Jaqueline Bloch, jacqueline.bloch@c2n.upsaclay.fr ; Mark Goerbig, goerbig@lps.u-psud.fr

1 Conductance dans le modèle de Drude (éventuellement à faire à l'amont

Le modèle de Drude est basé sur l'équation de Newton selon laquelle un électron de *masse de bande* m et de charge $-e$ dans un matériau est accéléré par un champ électrique $\mathbf{E}$ et subit une force de Lorentz par un champ magnétique $\mathbf{B}$,

$$\frac{d\mathbf{p}}{dt} = -e\left(\mathbf{E} + \frac{\mathbf{p}}{m} \times \mathbf{B}\right) - \frac{\mathbf{p}}{\tau}. \tag{1}$$

Le dernier terme (phénoménologique) indique que le mouvement est délimité par une force de frottement, décrite par un temps de relaxation τ et due à des collisions avec des impuretés et des défauts du réseau. Pour simplifier la discussion, nous considérons un système 2D, où le champ $\mathbf{B}$ est perpendiculaire à la surface (xy).

1. Expliquer qualitativement pourquoi les ≪ collisions ≫ entre un électron et les atomes du réseau ne sont pas pris en compte par ce temps de relaxation. Autrement dit : pourquoi ne s'agit-il pas de vraies collisions ?
2. On cherche la solution stationnaire $d\mathbf{p}/dt = 0$ de cette équation en la mettant sous la forme matricielle $\mathbf{E} = \rho \boldsymbol{j}$, où
$$\boldsymbol{j} = -en_{\text{el}}\frac{\mathbf{p}}{m}$$
est la densité de courant (2D) en termes de densité électronique 2D n_{el}. L'idée sous-jacente de ce modèle est la suivante : l'impulsion $\mathbf{p}$ est une valeur moyenne des $N = n_{\text{el}}A$ électrons dans le plan qui contribuent aux propriétés de conduction de ce film de surface A. Donner la forme du *tenseur de résistivité* ρ et du *tenseur de conductivité* $\sigma = \rho^{-1}$. Pour cela, nous définissons la conductivité de Drude
$$\sigma_0 = \frac{n_{\text{el}}e^2\tau}{m}$$
ainsi que la fréquence cyclotron
$$\omega_C = \frac{eB}{m}.$$

2 Densité d'états

Comme nous l'avons vu en cours, la densité d'états est une quantité très utile pour calculer des moyennes statistiques d'un ensemble de particules physiques. Le but du TD étant le calcul de la conductivité d'un ensemble d'électrons dans les matériaux, nous rappelons que la valeur moyenne d'une grandeur physique A dans un système de dimension d s'écrit

$$A = g\sum_{\mathbf{k}} A_{\mathbf{k}} f[\epsilon(\mathbf{k})] = \frac{L^d}{(2\pi)^d}\int d^dk\, A_{\mathbf{k}} f[\epsilon(\mathbf{k})], \tag{2}$$

où la somme porte sur les nombres quantiques orbitaux (ici les vecteurs d'onde), g désigne une dégénérescence interne (comme le spin des électrons ou la double dégénérescence de vallée dans le cas du graphène), et $A_{\mathbf{k}}$ est la valeur que prend la grandeur A dans l'état $|\mathbf{k}\rangle$. (N.B. : Elle peut également être vue comme une moyenne – quantique cette fois-ci – $A_{\mathbf{k}} = \langle\mathbf{k}|\hat{A}|\mathbf{k}\rangle$.)

De plus, $f(\epsilon) = [\exp(\beta(\epsilon - \mu) + 1]^{-1}$ est le facteur d'occupation de Fermi-Dirac, en termes de $\beta = 1/k_B T$ (inverse de la température) et de potentiel chimique μ. Au lieu de calculer cette somme (discrète), il s'avère souvent être plus simple de passer par une intégrale sur les énergies, notamment lorsque tous les termes de l'expression (2) ne dépendent que de l'énergie $\epsilon = \epsilon(\mathbf{k})$. Dans ce cas, l'intégrale s'écrit

$$A = L^d \int d\epsilon \, \rho(\epsilon) A(\epsilon) f(\epsilon), \tag{3}$$

où $\rho(\epsilon) = D(\epsilon)/L^d$ est la densité d'états par unité de volume (en dimension d). Nous rappelons (voir cours) que la densité d'états s'écrit, pour une relation de dispersion isotrope $\epsilon(k = |\mathbf{k}|)$ et inversible,

$$\rho(\epsilon) = \frac{g}{(2\pi)^d} \mathcal{S} \left(\frac{dk}{d\epsilon} \right) k^{d-1}(\epsilon) = \frac{g}{(2\pi)^d} \mathcal{S} \frac{1}{\hbar v} k^{d-1}(\epsilon), \tag{4}$$

où $\mathcal{S}$ est la surface d'une sphère unité en dimension d, et où nous avons exprimé la densité d'états en termes de vitesse de groupe (radiale)

$$v = \frac{1}{\hbar} \frac{d\epsilon}{dk}$$

dans la dernière ligne.

1. Nous considérons la limite continue d'une bande, dans l'approximation parabolique, *i.e.* $\epsilon = \hbar^2 k^2 / 2m$, où m est la masse de bande. Calculer la densité d'états dans les dimensions $d = 1$, 2 et 3.
2. Comment la densité d'états s'écrit-elle pour une relation de dispersion linéaire (graphène), $\epsilon = \hbar v k$? Généraliser aux dimensions $d = 1$ et 3.
3. Un gaz d'électrons (non relativistes) est confiné à l'interface de deux semiconducteurs, de sorte que son mouvement perpendiculaire à l'interface est quantifié en niveaux d'énergie ϵ_n. Dans le plan de l'interface, le mouvement est celui d'électrons libres de masse effective m. Comment varie la densité d'états $\rho(\epsilon)$?
4. Le gaz $2D$ est maintenant confiné en un canal unidimensionnel de largeur W. Le potentiel de confinement est supposé avoir la forme d'un puits carré infini.
   — Montrer que les niveaux d'énergie sont donnés par

   $$\epsilon_{n,j}(k_x) = \epsilon_n + j^2 \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mW^2} + \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m} \tag{5}$$

   où k_x désigne le vecteur d'onde le long du canal 1D.
   — Tracer la densité d'états à l'énergie ϵ.

3 Traitement statistique de la conductivité

Nous adopterons dans cet exercice une perspective statistique de la conduction. De manière tout à fait générale, la densité de courant d'un gaz d'électrons (en dimension d) est donnée par

$$j_x = -\frac{2e}{L^d} \sum_{\mathbf{k}} v_x(\mathbf{k}) f[\epsilon(\mathbf{k})], \tag{6}$$

où $v_x(\mathbf{k})$ est la vitesse de l'électron dans l'état $\mathbf{k}$ et $f(\epsilon) = [\exp(\beta(\epsilon - \mu) + 1]^{-1}$ le facteur d'occupation de Fermi-Dirac, en termes de $\beta = 1/k_B T$ (inverse de la température) et de potentiel chimique μ. Pour simplifier la discussion, nous considérons ici la composante x de la densité de courant et sa réponse à un champ électrique appliqué dans cette direction, en l'absence de champ magnétique. Le facteur 2 dans l'expression (6) tient compte de la double dégénérescence de spin ici.

1. En considérant que la vitesse dans l'état $\mathbf{k}$ est donnée par la vitesse de groupe $v_x = \partial\epsilon/\hbar\partial k_x$, expliquer pourquoi la densité de courant est nulle en l'absence de champ électrique.
2. En présence d'un champ électrique, nous montrerons que chaque état $\mathbf{k}$ subit un déplacement $\Delta\mathbf{k}$ proportionnel au champ électrique. Pour cela, nous pouvons à nouveau faire appel à l'équation du mouvement (1) pour l'état $\mathbf{k}$,

$$\hbar\frac{d\mathbf{k}}{dt} = -e\mathbf{E} - \hbar\frac{\Delta\mathbf{k}}{\tau}, \tag{7}$$

   et chercher sa solution stationnaire. Montrer que la densité de courant (6) peut alors s'écrire

$$j_x = -\frac{2e}{L^d}\sum_{\mathbf{k}} v_x(\mathbf{k}) f[\epsilon(\mathbf{k} - \Delta k_x \mathbf{u}_x)], \tag{8}$$

   où $\mathbf{u}_x$ est le vecteur unité dans la direction x.
3. Pourquoi la densité de courant reste-t-elle nulle pour une bande de Bloch pleine (cas d'un isolant) ?
4. En linéarisant la fonction de Fermi pour un champ électrique faible, montrer que la conductivité s'écrit

$$\sigma = 2\frac{e^2\tau}{L^d}\sum_{\mathbf{k}} v_x^2(\mathbf{k})\left(-\frac{\partial f}{\partial\epsilon}\right)\bigg|_{\epsilon(\mathbf{k})}. \tag{9}$$

5. Montrer que la conductivité (9) peut aussi se mettre sous la forme :

$$\sigma = e^2\tau\int d\epsilon\, v_x^2(\epsilon)\rho(\epsilon)\left(-\frac{\partial f}{\partial\epsilon}\right) \tag{10}$$

   en termes de densité d'états.
6. Montrer que, si ni la vitesse ni la densité d'états ne varie fortement dans un intervalle $k_BT \ll \epsilon_F$ autour du niveau de Fermi ϵ_F, la conductivité peut s'écrire comme (relation d'Einstein)

$$\sigma = e^2 D\rho(\epsilon_F), \tag{11}$$

   en termes de coefficient de diffusion

$$D = \frac{v_F^2}{d}\tau = \frac{v_F l_e}{d}, \tag{12}$$

   où nous avons introduit le libre parcours moyen $l_e = v_F\tau$.
7. Montrer que la conductance d'un conducteur de longueur L et de section W^{d-1} peut alors s'écrire

$$G = \sigma\frac{W^{d-1}}{L} = 2\frac{e^2}{h}\frac{\mathcal{S}}{d}\frac{l_e}{L}\left(\frac{W}{\lambda_F}\right)^{d-1}, \tag{13}$$

   en termes de longueur d'onde de Fermi $\lambda_F = 2\pi/k_F$ et de vecteur d'onde de Fermi $k_F = k(\epsilon_F)$.
8. *(Pour la maison)* Retrouver l'expression $\sigma_0 = e^2 n_{\text{el}}\tau/m$ pour la conductivité de Drude pour une relation de dispersion parabolique $\epsilon(\mathbf{k}) = \hbar^2k^2/2m$. (*Indication :* Pour cela écrire la densité électronique en termes de densité d'états au niveau de Fermi, et montrer que $\rho(\epsilon_F) = (d/2)n_{\text{el}}/\epsilon_F$.)

4 Conduction quantique d'un fil 1D

Nous nous intéressons maintenant au courant d'un fil quantique 1D entre deux réservoirs, au potentiel chimique $\mu_1 = \epsilon_F - eV_1$ à gauche et $\mu_2 = \epsilon_F - eV_2$ à droite. La différence de potentiel est générée par une tension $V = V_1 - V_2$ entre les deux réservoirs (contacts). Nous considérons un diffuseur dans le fil modélisé par une barrière de potentiel quantique, et nous calculons le courant transmis (de gauche à droite). Nous rappelons que la densité de courant est identique au courant en 1D, en raison de l'équation de continuité $I = \int dx\, \nabla \cdot \boldsymbol{j} = j_x$.

1. Rappeler que la densité de courant d'un état $|k\rangle$ décrivant une onde plane de vecteur d'onde k à droite de la barrière s'écrit

$$j_D = -\frac{ev_k}{L} T, \tag{14}$$

   où $T = |t|^2$ est le coefficient de transmission. Pour cela rappeler que l'onde transmise de gauche à droite s'écrit $\psi_D = t \exp(ikx)/\sqrt{L}$ alors que la fonction d'onde à gauche s'écrit $\psi_G = [\exp(ikx) + r \exp(-ikx)]/\sqrt{L}$, où le deuxième terme indique l'onde reflechie.

2. En sommant sur tous les états occupés, montrer que le courant transmis de gauche à droite peut s'écrire sous la forme

$$I_\rightarrow = -2\frac{e}{L} \sum_{k>0} v_k T(\epsilon_k) f(\epsilon_k + eV_1). \tag{15}$$

   De même, on trouve pour le courant transmis de droite à gauche

$$I_\leftarrow = -2\frac{e}{L} \sum_{k<0} v_k T(\epsilon_k) f(\epsilon_k + eV_2). \tag{16}$$

3. Montrer que, à l'aide de la densité d'états 1D $\rho(\epsilon) = 2/\pi\hbar v(\epsilon)$, le courant total peut s'écrire

$$I = I_\rightarrow - I_\leftarrow = -2\frac{e}{h} \int d\epsilon\, T(\epsilon) \left[f(\epsilon + eV_1) - f(\epsilon + eV_2) \right]. \tag{17}$$

   À l'aide d'un développement limité en $|eV_j| \ll \epsilon_F$ des facteurs de Fermi-Dirac, montrer que la conductance s'écrit

$$G = 2\frac{e^2}{h} \int d\epsilon \left(-\frac{\partial f}{\partial \epsilon} \right) T(\epsilon) \simeq 2\frac{e^2}{h} T(\epsilon_F), \tag{18}$$

   où nous avons fait l'hypothèse $k_B T \ll \epsilon_F$ dans le dernier pas.