

I DYNAMIQUE DES ELECTRONS DE BLOCH **2**

I.1	MODELE SEMI-CLASSIQUE:	2
I.1.1	DEMONSTRATION DES EQUATIONS SEMI – CLASSIQUES :	3
I.1.2	THEOREME DE LA MASSE EFFECTIVE:	4
I.1.3	VALIDITE DE L'HYPOTHESE SEMI-CLASSIQUE:	7
I.2	MOUVEMENT DANS UN CHAMP ELECTRIQUE UNIFORME ET CONSTANT:	8
I.3	MOUVEMENT DANS UN CHAMP MAGNETIQUE UNIFORME ET CONSTANT:	9
I.3.1	UTILISATION DE B POUR DETERMINER LES PROPRIETES DE LA MATIERE.	10

II EQUATION DE BOLTZMANN: **11**

II.1	FONCTION DE DISTRIBUTION DES ELECTRONS.	11
II.2	EQUATION DE BOLTZMANN:	11

III APPROXIMATION DU TEMPS DE COLLISION **12**

III.1	HYPOTHESE DE L'EQUILIBRE LOCAL:	12
III.2	LINEARISATION:	12
III.3	VECTEURS DENSITE DE COURANT ELECTRIQUE ET DE FLUX DE CHALEUR:	13
III.4	ELECTRONS ET TROUS:	15
III.5	PHENOMENE DE CONDUCTION DANS LES METAUX:	16
III.5.1	APPLICATION A LA CONDUCTION ELECTRIQUE:	17
III.5.2	APPLICATION A LA CONDUCTIVITE THERMIQUE	19
III.5.3	EFFETS THERMOELECTRIQUES	21
III.6	PHENOMENE DE CONDUCTION DANS LES SEMI – CONDUCTEURS:	21
III.7	TRANSPORT SOUS CHAMP MAGNETIQUE	24
III.7.1	EFFET HALL	25
III.7.2	MAGNETORESISTANCE	26

IV ECRANTAGE **27**

IV.1	CONSTANTE DIELECTRIQUE GENERALISEE	27
IV.2	ECRANTAGE DANS L'APPROXIMATION DE THOMAS - FERMI	27
IV.2.1	CAS DES METAUX:	28
IV.2.2	CAS DES SEMI – CONDUCTEURS:	29

Transport électronique

Précédemment, nous avons vu quelques modèles classiques et simples, comme les modèles de Drude et de Sommerfeld.

Nous allons ici effectuer un traitement quantique du problème, ou plutôt semi-classique.

I Dynamique des électrons de Bloch

I.1 Modèle semi-classique:

En mécanique quantique, les électrons ne peuvent plus être considérés comme des particules ponctuelles avec une position et une vitesse bien définies, et ceci en raison des inégalités d'Heisenberg.

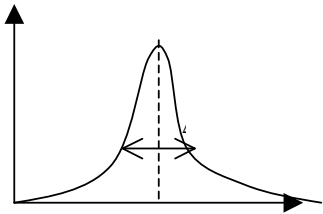
On va alors représenter la particule par un paquet d'ondes planes afin de se rapprocher d'un modèle semi-classique.

$$(1) \quad \psi_n(\vec{r}) = \int_{\vec{k}} a(\vec{k}) \psi_{n\vec{k}}(\vec{r}) e^{-i\omega_n t} d\vec{k},$$

où les $\psi_{n\vec{k}}(\vec{r}) = u_{n\vec{k}}(\vec{r}) e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}$ sont les fonctions de Bloch correspondant à l'énergie d'une bande $E_{n\vec{k}}$, et $\omega_{n\vec{k}} = \frac{E_{n\vec{k}}}{\hbar}$, ceci afin que l'on ait bien $H\psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}$.

Si l'on impose aucune action extérieure, le paquet d'onde est stable et $a(\vec{k}) = \text{cste} \quad \forall t$.

Par ailleurs, pour respecter la réalité physique, le paquet d'onde va être centré sur une valeur \vec{k}_0 .



Avec $\Delta k \ll (\text{taille PZB})$.

Quelle est alors l'extension de ce paquet d'onde dans l'espace réel?

On a:

$$(2) \quad \psi(\vec{r}_0 + \vec{R}, t) = \int_{\vec{k}} a(\vec{k}) \psi_{n\vec{k}}(\vec{r}_0) e^{i(\vec{k} \cdot \vec{R} - \omega_n t)} d\vec{k}$$

Le terme en $a(\vec{k}) \psi_{n\vec{k}}(\vec{r}_0)$ a toujours une extension caractéristique dans l'espace réciproque de $\Delta \vec{k}$, puisque à \vec{r}_0 fixé, il n'y a aucune raison pour que $\psi_{n\vec{k}}$ varie énormément avec \vec{k} (le paquet d'onde dans l'espace réciproque est donné par la fonction $a(\vec{k})$).

D'après les propriétés de la transformée de Fourier, l'extension spatiale de la fonction d'onde se fera donc autour de \vec{r}_0 avec une largeur s'étendant sur plusieurs mailles

élémentaires. En effet, $\frac{1}{k} \gg \gg (\text{maille elem.})$.

On va donc repérer l'électron par le centre du paquet d'ondes, que l'on appellera abusivement "position" de l'électron, et le caractère non localisé de la particule se manifestera dans l'extension de ce paquet d'ondes.

Ceci se comprend si l'on calcule la vitesse de groupe de ce paquet d'onde:

$$(3) \quad \vec{v}_g = \overrightarrow{\text{grad}}_{\vec{k}} \omega_{n\vec{k}} = \frac{1}{\hbar} \overrightarrow{\text{grad}}_{\vec{k}, \vec{k}=\vec{k}_0} E_{n\vec{k}} = \left\langle v_{n\vec{k}_0} \right\rangle$$

C'est cette extension que la modèle semi-classique vise à décrire, et il s'applique à des champs peu variables à l'échelle du paquet d'ondes et donc variable très lentement à l'échelle de la maille élémentaire.

Le modèle semi classique se fonde sur l'hypothèse qu'il n'y pas de transitions interbandes, et le fait que les champs soient lentement variables à l'échelle de la maille élémentaire implique, ce que nous allons démontrer, les relations suivantes:

$$(4) \quad \frac{d\vec{r}}{dt} = v_{n\vec{k}} = \frac{1}{\hbar} \overrightarrow{\text{grad}}_{\vec{k}} E_{n\vec{k}}$$

$$(5) \quad \hbar \frac{d\vec{k}}{dt} = -e [\vec{E} + \vec{v}_{n,l} \wedge \vec{B}]$$

où \vec{r} est la "position" de l'électron, c'est-à-dire le centre du paquet d'onde dans l'espace réel, et $\hbar\vec{k}$ est la "quantité de mouvement" de l'électron, c'est-à-dire que \vec{k} est le centre du paquet d'onde dans l'espace réciproque.

I.1.1 Démonstration des équations semi – classiques :

1^{ère} étape: Montrons que si on a $H\psi_{n\vec{k}} = E_{n\vec{k}}\psi_{n\vec{k}}$, alors il existe une fonction $E_n(-i\vec{\nabla})$, ne dépendant que de la quantité de mouvement de l'électron, telle que $E_n(-i\vec{\nabla})\psi_{n\vec{k}} = E_{n\vec{k}}\psi_{n\vec{k}}$.

On a $E_{n\vec{k}}$ qui est une fonction périodique avec la périodicité du réseau réciproque. On peut donc la décomposer en série de Fourier:

$$(6) \quad E_n(\vec{k}) = \sum_{\vec{R} \in R.B.} \tilde{E}_{n\vec{R}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}},$$

soit:

$$(7) \quad E_n(-i\vec{\nabla}) = \sum_{\vec{R} \in R.B.} \tilde{E}_{n\vec{R}} e^{\vec{\nabla} \cdot \vec{R}}, \text{ avec } \vec{\nabla} = \overrightarrow{\text{grad}}_{\vec{R}}.$$

Or

$$\begin{aligned} e^{\vec{\nabla} \cdot \vec{R}} \psi_{n\vec{k}} &= \left\{ 1 + \vec{R} \cdot \vec{\nabla} + \frac{1}{2} (\vec{R} \cdot \vec{\nabla})^2 + \dots \right\} \psi_{n\vec{k}} \\ &= \psi_{n\vec{k}} + R_x \frac{\partial \psi}{\partial x} + R_y \frac{\partial \psi}{\partial y} \dots \\ &= \psi_{n\vec{k}}(\vec{r} + \vec{R}) \text{ (Développement de Taylor)} \end{aligned}$$

D'après les propriétés des fonctions de Bloch, on a donc $e^{\vec{R} \cdot \vec{\nabla}} = e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}} \psi_{n\vec{k}}(\vec{r})$

Ce qui permet de démontrer le résultat de la première étape:

$$(8) \quad E_n(-i\vec{\nabla}) = \sum_{\vec{R} \in R.B.} (\tilde{E}_{n\vec{R}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}}) \psi_{n\vec{k}} = E_{n\vec{k}} \psi_{n\vec{k}}$$

Ceci constitue un résultat fondamental. En effet, l'équation aux valeurs propres écrite ci-dessus à directement la forme de celle d'un électron libre, mis à part que l'hamiltonien n'est pas l'énergie cinétique de la particule : le champ cristallin n'apparaît plus que dans la relation de dispersion.

2^{ème} étape : résolution de l'équation aux valeurs propres.

Nous allons ici nous limiter au champ électrique, le traitement pour le champ magnétique étant le même bien qu'un peu plus calculatoire.

On a donc

$$(9) \quad (H + U)\psi(\vec{r}, t) = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}, \text{ avec } \overrightarrow{\text{grad}}U = e\vec{E}$$

L'hypothèse que nous faisons alors est qu'il n'y a pas de transition interbandes.

En utilisant (1), l'équation aux valeurs propres se réécrit:

$$(10) \quad \int_{\vec{k}} \vec{a}_{\vec{k}}(t) H \psi_{n\vec{k}}(\vec{r}, t) d\vec{k} + U \psi(\vec{r}, t) = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}$$

Or $H \psi_{n\vec{k}} = E_{n\vec{k}} \psi_{n\vec{k}} = E_n (-i\vec{\nabla}) \psi_{n\vec{k}}$, d'après (8). On peut donc écrire:

$$(11) \quad [E_n (-i\vec{\nabla}) + U] \psi(\vec{r}, t) = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}$$

Dans un cadre classique, on aurait :

$$(12) \quad \frac{\partial \vec{r}}{\partial t} = \frac{\partial H}{\partial \vec{p}} \text{ et } \frac{\partial \vec{p}}{\partial t} = -\frac{\partial H}{\partial \vec{r}}.$$

Etant alors données les dépendances en \vec{r} et en \vec{p} des divers termes de (11), ceci s'écrit:

$$(13) \quad \frac{\partial \vec{r}}{\partial t} = \frac{\partial E_n}{\partial \vec{p}} \text{ et } \frac{\partial \vec{p}}{\partial t} = -\frac{\partial U}{\partial \vec{r}} = -e\vec{E}$$

Si on repasse alors en mécanique quantique, on a:

$$(14) \quad \frac{d\langle \vec{r} \rangle}{dt} = \frac{\partial E_n}{\partial \vec{p}} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E_n}{\partial \vec{k}}, \text{ ainsi que:}$$

$$(15) \quad \boxed{\hbar \frac{\partial \vec{k}}{\partial t} = -e\vec{E}}$$

I.1.2 Théorème de la masse effective:

Considérons une bande n comportant un extremum de bande \vec{k}_0 .

Toute fonction de Bloch dans cette bande s'écrit:

$$(16) \quad \psi_{n\vec{k}}(\vec{r}) = u_{n\vec{k}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}$$

Mais si \vec{k} est voisin de \vec{k}_0 , alors on a

$$(17) \quad \psi_{n\vec{k}} = e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} u_{n\vec{k}_0} = e^{i(\vec{k}-\vec{k}_0) \cdot \vec{r}} \psi_{n\vec{k}_0}.$$

La fonction d'onde totale dans le modèle semi-classique s'écrit donc, d'après (1):

$$(18) \quad \psi(\vec{r}, t) = \psi_{n\vec{k}_0} \int_{\vec{k}} \vec{a}_{\vec{k}}(t) e^{i(\vec{k}-\vec{k}_0) \cdot \vec{r}} d\vec{k} = \psi_{n\vec{k}_0} \cdot F(\vec{r}),$$

où $F(\vec{r}) = \int_{\vec{k}} \tilde{a}_{\vec{k}}(t) e^{i(\vec{k}-\vec{k}_0)\vec{r}} d\vec{k}$ est très lentement variable en \vec{r} dans la mesure où $\vec{k} - \vec{k}_0$ est petit.

Par ailleurs, on a

$$\begin{aligned}
 E_n(-i\vec{\nabla})F(\vec{r},t)\psi_{n\vec{k}_0} &= \sum_{\vec{R} \in R.B.} \tilde{E}_n(\vec{R}) e^{\vec{R} \cdot \vec{\nabla}} F(\vec{r},t) \psi_{n\vec{k}_0}(\vec{r}) \\
 &= \sum_{\vec{R} \in R.B.} \tilde{E}_n(\vec{R}) F(\vec{r} + \vec{R},t) \psi_{n\vec{k}_0}(\vec{r} + \vec{R}) \\
 (19) \quad &= \sum_{\vec{R} \in R.B.} \tilde{E}_n(\vec{R}) F(\vec{r} + \vec{R},t) \psi_{n\vec{k}_0}(\vec{r}) e^{i\vec{k}_0 \cdot \vec{R}} \\
 &= \psi_{n\vec{k}_0}(\vec{r}) \sum_{\vec{R} \in R.B.} \tilde{E}_n(\vec{R}) e^{\vec{R} \cdot \vec{\nabla}} F(\vec{r},t) e^{i\vec{k}_0 \cdot \vec{R}} \\
 &= \psi_{n\vec{k}_0}(\vec{r}) \left\{ \sum_{\vec{R} \in R.B.} \tilde{E}_n(\vec{R}) e^{i(\vec{k}_0 \cdot \vec{R} - i\vec{R} \cdot \vec{\nabla})} \right\} F(\vec{r},t)
 \end{aligned}$$

On a donc :

$$(20) \quad E_n(-i\vec{\nabla})F(\vec{r},t)\psi_{n\vec{k}_0} = \psi_{n\vec{k}_0} E_n(\vec{k}_0 - i\vec{\nabla})F(\vec{r},t)$$

D'où, en injectant le résultat précédent dans l'équation de Schrödinger (11), on obtient:

$$(21) \quad (E_n(\vec{k}_0 - i\vec{\nabla}) + U)F(\vec{r},t) = i\hbar \frac{\partial F}{\partial t}$$

Si maintenant on effectue un développement de $E_n(\vec{k})$ autour de \vec{k}_0 , on obtient, puisque E_n présente un extremum en \vec{k}_0 :

$$(22) \quad E_n(\vec{k}) = E_n(\vec{k}_0) + \frac{\hbar^2}{2m^*} (\vec{k} - \vec{k}_0)^2,$$

où m^* est appelée *masse effective*, et correspond au terme qui apparaît dans le développement. En appliquant ce résultat à $\vec{k} = \vec{k}_0 - i\vec{\nabla}$, on obtient une nouvelle expression de l'équation de Schrödinger:

$$(23) \quad \left\{ E_n(\vec{k}_0) - \frac{\hbar^2}{2m^*} \vec{\nabla}^2 + U \right\} F(\vec{r},t) = i\hbar \frac{\partial F}{\partial t}$$

ce qui signifie physiquement que à un extremum de bande, on va pouvoir étudier les particules comme des particules libres de masse effective m^* .

Remarque: lien entre masse effective et structure de bande:

On se souvient que, pour des fonctions des fonctions de Bloch de la forme $\psi_{n\vec{k}}(\vec{r}) = u_{n\vec{k}}(\vec{r}) e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}$, la fonction u était solution de l'équation:

$$h_{\vec{k}} u_{n\vec{k}}(\vec{r}) = E_{n\vec{k}} u_{n\vec{k}}(\vec{r}), \text{ avec } h_{\vec{k}} = \frac{\hbar^2}{2m} (\vec{k} - i\vec{\nabla})^2 + V(\vec{r}), V \text{ représentant le champ cristallin.}$$

On avait par ailleurs:

$$(24) \quad h_{\vec{k}+d\vec{k}} = \frac{\hbar^2}{2m} dk^2 + \frac{\hbar^2}{m} (\vec{k} - i\vec{\nabla}) d\vec{k} + h_{\vec{k}},$$

et on avait calculé la variation d'énergie due au potentiel cristallin au premier ordre en disant que:

$$(25) \quad dE_{n\vec{k}} = \langle u_{n\vec{k}} | dh_{\vec{k}} | u_{n\vec{k}} \rangle$$

Nous avons alors obtenu au premier ordre en perturbation, et donc en dk :

$$(26) \quad dE_{n,\vec{k}} = \frac{\hbar^2}{m} \langle \psi_{n\vec{k}} | -i \overrightarrow{\text{grad}} | \psi_{n\vec{k}} \rangle d\vec{k},$$

résultat important qui nous avait permis de dire que:

$$(27) \quad \langle \vec{v} \rangle = \frac{1}{\hbar} \overrightarrow{\text{grad}}_{\vec{k}} E_{n\vec{k}}.$$

Au second ordre en perturbation, on va avoir, en traitant le terme quadratique en dk dans le développement de $h_{\vec{k}}$ au premier ordre en perturbation et le terme linéaire au second ordre:

$$(28) \quad \delta^2 E_{n\vec{k}} = \langle u_{n\vec{k}} | \frac{\hbar^2}{2m} dk^2 | u_{n\vec{k}} \rangle + \sum_{n' \neq n} \frac{\left| \langle u_{n\vec{k}} | \frac{\hbar^2}{m} d\vec{k} (\vec{k} - i\vec{\nabla}) | u_{n'\vec{k}} \rangle \right|^2}{E_{n\vec{k}} - E_{n'\vec{k}}},$$

et on trouve finalement que:

$$(29) \quad \delta^2 E_{n\vec{k}} = \frac{\hbar^2}{2m} (d\vec{k})^2 + \left(\frac{\hbar^2}{m} \right)^2 \sum_{\alpha} \sum_{\beta} dk_{\alpha} dk_{\beta} \sum_{n' \neq n} \frac{\langle u_{n'\vec{k}} | P_{\alpha} | u_{n\vec{k}} \rangle \langle u_{n\vec{k}} | P_{\beta} | u_{n'\vec{k}} \rangle}{E_{n\vec{k}} - E_{n'\vec{k}}},$$

ce qui, en faisant le lien avec la masse effective, nous permet de définir un *tenseur masse effective* m^* tel que:

$$(30) \quad \left(\frac{1}{m^*} \right)_{\alpha\beta} = \frac{1}{m} \left(\delta_{\alpha\beta} + \sum_{n' \neq n} \frac{W_{\alpha\beta}}{E_{n\vec{k}} - E_{n'\vec{k}}} \right)$$

On peut par exemple appliquer ceci à des électrons dans un champ:

$$(31) \quad \frac{dk_{\alpha}}{dt} = \sum_{\beta} \frac{\delta k_{\beta}}{\partial v_{\beta}} \frac{\partial v_{\beta}}{\partial t} = \sum_{\beta} \frac{(m^*)_{\alpha\beta}}{\hbar} \frac{\partial v_{\beta}}{\partial t}.$$

Or comme $\hbar \frac{d\vec{k}}{dt} = -e(\vec{E} + \vec{v} \wedge \vec{B})$, on a:

$$(32) \quad [M^*] \frac{d\vec{v}}{dt} = -e(\vec{E} + \vec{v} \wedge \vec{B})$$

On va donc pouvoir traiter les problème en extremum de bandes comme des particules libres mais de masse la masse effective, qui contient les informations de la structure de bande induite par le champ cristallin.

I.1.3 Validité de l'hypothèse semi-classique:

L'hypothèse semi-classique est valable tant que les deux conditions suivantes sont remplies:

$$(33) \quad \begin{cases} eE_a \ll \frac{[E_{gap}(k)]^2}{E_F} \\ \hbar \frac{eB}{m} \ll \frac{[E_{gap}(k)]^2}{E_F} \end{cases}$$

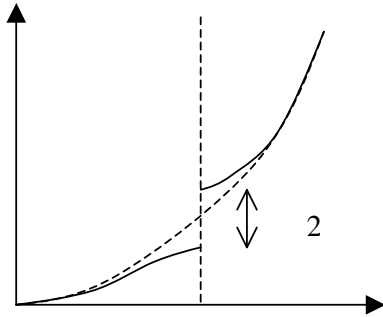
Avant de justifier ces critères, prenons quelques exemples:

—¹→ cas d'un mauvais métal : $\rho = 100 \mu\Omega.cm^{-1}$; $j = 100 A/cm^2$. Ceci implique que $E = 10^{-2} V/cm$. On a alors $eE_a \sim 10^{-10} eV$, et comme $E_F \sim 1 eV$, on doit avoir $E_{gap} \ll 10^{-5} eV$. Ceci montre que l'approximation semi-classique n'est pas très bonne dans le cas d'un métal.

—²→ cas d'un semi-conducteur intrinsèque. On a ici $eE_a = 10^{-4} eV$, soit $E_{gap} \ll 10 meV$. Ceci n'est pas trop difficile à satisfaire (?)

Quelle est l'origine de ces critères de validité?

Rappelons l'allure de la courbe $E(k)$ dans le modèle des électrons presque libres:



On a par ailleurs $v = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E}{\partial k}$.

L'hypothèse semi-classique consiste à dire que l'on doit avoir $\Delta v \ll v_F$. En effet, le paquet d'ondes "représentant" l'électron doit rester assez piqué, et donc ne pas trop s'étaler au cours de son évolution.

Or $\Delta v = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial^2 E}{\partial k^2} \Delta k$, et donc on doit avoir

$$\Delta k \ll \frac{\hbar v_F}{\left(\frac{\partial^2 E}{\partial k^2} \right)}$$

Par ailleurs, on a $\frac{\partial^2 E}{\partial k^2} \approx \left(\frac{\hbar^2 K}{m} \right)^2 \frac{1}{|u_K|}$. Comme $\frac{\hbar K}{m} \approx v_F$ et $E_{gap} = |u_K|$, la condition

s'écrit: $\Delta k \ll \frac{E_{gap}}{\hbar v_F}$

D'après les relations de Heisenberg, ceci implique que $\Delta x \gg \frac{\hbar v_F}{E_{gap}}$.

L'incertitude sur le champ électrique va donc être donnée par $e\Delta\phi = eE_a \Delta x \gg \frac{eE_a \hbar v_F}{E_{gap}}$.

Dans le cadre du modèle semi-classique, il ne peut pas y avoir de transition interbande, ce qui implique: $E_{gap} \gg e\Delta\phi = \frac{eE_a \hbar v_F}{E_{gap}}$, ce qui se réécrit $\frac{eE_a}{k_F} \ll \frac{[E_{gap}]^2}{E_F}$. Enfin on a $k_F \sim a$, ce qui donne l'inégalité attendue.

I.2 Mouvement dans un champ électrique uniforme et constant:

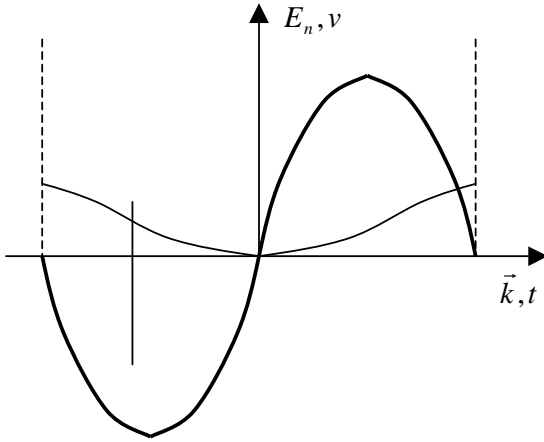
Dans le cadre du modèle semi classique, l'égalité (15) s'intègre aisément en:

$$(34) \quad \hbar \vec{k} = -e\vec{E}_a t + \hbar \vec{k}(0)$$

Par ailleurs, la vitesse de l'électron est donnée par:

$$(35) \quad \vec{v} = \frac{1}{\hbar} \overrightarrow{\text{grad}}_{\vec{k}} \{E_n(\hbar \vec{k}_0 - e\vec{E}_a t)\}$$

Représentons une bande du cristal dans la première zone de Brillouin:



Comme le comportement de la vitesse en t est le même que son comportement en \vec{k} , à une constante multiplicative près, la structure de bande impose que la vitesse reste bornée. Ceci constitue une différence majeure avec les électrons libres : on ne peut pas accélérer jusqu'à l'infini des électrons placés dans un potentiel périodique : ils effectuent des oscillations, appelées *oscillations de Bloch*. On constate alors que:

—¹→ il n'y a pas de courant continu dans un cristal parfait

—²→ l'application d'un champ électrique constant induit un courant alternatif dans le

conducteur.

En fait, dans un vrai solide, la présence des impuretés entraîne l'apparition d'un courant continu, dû aux collisions entre les électrons et les impuretés du cristal.

Intéressons nous tout d'abord à la période de ces oscillations:

Le temps mis pour parcourir la première zone de Brillouin est tel que:

$$(36) \quad \frac{2\pi}{a} = T \frac{eE_a}{\hbar}, \text{ soit}$$

$$(37) \quad T = \frac{2\pi\hbar}{aeE_a} = \frac{h}{aeE_a}$$

Si on prend un champ électrique fort $E_a = 10^4 \text{ V}$, et $a = 1 \text{ \AA}$, alors $T \approx 10^{-11} \text{ s} = 10^3 \tau$, où τ est le temps caractéristique des collisions.

On voit donc que les collisions avec les impuretés vont totalement détruire ce régime oscillant, puisque dans une période de ce mouvement l'électron va subir en moyenne un millier de collisions.

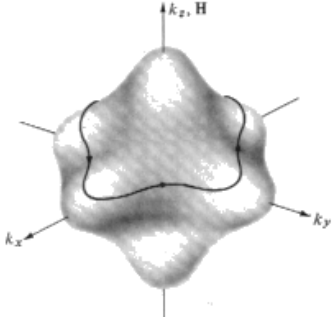
I.3 Mouvement dans un champ magnétique uniforme et constant:

On a toujours les relations du modèle semi-classique:

$$(38) \quad \frac{d\vec{r}}{dt} = \frac{1}{\hbar} \text{grad}_{\vec{k}} E \quad \text{et} \quad \hbar \frac{d\vec{k}}{dt} = -e\vec{v}_{\vec{k}} \wedge \vec{B}$$

Si on se donne un axe Oz parallèle à B , comme dans le traitement classique, $E(\vec{k})$ et k_z seront des constantes du mouvement.

La trajectoire, dans l'espace réciproque, de l'électron sera donc une courbe s'appuyant sur une surface d'énergie constante et perpendiculaire à Oz .

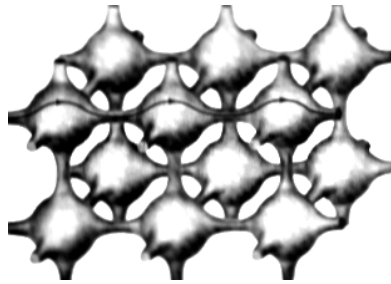


Le sens dans lequel est parcouru l'orbite se déduit de la relation liant la vitesse au gradient de l'énergie. En effet, la vitesse va pointer vers les énergies plus hautes, ce qui donne le sens du parcours. Si on s'imagine alors marchant le long de l'orbite (dans l'espace des k) de l'électron, ces relations montrent que les hautes énergies vont se trouver à notre droite, si le champ magnétique pointe vers le haut.

D'après la relation donnant l'évolution temporelle de \vec{k} , on a:

$d\vec{k} = -e d\vec{r}_{\vec{k}} \wedge \vec{B}$, ce qui implique que l'orbite électronique dans l'espace réel va se déduire de celle dans l'espace des k par une rotation de $\pi/2$ autour de Oz suivie d'une homothétie de rapport $\frac{\hbar}{eB}$.

Pour des électrons libres, on retrouve que la pulsation correspondant à l'orbite est la classique *pulsation cyclotron* $\omega_c = \frac{eB}{m}$.



Il faut remarquer que, dans le cas des électrons de Bloch, la structure de bande entraîne une déformation des surfaces d'énergies constantes, ce qui implique que dans un grand nombre de cas les orbites ne sont plus circulaires, ni même nécessairement fermées.

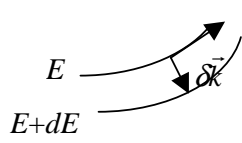
Nous pouvons alors évaluer le temps que met l'électron à parcourir la portion d'une orbite contenue entre k_1 et k_2 .

On a:

$$(39) \quad \Delta t = t_2 - t_1 = \int_{t_1}^{t_2} dt = \int_{\vec{k}_1}^{\vec{k}_2} \frac{d\vec{k}}{\left| \frac{d\vec{k}}{dt} \right|}$$

En utilisant les équations du modèle semi-classique, on a $\left| \frac{d\vec{k}}{dt} \right| = \frac{e}{\hbar} |v_{\vec{k}\perp}| B$, ce qui donne

$$(40) \quad \left| \frac{d\vec{k}}{dt} \right| = \frac{e}{\hbar^2} \left| \left(\overrightarrow{\text{grad}}_{\vec{k}} E \right)_{\perp} \right| B$$



Selon ce petit schéma, on a $\left(\overrightarrow{\text{grad}} E \right)_{\perp} = \frac{dE}{d\vec{k}}$, et donc:

$$(41) \quad \Delta t = \frac{\hbar^2}{eB} \int_{\vec{k}_1}^{\vec{k}_2} \frac{d\vec{k}}{dE} d\vec{k}$$

L'intégrale donne justement l'aire comprise entre les deux orbites voisines de \vec{k} , délimitées par \vec{k}_1 et \vec{k}_2 , ce qui donne au total, en désignant par $A_{1,2}$ cette aire:

$$(42) \quad \Delta t = \frac{\hbar^2}{eB} \frac{\partial A_{1,2}}{\partial E}.$$

Si la courbe est une courbe fermée, on obtient la période du mouvement:

$$(43) \quad T = \frac{\hbar^2}{eB} \frac{\partial A(E, k_z)}{\partial E} = \frac{2\pi m^*}{eH} = \frac{2\pi}{\omega_c^*},$$

où on a défini la masse cyclotron par

$$(44) \quad m^* = \frac{\hbar^2}{2\pi} \frac{\partial A(E, k_z)}{\partial E}.$$

Remarquons que l'on retrouve bien, dans le cas des électrons libres, $m^* = m$, puisque $A(E, k_z) = \pi k^2 = \frac{2\pi m}{\hbar^2} E$.

I.3.1 Utilisation de B pour déterminer les propriétés de la matière.

Rappel sur les niveaux de Landau:

Si on considère des électrons libres soumis à un champ $\vec{B} // Oz$, l'hamiltonien s'écrit:

$$(45) \quad H = \frac{1}{2m} (\vec{p} + e\vec{A})^2.$$

Les fonctions propres solutions de cet hamiltonien sont:

$$(46) \quad \psi_{n, k_y, k_z} = \frac{1}{L} e^{ik_y y} e^{ik_z z} \phi_n \left(x + \frac{\hbar k_y}{eB} \right),$$

et les énergies propres de ces états, appelés *niveaux de Landau* sont:

$$(47) \quad E_{n, k_z} = \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} + \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega_c$$

La dégénérescence d'un niveau de Landau est donnée, à k_z donné, par:

$$(48) \quad g(E_n) = \frac{2eB}{h} L^2,$$

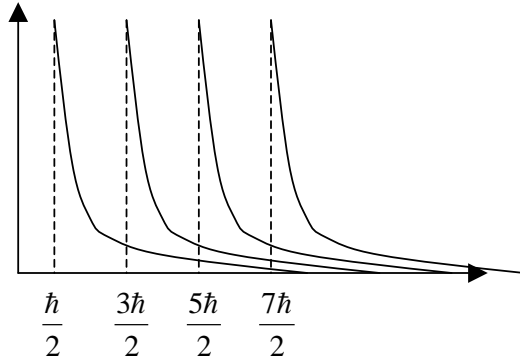
et la densité d'états par unité de surface est donnée par:

$$(49) \quad g(E) = \frac{2eB}{h} \sum_n \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk_z}{2\pi} \delta(E - E_{n,k_z}), \text{ soit:}$$

$$(50) \quad g(E) = \frac{2eB}{h} \sqrt{2\pi} \sum_{n=0}^{n_0} \frac{1}{\sqrt{E - \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega_c}},$$

avec n_0 tel que $\left(n_0 + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega_c < E < \left(n_0 + \frac{3}{2}\right) \hbar \omega_c$.

La densité d'états à donc l'allure suivante:



La densité d'état, qui est un des paramètres les plus importants en ce qui concerne les propriétés électriques du conducteur, présente donc des singularités à chaque fois que

$$(51) \quad \frac{1}{B} = \left(n + \frac{1}{2}\right) \frac{\hbar}{E_F} \frac{e}{m}.$$

II Equation de Boltzmann:

II.1 Fonction de distribution des électrons.

Nous nous intéressons maintenant à un modèle permettant d'expliquer le transport électronique dans les différents corps cristallins.

Considérons un volume élémentaire de l'espace des phases $d^3\vec{r}d^3\vec{k}$, avec $a \ll d^3\vec{r} \ll \text{macro}$.

Le volume occupé par un état vaut $\frac{8\pi^3}{V}$, ce qui implique que le nombre d'états contenus dans ce volume élémentaire vaut (avec le spin):

$$(52) \quad n(\vec{r}, \vec{k}) = \frac{d^3\vec{r}}{4\pi^3} d^3\vec{k}.$$

On appelle alors *fonction de distribution* la fonction donnant la proportion de ces états qui sont occupés. On aura donc

$$(53) \quad \frac{1}{4\pi^2} f(\vec{r}, \vec{k}, t) d^3\vec{r}.d^3\vec{k} : \text{nombre d'états occupés dans ce volume élémentaire.}$$

II.2 Equation de Boltzmann:

Lorsqu'il n'y a pas de collision, la fonction $f(\vec{r}(t), \vec{k}(t))$ est une constante. En effet, il s'agit d'une distribution statistique qui ne varie pas tant que les électrons ne sont pas soumis à un potentiel différent que celui du champ cristallin.

Ceci implique par différentiation que:

$$(54) \quad \frac{d\vec{r}}{dt} \cdot \overrightarrow{\text{grad}}_{\vec{r}} f + \frac{d\vec{k}}{dt} \cdot \overrightarrow{\text{grad}}_{\vec{k}} f + \frac{\partial f}{\partial t} = 0 \quad (\text{équation de Liouville})$$

Par ailleurs, comme les collisions sont des phénomènes soudain et rapide, on ne peut pas leur appliquer le modèle semi-classique.

Ici nous donnons à collision son sens le plus large, c'est-à-dire une interaction rapide avec, les impuretés, les défauts du cristal, les atomes extérieurs, les phonons acoustiques et optiques...

L'équation de Liouville va alors être modifiée en *équation de Boltzmann*:

$$(55) \quad \left[\frac{d\vec{r}}{dt} \cdot \overrightarrow{\text{grad}}_{\vec{r}} f + \frac{d\vec{k}}{dt} \cdot \overrightarrow{\text{grad}}_{\vec{k}} f + \frac{\partial f}{\partial t} = \frac{\partial f}{\partial t} \right]_{\text{coll.}}$$

III Approximation du temps de collision

III.1 Hypothèse de l'équilibre local:

On va essayer de modéliser les collisions. Cette approximation consiste en fait à oublier l'origine microscopique des collisions.

On fait tout d'abord l'*hypothèse de l'équilibre local* : on suppose qu'il est possible de découper le système en cellules élémentaires, suffisamment grandes pour pouvoir y définir des grandeurs thermodynamiques (T, P, μ), mais petites à l'échelle du système et surtout suffisamment petites pour pouvoir considérer que ces grandeurs thermodynamiques y sont uniformes.

On fait alors l'hypothèse suivante:

Les collisions ont tendance à ramener la fonction de distribution vers celle de l'équilibre local.

On écrit donc que $\left. \frac{\partial f}{\partial t} \right|_{\text{coll}} = -\frac{f - f_0}{\tau(v)}$, où f_0 est la fonction de distribution de l'équilibre local.

Par exemple, et c'est ce que nous considérerons dans la suite,

$$(56) \quad f_0(\vec{r}, \vec{k}, t) = \frac{1}{e^{\frac{\varepsilon(\vec{k}) - \mu(\vec{r})}{k_B T(\vec{r})}} + 1}, \text{ fonction de Fermi - Dirac.}$$

III.2 Linéarisation:

On va supposer que les effets qui vont écarter le système de l'équilibre vont être faibles, et on va développer f par:

$$(57) \quad f = f_0 + f_1, \text{ avec } f_1 \ll f_0.$$

III.3 Vecteurs densité de courant électrique et de flux de chaleur:

On a directement que le vecteur densité de courant électrique vaut :

$$(58) \quad \vec{j}_e(\vec{r}, t) = -\frac{e}{4\pi^3} \int_{PZB} d^3\vec{k} f(\vec{r}, \vec{k}, t) \vec{v}(\vec{k}).$$

Si on veut déterminer \vec{j}_Q , on doit utiliser l'expression thermodynamique des deux principes:

$$(59) \quad TdS = dU - \mu dN + eVdN,$$

ce qui implique que :

$$(60) \quad \vec{j}_Q(\vec{r}, t) = \frac{1}{4\pi^3} \int_{PZB} d^3\vec{k} f(\vec{r}, \vec{k}, t) [\mathcal{E}(\vec{k}) - (\mu - eV)] \vec{v}(\vec{k})$$

Réécrivons alors l'équation de Boltzmann (65) dans l'approximation du temps de collision:

$$(61) \quad \vec{v} \cdot \overrightarrow{\text{grad}}_{\vec{r}} f + \frac{d\vec{k}}{dt} \cdot \overrightarrow{\text{grad}}_{\vec{k}} f + \frac{\partial f}{\partial t} = -\frac{f - f_0}{\tau}.$$

On va alors supposer que la seule dépendance de f en t se trouve par l'intermédiaire de r et k , c'est-à-dire que $\frac{\partial f}{\partial t} = 0$.

En utilisant alors la linéarisation (57) de f , on a:

$$(62) \quad \vec{v} \cdot \overrightarrow{\text{grad}}_{\vec{r}} f_0 + \frac{d\vec{k}}{dt} \cdot \overrightarrow{\text{grad}}_{\vec{k}} f_0 + \frac{\partial f}{\partial t} = -\frac{f_1}{\tau(v)}$$

Or, d'après (56), on a:

$$(63) \quad \overrightarrow{\text{grad}}_{\vec{k}} f_0 = \frac{\partial f_0}{\partial \mathcal{E}} \overrightarrow{\text{grad}}_{\vec{k}} \mathcal{E} = \hbar \frac{\partial f_0}{\partial \mathcal{E}} \vec{v}$$

$$(64) \quad \overrightarrow{\text{grad}}_{\vec{r}} f_0 = \frac{\partial f_0}{\partial \mu} \overrightarrow{\text{grad}}_{\vec{r}} \mu(\vec{r}) + \frac{\partial f_0}{\partial T} \overrightarrow{\text{grad}}_{\vec{r}} T(\vec{r})$$

Toujours d'après (56), $\frac{\partial f}{\partial \mu} = -\frac{\partial f}{\partial \mathcal{E}}$ et par ailleurs, si l'on pose $X = \frac{\mathcal{E} - \mu}{k_B T}$, on a :

$$(65) \quad \frac{\partial f_0}{\partial T} = -\frac{\mathcal{E} - \mu}{k_B T^2} \frac{\partial f_0}{\partial X} = -\frac{\mathcal{E} - \mu}{k_B T^2} \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial X} \frac{\partial f_0}{\partial \mathcal{E}}$$

ce qui implique que:

$$(66) \quad \frac{\partial f_0}{\partial T} = -\frac{\mathcal{E} - \mu}{T} \frac{\partial f_0}{\partial \mathcal{E}}.$$

On est bien sûr toujours dans l'étude d'un système soumis à une force extérieure, et dans un cadre semi-classique, ce qui implique que $\frac{d\vec{k}}{dt} = \frac{1}{\hbar} \vec{F}$.

Toutes ces transformations permettent d'obtenir une forme assez simple de l'équation de Boltzmann:

$$(67) \quad f_1 = \tau(v) \left\{ -\vec{F} + \overrightarrow{\text{grad}}_{\vec{r}} \mu + \frac{\mathcal{E} - \mu}{T} \overrightarrow{\text{grad}}_{\vec{r}} T \right\} \cdot \frac{\partial f_0}{\partial \mathcal{E}} \vec{v}$$

Ceci nous permet de réécrire les expressions des courants \vec{j}_e et \vec{j}_Q . En effet, la contribution de f_0 à ces courants va être nulle puisque, lorsqu'il n'y a aucun gradient ni aucune force extérieure, ceux-ci doivent être nuls, et que la contribution de f_1 dans ce cas est nulle. Mathématiquement, ceci se voit à la parité de la fonction $f_0 \cdot \vec{v}$ en \vec{k} (f_0 dépend de k par l'intermédiaire de l'énergie, et est donc paire en k , et v est impaire en k).

Par ailleurs, dans l'expression du courant de flux de chaleur, on va pouvoir négliger le terme en eV , puisqu'il va être du second ordre après multiplication par f_1 (on suppose que la force extérieure est déjà du premier ordre, ceci nous ayant permis de linéariser f).

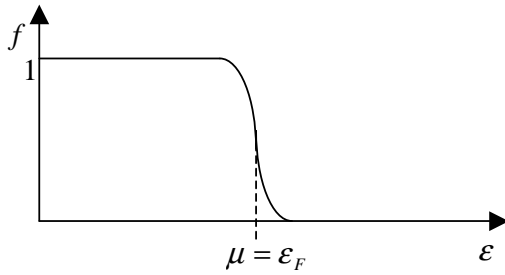
On a donc:

$$(68) \quad \vec{j}_e(\vec{r}, t) = -\frac{e}{4\pi^3} \int_{PZB} d^3\vec{k} f_1(\vec{r}, \vec{k}, t) \vec{v}(\vec{k})$$

$$(69) \quad \vec{j}_Q(\vec{r}, t) = \frac{1}{4\pi^3} \int_{PZB} d^3\vec{k} f_1(\vec{r}, \vec{k}, t) [\epsilon(\vec{k}) - \mu(\vec{r})] \vec{v}(\vec{k})$$

Remarque importante:

On a montré que $f_1 \propto \frac{\partial f_0}{\partial \epsilon}$ (67). Or si l'on trace f_0 en fonction de l'énergie, on voit que



pour $f_0(\epsilon)=1$, c'est-à-dire pour une bande pleine, on a $\frac{\partial f_0}{\partial \epsilon}=0$, et que pour $f_0(\epsilon)=0$,

c'est-à-dire pour une bande vide, on a $\frac{\partial f_0}{\partial \epsilon}=0$.

Ceci signifie clairement que les bandes complètement vides ou complètement pleines ne vont pas participer à la conduction, thermique ou électrique.

On peut par ailleurs exprimer les diverses composantes des courants considérés:

$$(70) \quad \begin{aligned} j_{e,\alpha} &= -\frac{e}{4\pi^3} \int_{PZB} d^3\vec{k} v_\alpha \sum_\beta \tau(v) \left\{ eE_\beta + \frac{\partial \mu}{\partial x_\beta} + \frac{(\epsilon - \mu)}{T} \frac{\partial T}{\partial x_\beta} \right\} \frac{\partial f_0}{\partial \epsilon} v_\beta \\ &= \sum_\beta \left\{ \frac{e^2}{4\pi^3} \left[\int_{PZB} d^3\vec{k} \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \epsilon} \right) \tau(\epsilon) v_\alpha v_\beta \right] \left(E_\beta + \frac{1}{e} \frac{\partial \mu}{\partial x_\beta} \right) \right. \\ &\quad \left. - \frac{1}{eT} \frac{e^2}{4\pi^3} \left[\int_{PZB} d^3\vec{k} \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \epsilon} \right) \tau(\epsilon) v_\alpha v_\beta (\epsilon(\vec{k}) - \mu) \right] \left(-\frac{\partial T}{\partial x_\beta} \right) \right\} \end{aligned}$$

Si on pose:

$$(71) \quad L_{\alpha\beta}^{(\nu)} = \frac{e^2}{4\pi^3} \int_{PZB} d^3\vec{k} \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \epsilon} \right) \tau(\epsilon) v_\alpha v_\beta (\epsilon(\vec{k}) - \mu)^\nu,$$

cette expression devient:

$$(72) \quad j_{e\alpha} = \sum_\beta \left\{ L_{\alpha\beta}^{(0)} \left(E_\beta + \frac{1}{e} \frac{\partial \mu}{\partial x_\beta} \right) - \frac{1}{eT} L_{\alpha\beta}^{(1)} \left(-\frac{\partial T}{\partial x_\beta} \right) \right\}.$$

On trouve de même que:

$$(73) \quad j_{Q\alpha} = \sum_{\beta} \left\{ -\frac{1}{e} L_{\alpha\beta}^{(1)} \left(E_{\beta} + \frac{1}{e} \frac{\partial \mu}{\partial x_{\beta}} \right) + \frac{1}{e^2 T} L_{\alpha\beta}^{(2)} \left(-\frac{\partial T}{\partial x_{\beta}} \right) \right\}$$

Tout le problème de détermination des propriétés de conduction du système considéré revient à la détermination des coefficients $L_{\alpha\beta}^{(\nu)}$, puisque seuls ces termes font intervenir les variables internes du système.

III.4 Electrons et trous:

Reprenons (71) de manière plus condensée:

$$(74) \quad L_{\alpha\beta}^{(\nu)} = \int_{PZB} d^3 \vec{k} \cdot \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} l_{\alpha\beta}^{(\nu)} v_{\beta}, \text{ avec}$$

$$(75) \quad l_{\alpha\beta}^{(\nu)} = -\frac{e^2}{4\pi^2} \tau(\varepsilon) v_{\alpha} \left(\varepsilon(\vec{k}) - \mu \right)^{\nu}$$

Or on a $v_{\beta} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \varepsilon}{\partial k_{\beta}}$, ainsi que $\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \frac{\partial \varepsilon}{\partial k_{\beta}} = \frac{\partial f_0}{\partial k_{\beta}}$, ce qui implique que:

$$(76) \quad L_{\alpha\beta}^{(\nu)} = \frac{1}{\hbar} \int_{PZB} d^3 \vec{k} \cdot \frac{\partial f_0}{\partial k_{\beta}} l_{\alpha\beta}^{(\nu)}$$

Si on effectue une intégration par partie, on obtient immédiatement:

$$(77) \quad L_{\alpha\beta}^{(\nu)} = \frac{1}{\hbar} \left\{ \int_{PZB} d^3 \vec{k} \frac{\partial [f_0 l_{\alpha\beta}^{(\nu)}]}{\partial k_{\beta}} - \int_{PZB} d^3 \vec{k} f_0 \frac{\partial l_{\alpha\beta}^{(\nu)}}{\partial k_{\beta}} \right\}$$

Or la fonction $f_0 l_{\alpha\beta}^{(\nu)}$ ne dépend de \vec{k} que par l'intermédiaire de ε et de v , qui sont des fonctions périodiques de \vec{k} . $f_0 l_{\alpha\beta}^{(\nu)}$ est donc périodique, et la sommation sur le premier terme est donc nulle. On a donc:

$$(78) \quad L_{\alpha\beta}^{(\nu)} = -\frac{1}{\hbar} \int_{PZB} d^3 \vec{k} f_0 \frac{\partial l_{\alpha\beta}^{(\nu)}}{\partial k_{\beta}}$$

Or f_0 représente les états peuplés dans la distribution d'équilibre local. Comme:

$$(79) \quad \int_{PZB} \frac{\partial l_{\alpha\beta}^{(\nu)}}{\partial k_{\beta}} d^3 \vec{k} = 0$$

puisque la fonction $l_{\alpha\beta}^{(\nu)}$ est périodique, on peut écrire que:

$$(80) \quad L_{\alpha\beta}^{(\nu)} = \frac{1}{\hbar} \int_{PZB} d^3 \vec{k} (1 - f_0) \frac{\partial l_{\alpha\beta}^{(\nu)}}{\partial k_{\beta}}.$$

Mais physiquement, le coefficient $1 - f_0$ représente exactement les états vides dans la distribution d'équilibre local.

Ceci permet d'introduire la notion d'électrons et de trous, et de justifier que l'on puisse indifféremment raisonner sur les électrons "réels" ou sur les trous "imaginaires".

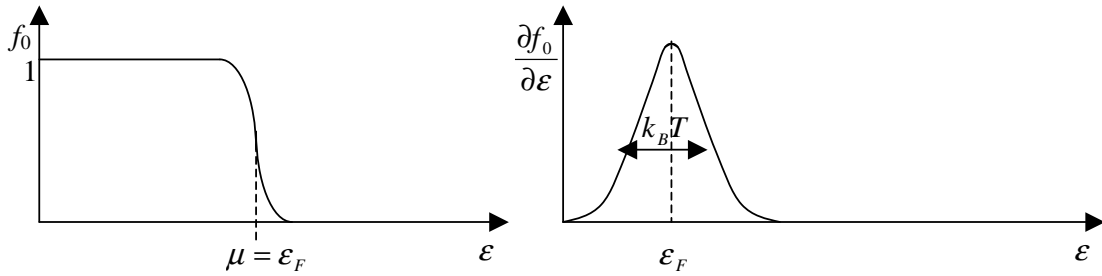
Par définition un trou est un électron manquant dans une bande, et il a les caractéristiques suivantes:

- $q_T = +e$
- $E_T = -E_{e^-}$
- $\vec{k}_T = -\vec{k}_{e^-}$
- $\vec{v}_T = \vec{v}_{e^-}$
- $m_T^* = -m_{e^-}^*$

III.5 Phénomène de conduction dans les métaux:

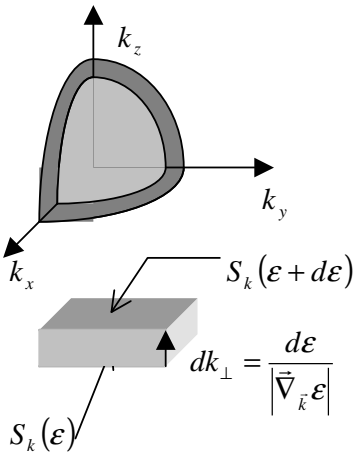
On considère ici un gaz d'électrons dégénéré, et on utilise donc la statistique de Fermi – Dirac, c'est-à-dire que la fonction de distribution de l'équilibre local va être donnée par (56)

Les coefficients $L_{\alpha\beta}^{(v)}$ définis par (71) dépendent de la fonction de distribution par l'intermédiaire de sa dérivée par rapport à l'énergie. Avant de les calculer, regardons donc l'allure de $\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon}$.



Or on a $k_B T \ll \varepsilon_F$, ce qui signifie que vis-à-vis de la densité électronique, la fonction $\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon}$ va se comporter comme une fonction δ . La conséquence physique de ce fait est que le comportement du matériau va être relié à la densité d'état à l'énergie de Fermi uniquement.

Calculons à présent ces coefficients:



Pour ce faire, on va effectuer une sommation non pas sur les vecteurs de l'espace réciproque, mais sur l'énergie, la correspondance entre les deux étant suggérée par le schéma. D'après (71):

$$\begin{aligned}
 L_{\alpha\beta}^{(v)} &= \frac{e^2}{4\pi^3} \int_{\varepsilon} d\varepsilon \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right) (\varepsilon - \mu)^v \iint_{S_k(\varepsilon)} \tau_k v_{\alpha} v_{\beta} \frac{dS_k}{|\vec{\nabla}_{\vec{k}} \varepsilon|} \\
 &= \int_{\varepsilon} d\varepsilon \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right) F_{\alpha\beta}^{(v)}(\varepsilon)
 \end{aligned}
 \tag{81}$$

avec:

$$(82) \quad F_{\alpha\beta}^{(\nu)}(\varepsilon) = (\varepsilon - \mu)^\nu g_{\alpha\beta}(\varepsilon), \text{ et}$$

$$(83) \quad g_{\alpha\beta}(\varepsilon) = \frac{e^2}{4\pi\hbar} \iint_{S_k(\varepsilon)} \tau(\vec{k}) v_\alpha v_\beta \frac{dS_k}{|\vec{v}|}$$

Etant donné les remarques faites d'après l'allure de $\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon}$, on va pouvoir développer la fonction $F_{\alpha\beta}^{(\nu)}$ autour de ε_F :

$$(84) \quad F_{\alpha\beta}^{(\nu)}(\varepsilon) = F_{\alpha\beta}^{(\nu)}(\varepsilon_F) + (\varepsilon - \varepsilon_F) \left. \frac{dF_{\alpha\beta}^{(\nu)}}{d\varepsilon} \right|_{\varepsilon=\varepsilon_F} + \frac{(\varepsilon - \varepsilon_F)^2}{2} \left. \frac{d^2 F_{\alpha\beta}^{(\nu)}}{d\varepsilon^2} \right|_{\varepsilon=\varepsilon_F}.$$

Regardons à présent la contribution des différents termes de ce développement dans l'expression de $L_{\alpha\beta}^{(\nu)}$:

—¹→ le premier terme va donner:

$$(85) \quad F_{\alpha\beta}^{(\nu)}(\varepsilon_F) \int_{\varepsilon} d\varepsilon \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right) = F_{\alpha\beta}^{(\nu)}(\varepsilon_F) \left[-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right]_0^\infty = F_{\alpha\beta}^{(\nu)}(\varepsilon_F).$$

—²→ le second terme va donner une contribution nulle puisque $\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon}$ est paire par rapport à ε_F et $(\varepsilon - \varepsilon_F)$ est quant à elle impaire.

Ceci nous permet d'écrire:

$$(86) \quad L_{\alpha\beta}^{(\nu)} = F_{\alpha\beta}^{(\nu)}(\varepsilon_F) + \frac{1}{2} F_{\alpha\beta}^{(\nu)''}(\varepsilon_F) \int_{\varepsilon} (\varepsilon - \varepsilon_F)^2 \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right)$$

Un développement d'Onsager permet de calculer le second terme, ce qui donne:

$$(87) \quad \boxed{L_{\alpha\beta}^{(\nu)} = F_{\alpha\beta}^{(\nu)}(\varepsilon_F) + \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 F_{\alpha\beta}^{(\nu)''}(\varepsilon_F)}$$

En reprenant alors l'expression (82), on obtient:

$$(88) \quad F_{\alpha\beta}^{(\nu)''}(\varepsilon) = \nu(\nu-1)(\varepsilon - \mu)^{\nu-2} g_{\alpha\beta}(\varepsilon) + 2\nu(\varepsilon - \mu)^{\nu-1} g'_{\alpha\beta}(\varepsilon) + (\varepsilon - \mu)^\nu g''_{\alpha\beta}(\varepsilon)$$

Par ailleurs, les divers courants ne dépendent des $L_{\alpha\beta}^{(\nu)}$ que pour $\nu \in \{1;2;3\}$. Ceci nous permet d'explicitier plus avant ces coefficients:

$$(89) \quad \xrightarrow{1} \nu = 0 : F_{\alpha\beta}^{(0)}(\varepsilon_F) = g_{\alpha\beta}(\varepsilon_F) \text{ et } F_{\alpha\beta}^{(0)''}(\varepsilon_F) = g''_{\alpha\beta}(\varepsilon_F)$$

$$(90) \quad \xrightarrow{2} \nu = 1 : F_{\alpha\beta}^{(1)}(\varepsilon_F) = 0 \text{ et } F_{\alpha\beta}^{(1)''}(\varepsilon_F) = 2g'_{\alpha\beta}(\varepsilon_F)$$

$$(91) \quad \xrightarrow{3} \nu = 2 : F_{\alpha\beta}^{(2)}(\varepsilon_F) = 0 \text{ et } F_{\alpha\beta}^{(2)''}(\varepsilon_F) = 2g_{\alpha\beta}(\varepsilon_F)$$

III.5.1 Application à la conduction électrique:

La composante α du courant électrique s'écrit:

$$(92) \quad j_\alpha = \sum_{\beta} \sigma_{\alpha\beta} E_\beta,$$

où les $\sigma_{\alpha\beta}$ sont les composantes du tenseur conductivité électrique.

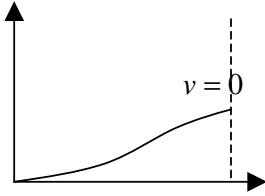
Or, d'après l'expression (72), on s'aperçoit immédiatement que, en utilisant (89):

$$(93) \quad \sigma_{\alpha\beta} = L_{\alpha\beta}^{(0)} = F_{\alpha\beta}^{(0)}(\epsilon_F) + \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 F_{\alpha\beta}^{(0)''}(\epsilon_F) \approx F_{\alpha\beta}^{(0)}(\epsilon_F) = g_{\alpha\beta}(\epsilon_F)$$

Or, d'après (83):

$$(94) \quad g_{\alpha\beta}(\epsilon_F) = \frac{e^2}{4\pi\hbar} \iint_{S_F} \tau(\vec{k}) v_\alpha v_\beta \frac{dS_k}{|\vec{v}|}, \text{ avec } S_F = S_k(\epsilon_F).$$

Ceci implique physiquement que pour que la conductivité électrique soit importante, il faut que les électrons aient des vitesses élevées sur la surface de Fermi. Or le modèle des électrons presque libres avait donné une relation de dispersion de la forme:



Il faut donc que la sphère de Fermi soit loin de la limite de la PZB. Ceci implique que les métaux alcalins, par exemples, ou les métaux nobles, vont être de bons conducteurs.

Pour aller plus loin dans le calcul de la conductivité, il faut supposer que $\tau(k) = \tau(\epsilon)$, ce qui implique que, en utilisant (93) et (94):

$$(95) \quad \sigma_{\alpha\beta} = \frac{e^2}{4\pi^3\hbar} \tau(\epsilon_F) \iint_{S_F} v_\alpha v_\beta \frac{dS_F}{|\vec{v}|}$$

Si on considère ensuite un cristal à symétrie cubique, l'isotropie nous donne directement que:

$$(96) \quad \sigma_{\alpha\beta} = \frac{e^2}{4\pi^3\hbar} \tau(\epsilon_F) \delta_{\alpha\beta} \frac{1}{3} \iint_{S_F} v dS_F$$

Si on se place enfin dans un modèle d'électrons libres (ceci étant justifié pour les bons conducteurs où la surface de Fermi est loin de la limite de la PZB), où $v = \frac{\hbar k}{m}$, on obtient que

$$(97) \quad \iint_{S_F} v dS_F = \frac{\hbar}{m} \int_0^\pi \sin \theta d\theta \int_0^{2\pi} d\phi k_F^3 = \frac{4\pi\hbar}{m} k_F^3,$$

soit

$$(98) \quad \sigma = \frac{e^2 \tau(\epsilon_F)}{m} \frac{k_F^3}{3\pi^2}$$

Or $\frac{k_F^3}{3\pi^2} = \frac{1}{V} \frac{4\pi k_F^3}{3} \frac{V}{4\pi^3} = \text{nombre d'électrons/unité de volume}$, ce qui redonne la formule classique de Drude:

$$(99) \quad \sigma = \frac{ne^2 \tau(\epsilon_F)}{m}.$$

Mais ici, τ est radicalement différent, puisqu'il ne prend en compte que les états à l'énergie de Fermi.

Numériquement, ceci donne une conductivité de l'ordre du $\mu\Omega.cm$ à température ambiante, valeur correspondant à l'ordre de grandeur des valeurs expérimentales.

Physiquement, qu'a modifié l'introduction de τ par rapport à la situation initiale qui entraînait, dans un champ électrique, des oscillations de Bloch?

Ceci se voit en utilisant l'équation de Boltzmann en champ électrique uniquement:

Comme $\vec{v} = \frac{1}{\hbar} \overrightarrow{\text{grad}}_{\vec{k}} \epsilon$, l'équation (67) en champ électrique seul se réécrit:

$$(100) \quad f_1 = \tau(v) \frac{e\vec{E}}{\hbar} \overrightarrow{\text{grad}}_{\vec{k}} \epsilon \frac{\delta f_0}{\partial \epsilon} = \tau(v) \frac{e\vec{E}}{\hbar} \overrightarrow{\text{grad}}_{\vec{k}} f_0$$

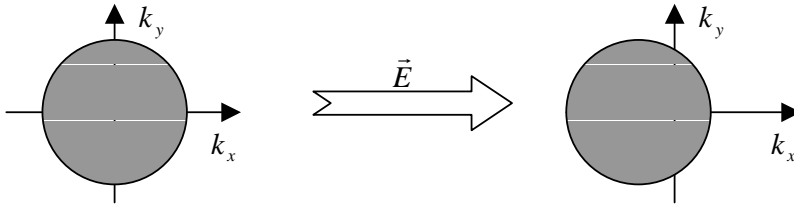
En se souvenant que la nouvelle fonction de distribution s'écrit: $f = f_0 + f_1$, on a

$$(101) \quad f = f_0 + \tau(v) \frac{e\vec{E}}{\hbar} \overrightarrow{\text{grad}}_{\vec{k}} f_0,$$

expression qui s'apparente à un développement de Taylor de f en \vec{k} . On a donc

$$f = f_0 \left(\vec{k} + \frac{e\vec{E}}{\hbar} \tau \right)$$

Graphiquement, ceci se représente par la sphère de Fermi:



La forme de la surface de Fermi reste donc la même, mais il y a plus d'électrons, dans la qui on des k_x négatifs que positifs (avec x la direction du champ électrique), ce qui induit le courant électrique.

III.5.2 Application à la conductivité thermique

On se place dans les conditions expérimentales suivantes:

- $\overrightarrow{\text{grad}} T \neq \vec{0}$
- $\vec{j}_e = \vec{0}$

Ceci implique, d'après (72), qu'il y a apparition d'un champ électrique.

On écrit la relation liant le courant de chaleur au gradient de température selon:

$$\vec{j}_Q = -[K_{\alpha\beta}] \overrightarrow{\text{grad}} T, \text{ où } [K_{\alpha\beta}] \text{ est le tenseur conductivité thermique.}$$

Il s'agit maintenant d'évaluer ce tenseur

Or, si l'on reprend l'expression de $\vec{j}_e = \vec{0}$, on obtient que:

$$(102) \quad [L^{(0)}][E_\beta] = \frac{1}{eT} [L^{(1)}] \left[\left(-\frac{\partial T}{\partial x_\beta} \right) \right],$$

où les $[L^{(\nu)}]$ sont les matrices $(L_{\alpha\beta}^{(\nu)})_{\alpha\beta}$, et $[E_\beta]$ et $\left[\left(-\frac{\partial T}{\partial x_\beta} \right) \right] = -\overrightarrow{gradT}$ sont les vecteurs de composantes $-\frac{\partial T}{\partial x_\beta}$ et E_β .

L'équation (73) devient alors:

$$(103) \quad \vec{j}_Q = \left\{ -\frac{1}{e^2 T} [L^{(1)}] [L^{(0)}]^{-1} [L^{(1)}] + \frac{1}{e^2 T} [L^{(2)}] \right\} (-\overrightarrow{gradT})$$

Or, on a les relations:

- $L_{\alpha\beta}^{(0)} = \sigma_{\alpha\beta}$
- $L_{\alpha\beta}^{(1)} = \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 2g'_{\alpha\beta}(\mathcal{E}_F)$
- $L_{\alpha\beta}^{(2)} = \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 2g_{\alpha\beta}(\mathcal{E}_F) = \frac{\pi^2}{6} k_B T^2 2\sigma_{\alpha\beta}$

ce qui donne, en introduisant les tenseurs $[\sigma]$ et $[g'(\mathcal{E}_F)]$, évidemment définis:

$$(104) \quad \vec{j}_Q = -\frac{\pi^2 k_B T}{3e^2} \left\{ [\sigma] - \frac{\pi^2}{3} (k_B T)^2 [g'(\mathcal{E}_F)] [\sigma^{-1}] [g'(\mathcal{E}_F)] \right\} \overrightarrow{gradT},$$

et donc:

$$(105) \quad \boxed{[K_{\alpha\beta}] = \frac{\pi^2 k_B^2 T}{3e^2} \left\{ [\sigma] - \frac{\pi^2}{3} (k_B T)^2 [g'(\mathcal{E}_F)] [\sigma^{-1}] [g'(\mathcal{E}_F)] \right\}}$$

Or en reprenant les résultats du modèle d'électrons libres établis au paragraphe précédent,

on a $g_{\alpha\beta}(\mathcal{E}_F) = \frac{e^2 \tau(\mathcal{E}_F)}{3\pi^2 m} k_F^3$, et donc, comme $k_F^3 = \left(\frac{2m\mathcal{E}}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}}$,

$$g'_{\alpha\beta}(\mathcal{E}_F) = \frac{e^2 \tau(\mathcal{E}_F)}{3\pi^2 m} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} \frac{3}{2} \sqrt{\mathcal{E}_F}, \text{ soit, puisque } \sigma = \frac{e^2 \tau(\mathcal{E}_F)}{m} \frac{k_F^3}{3\pi^2}, \quad g'_{\alpha\beta} = \frac{3\sigma}{2\mathcal{E}_F}. \text{ Ceci}$$

nous permet de déterminer l'ordre de grandeur du second terme dans l'expression de $K_{\alpha\beta}$:

$$(k_B T)^2 [g'(\mathcal{E}_F)] [\sigma^{-1}] [g'(\mathcal{E}_F)] \approx (k_B T)^2 \frac{\sigma}{\mathcal{E}_F} \frac{1}{\sigma} \frac{\sigma}{\mathcal{E}_F} \approx \sigma \left(\frac{k_B T}{\mathcal{E}_F} \right)^2 \ll \sigma$$

On retrouve alors la loi de Wiedemann – Franz:

$$(106) \quad \boxed{[K_{\alpha\beta}] = \frac{\pi^2}{3e^2} k_B^2 T [\sigma]}$$

Cette relation a une grande généralité à partir du moment où on ne considère que des processus élastiques. En effet, dans ce cas, les modifications de \vec{j}_Q – qui en toute généralité se font soit via l'énergie soit via le vecteur d'onde – ne se font ici que par le biais de \vec{k} , soit de la même manière que \vec{j}_e .

Cette relation est donc vérifiée même en dehors d'un modèle d'électrons libres, ou même en dehors du modèle semi – classique, à partir du moment où l'on peut négliger les processus inélastiques.

III.5.3 Effets thermoélectriques

—¹→ Effet Seebeck:

Si on impose un gradient de température sur un circuit ouvert, on observe l'apparition d'un champ électrique tel que:

$$(107) \quad \vec{E} = \frac{1}{eT} \left[L^{(0)} \right]^{-1} \left[L^{(1)} \right] \left(-\overrightarrow{gradT} \right) = [Q] \overrightarrow{gradT}$$

Or, d'après (98), pour des électrons libres:

$$(108) \quad L_{\alpha\beta}^{(0)} = g_{\alpha\beta}(\epsilon_F) = \frac{e^2 \tau(\epsilon_F)}{3\pi^2 m} \left(\frac{2m\epsilon_F}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}}$$

et

$$(109) \quad L_{\alpha\beta}^{(1)} = 2g'_{\alpha\beta}(\epsilon_F) \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2, \text{ avec } g'_{\alpha\beta}(\epsilon_F) = \frac{e^2 \tau(\epsilon_F)}{3\pi^2 m} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} \frac{3}{2} \sqrt{\epsilon_F},$$

On a donc:

$$(110) \quad Q = -\frac{1}{eT} \frac{\pi^2}{2} \frac{(k_B T)^2}{\epsilon_F} = -\frac{\pi^2 k_B^2 T}{2e\epsilon_F}, \text{ où } Q \text{ est le } \textit{coefficient Seebeck}, \text{ et vaut dans les métaux usuels environ } 2.10^{-6} V / K.$$

—²→ Effet Peltier: il s'agit de l'apparition d'un courant de chaleur lorsque l'on a un courant électrique donné et un gradient de température nul. On définit alors un *coefficient Peltier* par:

$$(111) \quad \vec{j}_Q = -\frac{1}{e} \left[L^{(1)} \right] \left[L^{(0)} \right]^{-1} \vec{j}_e = [\Pi] \vec{j}_e$$

On a alors directement que:

$$(112) \quad [\Pi] = [Q]T$$

III.6 Phénomène de conduction dans les semi – conducteurs:

Etant donné le remplissage des bandes dans les semi – conducteurs, la différence fondamentale avec les métaux est que, puisque le gap est très grand devant $k_B T$, que la densité d'énergie va "voir" la queue de $\frac{\partial f_0}{\partial \epsilon}$.

La partie de f_0 considérée va donc être $f_0 = e^{\frac{\epsilon_F - \epsilon}{k_B T}}$, ce qui implique que, dans cette zone:

$$(113) \quad -\frac{\partial f_0}{\partial \epsilon} = \frac{f_0}{k_B T}.$$

On suppose par ailleurs – ce qui rejoint une description en termes de masse effective – que puisque seule la partie extrême de la bande va intervenir:

$$(114) \quad \varepsilon_{\vec{k}} = \varepsilon_{\vec{k}_0} + \frac{\hbar^2}{2} \sum_{\alpha} \frac{(k_{\alpha} - k_{0\alpha})^2}{m_{\alpha}}.$$

On pose alors $\varepsilon_{\vec{k}_0} = 0$, ce qui revient uniquement à fixer une origine des énergies et est donc sans aucune influence sur le problème.

Il s'agit alors, comme dans les métaux, d'évaluer les coefficients $L_{\alpha\beta}^{(v)}$.

Effectuons pour cela un changement de variable $q_{\alpha} = \frac{k_{\alpha} - k_{0\alpha}}{\sqrt{m_{\alpha}}}$, ce qui donne $\varepsilon_{\vec{q}} = \frac{\hbar^2 q^2}{2}$.

On a alors $d^3 \vec{q} = \sqrt{m_1 m_2 m_3} d^3 \vec{k}$, ainsi que $v_{\alpha} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \varepsilon}{\partial k_{\alpha}} = \frac{\hbar(k_{\alpha} - k_{0\alpha})}{m_{\alpha}} = \frac{\hbar q_{\alpha}}{\sqrt{m_{\alpha}}}$.

Ceci nous amène à une nouvelle expression de $L_{\alpha\beta}^{(v)}$:

$$(115) \quad L_{\alpha\beta}^{(v)} = \frac{e^2}{4\pi^3} \iiint_{\vec{q}} \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right) \tau(\varepsilon) (\varepsilon - \mu)^v \frac{\hbar q_{\alpha}}{\sqrt{m_{\alpha}}} \frac{\hbar q_{\beta}}{\sqrt{m_{\beta}}} \sqrt{m_1 m_2 m_3} d^3 \vec{q}.$$

En coordonnées sphériques, on obtient donc:

$$(116) \quad L_{\alpha\beta}^{(v)} = \frac{e^2}{4\pi^3} \int_q \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right) \tau(\varepsilon) (\varepsilon - \mu)^v q^2 dq \int_{\theta=0}^{\pi} \int_{\varphi=0}^{2\pi} \frac{\hbar q_{\alpha}}{\sqrt{m_{\alpha}}} \frac{\hbar q_{\beta}}{\sqrt{m_{\beta}}} \sqrt{m_1 m_2 m_3} \sin \theta d\theta d\varphi$$

Les coordonnées α et β correspondent à des coordonnées cartésiennes. Examinons les différents cas:

- $q_x q_y = q^2 \sin^2 \theta \cos \varphi \sin \varphi \rightarrow 0$ par parité après sommation sur φ
- $q_x q_z = q^2 \sin \theta \cos \theta \cos \varphi \rightarrow 0$ par parité après sommation sur φ
- $q_y q_z = q^2 \sin \theta \cos \theta \sin \varphi \rightarrow 0$ par parité après sommation sur φ

On a donc forcément $\alpha = \beta$. Si on examine ces cas, on trouve que:

- $q_x^2 = q^2 \sin^2 \theta \cos^2 \varphi \rightarrow \frac{4}{3} \pi$
- $q_y^2 = q^2 \sin^2 \theta \sin^2 \varphi \rightarrow \frac{4}{3} \pi$
- $q_z^2 = q^2 \cos^2 \theta \rightarrow \frac{2}{3} 2\pi$

Ces considérations nous permettent d'écrire:

$$(117) \quad L_{\alpha\beta}^{(v)} = \frac{e^2}{3\pi^2} \int_q \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right) \frac{\hbar^2 \sqrt{m_1 m_2 m_3}}{\sqrt{m_{\alpha} m_{\beta}}} \delta_{\alpha\beta} \tau(\varepsilon) (\varepsilon - \mu)^v q^4 dq$$

On effectue alors un changement de variable en énergie, et, puisque:

- $q^4 = \frac{4\varepsilon^2}{\hbar^4}$
- $d\varepsilon = \hbar^2 q dq$, soit $dq = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\hbar}{\sqrt{2\varepsilon}} d\varepsilon$

On trouve alors:

$$(118) \quad L_{\alpha\beta}^{(v)} = \frac{e^2}{3\pi^2} \int_{\varepsilon} \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right) \frac{\hbar^2 \sqrt{m_1 m_2 m_3}}{\sqrt{m_{\alpha} m_{\beta}}} \delta_{\alpha\beta} \tau(\varepsilon) (\varepsilon - \mu)^v \frac{4\varepsilon^2}{\hbar^4} \frac{1}{\hbar} \frac{1}{\sqrt{2\varepsilon}} d\varepsilon$$

Si on écrit par ailleurs que $n(\vec{q})d^3\vec{q} = n(\vec{k})d^3\vec{k} = \frac{1}{4\pi^3}d^3\vec{k}$, on trouve que:

$$(119) \quad n(\vec{q}) = \frac{1}{4\pi^3} \frac{d^3\vec{k}}{d^3\vec{q}} = \frac{\sqrt{m_1 m_2 m_3}}{4\pi^3}.$$

En introduisant la densité d'énergie telle que $N(\varepsilon)d\varepsilon = n(q)4\pi q^2 dq$ on tire que $N(\varepsilon)d\varepsilon = n(q)4\pi \frac{2\varepsilon}{\hbar^2} \frac{1}{\hbar\sqrt{2\varepsilon}} d\varepsilon$, soit:

$$(120) \quad N(\varepsilon) = \frac{\sqrt{m_1 m_2 m_3}}{\pi^2} \frac{\sqrt{2\varepsilon}}{\hbar^3} \frac{1}{\sqrt{\varepsilon}}$$

Si on introduit cette densité d'états en énergie dans l'expression de $L_{\alpha\beta}^{(\nu)}$, on trouve:

$$(121) \quad L_{\alpha\beta}^{(\nu)} = \frac{2e^2}{3} \int_{\varepsilon} \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right) \frac{1}{\sqrt{m_\alpha m_\beta}} \delta_{\alpha\beta} \tau(\varepsilon) (\varepsilon - \mu)^\nu N(\varepsilon) \varepsilon d\varepsilon$$

Enfin si on exprime le fait que $-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} = \frac{f_0}{k_B T}$, on obtient finalement:

$$(122) \quad \boxed{L_{\alpha\beta}^{(\nu)} = \frac{2e^2}{3k_B T} \frac{\delta_{\alpha\beta}}{m_\alpha} \int_{\varepsilon} f_0 \tau(\varepsilon) (\varepsilon - \mu)^\nu N(\varepsilon) \varepsilon d\varepsilon}$$

Ceci nous permet de tirer directement l'expression de la conductivité électrique:

$$(123) \quad \sigma_{\alpha\beta} = L_{\alpha\beta}^{(0)} = \frac{2e^2}{3k_B T} \frac{\delta_{\alpha\beta}}{m_\alpha} \int_{\varepsilon} f_0 \tau(\varepsilon) N(\varepsilon) \varepsilon d\varepsilon,$$

que l'on peut écrire sous une forme habituelle:

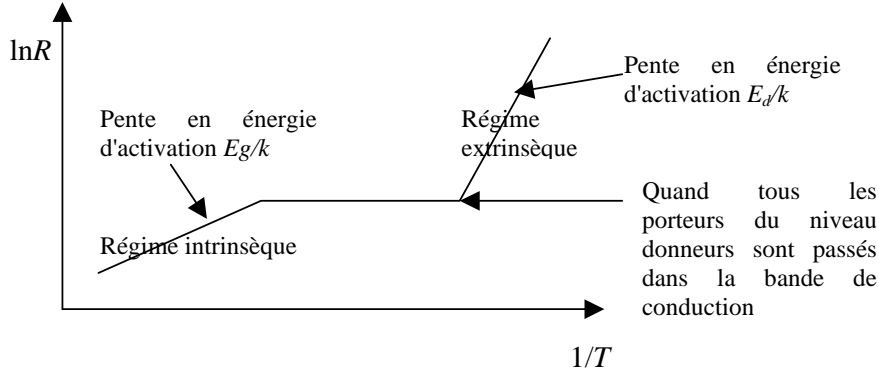
$$(124) \quad \sigma_{\alpha\beta} = \frac{n(T)e^2 \langle \tau \rangle}{m_\alpha} \delta_{\alpha\beta},$$

avec:

$$\begin{aligned} - \quad n(T) &= \int_0^\infty f_0 N(\varepsilon) \varepsilon d\varepsilon \\ - \quad \langle \tau \rangle &= \frac{1}{k_B T} \frac{\int_0^\infty f_0 \tau(\varepsilon) N(\varepsilon) \varepsilon d\varepsilon}{\int_0^\infty f_0 N(\varepsilon) \varepsilon d\varepsilon} \end{aligned}$$

Remarque: ici les variations en température de la conductivité vont être dans le terme $n(T)$, c'est-à-dire que celle-ci va varier en $e^{-\frac{1}{T}}$.

Expérimentalement, on obtient la courbe suivante:



III.7 Transport sous champ magnétique

On considère un électron dans un conducteur. En s'appuyant sur des résultats de masse effective, on a $\varepsilon(\vec{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}$

Plaçons nous dans une configuration où un champ électrique et un champ magnétique coexistent, mais où ils sont croisés.

L'équation de Boltzmann s'écrit alors, puisque les champs sont statiques et uniformes:

$$\frac{\vec{F}}{\hbar} \vec{\nabla}_{\vec{k}} f = -\frac{f_1}{\tau}, \text{ avec } f_1 = f - f_0$$

Ceci se réécrit en:

$$-\frac{f_1}{\tau} = \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \vec{v} \cdot \vec{F} - e \vec{v} \wedge \vec{B} \vec{\nabla}_{\vec{k}} f_1$$

On va alors chercher f_1 sous la forme $f_1 = \vec{v} \cdot \vec{c}(\varepsilon) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right)$. En injectant cette expression dans l'équation de Boltzmann, on obtient:

$$-\frac{\vec{v} \cdot \vec{c}(\varepsilon)}{\tau(\varepsilon)} = e \vec{E} \cdot \vec{v} - \frac{e}{m^*} \vec{c}(\vec{v} \wedge \vec{B}), \text{ soit } -\frac{\vec{c}}{\tau(\varepsilon)} = e \vec{E} - \frac{e}{m^*} \vec{B} \wedge \vec{c}$$

Introduisons la pulsation cyclotron vectoriellement, définie par $\vec{\omega}_c = \frac{e \vec{B}}{m^*}$. On a:

- $\vec{\omega}_c \cdot \vec{c} = \tau(\varepsilon) e \vec{E} \cdot \vec{\omega}_c = 0$ puisque les champs sont croisés
- $\vec{\omega}_c \wedge (\vec{\omega}_c \wedge \vec{c}) = \vec{\omega}_c \wedge e \vec{E} + \vec{\omega}_c \wedge \frac{\vec{c}}{\tau(\varepsilon)}$

Ceci nous permet de tirer que:

$$\boxed{\vec{c} = \frac{-e \tau \vec{E}}{1 + \omega_c^2 \tau^2} - \frac{e \tau^2 \vec{\omega}_c \wedge \vec{E}}{1 + \omega_c^2 \tau^2}}$$

La densité de courant électrique s'écrit alors:

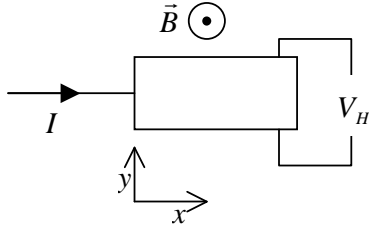
$\vec{j}_e = \frac{1}{4\pi^3} \iiint_{PZB} -e\vec{v}f_1 d^3\vec{k}$, qui mène au final à l'expression de la conductivité électrique définie par:

$$\begin{bmatrix} j_x \\ j_y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} \\ \sigma_{yx} & \sigma_{yy} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} E_x \\ E_y \end{bmatrix}, \text{ à } [\sigma] = \frac{ne^2}{m^*} \begin{bmatrix} \left\langle \frac{\tau}{1+\omega_c^2\tau^2} \right\rangle & -\left\langle \frac{\omega_c\tau^2}{1+\omega_c^2\tau^2} \right\rangle \\ \left\langle \frac{\omega_c\tau^2}{1+\omega_c^2\tau^2} \right\rangle & \left\langle \frac{\tau}{1+\omega_c^2\tau^2} \right\rangle \end{bmatrix},$$

$$\text{avec } \langle X \rangle = \frac{\int \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \epsilon} \right) \epsilon^{\frac{3}{2}} X d\epsilon}{\int \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \epsilon} \right) \epsilon^{\frac{3}{2}} d\epsilon}$$

Le résultat obtenu est donc identique à celui obtenu dans le cadre du modèle de Drude, aux valeurs moyennes près, qui font intervenir le caractère quantique du problème, via la fonction de distribution f_0 .

III.7.1 Effet Hall



On a, d'après la géométrie du système $j_y = 0$, ce qui

donne que $E_x = -\frac{\sigma_{yy}}{\sigma_{yx}} E_y$, et donc:

$$j_x = \frac{\sigma_{xy}^2 - \sigma_{xx}\sigma_{yy}}{\sigma_{xy}} E_y$$

$\xrightarrow{1}$ limite de champ magnétique fort $\omega_c\tau \gg 1$.

On obtient directement que $j_x = -\frac{ne^2}{m^*} \frac{1}{\omega_c} E_y = -\frac{ne}{B} E_y$

$\xrightarrow{2}$ limite de champ magnétique faible $\omega_c\tau \ll 1$

On obtient alors une expression moins simple:

$$j_x = -\frac{ne}{B} \frac{\langle \tau \rangle^2}{\langle \tau^2 \rangle} E_y$$

Dans le cas d'un métal, seule l'énergie de Fermi intervient, ce qui, compte tenu de l'expression des valeurs moyennes, implique $\langle \tau^2 \rangle = \langle \tau \rangle^2$. On retrouve alors l'expression de la limite champ fort.

Dans le cas d'un semi - conducteur, si on suppose que $\tau(\varepsilon) = \varepsilon^s$, on trouve que la résistance de Hall va être donnée par $R_H = -\frac{1}{ne} \frac{\Gamma\left(\frac{5}{2} + 2s\right)\Gamma\left(\frac{5}{2}\right)}{\Gamma^2\left(\frac{5}{2} + s\right)}$

III.7.2 Magnétorésistance

Selon le modèle de Drude, le tenseur résistivité est donné par:

$$[\rho] = [\sigma]^{-1} = \frac{m}{ne^2\tau} \begin{pmatrix} 1 & \omega_c \tau \\ -\omega_c \tau & 1 \end{pmatrix}$$

Ceci implique que si l'on définit la magnétorésistance telle que, si $j_y = 0$, alors $j_x = \sigma(B)E_x$, il n'y a pas de magnétorésistance dans le modèle de Drude.

Or, en fait, on a, pour $j_y = 0$ et pour $\omega_c \tau \ll 1$:

$$\begin{aligned} - \sigma_{B=0} &\propto \langle \tau \rangle \\ - \sigma_B &\propto \left\langle \frac{\tau}{1 + \omega_c^2 \tau^2} \right\rangle \sim \langle \tau \rangle - \omega_c^2 \langle \tau^3 \rangle, \end{aligned}$$

ce qui donne $\frac{\Delta\sigma}{\sigma} = -\omega_c^2 \langle \tau^3 \rangle \propto B^2$

Et pour $\omega_c \tau \gg 1$, on a:

$$\frac{\Delta\sigma}{\sigma} = \frac{\frac{\langle \tau^{-1} \rangle}{\omega_c^2} - \langle \tau \rangle}{\langle \tau \rangle} \rightarrow C^{ste} : \text{il y a une saturation de magnétorésistance.}$$

IV Ecrantage

IV.1 Constante diélectrique généralisée

Considérons un milieu isotrope et linéaire. L'électromagnétisme donne alors les équations suivantes:

$$(125) \quad \vec{D} = \epsilon_0 \epsilon_r \vec{E},$$

et les équations de Maxwell s'écrivent:

$$(126) \quad \text{div} \vec{D} = \rho^{ext} \text{ et } \text{div} \epsilon_0 \vec{E} = \rho^{ext} + \rho^{ind}, \text{ avec } \rho^{ind} = -\text{div} \vec{P}$$

Par ailleurs, on a:

$$(127) \quad \vec{E} = -\overrightarrow{\text{grad}} V \text{ et } \vec{D} = \epsilon_0 \overrightarrow{\text{grad}} V^{ext}, \text{ ce qui implique que } \frac{V^{ext}}{V} = \epsilon_r.$$

Considérons à présent un gaz d'électrons libres accompagné de n_0 charges positives.

Le potentiel extérieur s'écrit alors directement, d'après la relation donnant ϵ_r :

$$(128) \quad V^{ext}(\vec{r}) = \int d^3 \vec{r}' \epsilon(\vec{r}, \vec{r}') V(\vec{r}')$$

Or comme le milieu est homogène, on peut supposer que $\epsilon(\vec{r}, \vec{r}') = \epsilon(\vec{r} - \vec{r}')$. Une transformation de Fourier mène alors à la relation:

$$(129) \quad V^{ext}(\vec{q}) = \epsilon(\vec{q}) V(\vec{q})$$

Les relations de Maxwell énoncées ci-dessus mènent par ailleurs à:

$$(130) \quad \Delta V = \frac{\rho^{ext} + \rho^{ind}}{\epsilon_0} \text{ et } \Delta V_{ext} = \frac{\rho^{ext}}{\epsilon_0}, \text{ ce qui s'écrit en Fourier:}$$

$$(131) \quad q^2 V(\vec{q}) = \frac{\rho^{ext}(\vec{q}) + \rho^{ind}(\vec{q})}{\epsilon_0} \text{ et } q^2 V^{ext}(\vec{q}) = \frac{\rho^{ext}(\vec{q})}{\epsilon_0}$$

Ceci nous permet de tirer directement l'expression de $\epsilon_r(\vec{q})$:

$$(132) \quad \boxed{\epsilon(\vec{q}) = \frac{\rho^{ext}(\vec{q})}{\rho^{ext}(\vec{q}) + \rho^{ind}(\vec{q})} = 1 - \frac{\rho^{ind}(\vec{q})}{\epsilon_0 q^2 V(\vec{q})}}$$

IV.2 Ecrantage dans l'approximation de Thomas - Fermi

Cette approximation est une approximation semi – classique permettant de déterminer, entre autre, quel est le potentiel électrostatique effectif induit par un électron perçu par le milieu. Cette approximation est valable si le potentiel varie très lentement à l'échelle de la maille atomique, à savoir $q \ll k_F$.

La densité électronique en un point \vec{r} donné vaut:

$$(133) \quad n(\vec{r}) = \frac{1}{4\pi^3} \int \frac{d^3 \vec{k}}{e^{\frac{\epsilon(\vec{k}) - eV(\vec{r}) - \mu}{k_B T}} + 1}, \text{ avec } \epsilon(\vec{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

Par ailleurs, lorsque ce potentiel perturbateur n'est pas présent, c'est-à-dire lorsque l'on ne tient pas compte des interactions électron – électron, on a:

$$(134) \quad n_0 = \frac{1}{4\pi^3} \int \frac{d^3 \vec{k}}{e^{\frac{\varepsilon(\vec{k}) - \mu}{k_B T}} + 1}$$

On a donc:

$$(135) \quad n(\vec{r}) = n_0(\mu + eV(\vec{r})) = n_0(\mu) + eV \frac{\partial n_0}{\partial \mu}$$

Ceci implique que la densité électrique induite vaut:

$$(136) \quad \rho^{ind} = -e(n(\vec{r}) - n_0) = -e^2 V \frac{\partial n_0}{\partial \mu}$$

Et la constante diélectrique correspondante s'écrit,

$$(137) \quad \varepsilon(\vec{q}) = 1 + \frac{e^2}{\varepsilon_0 q^2} \frac{\partial n_0}{\partial \mu} = 1 + \frac{k_0^2}{q^2}, \text{ où } k_0 \text{ est le vecteur d'onde de Thomas – Fermi.}$$

Par ailleurs, si $V^{ext}(\vec{q}) = \frac{Q}{\varepsilon_0 q^2}$ (potentiel coulombien), on a

$$(138) \quad V(\vec{q}) = \frac{V^{ext}(\vec{q})}{\varepsilon(\vec{q})} = \frac{Q}{\varepsilon_0 (q^2 + k_0^2)},$$

ce qui implique que:

$$(139) \quad V(\vec{r}) = \frac{Q}{4\pi \varepsilon_0 r} e^{-k_0 r}$$

On comprend alors bien la notion d'écrantage : le potentiel créé par une charge ponctuelle n'est plus à longue portée, mais elle n'est perçue dans le milieu que sur une distance caractéristique de l'ordre de $1/k_0$.

IV.2.1 Cas des métaux:

On a, dans le cas d'un métal:

$$(140) \quad n_0 = \int \frac{d\varepsilon \cdot g(\varepsilon)}{e^{(\varepsilon - \mu)/k_B T} + 1}, \text{ avec } g(\varepsilon) = \frac{n}{\hbar \pi^2} \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}.$$

On en déduit que:

$$(141) \quad \frac{\partial n_0}{\partial \mu} = \int d\varepsilon \cdot g(\varepsilon) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right) = g(\varepsilon_F),$$

puisque la fonction $\left(\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right) \equiv \delta(\varepsilon_F)$. On en déduit la valeur du vecteur d'onde de Thomas –

Fermi:

$$(142) \quad k_0^2 = \frac{e^2 n}{\varepsilon_0 \pi^2 \hbar^2} k_F, \text{ ce qui numériquement s'écrit:}$$

$$k_0 \sim 0,815 \left(\frac{r_s}{a_0} \right)^{1/2} k_F, \text{ avec } r_s \text{ tel que } n_0 \frac{4}{3} \pi r_s^3 = 1, \text{ rayon de sphère dure de l'électron.}$$

Typiquement, une charge dans un métal est écrantée sur la distance d'une maille.

IV.2.2 Cas des semi – conducteurs:

On a dans ce cas:

$$(143) \quad \frac{\partial n_0}{\partial \mu} = \frac{n_0}{k_B T}$$

Et on aura:

$$(144) \quad k_0^2 = \frac{e^2}{\epsilon_0 \epsilon_r} \frac{n_0}{k_B T}, \text{ ce qui donne un } \lambda_0 \text{ de quelques nanomètres.}$$