

A.U. 2006/2007 – Examen de Physique de la Matière Condensée (MP024) du 3 juillet 2007

1. Approximation des liaisons fortes (*prévoir 80 min*). On veut utiliser l'approximation des liaisons fortes pour décrire la structure électronique d'une chaîne linéaire de $2N+1$ atomes monovalents et identiques, uniformément espacés de a . $\varphi_n = \varphi_0(x-x_n)$ désigne la fonction d'onde atomique normalisée ($\langle \varphi_n | \varphi_n \rangle = 1$) du n -ième atome ($n = -N, \dots, N-1, N$) de coordonnée $x_n = na$.

1a. Préciser les caractéristiques de la fonction φ_0 permettant d'appliquer cette approximation. Dans quelle mesure le paramètre a peut-il influencer la validité de l'approximation?

1b. Ecrire l'expression de la fonction d'onde de Bloch $\psi_k(x)$ dans l'approximation des liaisons fortes comme une combinaison linéaire des fonctions φ_n . Vérifier que ψ_k a la forme de Bloch.

1c. On supposant que le recouvrement entre les fonctions d'onde atomiques de deux atomes adjacents, n et $n+1$, soit négligeable ($\langle \varphi_n | \varphi_{n+1} \rangle \approx 0$), déterminer l'amplitude de ψ_k satisfaisant la condition de normalisation $\langle \psi_k | \psi_k \rangle = 1$.

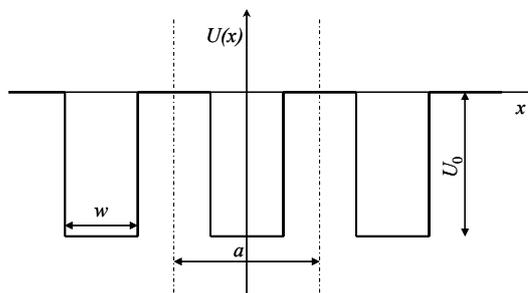
1d. Rappeler la forme générale de la relation de dispersion ε_k pour la chaîne d'atomes ci-dessus dans l'approximation des liaisons fortes. Illustrer la signification physique des paramètres contenus dans cette relation. Quelle grandeur physique détermine la largeur de bande ? Répondre à l'aide d'un graphe.

Maintenant on veut déterminer ε_k pour une chaîne ayant les caractéristiques suivantes : 1. $a=2$ Å ; 2. le potentiel périodique $U(x)$ est schématisé par des puits de potentiels carrés de largeur $w = 1$ Å et profondeur $U_0=10$ eV (voir figure); 3. $\varphi_0(x) = b^{-1/2} \exp(-|x|/b)$, où $b=0.5$ Å.

1e. Vérifier que la fonction $\varphi_0(x)$ est normalisée.

1f. Représenter graphiquement ψ_k pour $k=0$ et $k=\pi/a$.

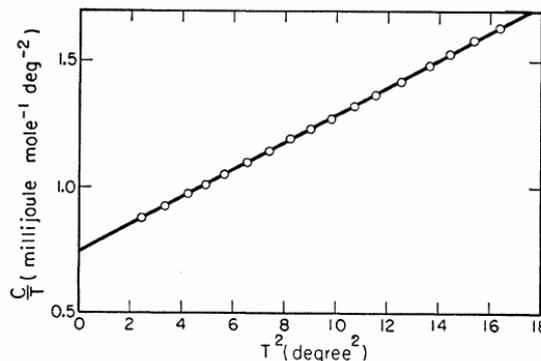
1g. Calculer numériquement l'intégrale $\beta = \langle \varphi_0 | U | \varphi_0 \rangle$ et exprimer le résultat en eV et en J. Cette intégrale peut-elle être limitée sur l'intervalle $[-a/2 - a/2]$? Justifier votre réponse. Quelle est la relation existant entre β et la largeur de bande ?



Suite page 2

2. Propriétés électroniques et calorifiques (prévoir 40 min). On s'intéresse au comportement de la capacité calorifique à volume constant, C , de l'alliage CuZn. La figure ci-dessous montre les valeurs expérimentales à basse température (T) pour une mole de CuZn.

2a. Pensez-vous que le comportement expérimental du graphe ci-contre soit bien décrit par l'expression $C(T) = \gamma T + AT^3$? Justifier votre réponse. Discuter l'origine physique des termes linéaire et cubique et dans quel domaine de température ce comportement peut être observé.



2b. On rappelle que, dans l'approximation des électrons libres, la constante γ est exprimée par la relation $\gamma = (V/3)(\pi k_B)^2 g(\varepsilon_F)$, où V désigne le volume molaire et $g(\varepsilon_F)$ est la densité d'états dans l'espace des énergies, ε , au niveau de Fermi, ε_F . Sachant que, à basse température, la maille élémentaire de CuZn est cubique simple avec paramètre de maille $a = 3.0 \text{ \AA}$, à l'aide du graphe, déterminer $g(\varepsilon_F)$ et la densité volumique des électrons libres. [Note : $g(\varepsilon)d\varepsilon$ désigne le nombre d'états dont l'énergie est comprise entre ε et $\varepsilon + d\varepsilon$, chaque état étant caractérisé par un nombre quantique de spin].

2c. A l'aide du graphe, déterminer la valeur numérique de la température de Debye, Θ_D , pour CuZn. On rappelle que, dans le modèle de Debye, la constante A est reliée à Θ_D par la relation $A = (12/5) \pi^4 R \Theta_D^{-3}$, où R est la constante des gaz.

2d. Etablir la relation entre Θ_D et la fréquence de Debye, ω_D et illustrer la signification physique de ω_D . Sachant que Zn est plus lourd que Cu, sauriez-vous conclure si Θ_D augmente ou diminue en augmentant la concentration de Zn dans l'alliage Cu-Zn ?