**Département de Chimie 2019/2020 M1 chimie Physique Chimie des solides**

**Série N° 3**

**(Structure électronique des solides : généralités)**

**Exercice 1 :**

1*◦*) Considérons une chaîne d’atomes répartis sur un segment de longueur 1000 nm.

Dans le modèle de l’électron libre, calculer la valeur de l’énergie la plus basse E1, dans le cas où la solution de l’équation d’onde conduit à un système d’ondes stationnaires.

Donner l’expression générale de l’énergie En pour les autres états.

Quelles sont les valeurs des longueurs d’onde associées aux trois états d’énergie les plus bas ?

2*◦*) Comparer avec les résultats obtenus avec un segment de 3 cm. Conclusions.

Dans quel cas peut-on parler d’un continuum des états d’énergie ?

**Exercice 2 :**

Déterminer, pour un électron dans une boîte tridimensionnelle cubique d’arête 1 mm, les valeurs de l’énergie correspondant aux 5 niveaux les plus bas, dans le cas où la solution de l’équation d’onde choisie est celle de Born-Von Karman. Préciser la dégénérescence de chacun de ces états.

**Exercice 3 :**

Esquisser, pour k = 0 et k = π/a, le recouvrement des orbitales pour les bandes, dxz et dz2,d’une chaine linéaire homonucléaire monodimensionnelle et le recouvrement des orbitales p dans un modèle bidimensionnel d'un solide mononucléaire

***Données* :** masse de l’électron = 9.10*−*31 kg , h = 6.63.10*−*34 J.s.