



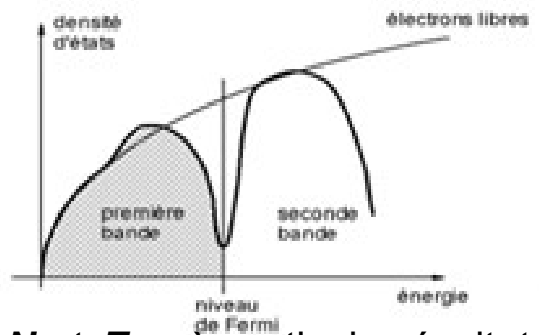
Physique des Matériaux II

Filière : SMP - Semestre : VI

***Travaux Dirigés
2023/2024***

Etude d'un cas particulier : Semi-métal Dans un semi-métal la largeur de la bande interdite est nulle et la densité d'états est représentée comme la figure ci-dessous :

Soient N le nombre total d'électrons et E_F l'énergie de Fermi à $T = 0K$.



1. Etablir l'expression de la densité d'états d'un tel cas ;
2. En superposant à la figure 1 la distribution de Fermi-Dirac à $T = 0K$, décrire la répartition des électrons entre bande de valence et bande de conduction ;
3. Calculer l'énergie interne du gaz d'électrons à $T = 0K$ en fonction de N et E_F ; à partir du résultat obtenu expliquer le caractère quantique du comportement du gaz d'électrons ;
4. On se place maintenant dans le cas d'une température finie $T \neq 0K$. Soit $\mu(T)$ le potentiel chimique à température T (dans la suite on le notera μ). On considère N_e le nombre d'électrons dans la bande de conduction. Exprimer N_e sous la forme d'une intégrale (sans la calculer) ;
5. Soit N_t le nombre de trous dans la bande de valence. Justifiez l'expression suivante :

$$N_t = 2 \int_0^{E_F} D(E) \cdot \left(1 - \frac{1}{e^{\beta(E-\mu)} + 1} \right) \quad (1) \quad \beta = \frac{1}{k_B T}$$

6. On se place désormais dans la limite de basses températures : $k_B T \ll E_F$.

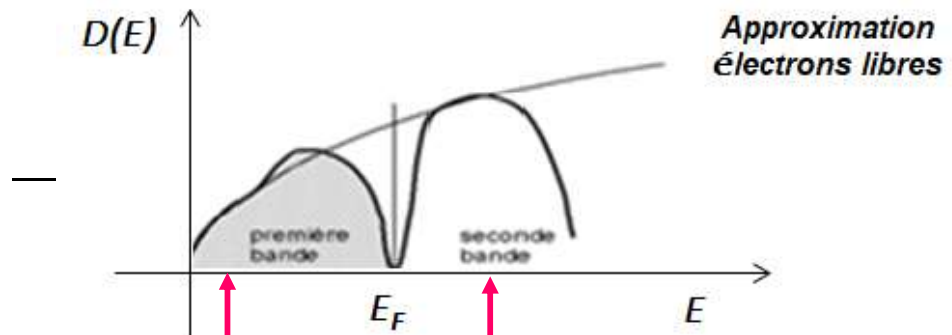
- a. Montrer qu'il est possible d'écrire l'expression (1) sous la forme ; Définir A et ξ ;
- b. Récrire l'expression donnant N_e en fonction d'une intégrale de la variable $y = -x$;
- c. Montrer que μ est indépendant de la température et donner son expression ;

$$N_t = A \cdot \left(\frac{k_B T}{E_F} \right)^{3/2} \int_0^\infty \frac{\sqrt{x}}{\xi^{-1} e^x + 1} \quad x = \beta(E_F - E)$$

d. En déduire les expressions de N_e et N_t en fonction de N , T et de la température de Fermi ; on exprimera le résultat à l'aide de l'intégrale :

$$I(\alpha) = \int_0^\infty \frac{x^\alpha}{e^x + 1} \quad I(1/2) = 0,678$$

1. Dans un semi-métal, la densité d'états est représentée dans la figure (1) :



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

Dans le cas du semi-métal : $D(E_F) = 0$

On pose $X = E - E_F$

$$D_{SM}(X) = \frac{V}{4\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} \sqrt{|X|}$$

$$D_{SM}(X) = \frac{V}{4\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} \sqrt{|E - E_F|}$$

1ère Bande $E_F > E$

2ème Bande $E_3 > E_F$

$$D_{SM}(E) = \frac{V}{4\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} \cdot \sqrt{E_F - E}$$

$$D_{SM}(E) = \frac{V}{4\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} \cdot \sqrt{E - E_F}$$

2. Répartition des électrons entre les bandes de valence et de conduction

BV = 1ère bande permise

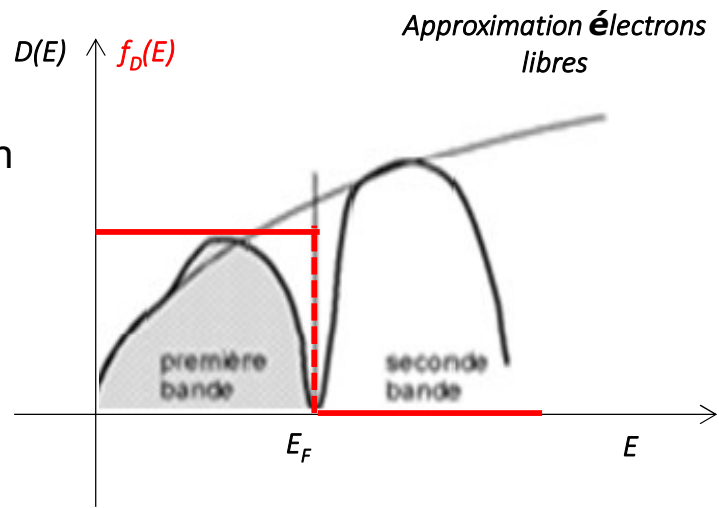
BC = 2ème bande permise

$$N_{\bar{e}} = 2 \cdot \int_0^{\infty} D_{SM}(E) \cdot f_D(E) dE$$

$$f_D(E) = \frac{1}{1 + e^{\frac{E-E_F}{kBT}}}$$

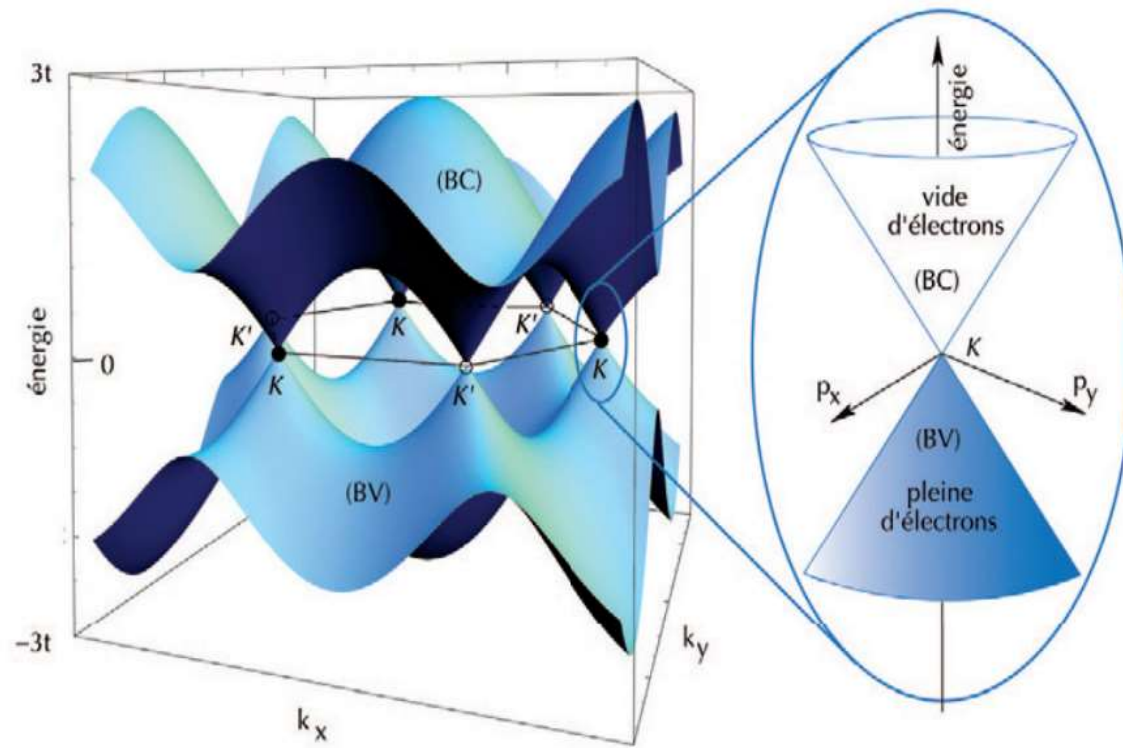
à $T=0K$ $f_D(E) = \begin{cases} 1 \\ 0 \end{cases}$

Si $E_F > E$
 $E > E_F$



La 1ère bande est totalement pleine : BV

La 2ème bande est totalement vide : BC




3. Energie interne

L'énergie interne du gaz d'électrons est donnée par l'expression $U_{\bar{e}}(T) = 2 \cdot \int_0^{\infty} E \cdot D_{SM}(E) \cdot f_D(E) dE$

à T=0K $U_{\bar{e}}(0) = 2 \cdot \int_0^{E_F} E \cdot D_{SM}(E) \cdot dE$ $U_{\bar{e}} = \frac{3}{2} N \cdot \int_0^{E_F} E \cdot \frac{\sqrt{E_F - E}}{E_F^{3/2}} \cdot dE$

$$U_{\bar{e}}(0) = \frac{3}{2} \frac{N}{E_F^{3/2}} \cdot \int_0^{E_F} E \cdot \sqrt{E_F - E} \cdot dE = \frac{3}{2} \frac{N}{E_F^{3/2}} \cdot I(E) \quad I(E) = \int_0^{E_F} E \cdot \sqrt{E_F - E} \cdot dE$$

Intégration par partie $I(E) = \frac{4}{15} E_F^{5/2}$  $U_{\bar{e}}(0) = \frac{2}{5} N E_F \neq 0$

En mécanique classique $U_{\bar{e}}(0) = 0$

Le fait que cette énergie interne (à T=0K) est non nulle confirme le caractère quantique du comportement du gaz électronique (voir modèle de Sommerfeld).

4. Concentration N_e à température finie dans la bande de conduction

$$N_e = 2 \int_{E_F}^{\infty} D_{SM}(E) \cdot f_{FD}(E) \cdot dE$$

$$N_e = \frac{3}{2} \frac{N}{E_F^{3/2}} \int_{E_F}^{\infty} \sqrt{E - E_F} \cdot \frac{1}{e^{\frac{E-\mu}{k_B T}} + 1} \cdot dE$$

$$N_e = \frac{3}{2} \frac{N}{E_F^{3/2}} \cdot I$$

$$I = \int_{E_F}^{\infty} \sqrt{E - E_F} \cdot \frac{1}{e^{\frac{E-\mu}{k_B T}} + 1} \cdot dE$$

5- Concentration N_t des trous à température finie

Chaque électron qui passe de la bande de valence à la bande de conduction, laisse un trou dans la bande de valence.

Si la probabilité de présence d'un électron dans la bande de conduction est

$$f_{FD}(E)$$

Alors la probabilité de présence des trous dans la bande de valence serait

$$(1 - f_{FD}(E))$$

$$N_t = 2 \int_0^{E_F} D_{SM}(E) \cdot (1 - f_{FD}(E)) \cdot dE$$

$$1 - f_{FD}(E) = 1 - \frac{1}{e^{\frac{E-\mu}{k_B T}} + 1} = \frac{e^{\frac{E-\mu}{k_B T}}}{e^{\frac{E-\mu}{k_B T}} + 1} = \frac{1}{e^{-\frac{E-\mu}{k_B T}} + 1}$$

$$N_t = \frac{3}{2} \frac{N}{E_F^{3/2}} \int_0^{E_F} \sqrt{E_F - E} \cdot \frac{1}{e^{-\frac{E-\mu}{k_B T}} + 1} \cdot dE$$

$$N_t = \frac{3}{2} \frac{N}{E_F^{3/2}} \int_0^{E_F} \sqrt{E_F - E} \cdot \frac{1}{e^{-\beta(E-\mu)} + 1} \cdot dE$$

$$\beta = \frac{1}{k_B T}$$

6- On travaille dans le domaine basses températures : $k_B T \ll E_F$

$$N_t = \frac{3}{2} \frac{N}{E_F^{3/2}} \int_0^{E_F} \sqrt{E_F - E} \cdot \frac{1}{e^{-\beta(E-\mu)} + 1} \cdot dE$$

a- On pose le changement de variable suivant

$$x = \beta(E_F - E) \quad dx = -\beta dE$$

$$N_t = \frac{3}{2} \frac{N}{E_F^{3/2}} \frac{1}{\beta^{3/2}} \int_{\beta E_F}^0 \sqrt{x} \cdot \frac{1}{e^{-\beta(E-E_F+E_F-\mu)} + 1} \cdot (-dx)$$

$$N_t = \frac{3}{2} N \left(\frac{k_B T}{E_F} \right)^{3/2} \int_0^{\beta E_F} \frac{\sqrt{x}}{e^x e^{-\beta(E_F-\mu)} + 1} dx$$

$$\xi = e^{\beta(E_F-\mu)} \quad A = \frac{3}{2} N$$

$$N_t = A \left(\frac{k_B T}{E_F} \right)^{3/2} \int_0^{\beta E_F} \frac{\sqrt{x}}{\xi^{-1} e^x + 1} dx$$

Aux très basses températures

$$k_B T \ll E_F \quad \frac{E_F}{k_B T} = \beta E_F \gg 1$$

$$N_t = A \left(\frac{T}{T_F} \right)^{3/2} \int_0^{\infty} \frac{\sqrt{x}}{\xi^{-1} e^x + 1} dx$$

b- On procède de la même manière en faisant le changement de variable suivant

$$y = \beta(E - E_F)$$

$$dy = \beta dE$$

$$N_e = \frac{3}{2} \frac{N}{E_F^{3/2}} \int_{E_F}^{\infty} \sqrt{E - E_F} \cdot \frac{1}{e^{\frac{E-\mu}{k_B T}} + 1} \cdot dE$$

$$N_e = \frac{3}{2} \frac{N}{E_F^{3/2}} \frac{1}{\beta^{3/2}} \int_0^{\infty} \frac{\sqrt{y}}{\xi e^y + 1} dy$$

$$N_e = A \left(\frac{T}{T_F} \right)^{3/2} \int_0^{\infty} \frac{\sqrt{y}}{\xi e^y + 1} dy$$

c- Chaque électron qui se déplace vers la bande de conduction laisse un trou dans la bande de valence

Le nombre d'électrons est égal au nombre de trous (à l'équilibre thermodynamique)

$$N_e = N_t \quad \longrightarrow \quad \int_0^{\infty} \frac{\sqrt{y}}{\xi e^y + 1} dy = \int_0^{\infty} \frac{\sqrt{x}}{\xi^{-1} e^x + 1} dx$$

Cette égalité n'est vérifiée que si

$$\xi = \xi^{-1} = 1$$

$$\mu = E_F$$

indépendant de T

d- Expressions de N_e et N_t en fonction de N, T et de la température de Fermi

$$N_e = A \left(\frac{T}{T_F} \right)^{3/2} \int_0^\infty \frac{\sqrt{y}}{e^y + 1} dy = A \left(\frac{T}{T_F} \right)^{3/2} \int_0^\infty \frac{\sqrt{x}}{e^x + 1} dx = N_t$$

$$N_e = N_t = A \left(\frac{T}{T_F} \right)^{3/2} I(1/2)$$