

# PHY6505: Physique de la matière condensée

## Cours 10 Classification et cohésion des solides (résumé)

François Schiettekatte  
Université de Montréal  
Automne 2009

1

## Classification

- La géométrie dit peu de choses sur les propriétés
- Types de cristaux
  - Moléculaires (VdW, gaz rares solides)
  - Ioniques (I-V, NaCl, LiF...)
  - ... II-VI, III-V, charge partiellement sur ions
  - Covalents (IV, Si, e- dans liaisons)
- Classif. moins catégorique, mais plus utile

2

## Énergie de cohésion

- Comptabilisation des contributions à l'énergie nécessaire pour isoler les constituants
- Cristaux ioniques: somme + - + - + - ...

$$-\frac{e^2}{d} + \frac{e^2}{d} \sum_{\vec{R} \neq 0} \left[ \frac{d}{R} - \frac{d}{|\vec{R} - \vec{d}|} \right] = \frac{e^2}{d} [d(S(0) - S(\vec{d})) - 1], \quad S(\vec{d}) = \sum_{\vec{R} \neq 0} \left[ \frac{1}{|\vec{R} - \vec{d}|} \right]$$

constante de Madelung  $\alpha$   
calculable numériquement

$$\frac{E}{N} = -\frac{11}{12} \alpha \frac{e^2}{d}$$

3

## Énergie de cohésion à partir d'un calcul de bandes

- calculs de bandes: état fondamental
- Soit  $r_W$  le rayon si on approxime la cellule de Wigner-Seitz par une sphère de même volume
- On définira un paramètre d'échelle de longueur
 
$$a_s = \eta \left( \frac{r_W}{r_{W_0}} - 1 \right), \quad r_{W_0} \text{ le rayon pour la position d'équilibre}$$

paramètre qui caractérise l'anharmonicité (~4-6)
- L'énergie de cohésion d'un grand nombre d'éléments est donnée par
 
$$\varepsilon(r_W) = \varepsilon_0 e^{-a_s} (-1 - a_s - 0.05a_s^2), \quad \varepsilon_0 \text{ l'énergie à la position d'équilibre}$$
- Fonctionne assez bien,  $r_W$  à qq. pourcents près

Marder p. 281

4