

Lundi 12 Janvier 2009

Tous documents autorisés

$$N=6.02.10^{23}, k_B=1.3810^{-23} \text{ (J/K)}, m_e=9.110^{-31} \text{ (kg)}, e=1.610^{-19} \text{ (C)}, h=6.610^{-34} \text{ (Js)}$$

A- Indiquez le (ou les) réponses exactes en la (ou les) commentant brèvement

I. Un système tétravalent est :

- 1. toujours métallique car il possède un grand nombre d'électrons de valence
- 2. toujours isolant car il remplit exactement deux bandes (de valence)
- 3. cela dépend de la structure cristallographique et du potentiel d'interaction $e^-/\text{réseau}$

II. L'énergie d'un solide (contribution électronique) :

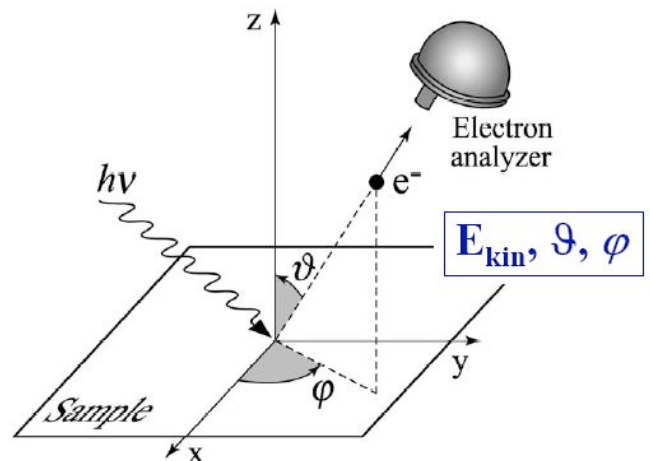
- 1. est indépendante de la température car est entièrement défini par le niveau de Fermi
- 2. peut, dans certains cas (précisez lesquels), augmenter linéairement avec T
- 3. augmente quadratiquement avec T si le système est métallique

III. La contribution des phonons (branches acoustiques) à la chaleur spécifique d'un système supposé parfaitement bidimensionnel :

- 1. varie en T^3 , sauf si l'interaction entre les ions du réseau est à longue portée
- 2. varie en T^2 car on est en dimension 2 (pour une interaction entre 1^{er} voisins)
- 3. varie linéairement car, dans ce cas, le théorème d'équipartition peut s'appliquer

B- Détermination de la relation de dispersion à partir de mesures de photo-émission (ARPES)

Une mesure de photo-émission consiste à envoyer des photons de haute énergie ($h\nu$, généralement X ou UV) sur la surface d'un métal, et à recueillir les électrons éjectés du métal (figure ci contre). L'angle d'émission



(\mathcal{V}) permet alors de remonter à la valeur du vecteur d'onde k de l'électron (dans le plan) et son énergie cinétique (E_{kin}) au niveau d'énergie E qu'il occupait dans le métal ($E=h\nu-E_{kin}-\Phi$, où Φ est le « travail de sortie » du métal). Finalement, on peut remonter à la relation $E(k)$ pour n'importe quelle direction du réseau réciproque en faisant varier l'angle (φ).

1. Le cuivre cristallise dans le réseau cubique face centré (le paramètre a du cube étant égal à 3.615Å). On taille un cristal selon la direction [111] (le plan de coupe passe alors par les atomes situés en centres de faces).

(a) Quelle est la symétrie de l'axe [111], quelle est alors la structure cristallographique dans le plan de coupe (faites un schéma indiquant la position des atomes et les principales distances) ? Donnez les coordonnées des vecteurs de base (a_1, a_2).

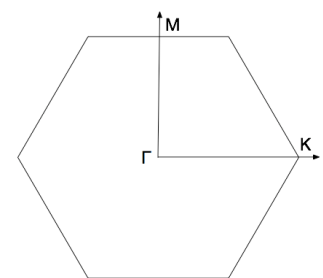
(b) Le cuivre étant monovalent, quelle est la densité électronique (en e^-/cm^2) dans le plan (en supposant que l'électron est totalement localisé dans le plan de coupe) ?

2. (a) Rappelez brièvement la définition du réseau réciproque (en précisant notamment la définition du vecteur d'onde k). Quelles sont les relations permettant de définir ce réseau réciproque à partir du réseau direct, explicitez ces relations en dimension 2¹ ?

(b) Montrez que le réseau réciproque (2D) associé au plan de coupe défini en 1 est un réseau hexagonal (dont on précisera l'orientation par rapport au réseau direct) et tracez les 3 premières zones de Brillouin. .

3. On effectue une mesure de photo-émission dans les directions ΓM et ΓK de la 1^{ère} zone de Brillouin dont on notera Γ le centre (figure ci-contre).

L'intensité du pic de photo-émission (figure ci-dessous) correspond à l'énergie de l'électron dans le métal et les valeurs de k associées sont reportées à droite des graphes.



(a) Quelle origine des énergies a-t-on choisi ?

(b) Quelle est la valeur de l'énergie de Fermi (à 5 meV près)?

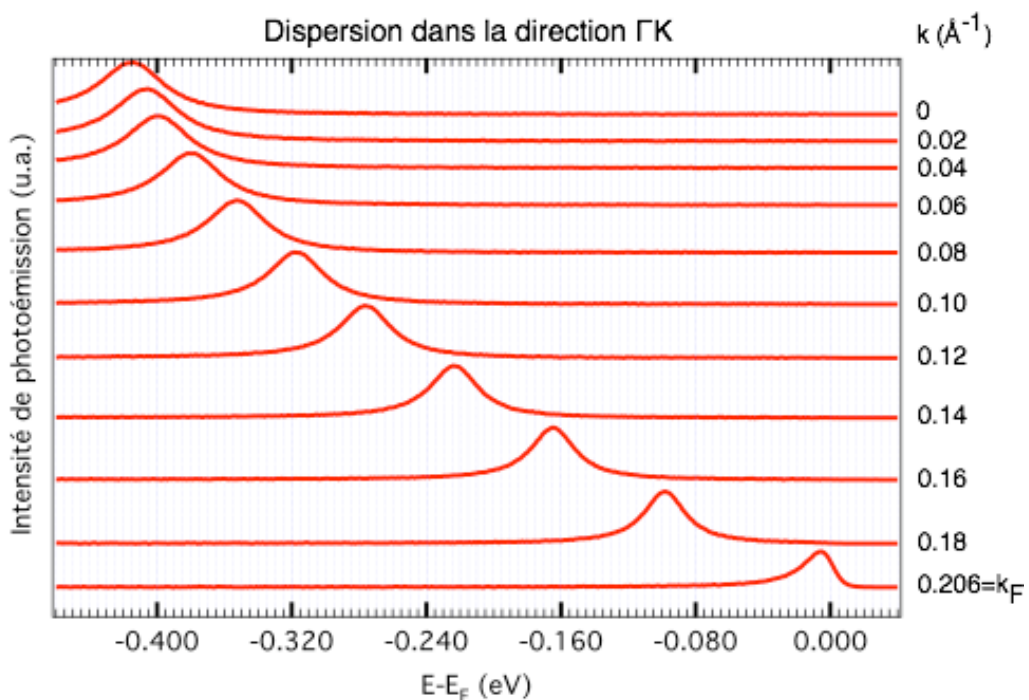
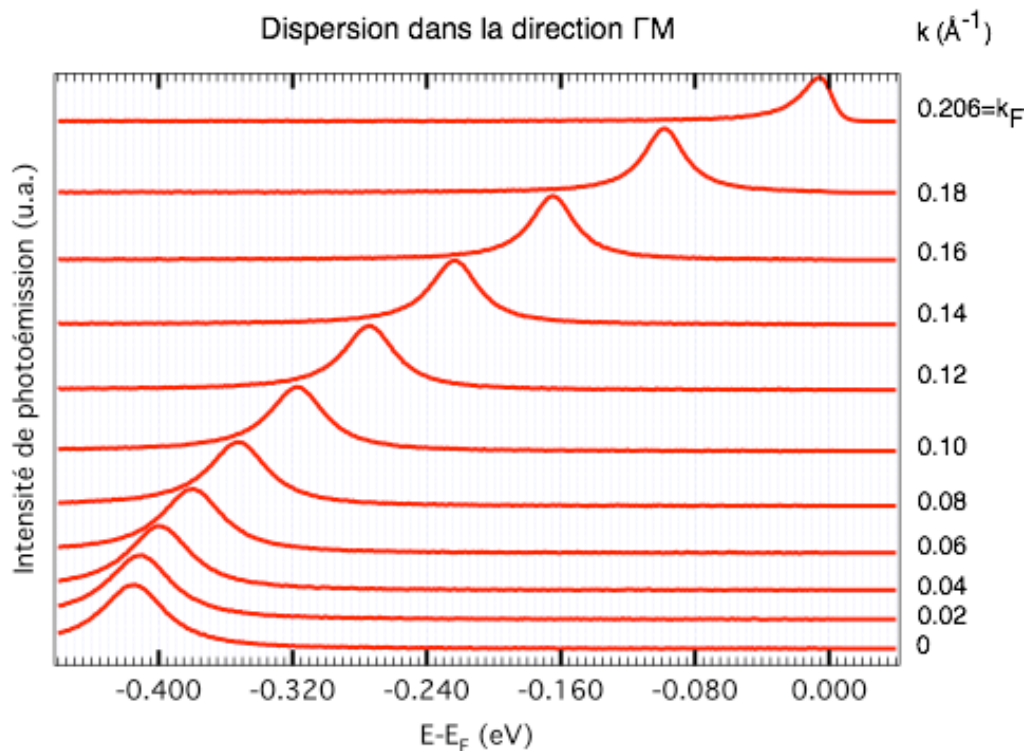
4. (a) Vérifiez que E varie quadratiquement² avec k (pour $k // \Gamma K$), en déduire la valeur de la masse effective pour $k // \Gamma K$. Que vaut cette valeur pour $k // \Gamma M$?

¹ On note (a_{1x}, a_{1y}) (a_{2x}, a_{2y}), (b_{1x}, b_{1y}), (b_{2x}, b_{2y}) les coordonnées des vecteurs du réseau direct et réciproque, donnez les système d'équations reliant les a_{ij} aux b_{ij} .

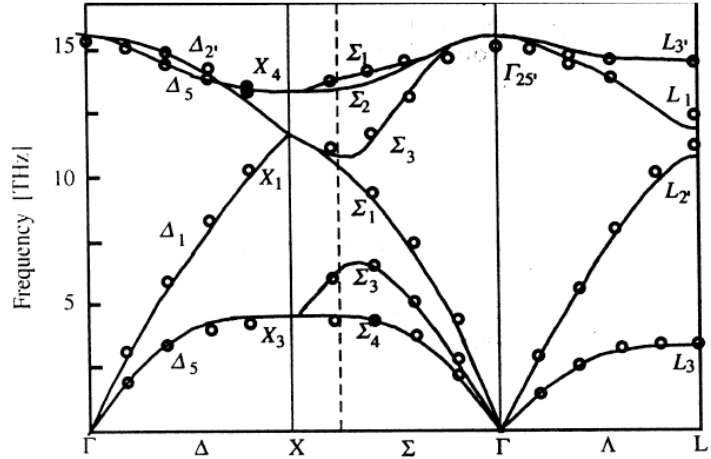
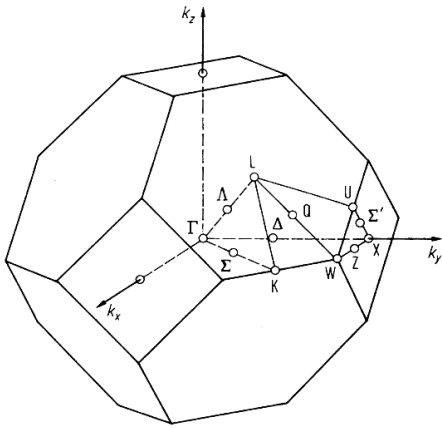
² On négligera le léger décalage vers la gauche (lié à la fonction de distribution $f(E,T)$) du pic pour $k=k_F$.

(b) Au vue de ces mesures que peut-on supposer pour la forme de la surface de Fermi ? Reportez cette surface (à la bonne échelle) sur la figure des zones de Brillouin tracées en 2(c).

(c) Un modèle d'électrons presque libres vous paraît-il applicable ? En déduire l'expression de la densité d'état ($g(E)$) et donnez la valeur numérique de $g(E_F)$ (en états/eV/cellule). Quelle est la densité électronique sur la surface (en e^- /cellule et en e^-/cm^2), comparez cette valeur à celle obtenue en 1(b), conclusion.



C- Phonons dans le diamant (C)



Le diamant cristallise dans la structure cfc, la figure ci-dessus (droite) représente les relations de dispersion des phonons le long de certaines directions particulières de la 1^{ère} zone de Brillouin (figure de gauche).

(a) Rappelez brièvement à quoi correspondent les phonons. A quoi est due ici la présence de modes optiques. Rappelez les expressions théoriques des relations de dispersion correspondant à ces différents modes.

(b) Sur quelle gamme d'énergie s'étendent (i) les modes acoustiques, (ii) les modes optiques ?

(c) Combien de branches acoustiques observe-t-on, à quoi correspondent-elles ?

(b) Estimez (grossièrement) la valeur de la température de Debye à partir des courbes de dispersion, à partir de quel type de mesure peut-on déterminer cette valeur précisément ?

(e) Comment la densité de modes varie-t-elle avec ω dans (i) le modèle de Debye et (ii) le modèle d'Einstein. Tracez schématiquement l'allure de cette densité de modes pour le diamant (en respectant l'échelle).