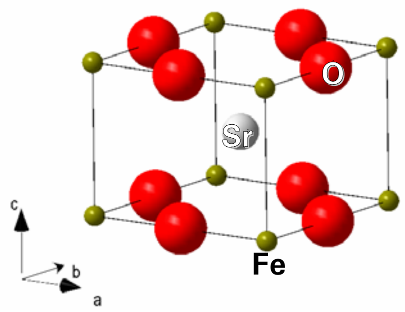
A.U. 2008/2009, MASTER DE PHYSIQUE GENERALE ET APPLICATIONS

Examen de Physique de la Matière Condensée (MP024) du 29 avril 2009

1. Structures cristallines et électroniques *(environ 60 min)*.

La figure ci-contre montre la maille tétragonale d'un oxyde de Sr et Fe, dont la composition est à déterminer à la question **1c**. Les paramètres de maille sont a=b=3.4 Å, c=3.9 Å, α=β=γ=90°. On souhaite étudier les propriétés électroniques de ce composé.



1a. La maille de la figure est-elle primitive ? Justifier votre réponse. (*Pour répondre, compter le nombre de nœuds du réseau contenus dans la maille. Pour ce faire, identifier les atomes formant le motif reproduit dans l'espace. Ce motif constitue le nœud du réseau*).

1b. En appliquant la définition, déterminer la maille du réseau réciproque. Préciser la direction et la norme des vecteurs de base ***a****, ***b****, ***c**** de ce réseau. A l'aide de ce résultat, dessiner la 1$^{\text{ère}}$ zone de Brillouin (1ZB) en rappelant sa définition.

1c. Préciser le nombre d'atomes de chaque espèce contenus dans la maille de la figure et fournir la formule chimique du composé.

1d. Sachant que, dans ce composé, le fer est divalent et dans l'hypothèse où les électrons de valence du fer sont libres dans le solide, calculer la densité volumique $n=N/V$ de ces électrons.

1e. En utilisant la réponse à la question précédente, calculer le vecteur de Fermi, k_F, ainsi que l'énergie de Fermi, ε_F, en eV.

1f. Grâce aux réponses aux questions **1b** et **1e**, dire si la surface de Fermi est à l'intérieur de la première zone de Brillouin. Justifier votre réponse.

2. Vibrations du réseau et chaleur spécifique *(environ 60 min)*.

On considère les vibrations du réseau du zinc. La structure cristalline, la 1ZB et les relations de dispersion selon les deux directions de symétrie Γ-M et Γ-A sont montrées page 2.

2a. Sachant que la maille est hexagonale avec a=2.67 Å et c=4.95 Å, déterminer les coordonnées du point A, au bord de la 1ZB selon l'axe c (ou z).

2b. Sachant que la maille hexagonale du zinc contient deux atomes, préciser le nombre de modes normaux de vibration. Justifier votre réponse. Votre réponse est-elle compatible avec le graphe des relations de dispersion à la page 2 ? (Considérer le graphe selon la direction Γ-M).

2c. Expliquer qualitativement la raison du nombre différent de modes détectés selon les deux directions Γ-M et Γ-A. Considérer ce même graphe selon la direction Γ-A. Identifier les modes optiques et acoustiques et la polarisation transverse ou longitudinale pour ces derniers.

2d. En utilisant la réponse à la question **2a**, estimer graphiquement les vitesses du son des modes acoustiques, longitudinal et transverses, v_L et v_T, selon la direction Γ-A.

2e. Rappeler la signification physique de la fréquence de Debye ω_D. Estimer sa valeur pour le zinc à partir des valeurs obtenues à la question **2d** pour v_L et v_T.

Rappel : ω_D est donnée par l'expression suivante :

$$\omega_D^3 = \frac{18\pi^2}{\frac{2}{v_T^3} + \frac{1}{v_L^3}} \frac{N}{V}$$

où N désigne le nombre d'atomes dans le volume V de la maille.

2f. Expliquer la raison physique du comportement linéaire de la contribution électronique à la chaleur spécifique par mole à volume constant en fonction de la température, $c_V^e = \gamma T$ dans la limite des basses températures, $T \to 0$ K, où γ est appelé coefficient de Sommerfeld.

2g. Préciser la dimension de γ et vérifier l'homogénéité de l'expression suivante, valable dans l'approximation des électrons libres :

$$\gamma = \frac{n_{mol}}{\left(3\pi^2\right)^{2/3}} \left(\frac{\pi k_B}{\hbar}\right)^2 \frac{m^*}{n^{2/3}}$$

où n_{mol} est le nombre d'électrons par mole, n est la densité volumique des électrons, m^* est la masse effective de l'électron et k_B désigne la constante de Boltzmann. A l'aide de cette expression, estimer la valeur numérique de γ pour Zn, sachant que ce dernier est divalent.