MASTER PHYSIQUE - 1ère année

Examen Partiel : Physique de la Matière Condensée

7 novembre 2014

Durée : 3 heures *Calculatrices autorisées*

Exercice I : Electrons d'un système bi-dimensionnel (2D) d'atomes trivalents

On considère *N* électrons libres dans une boîte carrée de côté *L* et on désigne par *n* le nombre d'électrons libres par unité de surface.

I.1 En se plaçant dans le cadre du modèle de Sommerfeld, vérifier que les fonctions d'onde électroniques de la forme

$$\psi(x,y) = A\, e^{ik_x x}\, e^{ik_y y}$$

sont solutions de l'équation de Schrödinger où k_x et k_y sont quantifiés [on imposera à la fonction d'onde électronique les conditions aux limites périodiques de Born et von Karman (BvK)].

En déduire la densité d'états électroniques par unité de surface et par unité d'énergie, que l'on notera $g_{2D}(E)$. Tracer qualitativement l'allure de la variation de $g_{2D}(E)$ en fonction de l'énergie *E*.

Dans la suite de cet exercice, on considèrera que les *N* électrons libres qui se trouvent dans cette boîte carrée de côté *L* proviennent d'atomes *trivalents* (chaque atome contribue 3 électrons). Les atomes sont répartis sur un réseau carré de paramètre *a* dans cette boîte.

I.2 Donner l'expression, en fonction de *a*, du paramètre de maille du réseau réciproque.

I.3 Représenter, sur un schéma clair, les trois premières zones de Brillouin.

I.4 Exprimer le vecteur d'onde de Fermi, k_F, en fonction de *n*, pour un tel réseau 2D.

I.5 Exprimer *n* en fonction de *a* et en déduire l'expression de k_F en unités de (π/a).

I.6 Tracer, sur le schéma de la question **I.3**, la surface de Fermi de ce matériau (on prendra bien soin de montrer l'étendue de cette surface de Fermi par rapport aux bords des zones de Brillouin ; on rappelle que les électrons sont toujours considérés libres).

I.7 Représenter, sur un 2ème schéma et en zone réduite, les courbes de dispersion *E(k)*, dans les directions ΓX et ΓM, où Γ (0, 0) est le centre de la 1ère zone de Brillouin et X et M sont les points définis par X $(\pi/a, 0)$ et M $(\pi/a, \pi/a)$.

I.8 Exprimer l'énergie de Fermi E_F et indiquer son niveau sur le schéma de la question **I.7**.

I.9 On considère maintenant que les électrons sont soumis à un faible potentiel périodique. Comment les courbes *E(k)* sont-elles modifiées ?

I.10 Combien d'électrons peut-on loger par bande ?

I.11 Ce système d'atomes trivalents est-il conducteur ou isolant ? Justifier votre réponse.

Exercice II : Chaleur spécifique d'une chaîne monoatomique uniforme

On considère une chaîne de longueur L formée de N atomes identiques séparés d'une distance a (avec $L >> a$). Les vibrations des atomes de cette chaîne seront supposées pouvoir être décrites dans le cadre de l'approximation harmonique et en ne tenant compte que des interactions entre premiers voisins, avec une constante de rappel unique α.

II.1 Écrire l'équation du mouvement d'un atome au voisinage de sa position d'équilibre et en déduire la loi de dispersion $\omega(q)$ [on supposera que le déplacement u_s du $s^{\text{ième}}$ atome s'écrit sous la forme $u_s = A\ e^{i(qsa\ -\ \omega t)}$]. Tracer les courbes de dispersion $\omega(q)$. Pourquoi peut-on se contenter de tracer ces courbes de dispersion à l'intérieur de la 1$^{\text{ère}}$ zone de Brillouin pour avoir toutes les valeurs possibles de ω ?

II.2 Que devient cette loi de dispersion $\omega(q)$ pour de faibles valeurs de q ?

II.3 On se place dans le cadre de l'approximation de Debye et on choisit d'utiliser les conditions aux limites cycliques de Born et von Karman. Exprimer la densité de modes par unité de longueur, $g(\omega)$, et vérifier que, dans ce cas de problème uni-dimensionnel, cette densité de modes est, en fait, indépendante de ω.

II.4 En déduire les expressions de (i) la pulsation de Debye, ω_D, (ii) le vecteur d'onde de Debye, q_D, et (iii) la température de Debye, θ_D.

II.5 Écrire l'expression de l'énergie interne, U, du gaz de phonons.

II.6 Exprimer la chaleur spécifique, C_V, de cette chaîne d'atomes (on posera $x = \dfrac{\hbar\,\omega}{k_B T}$, où $\hbar$ est la constante réduite de Planck, k_B est la constante de Boltzmann et T désigne la température). On exprimera C_V en particulier dans les deux cas: basse température ($T \to 0$) et haute température ($T \to \infty$).

On donne $\displaystyle\int_0^\infty \frac{x^2 e^x\, dx}{\left(e^x - 1\right)^2} = \frac{\pi^2}{3}$.