



MINISTÈRE DE L'ENSEIGNEMENT SUPÉRIEUR ET DE LA RECHERCHE
SCIENTIFIQUE

UNIVERSITÉ ABDELHAMID IBN BADIS – MOSTAGANEM



Faculté des Sciences Exactes et d'Informatique

Département de Physique.

Filière : Physique.

MÉMOIRE DE FIN D'ETUDES

Pour l'Obtention du Diplôme de Master en Physique.

Option : **Physique des matériaux.**

Présenté par :

BELBEY Linda

THÈME :

**L'effet de la dilatation thermique sur certains paramètres
physiques d'un solide cristallin**

Soutenu le : Juillet 2021

Devant le jury composé de :

SENOUCI Khaled	Professeur	Université de Mostaganem	Président
ADDA BENATIA Tekkouk	MCB	Université de Mostaganem	Examineur
BOUTTOU Miloud	MAA	Université de Mostaganem	Encadrant

Année Universitaire 2020-2021

Dédicace

Je dédie ce modeste travail :

A mes chers parents Mohamed et Khadîdja

A mes Sœurs

A mon Frère : Habib

A toute ma famille et à mes amis.

A tous ceux qui m'ont aidé de loin ou de près à réaliser ce travail.

BELBEY.L

REMERCIEMENTS

Je remercie ALLAH le tout-puissant de m'avoir donné le courage, la volonté et la patience de mener à terme ce présent travail.

J'adresse mes vifs remerciements à mon Encadrant Monsieur BOUATTOU Miloud pour m'avoir constamment guidée tout le long de mon projet et pour les précieux conseils qu'il m'a donnés, pour sa serviabilité, sa disponibilité et ses conseils constructifs

Je tiens à remercier, le président de jury, le Professeur SENOUCI Khaled et l'examinateur, Monsieur ADDA BENATIA Tekkouk Maître de conférence « B » pour l'honneur qu'ils m'ont fait en acceptant de juger ce travail.

Je ne pourrais jamais oublier le soutien moral, l'aide et l'encouragement de ma famille et mon amies, en un mot merci pour leur amitié précieuses.

Enfin, je destine mes derniers remerciements tous ceux qui m'ont aidé dans ce travail

Linda

LISTES DES FIGURES

FIGURE N°	TITRE DE LA FIGURE	PAGE
FIGURE N° I-1	Densité d'états $g(E)$ d'un réseau 3 dimensions	9
FIGURE N° I-2	Chaleur spécifique C_e d'un réseau 3 dimensions en fonction de la température T	11
FIGURE N° I-3	Densité d'états cas $\vec{B} = \vec{0}$	12
FIGURE N° I-4	Niveaux d'énergie d'un électron dans une induction magnétique	13
FIGURE N° I-5	Densité d'états à 3 dimension des électrons de spin \uparrow et \downarrow quand $\vec{B} \neq \vec{0}$	13
FIGURE N° I-6	Structure de bandes (électron presque libre) et 1 ^{ère} zone de Brillouin cas unidimensionnel	17
FIGURE N° II-1	: Variation relative du volume V/V_0 avec la température T	24
FIGURE N° II-2	Variation relative de la densité électronique n/n_0 avec la température T	25
FIGURE N° II-3	Variation de l'énergie de Fermi $E_F(T)$ avec la température T	26
FIGURE N° II-4	Variation de l'énergie moyenne d'un électron libre $E_e(T)$ avec la température T	27
FIGURE N° II-5	Variation de la chaleur spécifique $C_e(T)$ d'un électron libre avec la température T	27
FIGURE N° II-6	Variation de la susceptibilité paramagnétique relative des électrons libres avec la température T	28
FIGURE N° II-7	Variation du nombre de porteurs de charge avec la température T dans un SC intrinsèque unidimensionnel	29
FIGURE N° II-8	Variation de l'énergie de Fermi avec de température T dans un SC intrinsèque unidimensionnel	30
FIGURE N° II-9	Variation relative de la densité $\Delta n/n_0$ des porteurs de charge avec la température T dans un SC intrinsèque unidimensionnel	31

SOMMAIRE

INTRODUCTION GENERALE :	1
CHAPITRE I : Modèles théoriques :	3
I- Introduction :	4
II-Du problème de ‘N’ électrons au cas mono électronique :	4
II-1- Position du problème :	4
II-2- Réduction du nombre de particules :	6
II-3- Approximation de Born-Oppenheimer :	6
III- modèle des d’électrons libres :	8
III-1- Introduction :	8
III-2- Densité d’états :	8
III-3- Energie de Fermi :	9
III-4- Energie moyenne :	10
III-5- Chaleur spécifique des électrons libres :	11
III-6- Susceptibilité paramagnétique des électrons libres :	12
IV- Modèle des électrons presque libres :	16
IV-1- Introduction:	16
IV-2- Rappel du modèle électrons presque libres :	16
IV-3- Densité d’états des électrons dans un potentiel périodique :	18
IV-4- Cas d’un semi conducteur :	19
IV-4-1- Nombre de porteurs dans un semi-conducteur intrinsèque :	20
IV-4-2- Chaleur spécifique d’un semi conducteur intrinsèque :	21
CHAPITRE II : Résultats & interprétations :	23
I- Introduction :	24
II-Cas des métaux-	24
III- Cas d’un semi-conducteur :	28
III-1- Introduction:	28
III-2- Nombre de porteurs de charges& énergie de Fermi:-	28
III-3- Densité des porteurs de charge:	30
CONCLUSION GENERALE :	32
REFERENCES & BIBIOGRAPHIQUES :	35

INTRODUCTION GENERALE

Les propriétés thermiques des solides cristallins et leur comportement avec la température, particulièrement les métaux et les semiconducteurs, ont toujours suscité l'intérêt des physiciens. Ils ont développé des modèles simples basés aussi bien sur la mécanique classique que quantique. Ces modèles ont permis d'établir des paramètres connus pour être des caractéristiques de ces matériaux et ont été confrontés aux résultats expérimentaux. Dans tous les cas, la majorité des expressions de ces paramètres a été établie à volume (longueur) constant(e) et l'hypothèse d'une dilatation thermique n'est que rarement prise en compte.

Notre travail est théorique et consiste dans le premier chapitre à reprendre les théories qui ont permis d'établir les expressions littérales de ces paramètres à volume (longueur) constant(e). En parallèle, une modélisation sera introduite en visant dans l'expression de la densité d'états d'énergie, uniquement le terme « volume » pour ensuite le substituer par son expression qui contient le coefficient de dilatation. Il est important de préciser que la densité d'états est un facteur déterminant dans le calcul des expressions littérales de ces paramètres physiques.

Le second chapitre sera consacré aux résultats et leurs interprétations. Le comportement de quelques paramètres caractéristiques d'un cristal métallique et un cristal semiconducteur dans les deux variantes, c'est-à-dire à volume (longueur) constant(e) et à pression constante, sera traité en s'appuyant sur des courbes illustrant leur évolution avec la température. Les résultats montreront que la prise en compte de l'effet de la dilatation thermique sur ces paramètres dans notre échantillon métallique apparaît sensiblement à partir d'une température qui tourne autour de 500 °K, ce qui confirme le choix de les traiter précisément à volume constant dans cette gamme de température. Au-delà de cette limite, l'écart tend sensiblement à s'accroître avec la température pour le coefficient de dilatation thermique donné. Dans le cas d'un semiconducteur, la dilatation prend sérieusement effet à partir de 600 K.

Nous terminerons ce modeste travail par une conclusion générale dans laquelle nous proposerons quelques perspectives susceptibles d'être envisagées.

CHAPITRE I

« MODELES THEORIQUES »

I- INTRODUCTION :

Dans la littérature de la physique du solide, le comportement de certains paramètres physiques dépendant de la température sont le plus souvent présentés à volume constant, c'est-à-dire sans tenir compte de la dilatation thermique.

Tout d'abord, on commence par la présentation du problème théorique connu à N électrons que l'on simplifie et ensuite montrer comment transformer l'équation de Schrödinger en une équation monoélectronique simple dans laquelle apparaissent un terme décrivant l'énergie cinétique de l'électron et un autre, le potentiel cristallin créé par les ions et les autres électrons de conduction.

La seconde partie de ce chapitre sera consacrée au modèle des électrons libres. Quelques expressions des paramètres physiques des métaux seront présentées aussi bien à volume constant que lorsqu'on prend en compte la dilatation thermique. Dans la dernière partie et pour les besoins de simplifier, on se contente du cas unidimensionnel et on effectue le même traitement sur un semiconducteur intrinsèque.

II-DU PROBLEME DE 'N' ELECTRONS AU CAS MONOELECTONIQUE

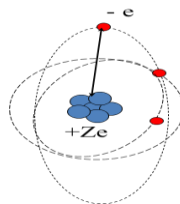
II-1- POSITION DU PROBLEME

On considère un échantillon solide constitué uniquement par des atomes d'un seul élément de nombre atomique Z_A qui contient N_e électrons de masse « m_e » et de charge « $-e$ » et N_n noyaux de masse « m_n » et de charge « $+Z_A e$ » [1][2]. Pour l'instant, on néglige l'effet du spin.

Le problème général est d'essayer de calculer toutes les propriétés des particules de cet échantillon (ions + électrons) à partir des lois de la mécanique quantique, à l'aide de l'équation de Schrödinger:

$$\hat{H}\Psi = E\Psi \quad 1$$

tel que E est l'énergie de l'état fondamental décrit par la fonction d'onde Ψ . \hat{H} est l'Hamiltonien exact de ce système (ions, électrons) :



La condition de neutralité électrique impose :

$$N_e = Z_A \times N_n \quad 2$$

Les coordonnées de l'électron i sont données par \vec{r}_{ei} , alors que celles du noyau j par \vec{r}_{nj} . Les électrons et les noyaux étant chargés, peuvent être considérés comme ponctuels et l'interaction mutuelle est donc coulombienne.

L'énergie potentielle d'interaction entre deux particules (1 électron et 1 noyau) :

$$V_{ij} = \frac{1}{4\pi\epsilon\epsilon_0} \frac{-Z_A e^2}{|\vec{r}_{ei} - \vec{r}_{nj}|} = -Z_A V_c(\vec{r}_{ei} - \vec{r}_{nj}) \quad 3$$

L'énergie potentielle totale s'écrit :

$$V_{total} = +\frac{1}{2} \sum_{j,j'} Z_A^2 V_c(\vec{r}_{nj} - \vec{r}_{nj'}) + \frac{1}{2} \sum_{i,i'} V_c(\vec{r}_{ei} - \vec{r}_{ei'}) - \sum_{i,j} Z_A V_c(\vec{r}_{ei} - \vec{r}_{nj}) \quad 4$$

Interaction
noyau–noyau

Interaction
électron–électron

Interaction
électron–noyau

L'opérateur d'énergie cinétique pour les électrons est donné par :

$$T_e = \sum_i \frac{-\hbar^2}{2m_e} \Delta_{ei} \quad 5$$

celui des noyaux par

$$T_N = \sum_j \frac{-\hbar^2}{2m_n} \Delta_{nj} \quad 6$$

Δ_{ei} : le Laplacien ne s'applique qu'aux coordonnées de l'électron i

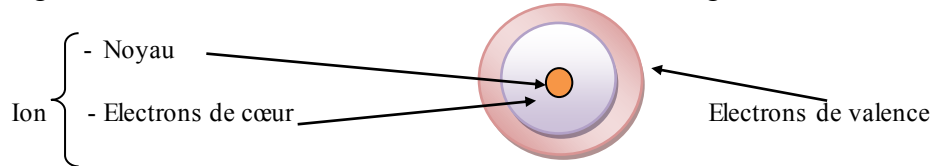
L'équation de Schrödinger devient :

$$\hat{H} = \sum_j \frac{-\hbar^2}{2m_n} \Delta_{nj} + \frac{1}{2} \sum_{j,j'} Z_A^2 V_c(\vec{r}_{nj} - \vec{r}_{nj'}) + \sum_i \frac{-\hbar^2}{2m_e} \Delta_{ei} + \frac{1}{2} \sum_{i,i'} V_c(\vec{r}_{ei} - \vec{r}_{ei'}) - \sum_{i,j} Z_A V_c(\vec{r}_{ei} - \vec{r}_{nj}) \quad 7$$

Il est plus clair qu'une solution générale à cette équation n'est pas évidente. Pour trouver une solution de l'équation de Schrödinger d'un système dont les particules se trouvent en interaction, il est indispensable de réduire ce système à un système d'une seule particule et pour cela il faut faire des approximations.

II-2- REDUCTION DU NOMBRE DE PARTICULES

La première approximation consiste à réduire le nombre de particules en changeant l'atome en ion c'est-à-dire en considérant un atome de nombre atomique Z_A dans un solide comme étant formé d'un ion de charge $+Z_{AE}$ et Z_C électrons de valence de charge $-Z_{CE}$. L'ion est formé d'un noyau de charge $+Z_{AE}$ et d'un nombre d'électrons de cœur de charge totale $-Z_e$.



La neutralité électrique exige : $Z_A = Z_C + Z_e$. Plus de 99% de la masse d'un atome se trouve dans les ions. Le potentiel d'interaction entre deux particules

$$V = ZV_{ion}(\vec{r}_{ei} - \vec{r}_j^{ion}) \quad 8$$

Au lieu d'avoir $N_n + N_e = N_n (1+Z_A)$ particules on a maintenant : N_{ion} ions de charge $+Ze$ et $Z \times N_{ion}$ électrons de charge $-e$. Ceci correspond à une réduction du nombre de particules d'un facteur 10 à 100

L'Hamiltonien devient :

$$\hat{H} = + \sum_j \frac{-\hbar^2}{2m_{ion}} \Delta_j^{ion} + \frac{1}{2} \sum_{j,j'} Z^2 V_{ion}(\vec{r}_j^{ion} - \vec{r}_{j'}^{ion}) + \sum_i \frac{-\hbar^2}{2m_e} \Delta_{ei} + \frac{1}{2} \sum_{i,i'} V_c(\vec{r}_{ei} - \vec{r}_{ei'}) - \sum_{i,j} ZV_{ion}(\vec{r}_{ei} - \vec{r}_j^{ion}) \quad 9$$

ce qui est toujours impossible de résoudre cette équation...

II-3- APPROXIMATION DE BORN-OPPENHEIMER

L'approximation de Born-Oppenheimer consiste à négliger le mouvement des ions par rapport à celui des électrons à cause de la différence des masses $m_{\text{électron}} = 9,1 \cdot 10^{-31}$ kg $m_{ion} \approx 10^{-26}$ kg et donc permet de considérer l'énergie cinétique T_N des noyaux négligeable devant celle des électrons et l'énergie potentielle noyaux – noyaux V_{N-N} devient une constante qu'on peut utiliser comme la nouvelle origine des énergies.

$$\hat{H} = \sum_j \frac{-\hbar^2}{2m_{ion}} \Delta_j^{ion} + \frac{1}{2} \sum_{j,j'} Z^2 V_{ion}(\vec{r}_j^{ion} - \vec{r}_{j'}^{ion}) + \sum_i \frac{-\hbar^2}{2m_e} \Delta_{ei} + \frac{1}{2} \sum_{i,i'} V_c(\vec{r}_{ei} - \vec{r}_{ei'}) - \sum_{i,j} ZV_{ion}(\vec{r}_{ei} - \vec{r}_j^{ion}) \quad 10$$

Le problème de la dynamique des ions est traité séparément

Pour le système des électrons, il reste donc :

$$\hat{H} = + \sum_i \frac{-\hbar^2}{2m_e} \Delta_{ei} + \frac{1}{2} \sum_{i,i'} V_c(\vec{r}_{ei} - \vec{r}_{ei'}) - \sum_{i,j} ZV_{ion}(\vec{r}_{ei} - \vec{r}_j^{ion}) \quad 11$$

et le dernier terme est le seul terme d'interaction électron - ion

Dans des solides cristallisés, les ions sont arrangés de manière périodique sur un réseau, on remplace donc $-\sum_{i,j} ZV_{ion}(\vec{r}_{ei} - \vec{r}_j^{ion})$ par $V_{périodique}$

avec
$$V_{périodique}(\vec{r}) = V_{périodique}(\vec{r} + \vec{R}) \quad 12$$

\vec{R} : un vecteur du réseau (cristallographique) direct

Il nous reste donc :

$$\hat{H} = + \sum_i \frac{-\hbar^2}{2m_e} \Delta_{ei} + \cancel{\frac{1}{2} \sum_{i,i'} V_c(\vec{r}_{ei} - \vec{r}_{ei'})} + V_{périodique} \quad 13$$

dans laquelle, on néglige souvent le terme d'interaction électron - électron et finalement on a :

$$\hat{H}_e = \sum_i \frac{-\hbar^2}{2m_e} \Delta_{ei} + V_{périodique} \quad 14$$

et l'équation de Schrödinger commence à devenir abordable

Dans l'approximation à '1' électron, l'hamiltonien devient

$$\hat{H} = \frac{-\hbar^2}{2m_e} \Delta_{ei} + V_{périodique} \quad 14$$

Le traitement d'un système à N électrons est effectué en utilisant une approximation qui consiste à décrire un état de ce système en attribuant les N électrons à N/2 orbitales différentes correspondant chacune à une solution ψ_n de l'équation de Schrödinger. En effet, cette équation représentative concerne un seul électron. Le principe d'exclusion de Pauli, oblige l'existence seulement de N/2 orbitales pour placer les N électrons. On obtient une fonction d'onde à N électrons sous forme d'un déterminant dont chaque élément représente une fonction d'onde appelée spin-orbitale qui en fait le produit d'une fonction du spin et d'une fonction dépendant des coordonnées spatiales de l'électron.

Le potentiel dans lequel se trouve un électron est supposé provenir des ions atomiques et de la contribution de tous les autres électrons de conduction.

III- MODELE DES ELECTRONS LIBRES

III-1- INTRODUCTION

L'hypothèse du modèle de Sommerfeld [1][3][4] consiste à négliger les interactions électrons-ions et électrons-électrons, c'est-à-dire prendre

$$V_{periodique} = cst = 0.$$

et permet de fournir une relation de dispersion représentant purement l'énergie cinétique des électrons libres sous la forme suivante :

$$E_k = \hbar^2 k^2 / 2m$$

m_0 , étant la masse de l'électron libre.

Pour cela, on considère un échantillon métallique de volume V_0 comportant N électrons libres. Dans cette partie, le travail sera porté sur la présentation de quelques paramètres physiques des métaux, comme l'énergie de Fermi, l'énergie moyenne, la chaleur spécifique ainsi que la susceptibilité paramagnétique des électrons libres, en tenant compte d'une part de la conservation du nombre total des électrons libres N et d'autre part la dilatation thermique caractérisée par le coefficient de dilatation volumique λ_v . Les expressions en fonction du coefficient de dilatation thermique de l'énergie de Fermi et l'énergie moyenne d'un électron libre ont déjà été mentionnées dans la littérature. Nous allons les reprendre et les illustrer par des courbes pour interpréter leur comportement avec la température. La modélisation originale que nous proposons dans ce travail, concerne la susceptibilité paramagnétique de Pauli des électrons libres. La chaleur spécifique sera développée et son expression obtenue sera comparée à d'autres résultats.

III-2- DENSITE D'ETATS:

Ce modèle fournit aussi la densité d'états $g(E)$. Celle correspond au nombre d'états ayant une énergie comprise entre E et $E+dE$. Elle apparait dans l'expression d'un grand nombre de paramètres physiques.

La densité d'états électronique à 3 dimensions $g(E)$ dans l'espace des énergies s'écrit[5]:

$$g(E) = \frac{L^3}{2\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} E^{1/2} \quad 15$$

ou encore

$$g(E) = \frac{V_0}{2\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} E^{1/2} \quad 16$$

en posant

$$A = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} \quad 17$$

elle devient

$$g(E) = AV_0 \cdot E^{1/2} \quad 18$$

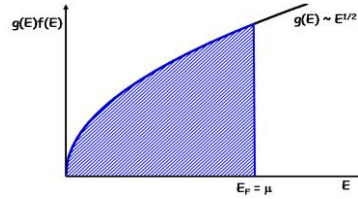


Figure I-1: Densité d'états $g(E)$ d'un réseau 3 dimensions

Dans tout ce qui va suivre, V_0 sera remplacé par $V_0(1+\lambda_V T)$ lorsqu'on traitera l'effet de la dilatation thermique où le paramètre λ_V est le coefficient de dilatation volumique.

III-3- ENERGIE DE FERMI

L'expression de l'énergie de Fermi $E_F(T=0)$ est obtenue à l'aide de la formule qui donne le nombre total N des électrons libres :

$$N = \int_0^{E_F(0)} g(E) \cdot dE = \int_0^{E_F(0)} AV_0 \cdot \sqrt{E} \cdot dE \quad 19$$

$$N = \frac{2}{3} AV_0 \cdot E_F^{3/2}(0) \quad 20$$

Finalement,

$$E_F(0) = \frac{\hbar^2}{2m} \left(3\pi^2 \frac{N}{V_0} \right)^{2/3} \quad 21$$

Pour obtenir l'expression de l'énergie de Fermi à la température T , on doit introduire la fonction de fermi-Dirac, $f(E) = (e^{(E-\mu)/k_B T} + 1)^{-1}$, qui représente la probabilité d'occupation d'un état électronique .

Le calcul de $E_F(T)$ repose sur le principe de la conservation du nombre total des électrons libres N

$$N = \int_0^{\infty} g(E) \cdot f(E) \cdot dE = \int_0^{\infty} AV_0 \cdot \sqrt{E} \cdot f(E) \cdot dE \quad 22$$

La formule (23) généralement employée en présence de la fonction de fermi-Dirac $f(E)$ permet de simplifier les développements limités.

$$\int_0^{\infty} \varphi(E) \cdot f(E) \cdot dE = \int_0^{E_F} \varphi(E) \cdot dE + \frac{(\pi k_B T)^2}{6} \varphi'(E)_{E_F} + \varepsilon T^4 \quad 23$$

L'expression de l'énergie de Fermi à volume constant est de la forme :

$$E_F(T) = E_F(0) \left[1 - \frac{\pi^2}{12} \left(\frac{T}{T_F(0)} \right)^2 \right] \quad 24$$

En tenant compte de la dilatation volumique exprimée par [6]:

$$V_0 \rightarrow V_0(1 + \lambda_v T) \quad 25$$

l'expression du nombre total N d'électrons libres s'écrit :

$$N = AV_0(1 + \lambda_v T) \int_0^{\infty} \sqrt{E} \cdot f(E) \cdot dE \quad 26$$

et en utilisant, ici aussi, le développement limité donné par la formule (23), on trouve [8]:

$$N = AV_0(1 + \lambda_v T) \left[\frac{2}{3} E_F^{3/2}(T) + \frac{(\pi k_B T)^2}{12} E_F^{-1/2}(T) \right] \quad 27$$

ou encore:

$$E_F(T) = E_F(0)(1 + \lambda_v T)^{-2/3} \left[1 - \frac{1}{12} \frac{(\pi k_B T)^2}{E_F^2(T)} \right] \quad 28$$

En prenant $E_F(T) \approx E_F(0)$ dans le terme correctif situé entre crochet et en effectuant un développement limité, l'expression finale de l'énergie de Fermi sous l'effet d'une dilatation thermique du volume, s'écrit

$$E_F(T) = E_F(0) \left(1 - \frac{2}{3} \lambda_v T \right) \left[1 - \frac{\pi^2 T^2}{12 T_F^2} \right] \quad 29$$

III-4- ENERGIE MOYENNE :

L'expression de l'énergie totale à volume constant est donnée par :

$$U_e = AV_0 \int_0^{\infty} E^{3/2} f(E) dE \quad 30$$

Ici, on utilise aussi la formule (23) et l'expression de l'énergie interne,

$$U_e = AV_0 \left[\frac{2}{3} E_F^{5/2}(T) + \frac{(\pi k_B T)^2}{4} E_F^{1/2}(T) \right] \quad 31$$

dans laquelle on injecte $E_F(T)$ en fonction de $E_F(0)$ ensuite on divise par $N = \frac{2}{3} AV_0 E_F^{3/2}(0)$, pour obtenir l'énergie moyenne d'un électron libre

$$E_e = \frac{AV_0 \int_0^{\infty} E^{3/2} f(E) dE}{AV_0 \int_0^{\infty} E^{1/2} f(E) dE} = \frac{AV_0 \int_0^{\infty} E^{3/2} f(E) dE}{N} \quad 32$$

Le résultat fournit l'énergie moyenne d'un électron dépendant de la température et qui se met sous la forme :

$$E_e(T) = \frac{3}{5} E_F(0) \left[1 + \frac{5\pi^2}{12} \left(\frac{T}{T_F(0)} \right)^2 \right] \quad 33-a$$

En tenant compte de la dilatation volumique, un calcul similaire permet d'aboutir à l'expression de l'énergie moyenne d'un électron donnée par :

$$E_e(T) = \frac{3}{5} E_F(0) (1 + \lambda_v T)^{-2/3} \left[1 + \frac{5\pi^2}{12} \left(\frac{T}{T_F} \right)^2 \right] \quad 33-b$$

III-5- CHALEUR SPECIFIQUE DES ELECTRONS LIBRES:

La chaleur spécifique correspond à la quantité d'énergie à fournir pour élever la température du solide d'un degré. Elle s'obtient à partir de l'énergie interne U_e du gaz d'électrons en dérivant cette quantité par rapport à la température T à volume constant.

La chaleur spécifique d'un électron libre $C_e(T)$ obtenue à l'aide de la formule (33-a) $C_e(T) = dE_e/dT$, prend la forme [7]:

$$C_e(T) = 4,25 \cdot 10^{-4} \frac{T}{T_F}$$

34

L'expression (34) est donnée en $\text{eVmol}^{-1} \text{K}^{-1}$. La chaleur spécifique électronique C_e varie linéairement avec la température T .

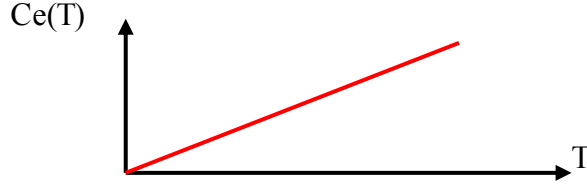


Figure I-2:: Chaleur spécifique $C(T)$ d'un réseau unidimensionnel en fonction de la température T

Dans le cas d'une dilatation thermique de volume, $V(T) = V_0(1 + \lambda T)$, l'énergie totale du gaz d'électrons libres

$$U = A V_0(1 + \lambda_V T) \int_0^\infty E^{3/2} f(E) dE \quad 35$$

sera donc,

$$U = A V_0(1 + \lambda_V T) \left[\frac{2}{5} E_F^{5/2}(T) + \frac{(\pi k_B T)^2}{4} E_F^{1/2} \right] \quad 36$$

et en injectant l'expression (28) dans (36), l'énergie moyenne d'un électron devient[8],

$$E_e(T) = \frac{3}{5} k_B T_F (1 + \lambda_V T)^{-2/3} \left[1 + \frac{5\pi^2}{12} \left(\frac{T}{T_F} \right)^2 \right] \quad 37$$

après avoir remplacé $E_F = k_B T_F$, pour l'avoir en fonction de T_F . La dérivée de (37), par rapport à la température suffit pour obtenir la chaleur spécifique. Le résultat est exprimé par (38 et 39-a) :

$$C_e(T) = 5,16 \times 10^{-5} T_F \left[-\frac{2}{3} \lambda_V (1 + \lambda_V T)^{-2/3} \left(1 + 4,11 \frac{T^2}{T_F^2} \right) + (1 + \lambda_V T)^{-2/3} \left(2 \times 4,1 \frac{T}{T_F} \right) \right] \quad 38$$

Après avoir effectué un développement limité, son expression complète devient:

$$C_e(T) = T_F \cdot 10^{-4} \left[(-0,344 \lambda_V + 0,57 \lambda_V^2 T) \left(1 + 4,11 \frac{T^2}{T_F^2} \right) + 4,25 \frac{T}{T_F} - 2,83 \lambda_V \frac{T^2}{T_F^2} \right] \quad 39-a$$

Cazaux [8] a montré qu'à pression constante, $C_e(T)$ a la forme suivante :

$$C_e(T) = T_F \cdot 10^{-4} \left[-0,344 \lambda_V + 0,57 \lambda_V^2 T + 4,25 \frac{T}{T_F} \right] \quad 39-b$$

dans laquelle les termes en T^2 ne figurent pas. Nous verrons dans le chapitre II, que les valeurs numériques du métal utilisé rendent ces termes négligeables.

III-6- SUSCEPTIBILITE PARAMAGNETIQUE DES ELECTRONS LIBRES:

Chaque électron possède un spin et le moment magnétique $\vec{\mu}$ de l'électron est opposé à son spin \vec{S}

$$\vec{\mu} = -g\mu_B\vec{S} \quad 40$$

avec $g = 2$ et

$$\mu_B = e\hbar/2m = 9,27 \cdot 10^{-24} \text{ J.T}^{-1}$$

T étant l'unité Tesla, μ_B est appelé le magnéton de Bohr.

En absence de champ magnétique, les deux directions du spin sont équivalentes (Figure I-3)

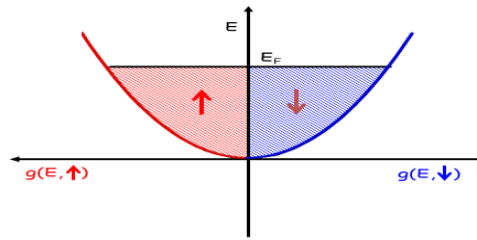


Figure I-3: Densité d'états cas $\vec{B} = \vec{0}$

Comme décrit juste ci-dessus, un milieu plongé dans un champ d'induction magnétique \vec{B} devient aimanté, engendrant ainsi une aimantation \vec{J} à partir de laquelle on peut déduire la susceptibilité magnétique χ qui est définie par le rapport:

$$\chi = \mu_0 J / B \quad 41$$

En effet, dans le champ d'induction magnétique \vec{B} , l'énergie U_m d'un électron de moment magnétique $\vec{\mu}$ est

$$U_m = -\vec{\mu} \cdot \vec{B} \quad 42$$

E_c étant l'énergie cinétique de l'électron libre, plongé dans un champ magnétique, son énergie totale devient (Figure I-4) [7] [8]:

$$E = E_c - \mu_B \cdot B \quad (\vec{\mu} \uparrow \vec{B} \uparrow) \quad 43$$

$$E = E_c + \mu_B \cdot B \quad (\vec{\mu} \downarrow \vec{B} \uparrow) \quad 44$$

Ce qui veut dire que les électrons avec un spin \uparrow parallèle à \vec{B} diminuent leur énergie de $\mu_B \cdot B$ (Figure I-5 rouge), alors que les électrons avec un spin \downarrow antiparallèle à \vec{B} augmentent leur énergie de $\mu_B \cdot B$ (Figure I-5 bleu).

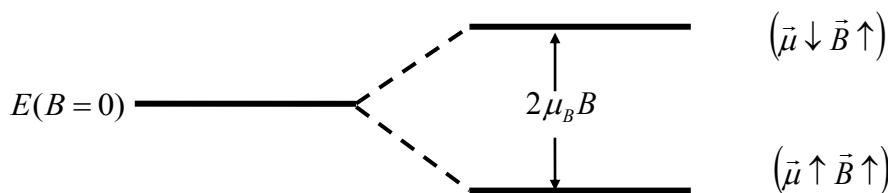


Figure I-4: Niveaux d'énergie d'un électron dans une induction magnétique \vec{B}

Lorsqu'on applique le champ magnétique, les électrons (Figure I-5-a) avec spin \downarrow changent en spin \uparrow jusqu'à l'alignement du niveau d'énergie de Fermi (Fig I-5-b) c'est-à-dire :

$$E_F \uparrow = E_F \downarrow = E_F \quad 45$$

A ce moment là, l'équilibre est donc établi.

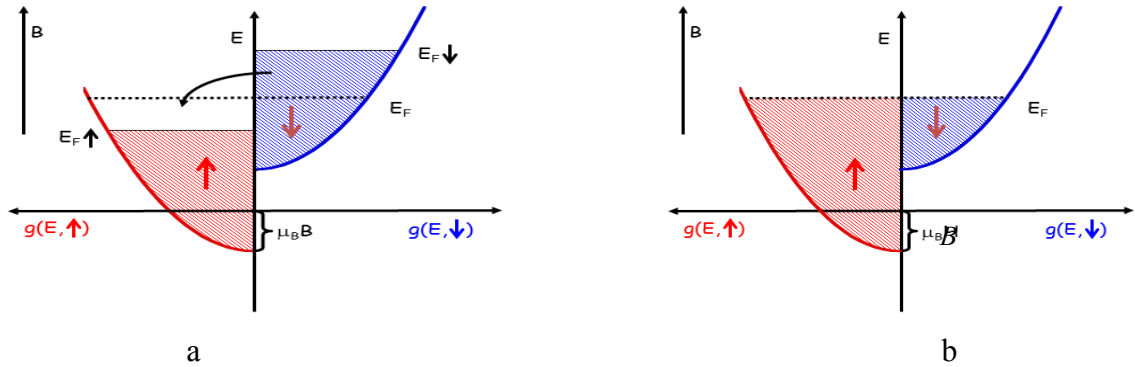


Figure I-5: Densité d'états à 3 dimensions des électrons de spin \uparrow et \downarrow quand $\vec{B} \neq \vec{0}$

La formule générale donnant le nombre d'électrons ayant un spin parallèle \uparrow à \vec{B} à une température T est [7] [8]:

$$N_{\uparrow} = \int_{-\mu_B B}^{\infty} f(E + \mu_B B) g(E + \mu_B B) dE \quad 46$$

De même, le nombre d'électrons ayant un spin antiparallèle \downarrow à \vec{B} à une température T est:

$$N_{\downarrow} = \int_{\mu_B B}^{\infty} f(E - \mu_B B) g(E - \mu_B B) dE \quad 47$$

Ici la densité d'états est prise égale à $g(E) = \frac{A}{2} V_0 E^{1/2}$, au lieu de l'expression (17) $g(E) = A V_0 E^{1/2}$, où le 2 provenait des deux orientations du spin.

On déterminera $E_F(T)$ à partir de $N = N_{\uparrow} + N_{\downarrow}$ et on portera le résultat obtenu dans $\Delta N = N_{\uparrow} - N_{\downarrow}$

L'aimantation J est exprimée par $J = \Delta N \cdot \mu_B$, et ΔN représente le nombre d'électrons ayant changé leur spin **par unité de volume**. Le volume V_0 sera pris égal à 1 quand on traitera le cas sans la dilatation, par contre il prendra la forme : $V_0 = 1 + \lambda_v T$ dans le cas où celle-ci est prise

en compte. La susceptibilité paramagnétique des électrons libres χ_e est déduite de l'expression :

$$\vec{J} = \chi \cdot \vec{H} = \chi \cdot \vec{B} / \mu_0$$

Ici, on utilisera encore une fois, la formule

$$\int_0^{\infty} \varphi(E) \cdot f(E) \cdot dE = \int_0^{E_F} \varphi(E) \cdot dE + \frac{(\pi k_B T)^2}{6} \varphi'(E)_{E_F} + \varepsilon T^4$$

utile pour un développement limité. Les expressions (46 et 47) deviennent:

$$N \uparrow = \frac{1}{3} A (E_F + \mu_B B)^{3/2} + \frac{(\pi k_B T)^2}{6} \frac{A}{4} (E_F + \mu_B B)^{-1/2} \quad 48$$

$$N \downarrow = \frac{1}{3} A (E_F - \mu_B B)^{3/2} + \frac{(\pi k_B T)^2}{6} \frac{A}{4} (E_F - \mu_B B)^{-1/2} \quad 49$$

On peut retrouver l'évolution de E_F en fonction de la température :

$$E_F(T) = E_F(0) \left[1 - \frac{1}{12} \left(\frac{\pi k_B T}{E_F(0)} \right)^2 \right] \quad 50$$

que l'on a pu déduire de :

$$N = N \uparrow + N \downarrow = \frac{2}{3} A E_F^{3/2}(T) + \frac{(\pi k_B T)^2}{12} A E_F^{-1/2}(T) \quad 51$$

sachant qu'à $T=0$ K, on a

$$N = \frac{2}{3} A E_F^{3/2}(0) \quad 52$$

L'expression de $\Delta N = N \uparrow - N \downarrow$ est donnée par

$$\Delta N = N \uparrow - N \downarrow = A \mu_B B E_F^{1/2}(T) - \frac{(\pi k_B T)^2}{24} A \mu_B B E_F^{-3/2}(T) \quad 53$$

ou encore

$$\Delta N = A \mu_B B E_F^{1/2}(0) \left[1 - \frac{\pi^2 T^2}{12 T_F^2} \right] \quad 54$$

Sachant que l'aimantation J exprimée en fonction de ΔN est donnée par $J = \Delta N \cdot \mu_B$, la susceptibilité paramagnétique des électrons χ_e est déduite de la formule $\vec{J} = \chi \cdot \vec{H} = \chi \cdot \vec{B} / \mu_0$

$$\chi_e(T) = A \mu_0 \mu_B^2 E_F^{1/2}(0) \left[1 - \frac{\pi^2}{12} \left(\frac{T}{T_F} \right)^2 \right] = \frac{3}{2} \frac{N \mu_0 \mu_B^2}{E_F} \left[1 - \frac{\pi^2}{12} \left(\frac{T}{T_F} \right)^2 \right] \quad 55$$

que l'on peut écrire sous la forme

$$\chi_e(T) = \chi_e(0) \left[1 - \frac{\pi^2}{12} \left(\frac{T}{T_F} \right)^2 \right] \quad 56$$

avec

$$\chi_e(0) = \frac{3}{2} \frac{N \mu_0 \mu_B^2}{E_F(0)} \quad 57$$

Dans le cas d'une dilatation thermique caractérisée par $V_0(1 + \lambda_v T) = 1 + \lambda_v T$, et où le volume V_0 est pris égal à l'unité, nous avons repris l'expression (53) de ΔN , à savoir :

$$\Delta N = N \uparrow - N \downarrow = A \mu_B B E_F^{1/2}(T) - \frac{(\pi k_B T)^2}{24} A \mu_B B E_F^{-3/2}(T)$$

et dans laquelle l'expression de

$$E_F(T) = E_F(0) (1 + \lambda_v T)^{-2/3} \left[1 - \frac{(\pi k_B T)^2}{12 E_F^2(0)} \right] \quad 58$$

a été injectée. Nous avons rajouté, à l'expression de A qui contient le volume, le terme $(1 + \lambda T)$ et ΔN devient donc :

$$\Delta N = A(1 + \lambda_v T) \mu_B B E_F^{1/2}(0) (1 + \lambda_v T)^{-1/3} - \frac{(\pi k_B T)^2}{24} A \mu_B B E_F^{-3/2}(T) \quad 59$$

ce qui permet d'obtenir l'expression finale de la susceptibilité paramagnétique dans le cas d'une dilatation thermique du volume :

$$\chi_e(T) = \chi_e(0) (1 + \lambda_v T)^{2/3} \left[1 - \frac{\pi^2}{12} \left(\frac{T}{T_F} \right)^2 \right] \quad 60-a$$

$$\chi_e(T) = \chi_e(0) \left(1 + \frac{2}{3} \lambda_v T \right) \left[1 - \frac{\pi^2}{12} \left(\frac{T}{T_F} \right)^2 \right] \quad 60-b$$

IV- MODELE DES ELECTRONS PRESQUE LIBRES

IV-1- INTRODUCTION

On s'intéresse au modèle dans lequel le potentiel périodique $V_{\text{périodique}}$ paru dans l'expression de l'hamiltonien (14) est différent de zéro et qui est traité comme une perturbation. Ce modèle, appelé le modèle des électrons faiblement liés est repris pour l'étude de l'effet de la dilatation thermique sur le nombre de porteurs de charges « n et p », la variation relative de leur densité, et l'énergie de Fermi d'un semiconducteur intrinsèque unidimensionnel.

On commence dans un premier temps par présenter l'essentiel de ce modèle en vue de déterminer les expressions de ces paramètres à volume constant, ensuite le modéliser en remplaçant

L_0 par $L_0(1+\lambda T) = N_0 a_0(1+\lambda T)$ nécessaire pour voir leur comportement dans le cas de la dilatation thermique.

IV-2- RAPPEL DU MODELE DES ELECTRONS PRESQUE LIBRES

Pour rappel, on considère donc une rangée d'atomes identiques équidistants de « a » disposés le long de l'axe $0x$. Les électrons de valence de chaque atome sont susceptibles de se déplacer le long de la rangée en subissant l'effet du potentiel périodique des ions. L'énergie potentielle qui en résulte est de la forme [3][7][9]:

$$U(x) = U_0 + U_1 \cos\left(\frac{2\pi}{a_0} x\right) ; \quad U_1 \ll U_0 \quad 61$$

et on prend

$$U(x) = U_1 \cos(Gx) = U_1 \cos\left(\frac{2\pi}{a_0} x\right) \quad 62$$

que l'on considère comme une perturbation d'un potentiel constant U_0 , choisi égal à zéro et U_1 suffisamment faible pour que l'on puisse résoudre l'équation de Schrödinger en procédant à des approximations successives [8].

Bloch démontra que les solutions de l'équation de Schrödinger pour un potentiel périodique ont la forme [9][10][11]:

$$\psi(x) = u_k(x) e^{ikx} \quad 63$$

telle que $u_k(x) = u_k(x+a)$

$$u_k(x) = 1 + \sum_{\substack{n=-\infty \\ n \neq 0}}^{+\infty} C_n e^{-inGx} \quad 64$$

L'équation de Schrödinger s'écrit :

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + (U_1 \cos Gx) \psi = E \psi \quad 65$$

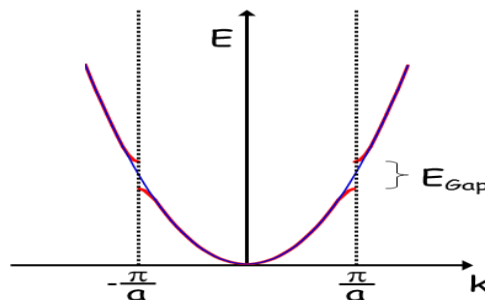


Figure I-6: Structure de bandes (électron presque libre) et 1^{ère} zone de Brillouin [12] cas unidimensionnel

Aux abords de la limite de la première zone de Brillouin $G/2$, on peut poser $k = G/2 - \Delta k$ où Δk est très petit devant $G/2$. Lorsque $\Delta k > 0$ est positif, les valeurs de k se trouvent juste en dessous de la limite de la première zone de Brillouin, par contre lorsque $\Delta k < 0$, elles sont en dessus de la limite [8].

- Cas $\Delta k > 0$, la relation de dispersion s'écrit :

$$E = E_i^0 + \frac{\hbar^2 \cdot \Delta k^2}{2m} \left(1 - \frac{4E_i^0}{U_1} \right) - \frac{U_1}{2} \quad 66$$

- Cas : $\Delta k < 0$, on a :

$$E = E_i^0 + \frac{\hbar^2}{2m} \Delta k^2 \left(1 + \frac{4E_i^0}{U_1} \right) + \frac{U_1}{2} \quad 67$$

où

$$E_i^0 = \frac{\hbar^2 G^2}{2m \cdot 4} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m a_0^2}$$

Lorsque $\Delta k = 0 \Rightarrow k = \frac{G}{2} \Rightarrow E_k^0 = E_{k-G}^0$, l'équation admet une racine double : $E = E_i^0 \pm \frac{U_1}{2}$

Quand le vecteur d'onde k s'appuie sur la 1^{ère} zone de Brillouin ($k = G/2$), l'énergie E est discontinue et l'amplitude de la discontinuité est égale à U_1 : elle représente la largeur de la bande interdite dans le modèle des électrons presque libres.

IV-3- DENSITE D'ETATS DES ELECTRONS DANS UN POTENTIEL PERIODIQUE

Dans le cas des électrons libres c'est-à-dire quand $|k| \ll G/2$, la densité d'états $g(E)$ est donnée par l'expression:

$$g(E) = \frac{L_0}{\pi} \cdot \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{1/2} E^{-1/2} \quad 68$$

alors que quand $k = \frac{G}{2} - \Delta k$, c'est-à-dire aux abords de la limite de la 1^{ère} zone de Brillouin [8], et

avec

$$\frac{d(\Delta k)}{dE} = \left(\frac{\hbar^2}{m} \Delta k \right)^{-1} \left(1 \pm \frac{4E_i^0}{U_1} \right)^{-1} \quad 69$$

plus

$$E_i^0 = \frac{\hbar^2 G^2}{2m \cdot 4} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m a_0^2}$$

on trouve,

$$\text{a)- } \Delta k > 0 \Rightarrow \frac{E_i^0}{U_1} > 1$$

$$g(E) = \frac{L_0}{\pi} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{1/2} \left(\frac{4E_i^0}{U_1} - 1 \right)^{-1/2} \left(-E + E_i^0 - \frac{U_1}{2} \right)^{-1/2} \quad E \leq E_i^0 - \frac{U_1}{2} \quad 70$$

$$\text{b)- } \Delta k < 0$$

$$g(E) = \frac{L_0}{\pi} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{1/2} \left(1 + \frac{4E_i^0}{U_1} \right)^{-1/2} \left(E - E_i^0 - \frac{U_1}{2} \right)^{-1/2} \quad E \geq E_i^0 + \frac{U_1}{2} \quad 71$$

Dans le cas des électrons libres, la relation de dispersion, s'écrit $E = \hbar^2 k^2 / 2m$ et la masse effective m^* définie par

$$\frac{1}{m^*} = \frac{1}{\hbar^2} \cdot \frac{\partial^2 E}{\partial k^2} \quad 72$$

donne $m^* = m$, (m étant la masse de l'électron libre)

On peut écrire les expressions de l'énergie

$$E = E_i^0 + \frac{\hbar^2 \cdot \Delta k^2}{2m} \left(1 - \frac{4E_i^0}{U_1} \right) - \frac{U_1}{2} \quad 73$$

$$E = E_i^0 + \frac{\hbar^2}{2m} \Delta k^2 \left(1 + \frac{4E_i^0}{U_1} \right) + \frac{U_1}{2} \quad 74$$

sous la forme

$$\zeta^+ = E^+ - E_i^+ = \frac{\hbar^2 \cdot \Delta k^2}{2m^*} \quad 75$$

$$\zeta^- = E^- - E_i^- = \frac{\hbar^2 \cdot \Delta k^2}{2m^*} \quad 76$$

où $E_i^- = E_i^0 + \frac{U_1}{2}$ et $E_i^+ = E_i^0 - \frac{U_1}{2}$

$$\frac{1}{m^*} = \frac{1}{m} \left(1 - \frac{4E_i^0}{U_1} \right) \quad \text{pour } \Delta k \geq 0 \quad 77$$

$$\frac{1}{m^*} = \frac{1}{m} \left(1 + \frac{4E_i^0}{U_1} \right) \quad \text{pour } \Delta k \leq 0 \quad 78$$

IV-4- CAS D'UN SEMICONDUCTEUR

On considère que le réseau comprend deux électrons par motif c'est-à-dire un corps divalent. A une température non nulle, certains de ces électrons vont migrer vers la bande supérieure (bande conduction) laissant des trous dans la bande inférieure (bande valence).

En prenant le sommet de la bande de valence comme nouvelle origine des énergies, et en utilisant les densités d'états (70 et 71) établies précédemment, le nombre d'électrons et de trous p se déplaçant sur longueur L_0 dans $g(E)$ à une température T , s'écrit

$$N_0 = \int_{U_1}^{\infty} g_e(E) f_e(E) dE = \frac{L_0}{\pi} \left(\frac{2m_e^*}{\hbar^2} \right)^{1/2} \int_{U_1}^{\infty} \left(e^{\frac{E-E_F}{k_B T}} + 1 \right)^{-1} (E - U_1)^{-1/2} dE \quad 79$$

$$P_0 = \int_{-\infty}^0 g_t(E) f_t(E) dE = \frac{L_0}{\pi} \left(\frac{2m_t^*}{\hbar^2} \right)^{1/2} \int_{-\infty}^0 \left(e^{\frac{E-E_F}{k_B T}} + 1 \right)^{-1} (-E)^{-1/2} dE \quad 80$$

Pour avoir une expression simple facile à intégrer (formule 82), on suppose que les bandes sont semi-infinies et que E_F est situé dans la bande interdite, ce qui permet d'assimiler la distribution de Fermi à une distribution de Boltzmann, c'est-à-dire lorsque [4][8]:

$$\frac{U_1 - E_F}{K_B T} \gg 1 \quad 81$$

Dans ce cas le nombre d'électrons dans la bande de conduction est :

$$N_0 = \frac{L_0}{\pi} \left(\frac{2m_e^*}{\hbar^2} \right)^{1/2} \cdot e^{\frac{E_F - U_1}{k_B T}} \cdot \int_0^{\infty} x^{-1/2} \cdot e^{-\frac{x}{k_B T}} dx \quad 82$$

soit avec: $\int_0^{\infty} x^{-1/2} \cdot e^{-\eta x} dx = (\pi/\eta)^{1/2}$

$$N_0 = L_0 \left(\frac{2m_e^* \cdot k_B T}{\hbar^2 \pi} \right)^{1/2} \cdot e^{\frac{E_F - U_1}{k_B T}} \quad 83-a$$

et
$$P_0 = L_0 \left(\frac{2m_t^* \cdot k_B T}{\hbar^2 \pi} \right)^{1/2} \cdot e^{-E_F/k_B T} \quad 83-b$$

d'où
$$N_0 \cdot P_0 = L_0^2 \frac{2k_B T}{\hbar^2 \pi} (m_t^* \cdot m_e^*)^{1/2} e^{-U_1/k_B T} \quad 84$$

IV-4-1- NOMBRE DE PORTEURS DE CHARGE DANS UN SEMICONDUCTEUR INTRINSEQUE

Si on considère en plus un semi-conducteur intrinsèque :

$$N_0 = P_0 = L_0 \left(\frac{2k_B T}{\hbar^2 \pi} \right)^{1/2} \cdot (m_i^* \cdot m_e^*)^{1/4} e^{-U_1/2k_B T} \quad 85$$

l'énergie de Fermi en fonction de la température T devient

$$E_F(T) = \frac{U_1}{2} + \frac{k_B T}{4} \text{Log}(m_i^* / m_e^*) \quad 86$$

et les nombres N_0 et P_0 de porteurs de charges intrinsèques ont la forme [8]

$$N_0 = P_0 = \alpha \cdot L_0 \cdot T^{1/2} \cdot e^{-\beta/T} \quad 87$$

avec

$$\alpha = \left(\frac{2k_B}{\hbar^2 \pi} \right)^{1/2} \cdot (m_i^* \cdot m_e^*)^{1/4} \quad \beta = \frac{U_1}{2k_B} \quad 88$$

Dans le cas de la dilatation thermique, nous avons remplacé la longueur L_0 dans les expressions (70 et 71) de la densité d'états par $L_0(1+\lambda T)$ dans laquelle le paramètre λ représente le coefficient de dilatation linéaire.

On suppose que l'amplitude du potentiel cristallin U_1 n'est pas affectée par la dilatation thermique. Les deux expressions de la densité d'états s'écrivent donc :

$$g(E) = \frac{L_0(1+\lambda T)}{\pi} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{1/2} \left(\frac{4}{U_1(1+\lambda T)^2} - 1 \right)^{-1/2} \left(-E + \frac{E_i^0}{(1+\lambda T)^2} - \frac{U_1}{2} \right)^{-1/2} \quad E \leq E_i^0 - \frac{U_1}{2} \quad 89$$

$$g(E) = \frac{L_0(1+\lambda T)}{\pi} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{1/2} \left(\frac{4}{U_1(1+\lambda T)^2} + 1 \right)^{-1/2} \left(E - \frac{E_i^0}{(1+\lambda T)^2} - \frac{U_1}{2} \right)^{-1/2} \quad E \geq E_i^0 + \frac{U_1}{2} \quad 90$$

Dans l'expression de l'énergie E_i^0 , le paramètre a_0 est remplacé par $a_0(1+\lambda T)$:

$$E_i^0 \rightarrow E_i^0 = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\pi^2}{a_0^2(1+\lambda T)^2}$$

et les masses effectives vont cette fois-ci dépendre de la température T :

$$\frac{1}{m_i^*} = \frac{1}{m} \left(1 - \frac{4E_i^0}{U_1(1+\lambda T)^2} \right) \quad \text{pour } \Delta k \geq 0 \quad 91$$

$$\frac{1}{m_e^*} = \frac{1}{m} \left(1 + \frac{4E_i^0}{U_1(1+\lambda T)^2} \right) \quad \text{pour } \Delta k \leq 0 \quad 92$$

Dans le cas d'un semi-conducteur intrinsèque, lorsque la longueur L_0 se dilate et devient $L_0(1+\lambda T)$, l'expression du nombre d'électrons et de trous à une température T, qui varie cette fois ci en fonction de la température et du coefficient de dilatation, ont la forme suivante :

$$N = P = \left(\frac{2k_B m_0 T}{\hbar^2 \pi} \right)^{1/2} L_0(1+\lambda T) \cdot \left(16 \left(\frac{E_i^0}{U_1} \right)^2 (1+\lambda T)^{-4} - 1 \right)^{-1/4} e^{-U_1/2k_B T} \quad 93$$

Les valeurs qui seront prises E_i^0 et U_1 permettent de négliger le « 1 » devant le rapport $16\left(\frac{E_i^0}{U_1}\right)^2(1 + \lambda T)^{-4}$. Les expressions originales de N et P deviennent :

$$N = P = \alpha T^{1/2} L_0 (1 + \lambda T)^2 \cdot e^{-\beta/T} \quad 93$$

avec $\beta = U_1/2k_B$ et $\alpha = \left(\frac{2k_B m_0}{\hbar^2 \pi}\right)^{1/2} \left(\frac{4E_i^0}{U_1}\right)^{-1/2}$

Pour l'énergie de Fermi en fonction de la température

$$E_F(T) = \frac{U_1}{2} + \frac{k_B T}{4} \text{Log}(m_i^*/m_e^*)$$

nous avons procédé de la même manière pour déterminer son expression dans le cas d'une dilatation thermique :

$$E_F(T) = \frac{U_1}{2} + \frac{k_B T}{4} \text{Log}\left[\frac{\left(\frac{4}{U_1(1+\lambda T)^2} + 1\right)}{\left(\frac{4}{U_1(1+\lambda T)^2} - 1\right)}\right] \quad 94$$

IV-4-2- DENSITE DES PORTEURS DE CHARGE

La densité des porteurs de charge à longueur constante s'écrit

$$n_0 = \frac{N_0}{L_0} = \alpha T^{1/2} e^{-\beta/T} \quad 95$$

Si la dilatation thermique est prise en compte avec une longueur $L \rightarrow L_0(1 + \lambda T)$, elle prend la forme :

$$n = \frac{N}{L} = \frac{P}{L} = \alpha T^{1/2} (1 + \lambda T) \cdot e^{-\beta/T} \quad 96$$

La densité subit donc une variation relative sous la forme :

$$\frac{\Delta n}{n_0} = \frac{n - n_0}{n_0} = \lambda T \quad 97$$

CHAPITRE II

RESULTATS & INTERPRETATIONS

I- INTRODUCTION

La dernière partie de ce travail est consacrée aux résultats et leurs interprétations dans les deux cas : à volume (longueur) constant(e) et à pression constante.

Dans un premier temps, l'évolution avec la température de certains paramètres physiques d'un cristal métallique tels que l'énergie de Fermi, l'énergie moyenne, la chaleur spécifique et la susceptibilité magnétique des électrons libres sera présentée. Leur comportement sera interprété aussi.

Dans le cas d'un semiconducteur intrinsèque unidimensionnel, l'étude sera faite sur des paramètres tels que le nombre de porteurs de charges intrinsèques (N ou P), la variation relative de leur densité et l'énergie de Fermi.

Il faut rajouter que le choix des valeurs du coefficient de dilatation thermique est pris sans tenir compte de la nature du cristal. Les courbes tracées correspondent à des résultats théoriques et la gamme de température utilisée est supposée être inférieure à la température de fusion.

II-CAS DES METAUX

L'étude théorique a été faite sur un cristal métallique à trois dimensions ayant une énergie de Fermi $E_F(0)=2$ eV (ou une température de Fermi $T_F=23220^\circ\text{K}$). L'objectif consiste à traiter l'effet de la dilatation thermique du volume sur les paramètres caractéristiques cités précédemment.

La figure II-1 représente la variation relative du volume V/V_0 avec la température pour un coefficient de dilatation thermique $\lambda_V=10^{-4} \text{ K}^{-1}$.

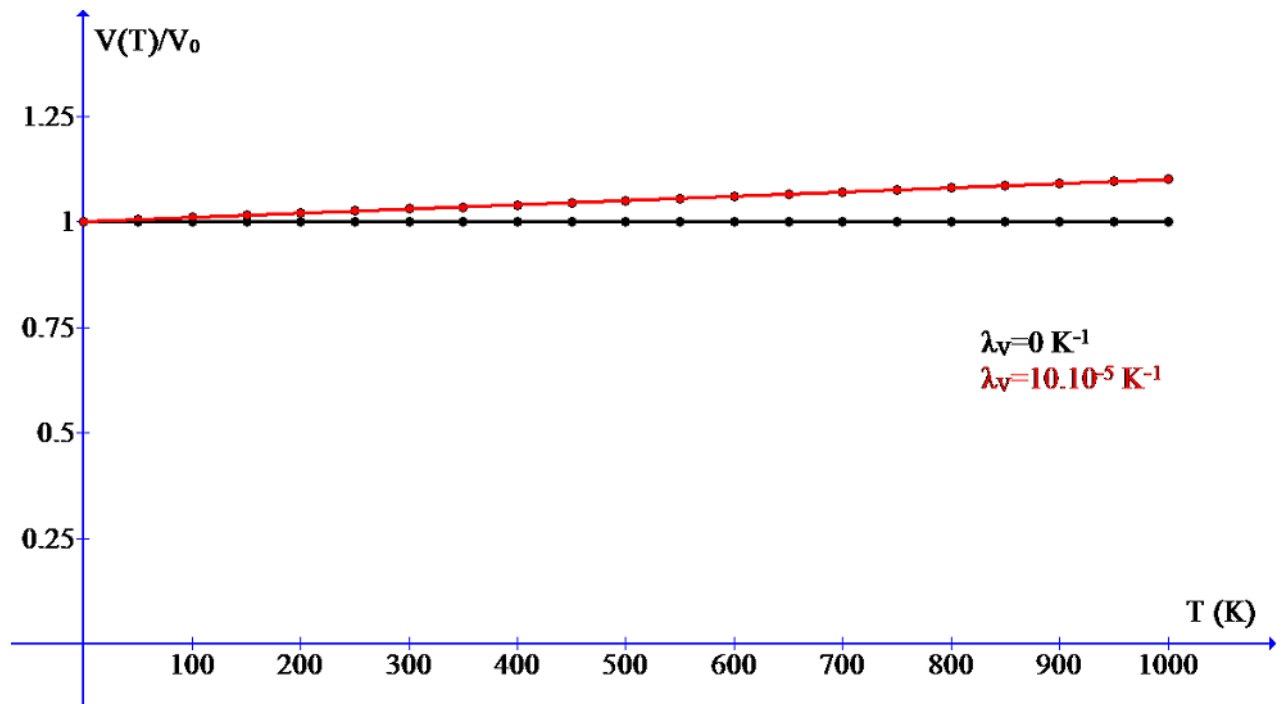


Figure II-1: Variation relative du volume V/V_0 avec la température T

Elle montre que le volume varie linéairement avec la température et subit un accroissement relatif de $\lambda_v T$. L'influence de la dilatation thermique dépend de l'ordre de grandeur de son coefficient et de la température. Pour un coefficient de dilatation $\lambda_v = 10 \cdot 10^{-5} K^{-1}$, la dilatation thermique provoque une augmentation relative de 5 % à 500 °K et que l'écart tend à s'élargir lorsque la température croît.

La figure II-2 représente la densité des électrons libres $n = N/V$ qui s'écrit $n = \frac{N}{V_0(1 + \lambda_v T)} = n_0(1 - \lambda_v T)$. On note que dans tout ce qui va suivre, V_0 sera pris égal à l'unité.

Par rapport au volume, seule différence remarquable qu'on peut constater est que la densité électronique subit quant à elle et dans les mêmes proportions que le volume, une diminution de 5% à la même température, puisque le nombre total N des électrons libres est pris comme constant et ne peut être donc affecté par la température.

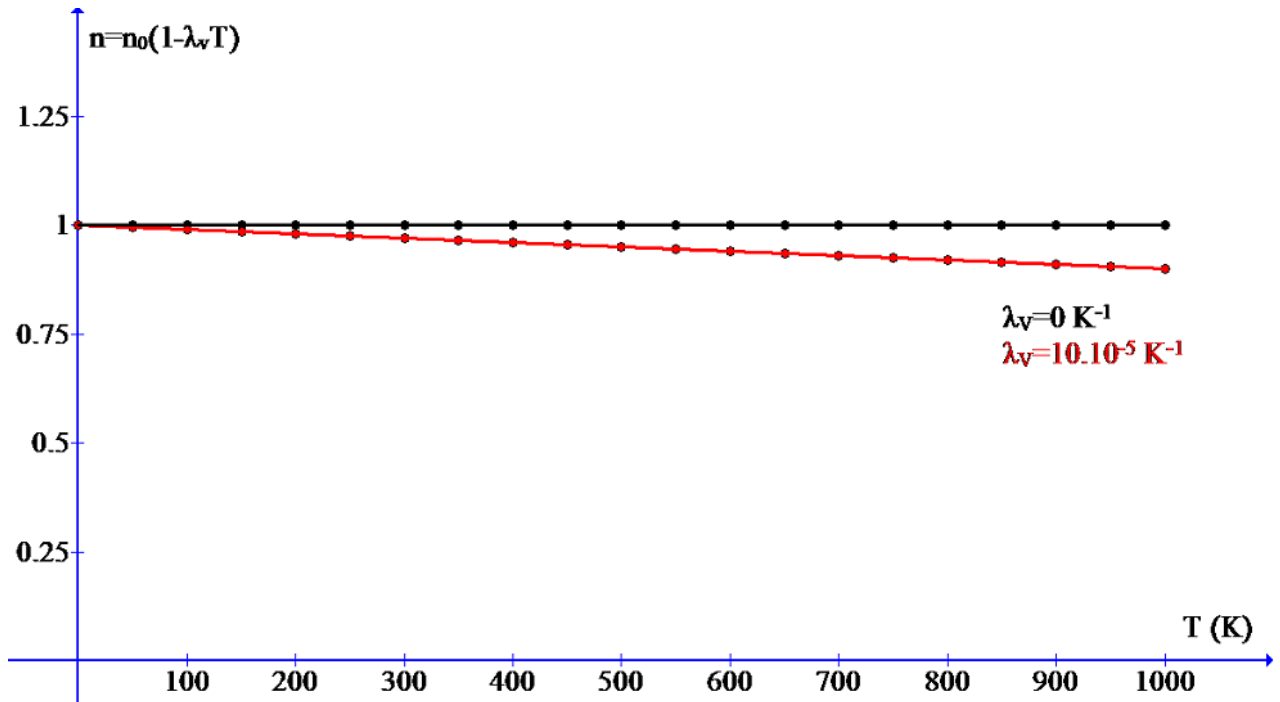


Figure II-2: Variation relative de la densité électronique n/n_0 avec la température T

L'étude de l'énergie de Fermi exprimée par :

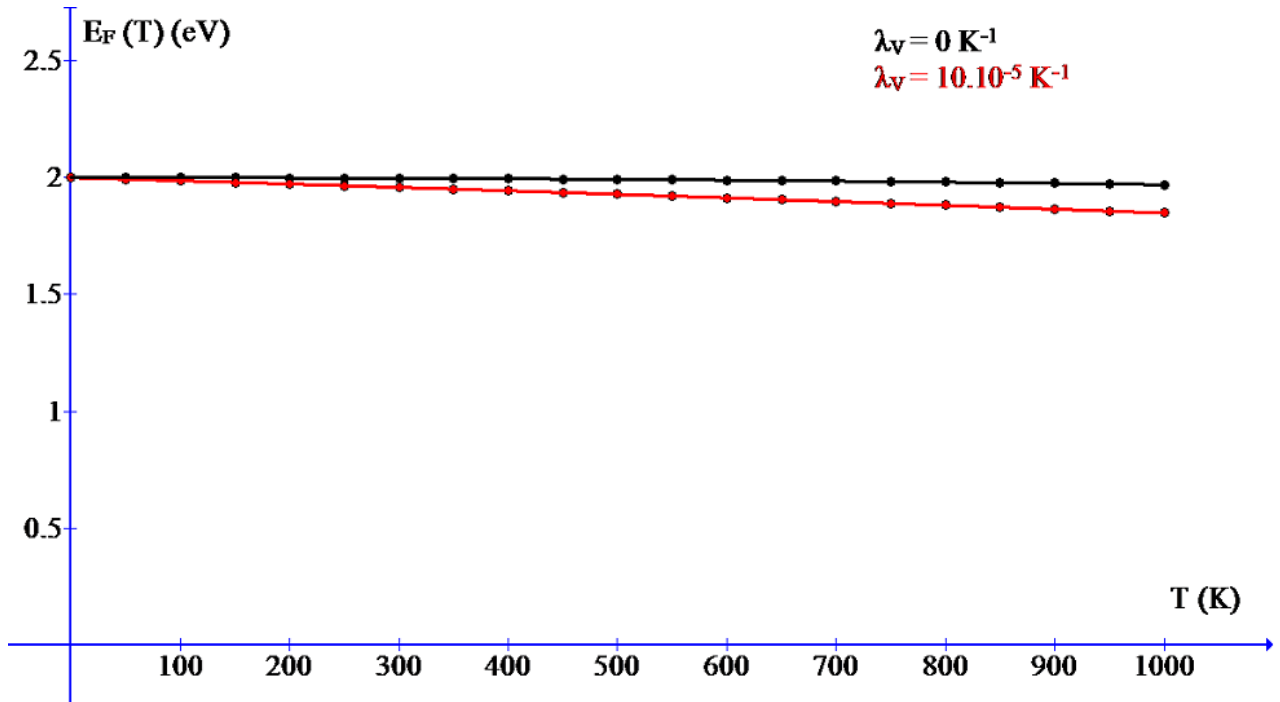
$$E_F(T) = E_F(0)(1 + \lambda_v T)^{-2/3} \left[1 - \frac{(\pi k_B T)^2}{12 E_F^2(0)} \right]$$

que l'on peut transformer en :

$$E_F(T) = E_F(0) \left(1 - \frac{2}{3} \lambda_v T \right) \left[1 - 0,822 \frac{T^2}{T_F^2} \right]$$

montre que la dilatation thermique entraîne une décroissance relative de $E_F(T)$ de 3,3% à 500 K (Figure II-3) par rapport à $E_F(T)$ à volume constant, moins importante que celle du volume. Il faut que la température atteigne 750 K pour voir une variation relative de 5% . Ce résultat permet de considérer qu'en dessous de 500 K, l'effet de la dilatation thermique pourra être négligé, ce qui permettra de traiter le sujet à volume constant tout simplement.

Même en négligeant l'influence de la dilatation thermique, l'énergie de Fermi peut être considérée comme insensible à la température et qu'on peut la prendre égale à $E_F(0)$.



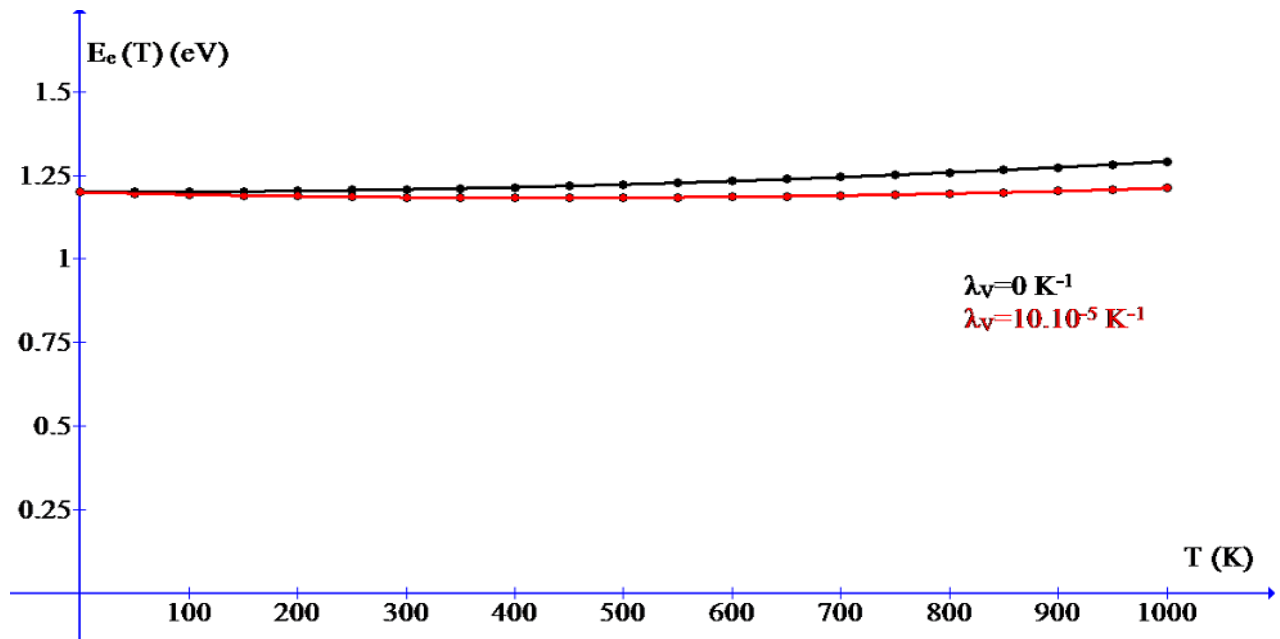
II-3: Variation de l'énergie de Fermi $E_F(T)$ avec la température T

Le comportement de l'énergie moyenne $E_e(T)$ d'un électron libre exprimée par :

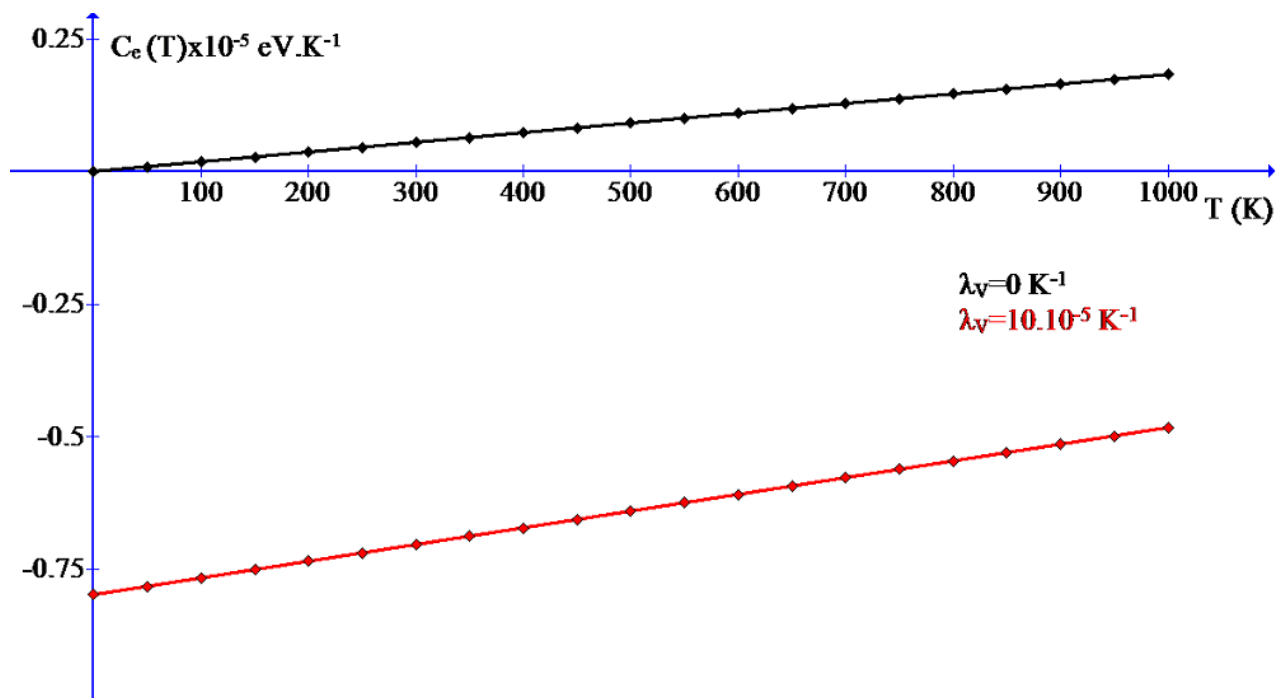
$$E_e(T) = \frac{3}{5} k_B T_F \left(1 - \frac{2}{3} \lambda_v T \right) \left[1 + 4,1 \left(\frac{T}{T_F} \right)^2 \right]$$

et reporté sur la figure II-4, montre une variation relative de -3,3% à 500 K. Le terme entre [] contribue à l'augmentation de l'énergie moyenne $E_e(T)$ à volume constant. La dilatation thermique entraîne une décroissance de l'énergie moyenne de l'électron lorsque la température augmente. Ce comportement prévoit une chaleur spécifique négative à travers sa dérivée par rapport à la température, indiquant que le corps est instable. La figure II-5 montre que la chaleur spécifique à volume constant ($\lambda_v=0$) est positive et varie linéairement avec la température. Dans la gamme de température utilisée, la dilatation thermique engendre une chaleur spécifique négative qui décroît en valeur absolue. La thermodynamique assure qu'une chaleur spécifique négative [13]

[14] suppose qu'un corps absorbe de la chaleur lorsque sa température diminue et en dégage lorsque sa température augmente.



II-4: Variation de l'énergie moyenne d'un électron libre $E_e(T)$ avec la température T



II-5: Variation de la chaleur spécifique $C_e(T)$ d'un électron libre avec la température T

Dans la chaleur spécifique donnée par les deux expressions (39-a et b),

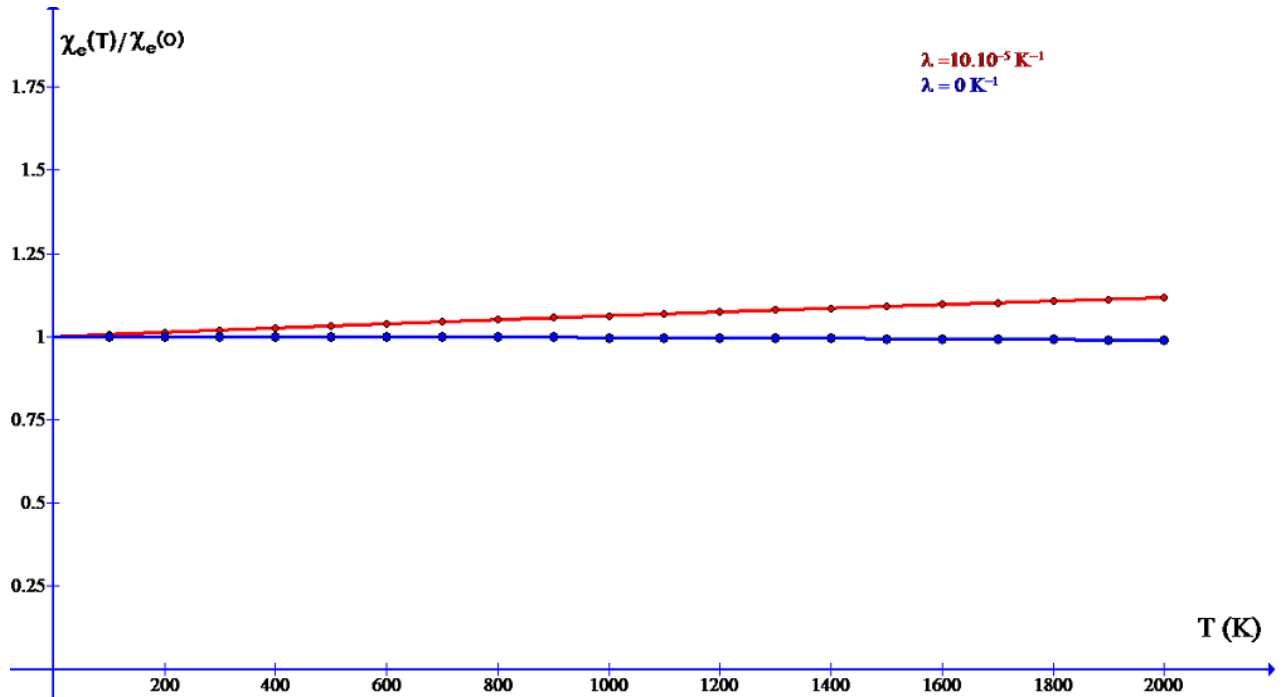
$$C_e(T) = T_F 10^{-4} \left[(-0,344\lambda_V + 0,57\lambda_V^2 T) \left(1 + 4,11 \frac{T^2}{T_F^2} \right) + 4,25 \frac{T}{T_F} - 2,83\lambda_V \frac{T^2}{T_F^2} \right]$$

on peut facilement constater que la contribution de la dilatation thermique au terme linéaire en T du métal est de l'ordre de 1,4 fois inférieure à celui donné à volume constant pour un coefficient

$\lambda_v=10.10^{-5} \text{ K}^{-1}$. Par contre dans un métal [8] de température de Fermi 5.10^4 K et un coefficient de dilatation $\lambda_v=15.10^{-5} \text{ K}^{-1}$, le même terme est 7,6 fois supérieur.

Quant à la susceptibilité paramagnétique relative $\chi_e(T)/\chi_e(0)$ des électrons libres, elle est exprimée par :

$$\chi_e(T)/\chi_e(0) = (1 + \lambda T)^{2/3} \left[1 - 0,822 \left(\frac{T}{T_F} \right)^2 \right]$$



II-6 Variation de la susceptibilité paramagnétique relative des électrons libres avec la température T

et son comportement en fonction de la température est représenté sur la figure II-6 qui montre là aussi que la dilatation thermique entraîne un accroissement relative de l'ordre de 3,3% par rapport à sa valeur à volume constant, bien visible, à 500 °K pour une valeur de $\lambda_v = 10.10^{-5} \text{ K}^{-1}$. Cet accroissement s'élargît progressivement avec la température.

III- SEMICONDUCTEUR INTRINSEQUE

III-1- INTRODUCTION

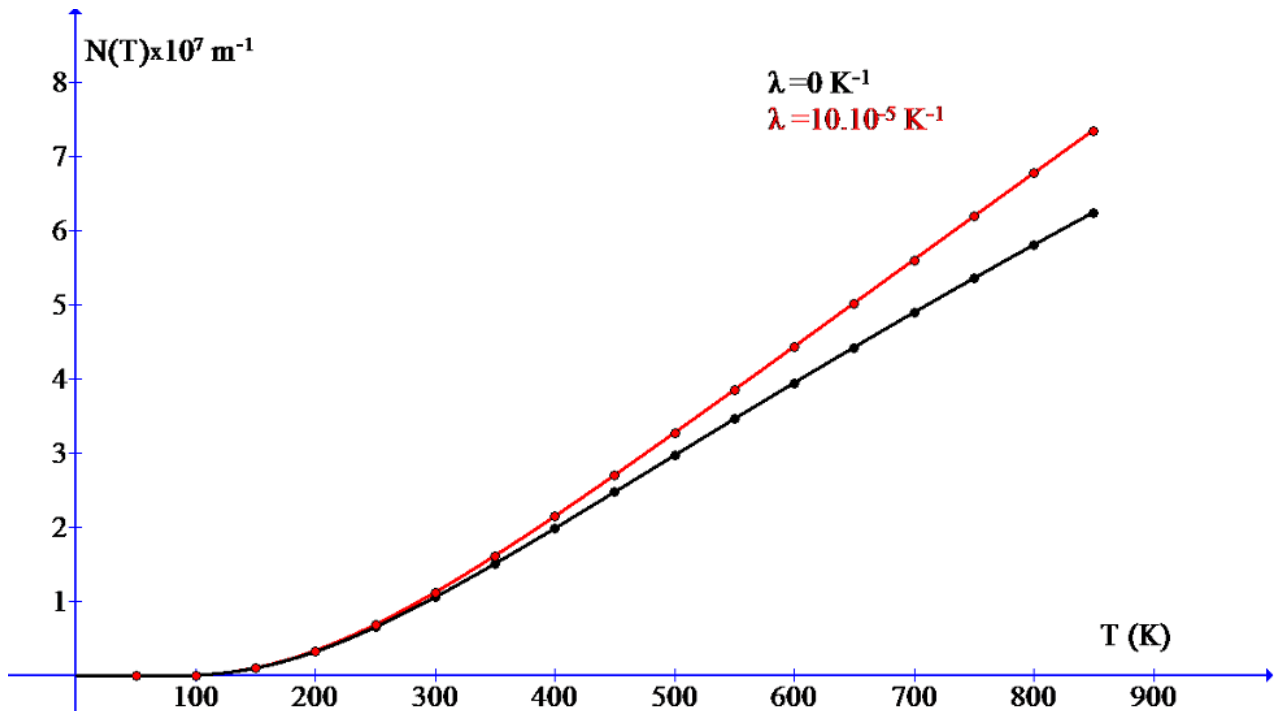
L'échantillon étudié possède une énergie $E_i^0 = 1 \text{ eV}$ et le coefficient de dilatation pris égal à $\lambda = 10^{-4} \text{ K}^{-1}$. Pour satisfaire la condition donnée par l'expression (81) : $(U_1 - E_F)/k_B T \gg 1$, la valeur de l'amplitude du potentiel cristallin est prise égale à $U_1 = 0,1 \text{ eV}$ et la gamme de température étalée jusqu'à $T=800 \text{ K}$. Pour simplifier on prendra $L_0=1$.

III-2- NOMBRE DE PORTEURS DE CHARGES & ENERGIE DE FERMI

La figure II-7 représente la variation avec la température T du nombre de porteurs de charge d'un semiconducteur intrinsèque unidimensionnel (N électrons dans la bande de conduction ou P trous dans la bande de valence), à longueur unitaire constante ($\lambda=0$) et pour un coefficient de dilatation thermique $\lambda=10^{-4}$ K⁻¹. Théoriquement et pour une longueur dilatée (1+ λT), elle est exprimée par

$$N = P = \alpha T^{1/2} (1 + \lambda T)^2 \cdot e^{-\beta/T}$$

avec $\alpha = (2k_B / \hbar^2 \pi)^{1/2} \cdot (m_i^* \cdot m_e^*)^{1/4}$ $\beta = U_1 / 2k_B$



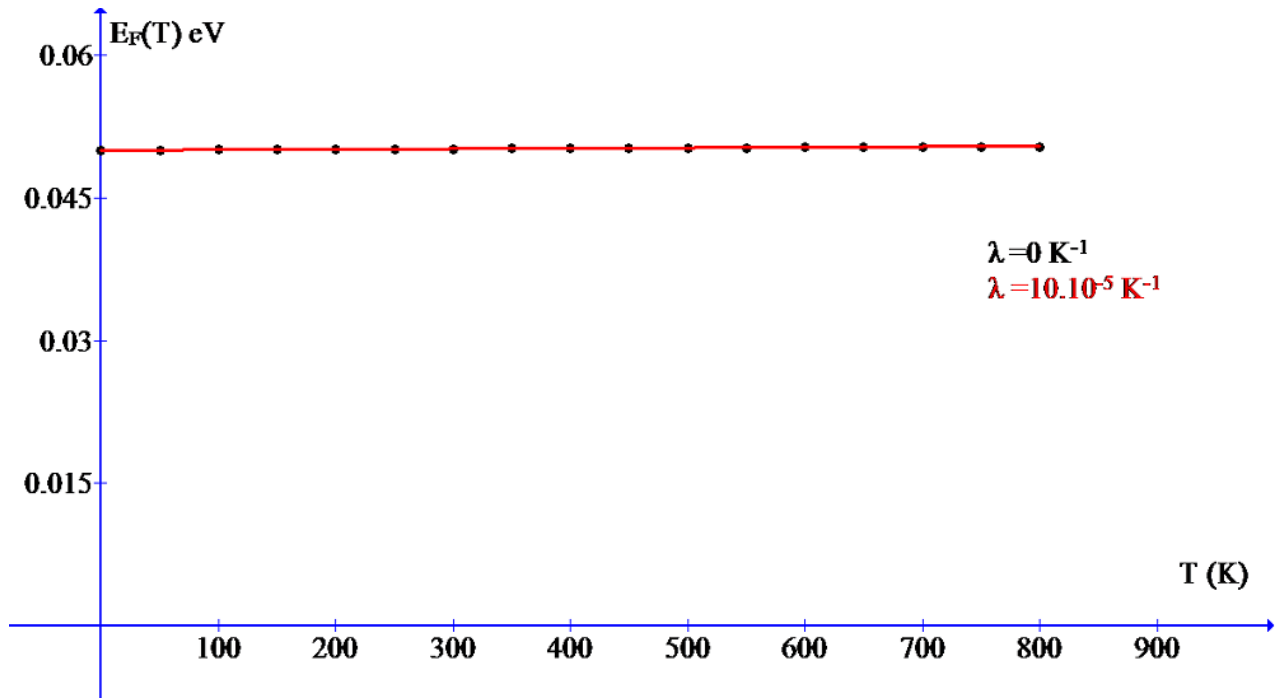
II-7 Variation du nombre de porteurs de charge avec la température T dans un semiconducteur intrinsèque unidimensionnel

Dans le cas d'une longueur unitaire constante ($\lambda=0$), le nombre de porteurs de charge varie presque linéairement avec la température, à peu près à partir de 350 K. Cette augmentation lente est due à la présence du potentiel cristallin, origine de l'apparition d'une bande interdite, qui empêche les électrons de la bande de valence de migrer vers la bande de conduction et que l'on peut voir clairement à travers le signe « moins » de l'exponentielle de l'expression (87). Par comparaison, on observe que la prise en compte de l'effet de la dilatation thermique, à travers la valeur non nulle de $\lambda= 10^{-4}$ K⁻¹, contribue à l'augmentation des porteurs de charge lorsque la longueur passe de 1 à 1+ λT .

A 300 K, l'augmentation relative de $N(T)$ est 6%, alors qu'à 850 K, elle est de 17,7 %. On peut constater aussi que l'écart tend à croître avec la température.

Quant à son énergie de Fermi $E_F(T)$ sous l'effet de la dilatation thermique, elle s'écrit :

$$E_F(T) = \frac{U_1}{2} + \frac{k_B T}{4} \text{Log} \left[\left(\frac{4}{U_1(1+\lambda T)^2} + 1 \right) / \left(\frac{4}{U_1(1+\lambda T)^2} - 1 \right) \right]$$



II-8 Variation de l'énergie de Fermi E_F avec la température T dans un semiconducteur intrinsèque unidimensionnel

La figure II-8 montre bien que l'énergie de Fermi $E_F(T)$ du semiconducteur considéré est insensible non seulement à la température mais aussi à l'effet de la dilatation thermique.

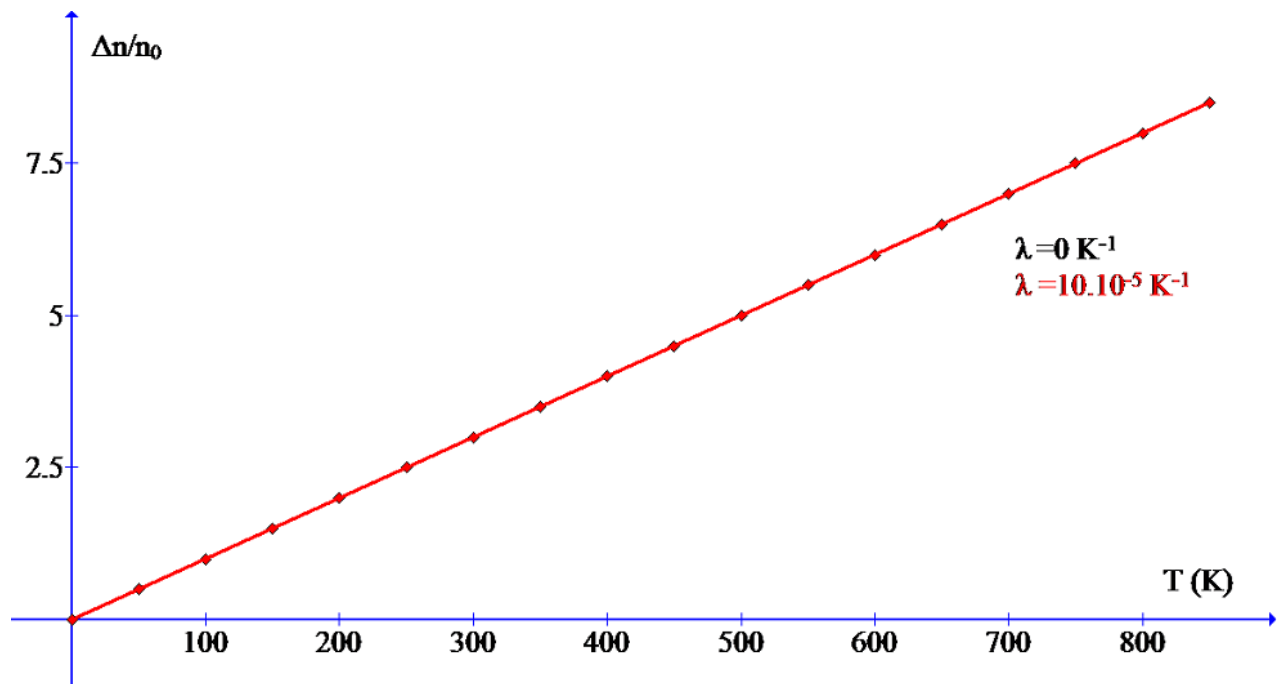
III-3- DENSITE DES PORTEURS DE CHARGE

En tenant compte de la dilatation thermique ($\lambda \neq 0$), l'expression (97) donnant la variation relative de la densité des porteurs de charge d'un semiconducteur intrinsèque unidimensionnel de longueur dilatée d'une quantité λT , s'écrit :

$$\frac{\Delta n}{n_0} = \frac{n - n_0}{n_0} = \lambda T$$

La figure II-9 représente la variation relative linéaire de la densité des porteurs de charge avec la température. Contrairement au cas d'un métal, la dilatation thermique ($\lambda \neq 0$) d'un semiconducteur intrinsèque unidimensionnel entraîne augmentation relative de la densité de 3% à

la température ambiante et qui croît pour atteindre 8,5% à 850 K. Ce résultat montre que l'accroissement de la densité « n » est faible de moitié par rapport à celui des porteurs de charge N et permet de considérer, dans ce cas, l'effet de la dilatation thermique minimale et on peut prendre l'expression de la densité des porteurs de charge à longueur constante sans risque de commettre de grosses erreurs.



II-9 Variation de la variation relative de la densité $\Delta n/n_0$ des porteurs de charge avec la température T dans un semiconducteur intrinsèque unidimensionnel

CONCLUSION GENERALE

Ce travail a été réalisé au département de physique. L'étude effectuée dans ce mémoire est basée sur le modèle des électrons libres et celui des électrons faiblement liés. Nous nous sommes intéressés à quelques paramètres physiques connus pour être des caractéristiques de certains types de cristaux et nous les avons développés avec comme objectif visé: observer leur comportement en fonction de la température dans un métal de volume V_0 et dans une chaîne monoatomique semiconductrice de paramètre a_0 , tout d'abord à volume (longueur) constant(e) et ensuite une modélisation dans laquelle l'influence de la dilatation thermique est prise en compte, a été présentée.

Quelques paramètres d'un métal ont été traités en premier lieu. Ceci a permis d'aboutir à de nouvelles formes théoriques de leur expression après avoir remplacé V_0 par $V_0(1+\lambda_V T)$ dans la formule de la densité d'états. Les résultats illustrés par des courbes montrent que certains paramètres subissent un accroissement alors que d'autres une décroissance tout à fait visibles à partir d'une valeur de T tournant autour de 500°K et qui deviennent conséquent(e) au fur et à mesure que la température et le coefficient de dilatation s'élèvent, à l'exception de la chaleur spécifique dont le comportement s'est montré très différent. En dessous de cette température l'effet de la dilatation sur les autres paramètres peut être considéré comme négligeable et l'hypothèse d'un paramètre à volume constant peut être envisagée sans risque d'erreur.

Dans la seconde partie, l'influence de la dilatation thermique a été traitée sur le nombre de porteurs de charges, la variation relative de leur densité linéaire et l'énergie de Fermi dans un semiconducteur intrinsèque unidimensionnel de paramètre de maille a_0 , en remplaçant ce dernier par $a_0(1+\lambda T)$ dans l'expression de la densité d'états. Les résultats indiquent que la dilatation thermique, à travers le coefficient λ , prend effet à partir de 250°K et contribue à l'augmentation du nombre de porteurs de charge lorsque la longueur passe de 1 à $1+\lambda T$. Les résultats montrent que l'énergie de Fermi E_F reste tout à fait insensible à la dilatation thermique et aux variations de la température. Quant à la densité des porteurs de charge, elle subit un accroissement variant linéairement avec la température. On constate que sa variation relative qui atteint 8,5% à 850 K, est de 3% à la température ambiante, ce qui permet de la traiter sans prendre en considération l'effet de la dilatation thermique, c'est-à-dire à longueur constante.

Ces résultats très intéressants nous offrent, pour la suite, l'envie de continuer cette étude, sur d'autres éventuels paramètres comme la chaleur spécifique de la chaîne semiconductrice intrinsèque en tenant compte dans le choix de la marge de température utilisée, de celle de fusion du cristal. Nous essayerons si les conditions le permettent d'exploiter le cas général d'un

semiconducteur sans la condition (81) et étendre l'étude, si possible, pour les valeurs différentes de la bande interdite.

REFERENCES & BIBLIOGRAPHIQUES

- [1] perso.neel.cnrs.fr › teaching › solid › Chap1-2
- II. Le Modèle de Sommerfeld : Électrons libres - Institut NÉEL
- [2] J L Farvacque, Théorie électronique des solides, Cours de «3^{ème} Cycle », Université des Sciences et Techniques de Lille 1
- [3] E Mooser, Introduction à la physique des Solides 1993 Presses polytechnique et universitaires romandes
- [4] O Bonnaud, Physique des Solides, des Semiconducteurs et Dispositifs
https://edu.ensrennes.fr/pluginfile.php/1741/mod_label/intro/DocPedagogiques/PhysiqueSC_Bonnaud2003.pdf
- [5] https://crppwww.epfl.ch/physgen4/repository/Notes_04.05.2009.pdf
- [6] <https://physique.merici.ca/autres/dilattherm.pdf>
- [7] C Kittel, Physique de l'état solide 1998 7^{ème} édition Dunod
- [8] J Cazaux, Initiation à la physique du solide, 1996 3^{ème} édition Masson
- [9] Hung T Diep, Physique de la matière condensée, 2003 Dunod
- [10] C Aslangul, Physique des solides (MP 022) UPMC 24 II 2010 aslangul@lptmc.jussieu.fr
<https://www.lptmc.jussieu.fr/files/Aslangul/MaitMCondCours.pdf>
- [11] F Mila, Physique du Solide Avancée I et II Ecole polytechnique fédérale de Lausanne 2003-2004
- [12] J J Benayoun et R Maynard, Physique de la matière condensée, 1991 Inter éditions Paris F
- [13] https://fr.wikipedia.org/wiki/Dilatation_thermique
- [14] A Cornu, « Relations entre les coefficients thermiques et thermo-élastiques des corps », J. Phys. Theor. Appl., vol. 2, no 1, 1873, p. 41-50

Résumé :

L'étude effectuée dans ce mémoire est basée sur le modèle des électrons libres et celui des électrons faiblement liés. Nous nous sommes intéressés à quelques paramètres physiques connus pour être des caractéristiques de certains types de cristaux et nous les avons développés avec comme objectif visé: observer leur comportement en fonction de la température dans un métal de volume V_0 et dans une chaîne monoatomique semiconductrice de paramètre « a_0 », sous l'effet de la dilatation thermique.

Dans un métal de température de Fermi de 23220 K et de coefficient de dilatation thermique volumique $\lambda_V=10^{-4} \text{ K}^{-1}$, l'étude a permis d'aboutir à de nouvelles formes théoriques des expressions de ces paramètres après avoir remplacé le volume V_0 par $V_0(1+\lambda_V T)$ dans l'expression de la densité d'états. Les résultats montrent que certains paramètres subissent un accroissement alors que d'autres une décroissance à partir d'une température tournant autour de 500°K et qui deviennent conséquent(e) au fur et à mesure que la température et le coefficient de dilatation s'élèvent. En dessous de cette température, l'effet de la dilatation peut être considéré comme négligeable et l'hypothèse d'un paramètre à volume constant peut être envisagée sans risque d'erreur.

Dans un semiconducteur intrinsèque de gap $U_1= 0,1 \text{ eV}$ et de paramètre de maille $a_0= 6,13 \cdot 10^{-10} \text{ m}$, ce dernier a été également remplacé par $a_0(1+\lambda T)$ dans l'expression de la densité d'états. L'étude a porté sur le nombre, la densité de porteurs de charges, et l'énergie de Fermi sous l'influence de la dilatation thermique. Les résultats indiquent que la dilatation thermique y prend sérieusement effet à partir de 600 °K. Elle contribue à l'augmentation du nombre de porteurs de charge lorsque la longueur passe de 1 à $1+\lambda T$. L'énergie de Fermi E_F reste tout à fait insensible à la dilatation thermique et aux variations de la température. Quant à la densité des porteurs de charge, elle subit une variation relative positive de 3% à la température ambiante et atteint les 8,5 % à 850 K, ce qui permet de considérer l'effet de dilatation thermique négligeable en dessous de 600 K sans risque de commettre là aussi de grosses erreurs.

Mots-clés :

Modèle de Sommerfeld - Modèle des électrons faiblement liés - Densité électronique des électrons libres - Dilatation thermique - Densité d'états - Energie de Fermi- Energie moyenne de l'électron libre - chaleur spécifique des électrons libres – Susceptibilité paramagnétique des électrons libres - Potentiel périodique - semiconducteur intrinsèque - Masse effective - Largeur de bande interdite- Nombre de porteurs de charges - Densité des porteurs de charge électrons.

Abstract :

The study carried out in this dissertation is based on the model of free electrons and that of weakly bound electrons. We were interested in some physical parameters known to be characteristics of certain types of crystals and we developed them with the aim of observing their behavior as a function of temperature in a metal of volume V_0 and in a semiconductor monoatomic chain of parameter « a_0 », under the effect of thermal expansion.

In a metal with a Fermi temperature of 23220 K and a volume thermal expansion coefficient $\lambda_v=10^{-4} \text{ K}^{-1}$, the study has led to new theoretical forms of the expressions of these parameters after replacing the volume V_0 by $V_0(1+\lambda_v T)$ in the expression for the density of states. The results show that some parameters undergo an increase while others a decrease from a temperature around 500K and which become consequent as the temperature and the coefficient of expansion increase. Below this temperature, the effect of expansion can be considered negligible and the assumption of a constant volume parameter can be considered without risk of error .

In an intrinsic semiconductor with gap $U_1=0.1\text{eV}$ and lattice parameter $a_0=6.13 \times 10^{-10} \text{ m}$, the latter has also been replaced by $a_0(1+\lambda T)$ in the expression for the density of states. The study investigated the number, density of charge carriers, and Fermi energy under the influence of thermal expansion. The results indicate that thermal expansion takes a serious effect from 600 K. It contributes to the increase in the number of charge carriers as the length increases from 1 to $(1+\lambda T)$. Fermi energy remains quite insensitive to thermal expansion and temperature changes. As for the density of charge carriers, it undergoes a positive relative variation of 3% at ambient temperature and reaches 8.5% at 850 K, which makes it possible to consider the negligible thermal expansion effect below 600 K without the risk of making big mistakes here too.

Keywords :

Sommerfeld model- model of weakly bound electrons- electronic density of free electrons- thermal expansion- density of states- fermi energy-average energy of free electron- specific heat of free electrons- paramagnetic susceptibility of free electrons- periodic potential- intrinsic semiconductor- effective mass- prohibited bandwidth-number of charge carriers- density of charge carriers electrons.

ملخص:

تستند الدراسة التي أجريت في هذا البحث إلى نموذج الالكترونات الحرة والالكترونات ضعيفة الارتباط. قد كان اهتمامنا ببعض المعلمات الفيزيائية المعروفة بأنها خصائص لأنواع معينة من البلورات وقمنا بتطويرها بهدف: مراقبة سلوكها كدالة لدرجة الحرارة في معدن بحجم $0V$ وفي سلسلة معلمة أحادية الذرة أشباه الموصلات "oa", تحت تأثير التمدد الحراري.

في معدن بدرجة حرارة فيرمي $23220 K$ ومعامل تمدد حراري حجم $\nu\lambda=10^{-4} K^{-1}$, أدت الدراسة النظرية إلى أشكال جديدة لتعابير هذه المعلمات بعد استبدال الحجم $0V$ ب $0V(1+T\nu\lambda)$ في التعبير عن كثافة الدول. أوضحت النتائج أن بعض المتغيرات تتعرض للزيادة والبعض الآخر ينخفض من درجة حرارة تبلغ حوالي $500 K$ والتي تصبح نتيجة لارتفاع درجة الحرارة ومعامل التمدد. تحت درجة الحرارة هذه, مما أدى من يمكن اعتبار افتراض معلمة حجم ثابت دون التعرض لخطر الخطأ.

في أشباه الموصلات الجوهرية ذات الفجوة $U=0,1 eV$ والمعلمة الشبكية $10^{-10} \times 6,13$ متر, تم أيضا استبدال هذا الأخير ب $0a(T\lambda+1)$ في التعبير عن كثافة الحالات. استقصت الدراسة عدد حاملات الشحنة, كثافتها وطاقة فيرمي تحت تأثير التمدد الحراري. تشير النتائج أن التمدد الحراري يأخذ تأثيرا خطيرا من $600 K$. يساهم في زيادة عدد حاملات الشحنة مع زيادة الطول من 1 إلى $T\lambda+1$. تظل طاقة فيرمي غير حساسة تماما للتمدد الحراري وتغيرات درجة الحرارة, أما بالنسبة لكثافة حاملات الشحنة, فإنها تخضع لتغير نسبي إيجابي بنسبة 3% في درجة الحرارة المحيطة وتصل إلى $8,5\%$ عند درجة $850 K$, مما يجعل اعتبار تأثير التمدد الحراري ضئيلا تحت $600 K$ دون التعرض لخطر ارتكاب أخطاء كبيرة.

الكلمات المفتاحية :

نموذج سومر فيلد- نموذج الالكترونات الضعيفة- الكثافة الالكترونية للالكترونات الحرة- التمدد الحراري- كثافة الحالات- طاقة فيرمي- متوسط طاقة الإلكترون الحر- الحرارة النوعية للالكترونات الحرة- القابلية البارامغناطيسية للالكترونات الحرة- الجهد الدوري- أشباه الموصلات الجوهرية- الكتلة فعالة- عرض النطاق الترددي المحظور- عدد حاملات الشحنة- كثافة الكترونات حاملات الشحنة.