

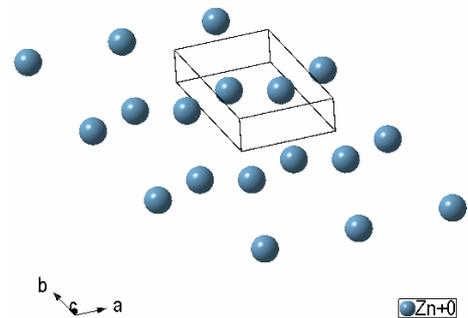
TD4 – Densité d'états et énergie de Fermi

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 ε_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 ε_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 ε_F en 1, 2 et 3D.
- 3b. Pour une densité électronique donnée, comparer ε_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.