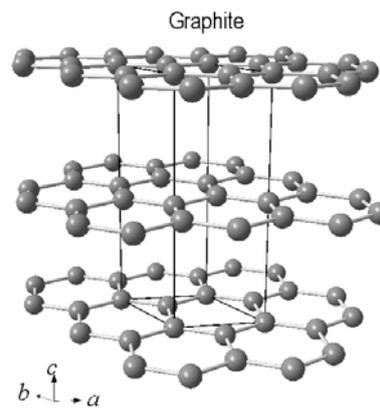


M1 2005/2006 – Examen écrit de Matière Condensée (MP024) 23 mai 2006

1. Modélisation de la structure électronique du graphène par l'approximation des électrons quasi-libres (prévoir 70 min.)

Le graphène est le feuillet constitutif du graphite ou des nanotubes de carbone. Une feuille de graphène consiste en un arrangement plan de type nid d'abeille d'atomes C. Le réseau 2D associé est hexagonal ($a = b = 2.46 \text{ \AA}$, $\gamma=120^\circ$), la maille atomique comportant deux atomes de coordonnées $(0,0)$ et $(1/3,2/3)$. On considère par la suite un plan de graphène de N_1 mailles suivant le vecteur de réseau \mathbf{a} et N_2 mailles suivant \mathbf{b} . On rappelle la structure électronique de l'élément C: $[\text{He}] 2s^2 2p^2$. Dans le graphène, chaque atome a trois électrons de valence engagés dans des liaisons avec les atomes voisins. On s'intéresse aux électrons de valence restant, que l'on suppose libres de se déplacer dans le plan de graphène.



1a. Donner l'expression de la surface totale S du plan de graphène en fonction du paramètre de maille a . Donner aussi le nombre total d'électrons libres N du plan de graphène.

1b. Rappeler la définition du réseau réciproque (RR) (\mathbf{a}^* , \mathbf{b}^* , \mathbf{c}^*) associé à un réseau hexagonal (\mathbf{a} , \mathbf{b} , \mathbf{c}). Faire un schéma représentant l'orientation relative des deux réseaux. Préciser la relation entre a et a^* et calculer ce dernier.

1c. Rappeler la forme générale des fonctions d'onde et énergies possibles pour l'électron dans le modèle des électrons libres à deux dimensions (2D).

1d. Dans les conditions aux limites de Born von Karmann, comment s'écrit le vecteur d'onde \mathbf{k} en fonction des vecteurs du RR (\mathbf{a}^* , \mathbf{b}^*)? Quelle est la densité d'états dans l'espace des \mathbf{k} à 2D ?

1e. Retrouver l'expression de la densité d'états à 2D dans l'espace des énergies ε , soit $D_{2D}(\varepsilon)$, dans le modèle des électrons libres (chaque état étant caractérisé par un nombre quantique de spin). *Note: $D(\varepsilon)d\varepsilon$ désigne le nombre d'états dont l'énergie est comprise entre ε et $\varepsilon+d\varepsilon$.*

1f. Ecrire la relation qui lie le nombre total d'électrons libres N du graphène au vecteur d'onde de Fermi k_F . Calculer les valeurs de k_F et de l'énergie de Fermi ε_F (on donnera celle-ci en eV).

1g. Comparer k_F à la distance qui sépare dans la 1^{ère} zone de Brillouin (1ZB) le point origine Γ en centre de zone du point M le plus proche en bord de zone. Il sera utile de représenter sur un schéma la 1ZB par rapport aux nœuds du réseau réciproque.

1h. Pensez-vous que le modèle des électrons libres soit adapté à la description du graphène? Quelles modifications attend-t-on de la courbe de dispersion $\varepsilon(k)$ au point M et quel type de comportement électronique peut-on attendre ? Soyez le plus précis possible dans votre réponse.

2. Vibrations du réseau (prévoir 30 min.)

Un composé cubique simple de densité $\rho=4.2 \text{ g/cm}^3$, avec $a = 3.5 \text{ \AA}$ et deux atomes par maille élémentaire de masses M_1 et M_2 , absorbe dans l'infrarouge à $\lambda = 18.8 \text{ \mu m}$. Sa vitesse du son est $v_s = 8 \times 10^5 \text{ cm/s}$. Dans le cadre du modèle des oscillateurs harmoniques couplés, déterminer M_1 et M_2 et la constante de raideur K . Considérer uniquement les modes de vibration longitudinaux exprimés par la relation $\omega^2 = K/\mu \pm [(K/\mu)^2 - 4(K^2/M_1M_2)\sin^2(ka/2)]^{1/2}$, où μ est la masse réduite.

3. Conductivité électrique des métaux (prévoir 20 min.)

La structure de Li est cubique centré ($a = 3.51 \text{ \AA}$). Sachant que la constante de Sommerfeld est $\gamma = 1.63 \text{ mJ/mole K}^2$, déduire la densité électronique, $n=N/V$, et l'énergie de Fermi, ε_F , ce dernière en fonction de n . Sachant que la résistivité électrique à 300 K est $\rho = 9.3 \text{ \mu}\Omega\text{cm}$, déduire le temps moyen de collision, τ , et le parcours libre moyen, ℓ , dans le cadre du modèle de Drude, en supposant que la vitesse des électrons soit v_F . Déduire la masse effective, m^* , à l'aide de la structure de bande ci-contre.

Rappel : $\gamma=(1/2)(\pi k_B)^2(N/\varepsilon_F)$, où N est le nombre d'électrons/mole.

