



UNIVERSITÉ DE STRASBOURG

# TD8

*Bernard Doudin*

Transcrit par  
PIERRE GUICHARD

L3 Semestre 6 2021

## 8.1 Énergie cinétique d'un gaz d'électrons

Montrer que l'énergie cinétique d'un gaz 3D de  $N$  électrons libres à température nulle est :

$$U_0 = \frac{3}{5} N \epsilon_F$$

$f(E)$  est une densité d'état. L'objectif est de calculer la valeur moyenne  $\langle E \rangle$ .

$$\langle E \rangle = \frac{\int_0^\infty d\epsilon f(\epsilon) p(\epsilon) \epsilon}{\int_0^\infty d\epsilon f(\epsilon) p(\epsilon)}$$

où  $p(\epsilon)$  est la fonction de Fermi-Dirac.

à  $T = 0$ ,

$$\int_0^\infty d\epsilon f(\epsilon) p(\epsilon) = \int_0^{\epsilon_F} d\epsilon f(\epsilon)$$

où  $\epsilon_F$  est l'énergie de Fermi.

On sait aussi que  $f(\epsilon) = \text{cste} \times \epsilon^{1/2}$ .

$$\langle E \rangle = \frac{\int_0^\infty d\epsilon f(\epsilon) p(\epsilon) \epsilon}{\int_0^\infty d\epsilon f(\epsilon) p(\epsilon)} = \frac{\int_0^{\epsilon_F} d\epsilon \epsilon^{3/2}}{\int_0^{\epsilon_F} d\epsilon \epsilon^{1/2}} = \frac{3}{5} \epsilon_F$$

Et on sait que :

$$U_0 = N \langle E \rangle = \frac{3}{5} N \epsilon_F$$

Uniquement vrai pour l'électron libre et pour  $f(\epsilon) \propto \epsilon^{1/2}$ .

## 8.2 Conductivité électrique en fonction de la fréquence

La vitesse de dérive des électrons est donnée par l'équation  $m \left( \frac{dv}{dt} + \frac{v}{\tau} \right) = -eE$ . En déduire l'expression de la conductivité en fonction de la fréquence  $\omega$  est :

$$\sigma(\omega) = \sigma(0) \left( \frac{1 + i\omega\tau}{1 + (\omega\tau)^2} \right)$$

Trouver l'expression de  $\sigma(0)$ .

On cherche une solution de la forme :

$$E(t) = E_0 \exp(-i\omega t) \qquad v(t) = v_0 \exp(-i\omega t)$$

Et on sait que :

$$j = n(-e)v_0 = \sigma(\omega)E_0$$

$$m \left( -i\omega v_0 \exp(-i\omega t) + \frac{v_0 \exp(-i\omega t)}{\tau} \right) = -eE_0 \exp(-i\omega t)$$

$$m \left( -i\omega + \frac{1}{\tau} \right) v_0 = -eE_0$$

Alors,

$$v_0 = -\frac{eE_0}{m(-i\omega + 1/\tau)} = -\frac{eE_0\tau}{m} \frac{1}{1 - i\omega\tau} = -\frac{eE_0\tau}{m} \frac{1 + i\omega\tau}{1 + (\omega\tau)^2}$$

Alors,

$$j = -nev_0 = \frac{ne^2E_0\tau}{m} \frac{1 + i\omega\tau}{1 + (\omega\tau)^2} = \sigma(\omega)E_0$$

C'est à dire :

$$\sigma(\omega) = \frac{ne^2\tau}{m} \frac{1 + i\omega\tau}{1 + (\omega\tau)^2}$$

Alors :

$$\sigma(0) = \frac{ne^2\tau}{m}$$

### 8.3 Changement de phase dans un alliage de CuZn

Le cuivre possède une structure cubique à faces centrées d'arête  $a$ . Si l'on substitue progressivement des atomes de cuivre (un électron libre par atome) par des atomes de zinc (deux électrons libres par atome), le rayon de la sphère de Fermi augmente sans modification de la structure cristalline de l'alliage (phase  $\alpha$ ). Lorsque la sphère de Fermi entre en contact avec la première zone de Brillouin, on a apparition de la phase  $\beta$  de structure cubique centrée.

L'objectif de cet exercice est de déterminer la concentration relative  $\rho_{\text{Zn}}$  des atomes de zinc correspondant au changement de phase  $\alpha \rightarrow \beta$  de l'alliage. On définit :

$$\rho = \frac{N_{\text{Zn}}}{N_{\text{Cu}} + N_{\text{Zn}}}$$

1. Écrire l'expression du vecteur de Fermi  $k_F$  en fonction de la concentration électronique  $n = N/V$  des électrons libres  
Calculer  $k_F$  pour le cuivre pur ( $a = 3.6 \text{ \AA}$ ).

Il y a deux états  $k$  par volume  $8\pi^3/V$ ,

$$N \equiv \text{nombre d'états dans la sphère de rayons } k_F = 2 \times \frac{\text{volume sphère}}{8\pi^3/V} = \frac{4/3\pi k_F^3}{4\pi^3} V$$

Alors,

$$n = \frac{k_F^3}{3\pi^2}$$

Et donc,

$$k_F = (3\pi^2 n)^{1/3}$$

Le cuivre pur est une structure CFC, il y a alors 4 atomes par maille de volume  $a^3$ ,

$$n_{\text{Cu}} = \frac{4}{a^3}$$

On trouve alors :

$$k_{F_{\text{Cu}}} = 1.36 \text{ \AA}^{-1}$$

2. Quelle est pour la structure CFC la distance  $k_M$  qui sépare le centre de la zone de Brillouin de sa face la plus proche ?

$$k_M = \frac{\sqrt{3}\pi}{a}$$

3. Après avoir exprimé  $k_F$  en fonction de  $a$  et  $\rho$ , déduire l'expression de  $\rho$  notée  $\rho_0$  pour laquelle  $k_F = k_M$ .

$$\begin{aligned} n &\equiv \text{densité d'électrons} = \text{densité d'atomes} \times (\text{fraction Cu} + 2 \times \text{fraction Zn}) \\ &= \frac{4}{a^3}(1 - \rho + 2\rho) \\ &= \frac{4}{a^3}(1 + \rho) \end{aligned}$$

Alors :

$$\frac{k_F = k_M}{\frac{(12\pi^2(1 + \rho_0))^{1/3}}{a}} = \frac{\sqrt{3}\pi}{a}$$

Alors,

$$\rho_0 = \frac{\sqrt{3}\pi}{4} - 1 = 0.36$$

4. Lorsque  $\rho = \rho_0$ , le réseau de l'alliage devient cubique centré de maille  $a'$ . (phase  $\beta$ ). Quelle est dans ce cas la nouvelle expression du vecteur d'onde de Fermi noté  $k'_F$  ?

Désormais en CC, on vas faire les mêmes calculs que précédemment, mais avec 2 atomes/mailles (plutôt que les 4 dans un CFC),

$$\begin{aligned} n'(\rho') &= \text{desnité d'atomes} \times (\text{fraction Cu} + 2 \times \text{fraction Zn}) \\ &= \frac{2}{a'^3} \times (1 + \rho') \end{aligned}$$

On sait que

$$k'_F = (3\pi^2 n')^{1/3}$$

5. Déterminer la nouvelle distance minimale  $k'_M$  séparant l'origine de la nouvelle première zone de Brillouin. En comparant  $k'_M$  à  $k'_F$  lorsque  $\rho = \rho_0$ , calculer l'expression  $\rho'_0$  pour laquelle  $k'_M = k'_F$  (transition de phase  $\alpha \rightarrow \beta$ ).

$k'_M$  est la demi-diagonale d'un carré de côté  $2\pi/a'$ ,

$$k'_M = \frac{\sqrt{2}}{2} \frac{2\pi}{a'} = \frac{\pi\sqrt{2}}{a'}$$

On pose  $k'_M = k'_F$  :

$$\frac{k'_F = k'_M}{\left(\frac{6\pi^2}{a'^3}(1 + \rho')\right)^{1/3}} = \frac{\pi\sqrt{2}}{a'}$$

On trouve alors,

$$\rho'_0 = \frac{\pi\sqrt{2}}{3} - 1 \approx 0.48$$

6. On suppose que les atomes de cuivre et de zinc se comportent comme des sphères dures ayant sensiblement le même rayon. Cette hypothèse implique que la substitution du cuivre par le zinc ne modifie pas sensiblement le paramètre cristallin. Dédurre la relation qui relie  $a$  et  $a'$  dans le changement de phase  $\alpha \rightarrow \beta$

CFC ( $\alpha$ ) :

$$R_\alpha = \frac{1}{2} \frac{a\sqrt{2}}{2}$$

CC ( $\beta$ ) :

$$R_\beta = \frac{1}{2} \frac{a'\sqrt{3}}{2}$$

Par hypothèse on pose  $R_\alpha = R_\beta$ , alors

$$\frac{a'}{a} = \sqrt{\frac{2}{3}}$$

7. Calculer l'énergie du gaz d'électrons libres à  $T = 0$  K relatif à  $N$  atomes dans la phase  $\alpha$  puis dans la phase  $\beta$ . Représenter graphiquement, remarques.

$$E_{\text{tot}} = \int_0^\infty d\varepsilon \varepsilon f(\varepsilon) F(\varepsilon)$$

où  $f$  désigne la densité d'état et  $F$  la statistique de Fermi-Dirac. Avec

$$f(\varepsilon) = \frac{V}{2\pi^2} \left( \frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} \sqrt{\varepsilon}$$

Alors, pour  $T = 0$ , et  $E_F$  l'énergie de Fermi,

$$\begin{aligned} E_{\text{tot}} &= \int_0^{E_F} d\varepsilon \varepsilon f(\varepsilon) \\ &= \frac{V}{2\pi^2} \left( \frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} \frac{2}{5} [\varepsilon^{5/2}]_0^{E_F} \\ &= \frac{V}{5\pi^2} \left( \frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} E_F^{5/2} \end{aligned}$$

Et on sait aussi que :

$$E_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m}$$

Alors,

$$E_{\text{tot}} = \frac{V\hbar^2}{10\pi^2 m} k_F^5$$