

ÉCOLE POLYTECHNIQUE FÉDÉRALE DE LAUSANNE

Série No. 7

1 Avril 2025

But de cette série : se familiariser avec la description des électrons libres de Fermi

1. La distribution de Fermi-Dirac

La statistique de Fermi-Dirac tient compte de la nature quantique des électrons et remplace donc la statistique de Maxwell-Boltzmann.

La distribution de Fermi-Dirac décrit la probabilité qu'un niveau électronique d'énergie E soit occupé à la température T :

$$f(E, T) = \frac{1}{\exp\left(\frac{E - \mu}{k_B T}\right) + 1}$$

- Tracer $f(E)$ pour le cas $T \rightarrow 0$ et pour $T > 0$ (avec μ paramètre donné).
- Pour $T > 0$, estimer la largeur de la région de transition. (Considérer les intersections de la tangente à $f(E)$ en $E = \mu$ avec les droites $f = 1$ et $f = 0$.)

2. Densité d'états du gaz d'électrons libres à $N = 1, 2$ et 3 dimensions

Considérer des électrons libres confinés dans un système unidimensionnel (un segment de longueur L), dans un système bidimensionnel (un carré de côté L), et dans un système tridimensionnel (un cube de côté L).

Chaque état électronique est caractérisé par un vecteur d'onde \mathbf{k} et par un spin s dont la projection peut prendre deux valeurs.

Pour des électrons libres, la relation entre vecteurs d'onde et énergie est de la forme $E(\mathbf{k}) = E(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$.

- Trouver l'expression pour le volume de l'espace réciproque occupé par chaque état électronique (i.e. par chaque vecteur \mathbf{k}) pour les trois systèmes ($N = 1, 2, 3$).

En considérant la forme de $E(\mathbf{k})$, trouver l'expression pour le volume infinitésimal de l'espace réciproque $d\Omega$ (en termes de k et de dk), pour $N = 1, 2, 3$.

- (b) $g(E)dE$ représente le nombre de niveaux d'énergie (c.-à-d. le nombre d'états) à un électron, par unité de volume, compris entre les énergies E et $E + dE$. Ce nombre d'états dans l'intervalle d'énergie dE est égal au nombre de valeurs \mathbf{k} permises ($\times 2$ pour le spin) dans le volume de l'espace réciproque $d\Omega$ correspondant.

En utilisant les résultats du point précédent, ainsi que la relation de dispersion $E(\mathbf{k})$ pour opérer le changement de variable, trouver l'expression de la densité d'états $g(E)$ pour le gaz d'électrons libres à $N = 1, 2$ et 3 dimensions.

- (c) Tracer le graphe de $g(E)$, ainsi que de la fonction produit $g(E)f(E)$ (pour $T = 0$ et pour $T > 0$), pour $N = 1, 2, 3$. $f(E)$ est la fonction de Fermi-Dirac.
- (d) Décrire l'évolution du potentiel chimique μ en fonction de la température, pour $N = 1, 2, 3$.
- (e) Application numérique : Considérer le cas du potassium avec une concentration atomique égale à $1.40 \cdot 10^{28} \text{ m}^{-3}$. Calculer l'énergie de Fermi en utilisant le modèle du gaz d'électrons

libres à 3 dimensions. Ensuite, calculer la densité d'états au niveau de Fermi. À température ambiante, quel est le nombre d'électrons dans la zone de transition de la distribution de Fermi-Dirac ? (Considérer une largeur de $4k_B T$.) Comparer ce nombre avec le nombre total d'électrons libres.

(Réponses : $E_F = 2.12 \text{ eV}$; $g(E_F) = 9.9 \cdot 10^{27} \text{ m}^{-3} \text{ eV}^{-1}$; $1 \cdot 10^{27} \text{ m}^{-3}$; 7.1 %)

3. Questions de compréhension - Chapitres 1, 2 3

- (a) Considérez les réseaux cubique simple (sc) et cubique à faces centrées (fcc). Décrivez en mots ou avec un dessin clair les cellules (ou mailles) conventionnelles respectives. Est-ce qu'elles coïncident avec les cellules primitives respectives ? Sans faire de gros calcul, pouvez-vous dire quel est le volume des cellules primitives par rapport au volume des cellules conventionnelles respectives ?

- (b) Dans la liaison covalente, il n'y a pas de transfert de charge entre les atomes. Expliquez l'origine de cette liaison. Prenez le diamant comme exemple. Quel est le nombre de coordination (c'est-à-dire le nombre de plus proches voisins) et quelles sont les orbitales formant les liaisons ?

- (c) Pour décrire les vibrations des atomes d'un solide, il suffit de se restreindre aux modes propres correspondant à des vecteurs d'ondes dans la première zone de Brillouin. Démontrez pour une chaîne 1D avec paramètre de maille a qu'un vecteur d'onde $k'_\nu = k_\nu + 2\pi/a$ donne lieu au même déplacement des atomes que le vecteur d'onde k_ν dans la première zone de Brillouin.

- (d) Pourquoi les valeurs \mathbf{k} sont-elles discrètes ? Combien de ces valeurs \mathbf{k} se trouvent dans la première zone de Brillouin pour un réseau avec N atomes et i) un atome par maille, ii) deux atomes par maille ? Combien de modes propres existent en 3D pour les cas i) et ii) ?

- (e) Pourquoi le modèle de Debye décrit mieux le comportement de c_v à basse température que le modèle d'Einstein ?

- (f) Considérer les trois matériaux du tableau ci-contre, ayant tous une structure fcc avec base monoatomique. Les températures de Debye θ_D sont, dans le désordre : 225 K, 105 K, 428 K. E_{coh} est l'énergie de cohésion. Associez la bonne θ_D à chaque matériau et justifiez vos réponses.

- (g) Pourquoi la conductibilité thermique d'un cristal parfait et harmonique est infinie ?

- (h) Pourquoi uniquement les processus Umklapp réduisent la conductibilité thermique ?

	masse (amu)	E_{coh} (eV/atome)
Al	27	3.39
Ag	108	2.95
Pb	207	2.03