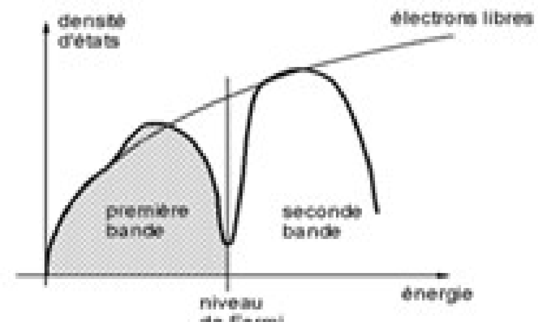
# Physique des Matériaux II

## Filière : SMP - Semestre : VI

## Travaux Dirigés
## 2024/2025

**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≠0K. Soit $\mu(T)$ le potentiel chimique à température T (dans la suite on le notera $\mu$). 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 :

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

**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 $\xi$ ;

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

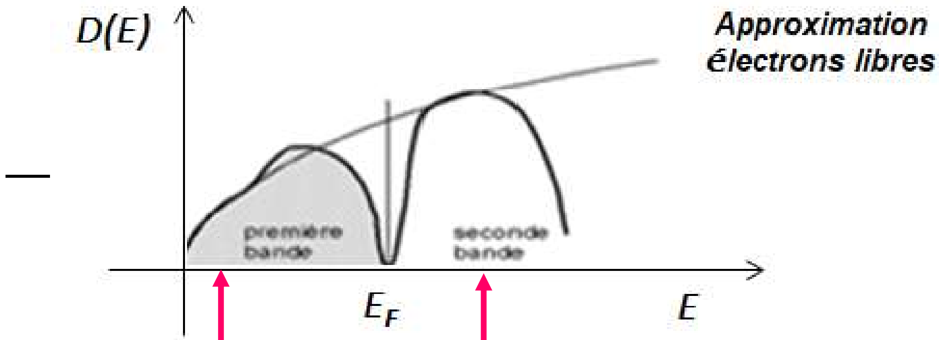
**b.** Récrire l'expression donnant $N_e$ en fonction d'une intégrale de la variable y=-x ;

**c.** Montrer que $\mu$ est indépendant de la température et donner son expression ;

**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 :

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

**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 $X = E - E_F$

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

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

$1ère\ Bande\ E_F > E$

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

$2ème\ Bande\ E > E_F$

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

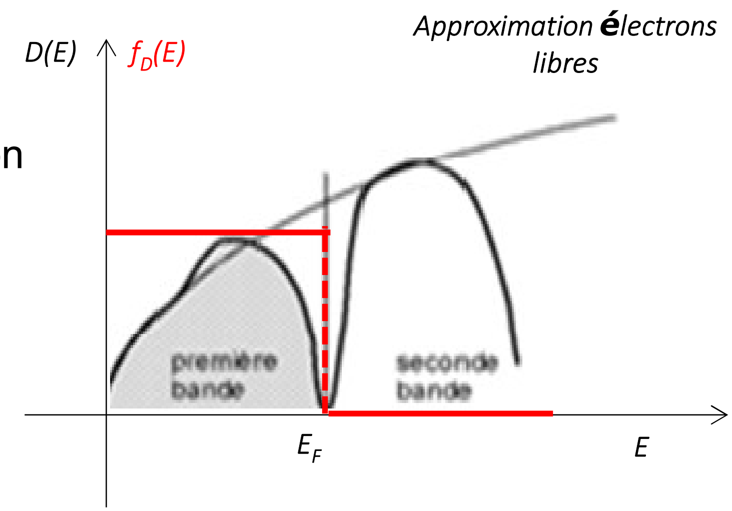
**2.** Répartition des électrons entre les bandes de valence et de conduction

BV = 1ère bande permise

BC = 2ème bande permise

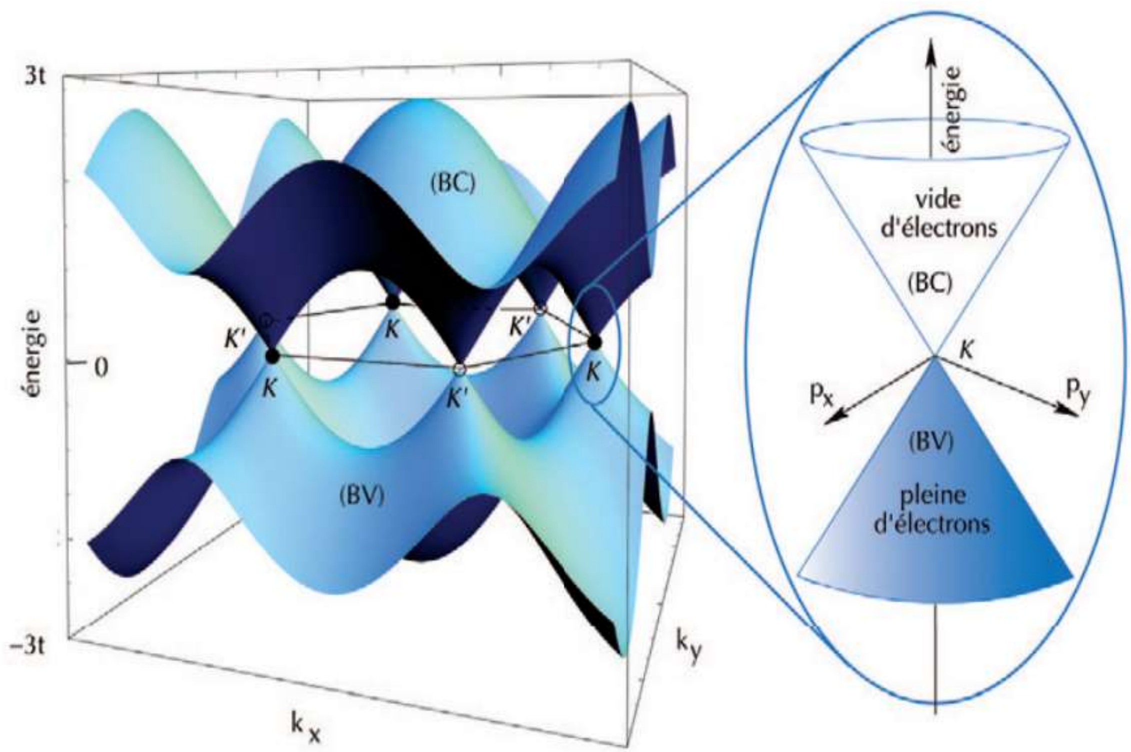
$$N_{\bar{e}} = 2.\int_0^{\infty} D_{SM}(E).f_D(E)dE \qquad f_D(E) = \frac{1}{1 + e^{\frac{E-E_F}{k_BT}}}$$

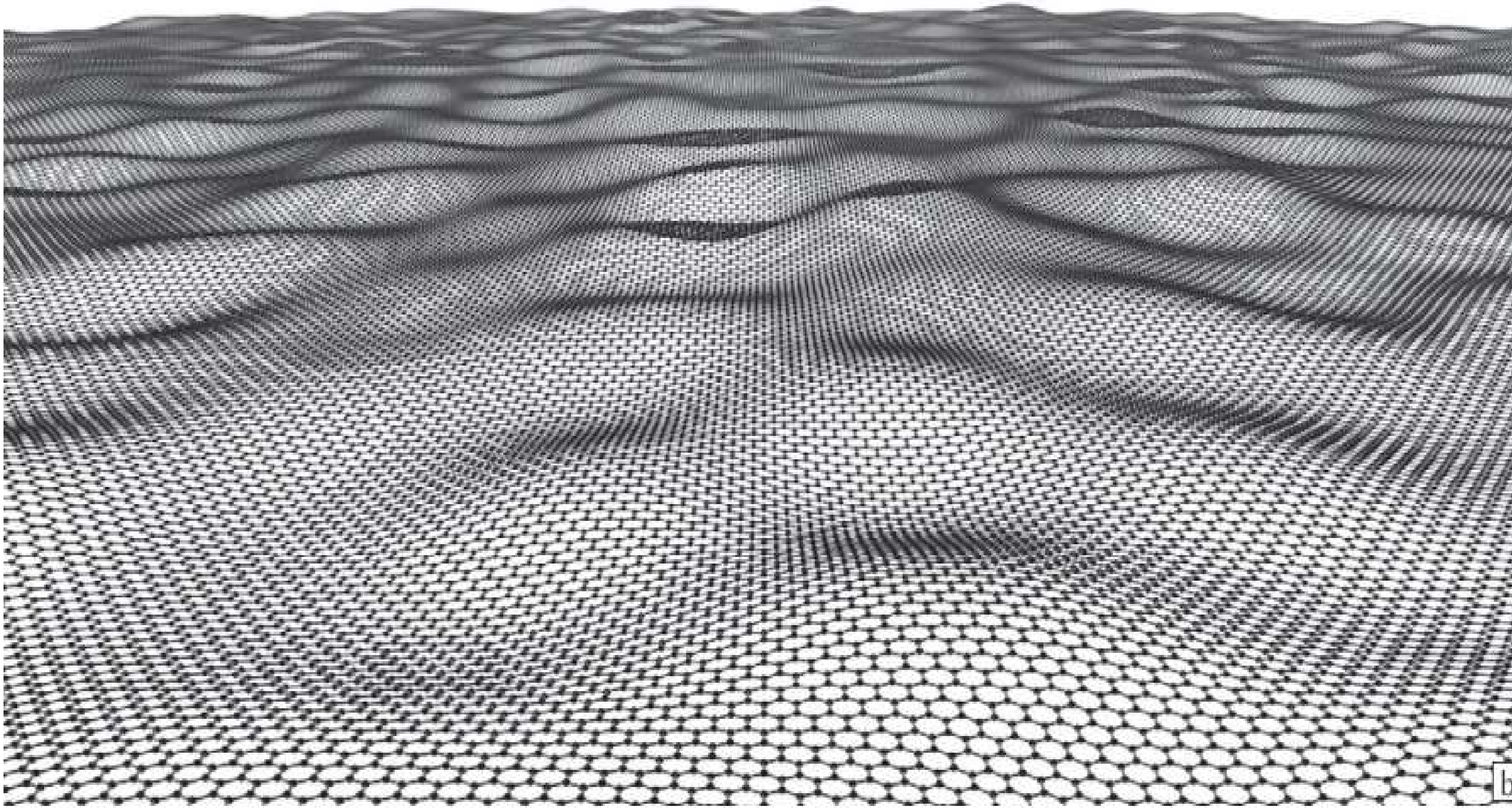
**à T=0K** $f_D(E) = \begin{cases} 1 \\ 0 \end{cases}$ **Si** $\begin{matrix} E_F > E \\ E > E_F \end{matrix}$




La 1ère bande est totalement pleine : BV

La 2ème bande est totalement vide : BC


3t
énergie
0
-3t
(BC)
(BV)
K'
K
K'
K
K'
K
$k_x$
$k_y$
énergie
vide
d'électrons
(BC)
K
$p_x$
$p_y$
(BV)
pleine
d'électrons


b

## **3.** Energie interne

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

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

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

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

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

$$N_e = 2\int_{E_F}^{\infty} D_{SM}(E).f_{FD}(E).dE \qquad N_e = \frac{3}{2}\frac{N}{{E_F}^{3/2}}\int_{E_F}^{\infty}\sqrt{E - E_F}.\frac{1}{e^{\frac{E-\mu}{k_BT}} + 1}.dE$$

$$\begin{cases} N_e = \frac{3}{2}\frac{N}{{E_F}^{3/2}}.I \\ I = \int_{E_F}^{\infty}\sqrt{E - E_F}.\frac{1}{e^{\frac{E-\mu}{k_BT}} + 1}.dE \end{cases}$$

**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

$$\left(1 - f_{FD}(E)\right)$$

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

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

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

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

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

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

**a-** On pose le changement de variable suivant

---

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

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

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

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

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

Aux très basses températures $\quad k_B T \ll E_F \qquad \frac{E_F}{k_B T} = \beta E_F \gg 1$

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

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

$$y = \beta(E - E_F) \qquad\qquad dy = \beta dE$$

---

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

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

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

**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 $\boldsymbol{N_e}$ et $\boldsymbol{N_t}$ en fonction de N, T et de la température de Fermi

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

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