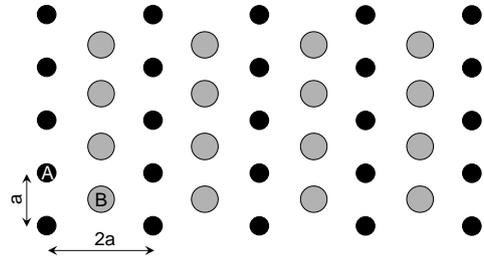


A.U. 2007/2008 – Examen de Physique de la Matière Condensée (MP024) du 15 avril 2008

1. Structures cristallines et propriétés électroniques (*prévoir 80 min*).

On considère le réseau cristallin en deux dimensions de la figure ci-contre, formé par deux espèces d'atomes, A et B. On désigne a et $2a$ les distances entre les plus proches voisins de même espèce selon les deux directions orthogonales.



1a. Dessiner deux choix possibles de maille élémentaire pour ce réseau, en spécifiant le nombre d'atomes par maille, les vecteurs de base, \mathbf{a} et \mathbf{b} , et la valeur de la surface S de la maille.

1b. Répondre à la question précédente, en supposant les espèces A et B identiques.

1c. Dans les deux cas précédents (espèces A et B différentes ou identiques), déterminer les vecteurs de base, \mathbf{a}^* et \mathbf{b}^* , du réseau réciproque et les représenter graphiquement.

1d. Dans les deux cas, dessiner précisément la 1^{ère} zone de Brillouin (1ZB), en indiquant les vecteurs \mathbf{g} du réseau réciproque qui permettent identifier cette zone et les coordonnées des points de symétrie de la zone.

Par la suite, on se limitera au cas d'espèces A et B différentes.

1e. Application numérique : on supposera A divalent (ex. Cu) et B trivalent (ex. Al), $a = 2 \text{ \AA}$ et que les électrons de la couche de valence soient décrits par l'approximation des électrons libres. Déterminer la densité électronique surfacique, n .

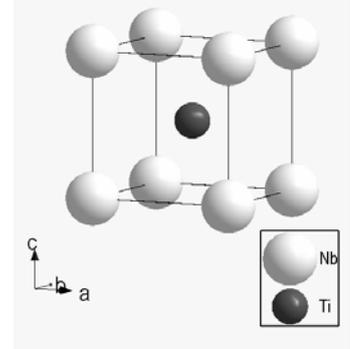
1f. Ecrire la relation qui lie n au vecteur d'onde de Fermi k_F pour ce système. Calculer les valeurs de k_F et de l'énergie de Fermi ε_F (on donnera celle-ci en eV). Est-ce que k_F sera à l'intérieur de 1ZB ? Justifier votre réponse à l'aide d'un dessin.

1g. A l'aide de la réponse à la question **1c**, écrire explicitement les coordonnées du vecteur d'onde $\mathbf{k} = 0.25(\mathbf{a}^* + \mathbf{b}^*)$ en fonction du paramètre a et la fonction d'onde plane correspondante, $\psi_{\mathbf{k}}(x,y)$, normalisée pour un réseau de $N = N_a \times N_b$ mailles.

Suite page 2

2. Vibrations du réseau (prévoir 40 min).

On s'intéresse aux vibrations du réseau de l'alliage NbTi. La structure cristalline simplifiée est montrée dans la figure ci-contre. Le réseau de Bravais correspondant est cubique avec paramètre de maille $a = 3.3 \text{ \AA}$.



2a. Peut-on assimiler les vibrations longitudinales de vecteur d'onde $\mathbf{q} \parallel \mathbf{a}$ dans ce composé aux vibrations d'une chaîne unidimensionnelle avec deux atomes par maille ? Justifier votre réponse, en précisant le paramètre de maille et les masses atomiques de la chaîne équivalente.

2b. Préciser le nombre de modes longitudinaux de vecteur d'onde $\mathbf{q} \parallel \mathbf{a}$ présents dans NbTi. Justifier votre réponse en classifiant chaque mode.

2c. Pour chaque mode de la question précédente, représenter qualitativement les vecteurs de déplacement atomique de Ti et Nb (\mathbf{u}_{Ti} , \mathbf{u}_{Nb}) pour $\mathbf{q} = 0$. Déterminer également le rapport des déplacements $u_{\text{Ti}}/u_{\text{Nb}}$, sachant que les masses atomiques sont $M_{\text{Nb}} = 92.9 \text{ u.m.a.}$ et $M_{\text{Ti}} = 47.9 \text{ u.m.a.}$

2d. Une mesure optique infrarouge sur NbTi montre un pic d'absorption à $\lambda = 1.3 \text{ \mu m}$. On souhaite modifier la position de ce pic à l'aide d'une substitution de Nb par un autre atome de masse M à déterminer. En supposant que cette substitution ne modifie pas les constantes élastiques, quelle devra être la valeur de M pour que le pic d'absorption soit décalé à $\lambda = 1.2 \text{ \mu m}$? [Indication : se rappeler de la forme de la relation entre la fréquence du mode optique à $q = 0$ et la masse réduite pour une chaîne unidimensionnelle avec deux atomes par maille].