

Utilisation de la mécanique statistique de Boltzmann dans les conceptions de la marche au hasard et de Fermi Dirac en semi-conducteur

Rodel Justola TSIAFITAKA*, Jean Victor RANDRIANOHAVY et Frederic ASIMANANA

Université d'Antsiranana, Faculté des Sciences, Laboratoire de Métrologie Nucléaire et Physique Théorique,
BP 0 201 Antsiranana, Madagascar

* Correspondance, courriel : t.rodeljustola@yahoo.fr

Résumé

La physique statistique de Boltzmann étudie quelques phénomènes constaté à partir d'un marcheur ivrogne qui se déplace sur une droite en faisant des pas aléatoirement à gauche et à droite à une distance de là où il se trouve. Sur cette distribution statistique permet d'expliquer la probabilité $P(n)$. Ce résultat reflète bien le marcheur ait le nombre N pas, dont les n pas sont effectués vers la droite et $(N-n)$ vers la gauche. Le nombre moyen \bar{n} de pas qui est déterminé à partir de la formule $nP(n)$ ne concerne que le nombre de pas vers la droite. La distribution statistique de Fermi - Dirac détermine les concentrations de porteurs dans la bande de conduction et dans la bande de valence d'un matériau semi - conducteur ainsi que leur dépendance en fonction de la température. Elle relie physiquement l'ordre de grandeur entre le nombre d'électron par unité de volume dans la bande de conduction ainsi que le nombre de trous dans la bande de valence en fonction de la température et du potentiel chimique.

Mots-clés : *statistique, comportement, équilibre, probabilité, grandeur, marcheur.*

Abstract

Utilization of Boltzmann's statistical mechanics in the conceptions of the random walking and Fermi-Dirac in semiconductor

Boltzmann's statistical physics studies some phenomena observed from a drunken walker who moves on a straight line, taking steps randomly to the left and right at a distance from where he is. On this statistical distribution makes it possible to explain the probability $P(n)$. This result reflects well the walker has the number N steps, whose n are not made to the right and $(N-n)$ to the left. The average number of steps that is determined from the formula $n P(n)$ concerns only the number of steps to the right. The Fermi-Dirac statistical distribution determines the carrier concentrations in the conduction band and in the valence band of a semiconductor material as well as their dependence as a function of temperature. It physically links the order of magnitude between the number of electrons per unit volume in the conduction band as well as the number of holes in the valence band as a function of temperature and chemical potential.

Keywords : *statistic, comportment, balance, probability, size, walker.*

1. Introduction

La physique statistique explique le comportement et l'évolution d'un système constitué pour un grand nombre de particules dont les formulations de lois physiques s'obtiennent à partir de leurs constituants microscopiques [2]. Elle est un cadre conceptuel qui permet, au moyen d'outils statistiques (probabilité, moyenne, variance, etc.), de condenser l'énorme information associée aux degrés de libertés microscopiques, en un petit nombre de variables macroscopiques accessibles à l'expérience [3]. La physique statistique est construite à partir des postulats (des hypothèses raisonnables), choisies à priori et dont la justification se fait à postérieur en vérifiant que cette théorie permet de reproduire et de comprendre un grand nombre de propriétés des corps macroscopiques [6]. Cette discipline théorique, nous amène à utiliser trois applications dont l'une concerne la physique la statistique de Boltzmann et les deux autres utilisent la statistique de Fermi-Dirac. La statistique de Boltzmann résout le problème de la marche au hasard d'un homme ivre pour calculer $P(n)$ d'avoir n pas vers la droite si l'ivrogne a fait N pas [8]. La statistique de Fermi-Dirac appliquée en semi-conducteur donne la probabilité d'occupation d'énergie $f_n(E)$ et explicite la densité d'état dans la bande de valence N_V et celle dans la bande conduction N_c enfin de pouvoir tracer leur représentations graphiques à températures différentes. Elle est aussi utilisée à trouver les nombres N_1 et N_2 de particules de chaque niveau à partir d'un système physique constitué de deux niveaux d'énergies différentes et de proposer leur représentation graphique. L'intérêt consiste à savoir, quelle est la formule consultée pour trouver la valeur moyenne \bar{x} dans la distribution de Boltzmann ? Quelle est l'expression adéquate pour déterminer les différents types de semi-conducteurs (type Pou N) en utilisant la statistique de Fermi-Dirac? Ce travail permet d'expliquer les domaines d'application de la physique statistique de Boltzmann et ceux de la physique statistique de Fermi-Dirac.

2. Méthodologie

La méthode utilisée est la notion de probabilité de distribution statistique de Boltzmann. En effectuant le calcul rigoureux pour déterminer la probabilité $P(n)$ en tenant compte la méthode d'approximation de Stirling. Cette probabilité nous amène à exprimer une loi gaussienne dans le cas limite de grand nombre N . L'apogée de cette méthode qui est de chercher la distribution du spin total des N atomes est un problème analogue à celui d'un ivrogne qui fait N pas tels que $p = q = 1/2$. On utilise la distribution statistique de Fermi-Dirac pour trouver la probabilité d'occupation $p(E)$ d'un niveau d'énergie E . Pour différencier le type d'un semi-conducteur (type N et P), on choisit les matériaux comme le silicium ou le germanium dont les structures sont indiquées sur la figure ci-dessous.

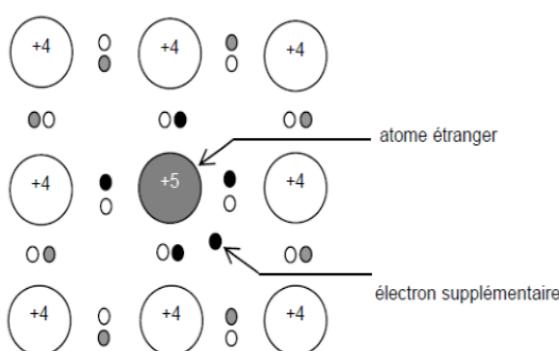


Figure 1 : Semi-conducteur de type N

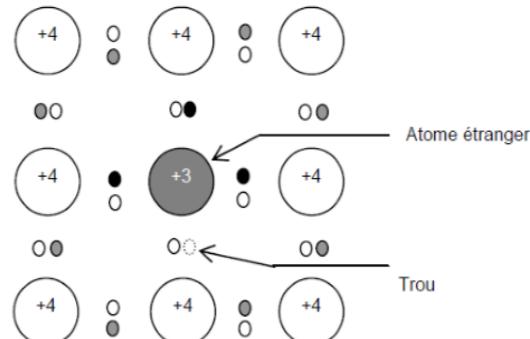


Figure 2 : Semi-conducteur de type P

On travaille sur le programme informatique Matlab pour tracer la représentation graphique de la probabilité d'occupation $p(E)$ d'un niveau d'énergie E et les densités d'états. Mais les nombre N_1 et N_2 de particules de chaque niveau sont représentés graphiquement à l'aide des programmations informatiques excel.

3. Résultats et discussion

3-1. Problème de la marche au hasard

Un homme ivre, pour fêter son anniversaire, invite ses collègues à boire dans un bar situé à plusieurs milliers de mètres de chez lui. Puis il quitte ce bar pour rentrer chez lui en faisant des pas de longueur l . On désigne par p la probabilité que l'un quel que de ses pas soit dirigé vers la droite et q qu'il soit dirigé vers la gauche. On note par n le nombre de ses pas dirigés vers la droit et n' le nombre de pas restants dirigés vers la gauche. L'homme est suffisamment ivre pour qu'à chaque pas, son comportement ne soit en aucun cas influencé par ses pas précédents. On suppose que l'homme à parcouru N pas pour rentrer chez-lui.

3-1-1. Probabilité $P(n)$

$$\left. \begin{array}{l} d \ d \ d \ d \ d \dots \dots \dots \Rightarrow P_a = p^n \\ g \ g \ g \ g \dots \dots \dots \Rightarrow P_b = q^{n'} \end{array} \right\} \Rightarrow P_1 = p^n q^{n'}$$

$P_1 = p^n q^{n'}$ est la probabilité due aux directions de pas.

$$P_2 \text{ est la probabilité due au nombre de pas effectués } P_2 = \frac{N}{n! n'!}$$

donc : $P(n) = P_1 P_2 = \frac{N!}{n!(N-n)!} p^n q^{N-n}$

$$\text{avec } N = n + n' \quad (1)$$

La probabilité $P(n)$ est en fonction de n , N , p et q .

3-1-2. Valeur la plus probable \tilde{n} de n

En appliquant l'approximation de sterling

$\log N! = N \log N - N$ avec N étant un grand nombre

$$\log P(n) = N \log \left(\frac{Nq}{N-n} \right) + n \log \left(\frac{N-n}{Nq} \right)$$

La valeur la plus probable \tilde{n} de n se traduit par la relation :

$$\left(\frac{d \log P(n)}{dn} \right)_{n=\tilde{n}} = \log \left(\frac{N-n}{N} \frac{p}{q} \right) \Rightarrow \left(\frac{d \log P(n)}{dn} \right)_{n=\tilde{n}} = 0$$

d'où $\tilde{n} = Np$ (2)

La valeur la plus probable \tilde{n} de n est en fonction de N et p , puisqu'elle est proportionnelle à la probabilité que l'un de quelques de ses pas soit dirigé vers la droite alors celle-ci ne permettra pas de prévoir le résultat d'un de ces événements pris individuellement, mais de prédire des propriétés collectives, et de faire ressortir des lois collectives.

3-1-3. Valeur moyenne \bar{n} [méthode statistique de Boltzmann]

$$\bar{n} = \sum_{n=1}^N nP(n) = \sum_{n=1}^N \frac{nN!}{n!(N-n)!} p^n q^{N-n}$$

avec $n! = n(n-1)!$

Soit :

$$\bar{n} = N \sum_{n=1}^N \frac{(N-1)!}{(n-1)!(N-n)!} p^n q^{N-n}$$

$$\text{donc : } \bar{n} = Np[q^{N-1} + \frac{(N-1)(N-2)}{1!(N-2)} p^2 q^{N-2} + \frac{(N-1)(N-2)(N-3)}{2!(N-3)} p^3 q^{N-3} + \dots]$$

On peut écrire la **Formule** en parenthèse de la forme :

$$(q+p)^{N-1} = q^{N-1} + C_{N-1}^1 p q^{N-2} + C_{N-1}^2 p^2 q^{N-3} + C_{N-1}^3 p^3 q^{N-4} + \dots$$

$$\text{donc } \bar{n} = Np(q+p)^{N-1} \text{ avec } q+p = 1$$

$$\text{d'où } \bar{n} = Np \quad (3)$$

La valeur moyenne \bar{n} de n dépend du nombre N de ses pas et de la probabilité de faire un pas vers la droite. En outre, isotropie du milieu considéré explique l'égalité entre la valeur moyenne ($\bar{n} = Np$) et la valeur la plus probable ($\tilde{n} = Np$).

3-1-4. Ecart quadratique moyen Δn de n

$$\Delta n = \overline{n^2} - (\bar{n})^2 \text{ or } \overline{n^2} = \sum_{n=0}^N n^2 P(n) = \sum_{n=0}^N n(n-1) P(n)$$

$$\begin{aligned} \sum_{n=0}^N n(n-1) P(n) &= N(N-1) \sum_{n=2}^N \frac{(N-2)!}{(n-2)!(N-n)!} p^n q^{N-n-2} \\ &= N(N-1)p^2 \text{ avec} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \overline{n^2} &= N(N-1)p^2 + N^2p^2 \text{ alors } \Delta n^2 = Np(1-p) = Npq \\ \text{d'où } \Delta n &= \sqrt{Npq} \end{aligned} \quad (4)$$

L'écart quadratique moyen Δn de n est en fonction de N , p et q . Donc l'écart, quadratique moyen, est proportionnel à la largeur de la distribution $P(n)$ autour de la valeur moyenne \bar{n} .

3-1-5. Probabilité $P(m)$

La distance parcourue par l'homme soit égale à ml , où m est un entier positif ou nul et l est une longueur de pas. Cherchons la relation entre m et n lorsqu'il fait n pas vers la droite et n' pas vers la gauche.

$$\text{Soit } ml = nl - n'l \text{ donc } m = n - N + n' \Rightarrow n = \frac{N+m}{2}$$

Calculons la probabilité de $P(m)$

$$\text{Donc } P(m) = \frac{N!}{(\frac{N+m}{2})!(\frac{N-m}{2})!} p^{\frac{N+m}{2}} q^{\frac{N-m}{2}} \quad (5)$$

La probabilité $P(m)$ est en fonction de N, m, p et q . Dans le cas particulier si $p = q = 1/2$, alors la distribution est symétrique par rapport à $n = 0$.

3-1-6. Cas limite de grands nombre

Dans le cas où N et n sont très grands, montrons la loi de distribution $P(n)$ tend vers une loi gaussienne $P(n) = \frac{N!}{n!(N-n)!} p^n q^{N-n}$

$P(n)$ est maximale pour des valeurs de n voisines de \tilde{n} , soit

On utilise la formule de Taylor

$$\text{Donc } P(x + h) = P(h) + \frac{P'(h)}{1!}x + \frac{P''(h)}{2!}x^2 + \frac{P'''(h)}{3!}x^3 + \dots$$

$$\text{Et } P(x - h) = P(h) + \frac{P'(h)}{1!}x + \frac{P''(h)}{2!}x^2 + \frac{P'''(h)}{3!}x^3 + \dots$$

$$\text{Alors : } \log P(n) = \log P(\tilde{n}) + \frac{n-\tilde{n}}{1!} \left(\frac{d \log P(n)}{dn} \right)_{n=\tilde{n}} + \frac{(n-\tilde{n})^2}{2!} \left(\frac{d^2 \log P(n)}{dn^2} \right)_{n=\tilde{n}}$$

$$\text{Sachant que } \left(\frac{d \log P(n)}{dn} \right)_{n=\tilde{n}} = 0 \text{ avec } \frac{d^2 \log P(\tilde{n})}{dn^2} = \frac{N-n+n}{n(N-n)}$$

$$\text{On exprime : } \left(\frac{d^2 \log P(n)}{dn^2} \right)_{n=\tilde{n}} = \frac{N}{\tilde{n}(N-\tilde{n})} \text{ avec } \tilde{n} = Np,$$

$$\log P(n) = \log P(\tilde{n}) - \frac{(n-\tilde{n})^2}{2Npq}$$

$$\text{alors } P(n) = P(\tilde{n}) e^{-\frac{(n-\tilde{n})^2}{2Npq}} \quad (6)$$

3-1-7. On calcule d'abord $P(\tilde{n})$

$$\log P(\tilde{n}) = N \log N - \tilde{n} \log \tilde{n} - N \log(N - \tilde{n}) + \tilde{n} \log(N - \tilde{n}) + \tilde{n} \log p + N \log q + \tilde{n} \log q$$

$\log P(\tilde{n}) = 0$, on va reconstruire les termes négligés de la **Formule de Stirling**

$$\log N! = N \log N - N + \sqrt{2\pi N}$$

$$\log P(\tilde{n}) = \log \sqrt{2\pi N} - \log \sqrt{2\pi \tilde{n}} - \log \sqrt{2\pi(N - \tilde{n})}$$

$$\text{donc } P(\tilde{n}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi Npq}}$$

$$\text{Alors l'expression de } P(n) \text{ devient } P(n) = \frac{1}{\sqrt{2\pi Npq}} e^{-\frac{(n-\tilde{n})^2}{2Npq}} \quad (7)$$

La loi gaussienne est assez simple puisqu'elle est caractérisée totalement par deux paramètres, sa valeur moyenne et son écart quadratique.

3-1-8. La limite de $P(m)$

Soit $n - n' = ml$ et $x = nl - n'l$ avec $n = \frac{1}{2}(N + m)$ où l longueur d'un pas

$$\text{Alors } P(m) = \frac{1}{\sqrt{2\pi Npq}} e^{-\frac{(m-\tilde{m})^2}{8Npq}} \quad (8)$$

3-1-9. Passage au cas continu

On considère toujours le cas où N est très grand et où l est petit, calculons la probabilité, après N pas, le déplacement soit x à $x + dx$, soit $P(x)dx$.

$$\begin{aligned} \text{On pose } x = ml &\Rightarrow \tilde{x} = \tilde{m}l \text{ et } x - \tilde{x} = (m - \tilde{m})l \\ \Rightarrow m - \tilde{m} &= \frac{x - \tilde{x}}{l} \end{aligned} \quad (9)$$

Le nombre de points dans l'intervalle considéré égal à $\frac{dx}{2l}$

$$P(x)dx = \frac{1}{2l\sqrt{2\pi pql^2}} e^{-\frac{(x-\tilde{x})^2}{8Npq l^2}} \frac{dx}{2l} \Rightarrow P(x)dx = \frac{1}{2l\sqrt{2\pi pql^2}} e^{-\frac{(x-\tilde{x})^2}{8Npq l^2}} dx \quad (10)$$

3-1-10. Valeur moyenne \bar{x} de x

$$\begin{aligned} \bar{x} &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \left[\tilde{x} \int_{-\infty}^{+\infty} y^{-\frac{1}{2}} e^{-y} dy + 2l \sqrt{2\pi pq} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-y} dy \right] \Rightarrow \bar{x} = \frac{\tilde{x}}{2\sqrt{\pi}} 2\sqrt{\pi} \\ \bar{x} &= \int_{-\infty}^{+\infty} x P(x)dx = \frac{1}{\sqrt{2\pi Npq l^2}} e^{-\frac{(x-\tilde{x})^2}{8Npq l^2}} x dx \end{aligned}$$

en utilisant la propriété de la fonction gamma, en posant $y = \frac{(x-\tilde{x})^2}{8Npq l^2}$

$$\begin{aligned} \bar{x} &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \left[\tilde{x} \int_{-\infty}^{+\infty} y^{-\frac{1}{2}} e^{-y} dy + 2l \sqrt{2\pi pq} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-y} dy \right] \Rightarrow \bar{x} = \frac{\tilde{x}}{2\sqrt{\pi}} 2\sqrt{\pi} \\ \bar{x} &= \tilde{x} \end{aligned} \quad (11)$$

On remarque que la valeur moyenne \bar{x} est égale à \tilde{x} car pour une gaussienne, à peu près la majorité des valeurs probables de x est encadré dans la valeur quadratique moyenne.

3-1-1-1. Ecart quadratique moyen Δx de x

$$\Delta x = \bar{x}^2 - (\bar{x})^2 \text{ avec } \bar{x}^2 = \frac{1}{2l\sqrt{2\pi pq}} \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 e^{-\frac{(x-\tilde{x})^2}{8Npq l^2}} dx \text{ alors } \Delta x^2 = 4Npq l^2$$

$$\text{d'où } \Delta x = 2l\sqrt{Npq} \quad (12)$$

L'écart quadratique moyen Δx de x est en fonction de l , N , p et q .

3-1-1-2. Distribution de fermi-Dirac

3-1-1-3. Notion de la probabilité de Fermi-Dirac

La statistique de Fermi-Dirac indique que chaque cellule de l'espace de phase ne peut être occupé alors que par une seule particule au plus. Chaque cellule d'un domaine peut être occupée de deux façons : cette cellule est vide ($n_{ik} = 0$) ou cette cellule est pleine ($n_{ik} = 1$). Toutes les cellules contenant $n_{ik} > 1$ sont interdites, où k est le nombre de dégénérescence. Si g_i est le nombre de cellules d'un domaine i , le nombre de particules N_i affecté à ce domaine est donc nécessairement limité : $N_i \leq g_i$. Le nombre de façons différentes P_i de réaliser une répartition de particule dans les cellules d'un domaine i :

$$\text{donc } P_i = \frac{g_i!}{N_i!(g_i-N_i)!} \quad (13)$$

N_i : étant le nombre de cellules pleines ; $g_i - N_i$: nombre de cellules vides

3-1-1-4. Calcul de la probabilité

$$P = \prod_i P_i = \prod_i \frac{g_i!}{N_i!(g_i-N_i)!} \quad (14)$$

En utilisant la formule d'approximation de Sterling :

$$\log P = \sum_i N_i \log\left(\frac{g_i - N_i}{N_i}\right) - \sum_i g_i \log\left(\frac{g_i - N_i}{g_i}\right)$$

3-1-1-5. Détermination nombre de particules N_i de la répartition la plus probable

$$\log P = \sum_i dN_i (-\log N_i + \log(g_i - N_i))$$

La méthode de multiplicateur de Lagrange donne :

$$\sum_i dN_i [\log\left(\frac{g_i - N_i}{N_i}\right) - \alpha - \beta \varepsilon_i] = 0$$

$$\text{d'où } N_i^* = \frac{g_i}{B e^{\beta \varepsilon_i + 1}} \quad (15)$$

On considère un gaz de fermions fortement dégénéré à basse température, par exemple :

- l'état fondamental

- la température peut être considérée comme faible

Des exemples sont :

-Le gaz des électrons de conduction dans un métal.

-l'hélium (3He) liquide

Les électrons dans un métal

Les électrons ont un spin $\frac{1}{2}$. Ce sont donc des fermions

3-1-1-6. Comportement à la température 0K

Chaque vecteur d'onde \vec{k} peut héberger deux électrons (fermions) : l'un avec un spin $\frac{1}{2}$, l'autre avec un spin- $\frac{1}{2}$.

Les surfaces d'énergie $E_{\vec{k}}$ qui est une constante dans l'espace des vecteurs d'onde \vec{k} sont des sphères. On rajoute successivement des électrons en commençant par les énergies les plus basses, pour minimiser l'énergie totale. Dans un volume Ω de l'espace de phase (\vec{r}, \vec{p}) on peut loger volume $(\Omega) / h^3$ états quantiques. Ω est ici l'ensemble des points (\vec{r}, \vec{p}) où $\vec{r} \in$ cube, $\vec{p} \in S$. S est la sphère de rayon $p = \hbar k$. On a donc $vol(\Omega) = \frac{4\pi}{3} p^3 V$. Comme chaque état quantique d'énergie E_k peut avoir deux configurations de spin possibles, le nombre total N d'électrons est donc donné par *l'Équation*:

$$N = g_r = 2 \frac{V}{h^3} \frac{4\pi}{3} p^3$$

3-1-1-7. Niveau de Fermi

Lorsque $T \rightarrow 0$, $\Rightarrow \frac{1}{T} \rightarrow \infty$. alors $\mathcal{E}_F \rightarrow \mathcal{E}_F^0$ et on cherche les signes de $\frac{\mathcal{E}_i - \mathcal{E}_F}{kT}$

$$\text{Soit } \bar{n}_i = \frac{1}{e^{\frac{\mathcal{E}_i - \mathcal{E}_F}{kT}} + 1}$$

$$\text{Si } \mathcal{E}_i < \mathcal{E}_F \Rightarrow \mathcal{E}_i - \mathcal{E}_F < 0 \text{ donc } e^{\frac{\mathcal{E}_i - \mathcal{E}_F}{kT}} \rightarrow 0 \Rightarrow \bar{n}_i \rightarrow 1$$

Par contre si $\mathcal{E}_i > \mathcal{E}_F \Rightarrow \mathcal{E}_i - \mathcal{E}_F > 0 \Rightarrow e^{\frac{\mathcal{E}_i - \mathcal{E}_F}{kT}} \rightarrow \infty \Rightarrow \bar{n}_i \rightarrow 0$

A la température 0K, toutes les cellules de l'espace des phases pour lesquelles $\mathcal{E}_i < \mathcal{E}_F$ sont complètement remplies et par contre les cellules de l'espace des phases où $\mathcal{E}_i > \mathcal{E}_F$ sont vides.

$$\text{Comme } \Rightarrow \mathcal{E}_F^0 = \frac{P_F^0}{2m} \Rightarrow P_F^0 = 2m\mathcal{E}_F^0$$

$$\text{Soit } g_r = \frac{N}{2} \Rightarrow \frac{V}{h^3} \frac{4\pi}{3} (2m\mathcal{E}_F^0)^{\frac{3}{2}} = \frac{N}{2}$$

$$\text{d'où } \mathcal{E}_F^0 = \frac{h^2}{8m} \left(\frac{3N}{\pi V} \right)^{\frac{3}{2}} \quad (16)$$

C'est le niveau d'énergie de Fermi car ils sont de fermions puisque chaque électron à la possibilité de s'orienter parallèlement ou antiparallèlement à un champ extérieur, alors la dégénérescence est égal à deux.

3-2. Statistique de Fermi Dirac et semi-conducteur

3-2-1. Approche quantique

Cette approche nous permet de préciser la différence entre les métaux isolants et semi-conducteurs. L'influence périodique du réseau d'ions positifs sur le mouvement des électrons (électrons « quasi libres » soumis à un potentiel périodique en opposition au modèle des électrons dits « libres », soumis à un potentiel constant) conduit à la notion de structure de bandes d'énergies permises ou interdites pour les électrons. Les électrons étant des fermions, la probabilité d'occupation $p(E)$ d'un niveau d'énergie E dans cette structure de bande est donnée par la statistique de Fermi- Dirac :

$$p(E) = \frac{1}{1 + e^{\frac{E - E_F}{kT}}} \quad (17)$$

3-2-2. Semi-conducteurs

La conduction d'électricité dans un solide est garanti par des charges ou porteurs pouvant être des trous ou des électrons. Un matériau est alors dit conducteur, s'il possède une concentration élevée de porteurs libres. Dans ce cas, la résistivité augmente avec la température. Par contre, on dit qu'un matériau est isolant si sa concentration en électrons libres est peu élevée, sa résistivité varie en sens inverse de la température. Entre ces deux types, on parle du semi-conducteur qui est un mauvais isolant et un mauvais conducteur à température ambiante (300K).

3-2-3. Matériaux cristallins

Un matériau à l'état cristallin est formé d'atomes présentant un arrangement périodique. Considérons maintenant un cristal. C'est un arrangement périodique d'atomes dans les trois directions de l'espace. Les plans de plus haute compacité atomique sont les plans (100). Pour les matériaux monocrystallins, l'orientation la plus connue est représentée par la découpe suivante :

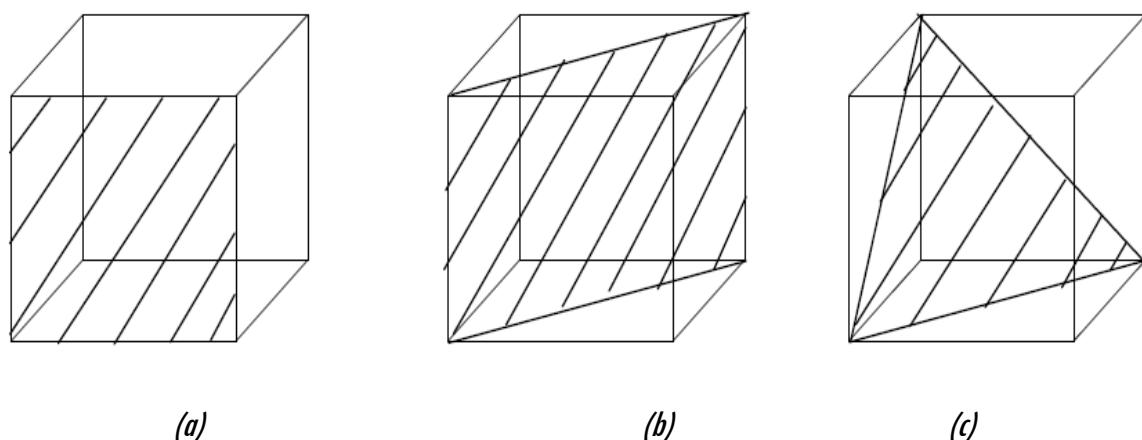


Figure 3 : Indices de Miller d'un réseau cubique : (a) Plan (100) ; (b) Plan (110) ; (c) Plan (111)

3-2-4. Semi-conducteur de type N

Si l'on a admis dans le silicium ou le germanium (groupe IV) des atomes d'arsenic (groupe V), on forme un semi-conducteur de type N. Parmi les cinq électrons périphériques de l'atome étranger, quatre seulement seront impliqués dans les liaisons covalentes ; le cinquième électron est faiblement lié. Notons bien que cet électron est en excès au point de vue de sa position, mais non en tant que charge : le cristal reste neutre après le dopage. La concentration en électrons libres se trouve alors augmentée et par conséquent, la conductibilité augmente. Il s'agit ici d'une conductibilité de type N.

3-2-5. Semi-conducteur de type P

De façon analogue, on peut introduire dans le réseau cristallin de base, groupe IV, des atomes du groupe III présentant un rayon covalent voisin. Facilement, l'atome étranger prendra place dans la structure cristalline du réseau, mais ne peut fournir que trois électrons de valence. Cet atome tend à capturer un électron voisin afin de compléter les liaisons covalentes. A chaque atome trivalent, ainsi introduit, correspond donc une particule positive qui peut vagabonder au même titre qu'un autre porteur de charge. On augmente ainsi la conductibilité du cristal, qui devient extrinsèque de type P.

3-2-6. Jonction PN

Les électrons de la zone N diffusent vers la zone P et les trous de la zone P diffusent vers la zone N. Il y a donc formation d'une charge d'espace constituée donc par les ions donneurs positifs dans la zone N et les ions accepteurs négatifs dans la zone P. Du fait de la présence de ces ions de part et d'autre de la jonction il existe un champ qui tend à ramener les charges. L'équilibre est atteint lorsque le courant du champ, est égal au courant de diffusion.

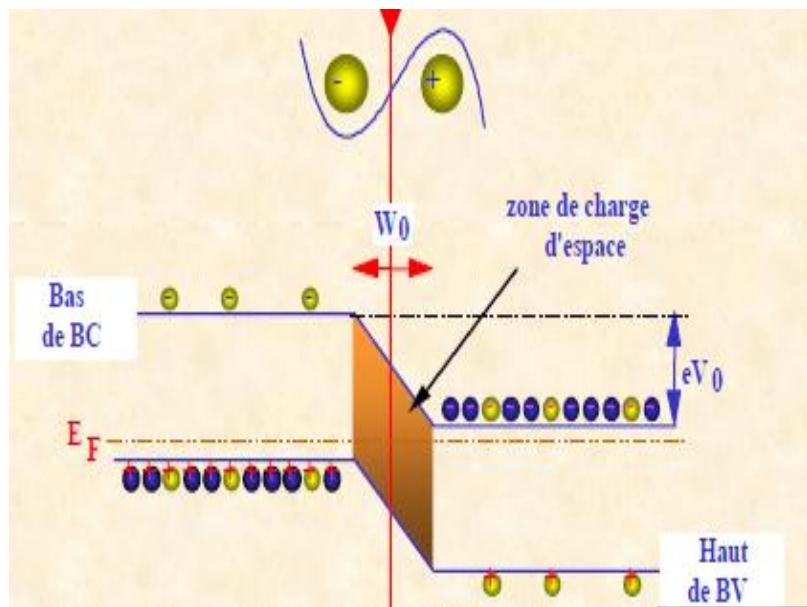


Figure 4 : Représentation de la jonction PN

3-3. Application de la statistique de Fermi-Dirac

3-3-1. Distribution et niveau Fermi

La fonction $f_n(E)$ est la probabilité d'occupation (à l'équilibre) d'un niveau d'énergie E par un électron est donnée par la statistique de Fermi-Dirac.

$$f_n(E) = \frac{\text{nombre de cases occupées par les électrons}}{\text{nombre de cases disponibles}} = \frac{n(E)dE}{n_c(E)dE}$$

$$f_n(E) = \frac{1}{1 + e^{\frac{E-E_F}{kT}}} \quad (18)$$

Voici les courbes représentatives de $f_n(E)$:

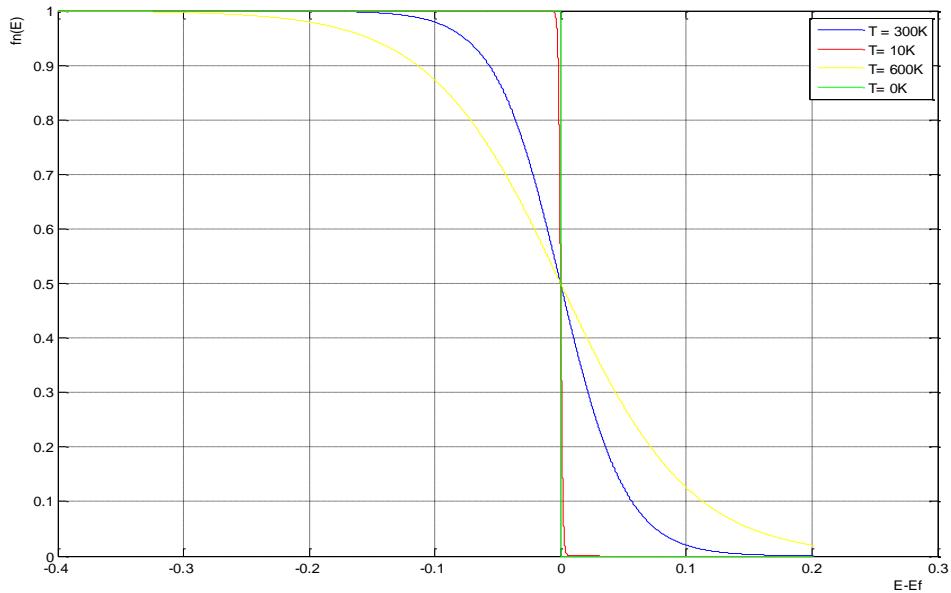


Figure 5 : Évolution de la probabilité en fonction de $E - E_F$ et de la température

- *Interprétation*

E_F étant le niveau de Fermi, qui correspond à une probabilité d'occupation égale à 1/2, quelle que soit la température T. La figure (3) donne l'évolution de $f_n(E)$ en fonction de la différence $E - E_F$ et de la température. Elle permet d'observer que sa valeur fluctue plus ou moins rapidement de 1 à 0 en passant toujours par 0,5 pour $E - E_F = 0$. La probabilité $f_p(E)$ qu'un niveau E soit occupé par un trou est complémentaire de la probabilité $f_p(E)$ $f_p(E) = 1 - f_n(E)$

$$\text{d'où } f_p(E) = \frac{1}{1 + e^{\frac{E_F - E}{kT}}} \quad (19)$$

Dans le cas où la différence $E - E_F$ est supérieure à quelques kT , l'éq (19) se simplifie en constatant que le terme en exponentiel est fortement supérieur à 1

$$\text{donc } E - E_F \gg kT \Leftrightarrow \frac{E_F - E}{kT} \gg 1 \text{ et } 1 + e^{\frac{E_F - E}{kT}} \approx e^{\frac{E_F - E}{kT}} \text{ alors } f_n(E) = e^{-\frac{E - E_F}{kT}}, \quad (20)$$

Ce qui correspond à la statistique de Boltzmann. Dans le cas où $E_F - E$ supérieur à quelques kT , On a l'approximation suivante $E - E_F < -kT$ et $E_F - E > k \Rightarrow \frac{E_F - E}{kT} > 1$ donc

$$1 + e^{\frac{E_F - E}{kT}} \approx e^{\frac{E_F - E}{kT}} \text{ d'où } f_p(E) = e^{-\frac{E_F - E}{kT}} \quad (21)$$

Pour un semi-conducteur intrinsèque le niveau de Fermi est appelé « niveau de Fermi intrinsèque » E_{F_i} se situe près du milieu de la bande interdite E_i avec $E_i = \frac{(E_c + E_v)}{2}$

- Si $E_F > E_{F_i} \Rightarrow$ semi-conducteur type N
- Si $E_F < E_{F_i} \Rightarrow$ semi-conducteur type P

3-3-2. Densité d'états (conduction et valence)

Nombre de « places » pour les électrons (dans la Bande de conduction)

$n_c(E)dE$: Nombre d'états (m^3) dans la « tranche » d'énergie $E, E + dE$ donc $n_c(E)$ en $m^{-3}J^{-1}$ ou $m^{-3}eV^{-1}(m^{-3})$

Soit $n_c(E)dE = g(k) d^3k$

Dans un espace à trois dimensions, cette densité est égale à $\frac{2}{(2\pi)^3}$. On en déduit l'expression de la densité d'états dans l'approximation des bandes paraboliques en utilisant le fait que les surfaces iso énergétique ($E = \text{constante}$), si m_n est isotope, sont des sphères dans l'espace des k .

alors $d^3k = 4\pi k^2 dk$

Comme : $E = \frac{p^2}{2m_n}$ avec $p = \hbar k$

Donc : $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_n}$ car $E = E(p) - E_i dE = \frac{\hbar^2}{m_n} k dk$

$$\text{alors } n_c(E) = p = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m_n}{\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}} (E - E_c)^{\frac{1}{2}} \quad (22)$$

De même pour les trous dans la bande de valence, on obtient comme densité d'états

$$\text{Donc } n_V(E) = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m_p}{\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}} (E_V - E)^{\frac{1}{2}} \quad (23)$$

3-3-3. Concentration à l'équilibre, loi d'action de masse

La concentration en électrons libres à l'équilibre n_0 est obtenue en sommant, pour tous les niveaux d'énergie de la bande de conduction, le produit de la densité d'état $n_c(E)$ (nombre de places libres dans la bande de conduction) par la probabilité d'occupation de ces places $f_n(E)$:

$$n_0 = \int_{BC} n(E) dE \\ n_0 = \int_{E_c}^{+\infty} n_c(E) f_n(E) dE = N_c e^{-\frac{E_c - E_F}{kT}} \quad (24)$$

où, $n(E)$ représente la distribution en énergie des électrons dans la bande de conduction. Pour pouvoir effectuer l'intégration, on considère que le semi-conducteur n'est pas dégénéré, c'est-à-dire que le niveau de Fermi reste dans la bande interdite en respectant les inégalités $E_c - E_F$ supérieur quel que soit kT et $E_F - E_V$ supérieur quelle que soit la valeur de kT . En utilisant alors l'expression correspondante de $f_n(E)$, (équation (20) dite « approximation de Boltzmann ») et celle de $n_c(E)$ (Équation (22)). On intègre l'Équation (24) pour obtenir : $N_c = 2 \left(\frac{2m_n \pi k T}{h^2}\right)^{\frac{3}{2}}$. Alors la densité équivalente d'états dans la bande de conduction ramenée en E_c vaut :

$$N_c = 2 \left(\frac{2m_n \pi k T}{h^2}\right)^{\frac{3}{2}} \quad (25)$$

3-3-4. Détermination de la densité de trous dans la bande de valence

Pour trouver la densité de trous dans la bande de valence il faut procéder de la même que pour les électrons mais en utilisant la densité d'états $n_V(E)$ et la probabilité d'occupation $f_p(E)$.

donc,

$$p_0 = \int_{-\infty}^{E_V} n_V(E) f_p(E) dE$$

Alors la densité équivalente d'état dans la bande de valence ramenée en E_V donne :

$$N_V = 2 \left(\frac{2m_p \pi kT}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}} \quad (26)$$

Tracage des densités comme : $N_V = 2 \left(\frac{2m_p \pi kT}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}}$ et $N_c = 2 \left(\frac{2m_n \pi kT}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}}$

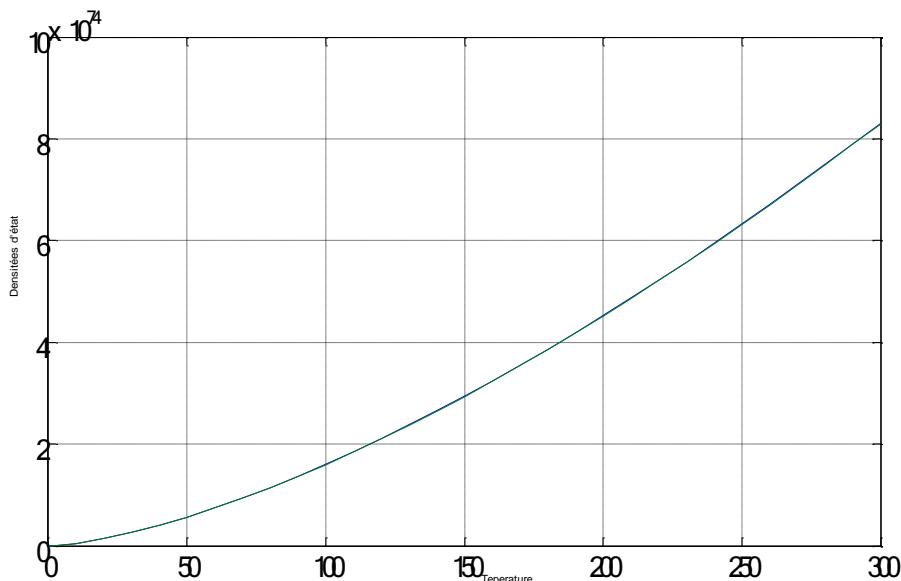


Figure 6 : Représentations graphique des densités d'états

Ces deux courbes qui sont confondues (valeur de la masse de proton et de neutron sont presque égales) représentent l'évolution de la température au niveau de la densité d'état dans la bande de valence et celle dans la bande de conduction. Cette représentation graphique, montre la répartition qualitative des électrons et des trous dans la bande de conduction et la bande de valence. Ce qui confirme l'apparition de la densité énergétique des porteurs libres.

3-3-5. Statistique de Fermi Dirac appliquée sur les particules se trouvant dans les deux niveaux d'énergies différentes

Etant donné un gaz monoatomique formé d'un grand nombre N de particules. Chacune d'elles ne peut avoir que deux niveaux propres (1) et (2) d'énergies respectives : $\mathcal{E}_1 = 0$ et $\mathcal{E}_2 = \mathcal{E}$ ($\mathcal{E} > 0$). Les dégénérances de ces deux niveaux sont égales et très élevées : $g_1 = g_2 = g$. Ces particules sont supposées des fermions.

On se propose de déterminer les nombres : N_1 et N_2 qui se trouvent dans les niveaux (1) et (2) respectivement en fonction des paramètres du texte.

$$\text{donc } N_1 = \frac{g}{e^\alpha + 1} \text{ et } N_2 = \frac{g}{e^\alpha e^{\frac{\varepsilon}{kT}} + 1} \quad \text{puisque } N = N_1 + N_2$$

$$\text{alors } N = \frac{g}{e^\alpha + 1} + \frac{g}{e^\alpha e^{\frac{\varepsilon}{kT}} + 1}$$

$$\Rightarrow N(e^{2\alpha} e^{\frac{\varepsilon}{kT}} + e^\alpha \cdot e^\alpha e^{\frac{\varepsilon}{kT}} + 1) = g(e^\alpha + e^\alpha e^{\frac{\varepsilon}{kT}} + 2)$$

$$\Rightarrow Ne^{\frac{\varepsilon}{kT}}(e^\alpha)^2 + (N-g)(1+e^{\frac{\varepsilon}{kT}})e^\alpha + N - 2g = 0 \quad (27)$$

C'est une **Équation** du second degré. Nous calculons d'abord le discriminant delta,

$$\begin{aligned} \Delta &= (N - g)^2 (1 + e^{\frac{\varepsilon}{kT}})^2 - 4Ne^{\frac{\varepsilon}{kT}}(N - 2g) \\ &= (1 + e^{\frac{\varepsilon}{kT}})^2 - 4N^2 e^{\frac{\varepsilon}{kT}} + 8Nge^{\frac{\varepsilon}{kT}} + 4g^2 e^{\frac{\varepsilon}{kT}} - 4g^2 e^{\frac{\varepsilon}{kT}} \end{aligned}$$

$$\text{donc } \Delta = (N - g)^2 (1 - e^{\frac{\varepsilon}{kT}})^2 + 4g^2 e^{\frac{\varepsilon}{kT}} \Delta \text{ est toujours positif.}$$

Si $N < 2g$, il n'y pas de solution

Si $N > 2g$, il y a une solution

$N = 2g$ est la valeur maximale, alors

$$e^\alpha = \frac{-(N-g)(1+e^{-\frac{\varepsilon}{kT}})\sqrt{(N-g)^2(e^{-\frac{\varepsilon}{kT}}-1)^2+4g^2e^{-\frac{\varepsilon}{kT}}}}{2N} \text{ en remplaçant } e^\alpha \text{ par son expression on a donc :}$$

$$N_1 = \frac{2Ng}{-(N-g)\left(1+e^{-\frac{\varepsilon}{kT}}\right)\sqrt{(N-g)^2\left(e^{-\frac{\varepsilon}{kT}}-1\right)^2+4g^2e^{-\frac{\varepsilon}{kT}}+2N}} \quad (28)$$

On se propose d'étudier les cas suivants :

a) si $T \rightarrow 0 \Leftrightarrow \frac{1}{T} \rightarrow \infty$. on pose $x = e^{-\frac{\varepsilon}{kT}} \Leftrightarrow x \rightarrow 0$ si $T \rightarrow 0$

$$N_1 = \frac{2Ng}{2N} \Rightarrow N_1 = \frac{N}{1+\frac{gx}{N-g}} \Rightarrow N_1 = N - \frac{Ng}{N-g} x$$

$$\text{d'où } N_1 = N - \frac{Ng}{N-g} e^{-\frac{\varepsilon}{kT}} \quad N_1 \rightarrow N \text{ si } T \rightarrow 0 \quad (29)$$

b) si $T \rightarrow \infty \Leftrightarrow \frac{1}{T} \rightarrow 0$ on pose $x = e^{-\frac{\varepsilon}{kT}} \Leftrightarrow x \rightarrow 1$

$$N_1 = \frac{2Ng}{-(N-g)(2)\sqrt{(N+g).0+4g^2}+2N} \Rightarrow N_1 = \frac{1}{2}N$$

On va exprimer N_2 en remplaçant e^α , donc :

$$N_2 = \frac{2Ng}{-(N-g)\left(1+e^{\frac{\varepsilon}{kT}}\right)\sqrt{(N-g)^2\left(1-e^{\frac{\varepsilon}{kT}}\right)^2 + 4g^2e^{\frac{\varepsilon}{kT}} + 2N}}$$

a) si $T \rightarrow 0 \Rightarrow \frac{1}{T} \rightarrow \infty \Rightarrow 1 + e^{\frac{\varepsilon}{kT}} \approx e^{\frac{\varepsilon}{kT}}$

donc $N_2 = \frac{2Ng}{-\frac{\varepsilon}{(N-g)e^{\frac{\varepsilon}{kT}}} + \frac{\varepsilon}{e^{\frac{\varepsilon}{kT}}}\sqrt{(N-g)^2 + 4g^2e^{-\frac{\varepsilon}{kT}} + 2N}} \Rightarrow N_2 = \frac{Ng}{N-g} e^{-\frac{\varepsilon}{kT}}$ (30)

a) si $T \rightarrow \infty \Rightarrow \frac{1}{T} \rightarrow 0 \Rightarrow e^{\frac{\varepsilon}{kT}} \rightarrow 1 \quad N_1 \rightarrow 0 \text{ si } T \rightarrow 0$

$N_2 = \frac{2Ng}{-2N+2g+2g+2N}$ d'où $N_2 = \frac{1}{2}N$

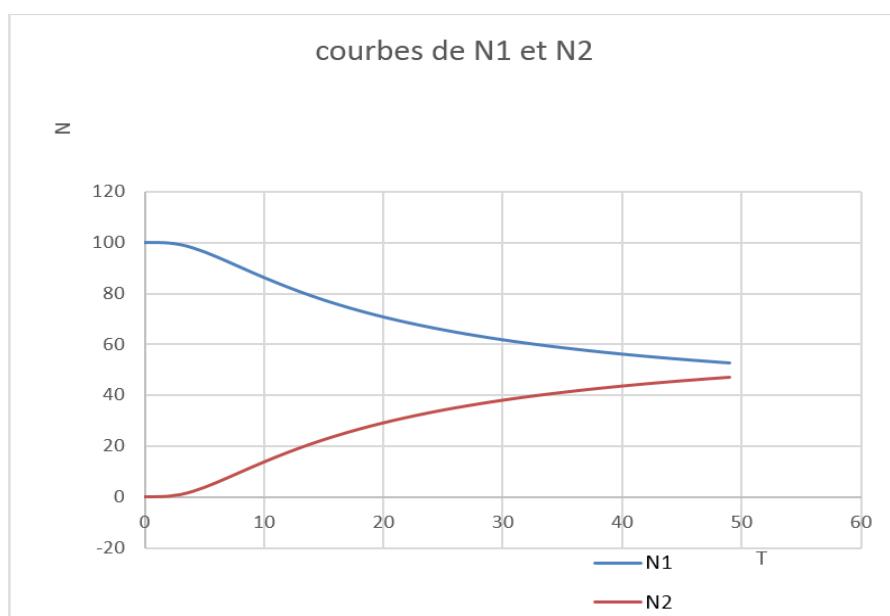


Figure 7 : Représentation graphiques de nombre des particules

Ces deux courbes représentent l'évolution de nombres des particules en fonction de température .On remarque qu'elles sont symétriques par rapport à la moitié du nombre des particules choisies, ce qui confirme l'étude théorique de leurs comportement dans les zones de hautes températures au programme. La monotonie croissante pour N_2 et décroissante pour N_1 puisque ces deux courbes ne se coupent pas, est valable pour de faible valeur d'énergie.

4. Conclusion

Les applications de la mécanique statistique de Boltzmann et de Fermi-Dirac ont permis de déterminer en détails les différentes grandeurs physiques évoquées dans le problème proposé. Pour la marche au hasard, grâce à la probabilité trouvée à partir de la formule de la statistique de Boltzmann, nous avons pu déterminer la valeur moyenne, la valeur la plus probable et l'écart quadratique moyen. Ces deux premières valeurs sont identiques à cause de l'isotropie des milieux considérés. Nous avons considéré un milieu continu pour

pouvoir utiliser la loi gaussienne à fin de vérifier les résultats obtenus ci-dessus. En effet on a trouvé que \bar{x} (valeur moyenne) est égale à \tilde{x} (valeur la plus probable). Cette étude permet de dire qu'il existe des bandes de conductions, c'est-à-dire des niveaux d'énergie où peuvent se trouver les électrons, et des bandes interdites, c'est à dire des valeurs de l'énergie où il ne peut y avoir aucun électron. Comprendre ces bandes autorisées et interdites permet d'expliquer pourquoi certains matériaux sont isolants, conducteurs, ou semi-conducteurs. Nous avons pu tracer les courbes des niveaux d'énergie de Fermi-Dirac à différentes température, les courbes de l'évolution de la température des densités d'états.

Références

- [1] - ANDRE-MARIE TREMBLAY, « PHYSIQUE STATISTIQUE PHQ 340 », révision automne, (2015)
- [2] - OLIVIER CASTERA, THERMODYNAMIQUE STATISTIQUE, (18 mars 2012)
- [3] - ASMAA ABADA, JEAN - LUC RAIMBAUT, Introduction à la physique statistique, (2013 - 2014)
- [4] - BAHRAM HOUCHMANDZADEH, « cours de physique statistique » Grenoble Universités Département de Physique, (24 Février 2014)
- [5] - ERIC BRUNET, ELIE WANDRSMAN JEROME BEUGNON, «Cours de physique statistique», (8 septembre 2015)
- [6] - TALLA KWET CLEMENT, " EFFET D'UNE BARRIERE DE POTENTIER SUR LES CARACTERISTIQUES DYNAMIQUE DU SOLITION DANS LES CONDENSAT DE BOSE - EINSESTEIN " MEMOIRE DE DIPES II © 2011 / 2012
- [7] - PIERRE DUSART, « Cour de Statistique Inferentielles L2, S4, SI, MASS » Année, (2015)
- [8] - J.-N. AQUA, G. FEVE, C. MORA, N. POTTIER, D. SIMON et F. VAN WIJLAND, FORMATION INTERUNIVERSITAIRE DE PHYSIQUE- L3 PHYSIQUESTATISTIQUE DES SYSTEMES A L'EQUILIBRE (L1), TRAVAUX DIRIGES, (2012 - 2013)
- [9] - Semiconductor Components Industries, LLC Décembre, (2014)
- [10] - YANN VALLS, Elément de Physique de Semi-conducteur Université d'Orléans, (2009 - 2010)
- [11] - VINCENT ROBERT, thermodynamique statistique préparation à l'agrégation de chimie, (2015 - 2016)
- [12] - PATRICK ROSIER (MCF- CIRIMAT), Science des matériaux UNIVERSITE PAUL SABATTER, (Année 2013 - 2014)
- [13] - ANTHONY BARBOT, Dopage co- sublimation de semi- conducteurs organique pour la conversion en énergie : Application aux cellules photovoltaïque << submitted on 21 Apr 2015>>
- [14] - G. GLOSE, Conduction dans le semi- conducteurs à rendre le, (18 novembre 2015)
- [15] - MICHEL ARMATTE, Statut de la Dispersion de l'erreur à la variabilité Journal Electronique d' Histoire des probabilités et de la Statistique, Vol. 6, N° 1 (Juin 2010)
- [16] - NICOLAS CHIREUX, SCHEMAS MECANIQUE STATISTIQUE, (29 Aout 2014)
- [17] - Y VELENIK, Probabilités et statistique version du (24 mai 2012)
- [18] - A. M. SONNET, R. V. GALATAGE, P. K. HUILEY, E. PELERCCHI, K. K. THOMAS, A. GOKALINSKA, J HUNG, N. GOEL, G. BERUKER, W. P. KIRK, C. L. HINKLE, R. M. WALLACE, E. M. VOGEL, On the calculation of effective electric field in $I_{no.53}G_{ao.47}A_s$ surface channel metal-oxide-semiconductor field-effect- transistor Applied Physics Lette, Vol. 98, (2011) 19351 p.
- [19] - LIN, LAND ROBERTSON, J. Defect States at III-V Semiconductor oxide intrfacesApplied Letters, Vol. 98 (2011) 02903 p.
- [20] - ENGEL-HRBERT, R. HWANG, Y. and S. STEMMER, Comparaison of methods to quantify interfacetrap densities at dielectric/ III-Vsemiconductor interfacesJournal Applied physics, Vol. 108, (2010) 12410-1-12410-15 p.
- [21] - A ISLAM, K. KALNA, Monte Carlo Simulation of mobility in doped GaAs using Self-consistentFermi- Dirac statistics.Semicond.Sci.Technol, Vol. 26, (2011) 055007 p.

- [22] - MING SHI SIMULATION MONTE CARLO DE MOSFETA BASE DE MATERIAUX III –V POUR HAUTE FREQUENCE ULTRA BASSE CONSOMATION soutenue le 27 Janvier 2012
- [23] - PAUL - ANTOINE, Hervieux unistra / IPCMS physique statistique L3 phys, (2013 - 2014)
- [24] - HALOGEN TREE, « Vishay General Semiconductor » Révision, (10 Décembre 2013)
- [25] - BOUROUBA FARID modélisation et simulation des contacts métal semi-conducteur A BARRIERE INHOMOGENE soutenue le, (5 octobre 2010)
- [26] - JEAN MARIE, « Probabilités et Statistique DUT GMP, UIT de Renne » Lion, (22 Juin 2015)
- [27] - BEROUIDJEL ZINEB DISPOSITIF de réalisation de couches antireflets à base de Tio 2 sur le silicium monocristallin. Soutenue le 06 juillet 2011 devant la commission de jury
- [28] - OLIVIER CASTERA, THERMODYNAMIQUE STATISTIQUE, (18 mars 2012)
- [29] - ARTHUR CHARPENTIER, Christophe DUTANG « L'actuariat avec R », (Décembre 2012)
- [30] - BERNARD SCHNETZLER, Un algorithme dérivé de l'algorithme de Metropolis (C.R.Acad.Sci.Paris,Ser.I) *Historique de l'article* : Reçu le 30 juin 2015 Accepté le 4 octobre 2017. Disponible sur Internet le 16 oct 2017
- [31] - ANTHONY BARBOT, « Dopage par Co-sublimation de semi-conducteurs organiques pour la conversion en énergie ; applications aux cellules photovoltaïques » Docteur de l'université de LIMOGES le 1^{er} octobre 2014