

COURS V

1. Quantification des états
2. Densité d'états
3. Vecteur et énergie de Fermi, k_F et ε_F
4. Cas marquant : l'approximation de l'électron libre

QUANTIFICATION DES ETATS

Cas 1D - conditions aux limites pour la fonction d'onde:

$$\psi_k(0) = \psi_k(L)$$

où $L=Na$ est la longueur du cristal

$$\Rightarrow \text{(théorème de Bloch)} \quad \psi_k(0) = \psi_k(0)\exp(ikL)$$

$$\Rightarrow kL = n2\pi \quad \Rightarrow \quad k = n \frac{2\pi}{L} \quad |k_{\max}| = \frac{\pi}{a}$$

$$\text{Cas 3D:} \quad k_x = n_x \frac{2\pi}{L_x} \quad k_y = n_y \frac{2\pi}{L_y} \quad k_z = n_z \frac{2\pi}{L_z}$$

où $V=L_xL_yL_z$ est le volume du cristal (on le suppose cubique)

DENSITE D'ETATS DANS L'ESPACE RECIPROQUE

1D

L'interval entre etats k est: $\Delta k = \frac{2\pi}{L} \Rightarrow \frac{dN}{dk} \approx \frac{\Delta N}{\Delta k} = \frac{L}{2\pi}$

où N designe le nombre des etats

La grandeur $\frac{dn}{dk} = \frac{1}{L} \frac{dN}{dk} = \frac{1}{2\pi}$

est appelée densité (linéique) d'états dans l'espace k

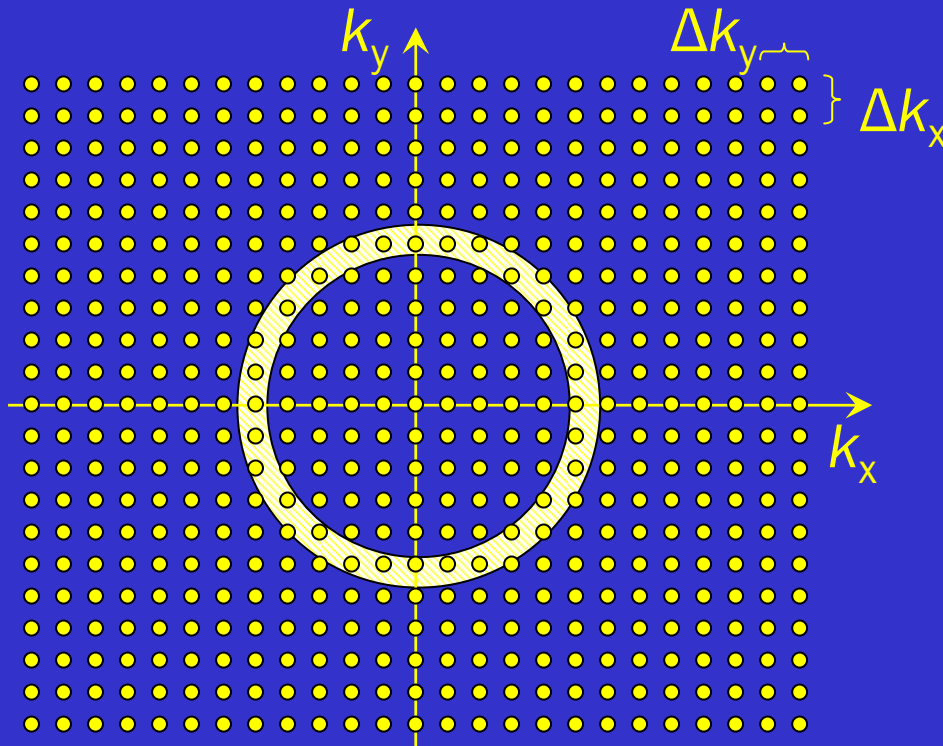
DENSITE D'ETATS DANS L'ESPACE RECIPROQUE

2D

L'intervalle entre états k est:

$$\Delta k_x = \frac{2\pi}{L_x}$$

$$\Delta k_y = \frac{2\pi}{L_y}$$



Le nombre d'états disponible dans l'intervalle Δk est:

$$\Delta N \approx \frac{L_x}{2\pi} \frac{L_y}{2\pi} 2\pi k \Delta k \Rightarrow$$

$$\frac{dN}{dk} = \frac{S}{2\pi} k$$

$$\frac{dn}{dk} = \frac{1}{2\pi} k$$

où S est la surface du cristal et $n=N/S$ est la densité surfacique d'états

DENSITE D'ETATS DANS L'ESPACE RECIPROQUE

3D

L'intervalle entre états k est:

$$\Delta k_x = \frac{2\pi}{L_x}$$

$$\Delta k_y = \frac{2\pi}{L_y}$$

$$\Delta k_z = \frac{2\pi}{L_z}$$

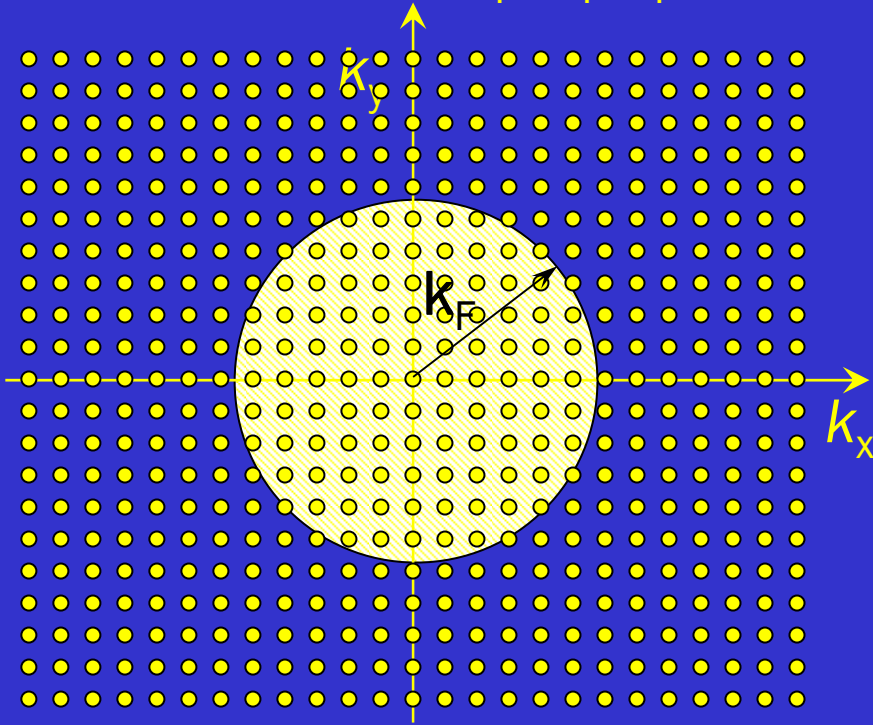
Un raisonnement analogue a celui en 2D conduit au résultat:

$$\Delta N \approx \frac{L_x}{2\pi} \frac{L_y}{2\pi} \frac{L_z}{2\pi} 4\pi k^2 \Delta k \quad \Rightarrow \quad \frac{dN}{dk} = \frac{V}{2\pi^2} k^2 \quad \frac{dn}{dk} = \frac{1}{2\pi^2} k^2$$

où V est le volume du cristal et $n=N/V$ est la densité volumique d'états

VECTEUR ET ENERGIE DE FERMI

L'énergie de Fermi ε_F est l'énergie de l'état occupé d'énergie maximale pour $T=0$ K (état fondamental). Le vecteur d'onde correspondant $\varepsilon_F = \varepsilon_F(k_F)$ est appelé vecteur de Fermi, k_F .



- La connaissance de la relation de dispersion permet de connaître ε_F à partir de k_F est vice-versa
- Nota bene: dans le cas général, k_F dépend de la direction dans l'espace k . Cependant, nous allons souvent considérer le cas isotrope.

RELATION ENTRE DENSITE ELECTRONIQUE ET VECTEUR DE FERMI

Considérons un cristal contenant N_e électrons. La valeur de k_F est déterminée par la relation:

$$1D \quad N_e = 2 \int_{-k_F}^{k_F} \frac{dN}{dk} dk = 2 \frac{L}{2\pi} \int_{-k_F}^{k_F} dk = \frac{2}{\pi} k_F L \quad \Rightarrow \quad k_F = \frac{\pi}{2} n_e$$

$$2D \quad N_e = 2 \int_0^{k_F} \frac{dN}{dk} dk = 2 \frac{S}{4\pi^2} \int_0^{k_F} 2\pi k dk = \frac{S}{2\pi} k_F^2 \quad \Rightarrow \quad k_F = \sqrt{2\pi n_e}$$

$$3D \quad N_e = 2 \int_0^{k_F} \frac{dN}{dk} dk = 2 \frac{V}{8\pi^3} \int_0^{k_F} 4\pi k^2 dk = \frac{V}{3\pi^2} k_F^3 \quad \Rightarrow \quad k_F = \left(3\pi^2 n_e\right)^{\frac{1}{3}}$$

où n_e est la densité (linéique, surfacique ou volumique) d'électrons et le facteur 2 devant les intégrales tient compte de la dégénérescence de spin

RELATION ENTRE DENSITE ELECTRONIQUE ET ENERGIE DE FERMI

A partir du résultat précédent et de la relation de dispersion $\varepsilon_F(k_F)$, le calcul de l'énergie de Fermi est immédiat:

$$N_e = 2 \int_0^{\varepsilon_F} \frac{dN}{d\varepsilon} d\varepsilon = 2 \int_0^{\varepsilon_F} \frac{\partial N}{\partial k} \frac{\partial k}{\partial \varepsilon} d\varepsilon$$

où $dN/d\varepsilon$ désigne la densité d'états dans l'espace de l'énergie.

Le calcul est explicite dans l'approximation des électrons libres:

$$\varepsilon_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad \Rightarrow \quad \frac{\partial k}{\partial \varepsilon} = \frac{1}{\hbar} \sqrt{\frac{m}{2\varepsilon}} \quad \Rightarrow \quad \frac{\partial N}{\partial \varepsilon} = \begin{cases} \frac{L}{2\pi\hbar} \sqrt{\frac{m}{2\varepsilon}} & \text{1D} \\ \frac{mS}{2\pi\hbar^2} & \text{2D} \\ \frac{m^{3/2}V}{\sqrt{2}\pi^2\hbar^3} \sqrt{\varepsilon} & \text{3D} \end{cases}$$

NOTATIONS

Souvent, on considère la densité d'états normalisée au volume (ou à la longueur ou à la surface):

$$\frac{\partial n}{\partial \varepsilon} = \begin{cases} \frac{1}{2\pi\hbar} \sqrt{\frac{m}{2\varepsilon}} & \text{1D} \\ \frac{m}{2\pi\hbar^2} & \text{2D} \\ \frac{m^{3/2}}{\sqrt{2\pi^2\hbar^3}} \sqrt{\varepsilon} & \text{3D} \end{cases}$$

Dans certains cas, le facteur 2 dû à la multiplicité de spin est inclus dans la définition de la densité d'états.