

Rapport LP 19/02/2021

LP 47 : Mécanismes de conduction électrique dans les solides

Aurélien Ricard (binôme 05 avec Rémy Lienard)

Correcteur : Charles Grenier



Figure 1

Niveau : L3

Prérequis : Mécanique quantique (orbitales moléculaires, niveaux d'énergie, principe de Pauli), force de Lorentz, vecteur densité de courants

J'ai mis en [bleu](#) les diapos auxquelles je me réfère, les remarques/transitions faites à l'oral. Bonne lecture, n'hésitez pas à me contacter pour d'éventuelles questions !

Aujourd'hui, on s'intéresse à la conduction dans les solides, donc on va chercher qui transporte les charges (courant) et comment (le mécanisme). On veut aussi prédire quel matériau est conducteur, isolant. Plus qu'un intérêt pratique, cette leçon permet d'avoir des considérations assez fondamentales. Par exemple, on peut expliquer avec la conduction pourquoi vous voyez à travers la vitre, et pourquoi une abeille ne verrait pas à travers.

Tout commence en 1897 lorsque Thomson met en évidence l'électron. En 1900, Drüde propose un modèle pour expliquer la conduction d'après des considérations sur les électrons d'un métal.

1 Modèle de conduction : modèle de Drüde

1.1 Hypothèses, cadre d'étude

Sur diapo, vous trouverez les hypothèses, des ordres de grandeur de la densité d'électrons libres dans différents conducteurs, des temps de relaxation.

1.2 Loi d'Ohm

On cherche à connaître le lien courant/différence de potentiel (grandeurs macroscopiques) à travers des grandeurs microscopiques (mouvements des électrons). On va donc définir la grandeur moyennée statistiquement :

$$\vec{j} = -en \langle \vec{v} \rangle \quad (1)$$

Avec e la charge de l'électron, n la densité d'électrons libres, \vec{v} la vitesse d'un électron.

Dans toute la suite de cette partie, on travaille avec soit des grandeurs macroscopiques soit des moyennes statistiques

Remarque : Sans champ extérieur, on a naturellement $\vec{j} = \vec{0}$ du fait de l'agitation thermique, il n'y a pas de flux macroscopique.

Sous ces hypothèses, on peut décrire les collisions par une force :

$$\vec{F} = \frac{-m \langle \vec{v} \rangle}{\tau} \quad (2)$$

Avec m la masse d'un électron, τ le temps de relaxation dans le matériau. De cette façon, on se ramène à une description continue du phénomène (et non plus des collisions abruptes), on peut donc appliquer le PFD à un électron dans le référentiel du labo supposé galiléen, qui en régime stationnaire donne :

$$\vec{0} = -e\vec{E} - \frac{m \langle \vec{v} \rangle}{\tau} \quad (3)$$

Qui avec la définition de \vec{j} donne

$$\vec{j} = \frac{ne^2\tau}{m} \vec{E} \quad (4)$$

On note $\sigma_0 = \frac{ne^2\tau}{m}$ la conductivité et $\rho = \frac{1}{\sigma_0}$ la résistivité du matériau à laquelle vous êtes plus familiers, qui vaut $1,56 \cdot 10^{-8} \Omega \cdot m$ dans le cas du cuivre. Ce résultat constitue la Loi d'Ohm

Sur diapo, différentes résistivités des mêmes conducteurs

Ce modèle explique bien la conduction dans certains solides, et rend compte de l'intuition qu'on en a. On va tout de même tester sa robustesse sur une expérience : l'effet Hall

Figure 2: Schémas de l'effet hall

1.3 Effet Hall

On applique toujours la même méthode, un PFD avec une force en plus. Que va-t-il se passer?

- Les électrons vont être accélérés par le champ électrique et vont acquérir une vitesse
- A cause de cette vitesse, les électrons vont subir la force de Lorentz magnétique et seront déviés
- En régime stationnaire, on aura donc accumulation de charges sur une face du solide, et déficit sur une autre, donc apparition d'une sorte de condensateur, et d'un champ électrique selon \vec{e}_y

En régime stationnaire, on obtient le système d'équations :

$$\begin{cases} \langle p_x \rangle = -eE_{0x} - \frac{e\langle p_y \rangle}{m} B_0 \\ \langle \frac{p_y}{\tau} \rangle = -eE_{0y} + \frac{e\langle p_x \rangle}{m} B_0 \end{cases} \quad (5)$$

Or $\vec{j} = -en\frac{\vec{p}}{m}$ Et au vu des conditions aux limites, en régime stationnaire, $j_y = 0$. Donc le système se simplifie en :

$$\begin{cases} j_x = \sigma_0 E_{0x} \\ E_y = \frac{-B_0}{ne} j_x \end{cases} \quad (6)$$

On définit deux grandeurs intéressantes : La constante de Hall $R_H \equiv \frac{E_y}{j_x B_0} = \frac{-1}{ne}$ et la magnétoconductance $\rho \equiv \frac{E_x}{j_x} = \frac{1}{\sigma_0}$. On va tout de suite voir en quoi ces résultats sont surprenants.

1.4 Limites du modèle

Un premier constat est que la magnétoconductance ne dépend pas du champ magnétique appliqué. C'est un fait surprenant car on aurait tendance à penser que ce champ modifie la conduction, et c'est ce qu'expérimentalement on observe.

Pour la constante de Hall, on voit qu'elle est indépendante de la géométrie du matériau, le seul paramètre variable est la densité d'électrons libre. [Sur diapo : un tableau avec le nombre d'électrons qu'il faut compter par atome pour que la constante fonctionne.](#) On doit prendre 1 électron par atome de Cuivre par exemple. On a dit que les atomes sont ionisés, vous savez que la configuration du cuivre est $[Cu] = [Ar]3d^{10}4s^1$ et vous savez qu'on peut former l'ion Cu^{2+} par exemple, alors pourquoi 1 électron et pas 2? Comment faire ce décompte? On est en train de parler de configuration électronique, peut être que le problème est quantique...

Si à $T=300K$ on calcule la longueur d'onde de De Broglie et qu'on la compare à n , on trouve : $n\lambda_{db}^3 = 4.10^4 \gg 1$. Le comportement des électrons doit être décrit par la mécanique quantique, il faut trouver un autre modèle!

2 Théorie des bandes

2.1 Cadre d'étude

On va donc étudier un modèle quantique, ou plus précisément ses conséquences.

On travaille à 0K. [Sur diapo : animation de toutestquantique.fr sur la construction des bandes.](#) En fait, cela revient à étudier l'association de $N = 10^{23}$ orbitales atomiques, qui deviennent tellement resserrées qu'elles forment des bandes d'énergies, séparées par des gaps. On va maintenant chercher à remplir ces niveaux.

2.2 Remplissage des bandes à 0K

Afin de placer les électrons sur les niveaux d'énergies, on fait comme avec des édifices moléculaires : on applique le principe de Pauli en remplissant les niveaux d'énergies croissantes. On définit deux grandeurs :

- L'énergie de Fermi : énergie de la haute occupée. On pose $\epsilon_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m}$
- k_F le vecteur d'onde de Fermi, vecteur d'onde du dernier électron défini comme s'il évoluait en espace libre

Ainsi, la dernière bande complètement remplie s'appelle bande de Valence, celle au dessus s'appelle bande de conduction(figure 3).

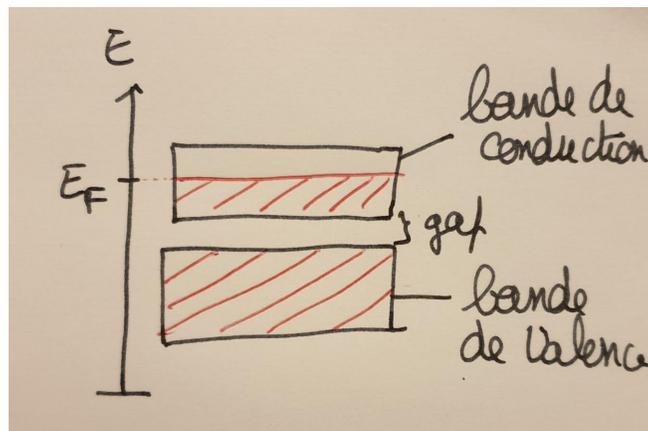


Figure 3

A partir de ces définitions et cette méthode de remplissage, on distingue deux types de solides :

- Les métaux, dont la bande de conduction est partiellement remplie (figure 5)
- Les isolants, dont la bande de conduction est vide (figure 4)

On comprend mieux la conduction : l'énergie de gap étant de quelques eV, il est très difficile de faire passer des électrons aux niveaux supérieurs pour les isolants, tandis que pour un conducteur, un électron de la bande de conduction sera facilement excitable dans les niveaux proches.

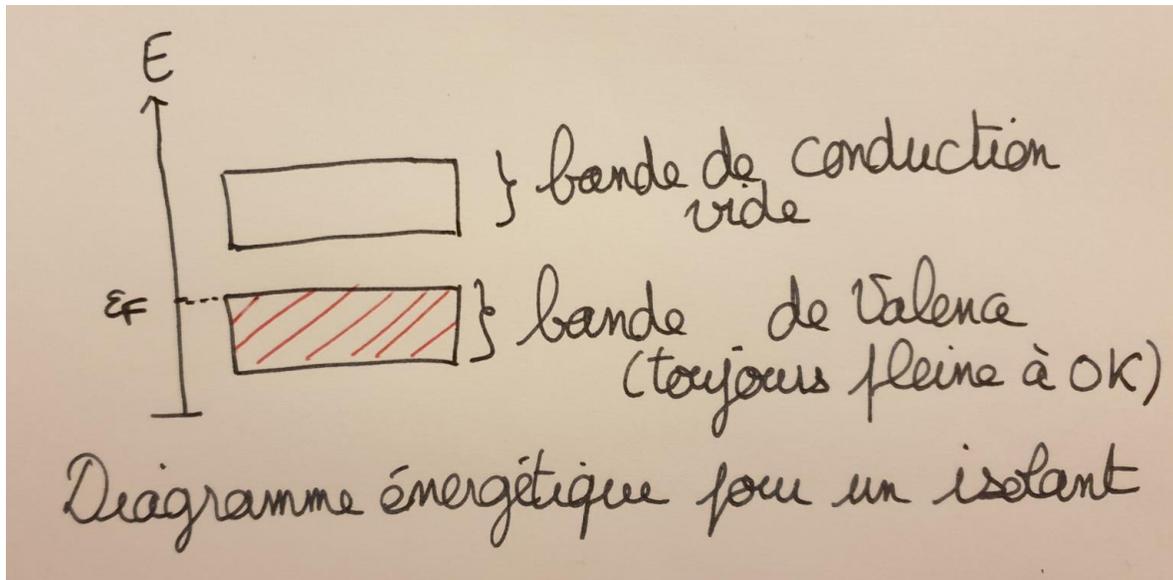


Figure 4

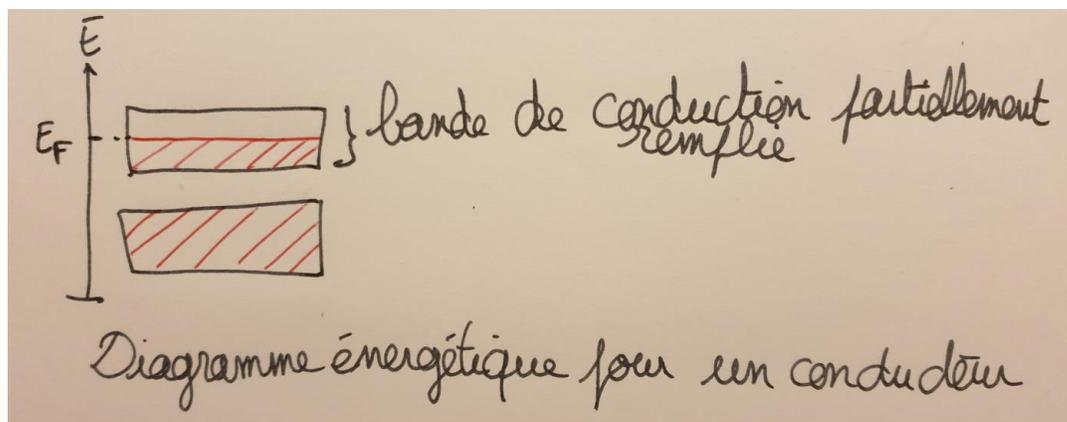


Figure 5

3 Conclusion

Le modèle de Drude rend bien compte des propriétés des métaux, mais pour comprendre en profondeur les choses il faut un modèle quantique de la matière. La théorie des bandes est très utile, et possède plein d'applications comme les semi conducteurs, et la recherche continue sur le sujet, en témoigne un travail d'une équipe du Synchrotron Soleil en 2020 sur l'hydrogène métallique.

4 Questions et remarques

4.1 Remarques

Le modèle de Drude n'est pas forcément à dénigrer trop fortement : dès lors qu'on se cantonne au cas des métaux, on peut retrouver le modèle de Drude à partir de l'approximation du temps de relaxation (cf. Ashcroft notamment), qui donne un éclairage nouveau sur le temps typique

intervenant dans Drude.

J'ai été peu efficace sur le 1, ce qui m'a mis dans le mal pour la suite. Il faut parler de semi conducteurs dans cette leçon, et se garder du temps pour que ce soit clair.

4.2 Questions

Je n'ai plus toutes les réponses, vu que les écrits m'ont coupé dans mon élan d'écrire ce compte rendu.

- Peut-on en toute rigueur parler d'isolant à $T \neq 0$? Non, on a toujours une probabilité d'excitation d'un électron avec l'agitation thermique.
- Qu'est-ce que la mobilité ? Même chose que la conductivité à des facteurs près : $\sigma = nq\mu$
- Comment prendre en compte plusieurs espèces dans le modèle de Drude ? C'est la loi de Kohlrach, on somme les conductivités, ça s'explique bien avec Drude.
- Le comportement de la conductivité en $\frac{1}{\sqrt{T}}$ est-il un problème du modèle de Drude ou de la statistique classique ?
- Dans la construction du modèle de Sommerfeld, comment calculer le vecteur d'onde de Fermi k_F ? Quel est le lien avec des quantités expérimentales ?
- Quelle est la différence fondamentale entre les modèles de Drude et de Sommerfeld ?
- Qu'est-ce qu'un semi-conducteur intrinsèque/extrinsèque ? Que signifie gap direct/indirect ? Un SC intrinsèque a une énergie de gap très faible, et des électrons de valence peuvent sauter dans la bande de conduction via agitation thermique. Ils laissent donc des trous dans la bande de valence, et ces trous participent à la conduction (voir diapo). Pour un SC extrinsèque, on a remplacé des atomes par l'élément de gauche (il manquera donc un électron, on a ajouté un trou, c'est un SC dopé P), ou de droite (on ajoute un électron dans la bande de conduction cette fois, SC dopé N).

Pour ce qui est des gaps directs/indirect, il faut s'intéresser à la relation de dispersion de l'énergie en fonction de k . En réalité, les bandes dépendent du vecteur d'onde, et il faut le prendre en compte si on veut comprendre la conduction (voir sur diapo la sphère de fermi déplacée).

- . Qu'est-ce qu'un semimétal ? Un métal qui conduit très peu?
- Comment expliquer la supraconductivité ? Là il faut regarder du côté de la théorie BCS, les électrons forment des paires de Cooper et la résistance devient nulle. Le matériau devient aussi diamagnétique parfait.
- Qu'est-ce que la thermoélectricité ?
- Qu'est-ce que la conductivité optique ?
- Quel est le lien entre la conductivité thermique et la conductivité électrique ? Pourquoi les deux sont-elles différentes ? Les électrons contribuent aux deux, et les phonons participent aussi à la conductivité thermique. Les contributions sont cependant différentes, comme on peut le voir dans le modèle de Debye par exemple pour la conductivité thermique.

- Qu'est-ce que la loi de Wiedemann-Franz ? Quel est son domaine de validité ?
- Que sont les régimes balistiques et diffusifs de la conduction ? Diffusif : beaucoup de dissipation. Ballistique : peu de dissipation
- Qu'est-ce que le quantum de conductance ?
- Que se passe-t-il en présence d'un champ magnétique ? Qu'est-ce que l'effet Hall ? Comment se manifeste l'effet Hall quantique ?
- Quels sont les succès et les échecs du modèle de Drude ?
- Comment se construit la fonction d'onde pour des électrons sans interaction ? Déterminant de Slater. On peut aussi parler du théorème de Bloch puis du modèle des liaisons fortes.
- En quoi 300K est une basse température pour un métal ? Ce qui compte, c'est le rapport $\frac{T}{T_F}$ et $TF = 10^4 K$. Attention, ce n'est plus vrai dans les structures de basse dimension...
- Comment les interactions modifient-elles la conductivité en première approche ? Dans la théorie du liquide de Fermi, l'effet premier des interactions est de modifier la masse, qui devient une masse effective plus grande que la masse "nue".
Nb : Pour comprendre la masse effective, il faut étudier encore la relation de dispersion de l'énergie, et en faire un DL autour de son extremum, qui est l'extrémité de la bande.
 $E(k) = E_F + \frac{1}{2}(k - k_0)^2 \frac{d^2 E}{dk^2}(k_0)$ On retrouve dans le deuxième terme une énergie de particule libre, dont on peut définir la masse effective par la relation $\frac{\hbar^2}{2m^*} = \frac{d^2 E}{dk^2}(k_0)$. Et d'ailleurs, selon la convexité de la relation, la masse peut être négative : on a des trous!
- Dans le modèle de Drude, qu'est-ce que la vitesse de dérive ? C'est la vitesse d'ensemble du mouvement des électrons induit par la présence d'un champ extérieur
- Comment s'écrit la conductivité en régime AC dans le modèle de Drude ? Quels régimes peut-on ainsi identifier ? Passer le PFD en complexes, on a une relation de la loi d'Ohm en fonction de la pulsation, qui caractérise plusieurs régimes
- Autre résistance ? Résistance de contact
- Montage pour mesurer la conductivité? Montage 4 fils, On ferme un circuit avec un barreau conducteur en série avec un ampèremètre, et on branche en parallèle un voltmètre