

**LA COMPREHENSION DU PTA DES MILIEUX  
DESORDONNES PEUT ELLE ÊTRE ETENDUE  
AUX MILIEUX ORDONNES ?**

**Jean-Georges GASSER**

Laboratoire de Physique des Milieux Dense, Institut  
de Chimie, Physique et Matériaux,  
Université Paul Verlaine - Metz, 1 Bd Arago, 57078  
Metz cedex 3, France.

Ceci est la synthèse d'un travail  
effectué avec la collaboration de  
**Prof. Joseph HUGEL**

Et de différents doctorants:  
**Dr. A. Makradi,**  
**Dr. H. Zrouri,**  
**Dr. A. Ben Abdellah.**

# LES COEFFICIENTS DE TRANSPORT ELECTRONIQUE

Cause

Effet

Propriétés physiques

Gradient de température

Densité de Flux de chaleur

Conductivité Thermique  $\lambda$

$$\vec{Q}_e = -\lambda \vec{\nabla} T$$

$$\vec{J}_e = -\sigma \vec{\nabla} V = \sigma \vec{E}$$

Gradient de potentiel

Densité de courant

Conductivité Électrique  $\sigma$

Effets croisés: 3 effets thermoelectriques:

- Effet Seebeck ou Pouvoir Thermoélectrique Absolu  $S_A$
- Effet Peltier  $\pi_A$
- Effet Thomson  $h_A(T)$

On trouve une relation entre  $\pi$  et  $S$   $\pi = \frac{-K_{21}}{K_{12}} T_K S = T_K S$

C'est la première relation de **Kelvin-(Onsager)**;

$$h = T_K \frac{dS}{dT_K} \quad \text{d' où} \quad S = \int_{T=0}^T \frac{hdT}{T_K}$$

La **seconde relation de Kelvin relie le** coefficient de Thomson **h** au coefficient de Seebeck **S**

$$\lambda = \frac{(L_0 - S^2) T_K}{\rho} = (L_0 - S^2) T_K \sigma$$

La conductivité thermique est reliée à la conductivité électrique et au PTA. Négliger  $S$  conduit à la relation de Wiedemann-Franz

On **NE PEUT PAS** mesurer les coefficients de Seebeck et Peltier d'un composant élémentaire (élément pur ou alliage), car pour faire une mesure il faut toujours fermer le circuit avec un autre composant.

On peut uniquement mesurer la différence de coefficients Seebeck ou Peltier. **On peut mesurer l'effet Thomson d'un élément (métal ou alliage), mais c'est une expérience très difficile.**

En pratique ceci a été réalisé au « National Bureau of Standards » par Roberts pour du **platine très pur qui est maintenant l'étalon de thermoélectricité.**

Grâce à la seconde loi de Kelvin **on peut** déduire le coefficient de Seebeck d'un **élément**,

$$S = \int_{T=0\text{ K}}^T \frac{hdT}{T\text{ K}}$$

Si le calcul est poursuivi, on peut finalement montrer que l'on a (cf. Ziman principles of the theory of solids)

$$S(E) = \frac{\pi^2}{3} \frac{k_B^2 T_K}{e} \left[ \frac{\partial \ln \sigma(E)}{\partial E} \right]_{E = \mu_F}$$

**ou**

$$S(E) = \frac{\pi^2 k_B^2 T_K}{3|e|E} \left| \frac{\partial \ln(\rho(E))}{\partial \ln(E)} \right|$$

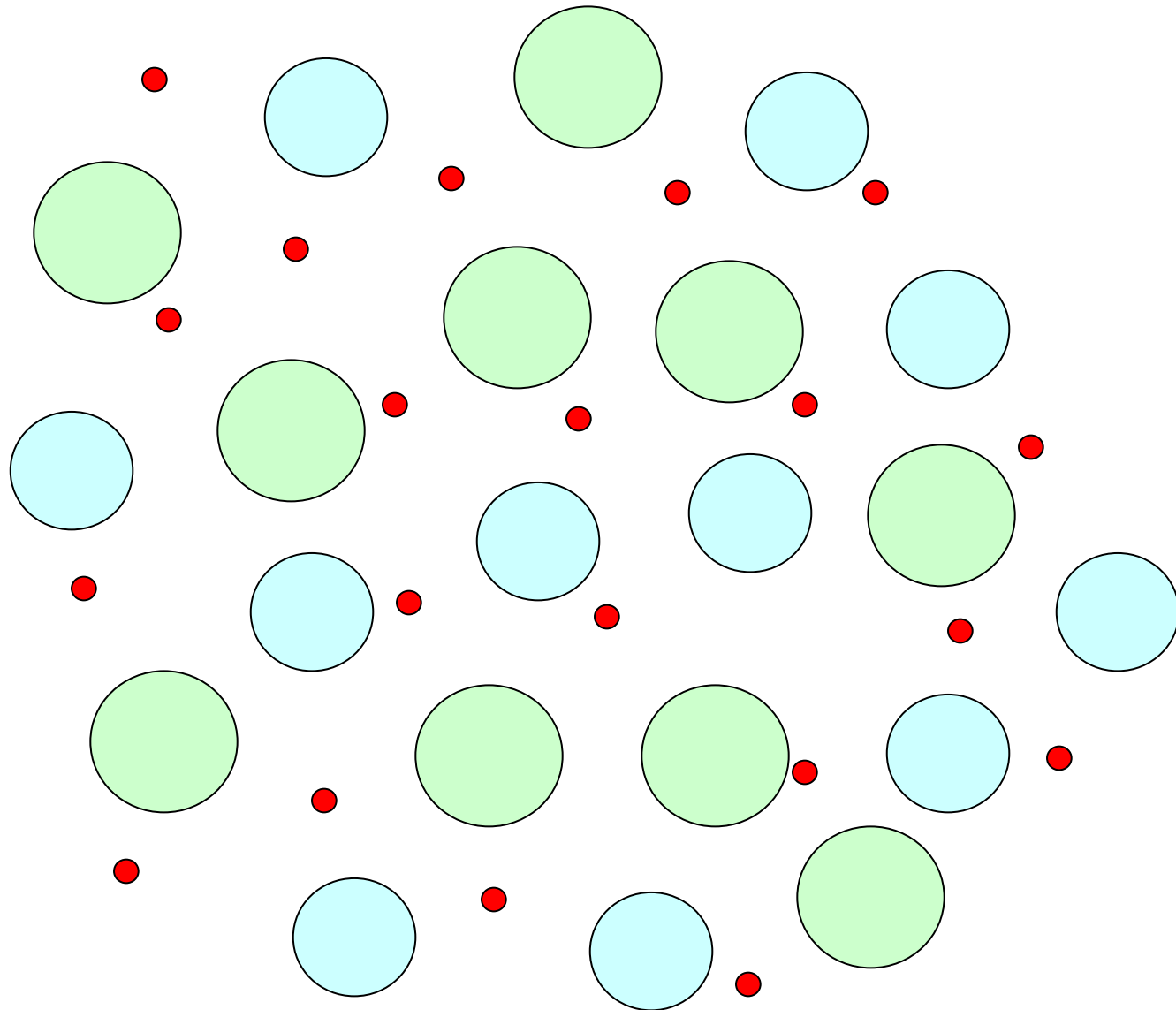
Le coefficient de Seebeck est proportionnel à la dérivée de la résistivité électrique par rapport à l'énergie

**Quelle est cette énergie ?**

# **COMPRÉHENSION DE LA PHYSIQUE DU TRANSPORT ÉLECTRONIQUE**

## **PROPRIÉTÉS DES MÉTAUX LIQUIDES ET ALLIAGES**

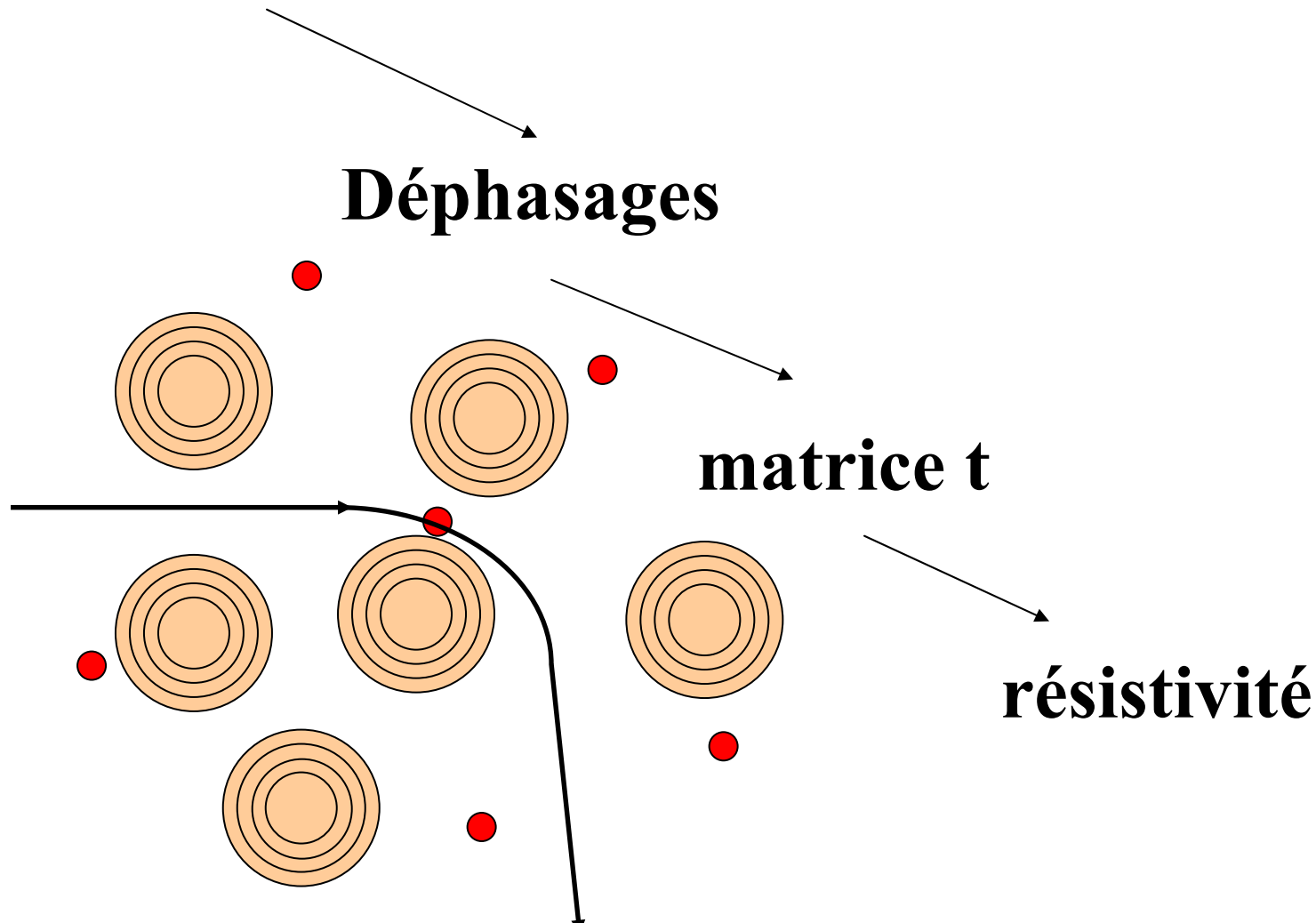
**Cette interprétation théorique vaut aussi  
bien pour les métaux liquides que pour les  
verres métalliques**



**Un alliage liquide (respectivement amorphe) est un arrangement plus ou moins aléatoire des ions et des électrons.**



# Diffusion par un potentiel

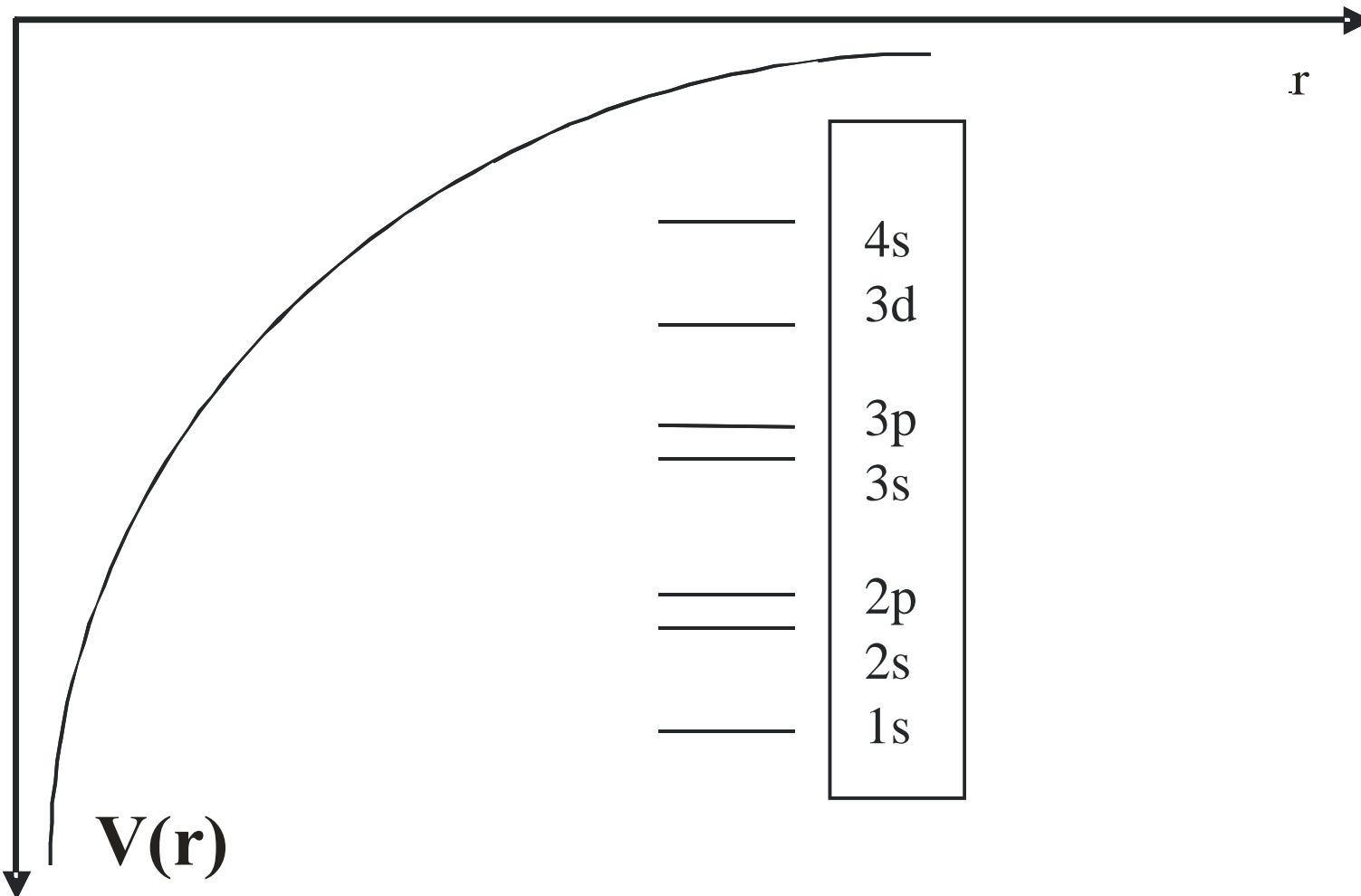


Les électrons sont diffusés par les ions en présence des autres électrons

**Les électrons internes se comportent comme les neutrons ou rayons de X diffusés par la matière dense**

# COMMENT PEUT ON OBTENIR LES PROPRIÉTÉS DE TRANSPORT ÉLECTRONIQUE DES MÉTAUX LIQUIDES ?

## 1) CONSTRUCTION UN POTENTIEL ATOMIQUE



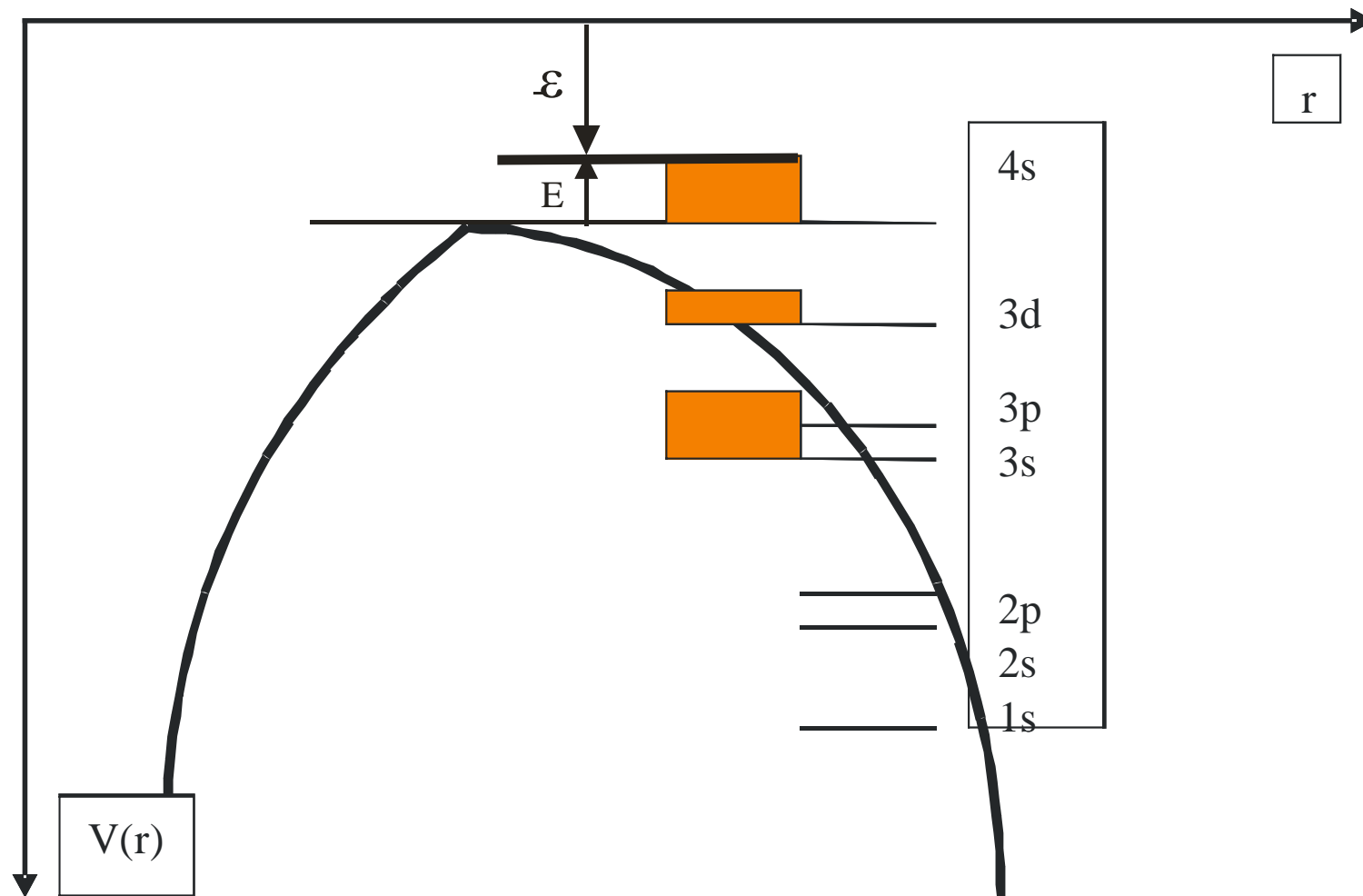
2) SUPERPOSITION DES POTENTIELS ATOMIQUES OU IONIQUES POUR  
CONSTRUIRE UN POTENTIEL POUR

LA **MATIÈRE DENSE DÉSORDONNÉE** (POTENTIEL « MUFFIN TIN »)

3) DÉTERMINATION DE L'ÉNERGIE DE FERMI

$\varepsilon$  est à l'énergie relative au vide (utilisée dans le formalisme des pseudopotentiels)

$E$  est l'énergie relativement à la valeur la plus élevée du potentiel)



# Effect of high temperatures (expanded metals)

$r$

$E_f$  level

4s band

$P = 1 \text{ bar}$

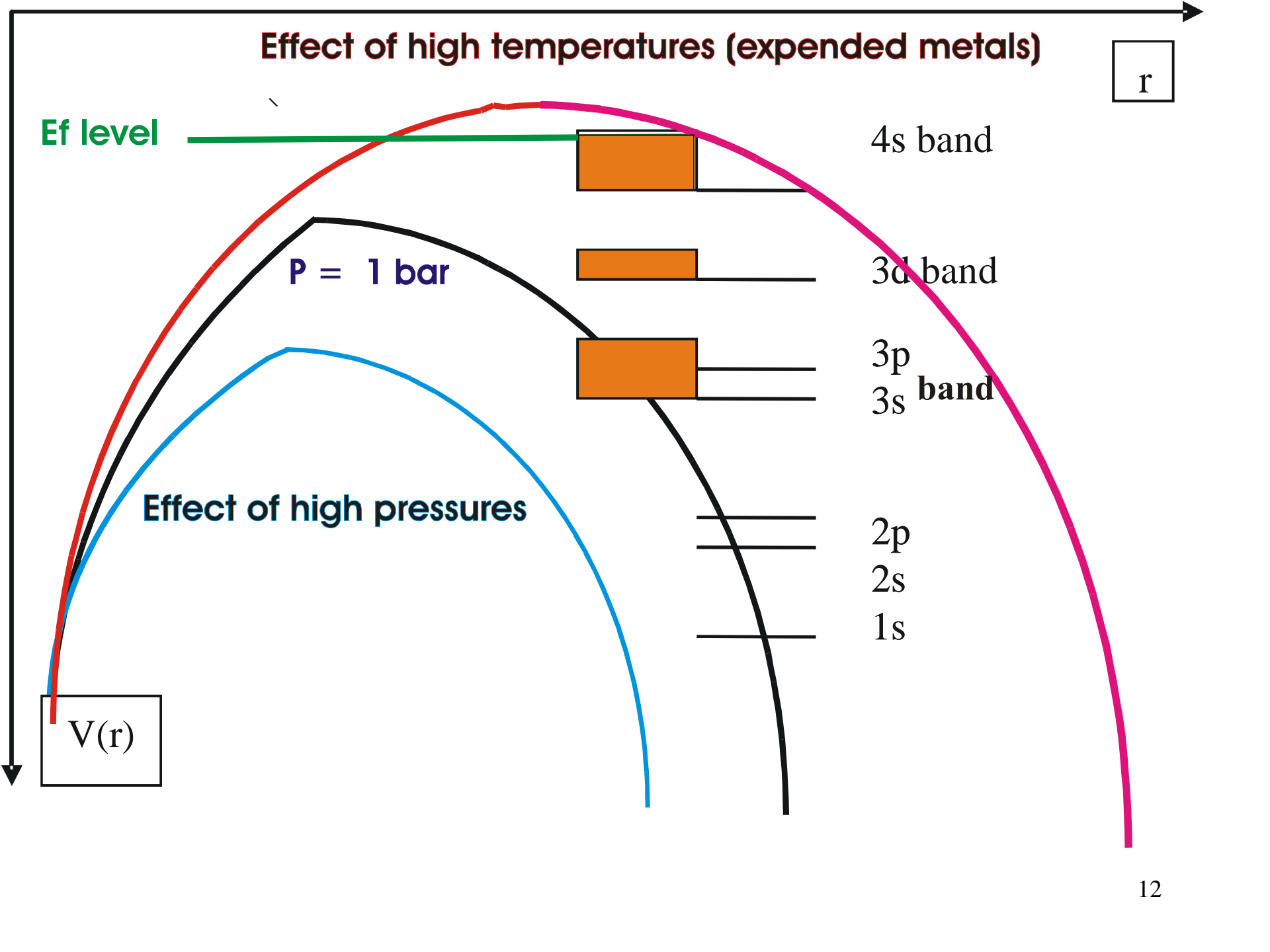
3d band

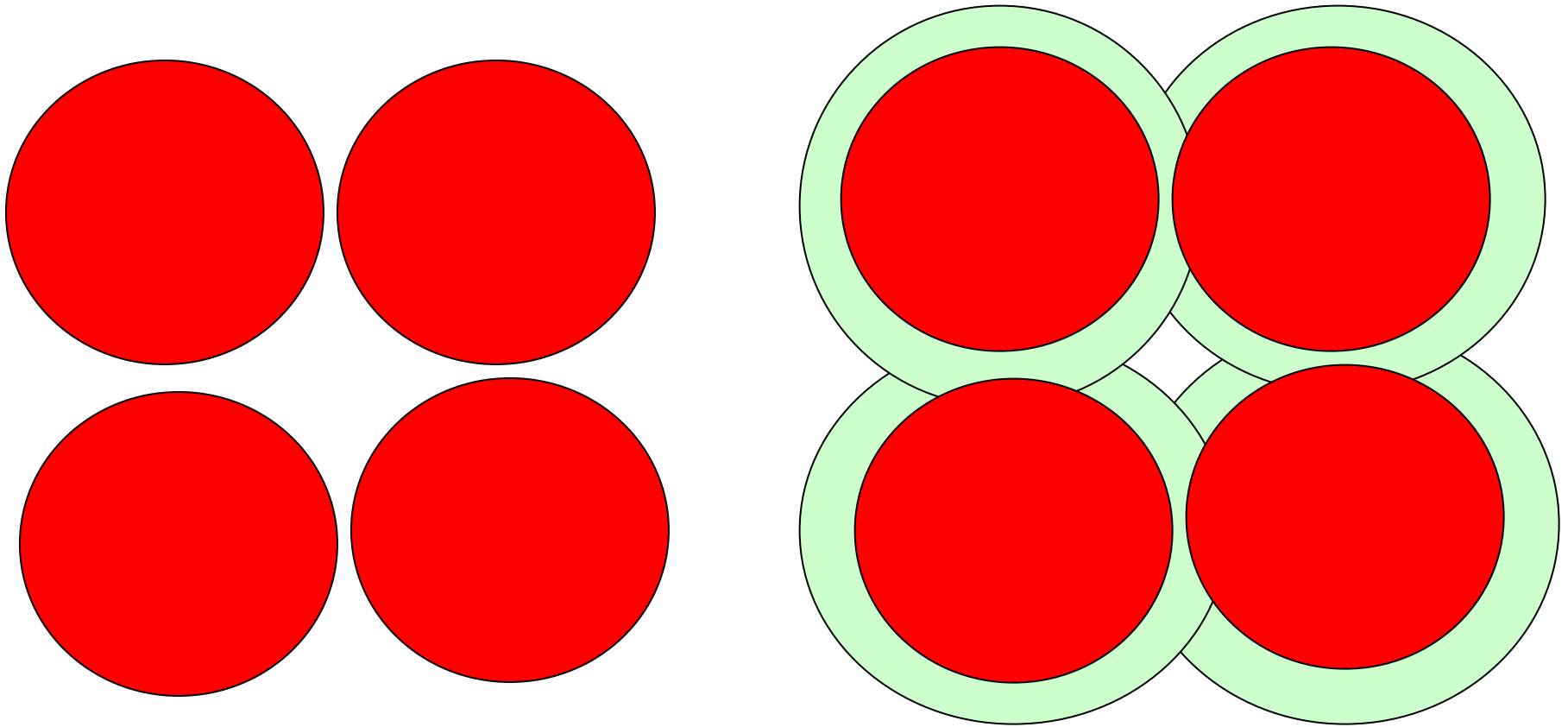
3p  
3s band

Effect of high pressures

2p  
2s  
1s

$V(r)$

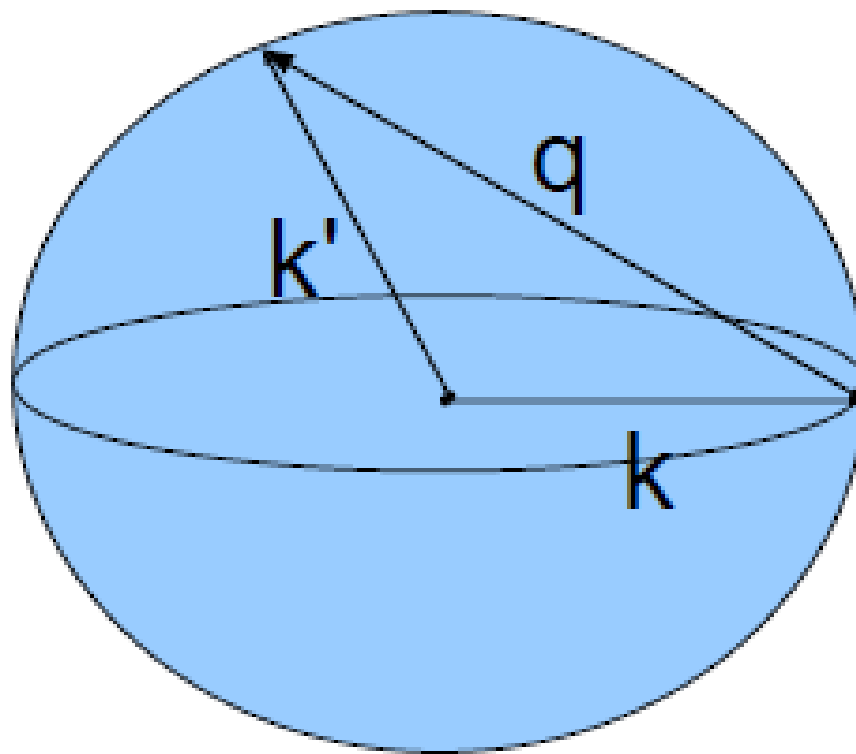




**Un potentiel sphérique est construit pour des valeurs de  $r$  entre 0 et le rayon de muffin tin  $R_{MT}$  (sphère rouge).**

**Pour tenir compte de la région interstitielle, un potentiel de recouvrement est construit entre le rayon  $R_{MT}$  de muffin tin et le rayon  $R_{WS}$  de Wigner Seitz (sphère verte)**





Un électron dans l'état  $k$  de la sphère de Fermi est diffusé à l'état  $k'$  de cette même sphère sous l'effet d'un potentiel  $V$

le vecteur de diffusion est  $q = k' - k$

L'état  $k$  doit être occupé, l'état  $k'$  doit être libre

On somme sur toutes les diffusions possibles

Tous les états à l'intérieur de la sphère de Fermi sont occupés

Tous les états à l'extérieur sont libres

### 3 - Résistivité et PTA. La formule de Ziman étendue :

$$\rho(E) = \frac{3\pi^2 m_e^2 \Omega_0}{4e^2 \hbar^3 k^6} \int_0^{2k} a(q) |t(q, E)|^2 q^3 dq$$

$-\Omega_0$  est le volume atomique-  $a(q)$  est le facteur de structure. La transformée de Fourier [g(r) - 1] de [a(q) - 1] définit g(r) la probabilité de trouver un atome à la distance  $r$  d'un atome d'origine. - Le carré de la matrice  $|t(q, E)|^2$  est caractéristique de la diffusion d'un électron par un potentiel muffin tin .

--  $q$  est le vecteur d'onde de transfert entre l'onde de l'électron incident et l'onde de l'électron diffusé.

$E$  est relié à  $k$  par

$$E = \hbar^2 k^2 / (2m^*) + E_B$$

avec :

$$t(q, E) = -\frac{2\pi\hbar^3}{m\sqrt{2mE}\Omega_0} \sum_{\ell} (2\ell + 1) \sin \eta_{\ell}(E) \exp(i\eta_{\ell}(E)) P_{\ell}(\cos \theta)$$

Dans la formule de Ziman, l'énergie apparaît dans le préfacteur ( $k^6$ ), dans la limite intégrale supérieure  $k$  et dans la matrice  $t$

$t(q, E)^2$  *Equation de Boltzmann – Factorisation - Théorie de la diffusion* <sup>16</sup>



Nous nous rappelons que le PTA est la dérivée de la conductivité (ou de la résistivité) par rapport à l'énergie

$$S(E) = \frac{\pi^2}{3} \frac{k_B^2 T_K}{e} \left[ \frac{\partial \ln \sigma(E)}{\partial E} \right]_{E = \mu_F}$$

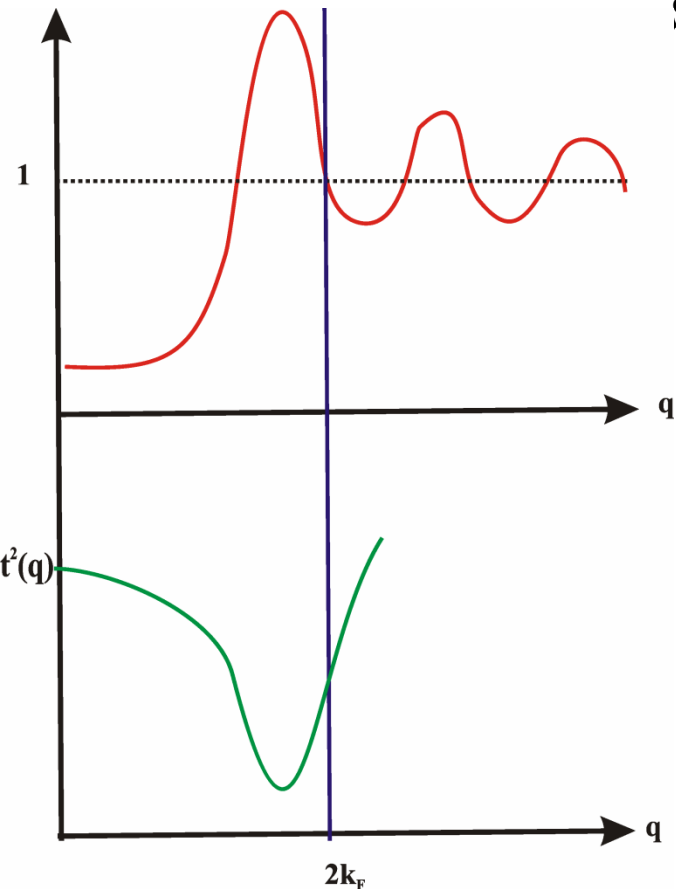
ou

$$S(E) = \frac{\pi^2 k_B^2 T_K}{3|e|E} \left| \frac{\partial \ln(\rho(E))}{\partial \ln(E)} \right|$$

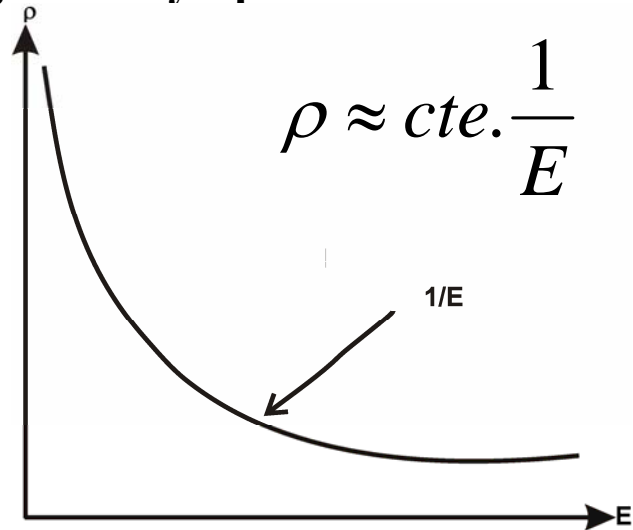
# Théorie de Ziman

L'approche d'électron libre de Ziman donne une assez bonne description de la résistivité et du PTA des métaux liquides.

$$\rho(E) = \frac{3\pi m^2}{4e^2 \hbar^3} \frac{\Omega}{k^6} \int_0^{2k} a(q) t^2(q, E) q^3 dq \quad S(E) = \frac{\pi^2 k_B^2 T_K}{3|e|E} \left| \frac{\partial \ln(\rho(E))}{\partial \ln(E)} \right| \quad E \cong \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

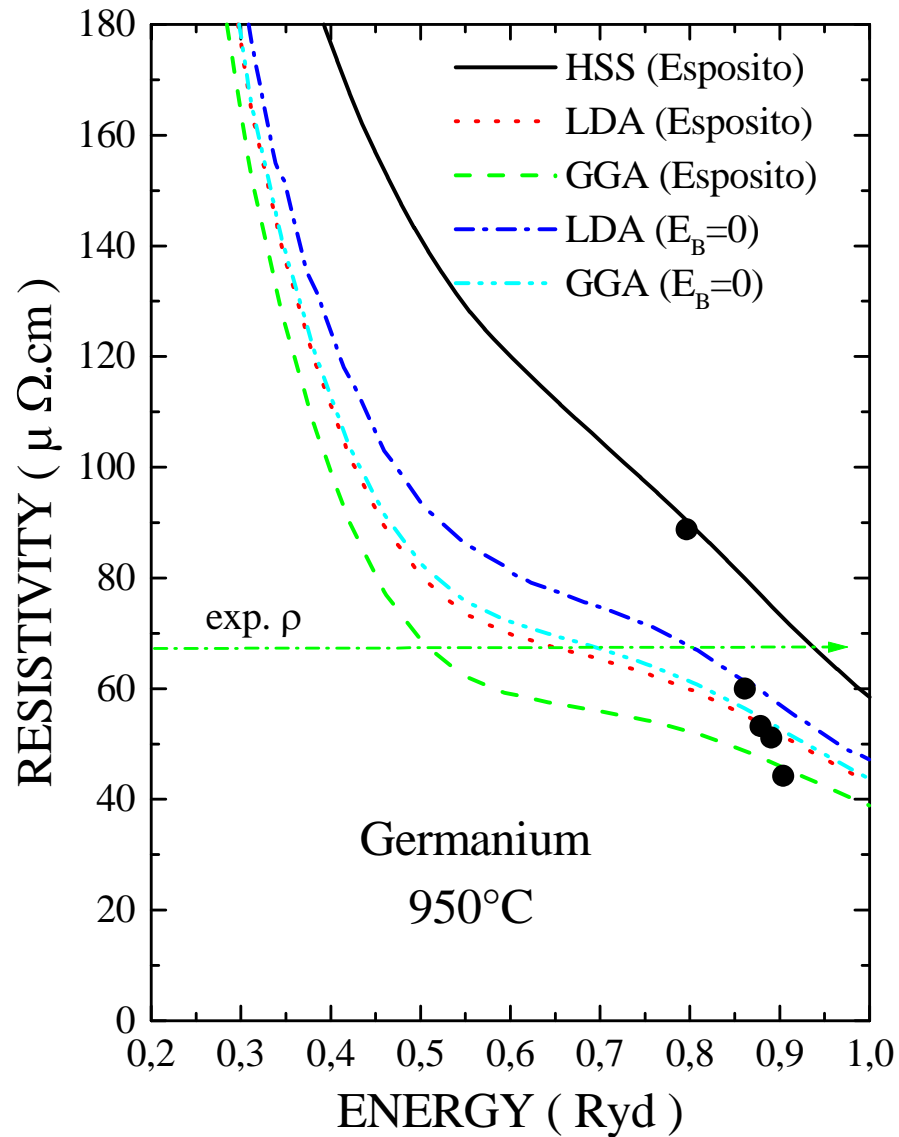


Si nous remplaçons le produit :  $a(q) t^2(q)$  par une constante on peut alors intégrer analytiquement. On obtient :

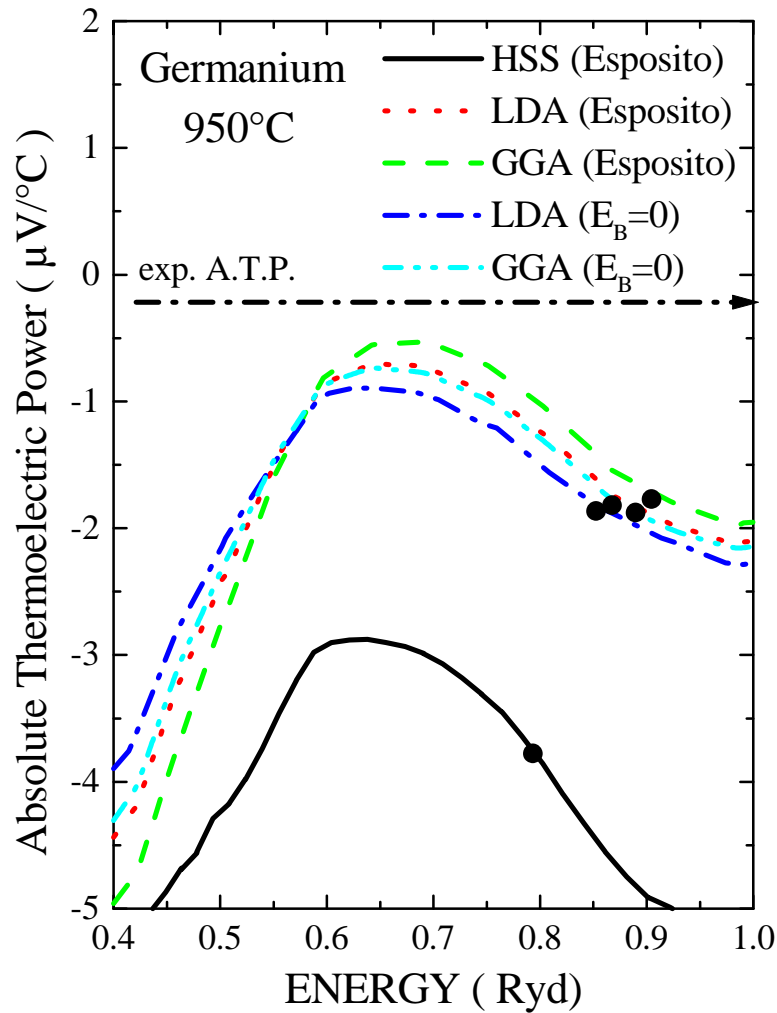


**Conséquence : le PTA des métaux liquide est toujours négatif**

**ESSAYONS DE  
COMPRENDRE LES  
RÉSULTATS  
EXPÉRIMENTAUX**

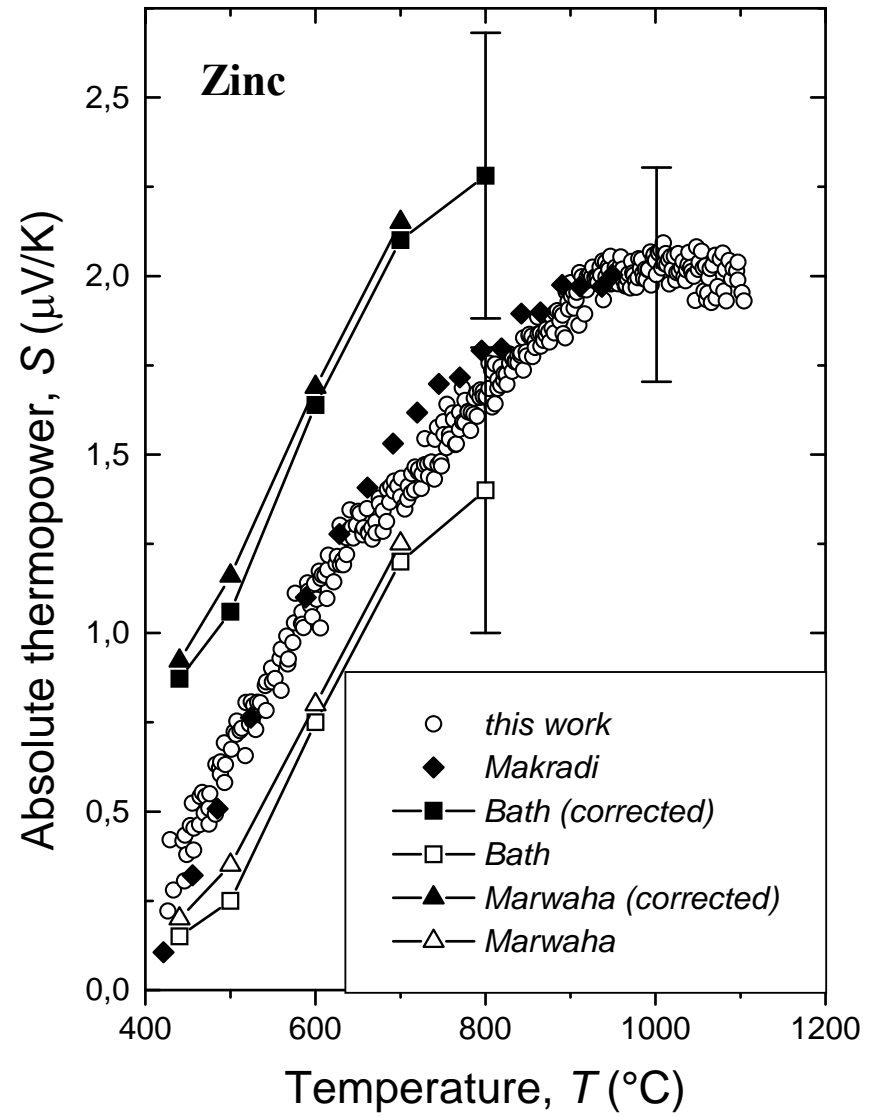


**Nous avons représenté plusieurs calculs ab initio de la résistivité qui sont toujours des fonctions décroissantes de l'énergie. De ce fait le PTA est négatif**

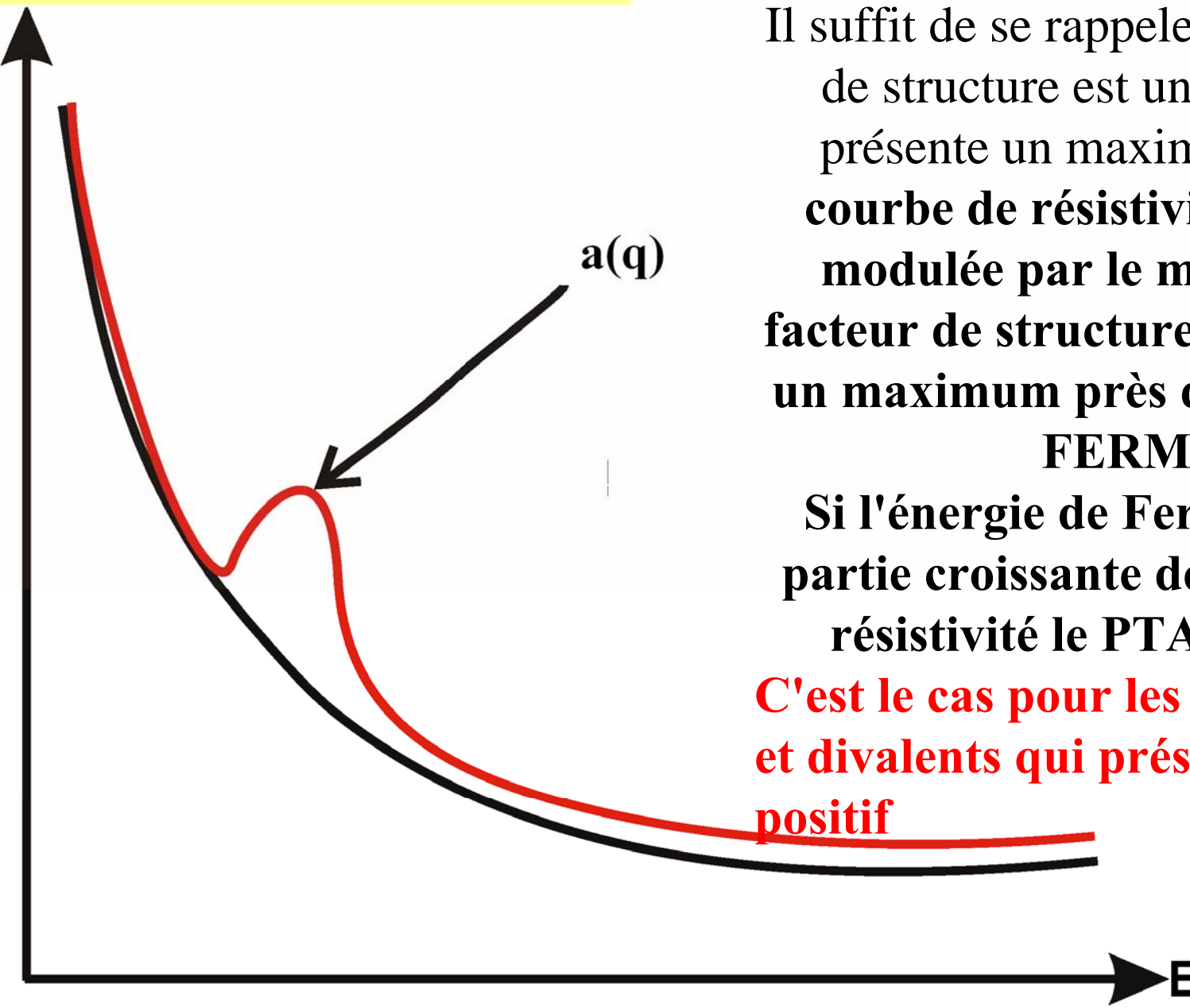


Ici nous avons représenté plusieurs calculs ab initio du PTA qui sont toujours des fonctions négatives de l'énergie. Cette règle explique le PTA négatif de la plupart des métaux liquides polyvalents (In, Ga, Al, Ge, Sn, Pb, Bi)

**Le PTA du zinc liquide est positif.**  
**Le signe positif est en contradiction avec notre première approximation.**  
 **$a(q) |t(q)|^2 \approx \text{constante}$**



$$\rho(E) = \frac{3\pi^2 m_e^2 \Omega_0}{4e^2 \hbar^3 k^6} \int_0^{2k} a(q) |t(q, E)|^2 q^3 dq$$

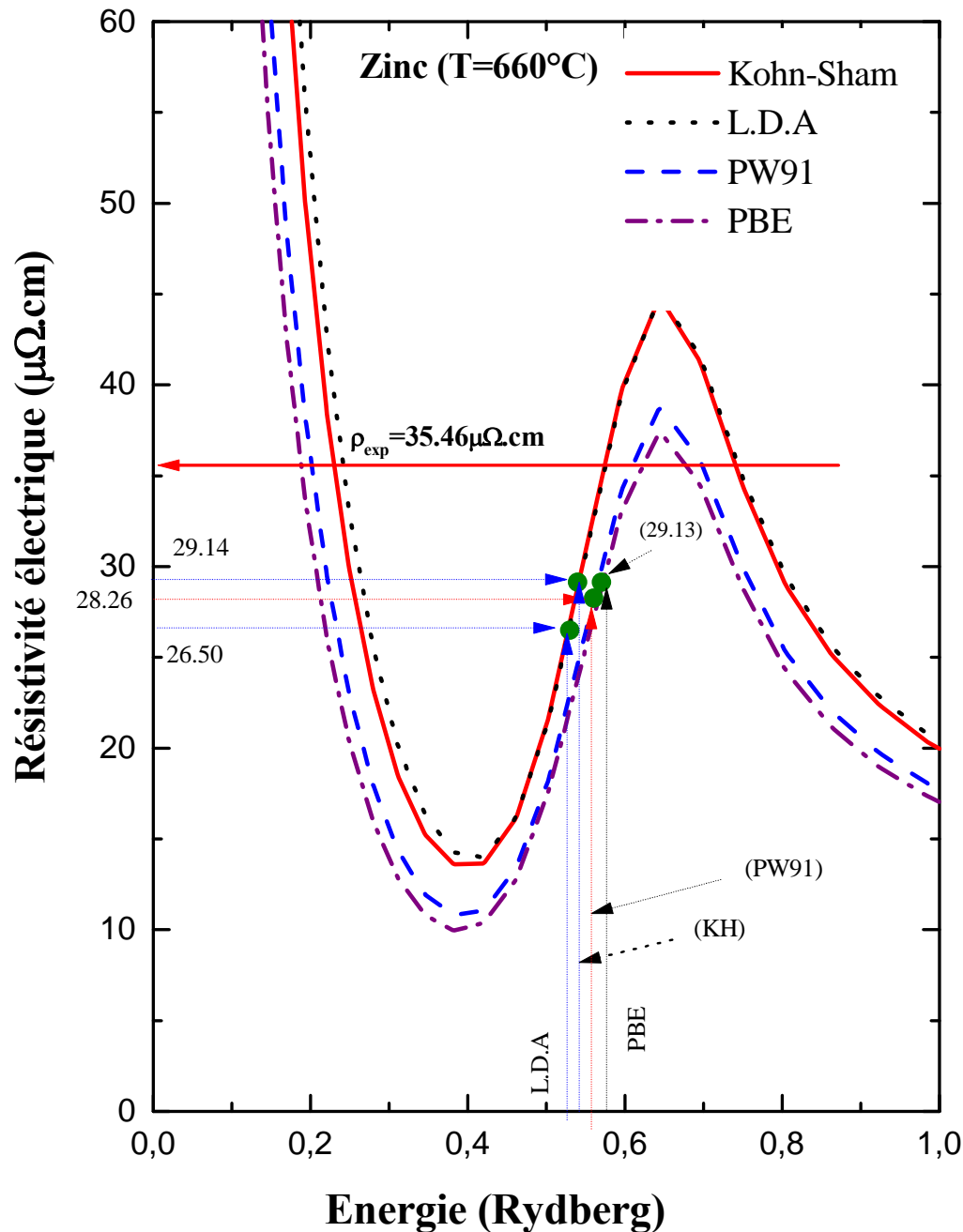


**Mais une explication peut facilement être trouvée !**

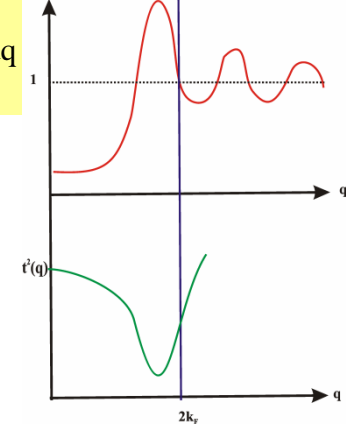
Il suffit de se rappeler que le facteur de structure est une courbe qui présente un maximum, ainsi **la courbe de résistivité en 1/E est modulée par le maximum du facteur de structure. Elle présente un maximum près de l'énergie de FERMI.**

**Si l'énergie de Fermi est sur la partie croissante de la courbe de résistivité le PTA est positif.**

**C'est le cas pour les métaux nobles et divalents qui présentent un PTA positif**



$$\rho(E) = \frac{3\pi^2 m_e^2 \Omega_0}{4e^2 \hbar^3 k^6} \int_0^{2k} a(q) |t(q, E)|^2 q^3 dq$$

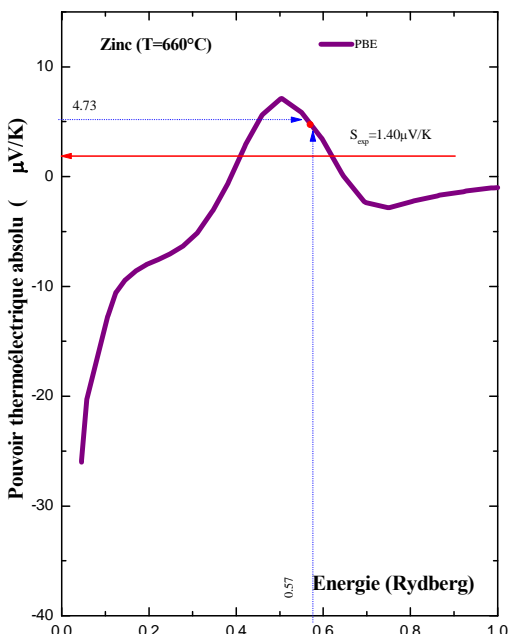
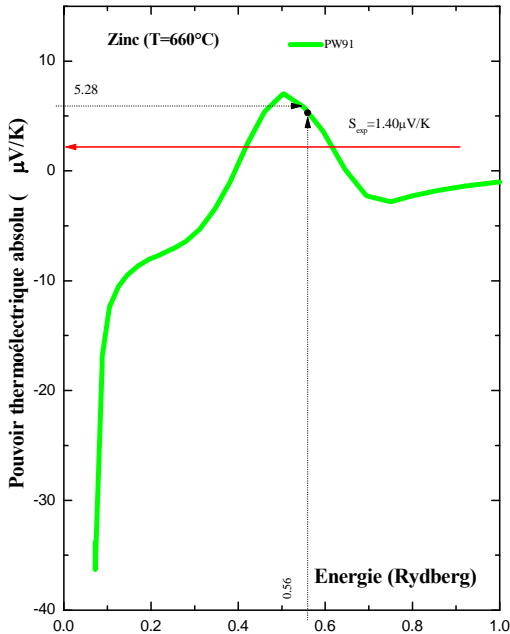
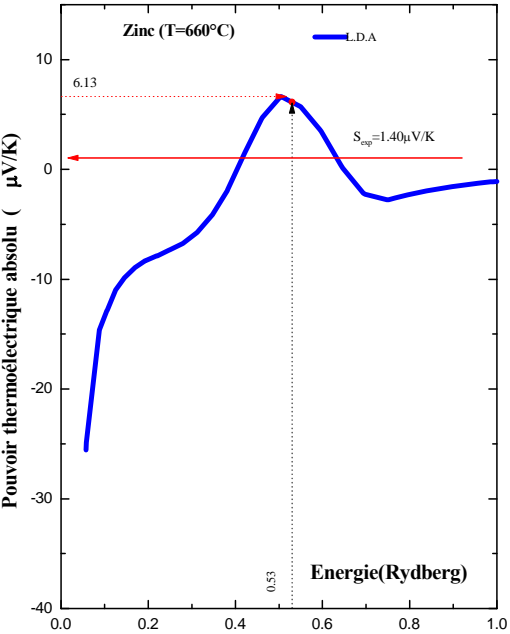
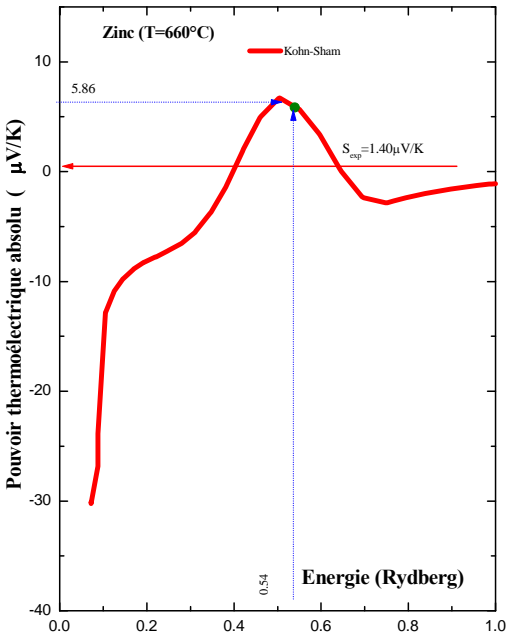


**Sur la figure ci contre nous observons le comportement général en  $1/E$  fortement modulé par le premier pic du facteur de structure.**

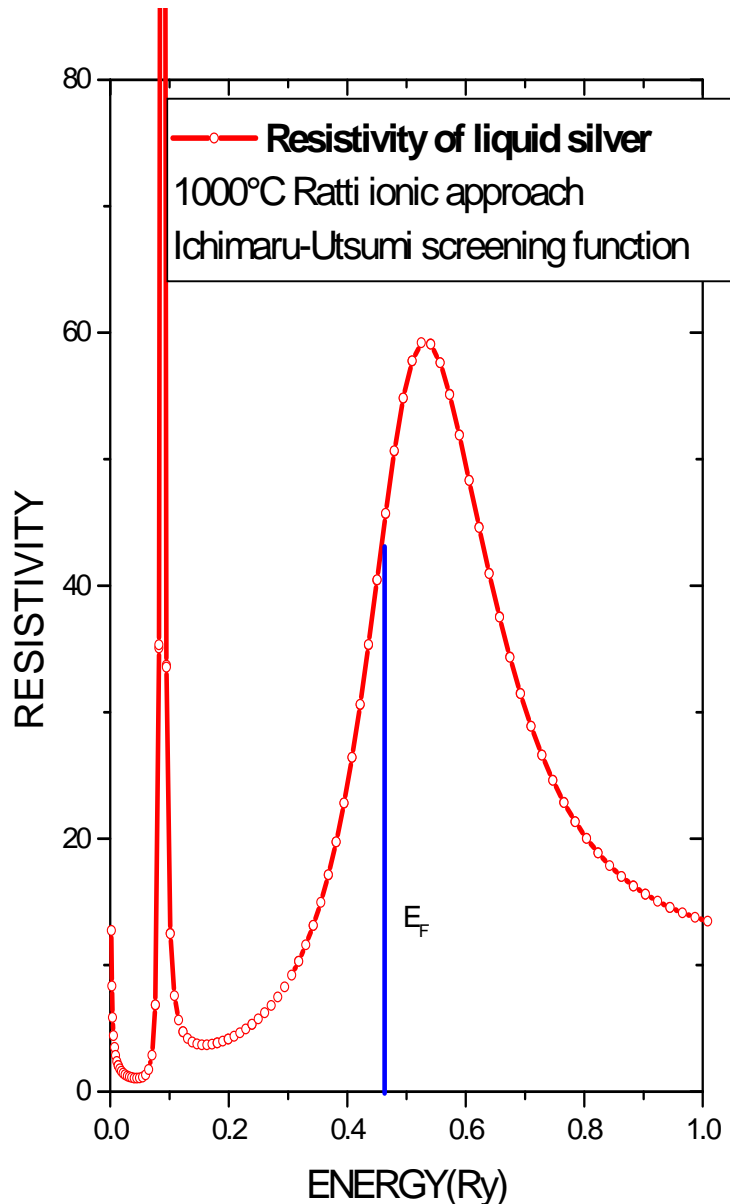
**L'énergie de Fermi est à gauche du maximum expliquant clairement pourquoi le PTA du zinc est positif**



**Pour tout les potentiels ab initio utilisés, le PTA calculé est toujours positif**



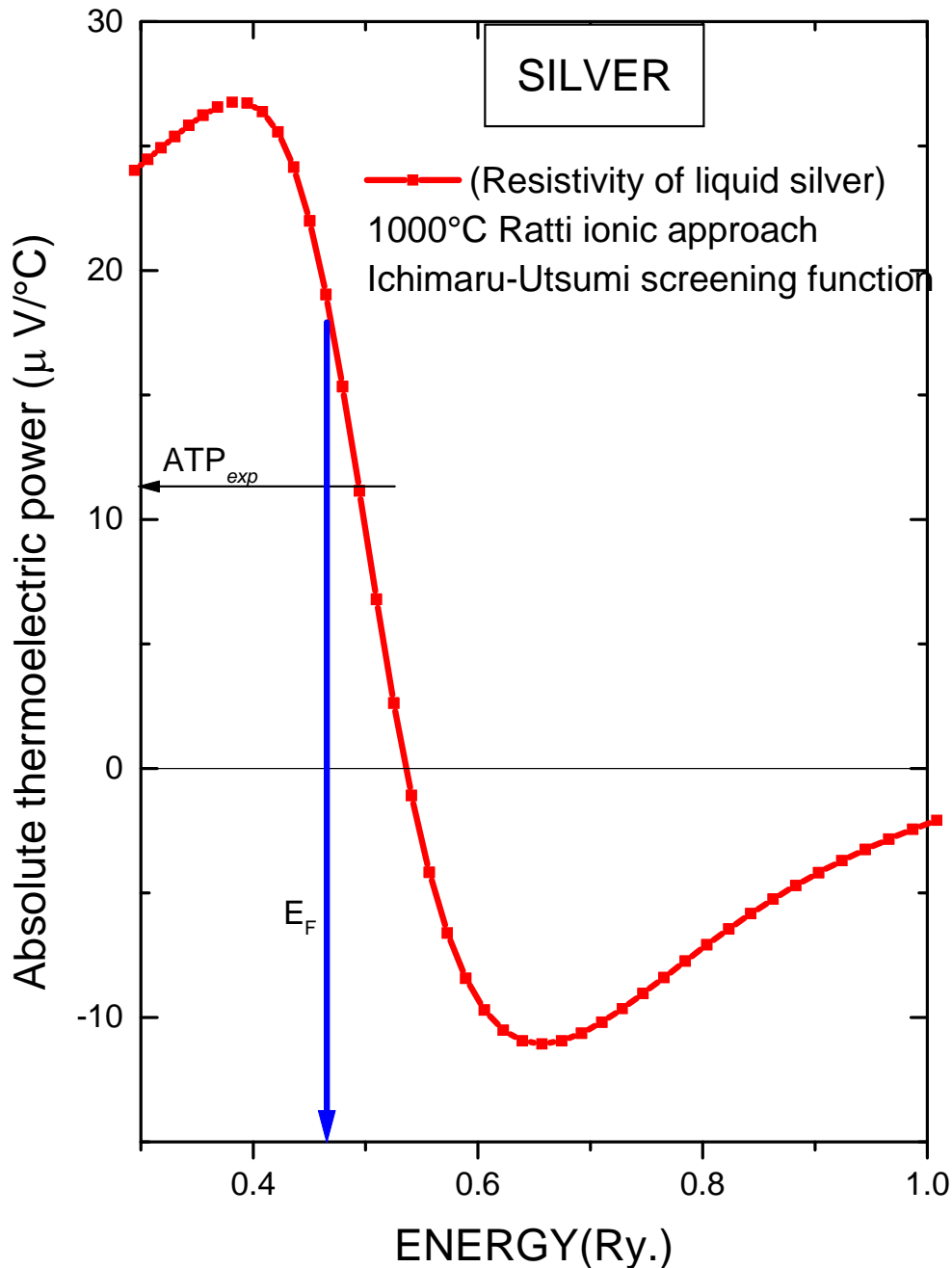
$$\rho(E) = \frac{3\pi^2 m_e^2 \Omega_0}{4e^2 \hbar^3 k^6} \int_0^{2k} a(q) |t(q, E)|^2 q^3 dq$$



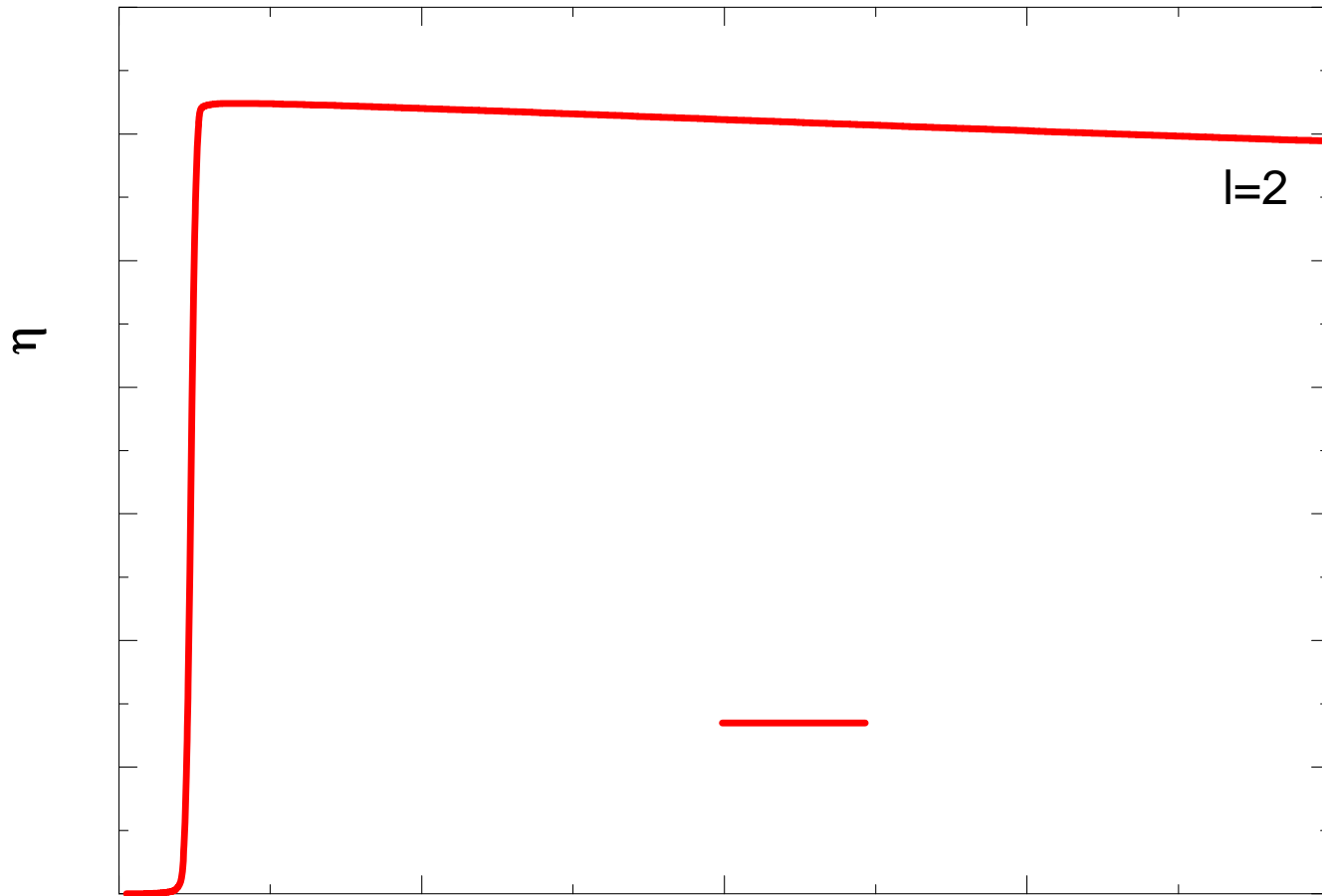
Avec l'argent liquide nous observons l'apparition d'une **seconde modulation** de la courbe en  $1/E$

Ce nouveau maximum vient d'une **diffusion résonnante**. Il est dû à la bande d qui présente a résonance due au déphasage  $\eta_2$  qui prend la valeur  $\pi/2$ .

La densité d'états est maximum à cette valeur d'énergie qui est située au fond la bande s.



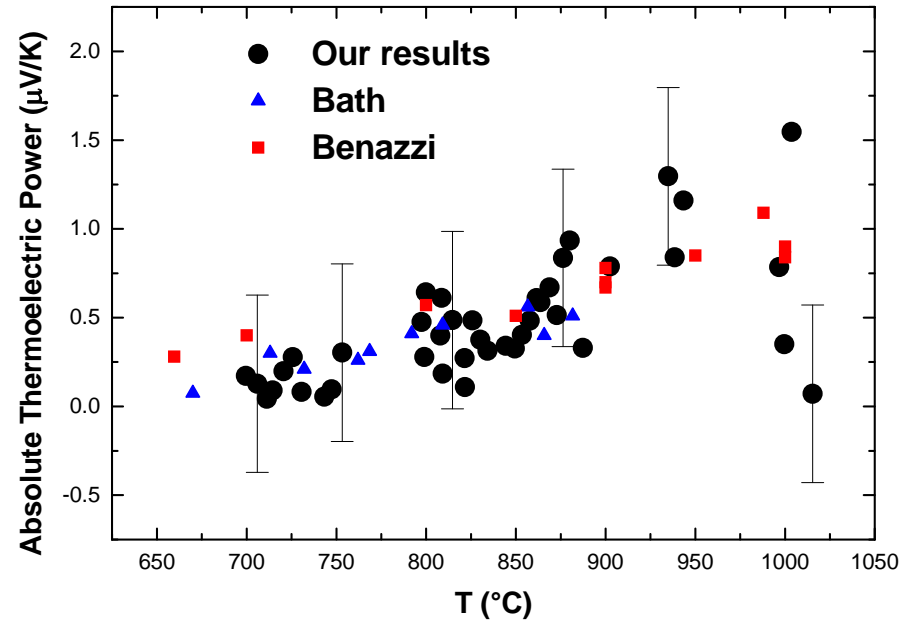
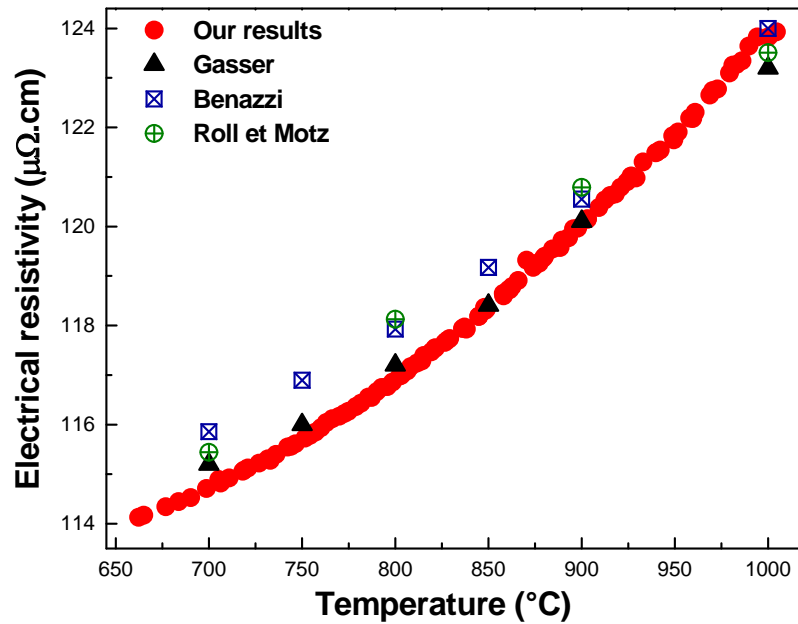
**Le PTA positif des métaux nobles** est dû au fait que l'énergie de Fermi se trouve sur la partie croissante du pic du facteur de structure, comme pour les métaux divalents.



**Nous représentons ici le déphasage  $\eta_2$  responsable de la diffusion résonnante**

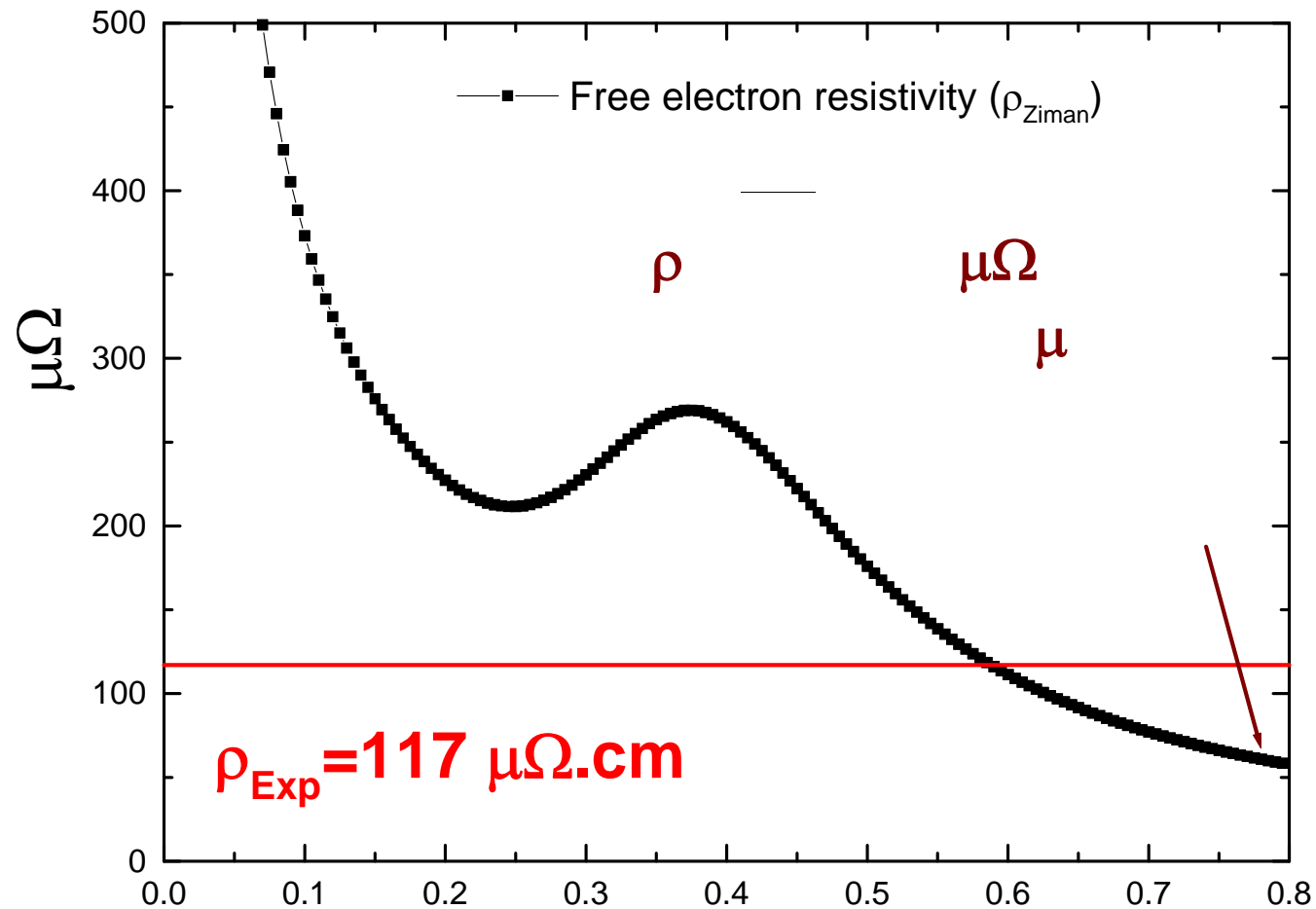
# Antimoine pur

## Notre expérience



Le PTA expérimental de l'antimoine est **positif**

# Notre calcul pour l'antimoine liquide



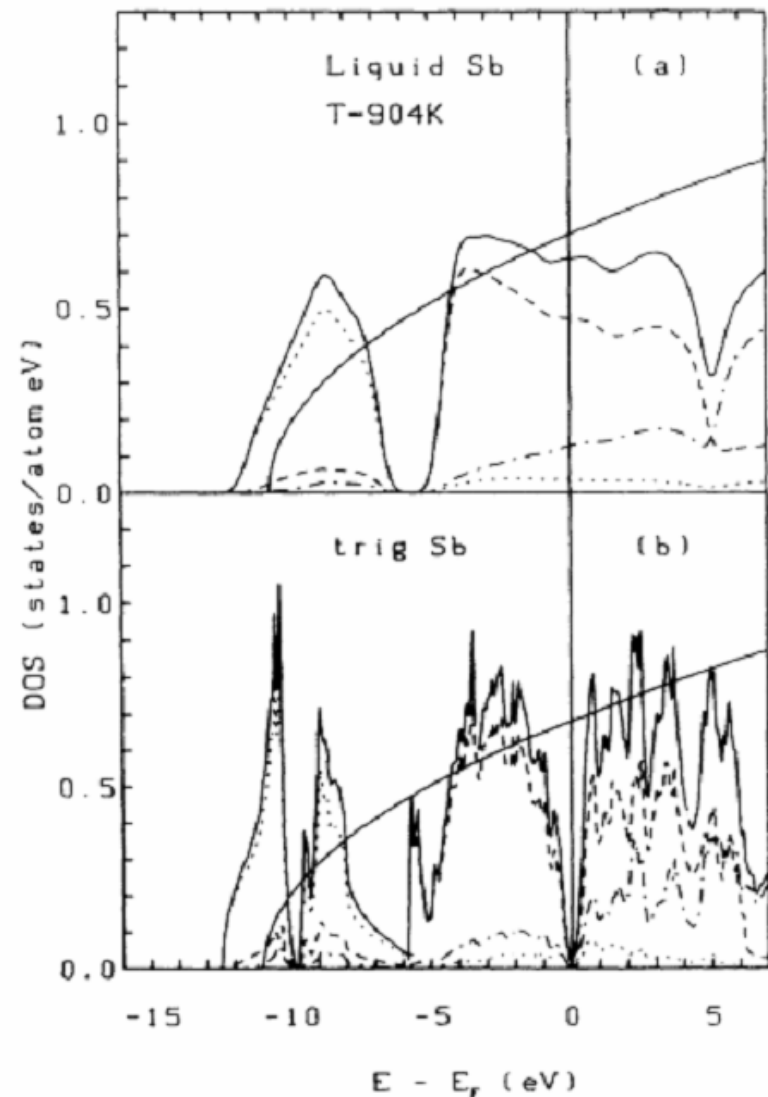


FIG. 7. Electronic density of states for liquid (a) and crystalline (b) Sb.

1. La formule de Ziman est seulement valide pour une bande d'électrons libre.
2. La vraie densité des états peut présenter
  - \* un **gap** (comme pour Sb) la **valence** doit être **Z=3** ou un
  - \* **pseudogap** (bande p de Sb par exemple) comme calculé par Hafner.
3. Il est nécessaire de tenir compte de l'existence d'un gap et d'un pseudogap dans la formule de Ziman de la résistivité  $\rho$  et du PTA.

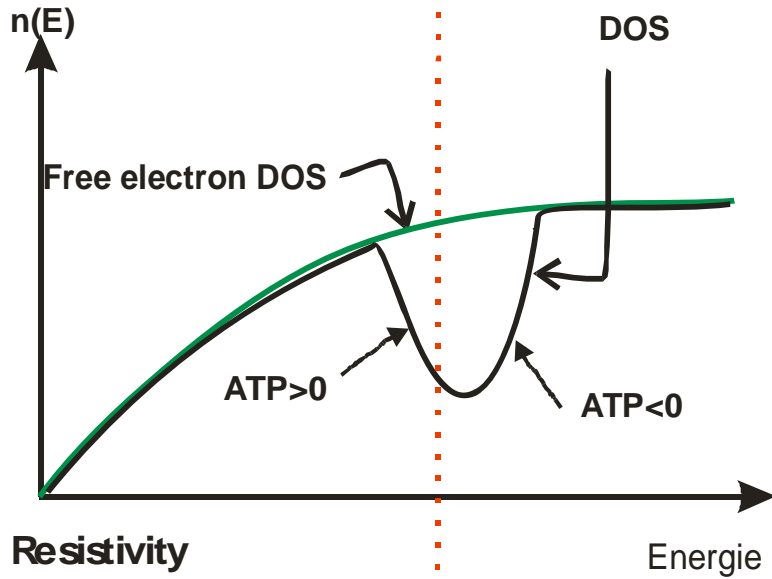
# Densité des états

Mott a proposé de corriger le libre parcours moyen à l'énergie de Fermi :

$$L = L_{Ziman} / g^2 \quad \text{avec } g = \frac{n(E)}{n(E)_{free}} \Bigg|_{E_F}$$

Faber a démontré que :

$$\rho = \frac{\rho_{Ziman}}{g^2}$$



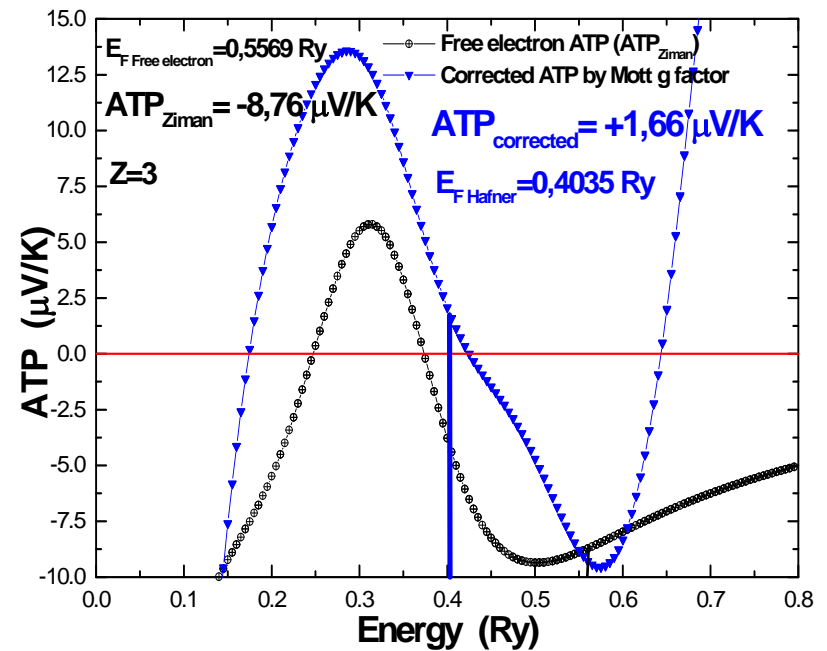
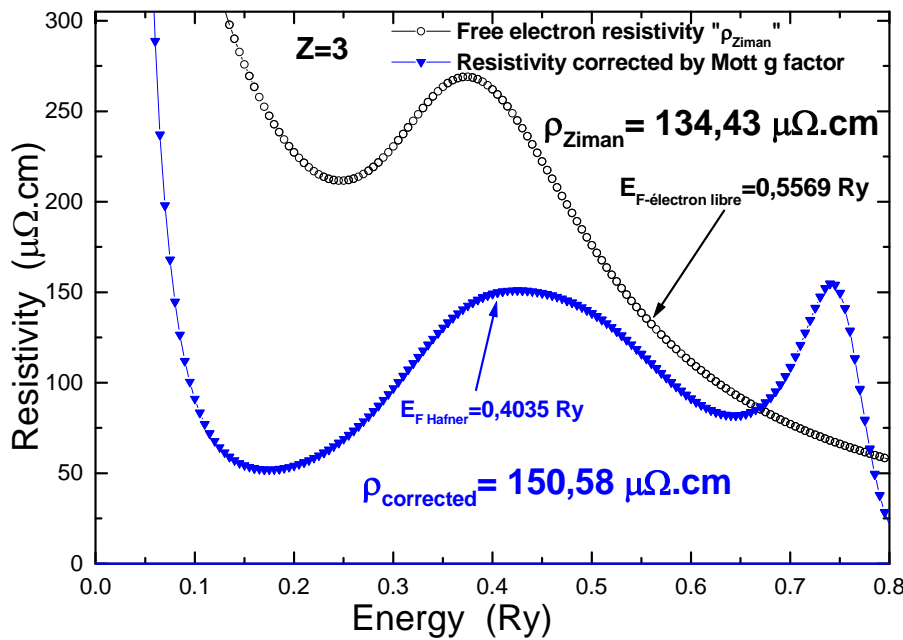
Par conséquent : On peut corriger le calcul de  $\rho$  à l'énergie de Fermi

**Notre proposition :** utiliser la densité d'états de Hafner pour corriger la résistivité par  $g^2(e)$  à toute énergie, puis dériver pour obtenir le PTA.

$$\rho(E) = \frac{\rho_{Ziman}(E)}{g^2(E)}$$



# Calcul : Formalisme de Ziman Corrigé par la densité des états de Hafner



**NOTA:.** L'énergie de Fermi diminue de 0.55 à 0.40 Ry

Thèse de  
Mhiaoui

**Le PTA théorique devient positif**

# MÉTAUX DE TRANSITION

- Pour les métaux de transition on observe que **le pic du facteur de structure et la résonance d apparaissent à la même énergie.**
- Nous comprenons ainsi que **les premiers éléments (comme le Sc) de la série des métaux de transition doivent avoir un PTA positif, alors que les derniers (comme le nickel) doivent avoir un PTA négatif.** En effet l'énergie de Fermi passe de la gauche à la droite du pic de résonance quand le nombre des électrons d est augmenté.
- Cependant la résistivité expérimentale du manganèse est plus de cinq fois plus petite que la valeur calculée. Les résistivités élevées calculées par la théorie n'ont pas été observées expérimentalement pour les métaux de transition liquides ou leurs alliages.
- Enfin **nous avons développé un nouveau formalisme** basé sur le fait que **des électrons de spin haut ne ressentent pas le même potentiel que des électrons de spin bas** dans des métaux comme le manganèse qui ont un grand nombre d'électrons non appariés.

Dans le cadre de nos hypothèses, le potentiel ressenti par un électron de spin up n'est pas le même que le potentiel ressenti par un électron de spin down. Cela donne naissance à un mécanisme de conduction à deux bandes. La formule de Ziman (1) écrite pour un électron de spin  $\alpha$  ( $\alpha$ =up or down) devient:

$$\rho^\alpha(E) = \frac{3\pi m_e^2 \Omega_0}{4e^2 \hbar^3 k^6} \int_0^{2k} a(q) |t^\alpha(q, E)|^2 q^3 dq$$

$$t^\alpha(q, E) = -\frac{2\pi\hbar^3}{m\sqrt{2mE}\Omega_0} \sum_l (2l+1) \sin \eta_l^\alpha(E) \exp(i\eta_l^\alpha(E)) P_l(\cos\theta)$$

Les déphasages  $\eta^\alpha(E)$  sont calculés à partir de potentiels muffin tin pour chaque direction de spin. La résistivité totale s'exprime simplement :

$$\frac{1}{\rho} = \frac{1}{\rho^{\text{up}}} + \frac{1}{\rho^{\text{down}}}$$

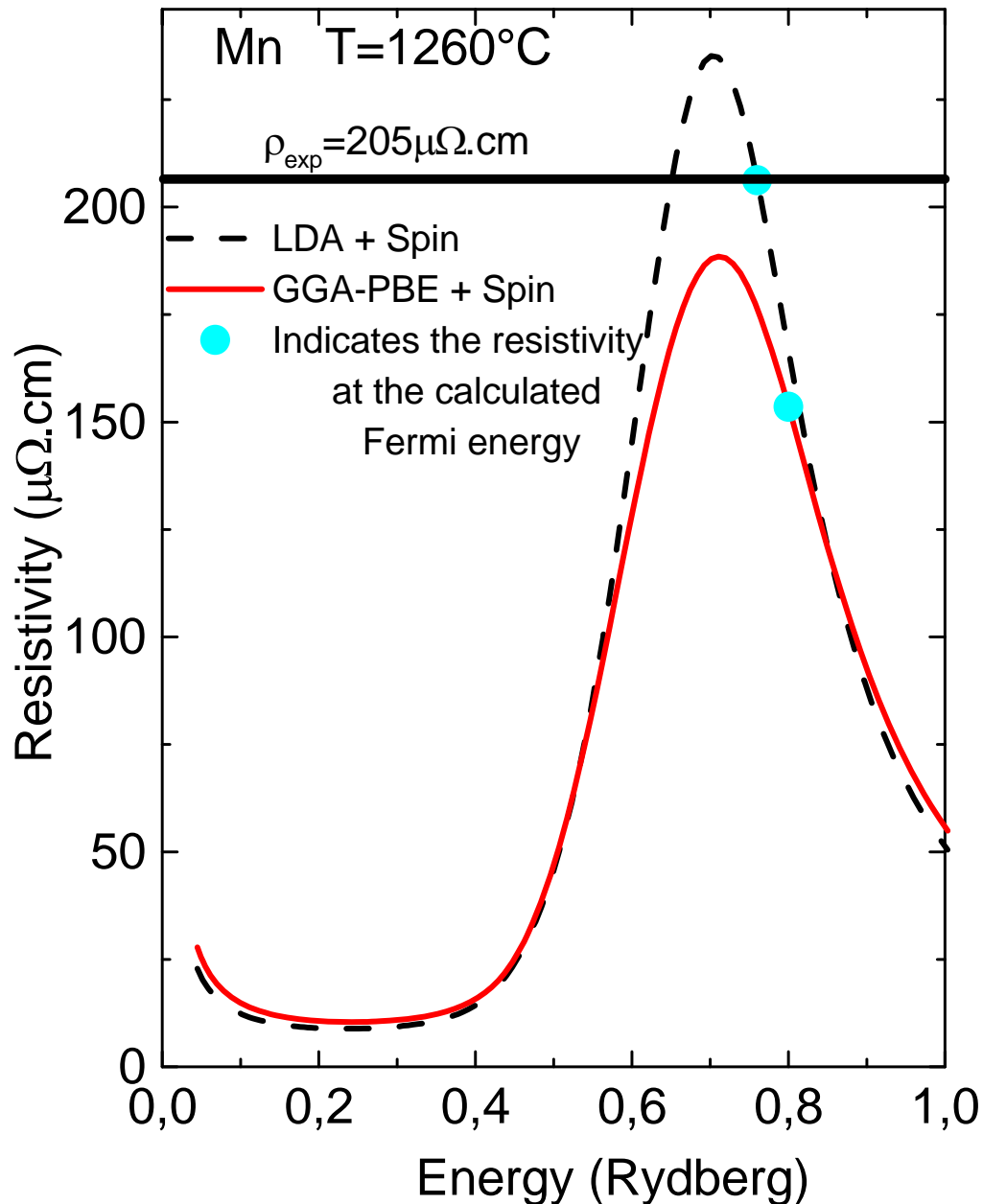
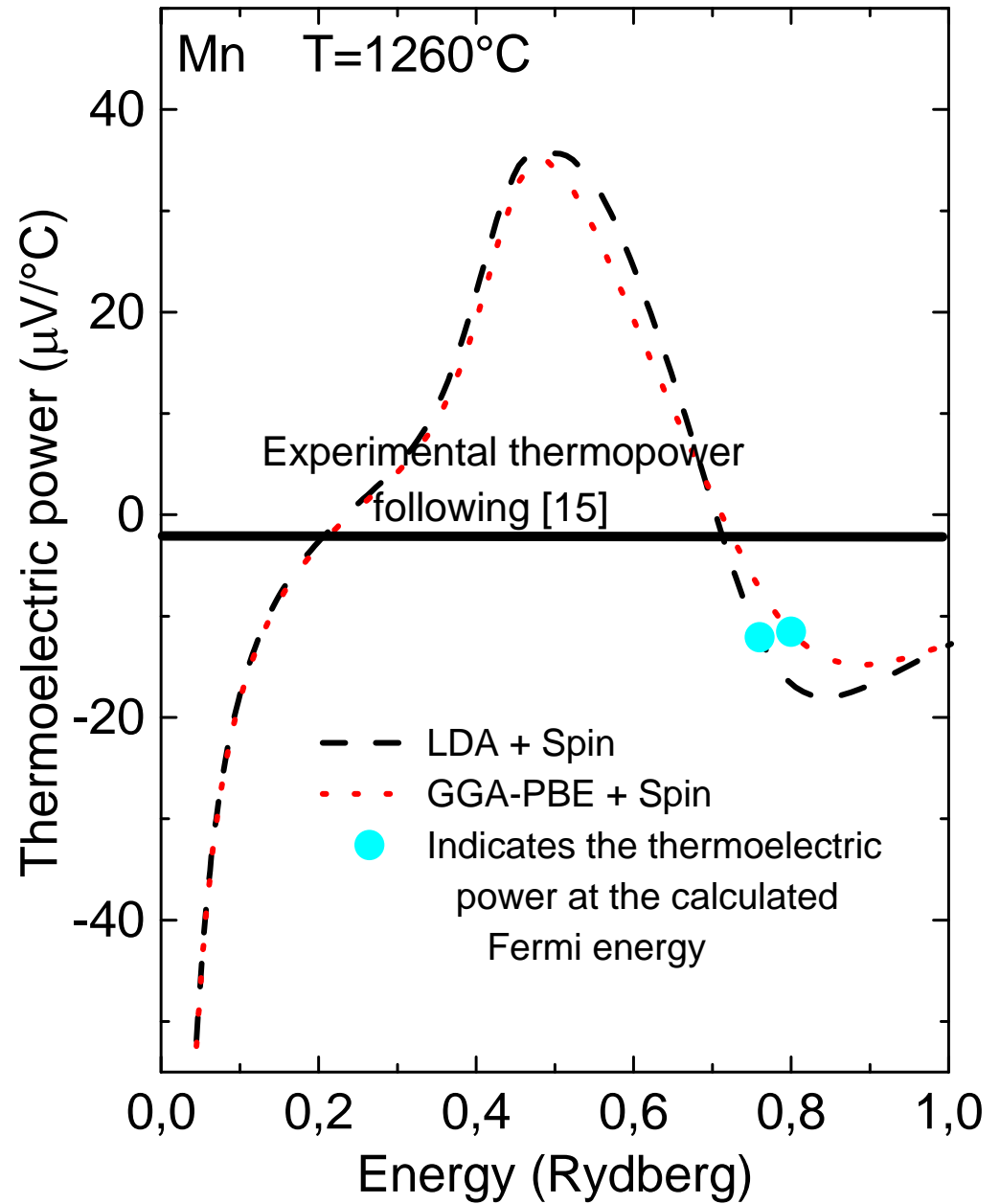


Figure 4

**Avec notre nouveau formalisme, nous obtenons des résultats très raisonnables. Sur cette courbe nous postulons que tout les cinq électrons d ont un spin up.**

**Nous avons montré qu'un nombre plus petit de spin up permettait d'expliquer les résistivités observées.**

Le PTA est beaucoup plus faible

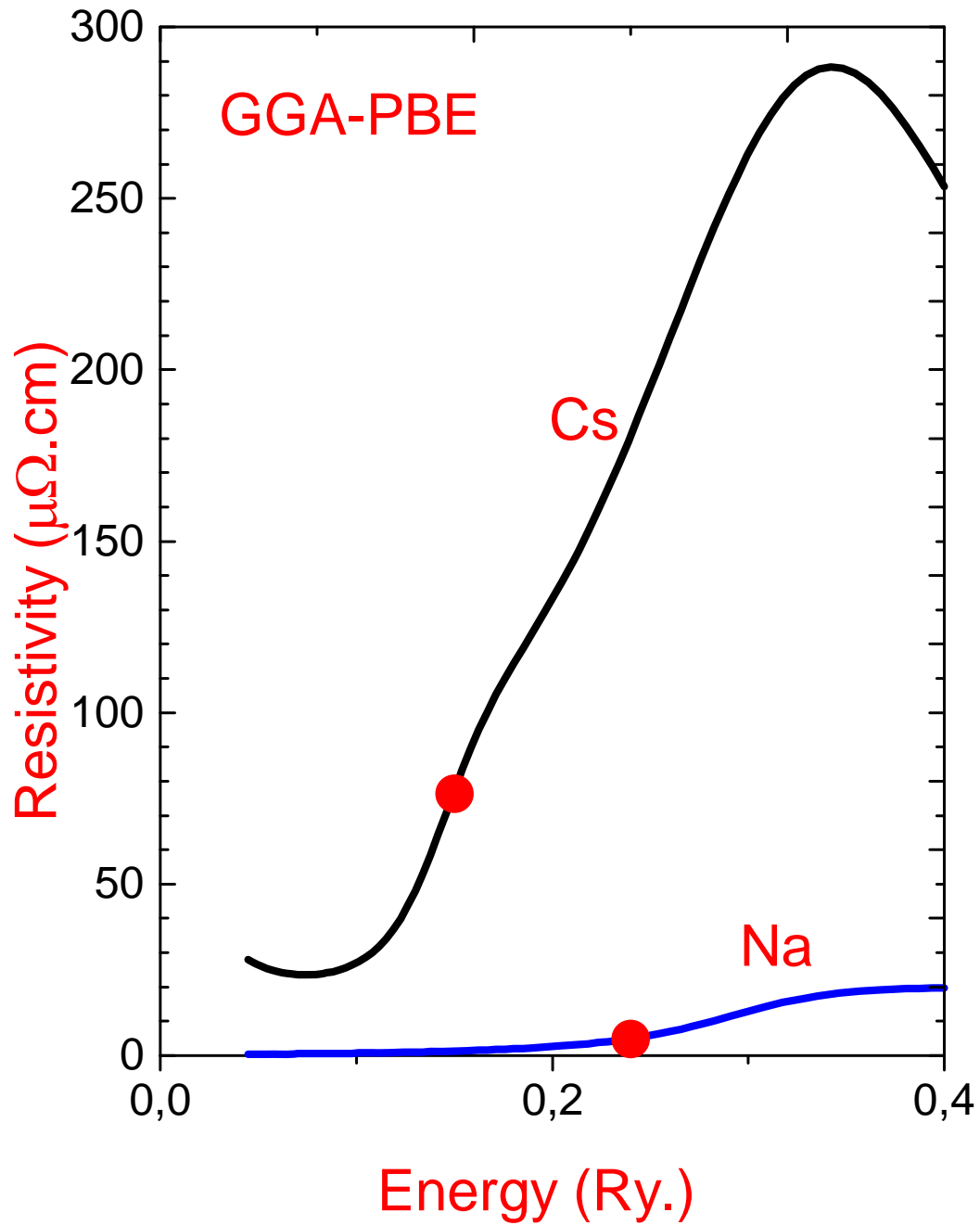


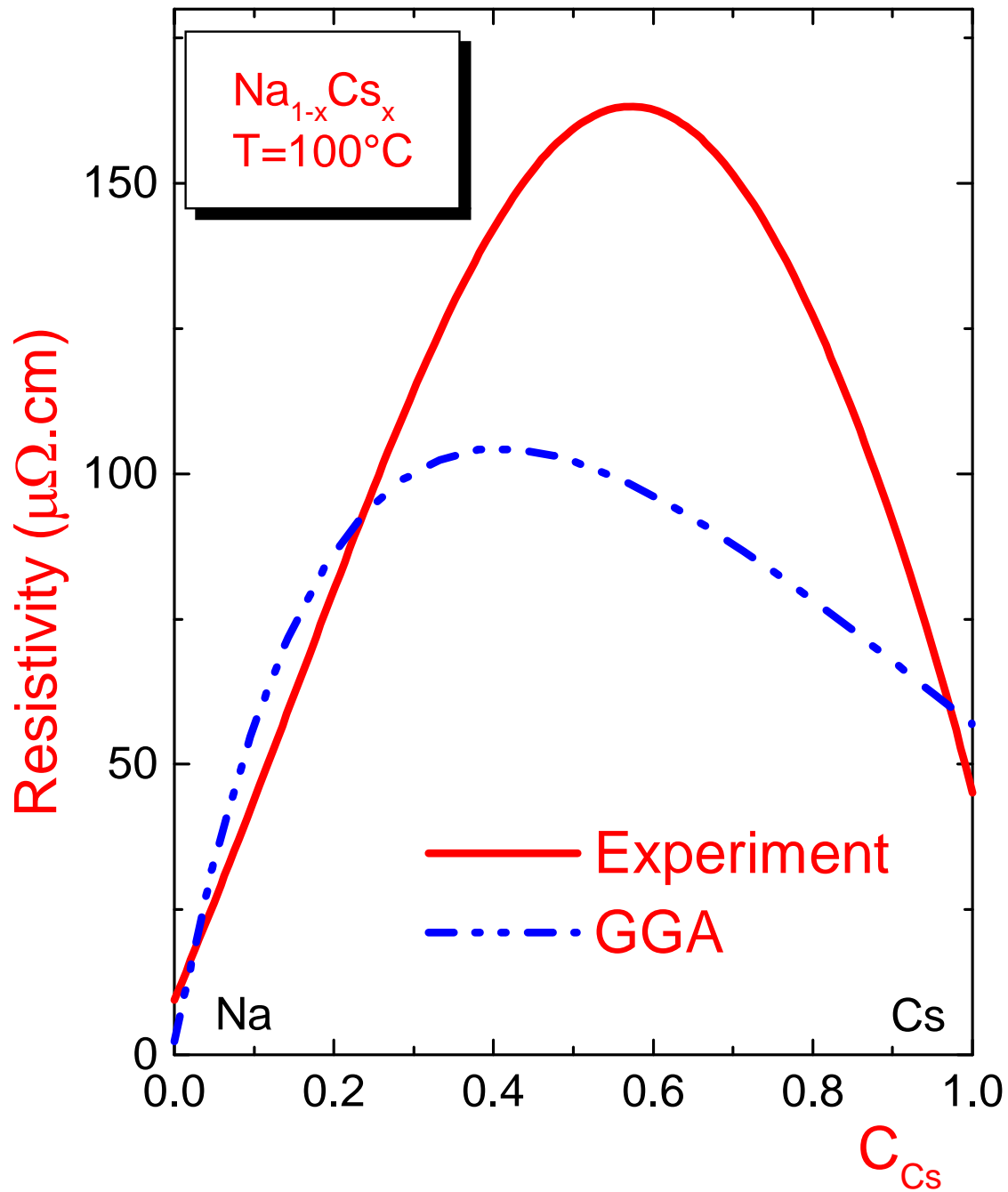
**La formule de Ziman étendue peut également être employée pour des alliages**

$$\rho_{alloy} = \frac{3\pi}{\hbar^3} \frac{m^2}{e^2 k_F^2} \Omega_o \int_0^1 |t_{alloy}|^2 4 \left(\frac{q}{2k_F}\right)^3 d\left(\frac{q}{2k_F}\right)$$

avec

$$c_1 |t_1|^2 [1 - c_1 + c_1 a_{11}(q)] + c_2 |t_2|^2 [1 - c_2 + c_2 a_{22}(q)] + c_1 c_2 (t_1^* t_2 + t_1 t_2^*) [a_{12}(q) - 1]$$







# CONCLUSIONS

**Différentes équations relient les coefficients de transport en particulier le PTA, la conductivité électrique et thermique.**

**Le PTA est proportionnel à la dérivée de la résistivité par rapport à l'énergie.**

**La résistivité fonction de l'énergie est ainsi la fonction clé.**

**La résistivité est une fonction en  $1/E$  modulée par :**

- le facteur de structure,**
- la matrice  $t$  au carré,**
- le rapport de la densité d'états divisée par celle des électrons libres.**

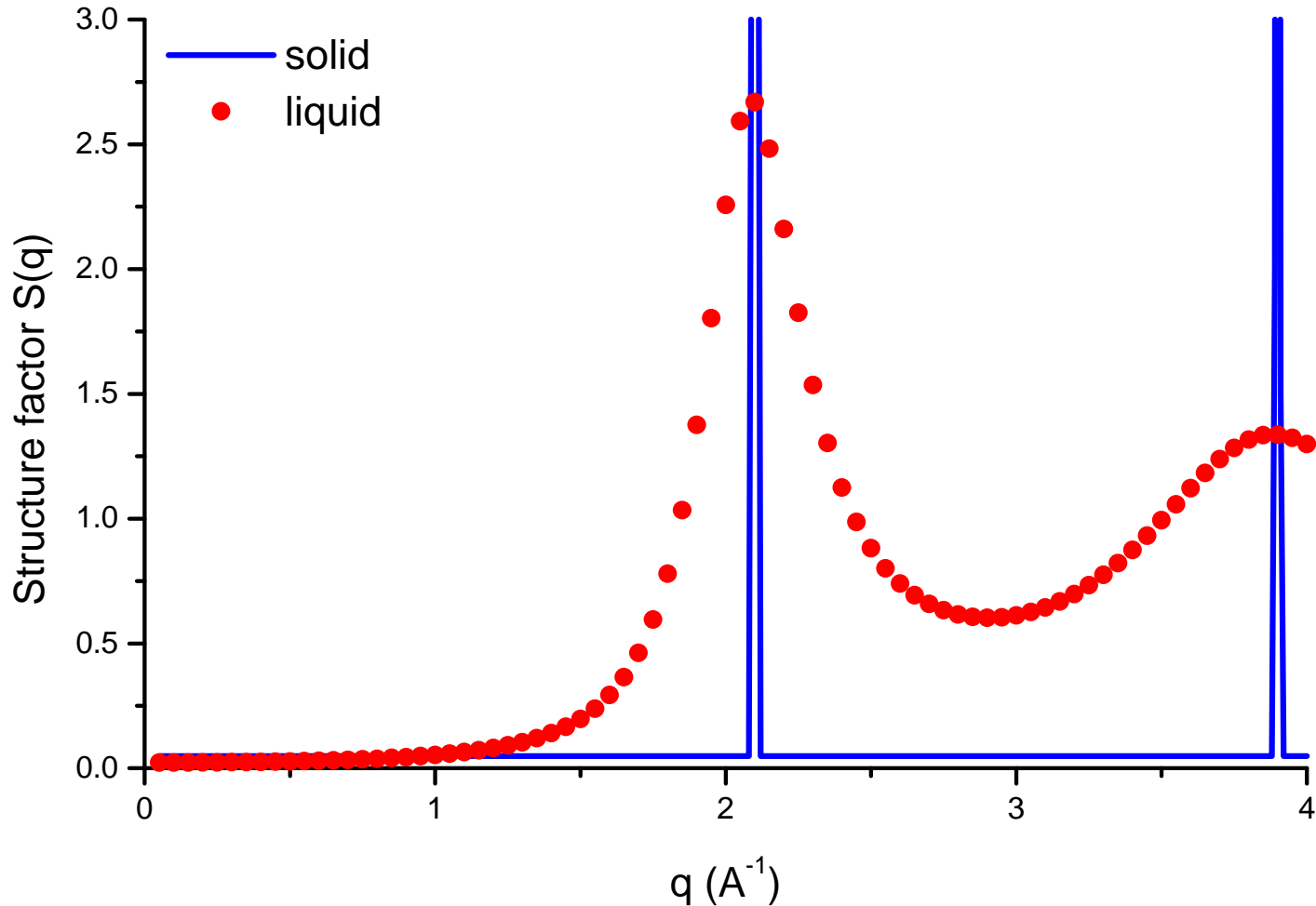
**Le PTA est positif quand l'énergie de Fermi se situe sur la partie croissante de chacune de ces fonctions de modulation.**

**Le comportement des alliages peut également être compris en termes de résistivités en fonction de l'énergie. Le problème est de savoir comment l'énergie de Fermi passe à travers les pics de modulation.**

**La contribution des différents métaux est pondérée par la composition, par la position et par le déplacement de l'énergie de Fermi de l'alliage.**

**Puis je espérer une extension  
du formalisme de Ziman aux  
solides cristallins ?**

# Peut on aussi conclure quelque chose pour les solides métalliques ? (amorphes, monocristaux, poly-cristaux, quasi-cristaux avec des défauts, à température élevée)



**Intensity (a.u.)**

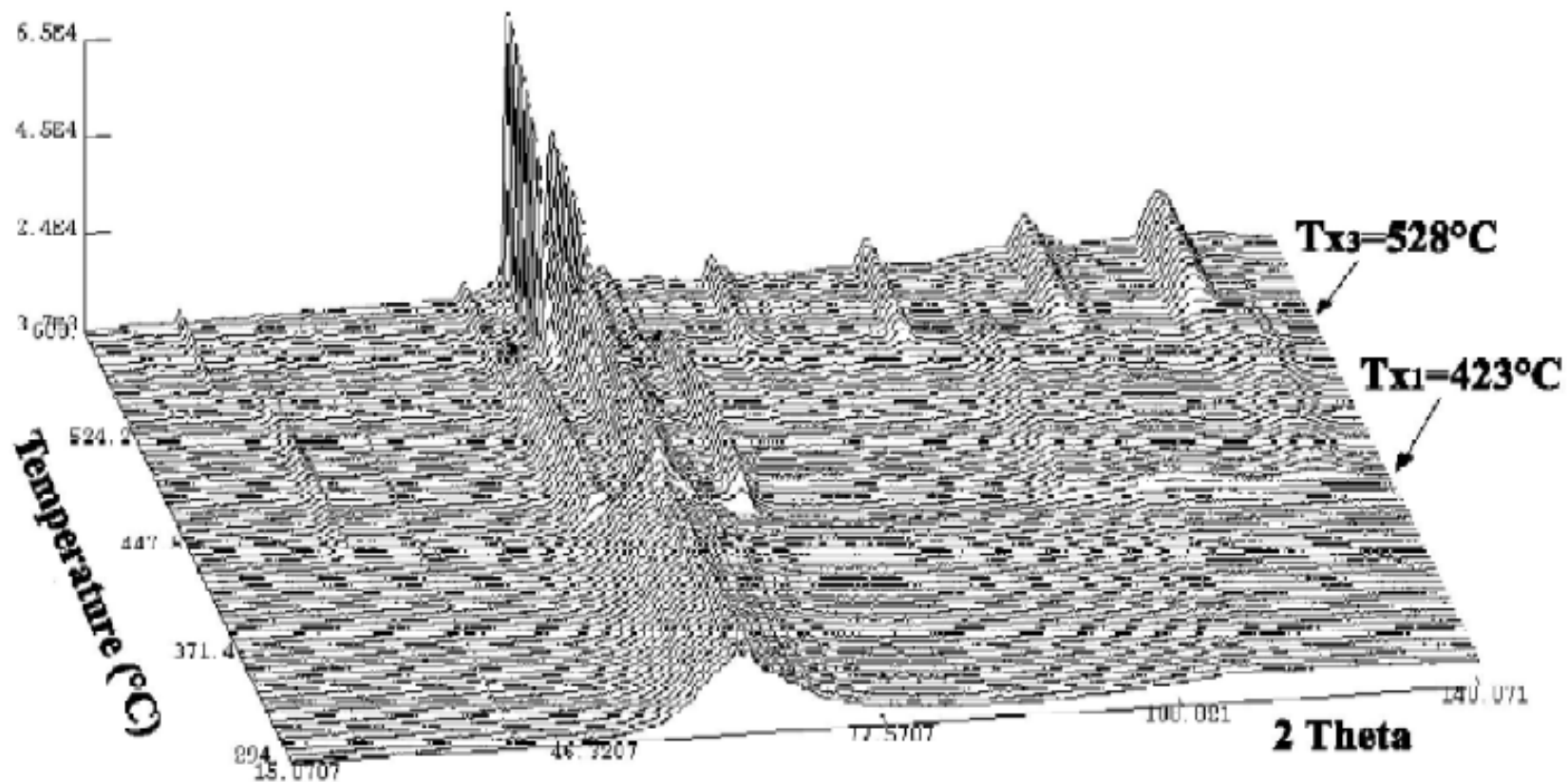
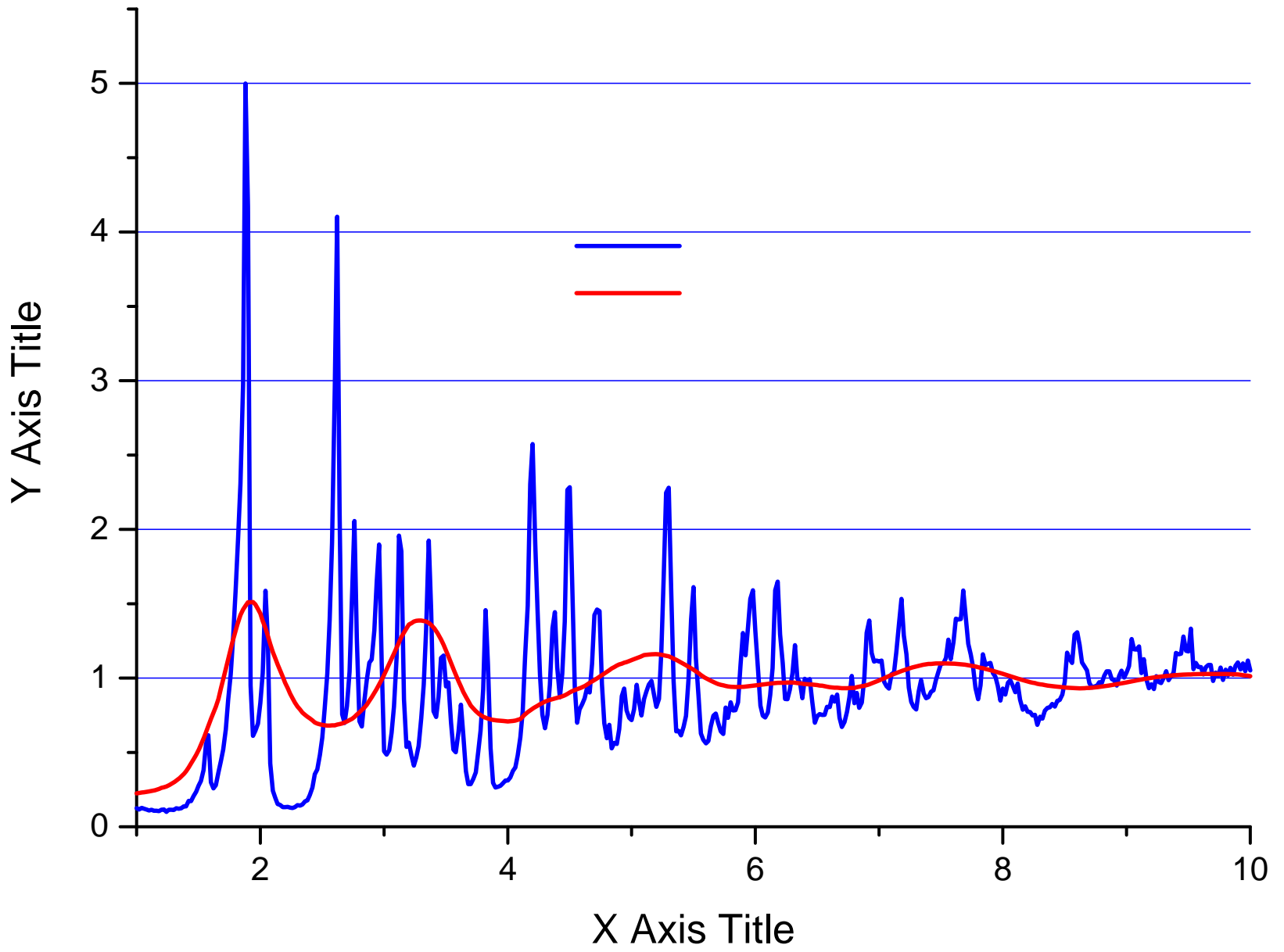
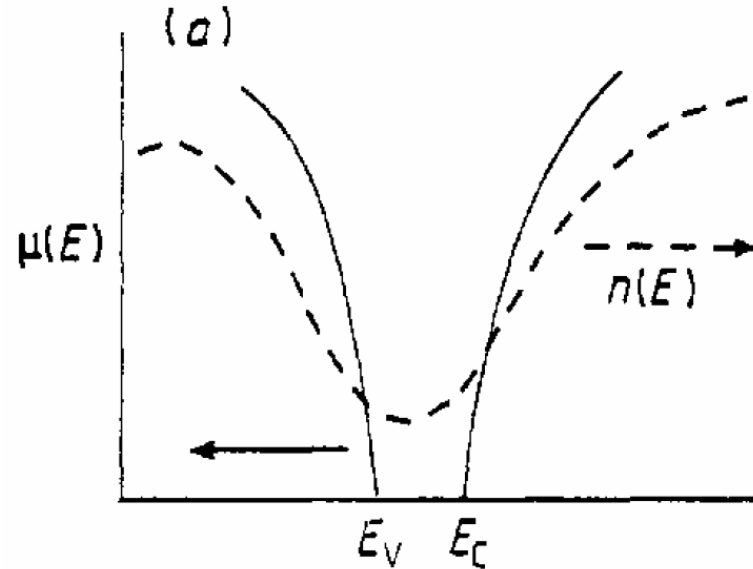
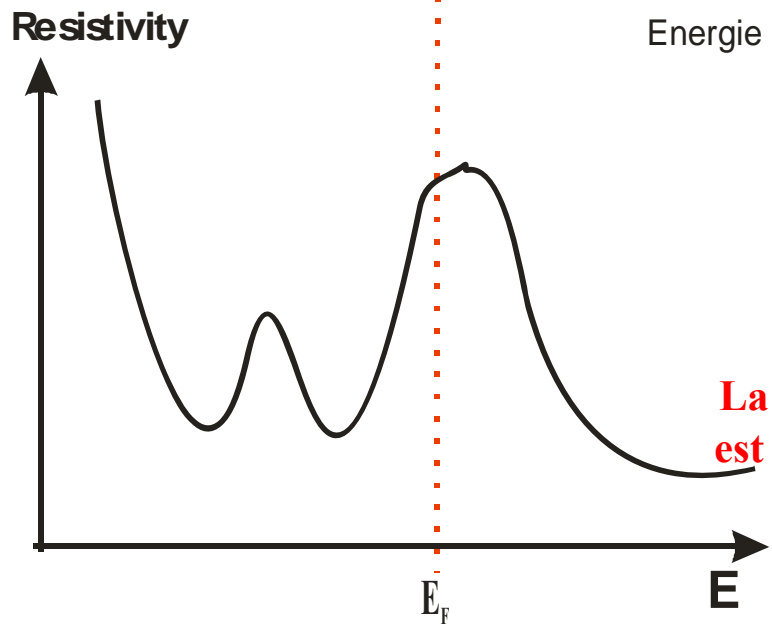
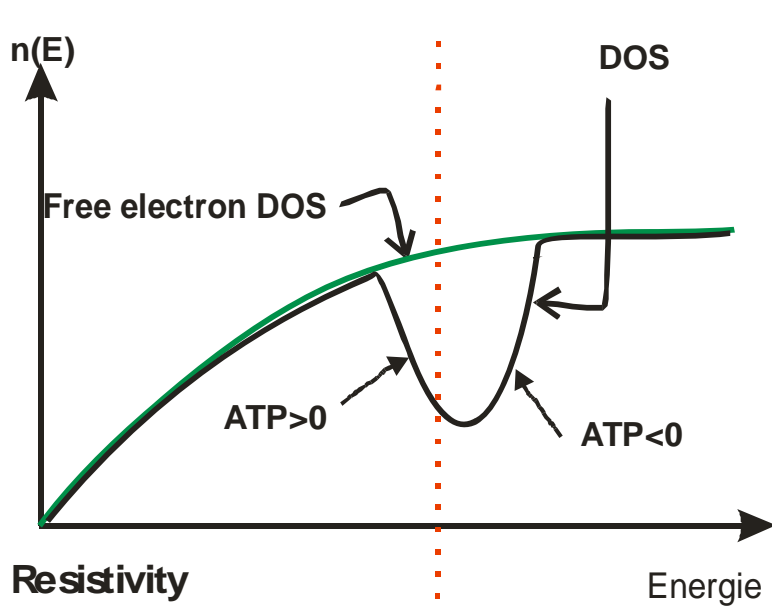


Fig. 3. Neutron diffraction experiment of the alloy  $\text{Zr}_{50}\text{Ti}_5\text{Al}_{10}\text{Cu}_{22}\text{Ni}_{13}$  heated under vacuum between 295 and 600 °C.



# Peut on également conclure quelque chose pour des semi-conducteurs ? (amorphes, liquides, cristallins)



$$\sigma = - \int_{-\infty}^{+\infty} \sigma(E) \frac{\partial f(E)}{\partial E} dE$$

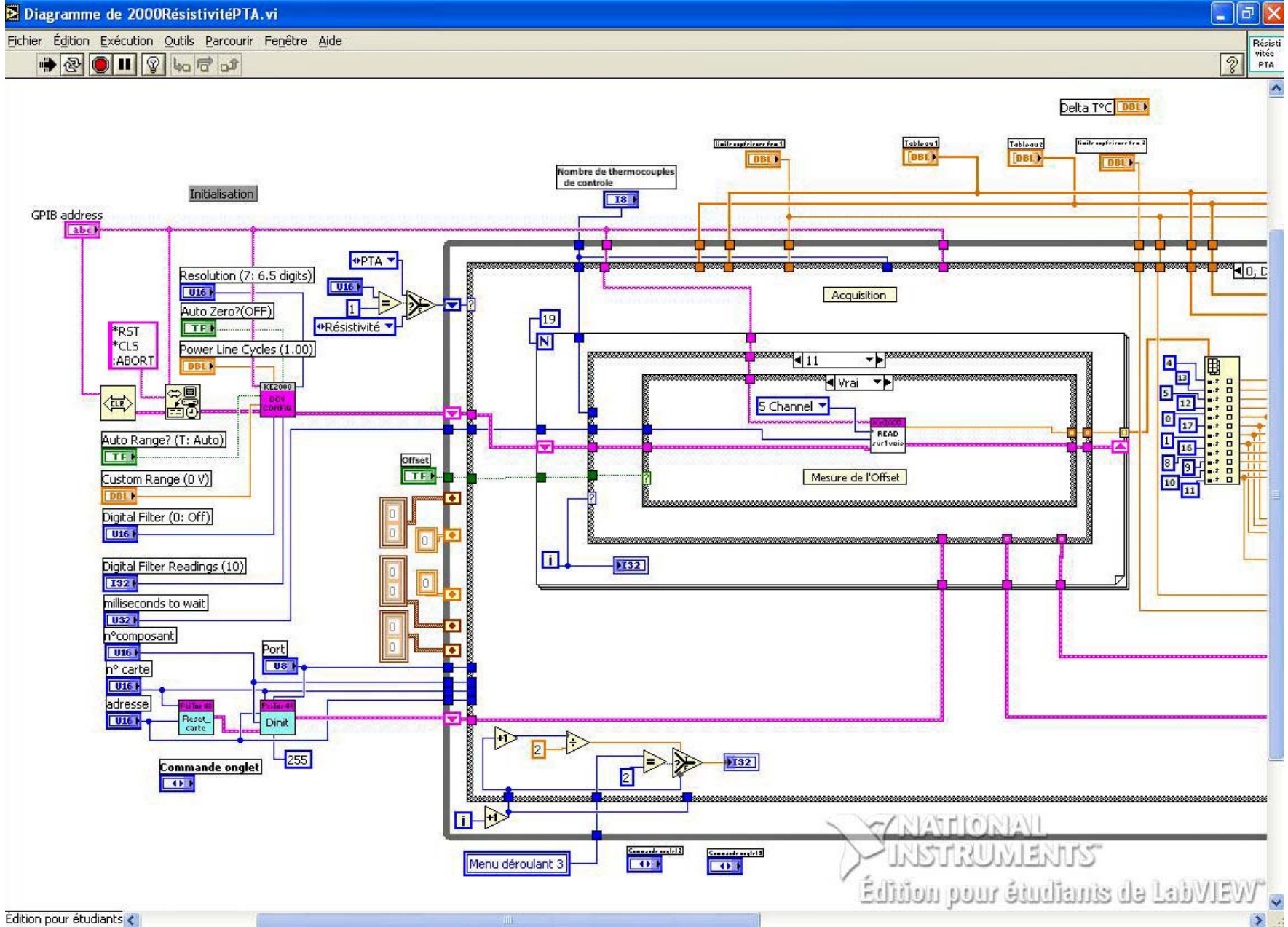
La probabilité de transition d'un état  $k$  occupé à un état  $k'$  libre est proportionnel au nombre d'états occupés par un électron par le nombre d'états libres susceptibles de l'accueillir



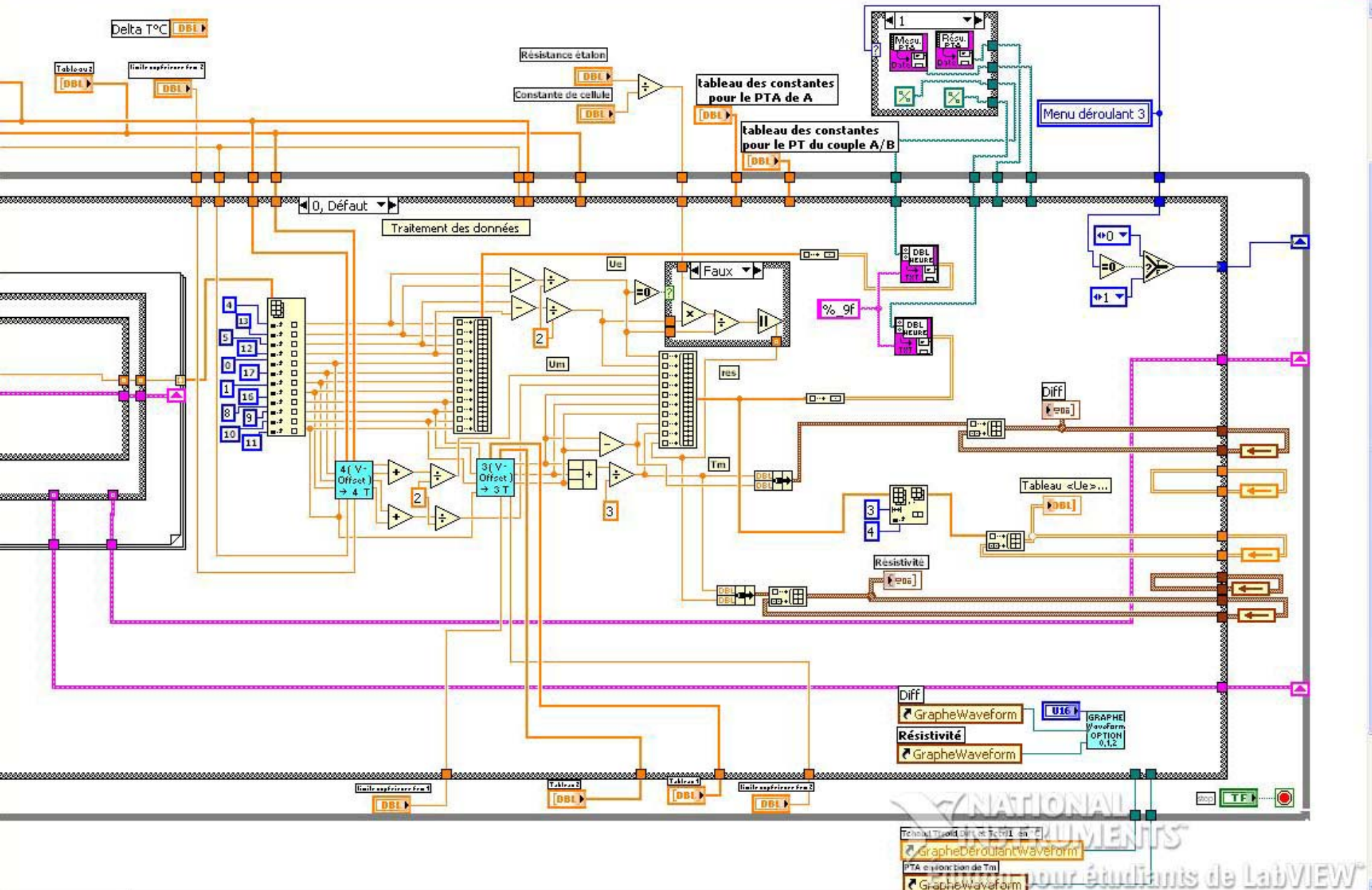
**MERCI**

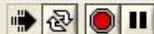
**Résistivité et PTA utilisés  
comme méthode de contrôle non destructif**

**F. Gasser, L. Abadlia, K. Khalouk,  
M. Mayoufi et J. G. Gasser**



Labview programm (written by Françoise Gasser) to control the simultaneous measurement of resistivity and thermopower





Compteur d'itération  
montée      descente

7      7

**Valeurs actuelles**

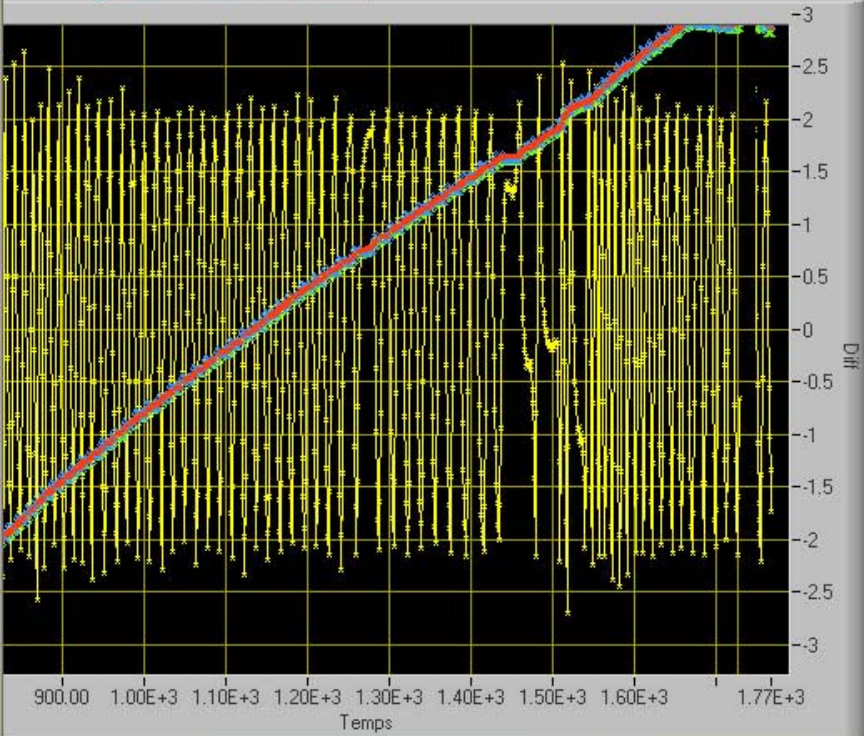
Tfroid      Tchaud-Tfroid  
634.3511      -1.736487

V13  
-3.84574033E-5

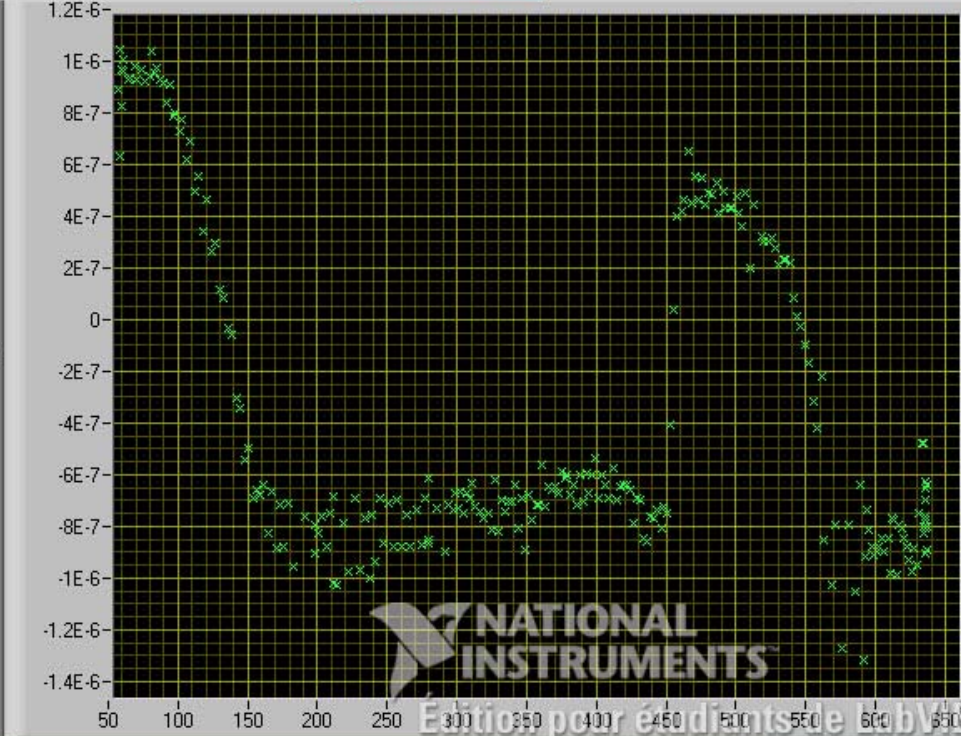
Températures et PTA

PTA	Tm	Pente	Interception	écart-type sur P	N	Tfroidmax	Tfroidmin
-8.046196E-7	635.1146	-1.408155	-8.225807E-6	0.009997619	7	637.242	632.588
-6.548227E-7	635.4058	-1.42904	-1.258574E-5	0.01330621	8	637.807	633.3802
-7.997085E-7	634.9814	-1.408313	-8.545119E-6	0.009121489	7	637.0325	632.6105
-7.755063E-7	635.1133	-1.411974	-1.250093E-5	0.01247748	7	637.4607	633.1748
-8.249999E-7	634.8889	-1.404664	-8.570873E-6	0.0115587	7	636.9787	632.6034
-8.026143E-7	634.9598	-1.407853	-1.270671E-5	0.01615837	6	637.2306	632.9386
-7.985753E-7	634.9069	-1.40819	-8.138673E-6	0.01045351	7	636.7058	632.7365
-9.049907E-7	635.1544	-1.395207	-1.186685E-5	0.01109765	6	637.503	633.0101
-6.949173E-7	635.3835	-1.42362	-7.802248E-6	0.009359575	8	637.6018	632.9195
-6.28826E-7	635.7802	-1.433906	-1.27135E-5	0.01145766	6	637.938	633.9403
-7.608629E-7	636.1422	-1.417679	-7.982711E-6	0.01140408	8	638.3658	633.7199

Tchaud,Tfroid,Diff et Tctrl1 en °C



PTA en fonction de Tm



e boucle Compteur d'itération

2 18

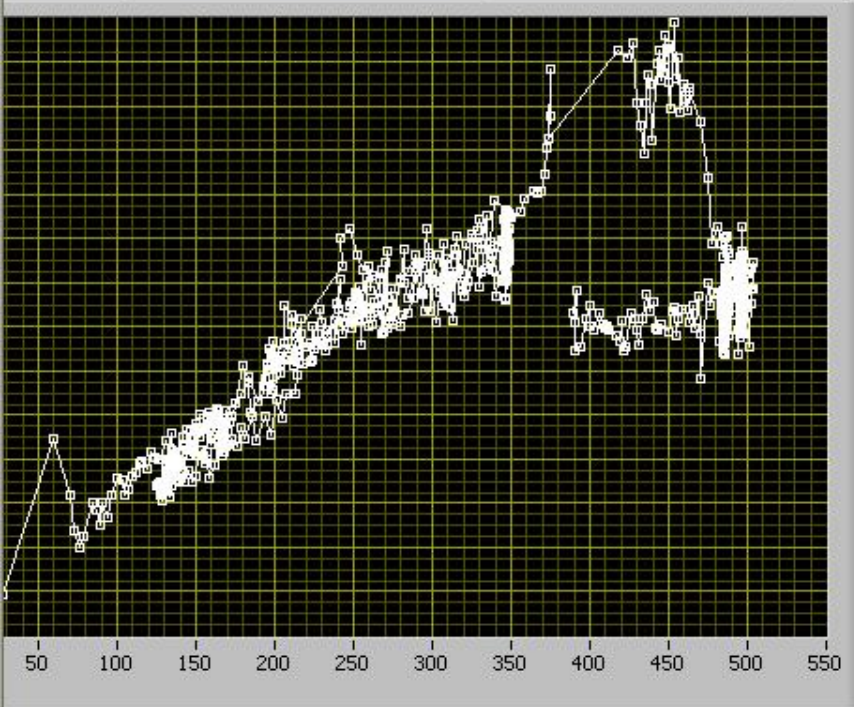
Valeurs actuelles

Ue1	Um1	femTctrl1	femTctrl2
00793363909	-0.00493020606	0.0161761457	
Ue2	Um2	femTctrl3	0.016190455
00791107523	0.00465011013	0.0154734983	

Diff et Résistivité

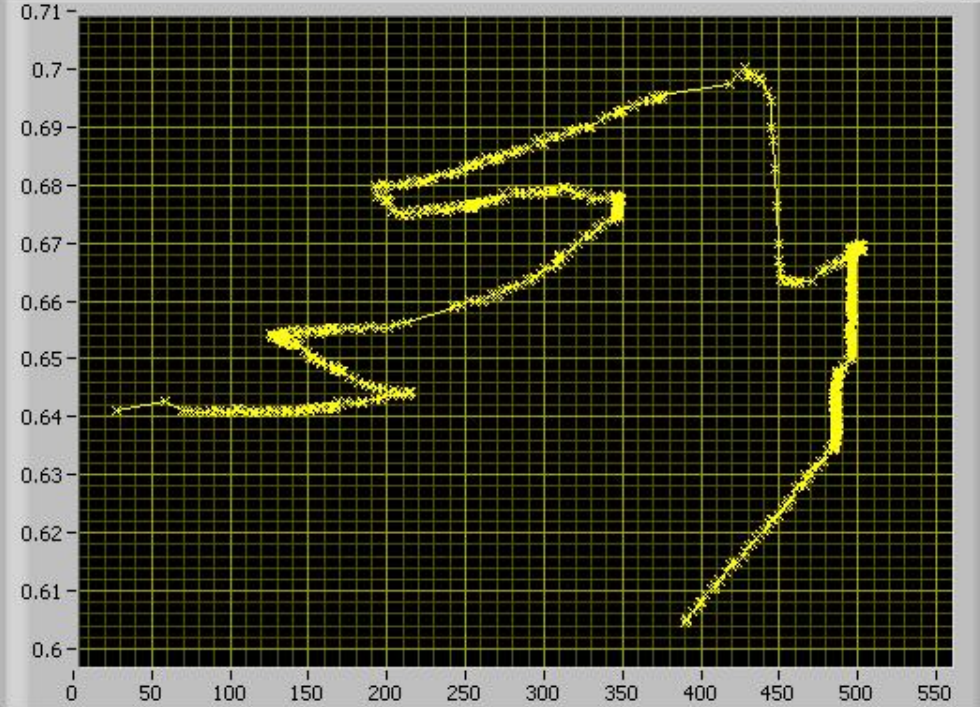
<Ue>	<Um>	<Tchaud>	<Tfroid>	Diff=Tctrl1-Tctrl3
-0.0007922357	-0.004790158	395.565	388.1808	16.67671
-0.0007925146	-0.004796818	397.7624	389.8081	17.66989
-0.0007911356	-0.004785553	396.735	390.1202	16.20207
-0.0007927945	-0.004797761	396.4957	389.6795	14.89984
-0.0007951411	-0.004823563	400.6112	393.5541	15.10944
-0.0007963512	-0.004835753	403.8476	397.0249	16.38237
-0.0007946714	-0.004832815	405.3845	398.1036	16.94983
-0.0007943105	-0.004829796	405.7785	398.6144	16.08313
-0.000793063	-0.004833363	409.2079	401.2967	15.84876
-0.0007950362	-0.004851934	412.5064	404.5754	16.5992

Diff = Tctrl1 - Tctrl3 en fonction de Tm

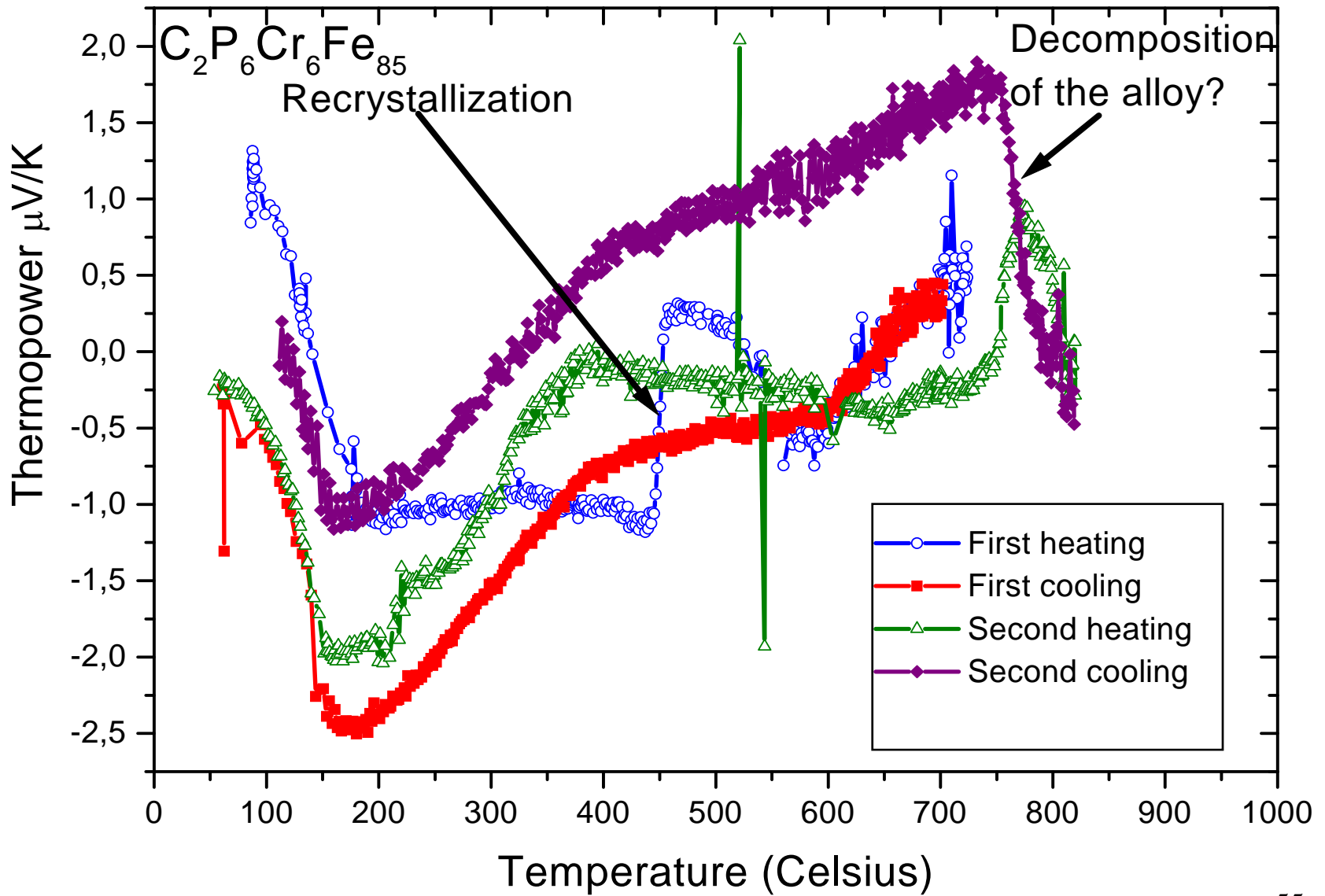


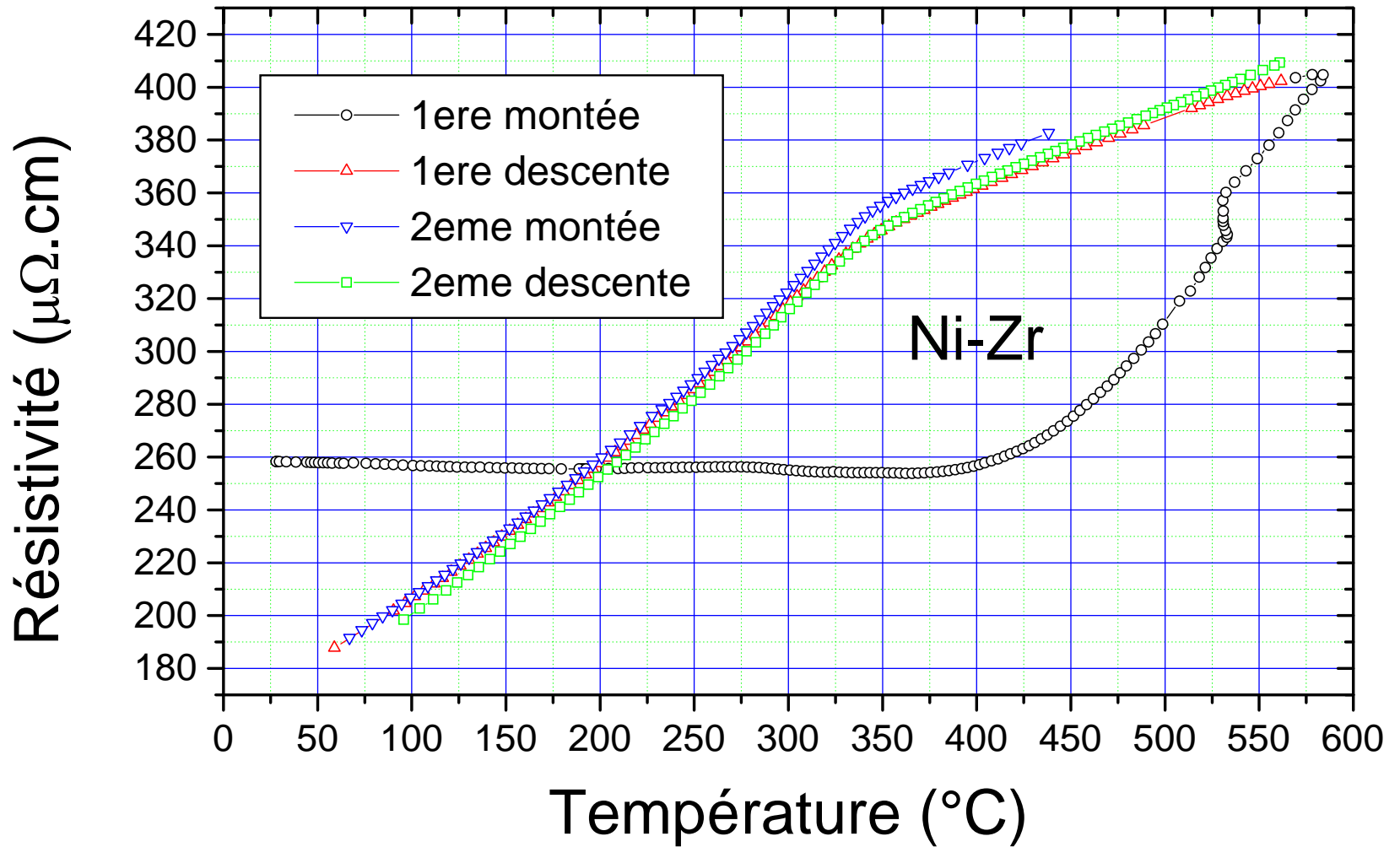
Diff

Résistivité en fonction de

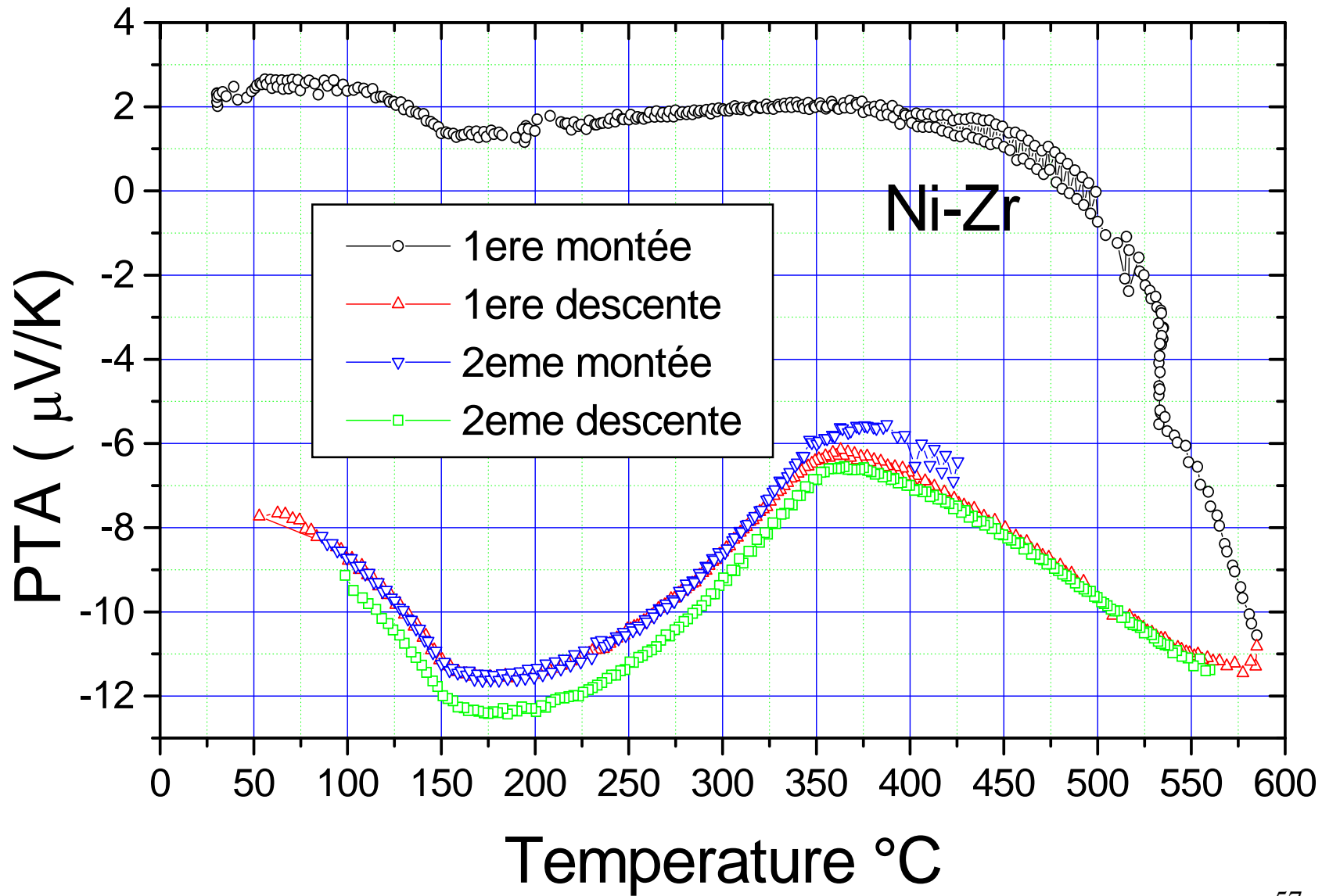


Résistivité

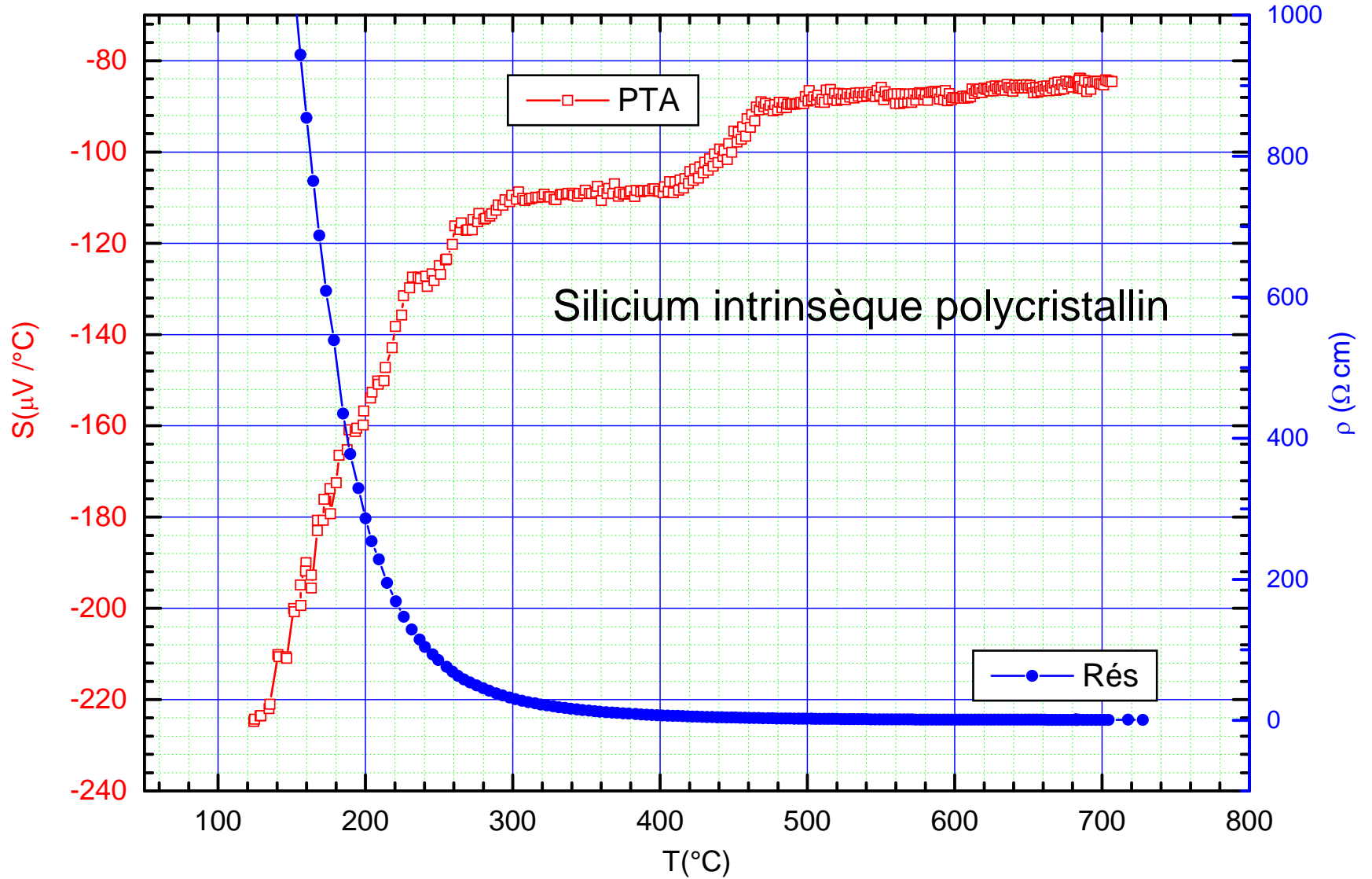








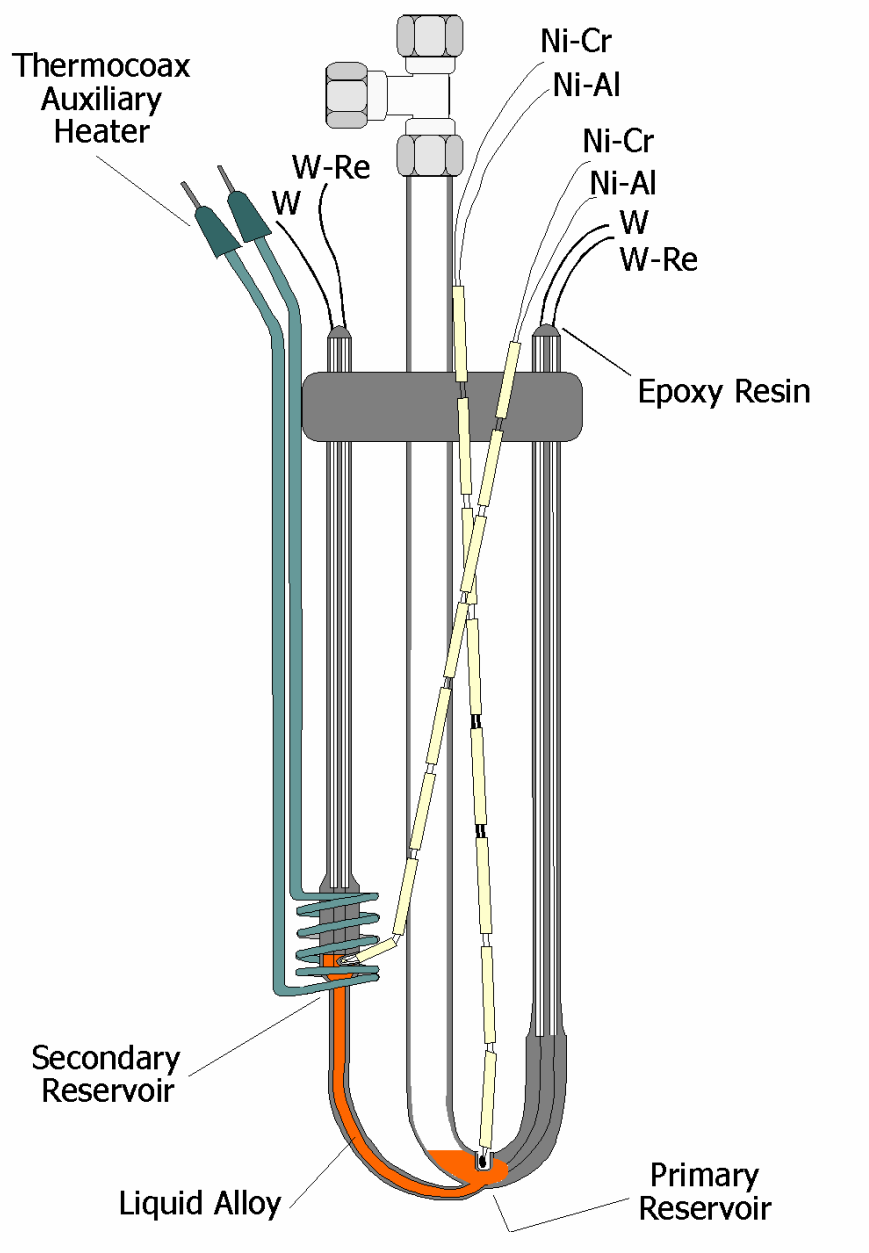
Le 25/05/09



Pouvoir thermoélectrique absolu et la résistivité électrique de Si en fonction de la température

# **NOS EXPERIENCES** **sur les métaux liquides**

# Cellule de mesure



## La mesure de la résistivité :

- Long capillaire
- 4 électrodes

## La mesure du pouvoir thermoélectrique absolu :

- Gradient de température
- 2 couples immergés dans le métal liquide (ou en contact électrique avec le métal liquide)
- On déduit la conductivité thermique

**MERCI (bis)**

# ANNEXE

Les coefficients de transport  
Quelques équations

On utilise les coefficients de transport généralisés

$$\vec{J}_e = e^2 K_{11} \vec{E} - (e / T_K) K_{12} (-\vec{\nabla} T_K)$$

$$\vec{Q}_e = -e / K_{21} \vec{E} + (1 / T_K) K_{22} (-\vec{\nabla} T_K)$$

$\vec{J}_e$  est la densité de courant

$\vec{Q}_e$  est la densité de flux de chaleur

$\vec{E} = -\vec{\nabla} V$  est le gradient de potentiel

$-\vec{\nabla} T$  est le gradient de température

La densité de courant et de flux de chaleur est proportionnelle au gradient de potentiel et de température

**Dans la matière désordonnée (liquide ou amorphe)  
l'espace est isotrope. Les coefficients  $K_{ij}$  sont des scalaires  
(pas des tenseurs comme dans les solides)**

$$\vec{J}_e = e^2 K_{11} \vec{E} - (e/T_K) K_{12} (-\vec{\nabla} T_K)$$

**A gradient de température nul :**

$$\vec{J}_e = \sigma \vec{E} = -\sigma \vec{\nabla} V$$

$$\sigma = e^2 K_{11}$$

C'est la loi d'Ohm microscopique,  
 $\sigma$  est la conductivité électrique



$$\vec{Q}_e = -\frac{1}{e} \frac{1}{K_{21}} \vec{E} + (1/T_K) K_{22} (-\vec{\nabla} T_K)$$

**Toujours à gradient de température nul :**

$$\vec{Q} = -\frac{1}{e} \frac{1}{K_{21}} \vec{E} = -\frac{\frac{1}{e} \frac{1}{K_{21}}}{e^2 K_{11}} \vec{J}_e = \pi \vec{J}_e$$

**$\pi$  est le coefficient de PELTIER**

$$\vec{J}_e = e^2 K_{11} \vec{E} - (e / T_K) K_{12} (-\vec{\nabla} T_K)$$

- **A densité de courant nul (circuit ouvert)**

$$\vec{E} = \frac{-K_{12}}{(e / K_{11} T_K)} (-\vec{\nabla} T_K) = S \vec{\nabla} T_K$$

**S** est le **Pouvoir Thermoélectrique Absolu** ou **coefficient de Seebeck**) d'**un** conducteur

$$\vec{J}_e = e^2 K_{11} \vec{E} - (e/T_K) K_{12} (-\vec{\nabla} T_K)$$

$$\vec{Q}_e = -1/e/K_{21} \vec{E} + (1/T_K) K_{22} (-\vec{\nabla} T_K)$$

- **Toujours à densité de courant nul (circuit ouvert)**

$$\vec{Q}_e = -\lambda \vec{\nabla} T$$

$$\lambda = \frac{K_{22} K_{11} - K_{12} K_{21}}{T_K K_{11}} \quad \lambda = \frac{(L_0 - S^2) T_K}{\rho} = (L_0 - S^2) T_K \sigma$$

C'est la loi de Fourier:

$\lambda$  est la conductivité thermique

Ceci nécessite la détermination expérimentale du coefficient de Thomson par des études calorimétriques entre 0 K et la température considérée. (1600 Celsius) en mesurant le dégagement de chaleur produit par effet Thomson (qui représente environ 1% de l'effet Joule !!!)

Puis, grâce à la première loi on obtient le coefficient de Peltier.

**On mesure le coefficient de Seebeck d'un couple.**

**Connaissant le coefficient de Seebeck d'un élément (platine) obtenu par la mesure du coefficient de Thomson,**

**On peut obtenir le coefficient de Seebeck de tout autre élément (sous forme d'élément pur ou d'alliage) .**

Le courant électrique transporté par **un** electron est

$$e\vec{v}f_k$$

Le flux de chaleur transporté par **un** electron est

$$(E_k - \mu_e)\vec{v}f_k$$

Le courant et le flux de chaleur transporté par **tous** les porteurs est:

$$\vec{J} = q \int_{ZB} \vec{v}f_k \frac{dV_k}{4\pi^3}$$

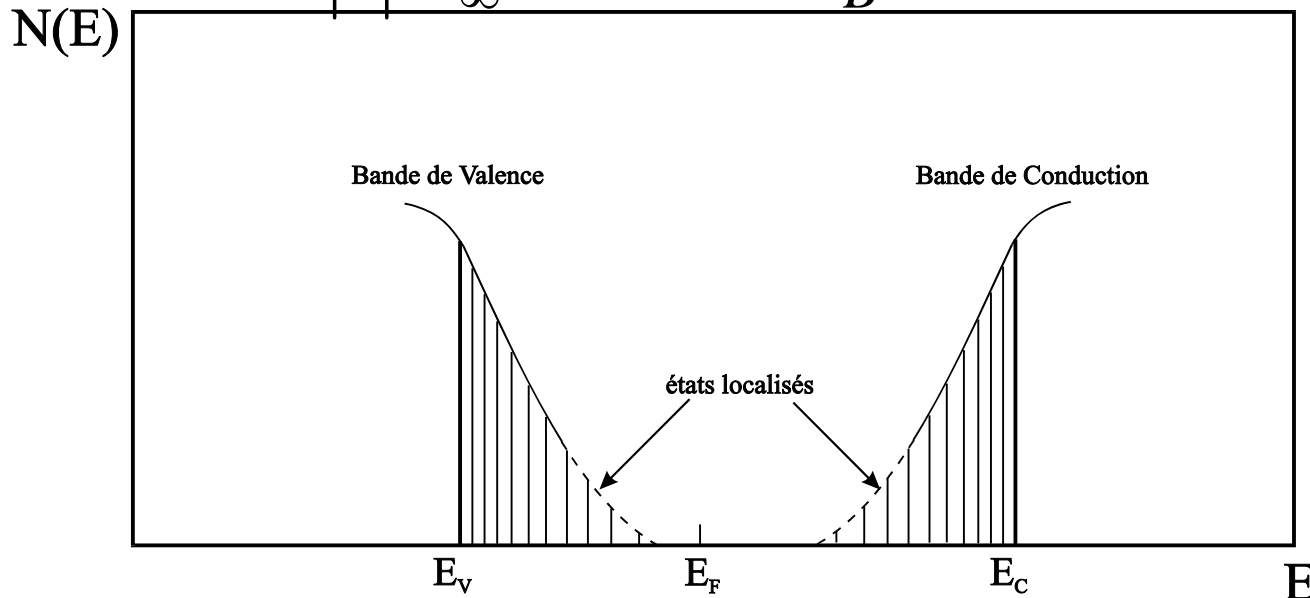
$$\vec{Q} = q \int_{ZB} (E_k - \mu_e)\vec{v}f_k \frac{dV_k}{4\pi^3}$$

# Quelques formules

Formalisme de Kubo Greenwood

$$\sigma = - \int_{-\infty}^{+\infty} \sigma(E) \frac{\partial f(E)}{\partial E} dE$$

$$S = - \frac{k_B}{|e|} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\sigma(E) [E - E_F]}{\sigma k_B T} \frac{\partial f(E)}{\partial E} dE$$



$$P(\theta) \propto \left| \langle \vec{k} | T | \vec{k}' \rangle \right|^2 N(E_F)$$