
Relation d'Einstein pour la conductivité

La relation de Drude $\sigma = ne^2\tau_e/m$, ne s'applique que pour un gaz d'électrons libres ou pour une relation de dispersion quadratique. On va établir ici une expression générale de la conductivité valable pour toute relation de dispersion.

On veut généraliser la formule de Drude au cas d'un spectre quelconque dans un solide décrit par plusieurs bandes $\epsilon_n(\mathbf{k})$. On rappelle que la conductivité σ mesure la densité de courant \mathbf{j} induite par un champ électrique extérieur \mathbf{E} . Ainsi pour un champ appliqué selon l'axe Ox , on note

$$j_x = \sigma E_x .$$

De façon tout à fait générale, la densité de courant résulte des contributions de tous les états électroniques occupés. En l'absence de champ appliqué, elle s'écrit:

$$j_x = -\frac{2e}{V} \sum_{n,\mathbf{k}} v_x^{(n)}(\mathbf{k}) f[\epsilon_n(\mathbf{k})] , \quad (1)$$

où V est le volume, $f(\epsilon)$ est la distribution de Fermi et $-e$ la charge de l'électron. La vitesse de groupe dans la direction Ox , $v_x^{(n)}(\mathbf{k})$ est donnée par la relation

$$\hbar v_x^{(n)}(\mathbf{k}) = \frac{\partial \epsilon_n(\mathbf{k})}{\partial k_x}$$

1 - Montrer que, en l'absence de champ extérieur, le courant est nul.

On applique maintenant un champ électrique extérieur \mathbf{E} selon l'axe Ox . Il existe alors un courant dans la direction x , donné par

$$j_x = -\frac{2e}{V} \sum_{n,\mathbf{k}} v_{n,x}(\mathbf{k}) f[\epsilon_n(\mathbf{k} - \Delta k_x \mathbf{i})] , \quad (2)$$

où \mathbf{i} est un vecteur unitaire le long de la direction Ox .

2 - Justifier cette formule et donner la valeur de Δk_x . On décrit les collisions subies par les électrons par une force de frottement visqueux et un temps caractéristique noté τ_e , appelé temps de relaxation ou temps de collision.

3 - Montrer que la conductivité d'une bande pleine est nulle à $T = 0$.

On suppose maintenant qu'il n'existe qu'une bande au niveau de Fermi, de relation de dispersion $\epsilon(\mathbf{k})$ et on note $\hbar v_x(\mathbf{k}) = \partial \epsilon(\mathbf{k}) / \partial k_x$.

4 - En linéarisant la fonction de Fermi pour un champ électrique faible, montrer que la conductivité s'écrit:

$$\sigma = 2 \frac{e^2 \tau_e}{V} \sum_{\mathbf{k}} v_x^2(\mathbf{k}) \left(-\frac{\partial f}{\partial \epsilon} \right) \Big|_{\epsilon(\mathbf{k})} \quad (3)$$

et qu'elle peut aussi se mettre sous la forme:

$$\sigma = e^2 \tau_e \int_{-\infty}^{\infty} v_x^2(\epsilon) \rho(\epsilon) \left(-\frac{\partial f}{\partial \epsilon} \right) d\epsilon \quad (4)$$

où $\rho(\epsilon)$ est la densité d'états par unité de volume et où $v_x^2(\epsilon)$ est la vitesse quadratique moyenne à l'énergie ϵ , définie par:

$$\rho(\epsilon)v_x^2(\epsilon) = \frac{2}{V} \sum_{\mathbf{k}} v_x^2(\mathbf{k})\delta[\epsilon - \epsilon(\mathbf{k})] . \quad (5)$$

À basse température, le temps de collision est déterminé par les collisions sur des impuretés statiques et il ne dépend pas de la température. C'est pourquoi la conductivité d'un métal est constante à basse température (loi de Matthiessen). À partir de maintenant, on suppose donc que τ_e est une constante indépendante de la température.

5 - Montrer que si la densité d'états ne varie pas dans un intervalle d'énergie d'ordre $k_B T$ autour de ϵ_F , la conductivité est effectivement indépendante de la température et s'écrit:

$$\sigma = e^2 D \rho(\epsilon_F) \quad (6)$$

où on a introduit le coefficient de diffusion

$$D = v_x^2(\epsilon_F)\tau_e = \frac{v_F^2}{d} \tau_e . \quad (7)$$

6 - Cette expression est très générale et ne dépend pas de la relation de dispersion. Montrer que pour une relation de dispersion quadratique et isotrope $\epsilon(\mathbf{k}) = \hbar^2 k^2 / 2m$, on retrouve la formule de Drude. On rappelle que dans ce cas le nombre (par unité de volume) d'états d'énergie inférieure à ϵ est de la forme $n(\epsilon) = A\epsilon^{d/2}$, où d est la dimension de l'espace.