

MASTER 1<sup>ère</sup> année – Physique de la matière condensée 2008/2009

TD 1 – Structures cristallines, densité électronique et théorème de Bloch

**1. Structures et réseaux cristallins**

**1a.** En utilisant un modèle de sphères rigides, calculer la fraction vide dans les réseaux cubiques simple, à faces centrées (fcc) et centré (bcc) et hexagonal compacte (hcp). Pour ce dernier, calculer le rapport idéal  $c/a$ .

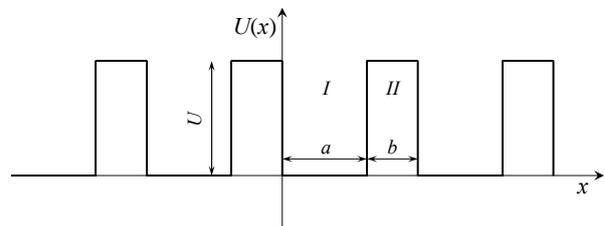
**1b.** Pour quelques métaux, compter le nombre des structures fcc, bcc et hcp stables à température et à pression ambiantes (voir les tableaux I-II au verso). En utilisant le résultat du point **1a** et considérant la contribution du terme  $PV$  dans l'énergie libre de Gibbs, justifier le fait que les structures cristallines les plus communes sont les plus compactes.

**2. Densité électronique**

Estimer la densité des électrons libres pour quelques métaux alcalins, alcalino-terreux et de transition en supposant que tous les électrons de valence participent à la conduction électrique (voir les tableaux I-II au verso).

**3. Relation de dispersion pour les états électroniques dans un potentiel périodique**

On considère le potentiel périodique à 1D,  $U(x)$ , de la figure ci-contre.



**3a.** Ecrire les premiers trois termes,  $U_0$ ,  $U_1$  et  $U_2$ , de la série de Fourier associée à ce potentiel. Quelle est la signification physique de  $U_0$  ?

**3b.** En appliquant le théorème de Bloch, déterminer la relation de dispersion,  $\varepsilon_k$ , d'un électron dans ce potentiel en ne considérant que l'effet de  $U_0$  et de  $U_1$ . Application numérique : calculer et dessiner  $\varepsilon_k$  en Joule et en eV pour  $a=3 \text{ \AA}$ ,  $b=1 \text{ \AA}$ ,  $U=2 \text{ eV}$ . Cette relation de dispersion est-elle compatible avec l'approximation des électrons quasi-libres ?

**Tableau I. Métaux de transition 3d.**

	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn
	hcp	hcp	bcc	bcc	bcc*	bcc	hcp	fcc	fcc	hcp
a [Å]	3.31	2.95	3.03	2.91	8.91	2.87	2.51	3.52	3.62	2.67
c [Å]	5.27	4.69					4.07			4.95
Valence principale	III	IV	V	III	II	III	II	II	II	II

\* Réseau avec 29 atomes/maille élémentaire.

**Tableau II. Autres métaux.**

	Al	Ag	Au	Cd	Mg	Nb	Pb	Pt	Zn	Zr
	fcc	fcc	fcc	hcp	hcp	bcc	fcc	fcc	hcp	hcp
a [Å]	4.05	4.09	4.08	2.98	3.21	3.30	4.95	3.92	2.67	3.23
c [Å]				5.62	5.21				4.95	5.15
Valence principale	III	I	III	II	II	V	II	II,IV	II	IV