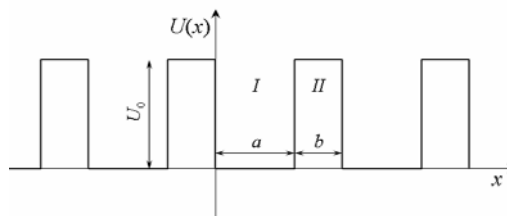


M1 – Examen écrit de Matière Condensée (MP024) du 5 septembre 2006

1. Théorème de Bloch et relation de dispersion (prévoir 50 min.)

On considère le potentiel périodique à 1D, $U(x)$, de la figure ci-contre.



1a. Quelle est la périodicité L de $U(x)$? Quel est le potentiel moyen $\langle U(x) \rangle$?

1b. Ecrire la condition de Bloch pour la fonction d'onde $\psi(x)$ de l'électron dans ce potentiel pour un vecteur d'onde k donné.

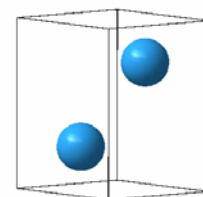
1c. Préciser les vecteurs d'onde, k_I et k_{II} , et la forme générale de $\psi(x)$ dans les deux régions I et II en fonction de l'énergie ε de l'électron.

1d. En utilisant la condition de Bloch et le résultat 1c, dessiner qualitativement $\psi(x)$ pour $k=0$ et $k=\pi/L$ ainsi que pour $\varepsilon < U_0$ et $\varepsilon > U_0$.

1e. Discuter sans calcul quelle condition doit remplir ε par rapport à U_0 pour que la relation de dispersion $\varepsilon(k)$ puisse être approximée par celle de l'électron libre.

2. Structure électronique du béryllium (prévoir 40 min.)

La structure cristalline du béryllium est hexagonale avec $a = b = 2.29 \text{ \AA}$, $c = 3.59 \text{ \AA}$, $\gamma = 120^\circ$; la maille élémentaire comporte deux atomes de coordonnées $(1/3, 2/3, 1/4)$ et $(2/3, 1/3, 3/4)$ (voir figure ci-contre). On rappelle la structure électronique de l'élément Be: $[\text{He}] 2s^2$.

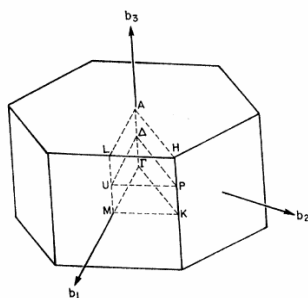
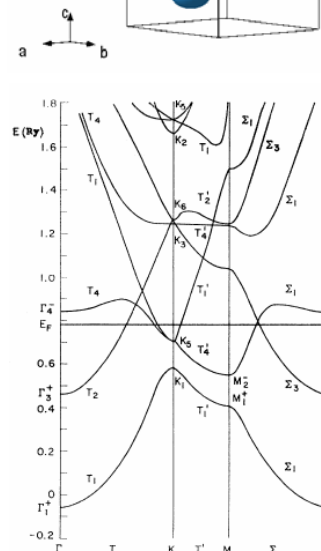


2a. Calculer le volume de la maille élémentaire, V_0 .

2b. Préciser la relation entre les vecteurs de base du réseau direct a , b et c et les vecteurs de réseau réciproque a^* , b^* , c^* (faire un schéma). Calculer a^* , b^* , c^* .

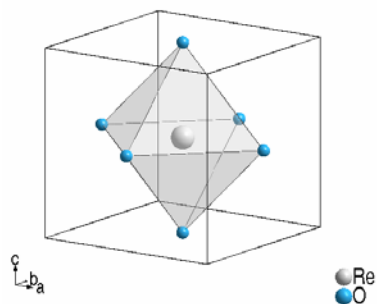
2c. Estimer la densité n des porteurs de charge, en supposant que les deux électrons $2s$ de chaque atome de Be sont délocalisés.

2d. On considère le réseau réciproque et la structure de bande du béryllium (voir figures). Estimer la vitesse de Fermi, v_F , et la densité d'états par unité d'énergie $dn/d\varepsilon$ à 2D au niveau de Fermi, ε_F , de la bande quasi-bidimensionnelle T_2 , en estimant $d\varepsilon/dk$ pour $\varepsilon = \varepsilon_F$. D'après la structure de bande, Be est-il un métal ou un isolant ? Justifier la réponse.



3. Vibrations du réseau et phonons (prévoir 30 min.)

La structure cristalline de ReO_3 est cubique ; la maille élémentaire comporte un atome de Re au centre et trois atomes d'oxygène au milieu de chaque face (voir figure).



3a. Ce réseau est-il cubique simple, cubique à faces centrés, ou cubique centré ? Combien d'atomes sont contenus dans la maille élémentaire ?

3b. Préciser le nombre et le degré de dégénérescence des modes optiques de vibration dans ce composé. Considérer deux modes optiques différents et en dessiner qualitativement les déplacements atomiques $u_s(k)$ (s est l'indice de l'atome) et les vecteurs d'onde k pour $k=0$. Préciser lequel des deux modes aura une énergie plus élevée et justifier la réponse.

3c. Une mesure de diffusion Raman montre que les intensités relatives des pics Stokes et anti-Stokes d'un mode optique de fréquence angulaire $\omega=12.7$ THz sont $I_S=0.65$ et $I_A=0.35$. En déduire la température T de l'échantillon.