Modèle de l'électron quasi libre :

En mécanique quantique le modèle de l'électron quasi libre est un modèle permettant de modéliser les propriétés des électrons pouvant se déplacer de façon quasiment libre dans le réseau cristallin d'un solide. Ce modèle est très proche du modèle plus conceptuel de l'approximation du réseau vide, ce modèle permet de donner un premier aperçu de la théorie des bandes et permet en bonne approximation de calculer le niveau de ces bandes en particulier pour les métaux.

Dans la nature et précisément dans les matériaux en particulier dans l'atome ou il existe des électrons dont certains sont liés au noyau et certains sont libres et certains sont notre intérêt les électrons presque libres. L'approximation des électrons presque libres consiste à supposer que les électrons de la bande de la conduction sont soumis à un potentiel efficace $V(r)$ très faible ayant la périodicité du réseau cristallin cette approximation permet de faire une étude systématique de l'espace des moments cette même approximation permet également de déterminer la répartition spatiale des électrons et de faire une évaluation du coefficient de Knight.

Les bases qui s'accordent avec les électrons quasi libres :

Réseau cristallin :

Il est nécessaire de traiter le réseau cristallin parce que c'est la base de l'allongement des atomes dans un cristal, ces atomes se répètent périodiquement dans l'espace sous l'action des opérations de symétrie du groupe d'espace et formant aussi la structure cristalline. Le réseau cristallin est un ensemble des points régulièrement disposés.

Approximation du réseau vide :

En physique quantique le modèle qui permet de décrire les propriétés des électrons dans un matériau cristallin est appelé l'approximation du réseau vide.

La théorie des bandes :

En physique de l'état solide la théorie des bandes est une modélisation des valeurs d'énergie qui peuvent prendre les électrons d'un solide à l'intérieur de celui-ci de façon générale c'est les électrons n'ont la possibilité de prendre que des valeurs d'énergies comprises dans certains intervalles lesquelles sont séparés par des bandes interdites. Cette modélisation conduit à parler de bande d'énergie ou de structure de bande.

Cas de l'électron quasi-libre

Cas particulier: k près du bord de la zone de Brillouin, soit $k \approx G/2 = \pi/a$ et interaction seulement avec le plus proche voisin ($V', V'' \dots \ll V$) dans ce cas, Ket G-K ont la même valeur et l'on a la sous matrice 2x2 dont les termes sont identiques ;

$$\begin{bmatrix} \frac{\hbar^2 G^2}{8m} - E & V \\ V & \frac{\hbar^2 G^2}{8m} - E \end{bmatrix}$$

Le potentiel V lève la dégénérescence entre les niveaux non perturbés de l'électron libre qui auraient la même énergie en $k = G/2$ si $V=0$.

$$\begin{bmatrix} \frac{\hbar^2(K-G)^2}{2m} - E & V \\ V & \frac{\hbar^2 K^2}{2m} - E \end{bmatrix} = 0$$

La solution s'écrivent ;

$$E^{\pm} = \frac{1}{2} \frac{\hbar^2}{2m} ((K-G)^2 + K^2) \pm \frac{1}{2} \sqrt{[(K-G)^2 + K^2] + 4V^2}$$

Ce qui se réécrit en posant $q=K-G/2$ et E_0 l'énergie de l'électron libre calculer pour $K=G/2$ $E_0 = \hbar^2 G^2/8m$ et pour q petit ($q \ll G$)

$$E = E_0 \pm V + \frac{\hbar^2 q^2}{2m} \left(1 \pm \frac{2E_0}{V}\right)$$

Dispersion en énergie de l'électron libre ainsi que les dispersions au voisinage de $k=G/2$ de l'électron quasi-libre dans un potentiel périodique.

- Formation d'une bande interdite en $G/2$
- Loin du bord de zone, les courbes de dispersion de l'électron quasi-libre rejoignent celle de l'électron libre
- La relation de dispersion est parabolique et varie en q^2 (en posant $q=k-G/2$).

$$E = E_0 \pm V + \frac{\hbar^2 q^2}{2m} \left(1 \pm \frac{2E_0}{V}\right)$$

La bande interdite E_g vaut $E_g = 2V$

L'équation de dispersion peut se mettre sous la forme de la dispersion d'un électron libre de masse m^*

$$E_+ = E_0^+ + \frac{\hbar^2 q^2}{2m^*}$$

$$E_- = E_0^- - \frac{\hbar^2 q^2}{2m^*}$$

Cas de l'électron quasi-libre masse effective

$$E_+ = E_0^+ + \frac{\hbar^2 q^2}{2m^*} \quad , \quad E_- = E_0^- - \frac{\hbar^2 q^2}{2m^*}$$

Avec

$$\frac{1}{m^*} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{d^2 E}{dq^2} = \frac{1}{m} \left(1 \pm \frac{2E_0}{V}\right) = \frac{1}{m} \left(\frac{E_g \pm 4E_0}{E_g}\right) \approx \pm \frac{1}{m} \frac{4E_0}{E_g}$$

$$\frac{m^*}{m} = \pm \frac{E_g}{4E_0}$$

La masse effective croît avec le potentiel V , c'est-à-dire comme la bande interdite.