



UNIVERSITÉ DE STRASBOURG

TD9

Bernard Doudin

Transcrit par
PIERRE GUICHARD

L3 Semestre 6 2021

9.1 Électrons de valence du lithium

Les électrons de valence du lithium, un par atome, se comportent comme s'ils étaient libres. Le nombre d'électrons par unité de volume est de $n = 4.7 \times 10^{22} \text{ cm}^{-3}$.

1. Déterminer l'énergie de Fermi du lithium.

$n \rightarrow E_f$, $E_F = f(n)$. On se rappelle que dans l'espace réciproque, il y a 2 électrons (à cause du spin) dans un volume $(2\pi)^3/L_x L_y L_z$.

L'électron libre à $T = 0$, état occupé si $||\vec{k}|| < k_F$ où k appartient à la sphère de rayon k_F de volume $4/3\pi k_F^3$.

$$\text{nombre d'électrons} = N = \frac{\frac{4}{3}\pi k_F^3}{\frac{4\pi^3}{V}} = \frac{k_F^3}{3\pi^2} V = N$$

Alors,

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

On sait que

$$E_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m} (3\pi^2 n)^{2/3}$$

Application numérique :

$$E_F = 4.72 \text{ eV}$$

2. Calculer sa température de Fermi ainsi que la vitesse des électrons sur la surface de Fermi.

$$T_F = \frac{E_F}{k_B} \approx 54.8 \times 10^3 \text{ K}$$

$$v_F = \sqrt{\frac{2mE_F}{m}} = 1288 \text{ km/s}$$

3. La résistivité étant de l'ordre $10^{-5} \Omega\text{cm}$ à température ambiante, quel est le temps de relaxation τ et le libre parcours moyen λ des électrons de conduction.

$$j = \sigma E = -nev_D$$

$$\Delta v = -\frac{eEt}{m}$$

$$j = -nev \approx -ne\Delta v = \frac{ne^2 E\tau}{m}$$

τ c'est le temps moyen avant collision,

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

Application numérique, $\sigma = 1/\rho$,

$$\tau = 0.75 \times 10^{-14} \text{ s} = \text{quelques femtosecondes}$$

Alors, le libre parcours moyen,

$$\lambda = v_F\tau \approx 10 \text{ nm}$$

9.2 Électrons libres dans un réseau rectangulaire

On considère un réseau cristallin bidimensionnel dont la maille est décrite par un réseau de Bravais rectangulaire de dimensions $a_1 = 3 \text{ \AA}$ et $a_2 = 4 \text{ \AA}$. Le motif associé est constitué d'un atome de l'espèce A en $(0, 0)$ et d'un atome de l'espèce B en $(1/2, 1/2)$.

1. Caractériser le réseau réciproque associé en utilisant la maille indiquée précédemment. Donner la symétrie et les dimensions de la première zone de Brillouin en situant les limites de zone dans les directions $(1\ 0)$, $(0\ 1)$ et $(1\ 1)$.

Réseau orthorhombique,

$$\vec{a}_i \cdot \vec{b}_j = 2\pi\delta_{ij}$$

$$\vec{b}_1 \parallel \vec{a}_1 \text{ et } \vec{b}_2 \parallel \vec{a}_2$$

$$b_1 = \frac{2\pi}{a_1} = 2.09 \text{ \AA}^{-1}$$

$$b_2 = \frac{2\pi}{a_2} = 1.57 \text{ \AA}^{-1}$$

2. Calculer les vecteurs élémentaires du réseau réciproque dans le cas particulier où les atomes A et B sont chimiquement identiques. Préciser la forme de la nouvelle zone de Brillouin en comparaison avec celle du cas général.

Réseau orthorhombique centré, si $A=B$, il y a alors la translation $\frac{1}{2}(\vec{a}_1 + \vec{a}_2)$,

On peut construire (\vec{a}'_1, \vec{a}'_2) une base du réseau primitif,

$$\vec{a}'_1 = \frac{1}{2}(\vec{a}_1 - \vec{a}_2)$$

$$\vec{a}'_2 = \frac{1}{2}(\vec{a}_1 + \vec{a}_2)$$

On a toujours la relation

$$\vec{a}'_i \cdot \vec{b}'_j = 2\pi\delta_{ij}$$

$$\vec{b}'_1 = \begin{pmatrix} b_{11} \\ b_{12} \end{pmatrix} = \frac{2\pi}{a_1}\hat{x} - \frac{2\pi}{a_2}\hat{y}$$

$$\vec{b}'_2 = \begin{pmatrix} b_{21} \\ b_{22} \end{pmatrix} = \frac{2\pi}{a_1}\hat{x} + \frac{2\pi}{a_2}\hat{y}$$

3. On se place maintenant dans le cas où A et B sont chimiquement différents, chaque atome fournissant un électron de valence au réseau. Dans une approche des électrons libres, exprimer le vecteur d'onde de Fermi k_F en fonction de a_1 et a_2 pour ce réseau bidimensionnel. Représenter le "surface" (unidimensionnelle) de Fermi par rapport à la zone de Brillouin obtenue dans la partie 1. Est-elle entièrement contenue dans la première zone de Brillouin ?

$$\begin{aligned} \text{nombre de particules} &= \frac{\text{surface du disque de rayon } k_F}{\text{surface d'une valeur possible de } k} \\ &= 2 \frac{\pi k_F^2}{\frac{2\pi}{L_x} \frac{2\pi}{L_y}} \end{aligned}$$

Il y a un facteur 2 à cause du spin. C'est à dire,

$$N = k_F^2 \frac{L_x L_y}{2\pi}$$

Et en posant $n = N/S$ on trouve,

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

A et B fournissent un électron par atome,

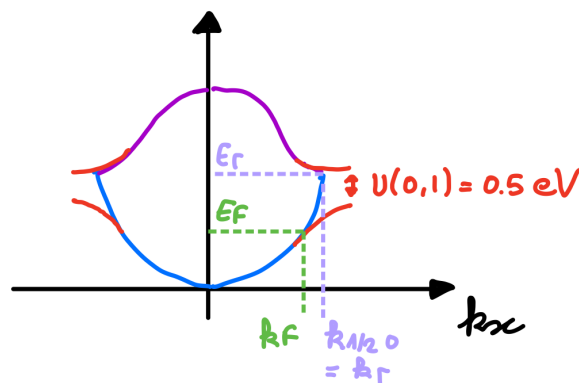
$$n = \frac{2}{a_1 a_2}$$

En faisant l'application numérique,

$$k_F = \sqrt{\frac{\pi}{3}} \text{ \AA}^{-1} \approx 1.02 \text{ \AA}^{-1}$$

- Représenter la relation de dispersion des électrons libres dans la direction (1 0) dans le schéma des zones réduites.
- Une description plus réaliste de la relation de dispersion des électrons de valence doit tenir compte du potentiel périodique auquel sont soumis les électrons. Si le potentiel est faible, nous pouvons utiliser la théorie des électrons presque libres. Dans cette approche, pour quelles régions de la zone de Brillouin une théorie de perturbation au premier ordre donne une bonne description, et pour quelles autres faut-il aller au delà ?

La perturbation approximé à l'ordre 1 permet une renormalisation de l'énergie, la où à l'ordre 2 cela modifie $E(k)$ au bord de la zone de Brillouin



- Représenter, dans l'approche des électrons presque libres, la relation de dispersion dans la direction $(0, 0) \rightarrow (0, 1)$ dans le schéma des zones réduites, en sachant que, pour cette direction, l'élément de matrice de la perturbation est $U(0, 1) = 0.5 \text{ eV}$.

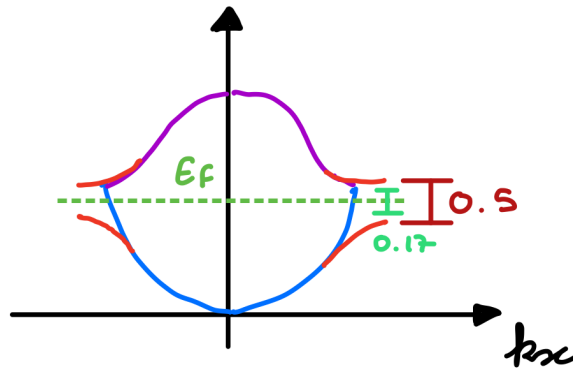
$$E_F = \frac{\hbar^2}{2m} k_F^2 = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{4\pi}{a_1 a_2}$$

$$E_\Gamma = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\pi}{a_1} \right)^2$$

Alors,

$$E_\Gamma - E_F = \frac{\hbar^2 \pi}{2m a_1} \left(\frac{\pi}{a_1} - \frac{4}{a_1} \right)$$

En faisant l'application numérique, on trouve $\Delta E = 0.19$ eV.



Il n'y a pas d'états conducteur.

7. Refaire les questions 4. et 6. (relation de dispersion des électrons libres et électrons presque libres) pour la direction $(0\ 0) \rightarrow (1\ 1)$ en sachant que $U(1, 1) = 0.6$ eV.

$$E_{\Gamma_2} = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\pi^2}{a_1^2} + \frac{\pi^2}{a_2^2} \right)$$

Alors,

$$E_{\Gamma_2} - E_F = \frac{\hbar^2 \pi}{2m} \left(\frac{\pi}{a_1^2} + \frac{\pi}{a_2^2} - \frac{4}{a_2} \right) = 2.52 \text{ eV} > 0.6 \text{ eV}$$

La bande de valence est partiellement remplie.

8. Le matériau est-il conducteur ou isolant ? Pourquoi ?