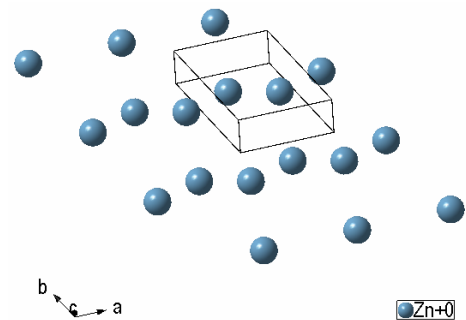


TD4 – Densité d'états et énergie de Fermi

**1. Réseaux en 2D.** Considérer en 2D un réseau carré ayant un paramètre de maille  $a=3 \text{ \AA}$  et un électron par maille. Dans l'approximation des électrons libres :

- 1a. calculer l'énergie de Fermi  $\varepsilon_F$  ;
- 1b. représenter les courbes isoénergétiques dans le réseau réciproque ;
- 1c. le matériau sera-t-il un métal ou un isolant ? Et avec deux électrons par maille ?

**2. Réseaux en 3D.** Le zinc adopte la structure cristalline hexagonale compacte (hcp, voir figure) de paramètres de maille  $a = 2.66 \text{ \AA}$  et  $c = 4.95 \text{ \AA}$ . Sachant que le zinc est divalent, en appliquant l'approximation des électrons libres, on calculera :



- 2a. la densité des électrons libres  $n_e=N_e/V$  ;
- 2b. le vecteur de Fermi  $k_F$  ;
- 2c. l'énergie de Fermi  $\varepsilon_F$ .

**3. Effets de la dimension et de la densité électronique sur la validité de l'approximation de l'électron indépendant.** Dans l'approximation des électrons libres,

- 3a. Rappeler la relation entre la densité électronique  $n$  et l'énergie de Fermi  $\varepsilon_F$  en 1, 2 et 3D.
- 3b. Pour une densité électronique donnée, comparer  $\varepsilon_F$  avec l'énergie moyenne de répulsion coulombienne en 1D, 2D et 3D. Discuter le résultat en relation aux hypothèses permettant d'appliquer l'approximation de l'électron indépendant.
- 3c. Répondre à la question 1a dans l'approximation des liaisons fortes en 1D.