Devoir maison
Physique des matériaux

INSA Rennes – 3 SGM

Tanneguy Blandin

Mars 2021

Exercice 1 : Cristal bidimensionnel

A – Réseau

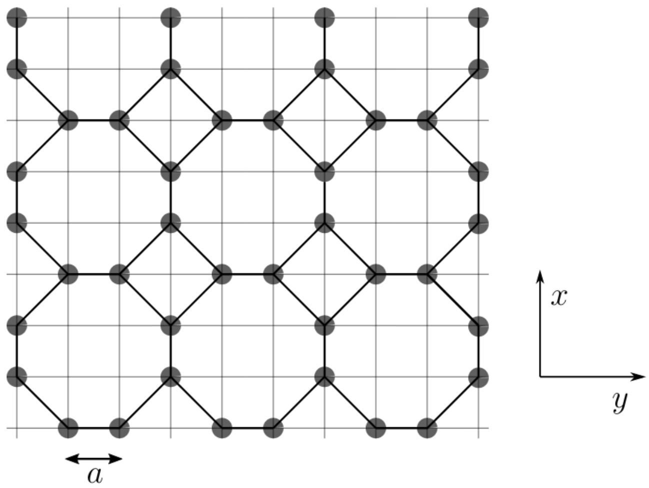

FIGURE 1 – Cristal 2D

1 Donner les coordonnées des vecteurs $(\vec{a}, \vec{b})$ qui définissent une maille primitive de ce réseau dans le repère Oxy orthonormé, en fonction de a_0.

La maille est une maille carrée, les vecteurs de la maille élémentaire de ce réseau sont $\vec{a} = (3a_0, 0)$ et $\vec{b} = (0, 3a_0)$. Cependant, la maille primitive ne doit être consitué aue d'un unique noeud du réseau. AHHH

2 Préciser la nature du réseau direct et son paramètre de maille a

3 Préciser le motif associé à ce cristal : nombre d'atomes et position en fonction des vecteurs $\vec{a}$ et $\vec{b}$

4 Calculer l'aire de la maille unitaire, en fonction de a_0

5 Calculer le nombre d'atomes par unité de surface. Application numérique en m.

6 Exprimer les coordonnées des vecteurs du réseau réciproque $(\vec{a*}, \vec{b*})$, en fonction de a_0 dans le repère Oxy

7 Dessiner le réseau réciproque et le première zone de Brillouin

8 Dans la première zone de Brillouin, placer les points Γ ,X de coordonnées $(\pi/a, 0)$ et M de coordonnées $(\pi/a, \pi/a)$.

B – Bandes d'énergie

On suppose que l'énergie des électrons de conduction est représentée par :

$$E_c(\overrightarrow{k}) = \alpha - 2\gamma(\cos(k_x a) + \cos(k_y a)) \tag{1}$$

1. En prenant l'équation 1 pour définir l'énergie des électrons de conduction, nous pouvons calculer l'énergie aux points caractéristiques de la maille en prenant $\alpha = 2.5\,\text{eV}$ et $\gamma = 0.5\,\text{eV}$:

- En Γ ($\overrightarrow{k} = (0,0)$), nous avons : $E_{c\Gamma} = \alpha - 4\gamma = 0.5\,\text{eV}$.
- En X ($\overrightarrow{k} = (\pi/a, 0)$), nous avons : $E_{cX} = \alpha = 2.5\,\text{eV}$.
- En M ($\overrightarrow{k} = (\pi/a, \pi/a)$), nous avons : $E_{cM} = \alpha + 4\gamma = 4.5\,\text{eV}$.

2. En déterminant la ou les composantes de $\overrightarrow{k}$ qui varie ou varient en fonction de la direction dans laquelle nous nous déplaçons dans le cristal, nous pouvons réécire la fonction $\overrightarrow{k}$ pour chaque direction :

- Sur la direction ΓX ou Δ, nous pouvons définir $\overrightarrow{k}$ en fonction de x de la manière suivante :

$$[0, \frac{\pi}{a}] \to [0, \frac{\pi}{a}]^2$$
$$x \mapsto \overrightarrow{k} = (x, 0)$$

Nous pouvons donc définir la variation de l'énergie dans cette direction :

$$x \in [0, \frac{pi}{a}] \quad E_{c\Delta} = \alpha - 2\gamma(1 + \cos(ax)) \tag{2}$$

- Sur la direction ΓM, nous pouvons définir $\overrightarrow{k}$ en fonction de xx de la manière suivante :

$$[0, \frac{\pi}{a}] \to [0, \frac{\pi}{a}]^2$$
$$x \mapsto \overrightarrow{k} = (x, x)$$

Nous pouvons donc définir la variation de l'énergie dans cette direction :

$$x \in [0, \frac{pi}{a}] \quad E_{c\ \Gamma X} = \alpha - 4\gamma \cos(ax) \tag{3}$$

- Sur la direction XM, nous pouvons aussi définir $\overrightarrow{k}$ en fonction de x :

$$[0, \frac{\pi}{a}] \to [0, \frac{\pi}{a}]^2$$
$$x \mapsto \overrightarrow{k} = (\frac{\pi}{a}, x)$$

Nous pouvons donc définir la variation de l'énergie dans cette direction :

$$x \in [0, \frac{pi}{a}] \quad E_{c\ XM} = \alpha - 2\gamma(\cos(ax) - 1) \tag{4}$$

Nous pouvons représenter l'évaluation de l'énergie en fonction de la position sur les principales directions, c'est que que nous faisons sur la figure