Mines Deuxième année
Physique de la matière condensée et des nano-objets
TD4-2010

Le gaz d'électrons libres

Résumé

Dans ce TD nous nous intéressons à l'influence des conditions au bord sur le gaz d'électron libres. Pour ce faire nous comparons le cas du gaz d'électrons dans une boîte finie à celui vérifiant les conditions périodiques de Born von Karman. Nous mettons explicitement en évidence les perturbations induites par la surface .

1 Solutions du gaz d'électrons libres

On considère le modèle ultra simplifié dans lequel les électrons de valence (ceux participant à la cohésion et au transport électronique) se déplacent dans un potentiel constant que l'on prendra nul $V = 0$.

1.1 La boîte finie

L'effet de la surface du cristal est de confiner les électrons dans un volume fini. Nous nous limitons au cas unidimensionnel et supposons que le confinement est imposé par un "mur" infini. La fonction d'onde de l'électron doit donc s'annuler exactement au bord. On considère le cas d'un gaz d'électron confiné sur un segment de longeur L

Question no 1 : Montrez que la fonction d'onde normalisée est donnée par

$$\Psi_k(z) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin kz \quad \text{avec} \quad k = p\frac{\pi}{L}$$

p étant un entier strictement positif. Quel est le niveau d'énergie correspondant ainsi que sa dégénerescence ?

1.2 Les conditions BVK

On considère à présent le cas d'un gaz d'électron sans bord avec les conditions périodiques de Born-Von-Karman (BVK) sur une longueur L, c'est à dire vérifiant :

$$\Psi_k(z+L) = \Psi_k(z)$$

Question no 2 : Montrez que la fonction d'onde normalisée est donnée par

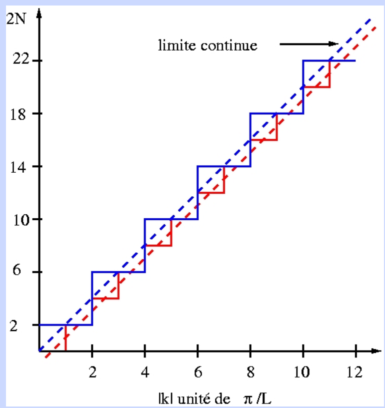
$$\Psi_k(z) = \sqrt{\frac{1}{L}}\, e^{ikz} \quad \text{avec} \quad k = n\frac{2\pi}{L}$$

n étant un entier relatif (négatif ou positif). Quel est le niveau d'énergie correspondant ainsi que sa dégénerescence ?

1.3 Remplissage des niveaux et niveau de Fermi

On s'intéresse à présent à la distribution des niveaux énergétiques et de leur remplissage suivant le principe de Pauli. Nous nous attardons notamment sur la limite continue de ces deux modèles.

Question no 3 : Montrez que la courbe du remplissage électronique (dégénérescence de spin comprise) en fonction du module du vecteur d'onde est donnée par la courbe suivante (boîte finie en rouge et BVK en bleu) :



Question no 4 : Soit $2N$ le nombre d'électrons dans le système et $k_F^{(1)}$ et $k_F^{(2)}$ les vecteur d'onde de Fermi respectifs du gaz dans une boîte finie et vérifiant BVK. Montrez que dans la limite continue (courbe en pointillée) on a :

$$2N = (2L/\pi)k_F^{(1)} - 1 \quad \text{pour la boîte finie}$$

$$2N = (2L/\pi)k_F^{(2)} \quad \text{pour BVK}$$

Le niveau de Fermi est essentiel pour tout système de Fermions (en interaction directe ou non) car il définit le plus haut niveau occupé et nous verrons par la suite qu'un grand nombre de propriétés physiques sont directement reliées aux électrons situés autour du niveau de Fermi.

Question no 5 : Soit un cristal infini (conditions BVK) avec $2N$ électrons dans l'espace $[0, L]$. De combien varie k_F lors de la création des deux "surfaces" ? Si cette variation est négligée combien perd-on d'électrons ?

2 La densité électronique

La densité électronique est une quantité caractérisant, comme son nom l'indique la distribution spatiale des électrons dans le cristal. Son comportement fournit des informations importantes sur le comportement du nuage électronique proche des défauts comme une surface par exemple.

Question no 6 : Montrez que la densité électronique $\rho^-(z)$ s'écrit :

$$\rho^-(z) = \frac{4}{L}\sum_{p=1}^{N} \sin^2 \frac{p\pi z}{L} = \frac{2N+1}{L}\left(1 - \frac{\sin(2N+1)\pi z/L}{(2N+1)\sin \pi z/L}\right)$$

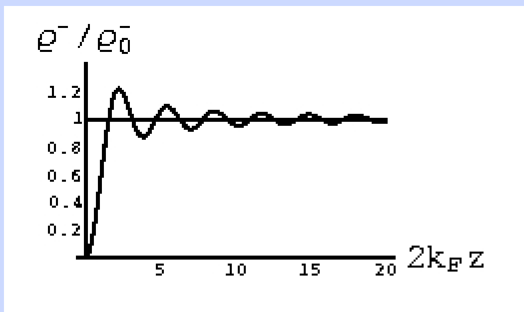
En volume la densité électronique est de manière évidente :

$$\rho_0^- = \frac{2N}{L}$$

Question no 7 : Dans la limite continue $N \to \infty$ et $L \to \infty$ mais N/L reste constant. Montrez que pour $z << L$ on a :

$$\rho^-(z) = \rho_0^- \left(1 - \frac{\sin 2k_F z}{2k_F z}\right)$$

Montrez que l'intégrale de $\rho^-(z) - \rho_0$ de 0 à $+\infty$ vaut $-1/2$. Autrement dit il y a un déficit d'électrons sur chaque côté de la boîte ! Expliquez ce paradoxe.



3 Energie de surface

L'énergie de surface est l'énergie par unité de surface nécessaire pour couper un cristal en deux. Il s'agit d'une grandeur essentielle en physique de la matière condensée car elle gouverne un grand nombre de comportement des cristaux. Par exemple la forme des cristaux à l'équilibre dépend entièrement de leur énergie de surface.

Question no 8 : Pour simplifier le calcul nous considérons un système formé de $4N'+2$ électrons. Montrez que l'énergie de création de la surface ΔE s'écrit [1] :

$$\Delta E = 2\frac{\hbar^2}{2m}\left[\sum_{p=1}^{2N'+1}\left(\frac{p\pi}{L}\right)^2 - 2\sum_{n=1}^{N'}\left(\frac{2n\pi}{L}\right)^2\right] = \frac{\hbar^2}{m}\left(\frac{\pi}{L}\right)^2 (N'+1)(2N'+1)$$

En déduire que dans la limite du continu (avec $N = 2N'+1$) on a :

$$\Delta E = \frac{\hbar^2 k_F}{2m}$$

Comment interprétez vous ce résultat ?

1. On rappelle que

$$\sum_{n=1}^{N} = \frac{1}{6}N(N+1)(2N+1)$$