

Zeitschrift: Helvetica Physica Acta
Band: 58 (1985)
Heft: 2-3

Artikel: Propriétés électroniques des éléments de transition : résultats et perspectives
Autor: Peter, M. / Manuel, A.A. / Pictet, O.
DOI: <https://doi.org/10.5169/seals-115589>

Nutzungsbedingungen

Die ETH-Bibliothek ist die Anbieterin der digitalisierten Zeitschriften auf E-Periodica. Sie besitzt keine Urheberrechte an den Zeitschriften und ist nicht verantwortlich für deren Inhalte. Die Rechte liegen in der Regel bei den Herausgebern beziehungsweise den externen Rechteinhabern. Das Veröffentlichen von Bildern in Print- und Online-Publikationen sowie auf Social Media-Kanälen oder Webseiten ist nur mit vorheriger Genehmigung der Rechteinhaber erlaubt. [Mehr erfahren](#)

Conditions d'utilisation

L'ETH Library est le fournisseur des revues numérisées. Elle ne détient aucun droit d'auteur sur les revues et n'est pas responsable de leur contenu. En règle générale, les droits sont détenus par les éditeurs ou les détenteurs de droits externes. La reproduction d'images dans des publications imprimées ou en ligne ainsi que sur des canaux de médias sociaux ou des sites web n'est autorisée qu'avec l'accord préalable des détenteurs des droits. [En savoir plus](#)

Terms of use

The ETH Library is the provider of the digitised journals. It does not own any copyrights to the journals and is not responsible for their content. The rights usually lie with the publishers or the external rights holders. Publishing images in print and online publications, as well as on social media channels or websites, is only permitted with the prior consent of the rights holders. [Find out more](#)

Download PDF: 16.01.2026

ETH-Bibliothek Zürich, E-Periodica, <https://www.e-periodica.ch>

Propriétés électroniques des éléments de transition: résultats et perspectives

Par M. Peter, A. A. Manuel et O. Pictet, Département de Physique de la matière condensée, Université de Genève, CH-1211 Genève 4, Suisse.

(9. VII. 1984)

A l'occasion du 60ème anniversaire d'Emanuel Mooser

Résumé. Le calcul de structures de bandes et l'annihilation de positons sont deux moyens mis en oeuvre pour étudier les propriétés électroniques des éléments de transition. Après une présentation sommaire de ces méthodes, nous discutons la situation actuelle dans ce domaine en prenant un certain nombre d'exemples. Nous terminons par l'esquisse de quelques directions de recherche pour le futur.

Introduction

Nous présentons un rapport sur les travaux du groupe de Genève dans la physique des métaux de transition.

Les aspects marquants de ces travaux sont le calcul numérique de la structure de bandes d'une série d'éléments et de composés métalliques, la calibration de ces calculs par observation de la surface de Fermi moyennant ACPAR, et l'application des structures de bandes ainsi obtenues au calcul ou à la discussion d'autres propriétés physiques.

Au centre de cette approche se situe la technique ACPAR (Angular Correlation of Positron Annihilation Radiation) qui est la technique complémentaire, dans l'espace des impulsions, à la tomographie, technique d'observation de la densité électronique dans l'espace habituel.

A la fin du rapport nous évoquerons les perspectives d'avenir qui s'ouvrent à la suite des travaux actuels.

1. Calcul des structures de bandes électroniques

Parmi les différentes méthodes utilisées pour le calcul des structures de bandes électroniques dans l'approximation de la densité locale, nous avons principalement employé la méthode des liaisons fortes (TB/NTB) et la méthode LMTO.

1.1. La méthode LMTO

La méthode LMTO [1] est une méthode ab-initio et généralement auto-cohérente. Dans celle-ci on formule le problème du calcul de la structure de

bande en deux termes: l'un qui dépend uniquement de la géométrie de la structure cristalline considérée et l'autre qui consiste en un potentiel de symétrie sphérique pour chaque 'Muffin-Tin' ne dépendant que du type d'atome et de son voisinage. Le calcul du terme structural tient compte de tous les atomes jusqu'à l'infini, et l'on obtient de bonnes propriétés de convergence.

La méthode LMTO donne avec une grande précision les structures de bandes électroniques, même loin de l'énergie de Fermi. On peut calculer l'énergie totale et la pression; les résultats obtenus pour la compressibilité et la stabilité des phases sont généralement bons (i.e. 10–15% des valeurs expérimentales), même pour des alliages.

1.2. *La méthode des liaisons fortes*

La méthode TB est similaire à la précédente, mais au lieu d'utiliser des orbitales 'Muffin-Tin' on emploie des orbitales atomiques, ce qui a pour avantage de fournir une bonne compréhension physique intuitive. Bien qu'il existe des versions ab-initio de cette méthode [2], nous avons utilisé une paramétrisation en fonction de la distance inter-atomique des intégrales de transfert et de recouvrement [3, 4]. Cette paramétrisation a l'avantage de permettre un calcul simple de l'hamiltonien et de ses dérivées sous l'influence de déformations, par contre elle introduit de grandes difficultés de convergence et une mauvaise représentation de la structure de bandes loin de l'énergie de Fermi. Pour des raisons de convergence on a négligé les termes à trois centres et limité la distance d'interaction aux plus proches voisins.

2. **Contrôle des calculs par mesures positoniques**

2.1. *Principes*

L'annihilation de positons a été proposée dès 1950 [5] comme méthode d'investigation des propriétés électroniques des solides [6] mais c'est en 1956 que Berko et Plaskett [7] en ont établi la théorie dans le cadre de l'approximation des particules indépendantes. Cette méthode a connu un essort particulier ces dernières années, essort provoqué par l'introduction de caméras gamma à haute résolution spatiale. Actuellement trois types de détecteurs sont utilisés: la mosaïque de cristaux scintillateurs [8], la caméra Anger [9], et la chambre à fils de haute densité [10, 11], qui est la méthode que nous utilisons et qui offre la meilleure résolution.

Ce type d'appareil permet de mesurer une projection de la densité de la quantité de mouvement de la radiation d'annihilation. Cette observable est exactement égale à la densité de la quantité de mouvement des électrons dans le cas où les effets de corrélation sont nuls et où la fonction d'onde du positon est constante. On voit donc d'une part une des forces de la méthode mais aussi la première de ses limitations. Nous les discuterons plus loin.

Une spécificité de la méthode réside dans la possibilité de mesurer les corrélations, et plus précisément d'offrir un moyen de voir leur répartition dans l'espace de phase, contrairement à d'autres méthodes, telles la chaleur spécifique ou la résistivité, qui rendent compte de leur effet de façon globale. Nous discuterons plus loin les résultats déjà obtenus dans ce domaine.

2.2. Limites expérimentales

La qualité des mesures dépend à la fois de la statistique et de la résolution. La statistique n'est pas, en principe, un facteur limitatif: il suffit de mesurer le temps voulu. On peut facilement estimer ce dernier en sachant que le taux de comptage est de 80/sec, la résolution de $0.3 \times 0.3 \text{ mrad}^2$ et que l'on veut une précision de 0.5% sur un domaine de 100 mrad^2 : il est de l'ordre de 8 jours et peut s'élever jusqu'à 15 jours dans certains cas. La résolution angulaire dépend de plusieurs facteurs. Les principaux sont la résolution spatiale des détecteurs (1 mm^2 pour les chambres à fils de haute densité) et leur écartement. Les autres facteurs sont le mouvement thermique résiduel du positon (négligeable puisqu'il est thermalisé lors de son annihilation, mais potentiellement significatif lors de mesures à plus de 50 K), la taille de l'échantillon, la profondeur de pénétration des positons dans l'échantillon. Ainsi, la résolution des mesures est comprise entre 0.3 et 0.5 mrad ce qui permet d'obtenir typiquement 25 points indépendants le long d'une ligne de haute symétrie dans la zone de Brillouin d'un métal de transition.

La dynamique du positon avant son annihilation est importante à connaître et, dans certains cas, elle peut sérieusement limiter l'étude: sensibilité aux défauts, qui sont autant de pièges pour le positon, et sensibilité à l'uniformité de la répartition des atomes dans la maille, puisque le positon est fortement repoussé par les ions.

2.3. Méthodes d'analyse

Les mesures, qui sont faites dans l'espace p (périodique), peuvent être réduites dans l'espace k . On peut montrer, [12] que, si les effets de corrélation sont ignorés et si la fonction d'onde du positon est constante, alors, premièrement, la distribution réduite est constante pour les bandes pleines et, deuxièmement, elle est donnée par le nombre d'occupation pour les bandes qui croisent le niveau de Fermi. Il est maintenant bien établi que ce théorème est vérifié en bonne approximation. Il nous permet donc d'attribuer les anisotropies de la distribution réduite à la surface de Fermi.

La méthode d'analyse suivante a pour but de déterminer la surface de Fermi à partir des distributions réduites qui en sont les projections. Nous sommes là en face d'un problème commun à bien des domaines: tomographie, microscopie électronique etc. L'arsenal des algorithmes est fourni depuis les travaux de pionnier entrepris par Cormack [13]. Dans notre cas, une grande simplification provient de la symétrie connue de l'objet à déterminer. Ainsi, un nombre limité de projections suffit. Citons deux résultats obtenus à partir des mêmes mesures dans le vanadium. Une reconstruction dans la première zone de Brillouin permet de déterminer la surface de Fermi bien connue, avec une précision de l'ordre de 5%, déjà à l'aide de deux projections réduites [14]. Une reconstruction dans l'espace p , donc beaucoup plus étendue, est obtenue à l'aide de quatre projections [15]. Mentionnons que la détermination de la surface de Fermi à partir des densités reconstruites nécessite un ansatz sur le nombre de bandes qui y contribuent; cette valeur est prise des calculs de structures de bandes. Une calibration purement expérimentale, basée sur l'amplitude de la contribution des bandes pleines, n'est pas possible: celle-ci est non-linéaire car le recouvrement de la

fonction d'onde positonique et des fonctions d'onde des électrons internes n'est pas uniforme.

2.4. Méthodes complémentaires

2.4.1. Temps de vie du positon

Le fait que le positon soit sensible aux défauts peut être mis à profit pour étudier ces derniers. Le temps de vie du positon est une mesure fine de la tendance de ce dernier à être piégé dans les lacunes, les dislocations et autres défauts. La mesure du temps de vie du positon est effectuée en déterminant le temps séparant la naissance du positon, marquée dans certaines sources par l'émission simultanée d'un gamma, et la détection de la radiation d'annihilation. Les spectromètres actuels ont une résolution de l'ordre de 280 psec. Elle est suffisante pour déterminer les différents temps de vie et leurs intensités [16]. Cette méthode est très largement appliquée à l'étude de la fatigue, de la déformation et de la résistance des matériaux aux irradiations.

2.4.2. Effet Doppler

La paire de photons émise lors de l'annihilation contient un écart de fréquence Doppler proportionnel à la composante longitudinale de la quantité de mouvement électronique. Cet écart peut être mesuré avec une diode Ge(Li). La résolution atteinte actuellement est un ordre de grandeur moins bonne que celle des corrélations angulaires mais la mesure est deux à trois ordres de grandeurs plus rapide. Elle est utilisée pour l'étude des transitions de phases ainsi que pour l'étude des défauts. Elle est d'une utilité moindre dans le cas des propriétés électroniques.

3. Le point: revers et succès

3.1. Structures en couches: échecs expérimentaux

Des travaux ont porté récemment [17] sur un composé lamellaire, bien connu à Lausanne [18, 19]: 1T-TaS₂. On pense généralement que ce matériau subit une transition métal-isolant due type Anderson-Mott. Les positons sont sensibles à cette transition: elle a été détectée par des mesures d'élargissement Doppler. A la suite de ce résultat, nous avons effectué une étude de la distribution de la quantité de mouvement électronique à une température inférieure à celle de la transition [20]. Un résultat surprenant a été obtenu: cette mesure est en très bon accord avec les résultats de calculs LMTO effectués pour l'état conducteur. Nous ne comprenons pas bien cette observation; elle mérite une analyse plus approfondie, probablement à corrélérer avec les ondes de densité de charges.

3.2. Propriétés élastiques des métaux de transition: échecs théoriques

On a effectué des calculs des constantes élastiques des métaux de transition de structure bcc en fonction de deux paramètres: la température et le nombre d'électrons par atomes [3, 4, 21]. Après avoir déterminé la structure de bande de ces matériaux (V, Nb, Ta) en utilisant la méthode LMTO auto-consistante, on a

basé le calcul sur la paramétrisation en fonction de la distance (méthode TB), utilisée pour décrire le couplage électron-phonon dans l'approche de Fröhlich. Les alliages sont représentés par le modèle des bandes rigides, où les énergies de Fermi sont déterminées par le nombre d'électrons par atome. Les résultats montrent des effets anormaux en fonction de la température, qualitativement en bon accord avec les données expérimentales [22, 23], par contre l'écart quantitatif est important.

Par ailleurs on a effectué des calculs ab-initio des constantes élastiques dans les métaux de transition bcc et fcc en utilisant la méthode LMTO. Les résultats théoriques ne sont pas en très bon accord avec les résultats expérimentaux, spécialement en ce qui concerne la déformation trigonale. L'origine de ces écarts est probablement liée aux termes non-sphériques des potentiels, qui grandissent au cours d'un cisaillement. L'utilisation de sphères vides dans la structure pour décrire les effets non-sphériques n'est pas suffisante et il faut envisager d'introduire des potentiels généralisés pour obtenir des résultats satisfaisants.

3.3. Propriétés supraconductrices: succès théoriques

Pour calculer les propriétés supraconductrices et la chaleur spécifique à basse température on doit connaître avec grande précision la structure de bandes électroniques près du niveau de Fermi ainsi que le rehaussement de la densité d'état dû à un couplage électron-phonon. Ce dernier est obtenu en utilisant les fonctions d'ondes LMTO pour recalculer les éléments de matrice dans l'approximation 'Rigid-Muffin-Tin'. N'ayant généralement pas de spectres phononiques, on utilise ici les valeurs expérimentales pour la température de Debye. Les résultats obtenus ainsi pour la chaleur spécifique sont en assez bon accord avec l'expérience pour autant que des effets anormaux comme les fermions lourds ne soient pas présents [24]. En résolvant l'équation d'Eliashberg ou en utilisant une formule approximative de celle-ci [25], on peut calculer la température de transition supraconductrice. En incluant les fluctuations de spin, que l'on suppose reliées au facteur de Stoner (calculé ab-initio) par une théorie simplifiée [26], on obtient alors de bonnes valeurs pour les températures de transition et l'on peut aussi observer une diminution de celles-ci dans certains alliages [27] ($V_xNb_{1-x}N$ ou V_xNb_{1-x}). Ce type de calculs permet l'estimation de l'influence des fluctuations de spin dans la forte diminution de la supraconductivité dans ces alliages, et malgré ces approximations les résultats sont en bon accord avec l'expérience.

3.4. Surfaces de Fermi: succès expérimentaux

Dans cette section, nous traiterons quatre exemples pour lesquels des résultats nouveaux ont été obtenus:

3.4.1. Métaux alcalins

Le lithium a une surface de Fermi mal connue. Les calculs sont rendus difficiles à cause de l'importance du terme non-local du potentiel [28]. Expérimentalement, la transition martensitique à 80 K supprime l'état monocristallin à basse température, rendant les mesures de l'effet de Haas-van Alphen très difficiles. L'annihilation de positons a permis d'étudier très précisément l'anisotropie de la surface de Fermi du lithium [29].

3.4.2. Alliages désordonnés

Le système NbMo est un cas d'école. Des calculs ATA [30] donnent des résultats satisfaisants comparés aux mesures positoniques de West [31] qui conclut d'autre part que l'approximation des bandes rigides décrit correctement l'évolution de la surface de Fermi du Nb au Mo. Pour notre part, nous avons observé une variation des ellipsoïdes centrés au points N qui n'est pas correctement décrite par un modèle des bandes rigides appliqué au calcul LMTO [29].

3.4.3. Composés supraconducteurs

Le V_3Si est le composé de la structure A15 [32] actuellement le plus étudié par annihilation de positons. Citons les travaux de précurseur effectués par Weger et Berko [33]. Deux travaux récents ont été menés parallèlement [34, 35]. Les surfaces de Fermi obtenues sont essentiellement les mêmes, et en bon accord avec les calculs [36, 37]. Soulignons que, pour la première fois, la surface de Fermi d'un composé a été déterminée expérimentalement par cette méthode et qu'elle permet de conclure que la précision des calculs de structure de bandes est de l'ordre de quelques mRy.

3.5. *Densités de spin: succès expérimental*

La polarisation du faisceau de positons, qui est due à la non conservation de la parité lors de la désintégration bêta, permet d'étudier les substances magnétiques [38]. Des résultats récents ont été obtenus pour le Gd [39] et le Ni [40]. Ces mesures sont en bon accord avec les résultats de structures de bandes et permettent ainsi une estimation indirecte de l'«exchange splitting».

4. Prospective: quelle physique faire?

Nous allons tenter de séparer en deux ensembles les domaines où, dans le futur, l'intérêt de la recherche se portera (ou continuera à se porter). Cette séparation, quoique arbitraire pour le physicien expérimentateur, nous permettra de clarifier notre propos.

4.1. *Effets 'one-body'*

4.1.1. Composés et alliages

Les propriétés électroniques des alliages et des composés intermétalliques sont un vaste domaine où la connaissance est encore partielle. L'application des approximations de calculs du type CPA ou ATA [41, 52] a connu bon nombre de succès, mais mérite certainement une plus large confrontation avec les données expérimentales. Or, si l'on examine les différents moyens de mesure disponibles, on s'aperçoit qu'il n'y a, dans ce domaine, que relativement peu de méthodes quasi-directes:

- * Pour les mesures de la densité d'états, les expériences spectroscopiques telles XPS permettent de situer la position des bandes en énergie, mais leur résolution ne donne pas une information précise sur les structures fines de la

densité d'états. Des méthodes de déconvolution peuvent parfois être mises à profit, néanmoins.

- * Les mesures des courbes de dispersion sont peut-être plus performantes. Les oscillations quantiques ont un avenir dans la mesure où des progrès dans la recherche de champs magnétiques intenses pourront être obtenus. Les matériaux supraconducteurs à haut champ critique existent déjà et l'on travaille activement à la réalisation de fils aux courants critiques suffisamment élevés pour permettre de construire des bobines [43].
- * Une autre méthode prometteuse est incontestablement la photoémission directionnelle [44, 45] qui, tout comme les positons, permet des investigations précises en s'appuyant sur les résultats théoriques. Les points ouverts sont ici les problèmes liés à l'interface que doit franchir l'électron détecté, ainsi que les formes et positions des bandes vides.
- * La dernière observable que nous mentionnerons est la distribution des quantités de mouvement électroniques. Ici deux méthodes différentes émergent: la diffusion Compton et l'annihilation des positons. La diffusion Compton a vu des progrès marquants dans la dernière décennie. L'utilisation de la radiation synchrotron [46] en a fait une méthode de choix, spécialement pour l'étude des matériaux de faible densité. Elle est pourtant limitée à des mesures unidimensionnelles dont la résolution est inférieure aux mesures positoniques.

Les très bons résultats obtenus pour un certain nombre de propriétés physiques décrites essentiellement par des effets à un corps, telles que les surfaces de Fermi, la chaleur spécifique, la compressibilité, etc . . . , montrent la grande qualité des structures de bandes électroniques obtenues par la méthode LMTO. Par ailleurs, l'étude des alliages effectuée au moyen de calculs 'supercell' sont encourageant et il serait souhaitable de les poursuivre pour de nouveaux composés.

Par contre, pour d'autres propriétés aussi décrites par des effets à un corps, tels que le calcul des constantes élastiques ou le calcul des phonons, il sera nécessaire d'améliorer la méthode LMTO en introduisant des potentiels généralisés non-sphériques.

4.1.2. Matériaux synthétiques

Cette classe de matériaux nouveaux connaîtra, à n'en pas douter, un développement important. Citons en passant l'apparition des super-réseaux qui, dans le cas des semiconducteurs notamment, permettent d'obtenir des composants électroniques nouveaux, aux caractéristiques modelables presque à volonté [47]. Les super-réseaux pourraient aussi permettre d'étendre le domaine d'existence de la supraconductivité, mais là les applications sont beaucoup plus hypothétiques. Dans notre domaine plus restreint, citons les composés intercalaires à base de graphite, dans lesquels les positons ont déjà apporté des résultats substantiels sur la nature des orbitales électroniques des intercalés [48].

4.1.3. Etude des surfaces

L'étude des propriétés électroniques au voisinage des surfaces a connu un grand essort récemment [49] en Suisse romande. La connaissance des propriétés de surface, on le sait, joue un grand rôle, principalement en chimie (catalyse, adsorption etc.). Le calcul des états électroniques de surface revêt donc une certaine importance. Ici encore, le positon ouvre une fenêtre d'observation. Mais à la condition qu'il soit envoyé à faible énergie, afin qu'il ne pénètre pas dans le

solide. Des efforts importants dans cette nouvelle voie sont consentis un peu partout dans le monde et un premier atelier de travail international consacré à ce sujet vient d'avoir lieu en Finlande. Des mesures de corrélation angulaires de la radiation d'annihilation de positons lents devraient permettre de mesurer les distributions d'impulsion des électrons de surface pour vérifier les calculs mentionnés. D'autre part la LEPD (Low Energy Positron Diffraction) [50] pourrait être bientôt une méthode complémentaire au LEED, un de ses avantages étant l'absence d'échange de spin qui amène une certaine simplification dans le calcul des spectres.

4.2. Effets 'many-body'

Nous avons déjà montré plus haut la contribution des positons à l'étude du magnétisme en discutant le cas du nickel. Pour le fer, des calculs très précis de la distribution de l'aimantation dans l'espace de phase ont été faits [51]; ils ne demandent qu'à être confrontés avec l'expérience. Le magnétisme des terres rares est aussi un champ d'investigation pour les positons.

Si les matériaux supraconducteurs peuvent être étudiés, l'observation directe de l'ouverture d'un gap au niveau de Fermi reste bien au delà de la résolution des caméras à positons actuelles. Néanmoins, l'étude indirecte est très prometteuse.

On obtient déjà des résultats quantitativement encourageants dans la cas de propriétés physiques faisant intervenir des effets "Many-body", comme les fluctuations de spin, au moyen de théories assez approximatives (par exemple dérivées pour des électrons libres).

Mais il est maintenant très important d'effectuer la liaison entre les théories des effets essentiellement 'Many-Body' (tels que les fluctuations de valence, les fluctuations de spin, fermions lourds, effet Kondo, etc...), qui sont déjà bien établies, et les calculs de structures de bandes électroniques dans l'approximation de la densité non locale. Ces dernières étant incapables à elles seules d'expliquer ces effets intéressants, il faut donc les utiliser comme base pour de nouveaux calculs où l'on aura inclus les interactions 'Many-Body'.

Le problème nouveau des fermions lourds est aussi un sujet très intéressant. Nous voudrions montrer comment l'annihilation de positons pourrait apporter des renseignements nouveaux et susciter une réflexion théorique supplémentaire. Les calculs actuels expliquent l'apparition des rapports m^*/m de 100 à 1000 par l'existence d'un pic très étroit dans la densité d'état. On pense que ce pic est dû soit au réseau de Kondo [52] soit au '*p*-state pairing' [53]. Cependant, ces travaux ne disent rien sur la provenance de ce pic de densité d'état dans l'espace de phase. Est-il un phénomène collectif qui provient de tous les états situés au niveau de Fermi? Est-il provoqué par quelques états particuliers seulement? Ces derniers ont-ils des caractéristiques topologiques particulières? Comme nous l'avons déjà vu, c'est dans l'espace de phase que les positons donnent des informations. Il serait donc intéressant de mesurer ces matériaux avec cette technique pour voir si la distribution des effets de corrélations peut être obtenue. Il serait aussi bon, en parallèle, que les questions relevées ci-dessus soient étudiées.

5. Conclusion: quels moyens mettre en oeuvre?

Les moyens à mettre en oeuvre sont de nature expérimentale et théorique. Les appareils sont relativement peu coûteux mais inutilement lents. Pour

améliorer cette situation, on peut essayer d'augmenter l'efficacité des détecteurs, recherche qui s'impose notamment aussi pour l'application de ces détecteurs à la tomographie médicale (travaux de Jeavons [54]). Pour l'application ACPAR on peut également chercher à agrandir les détecteurs au delà des $30\text{ cm} \times 30\text{ cm}$ actuellement atteints, et aussi tenter l'utilisation de détecteurs multiples. L'observation simultanée de différents angles devrait rendre possible la reconstruction de l'image des impulsions pendant la mesure, ce qui signifierait le début d'une procédure interactive, donc un grand gain d'efficacité scientifique.

Crucial pour l'évaluation théorique de nos mesures a été l'existence d'algorithmes rapides, tels que LMTO, qui permettent l'obtention de surfaces de Fermi en accord étonnant avec les observations positoniques, et avec un effort de calcul abordable pour un miniordinateur tel qu'un VAX.

Ces succès ne doivent cependant pas cacher les insuffisances des approximations utilisées:

- Les méthodes rapides présupposent une symétrie sphérique autour des atomes. L'enlèvement de cette restriction est nécessaire notamment pour l'étude des propriétés élastiques.
- Le traitement des alliages, (et défauts) nous force à renoncer à l'hypothèse de symétrie translationnelle.
- Le traitement plus explicite des effets à N corps nous force à renoncer à l'hypothèse de la localité du potentiel effectif.

On peut donc dire que le succès remarquable dans le calcul des surfaces de Fermi dans des alliages relativement complexes nous encourage à aborder le calcul des propriétés physiques des métaux dans leur totalité, mais ce but ne sera abordable qu'avec des ordinateurs très puissants qui deviennent disponibles maintenant. Cette prochaine phase du programme numérique ne nécessitera pas seulement des moyens matériels d'un ordre de grandeur inhabituel (du moins pour la physique de la matière condensée), mais encore et surtout un groupe de chercheurs suffisamment grand et compétent. Qu'il nous soit permis d'émettre le vœu que la communauté de physique numérique qui est implantée en Suisse Romande, dans des institutions indépendantes, mais animée par un commun intérêt pour la science, puisse trouver en commun les moyens techniques, intellectuels et financiers pour exploiter son avance actuelle, et la force de réaliser l'avantage qu'une coordination intelligente pourrait lui apporter.

Une réelle maîtrise de la physique des matériaux n'est pas seulement un défi intellectuel, mais comporte aussi une chance de passer de l'attitude traditionnelle analytique du physicien des matériaux à une approche plus synthétique, pouvant dans certains cas déboucher sur l'invention de matériaux nouveaux, faits 'sur mesure'. Nous espérons que de telles perspectives ne sont pas pour déplaire au professeur Mooser, qui a oeuvré à l'EPFL, pour un institut de physique qui se distingue à la foi en physique fondamentale et appliquée, en physique expérimentale et numérique, et à qui nous dédions cet article avec nos vœux pour son sixième anniversaire.

REFERENCES

- [1] O. K. ANDERSEN, Phys. Rev. B, 12, 3060 (1975).
- [2] P. J. FEIBELMANN, J. A. APPELBAUM and D. R. HAMAN, Phys. Rev. B 20, 1433 (1979).

- [3] J. ASHKENAZI, M. DACOROGNA, M. PETER, Y. TALMOR and E. WALKER, *Phys. Rev. B*, **18**, 4120 (1978).
- [4] O. PICTET, Travail de diplôme, Université de Genève (1981).
- [5] S. DE BENEDETTI, C. E. COWAN, W. R. KONNEKER and H. PRIMAKOFF, *Phys. Rev.*, **77**, 205-212 (1950).
- [6] W. BRANDT and A. DUPASQUIER (eds), *Positron Solid-State Physics*, North-Holland, (1983).
- [7] S. BERKO and J. S. PLASKETT, *Phys. Rev.*, **108**, 1877 (1958).
- [8] S. BERKO, M. HAGHOOIE and J. J. MADER, *Phys. Lett.* **63A**, 335 (1977).
- [9] R. N. WEST, J. MAYERS and P. WALTERS, *J. Phys. E*, **14**, 478 (1981).
- [10] P. E. BISSON, P. DESCOUTS, A. DUPANLOUP, A. A. MANUEL, E. PERRÉARD, M. PETER et R. SACHOT, *Helv. Phys. Acta* **55**, 100 (1982).
- [11] P. E. MIJANRENDIS et L. RABOU, communication privée.
- [12] D. G. LOCK, V. H. C. CRISP and R. N. WEST, *J. Phys. F*, **3**, 561 (1973).
- [13] A. M. CORMACK, *Phys. Med. Biol.*, **18**, 195 (1973).
- [14] A. A. MANUEL, *Phys. Rev. Lett.*, **49**, 1525 (1982).
- [15] L. M. PECORA and A. C. EHRLICH, A. A. MANUEL, A. K. SINGH, R. M. SINGRU, in *Proced. of 7th Intern. Conf. on Positron Annihilation*, New-Delhi, 1985.
- [16] P. E. KIRKEGAARD and M. ELDRUP, *Comp. Phys. Comm.* **3**, 240 (1972).
- [17] F. BOILEAU, B. GEFFROY, R. PAULIN, R. MOLINIE et L. ZUPPIROLI, *J. de Physique*, **44**, 1157 (1983).
- [18] E. MOOSER et M. SCHLUTER, *Nuovo Cim.* **18b**, N1, 164 (1973).
- [19] H. P. VATERLAUS, F. LÉVY et H. BERGER, *J. Phys. C*, **16**, 1517 (1983).
- [20] F. BOILEAU, R. PAULIN, A. A. MANUEL, T. JARLBORG, E. WALKER, R. SACHOT, P. DESCOUTS and M. PETER, to be published.
- [21] P. BUJARD, R. SANJINES, E. WALKER, J. ASHKENAZI et M. PETER, *J. Phys. F*, **11**, 775 (1981).
- [22] E. WALKER and M. PETER, *Journal of Applied Phys.* **48**, 2820 (1977).
- [23] P. BUJARD, Ph.D. Thesis, University of Geneva (1982).
- [24] T. JARLBORG, A. JUNOD and M. PETER, *Phys. Rev. B*, **27**, 1558 (1982).
- [25] W. L. McMILLAN, *Phys. Rev.* **167**, 331 (1968).
- [26] S. DONIACH and S. ENGELSBERG, *Phys. Rev. Lett.* **17**, 750 (1966).
- [27] M. DACOROGNA, T. JARLBORG, A. JUNOD, M. PELIZZONE and M. PETER, to appear in *J. Low Temp. Phys.*
- [28] A. H. MACDONALD, *J. Phys. F*, **10**, 1737 (1980).
- [29] A. A. MANUEL, L. OBERLI, T. JARLBORG, R. SACHOT, P. DESCOUTS and M. PETER, in *Positron Annihilation* (P. G. Coleman, S. C. Sharma and L. M. Diana, eds.), North-Holland, p. 281 (1982).
- [30] Y. NAKAO and S. WAKOH, *J. Phys. Soc. Japan*, **52**, 3122 (1983).
- [31] R. N. WEST, *Inst. Phys. Conf. Ser.*, **55**, 35 (1980).
- [32] J. MULLER, *Rep. Prog. Phys.*, **43**, 641 (1980).
- [33] S. BERKO and M. WEGER, *Phys. Rev. Lett.*, **24**, 55, (1970).
- [34] W. S. FARMER, F. SINCLAIR, S. BERKO and G. M. BEARDSLEY, *Sol. State Comm.*, **31**, 481 (1979).
- [35] T. JARLBORG, A. A. MANUEL and M. PETER, *Phys. Rev. B*, **27**, 4210, (1983).
- [36] B. M. KLEIN, L. L. BOYER, D. A. PAPACONSTANTOPOULOS et L. F. MATTHEISS, *Phys. Rev. B*, **18**, 6411 (1978).
- [37] T. JARLBORG, *J. Phys. F*, **9**, 283 (1979).
- [38] S. BERKO et A. P. MILLS, *J. de Physique*, **32-C1**, 287, (1971).
- [39] K. R. HOFFMANN, S. BERKO and B. J. BEANDRY, in *Positron Annihilation*, (P. G. Coleman, S. C. Sharma, L. M. Diana, eds.), North-Holland, p. 325 (1982).
- [40] Y. MATHYS, Travail de diplôme, Univ. de Genève, 1984.
- [41] A. BANSIL, in *Positron Annihilation*, (P. G. Coleman, S. C. Sharma, L. M. Diana, eds.), North-Holland, p. 281 (1982).
- [42] W. M. TEMMERMAN, B. L. GYORFFY, G. M. STOCKS, *Int. Phys. Conf. Ser.*, **39**, 398 (1978).
- [43] B. SEEGER, C. ROSSEL and Ø. FISCHER, in *Ternary superconductors*, (G. K. Shenoy, B. D. Dunlap, F. Y. Fraydin, eds.), North-Holland (1982).
- [44] H. C. SIEGMANN, F. MEIER, M. ERBUDAK and M. LANDOLT: *Adv. Electr. Electr. Phys.*, **62**, 1 (1984).
- [45] E. KISKER, K. SCHRODER, M. CAMPAGNA and W. GUDAT, *Phys. Rev. Lett.*, **52**, 2285 (1984).
- [46] G. LOUPIAS, J. PETIAU, A. ISSOLAH and M. SCHNEIDER, *Phys. Stat. Sol. (b)*, **102**, 79 (1980).
- [47] G. H. DÖHLER, *Proc. of the 4th General Conference of the Condensed Matter Division or the EPS*, The Hague, The Netherlands (1984).

- [48] E. CARTIER, F. HEINRICH, P. PFLÜGER and H. J. GÜNTHERODT, *Phys. Rev. Lett.*, **46**, 272 (1981).
- [49] M. POSTERNAK, A. BALDERESCHI, A. J. FREEMAN and E. WIMMER, *Phys. Rev. Lett.*, **52**, 863 (1984).
- [50] A. H. WEISS, I. J. ROSENBERG, K. F. CANTER, C. B. DUKE and A. PATON, *Phys. Rev. B*, **27**, 867 (1983).
- [51] H. J. F. JANSEN and F. M. MUELLER, *Phys. Rev. B*, **26**, 2624 (1982).
- [52] H. RAZAFIMANDIMBY, P. FULDE and J. KELLER, *Zeitschr. Phys. B*, **54**, 111 (1984).
- [53] H. R. OTT, H. RUDIGIER, T. M. RICE, K. UEDA, Z. FISK et J. L. SMITH, *Phys. Rev. Lett.*, **52**, 1915 (1984).
- [54] D. TOWNSEND, P. FREY, A. DONATH, R. CLACK, B. SCHORR and A. JEAVONS, *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research*, **A221**, 105 (1984).