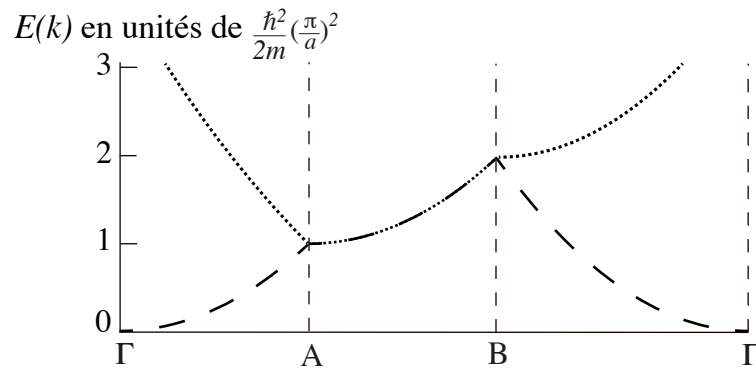


But de cette série : interpréter les structures de bandes

1. Conducteurs et isolants - Surface de Fermi

Considérer un réseau carré plan composé de N mailles de côté a . Le système possède un atome par maille primitive. Chaque atome possède **deux** électrons de valence.

- Dessiner la première zone de Brillouin (PZB) relative à ce réseau, avec :
 Γ : centre de la zone ; point A : $(\frac{\pi}{a}, 0)$; point B : $(\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a})$. Quelle est l'aire de la PZB ?
- Combien de valeurs \mathbf{k} y a-t-il dans la première zone de Brillouin ? Combien d'électrons pourrait-elle contenir par bande ?
- Considérer des électrons libres : évaluer k_F et dessiner la surface de Fermi. Quelle est le volume (puisque on est à 2D, c'est une aire) de la "sphère" de Fermi ?



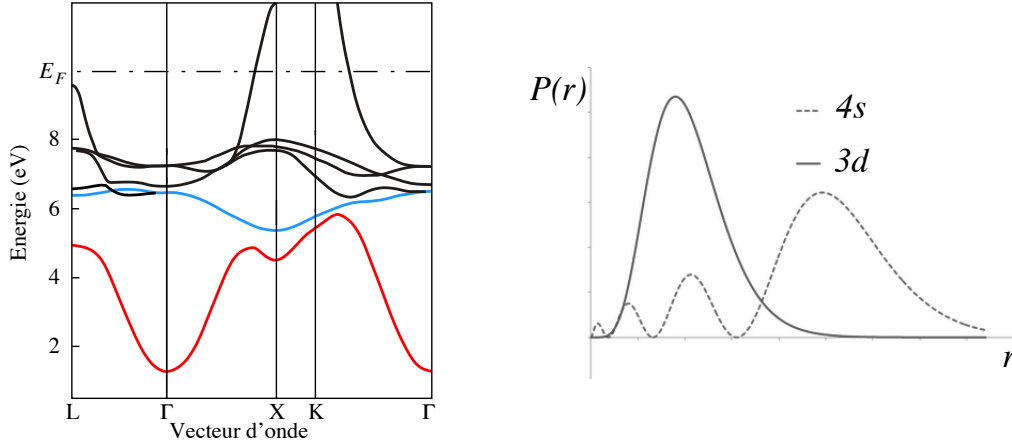
- La figure montre l'allure de $E(\mathbf{k})$ toujours pour des électrons libres, dans les directions ΓA , AB et $B\Gamma$. Nous considérons seulement les deux premières bandes d'énergie. Calculer l'énergie (niveau) de Fermi et la reporter sur le schéma des bandes.
- Considérer maintenant la présence d'un potentiel U tel que la dégénérescence des niveaux est levée au points A et B, ainsi que le long de AB.

Esquisser qualitativement l'évolution des bandes $E(\mathbf{k})$ et de la surface de Fermi pour un potentiel avec une amplitude de plus en plus grande. Pour comprendre ce qui se passe, on va considérer un potentiel très fort, qu'on ne devrait pas traiter comme perturbation. Cela dit, ici nous voulons seulement comprendre ce qui se passe pour la surface et le niveau de Fermi. Quel est le comportement du niveau de Fermi E_F ? Dans quelles conditions a-t-on un système isolant ? Que peut-on dire de la surface de Fermi dans le cas de l'isolant ?

2. Structure de bande et densité d'états

Le cuivre (Cu) a la configuration électronique atomique suivante : $[\text{Ar}]3d^{10}4s^1$. Lors de la formation du solide, les états électroniques plus étendus dans l'espace s'hybrident pour former des bandes. Pour le Cu, on a la formation des bandes à partir des orbitales $3d$ et des orbitales $4s$. La structure de bande du Cu est montrée ci-dessous.

La figure à droite montre la densité radiale de probabilité de présence d'un électron dans les orbitales $3d$ et $4s$ pour un atome de cuivre isolé : $P(r) \propto r^2 |\psi_{rad}(r)|^2$, où ψ_{rad} est la partie radiale de la fonction d'onde correspondante.



- Considérer les bandes indiquées en rouge et en bleu. A l'aide des informations sur l'extension radiale des orbitales $3d$ et $4s$, déduire quelle bande dérive des orbitales $4s$ et quelle bande des orbitales $3d$ (une des 5 orbitales d). Qualitativement, que peut-on dire des intégrales de transfert correspondantes ?
- Esquisser qualitativement la densité d'états $g(E)$ correspondante à la structure de bande.

3. Notion de masse effective

On considère un système à deux dimensions (réseau carré) ayant une bande électronique de la forme suivante :

$$E(\mathbf{k}) = E_0 - 2|\gamma| [\cos(k_x a) + \cos(k_y a)]$$

a est le paramètre de la maille primitive et E_0 est l'énergie de l'état atomique considéré. C'est la forme typique d'une bande calculée par la méthode des liaisons fortes pour une orbitale de type s , avec intégrale de transfert γ non-nulle seulement pour les plus proches voisins.

- Représenter l'énergie $E(\mathbf{k})$ le long du chemin $\Gamma\text{AB}\Gamma$ où $\Gamma = (0, 0)$, $A = (\frac{\pi}{a}, 0)$ et $B = (\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a})$. Quelles sont les énergies du bas de la bande et du haut de la bande ? Quelle est la largeur de la bande ?
- La forme des courbes d'énergie constante au voisinage de certains points dans la 1ère zone de Brillouin peut être approximée par :
au voisinage de $(0, 0)$: $E(k_x, k_y) = E_0 - 4|\gamma| + |\gamma| [(k_x a)^2 + (k_y a)^2]$;
au voisinage de $(\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a})$: $E(k_x, k_y) = E_0 + 4|\gamma| - |\gamma| [(\pi - k_x a)^2 + (\pi - k_y a)^2]$.

Montrer que l'énergie est constante sur la droite reliant les points $(0, \frac{\pi}{a})$ et $(\frac{\pi}{a}, 0)$ et déterminer cette énergie.

Par interpolation et, à l'aide de la symétrie du système, faire une représentation des courbes d'énergie constante dans le plan k_x, k_y dans la première zone de Brillouin.

- (c) Représenter la surface de Fermi dans le plan k_x, k_y dans le cas où le système possède un électron par atome.
- (d) La masse effective peut être exprimée par un tenseur \mathbf{m} tel que

$$[\mathbf{m}^{-1}(\mathbf{k})]_{ij} = \pm \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E(\mathbf{k})}{\partial k_i \partial k_j} \quad \text{avec } i, j = x, y, z$$

Trouver l'expression du tenseur de masse effective \mathbf{m} dans le cas de la bande $E(\mathbf{k})$.
 Calculer la valeur de ses coefficients aux points $(0, 0)$, $(\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a})$, $(\frac{\pi}{a}, 0)$ et $(0, \frac{\pi}{a})$.
 Discuter les limites de validité d'utilisation de la notion de masse effective.

4. Questions - Chapitres 4 à 6

- (a) Montrer que l'énergie de Fermi pour un gaz d'électrons 3D à $T = 0$ est proportionnelle à $n^{2/3}$, avec n la densité électronique. Considérer le gaz confiné dans une boîte 3D et les conditions aux bords périodiques.
- (b) Énoncer la loi de Wiedemann-Franz. En partant de la conductivité thermique κ^{el} et de la chaleur spécifique c_v^{el} , déduire l'expression explicite de cette loi.
- (c) Donner une formulation du théorème de Bloch. Quelles conditions aux bords pour les fonctions d'onde électroniques doivent être utilisées ?
- (d) Expliquer brièvement le modèle des électrons faiblement couplés au réseau et le modèle des liaisons fortes. Pour quels métaux le modèle des électrons faiblement couplés au réseau est une bonne description ? Pour quels métaux l'approximation des liaisons fortes est une bonne description ? Justifier.
- (e) Expliquer la différence entre l'intégrale de champ cristallin β et l'intégrale de transfert $\gamma(\mathbf{R})$.
- (f) Écrire les deux équations du mouvement des électrons dans le modèle semi-classique et indiquer brièvement dans quelles conditions elles sont valables.
- (g) Démontrer qu'une bande pleine ne participe pas à la conduction électrique. Vous pouvez baser votre démonstration soit sur une description graphique soit sur un raisonnement impliquant la densité de courant électrique.