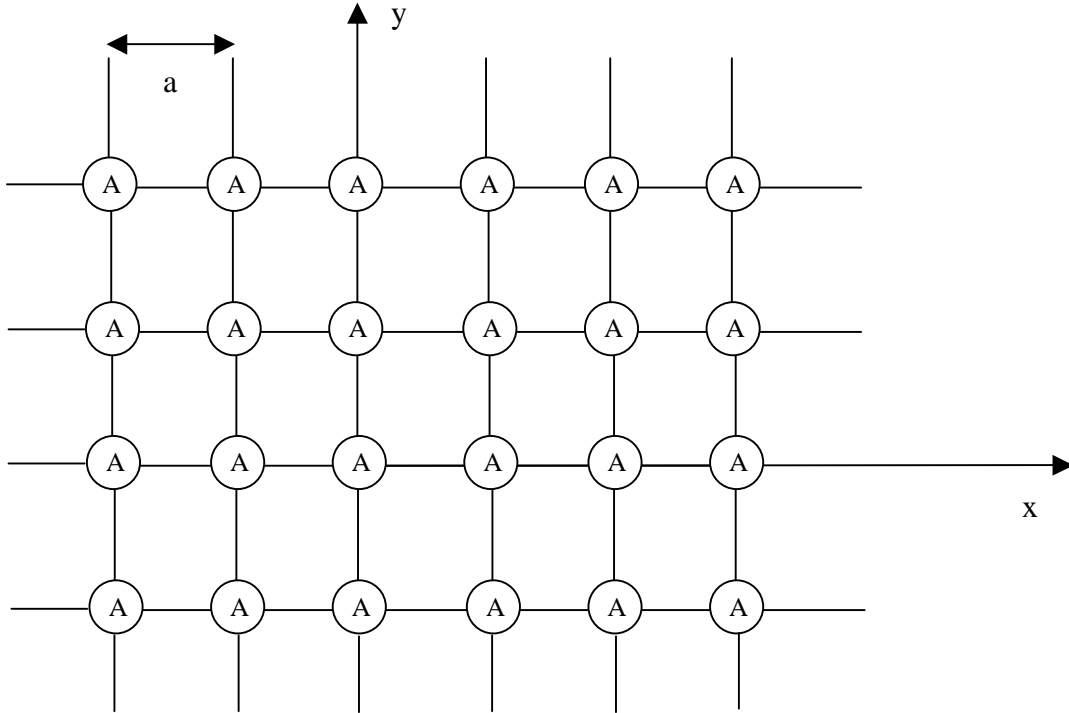
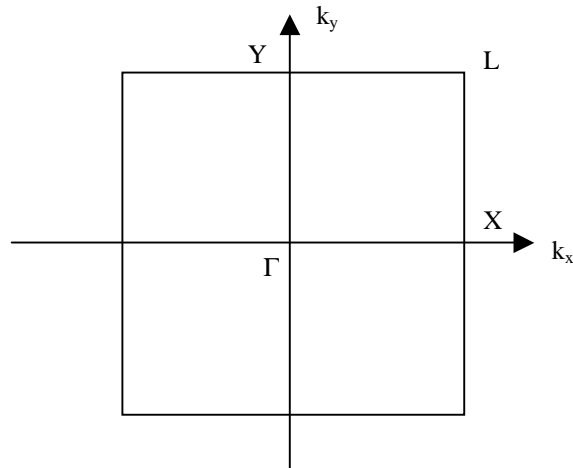


PHYSIQUE DU SOLIDE

On considère un cristal bidimensionnel carré simple représenté ci-dessous, et constitué d'atomes A tous identiques ($a =$ côté du carré).

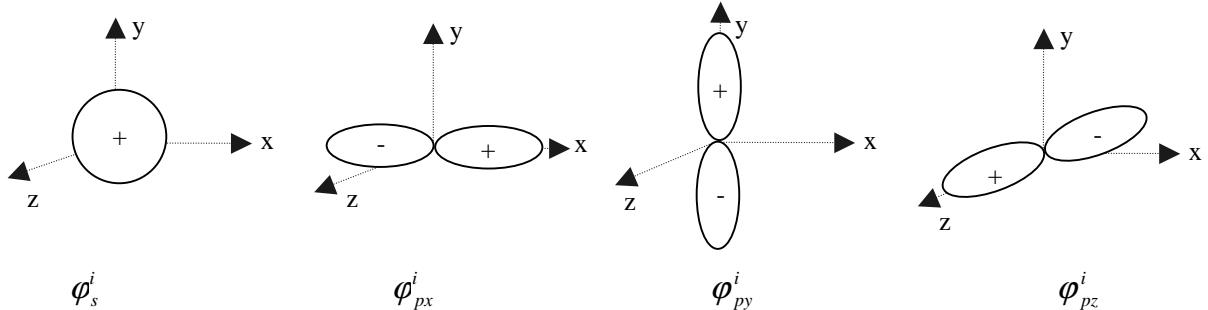


1. Donner le réseau, le motif et le réseau réciproque.
2. La zone de Brillouin est un carré représenté ci-dessous dans l'espace réciproque:



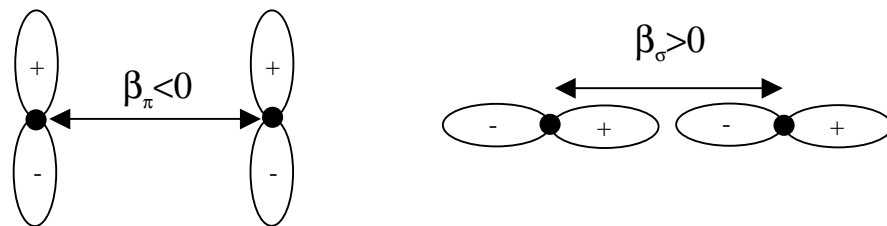
Préciser le côté de ce carré et les coordonnées des points Γ , X , Y et L .

3. On souhaite calculer la structure de bandes de ce cristal par la méthode C.L.O.A., dans l'approximation des liaisons fortes aux premiers voisins. Pour cela, on utilisera une base formée sur chaque atome i d'une fonction "s" φ_s^i , et de trois fonctions "p" φ_{px}^i , φ_{py}^i et φ_{pz}^i . Les fonctions φ_{px}^i et φ_{py}^i sont dans le plan du cristal, tandis que la direction z est perpendiculaire au plan du cristal.



Ecrire la fonction d'essai utilisée dans la méthode C.L.O.A.. Combien reste-t-il de coefficients inconnus après application du théorème de BLOCH, dont on fournira l'énoncé général et la conséquence pratique pour la méthode C.L.O.A. ?

4. Que peut-on dire de $\langle \varphi_s^i | H | \varphi_{pz}^j \rangle$, $\langle \varphi_{px}^i | H | \varphi_{pz}^j \rangle$ et $\langle \varphi_{py}^i | H | \varphi_{pz}^j \rangle$? En déduire que le calcul des bandes issues des fonctions pz est découplé de celui pour les fonctions s, px et py. Donner alors l'expression de la bande issue des orbitales pz en fonction de $E_{pz} = \langle \varphi_{pz}^i | H | \varphi_{pz}^i \rangle$ et d'une intégrale de résonance $\beta_{\pi} = \langle \varphi_{pz}^i | H | \varphi_{pz}^j \rangle$, où i et j sont premiers voisins.
5. Pour les bandes issues des orbitales s, px et py, on retiendra les énergies propres $E_p = \langle \varphi_{p\alpha}^i | H | \varphi_{p\alpha}^i \rangle$ (où $\alpha=x, y$) et $E_s = \langle \varphi_s^i | H | \varphi_s^i \rangle$ des orbitales atomiques dans le cristal et les interactions β_s entre orbitales s portées par des atomes premiers voisins, β_{π} entre orbitales p parallèles entre elles et perpendiculaires à l'axe interatomique et β_{σ} entre orbitales p pointant l'une vers l'autre portées par des atomes premiers voisins:



On négligera donc les interactions entre orbitales s et p. Ecrire alors le système obtenu en liaisons fortes et en déduire les relations de dispersion correspondantes.

6. Représenter l'ensemble des bandes obtenues lorsque l'extrémité du vecteur \vec{k} décrit le trajet Γ XY dans la zone de Brillouin avec les valeurs numériques suivantes.

$$E_s = -16 \text{ eV}, \quad E_p = -7 \text{ eV}, \quad E_{p_{\pi}} = -7 \text{ eV}$$

$$\beta_s = -1 \text{ eV}, \quad \beta_{\sigma} = +1.5 \text{ eV}, \quad \beta_{\pi} = -0.5 \text{ eV}, \quad \beta_{\pi z} = -0.5 \text{ eV}$$

7. Discuter le remplissage et la nature de ce cristal si chaque atome A possède 2 ou 3 électrons sur sa couche de valence.

