

I	DIFFUSION PAR LES IMPURETES FIXES	2
I.1	INTEGRALES DE COLLISION POUR UNE IMPURETE ; SECTION EFFICACE.	2
I.2	TEMPS DE RELAXATION.	3
I.3	DIFFUSION PAR DES IMPURETES IONISEES	4
I.3.1	CAS DES SEMI - CONDUCTEURS	5
I.3.2	CAS DES METAUX	5
II	DIFFUSION ELECTRON - ELECTRON	5

Processus de diffusion

I Diffusion par les impuretés fixes

On suppose que, puisque $M \gg m_e$, que les collisions sont élastiques.

I.1 Intégrales de collision pour une impureté ; section efficace.

Soit $V_i(\vec{r})$ le potentiel associé à une impureté. On se place dans une description de masse effective du système, et on suppose de plus que celui-ci est isotrope. La probabilité par unité de temps et unité de volume dans l'espace réciproque s'écrit, d'après la règle d'or de Fermi:

$$(1) \quad W_{\vec{k}, \vec{k}'} = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \langle \vec{k}' | V_i(\vec{r}) | \vec{k} \rangle \right|^2 \delta(E_{\vec{k}} - E_{\vec{k}'}), \text{ avec } \rho(\vec{k}) = \frac{V}{8\pi^3}.$$

Cependant, en raison du principe d'exclusion de Pauli, le taux de diffusion, c'est-à-dire le nombre d'électrons qui vont être diffusés de l'état \vec{k} vers l'état \vec{k}' par unité de temps doit être modulé par la fraction d'états \vec{k}' disponibles, soit $1 - f(\vec{k}')$, où f est la fonction de distribution des électrons, ainsi que par la fraction des états \vec{k} occupés, soit $f(\vec{k})$. A partir de ce moment, la variation de la fonction de distribution $f(\vec{k})$ par unité de temps va correspondre à la somme de la probabilité qu'un électron \vec{k} soit diffusé vers un état \vec{k}' quelconque et de la probabilité qu'un électron de vecteur d'onde \vec{k}' soit diffusé vers l'état \vec{k} .

On a donc:

$$(2) \quad \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{coll} = \int_{\vec{k}'} d^3 \vec{k}' \left\{ -W_{\vec{k}, \vec{k}'} f_{\vec{k}} (1 - f_{\vec{k}'}) + W_{\vec{k}', \vec{k}} f_{\vec{k}'} (1 - f_{\vec{k}}) \right\}$$

Or, puisque les collisions sont supposées élastiques, on a $W_{\vec{k}, \vec{k}'} = W_{\vec{k}', \vec{k}}$, ce qui implique:

$$(3) \quad \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{coll} = \int_{\vec{k}'} d^3 \vec{k}' W_{\vec{k}, \vec{k}'} (f_{\vec{k}'} - f_{\vec{k}})$$

Remarquons que dans le cadre de l'approximation du temps de relaxation, cette relation se simplifie en $\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{coll} = -\frac{f(\vec{k}) - f_0(\vec{k})}{\tau(\vec{k})}$.

Afin de calculer plus avant l'expression (3), remarquons que, comme $dE = \frac{\hbar^2 \vec{k}}{m} d\vec{k}$, on a

$\delta(E) = \frac{\hbar^2 k}{m} \delta(k)$. On a donc:

$$(4) \quad \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{coll} = \frac{2\pi}{\hbar} \frac{V}{8\pi^3} \iiint \left| \langle \vec{k}' | V_i | \vec{k} \rangle \right|^2 \frac{m^*}{\hbar^2 k} \delta(k' - k) (f_{\vec{k}'} - f_{\vec{k}}) d^3 \vec{k}',$$

En coordonnées sphériques, ceci se réécrit:

$$(5) \quad \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{coll} = \frac{Vm^*}{4\pi^2 \hbar^3} \int k'^2 dk' \frac{1}{k} \delta(k - k') \int d\theta \sin \theta \int d\varphi \left| \langle \vec{k}' | V_i | \vec{k} \rangle \right|^2 (f_{\vec{k}'} - f_{\vec{k}})$$

En raison de la présence du Dirac, ceci se simplifie et se réécrit en:

$$(6) \quad \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{coll} = \frac{\hbar k}{m^* V} \iint d\Omega \frac{V^2 m^{*2}}{4\pi^2 \hbar^4} \left| \langle \vec{k}', V_i | \vec{k} \rangle \right|^2 (f_{\vec{k}} - f_{\vec{k}'})$$

Le terme devant l'intégrale représente un courant de probabilité, et on définit la section efficace de diffusion par

$$(7) \quad \sigma(\theta, \varphi) = \frac{V^2 m^{*2}}{4\pi^2 \hbar^4} \left| \langle \vec{k}', V_i | \vec{k} \rangle \right|^2$$

1.2 Temps de relaxation.

Si on se replace dans l'approximation du temps de relaxation, on peut écrire:

$$(8) \quad f_{\vec{k}} = f_{0,\vec{k}} + f_{1,\vec{k}}, \text{ soit, puisque } f_0 \text{ ne dépend que de } |\vec{k}|:$$

$$(9) \quad f_{\vec{k}'} - f_{\vec{k}} = f_{1,\vec{k}'} - f_{1,\vec{k}}$$

On a donc, en reprenant l'équation (3):

$$(10) \quad (\partial_t f)_{coll} = -f_1(\vec{k}) \iiint d^3 \vec{k}' W_{\vec{k},\vec{k}'} \left(1 - \frac{f_1(\vec{k}')}{f_1(\vec{k})} \right).$$

Par définition du temps de relaxation, on va avoir

$$(11) \quad \frac{1}{\tau(\vec{k})} = \iiint d^3 \vec{k}' W_{\vec{k},\vec{k}'} \left(1 - \frac{f_1(\vec{k}')}{f_1(\vec{k})} \right)$$

Si on considère, pour relier le temps de relaxation à la section efficace de diffusion, une perturbation par un champ électrique (cas du transport électronique simple), on a:

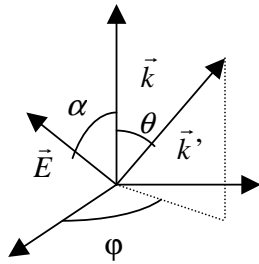
$$(12) \quad f_1(\vec{k}) = e \tau(\vec{k}) \vec{v}_{\vec{k}} \cdot \vec{E} \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \epsilon} \right)$$

Si on fait l'hypothèse que $\tau(\vec{k})$ ne dépend que de $|\vec{k}|$, alors on a directement:

$$(13) \quad 1 - \frac{f_1(\vec{k}')}{f_1(\vec{k})} = 1 - \frac{\vec{k}' \cdot \vec{E}}{\vec{k} \cdot \vec{E}}, \text{ puisque } \vec{v} = \hbar \vec{k}.$$

Replaçons nous alors à nouveau en coordonnées sphériques, avec un angle supplémentaire

α défini par l'angle entre \vec{E} et \vec{k} . Géométriquement, on a:



$$(14) \quad \vec{k}' \cdot \vec{E} = kE (\cos \theta \cos \alpha + \sin \alpha \sin \theta \cos \varphi)$$

$$(15) \quad \vec{k} \cdot \vec{E} = kE \cos \alpha$$

Donc :

$$(16) \quad 1 - \frac{f_1(\vec{k}')}{f_1(\vec{k})} = 1 - \cos \theta - \tan \alpha \sin \theta \cos \varphi$$

Or, en raison de l'isotropie du système, σ ne dépend que de l'angle entre \vec{k} et \vec{k}' , soit θ , ce qui implique que le troisième terme de l'équation (16) disparaît par intégration sur φ . On a donc:

$$(17) \quad \frac{1}{\tau(\vec{k})} = \frac{\hbar k}{m^* V} \int d\Omega \sigma(\theta) (1 - \cos \theta)$$

On n'a traité ici que le cas où il n'y avait qu'une seule impureté. Que se passe-t-il si il y en a un grand nombre?

On va alors avoir, dans l'expression de $W_{\vec{k}\vec{k}}$, un terme en:

$$(18) \quad \left| \left\langle \vec{k} \left| \sum_i V_i(\vec{r} - \vec{R}_i) \right| \vec{k} \right\rangle \right|^2 = \left| \sum_i \int d^3\vec{r} V_i(\vec{r} - \vec{R}_i) e^{i(\vec{k} - \vec{k}') \cdot \vec{r}} \right|^2 = \left| \sum_i \int d^3\vec{r} V_i(\vec{r}) e^{i(\vec{k} - \vec{k}') \cdot (\vec{r} + \vec{R}_i)} \right|^2$$

Ceci se réécrit donc:

$$(19) \quad \sum_{i,j} e^{i(\vec{k} - \vec{k}') \cdot (\vec{R}_i - \vec{R}_j)} \left| \left\langle \vec{k} \left| V_i(\vec{r}) \right| \vec{k} \right\rangle \right|^2$$

On a alors directement:

$$(20) \quad \left| \left\langle \vec{k} \left| \sum_i V_i(\vec{r} - \vec{R}_i) \right| \vec{k} \right\rangle \right|^2 = N \left| \left\langle \vec{k} \left| V_i \right| \vec{k} \right\rangle \right|^2$$

Le temps de relaxation dans cette approche plus générale se modifie donc simplement en:

$$(21) \quad \frac{1}{\tau(\vec{k})} = \frac{\hbar k}{m^*} n_i \int d\Omega \sigma(\theta) (1 - \cos \theta), \text{ où } n_i \text{ est la densité d'impuretés.}$$

Remarque : cette expression n'est valable que pour des impuretés réparties aléatoirement, ce qui est généralement vrai. Dans ce cas, le temps de relaxation ne dépend pas de leur position, mais uniquement de leur densité.

I.3 Diffusion par des impuretés ionisées

Le potentiel créé par de telles impuretés est donné, dans le milieu, par:

$$(22) \quad V_i = \pm \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon_r r}, \text{ où } \epsilon_r \text{ représente l'écrantage par les impuretés liées.}$$

Or, dans l'expression de la section efficace, le terme $\left| \left\langle \vec{k} \left| V_i \right| \vec{k} \right\rangle \right|^2$ représente le module au carré de la transformée de Fourier du potentiel en $\vec{k} - \vec{k}'$, soit:

$$(23) \quad \left| \left\langle \vec{k} \left| V_i \right| \vec{k} \right\rangle \right|^2 = \left| \frac{Ze^2}{\epsilon_0\epsilon_r} \frac{1}{|\vec{k} - \vec{k}'|^2 + k_0^2} \right|^2$$

Or $|\vec{k} - \vec{k}'|^2 = 2k^2 - 2k^2 \cos \theta = 2k^2 (1 - \cos \theta)$, ce qui implique, d'après la définition (7):

$$(24) \quad \sigma(\theta) = 4 \left(\frac{Ze^2 m^*}{4\pi\epsilon_0\epsilon_r \hbar^2} \right)^2 \frac{1}{\left(4k^2 \sin^2 \frac{\theta}{2} + k_0^2 \right)^2}$$

On en déduit le temps de relaxation par intégration sur l'angle solide:

$$(25) \quad \frac{1}{\tau(E)} = \pi n_i \left(\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon_r} \right)^2 \frac{1}{E^{3/2}} \frac{1}{(2m^*)^{1/2}} \left\{ \ln \left(1 + \frac{1}{2x} \right) - \frac{1}{1+x^2} \right\}, \text{ avec } x = \frac{k_0}{2k}$$

I.3.1 Cas des semi - conducteurs

On a $k \gg k_0$, soit $x \ll 1$. Ceci implique que, puisque le ln est quasiment plat, que $\tau(\varepsilon) \sim \varepsilon^{3/2}$

On en déduit que la mobilité des électrons, qui s'écrit $\mu = \frac{e\langle\tau\rangle}{m^*}$, va dépendre de la température en $T^{3/2}$ (théorème de l'équipartition de l'énergie). Au niveau des ordres de grandeur, on a dans ce cas $\tau \sim 10^{-12} s$.

I.3.2 Cas des métaux

Dans ce cas, le vecteur d'onde pertinent est k_F . On va considérer que $k_F \ll k_0$. Or on a vu dans le cours sur l'écrantage que $k_0^2 \propto nk_F$, ce qui implique que $x^2 = \frac{k_0^2}{k_F^2} \propto \frac{n}{k_F}$. Par ailleurs,

$$\frac{1}{E_F^{3/2}} \propto \frac{1}{k_F^3}. \text{ On va donc avoir } \tau(\varepsilon) \propto \frac{n_i}{n} \frac{1}{k_F^2} \sim \frac{n_i}{n} \frac{1}{E_F}$$

La conductivité va alors s'écrire $\sigma = \frac{ne^2\tau(E_F)}{m^*}$, qui va alors ne dépendre que de n_i (et non plus de n)

II Diffusion électron - électron

On considère à présent deux électrons avec $\varepsilon_1 = E_F$, $\varepsilon_2 \leq E_F$, l'électron 1 étant l'électron incident (participant à la conduction électrique). Or, puisque la bande est pleine, il faut nécessairement que $\varepsilon'_1 \geq E_F$ et $\varepsilon'_2 \geq E_F$, d'après le principe d'exclusion. Cependant, la conservation de l'énergie impose $\varepsilon_1 + \varepsilon_2 (\leq 2E_F) = \varepsilon'_1 + \varepsilon'_2 (\geq 2E_F)$. On a donc $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = \varepsilon'_1 = \varepsilon'_2 = E_F$. Ce type de diffusion ne concerne donc que des états sur la surface de Fermi.

On peut donc en tirer que $\frac{1}{\tau_{e^-e^-}} = \frac{(k_B T)^2}{\hbar \varepsilon_F}$, ce qui donne $\tau_{e^-e^-} \sim 10^{-11} s$, ce qui est au moins d'un ordre de grandeur supérieur aux temps de relaxation correspondant aux collisions avec les impuretés. Il ne va donc pas être très influent sur la conductivité électrique.

