carré

$$\epsilon(\vec{k}) \neq \epsilon(|\vec{k}|)$$

$$\epsilon_{\vec{k}} = \epsilon - 2t(\cos k_x a + \cos k_y a)$$



2N états dans une bande d'énergie (s)

Le nombre d'électrons fixe le niveau de Fermi

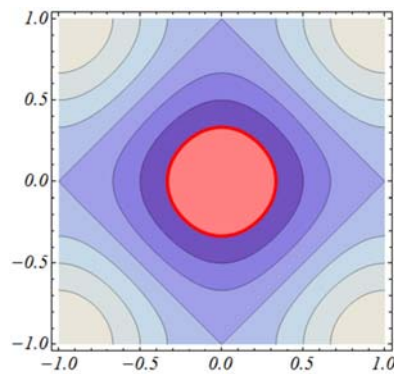
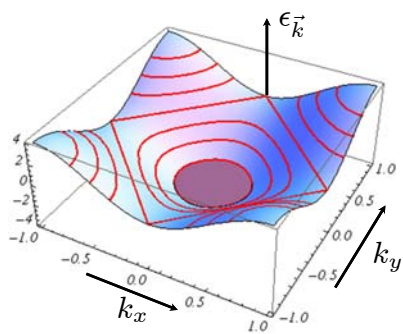
Pour une bande demi-remplie, la surface de Fermi est un carré !

34

Électrons sur un réseau carré

$$\epsilon(\vec{k}) \neq \epsilon(|\vec{k}|)$$

$$\epsilon_{\vec{k}} = \epsilon - 2t(\cos k_x a + \cos k_y a)$$



Pour une bande peu remplie, la surface de Fermi est isotrope

$$\epsilon_{\vec{k}} = \epsilon - 4t + ta^2 k^2 = \epsilon_{min} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_{eff}}$$

$$m_{eff} = \frac{\hbar^2}{2ta^2}$$

← Masse effective

35

Électrons sur un réseau cubique

$$\epsilon(\vec{k}) \neq \epsilon(|\vec{k}|)$$

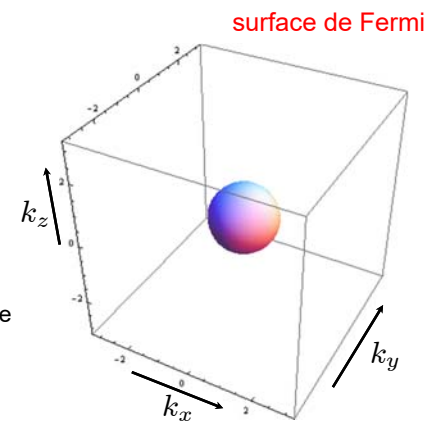
$$\epsilon_{\vec{k}} = \epsilon - 2t(\cos k_x a + \cos k_y a + \cos k_z a)$$

Pour une bande peu remplie,
la surface de Fermi est isotrope

$$\epsilon_{\vec{k}} = \epsilon_{min} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_{eff}}$$

La **masse effective** peut être très différente
de la masse « nue » de l'électron

Métaux	~ 0,5 - 20
Semiconducteurs	~ 0,001 - 1
« Fermions lourds »	~ 1000



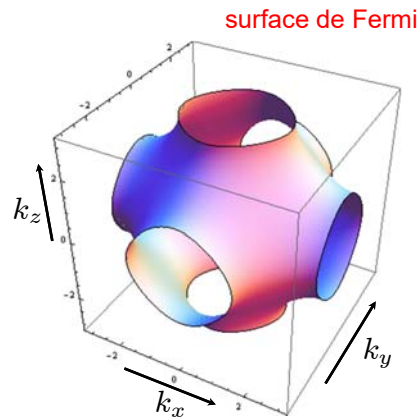
$$m_{eff} = \frac{\hbar^2}{2ta^2}$$

36

Électrons sur un réseau cubique

$$\epsilon(\vec{k}) \neq \epsilon(|\vec{k}|)$$

$$\epsilon_{\vec{k}} = \epsilon - 2t(\cos k_x a + \cos k_y a + \cos k_z a)$$



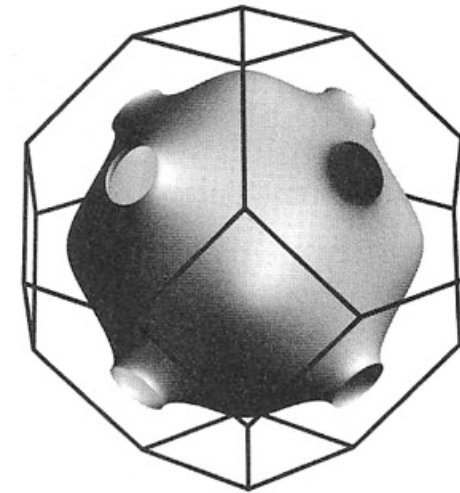
Métaux $\sim 0,5 - 20$
 Semiconducteurs $\sim 0.001 - 1$
 « Fermions lourds » ~ 1000

Bande demi-remplie

37

La surface de Fermi du cuivre

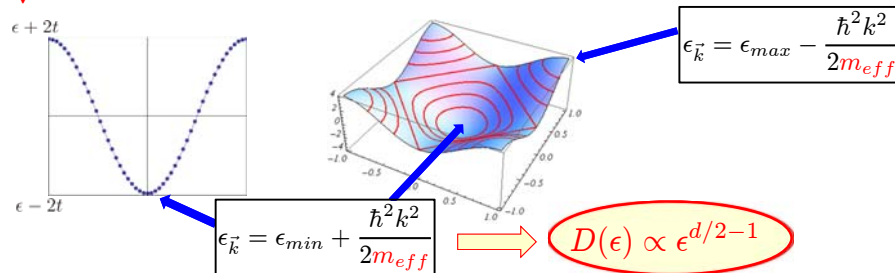
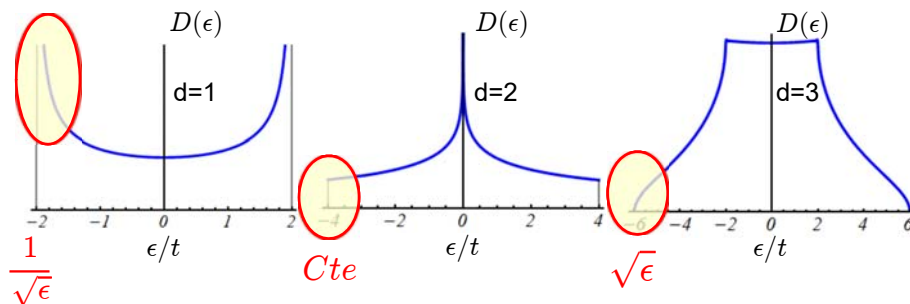
$$\epsilon(\vec{k}) \neq \epsilon(|\vec{k}|)$$



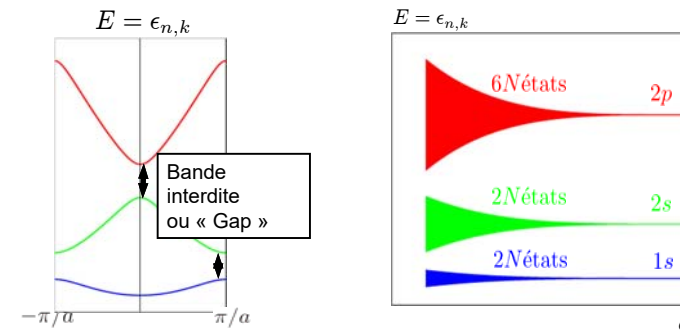
38

Densité d'états (liaisons fortes)

$$\epsilon(\vec{k}) \neq \epsilon(|\vec{k}|)$$



Conclusions importantes



Dans un cristal (potentiel périodique), les états électroniques permis sont répartis en bandes d'énergies séparées par des gaps.

Ces bandes sont d'autant plus larges que les états atomiques se recouvrent

Le spectre en bord de bande est quadratique avec une masse effective

$2(2l+1)N$ états dans chaque bande

40

métaux et isolants

Bandes d'énergie dans un métal : l'exemple du sodium Z=11

N atomes

11 N électrons

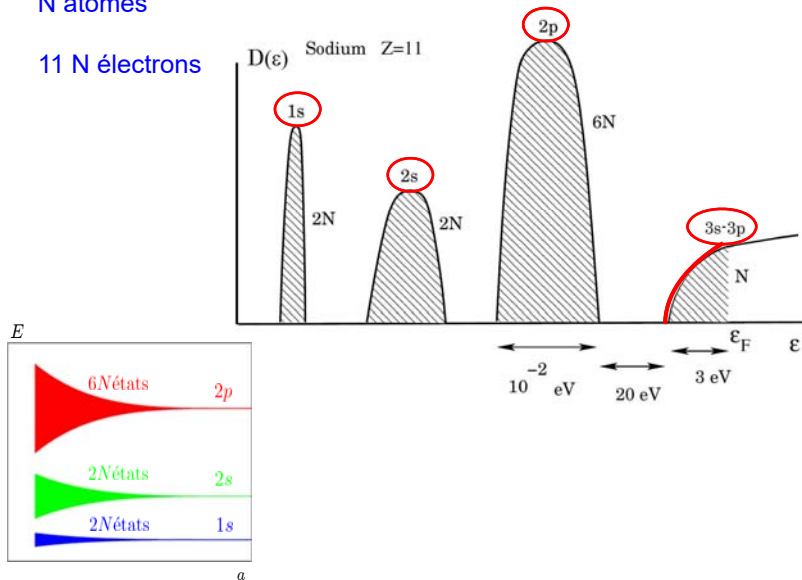
PERIODIC TABLE OF THE ELEMENTS

Na is highlighted in a red box with an arrow pointing to it.

Bandes d'énergie dans un métal : l'exemple du sodium Z=11

N atomes

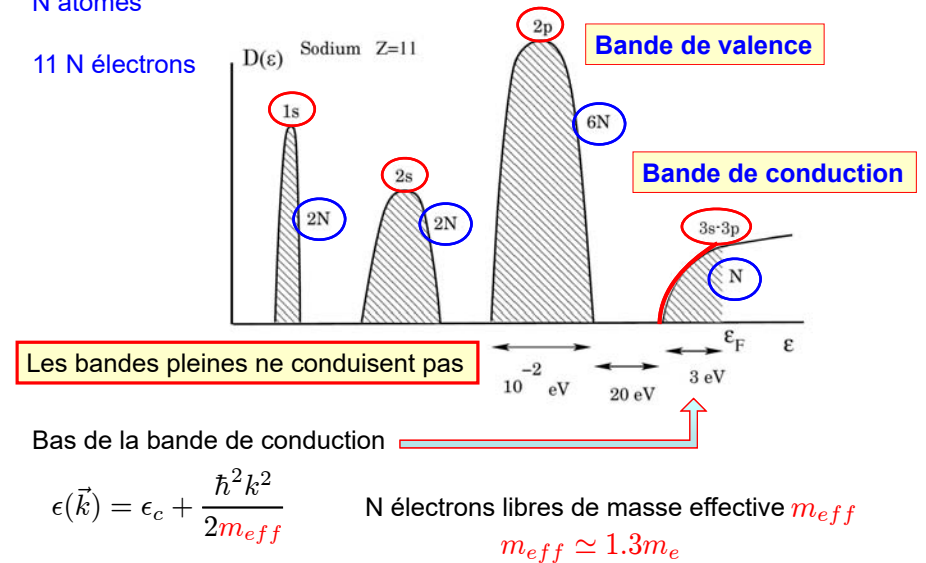
11 N électrons

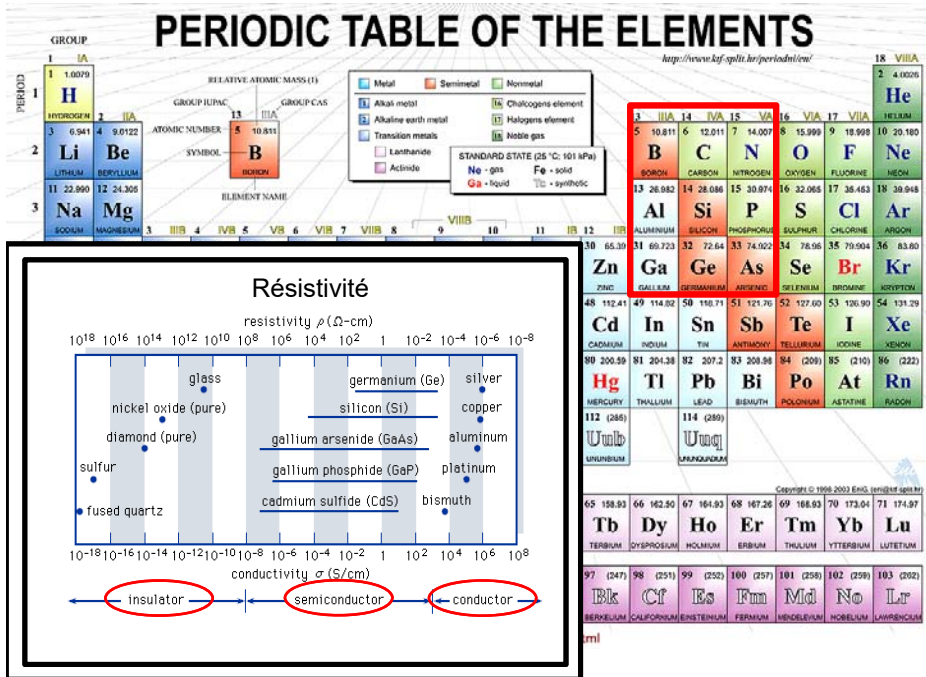


Bandes d'énergie dans un métal : l'exemple du sodium Z=11

N atomes

11 N électrons

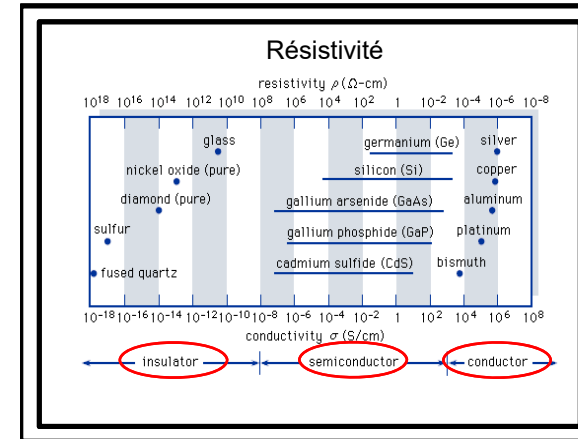




Un semiconducteur est un isolant à petit gap

Ge: gap = 0,7 eV

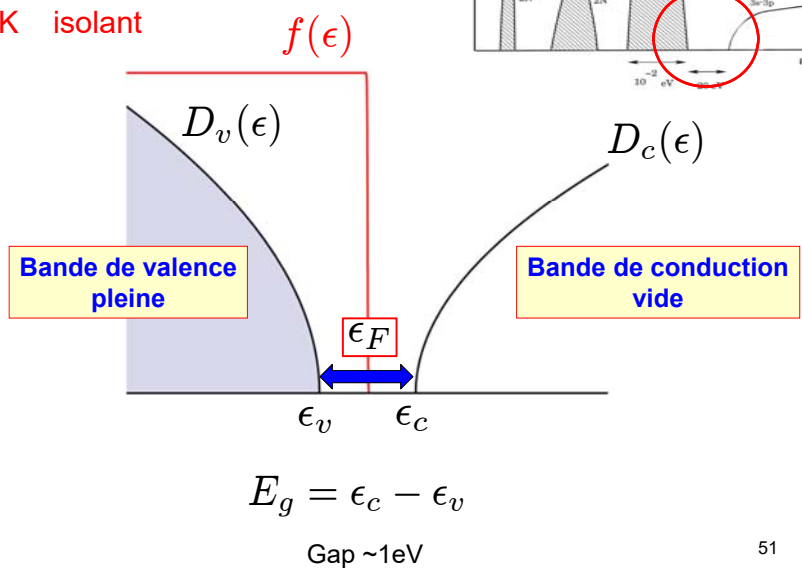
Si: gap = 1,1 eV



50

Porteurs de charge dans un semiconducteur

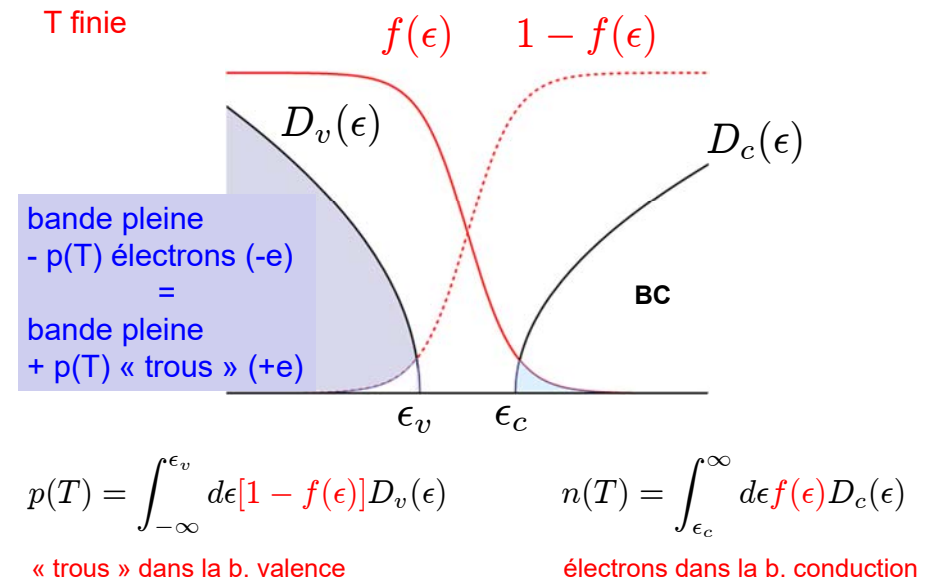
T=0K isolant



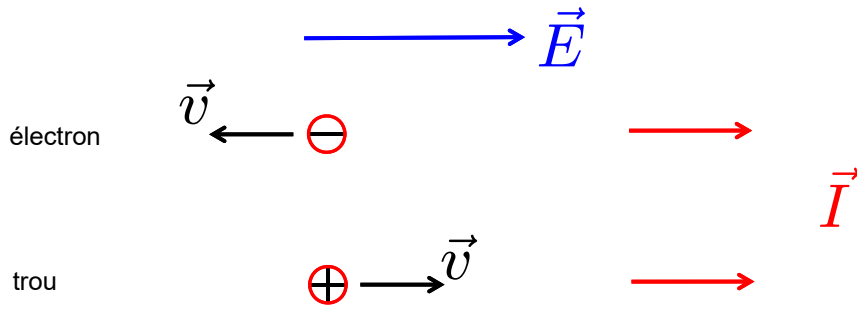
51

Porteurs de charge dans un semiconducteur

T finie



Électrons et trous contribuent au courant



courant = charge x vitesse

Électrons dans la bande de conduction $E_g \gg kT$

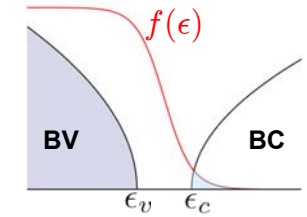
$E_g \gg kT$

$$n(T) = \int_{\epsilon_c}^{\infty} d\epsilon \frac{1}{e^{\beta(\epsilon-\mu)} + 1} D_c(\epsilon)$$

$$\epsilon - \mu \gg kT$$

$$n(T) \simeq \int_{\epsilon_c}^{\infty} d\epsilon e^{-\beta(\epsilon-\mu)} D_c(\epsilon)$$

$$D_c(\epsilon) \simeq V \frac{(2m_c)^{3/2}}{2\pi^2 \hbar^3} \sqrt{\epsilon - \epsilon_c}$$



$$n(T) \simeq 2V \left(\frac{2\pi m_c k_B T}{h^2} \right)^{3/2} e^{-\beta(\epsilon_c - \mu)}$$

$$\rightarrow n(T) \simeq 2 \frac{V}{\lambda_{cT}^3} e^{-\beta(\epsilon_c - \mu)}$$

longueur de de Broglie

$$\lambda_T = \frac{h}{\sqrt{2\pi m k T}}$$



Électrons dans la b. de conduction et trous dans la b. de valence

$$n(T) = V \frac{(2m_c)^{3/2}}{2\pi^2 \hbar^3} \int_{\epsilon_c}^{\infty} d\epsilon \sqrt{\epsilon - \epsilon_c} e^{-\beta(\epsilon-\mu)}$$

$$\underbrace{\int_0^{\infty} d\epsilon' \sqrt{\epsilon'} e^{-\beta\epsilon'} e^{-\beta(\epsilon_c - \mu)}}_{\frac{\sqrt{\pi}}{2\beta^{3/2}}} \quad \epsilon' = \epsilon - \epsilon_c$$

$$n(T) = \frac{V}{4} \left(\frac{2m_c k_B T}{\pi \hbar^2} \right)^{3/2} e^{-\beta(\epsilon_c - \mu)}$$

On procède de même pour calculer $p(T)$ en posant $\epsilon' = \epsilon_v - \epsilon$

Trous dans la bande de valence $E_g \gg kT$

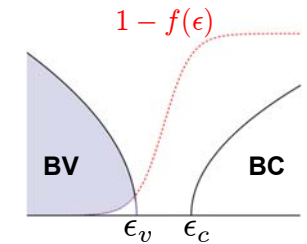
$E_g \gg kT$

$$p(T) = \int_{-\infty}^{\epsilon_v} d\epsilon \frac{1}{e^{-\beta(\epsilon-\mu)} + 1} D_v(\epsilon)$$

$$\epsilon - \mu \gg kT$$

$$p(T) \simeq \int_{-\infty}^{\epsilon_v} d\epsilon e^{\beta(\epsilon-\mu)} D_v(\epsilon)$$

$$D_v(\epsilon) \simeq V \frac{(2m_v)^{3/2}}{2\pi^2 \hbar^2} \sqrt{\epsilon_v - \epsilon}$$



$$p(T) \simeq 2V \left(\frac{2\pi m_v k_B T}{h^2} \right)^{3/2} e^{-\beta(\mu - \epsilon_v)}$$

$$\rightarrow p(T) \simeq 2 \frac{V}{\lambda_{vT}^3} e^{-\beta(\mu - \epsilon_v)}$$

longueur de de Broglie

Nombre de porteurs

$$E_g \gg kT$$

$$n(T) \simeq \frac{V}{4} \left(\frac{2m_c k_B T}{\pi \hbar^2} \right)^{3/2} e^{-\beta(\epsilon_c - \mu)}$$

$$n(T)p(T) = K(T)$$

$$p(T) \simeq \frac{V}{4} \left(\frac{2m_v k_B T}{\pi \hbar^2} \right)^{3/2} e^{-\beta(\mu - \epsilon_v)}$$

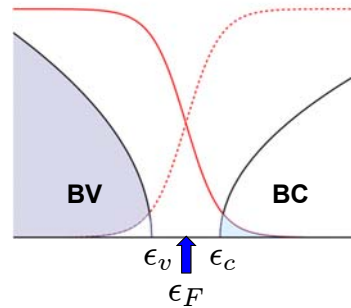
Loi d'action de masse
(indépendante de μ)

neutralité électrique

$$n(T) = p(T)$$

$$\mu = \frac{\epsilon_v + \epsilon_c}{2} + \frac{3}{4} kT \log \frac{m_v}{m_c}$$

Le niveau de Fermi est au milieu du gap



Nombre de porteurs dans un semiconducteur « intrinsèque »

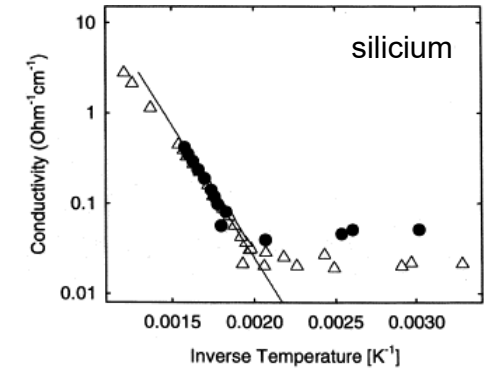
$$n(T) = p(T) \simeq \frac{V}{4} \left(\frac{2\sqrt{m_c m_v} k_B T}{\pi \hbar^2} \right)^{3/2} e^{-\beta E_g/2}$$

$$E_g = \epsilon_c - \epsilon_v$$

* Variation rapide en température

* Pente $\rightarrow E_g \simeq 1eV$

Applications : thermistors



58

Nombre de porteurs dans un semiconducteur « intrinsèque »

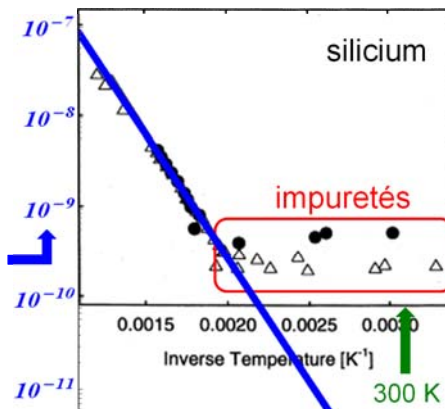
$$n(T) = p(T) \simeq \frac{V}{4} \left(\frac{2\sqrt{m_c m_v} k_B T}{\pi \hbar^2} \right)^{3/2} e^{-\beta E_g/2}$$

$$E_g \simeq 1eV$$

$$m_c \simeq m_v \simeq 0.2m_e$$

$$a \simeq 2.35\text{\AA}$$

Concentration de porteurs par atome

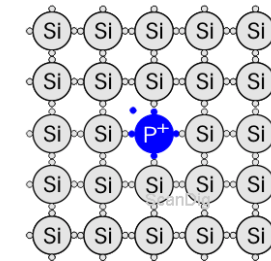


Une faible concentration d'impuretés change complètement le nombre de porteurs

\rightarrow semiconducteurs « extrinsèques »

Dopage « n » : impuretés donneuses

13	IIIA	14	IVA	15	VA
5	10.811	6	12.011	7	14.007
B		C		N	
BORON		CARBON		NITROGEN	
13	26.982	14	28.086	15	30.974
Al		Si		P	
ALUMINIUM		SILICON		PHOSPHORUS	
31	69.723	32	72.64	33	74.922
Ga		Ge		As	
GALLIUM		GERMANIUM		ARSENIC	

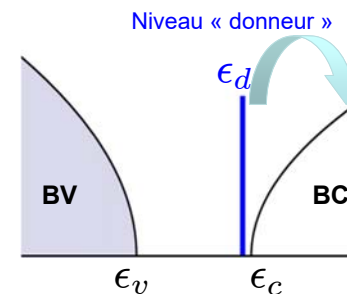


L'atome de phosphore apporte un électron supplémentaire très faiblement lié autour de l'ion P^+

N_d atomes de phosphore libèrent N_d électrons dans la BC

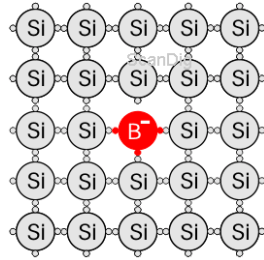
$$n(T) \simeq N_d \quad (p(T) \ll n(T))$$

Semiconducteur « n »

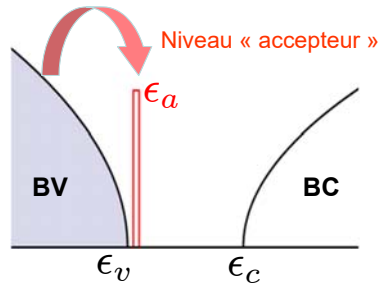


Dopage « p » : impuretés acceptrices

13	III A	14	IV A	15	V A
5	10.811	6	12.011	7	14.007
B	C	N			
BORON	CARBON	NITROGEN			
13	26.982	14	28.086	15	30.974
Al	Si	P			
ALUMINIUM	SILICON	PHOSPHORUS			
31	69.723	32	72.64	33	74.922
Ga	Ge	As			
GALLIUM	GERMANIUM	ARSENIC			



L'atome de **bore** piège un électron de la bande de valence



N_a atomes de bore libèrent N_a trous dans la BV

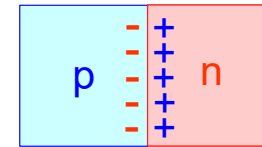
$$p(T) \approx N_a \quad (n(T) \ll p(T))$$

Semiconducteur « p »

Les semiconducteurs dopés, briques de base pour l'électronique

La diode np

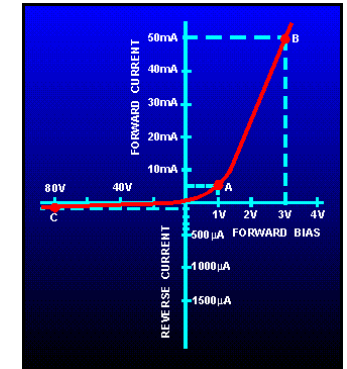
p : trous libres n : électrons libres



\vec{E} bloque le passage du courant

\vec{E}_{ext} le courant ne passe pas

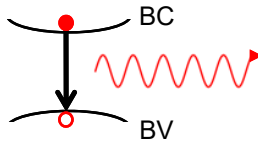
\vec{E}_{ext} le courant passe



62

La LED : recombinaison des trous et des électrons

$$E_g = h\nu = \frac{hc}{\lambda}$$



Ge : $E_g \approx 0.7\text{eV}$

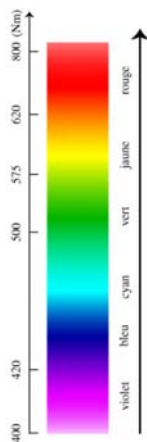
Si : $E_g \approx 1.1\text{eV}$

GaAs : $E_g \approx 1.6\text{eV}$

AlGaAs : $E_g \approx 2\text{eV}$

GaP : $E_g \approx 2.2\text{eV}$

GaN : $E_g \approx 2.7\text{eV}$

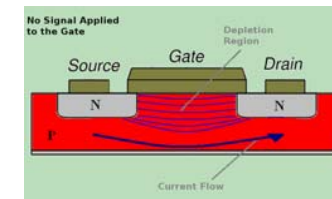


13	III A	14	IV A	15	V A
5	10.811	6	12.011	7	14.007
B	C	N			
BORON	CARBON	NITROGEN			
13	26.982	14	28.086	15	30.974
Al	Si	P			
ALUMINIUM	SILICON	PHOSPHORUS			
31	69.723	32	72.64	33	74.922
Ga	Ge	As			
GALLIUM	GERMANIUM	ARSENIC			

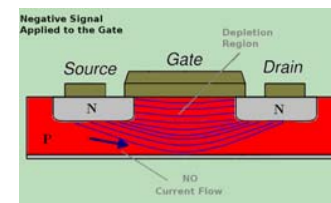


Les semiconducteurs dopés, briques de base pour l'électronique

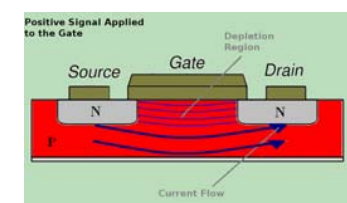
Le transistor à effet de champ



$V < 0$



$V > 0$

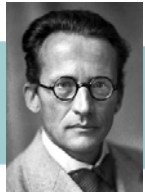


La tension de grille V (gate voltage) contrôle le passage du courant



M. Planck
1900

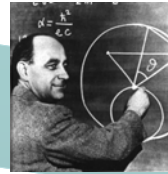
Naissance de la mécanique quantique



E. Schrödinger
1925



W. Pauli
1925



E. Fermi
1926



P. Dirac
1926



J. Kilby, 1959



J. Bardeen,
W. Shockley,
W. Brattain
transistor, 1947



F. Bloch
1928

Prochain amphi

8. Thermodynamique du rayonnement, gaz de photons

Rayonnement du corps noir, loi de Planck
Equilibre thermique soleil terre, effet de serre
Rayonnement fossile de l'univers