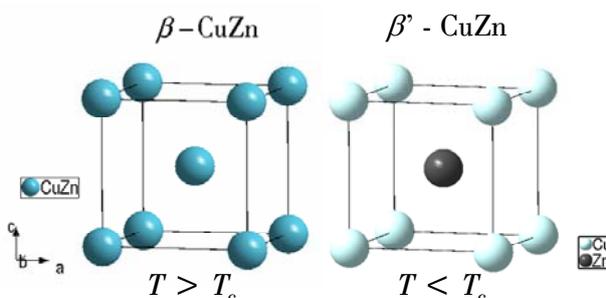


A.U. 2006/2007 – Examen de Physique de la Matière Condensée (MP024) du 24 avril 2007

1. Structures cristallines et propriétés électroniques (*prévoir 80 min*). L'alliage Cu-Zn (laiton) forme deux phases cubiques différentes, dites β et β' , selon la température (voir figure). On supposera ici une proportion égale des deux métaux. A *haute* température, $T > T_c = 468$ °C, l'occupation des sites atomiques est complètement désordonnée et la probabilité d'occupation est donc la même (50%) pour le Cu et pour le Zn (phase β). En revanche, pour $T < T_c$, ces deux éléments occupent de façon ordonnée les sites (phase β').



1a. Quel est le nombre de premiers voisins de chaque atome dans les deux structures? Sachant que les rayons atomiques sont $R_{Cu} = 1.28$ Å et $R_{Zn} = 1.34$ Å, estimer le paramètre de la maille cubique a .

1b. On supposera que Cu et Zn sont divalents et que les électrons de valence sont libres. Calculer la densité des électrons libres $n = N/V$, le vecteur de Fermi k_F , l'énergie de Fermi ε_F en J et en eV et la densité d'états dans l'espace de l'énergie $dn/d\varepsilon = g(\varepsilon_F)$ au niveau de Fermi ε_F .

1c. Préciser le réseau de Bravais (simple, bcc ou fcc) des deux phases β et β' . Dans les deux cas, préciser et représenter graphiquement les vecteurs primitifs \mathbf{a} , \mathbf{b} et \mathbf{c} du réseau direct et les vecteurs primitifs \mathbf{a}^* , \mathbf{b}^* et \mathbf{c}^* du réseau réciproque.

1d. Rappeler la définition de la 1^{ère} zone de Brillouin (1ZB) et l'appliquer aux structures β et β' en précisant les coordonnées des points de symétrie de la 1ZB en 3 dimensions.

1e. Pour les deux phases β et β' , déterminer la distance la plus courte k_{min} entre le point $\Gamma(0,0,0)$ et le bord de la 1ZB. Comparer k_{min} au k_F de la question 1b. La surface de Fermi sera-t-elle contenue à l'intérieur de la 1ZB ? (*Faire un dessin pour répondre*).

1f. Ecrire explicitement les coordonnées du vecteur d'onde \mathbf{k} de module k_F orienté selon la direction (1,1,1). Pour ce vecteur d'onde, calculer la valeur numérique de la phase $\varphi = \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}$ de la fonction d'onde au point $\mathbf{r} = \mathbf{a}$ dans les phases β et β' . (*Utiliser les réponses aux questions 1b-c*).

Suite page 2

2. Vibrations du réseau (prévoir 40 min). On s'intéresse maintenant aux vibrations du réseau de CuZn.

2a. Préciser le nombre des modes normaux de vibrations en 3 dimensions et les classifier.

2b. Le graphe ci-dessous montre les relations de dispersion selon la direction (001). Reconnaitre les différents modes acoustiques et optiques et leur polarisation (transverse et longitudinale). Compte tenu de la structure cristalline, expliquer pour quoi 4 relations de dispersion différentes sont visibles selon cette direction.

On considère maintenant les deux modes n. 1 et n. 3 de la figure ; on les assimilera aux deux modes d'une chaîne unidimensionnelle de périodicité a ayant deux atomes différents (Cu et Zn) de masse M_1 et M_2 et une constante élastique K . On rappelle l'expression de la dispersion de ces deux modes : $\omega^2 = K/\mu \pm [(K/\mu)^2 - 4(K^2/M_1M_2)\sin^2(ka/2)]^{1/2}$, où $\omega=2\pi\nu$ et μ est la masse réduite.

2c. Sachant que les masses atomiques sont $M_{\text{Cu}} = 63.5$ et $M_{\text{Zn}} = 65.4$ u.m.a., déterminer μ en g.

2d. A partir des courbes expérimentales n. 1 et n. 3 de la figure, déterminer la constante K .

2e. En utilisant la relation de dispersion théorique ci-dessus, calculer la différence de fréquence $\Delta\nu$ entre les deux modes n. 1 et n. 3 de la figure au point critique $k=0.5 a^*$ pour les deux phases β et β' . Considérant la différence de masse atomique entre le Cu et le Zn et la résolution en fréquence ($\delta\nu \approx 10^{11}$ Hz) des courbes expérimentales du graphe ci-dessous, peut-on conclure si ces courbes concernent la phase β ou la phase β' ? Justifier votre réponse.

