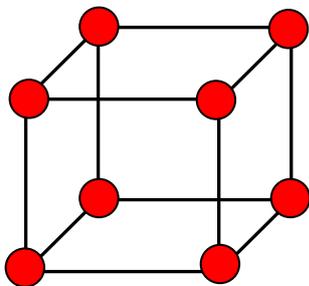
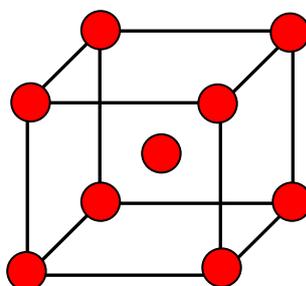

Travaux dirigés
Série n°: 1

Exercice 1: Les empilements cubiques

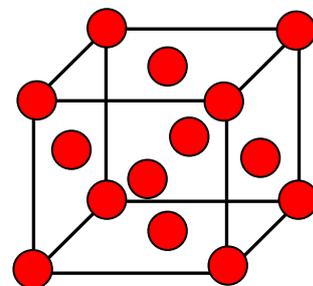
On considère successivement les empilements monoatomiques suivants: cubique simple (cs), cubique centré (cc) et cubique à faces centrées. Soient $(\vec{a}, \vec{b}, \vec{c})$ les vecteurs de la maille conventionnelle cubique de paramètre de maille « a ».



Cubique simple (cs)



Cubique centré (cc)



Cubique à faces centrées (cfc)

Déterminer pour chacune de ces trois structures:

1. Le nombre de premiers et de seconds voisins autour d'un atome quelconque pris comme origine.
2. Le nombre et la position des atomes qui constituent le motif de la maille conventionnelle.
3. La compacité C ou le taux de remplissage (C est défini comme étant le rapport du volume occupé par les atomes au volume de la maille).
4. Les paramètres de la maille élémentaire ainsi que le volume engendré par les vecteurs de base $(\vec{a}_0, \vec{b}_0, \vec{c}_0)$ de cette maille.
5. Les vecteurs de base $(\vec{A}, \vec{B}, \vec{C})$ du réseau réciproque ainsi que le volume engendré par ces vecteurs.

Exercice 2 : Expression de la distance d_{hkl}

On considère une famille de plans réticulaires de l'espace direct d'indices de Miller $(h \ k \ l)$. Soit $\vec{G}_{hkl} = h\vec{A} + k\vec{B} + l\vec{C}$ un vecteur du réseau réciproque qui porte les mêmes indices. \vec{A} , \vec{B} et \vec{C} les vecteurs de base du réseau réciproque.

1. Montrer que le vecteur \vec{G}_{hkl} est perpendiculaire à la famille de plans $(h k l)$. On rappelle que le plan le plus proche de l'origine coupe les axes $(\vec{a}, \vec{b}, \vec{c})$ en $(\frac{1}{h}, \frac{1}{k}, \frac{1}{l})$.
2. Soit d_{hkl} la distance inter-réticulaire entre deux plans $(h k l)$ consécutifs. Montrer que d_{hkl} peut s'écrire sous la forme: $d_{hkl} = \frac{2\pi}{\|\vec{G}_{hkl}\|}$
3. En déduire l'expression de d_{hkl} :
 - i) pour un réseau cubique simple.
 - ii) pour un réseau orthorhombique simple.

Exercice 3 : Angle entre deux plans

Dans un réseau cristallin cubique, on considère deux plans réticulaires d'indices de Miller $(h_1 k_1 l_1)$ et $(h_2 k_2 l_2)$.

1. En utilisant une propriété du réseau réciproque, déterminer l'expression de l'angle Φ entre ces deux plans.
2. Application: calculer l'angle Φ entre les plans d'indices $(1 0 0)$ et $(1 1 0)$.

Exercice 4 : Equation d'un plan

On considère un plan réticulaire de numéro d'ordre m dans une famille de plans d'indices $(h k l)$. Ce plan est situé à une distance $m \cdot d_{hkl}$ du plan passant par l'origine (dans ce cas $m = 0$). Soit M un point, de coordonnées (x, y, z) , appartenant au plan $(h k l)$.

1. En utilisant les propriétés du réseau réciproque, établir l'équation du plan d'ordre m et montrer qu'elle peut s'écrire sous la forme:

$$hx + ky + lz = m$$

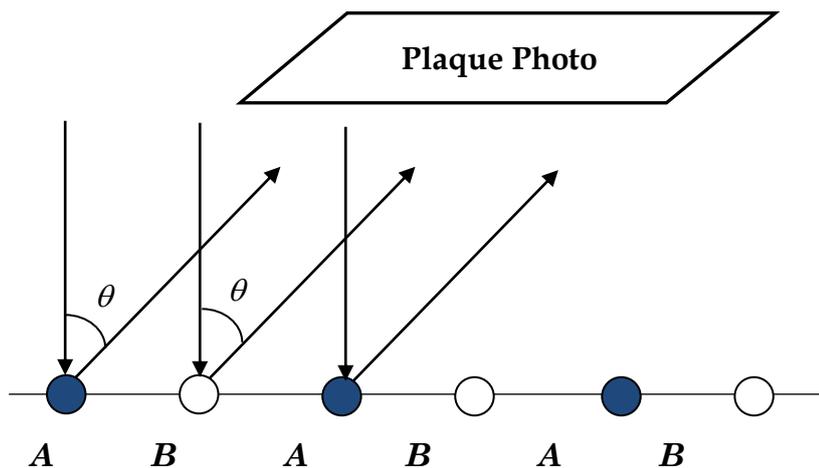
2. Application: Déterminer les indices $(h k l)$ ainsi que le numéro d'ordre d'une famille $(h k l)$ contenant les nœuds $(1, 2, 0)$, $(1, 1, 2)$ et $(3/2, 1/2, 1/2)$.

Travaux dirigés
 Série n°: 2

Exercice 1

On considère une rangée (chaîne) infinie d'atomes équidistants de distance $d = a/2$, où a est le pas du réseau. Cette rangée est composée alternativement de l'espèce A et de l'espèce B . Les facteurs de structures atomiques de ces deux éléments sont notés f_A et f_B .

On éclaire cette rangée à incidence normale à l'aide d'une radiation X monochromatique de longueur d'onde λ et l'on détecte les rayons diffusés par réflexion à l'aide d'une plaque photo perpendiculaire au faisceau incident. On désigne par θ l'angle entre le rayon incident et le rayon diffracté (voir figure).



1. A partir de considérations géométriques simples, déterminer la condition d'interférence sur la plaque photo (condition pour avoir une tache de diffraction sur la plaque).
2. Déterminer le facteur de structure F_h de cette rangée et montrer que l'intensité du faisceau diffracté est proportionnelle à $(f_A - f_B)^2$ pour h impair et à $(f_A + f_B)^2$ pour h pair.

Exercice 2

On considère un édifice cristallin à 2 dimensions caractérisé par un réseau direct rectangulaire simple de paramètres $a = 3 \text{ \AA}$ et $b = 4 \text{ \AA}$. Le motif de ce système est composé d'un atome de type A placé en $(0, 0)$ et d'un atome de type B placé en $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2})$.

1. Déterminer les vecteurs de base du réseau réciproque.
2. On éclaire cet édifice à l'aide d'un rayonnement X dirigé suivant la rangée $[\bar{1}, 0]$ de l'espace direct. La longueur d'onde de ce rayonnement est $\lambda = 1,8 \text{ \AA}$.

- a) En utilisant la construction d'Ewald, préciser les indices des réflexions susceptibles d'être observées.
- b) Calculer la valeur numérique du premier angle de Bragg.

Exercice 3

On considère les trois structures cubiques: cubique simple (c.s), cubique centré (c.c) et cubique à faces centrées (c.f.c).

1. Déterminer le facteur de structure F_{hkl} pour chacune de ces structures puis donner les conditions d'obtention de raies permises.
2. On utilise la méthode des poudres pour enregistrer les diagrammes de diffraction de deux cristaux cubiques A et B qui cristallisent dans l'une des deux formes suivantes : c.c ou c.f.c. Les mesures des angles de diffusion 2θ (entre les rayons directement transmis et ceux relatifs aux deux premiers anneaux) donnent les résultats suivants:

Cristal A : 42° et 49° ; Cristal B : 28° et 41°

- a) Attribuer une structure cristalline à chaque cristal
- b) Déterminer dans chaque cas le paramètre de maille « a » sachant que la longueur d'onde du rayonnement X utilisé est $\lambda = 1,5 \text{ \AA}$.

Exercice 4

Un diagramme de diffraction aux rayonnements X d'un cristal cubique utilisant la radiation $\lambda = 1,54 \text{ \AA}$ a donné des raies correspondant aux angles suivants:

N° de la raie	1	2	3	4	5	6	7	8
θ	$21^\circ 8$	$25^\circ 4$	$37^\circ 2$	$45^\circ 4$	$47^\circ 8$	$58^\circ 8$	$68^\circ 6$	$72^\circ 7$

1. Déterminer les indices h, k, l des plans produisant ces raies.
2. Identifier la structure de ce cristal.
3. Calculer le paramètre de la maille de ce réseau.

Travaux dirigés
Série n°: 3

Exercice 1: Liaisons de type Van der Waals

On considère un cristal composé de N atomes d'un gaz rare. La cohésion dans ce cristal est assurée par des liaisons de type Van der Waals. Le potentiel d'interaction entre deux atomes distants de r peut s'écrire sous la forme :

$$u(r) = 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right]$$

où ε et σ sont des constantes positives caractéristiques de chaque cristal. Ce potentiel est connu sous le nom de potentiel de Lennard-Jones.

1. Quelle est l'origine de chacun des deux termes contenus dans le potentiel d'interaction. Tracer sur le même graphique l'allure de ces deux termes ainsi que leur somme $u(r)$.
2. Donner l'expression de l'énergie totale d'interaction $U(r)$ des N atomes du cristal: on limitera la sommation au Z premiers voisins.
3. Soit r_0 la distance séparant deux atomes voisins à l'équilibre. Donner la condition d'équilibre puis exprimer r_0 en fonction de σ . En déduire l'expression de l'énergie totale d'interaction $U(r_0)$.
4. Le réseau de Bravais des cristaux de gaz rares est cubique à faces centrées (c.f.c). Les paramètres ε et σ de ces cristaux sont regroupés dans le tableau suivant:

	Ne	Ar	Kr	Xe
σ (Å)	2,74	3,40	3,65	3,98
ε (10^{-23} J)	50	167	225	320

Déterminer l'énergie de cohésion par atome E_c (en eV) ainsi que le paramètre de maille « a » pour chacun de ces cristaux. Présenter les résultats sous forme d'un tableau.

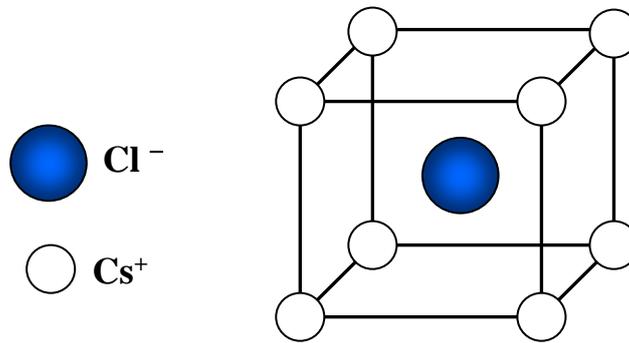
5. Donner, en se basant sur les résultats précédents, les principales propriétés des cristaux de Van der Waals.

Exercice 2: Liaisons ioniques dans la structure CsCl

On considère la structure du chlorure de césium ($CsCl$) dont le réseau de Bravais est cubique simple. Le motif de cette structure est composé d'un ion Cs^+ de coordonnées $(0,0,0)$ et d'un ion Cl^- de coordonnées $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$. La distance entre deux ions Cs^+ et Cl^- , premier voisin, est notée r . L'énergie totale d'interactions des N molécules du cristal $CsCl$ peut être mise sous la forme:

$$U(r) = N \left[z \frac{A}{r^p} - \alpha \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right]$$

z le nombre de premiers voisins, A et p des constantes réelles positives, α la constante de Madelung.



1. Expliquer brièvement la nature des deux termes contenus dans l'énergie d'interaction $U(r)$. Tracer sur le même graphe l'allure de ces deux termes ainsi que leur somme.
2. Etablir l'expression littérale donnant la distance r_0 entre premiers voisins à l'équilibre.
3. Montrer que l'énergie de cohésion à l'équilibre $U(r_0)$ peut prendre alors la forme:

$$U(r_0) = \frac{C}{r_0}$$

Donner l'expression de la constante C .

4. Le module de compression B à l'équilibre obéit à la relation :

$$B = V \left. \frac{d^2U}{dV^2} \right|_{r=r_0}$$

où V est le volume total du cristal.

Déterminer l'expression de B .

Travaux dirigés
 Série n°: 4

Exercice 1: Vibrations d'une chaîne monoatomique

On considère une rangée d'atomes identiques de masse m et de paramètre de réseau « a ». On repère la position d'équilibre du n -ième atome par x_n et le déplacement par rapport à sa position d'équilibre par u_n . La force de rappel F_n exercée sur l'atome n , par tous les autres atomes, peut se mettre sous la forme:

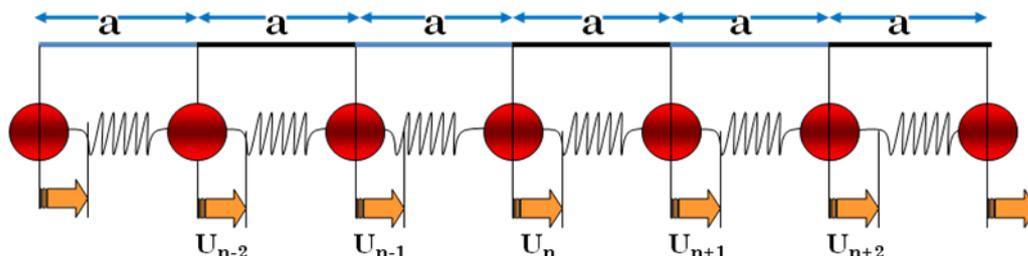
$$F_n = \sum_{p \neq 0} C_p (u_{n+p} - u_n)$$

où C_p est la constante de rappel entre l'atome n et l'atome $(n + p)$.

On cherche des solutions en forme d'ondes planes d'amplitude u_0 et de vecteur d'onde K :

$$u_n = u_0 e^{i(x_n K - \omega t)}$$

où $x_n = na$ est la position d'équilibre de l'atome n .



1. On se limite aux interactions entre un atome donné et ses plus proches voisins caractérisées par la constante de rappel C .

a) Donner l'équation du mouvement de l'atome n .

b) Etablir la relation de dispersion $\omega = f(K)$ des vibrations de la chaîne atomique. Tracer l'allure graphique de $\omega = f(K)$ dans la première zone de Brillouin.

c) Déterminer l'expression de la vitesse du groupe v_g puis en déduire la vitesse de son v_s .

2. On tient compte maintenant des premiers et seconds voisins et on désigne par C_1 et C_2 les constantes de rappel correspondantes respectivement.

a) Etablir la nouvelle équation du mouvement de l'atome n .

b) Montrer que la pulsation ω des vibrations atomiques peut se mettre sous la forme:

$$\omega^2(K) = f_1(K) + f_2(K)$$

où $f_1(K)$ est la contribution des premiers voisins et $f_2(K)$ celle des seconds voisins.

Donner les expressions de $f_1(K)$ et $f_2(K)$.

Exercice 2: Modèle d'Einstein pour la capacité calorifique

En 1907, Einstein propose un modèle théorique permettant de déterminer la capacité calorifique d'un solide cristallin due aux vibrations atomiques à une température T . Dans ce modèle, on assimile les N atomes du cristal à des oscillateurs harmoniques quantiques. L'énergie d'un oscillateur à une dimension a pour expression:

$$\varepsilon_n = (n + 1/2)h\omega$$

où n est nombre entier positif ou nul ($n = 0, 1, 2, \dots$), h la constante de Planck réduite et ω la pulsation de l'oscillateur harmonique.

1. Montrer que l'énergie totale U (énergie interne) des N oscillateurs à 3 dimensions peut s'écrire:

$$U = 3Nh\omega \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{\exp(\beta h\omega) - 1} \right)$$

2. Etablir l'expression de la capacité calorifique à volume constant C_V du cristal. En posant $\theta_E = h\omega/k_B$ (appelée température d'Einstein), donner la nouvelle expression de C_V .

3. Tracer l'allure de C_V en fonction de la température.

4. Déterminer la loi de variation de C_V à haute température ($T \gg \theta_E$) et sa loi de variation à basse température ($T = \theta_E$). Comparer ces résultats aux résultats expérimentaux.

Exercice 3: Capacité calorifique d'un réseau linéaire (modèle de Debye)

Soit un réseau linéaire de longueur L et constitué de N atomes identiques équidistants de « a ». On suppose que les ondes de vibrations atomiques de cette chaîne sont de la forme:

$$u(x) = u_0 e^{i(xK - \omega t)}$$

1. Déterminer la densité des vibrations $D(\omega)$ (ou densité de modes), pour le seul mode longitudinal possible, en utilisant les conditions aux limites périodiques de Born von Karman: $u(x) = u(x + L)$.

2. On suppose que la relation de dispersion des phonons puisse être convenablement décrite par la relation (approximation de Debye): $\omega = vK$, où v la vitesse de son.

a) Préciser la valeur maximale de la fréquence de vibration ω_D des atomes.

b) En déduire l'expression de la température de Debye θ_D puis calculer sa valeur numérique. On donne: $a = 3 \text{ \AA}$, $v = 3000 \text{ m/s}$, $h = 6,62 \cdot 10^{-34} \text{ J.s}$ et $k_B = 1,38 \cdot 10^{-23} \text{ J/K}$.

3. En posant $x = \beta h\omega$ et $x_D = \beta h\omega_D = \theta_D/T$, donner sous formes d'intégrales définies les expressions de l'énergie interne U et la capacité calorifique à volume constant C_V des vibrations du réseau linéaire.

4. Discuter le comportement de C_V à haute ($T \gg \theta_D$) et à basse température ($T = \theta_D$).

Travaux dirigés
Série n°: 5

Exercice 1: Electrons libres à une dimension (CLF), passage de l'atome au cristal

On considère un segment de longueur L le long duquel les électrons sont susceptibles de se mouvoir librement (l'énergie potentielle U est nulle sur le segment). A l'extérieur de ce segment ($x \leq 0$ et $x \geq L$) leur énergie potentielle U est infinie.

1. Quelle est la forme générale des solutions de l'équation de Schrödinger ? Préciser ces solutions dans le cas de conditions aux limites fixes (CLF). Représenter l'allure des 3 premières fonctions d'onde.

2. En déduire la quantification des niveaux d'énergie (cinétique) autorisés. Quelle est l'expression littérale des 3 premiers niveaux d'énergie distincts soit E_1 , E_2 et E_3 .

3. Application au cas de l'atome: $L = 3 \text{ \AA}$.

a) Calculer les valeurs numériques (en eV) prises par E_1 , E_2 et E_3 .

b) L'atome est supposé avoir 2 électrons (supposés libres), quelle énergie minimale doit-on communiquer à l'un de ces électrons pour le faire passer de l'état fondamental au premier niveau excité

4. Applications au cas d'un métal: $L = 3\text{mm}$.

a) Calculer les valeurs numériques (en eV) prises par E_1 , E_2 et E_3 .

b) La rangée est constituée d'atomes identiques et divalents (2 électrons libres par atome), équidistants de $a = 3 \text{ \AA}$. Combien de niveaux d'énergie sont occupés dans l'état fondamental. Quelle est l'énergie E_F du dernier niveau occupé ?

Exercice 2 : Métal unidimensionnel (conditions aux limites périodiques)

On considère une rangée infinie d'atomes identiques équidistants de « a ».

1. Donner l'expression générale de la fonction d'onde des électrons susceptibles de se mouvoir librement le long de la rangée.

2. Ces fonctions d'onde satisfont aux conditions aux limites périodiques (CLP) de périodicité L , soit $\varphi(x) = \varphi(x + L)$.

En déduire la quantification du vecteur d'onde k et la quantification des niveaux d'énergie possibles pour les électrons.

3. Donner l'expression littérale puis la valeur numérique des 3 premiers niveaux d'énergie distincts dans le cas d'un élément monovalent (un électron par atome) dont les atomes sont équidistants de $a = 3 \text{ \AA}$ (on prendra $L = 3\text{mm}$).

4. Donner l'expression littérale puis la valeur numérique caractérisant le dernier niveau occupé à 0 K, soit k_F et E_F (vecteur d'onde de Fermi et énergie de Fermi).

Exercice 3 : Electrons libres dans une enceinte (CLF)

On considère un électron de masse m soumis à un potentiel nul à l'intérieur d'un parallélépipède rectangle de côtés a , b , c et ayant un de ses sommets en O et un autre en M de coordonnées a , b , c . Le potentiel est infini à l'extérieur de la boîte rectangulaire.

1. A quelle équation différentielle obéit la fonction d'onde φ de la particule ?
2. On cherche à résoudre cette équation par des fonctions à variables séparées du type:

$$\varphi(x, y, z) = \varphi(x)\varphi(y)\varphi(z)$$

Montrer que l'équation différentielle se scinde en trois équations suivantes:

$$\frac{d^2\varphi(x)}{dx^2} + k_x^2\varphi(x) = 0; \quad \frac{d^2\varphi(y)}{dy^2} + k_y^2\varphi(y) = 0; \quad \frac{d^2\varphi(z)}{dz^2} + k_z^2\varphi(z) = 0$$

avec $k_x^2 + k_y^2 + k_z^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$

3. Après avoir intégré ces équations différentielles, montrer que les conditions aux limites sur les parois de la cavité imposent des solutions du type:

$$\varphi(x) = A \sin\left(\frac{n_x\pi}{a} x\right); \quad \varphi(y) = B \sin\left(\frac{n_y\pi}{b} y\right); \quad \varphi(z) = C \sin\left(\frac{n_z\pi}{c} z\right)$$

Dans lesquelles les nombres quantiques n_x , n_y , n_z sont des entiers positifs ou nuls.

En déduire l'expression complète de la fonction d'onde résultante.

4. Exprimer les valeurs quantifiées de l'énergie totale E en fonction de (n_x, n_y, n_z) et des dimensions de la cavité.

5. Dans l'hypothèse où la cavité est cubique ($a = b = c = L$), déterminer:

- toutes les fonctions d'onde pour les 3 premiers niveaux d'énergie,
- l'expression de l'énergie pour chaque niveau,
- la dégénérescence de chaque niveau (négliger l'existence du spin dans cette énumération).

Travaux dirigés
Série n°: 6

Exercice 1 : Conduction électrique d'un métal

1. Considérons un conducteur cylindrique de section droite S , parcouru par un courant continu d'intensité I . On supposera que les porteurs ont une charge électrique q , que leur concentration est n , et qu'ils se déplacent avec une vitesse constante \vec{v} le long du conducteur. Déterminer l'expression de la densité de courant \vec{j} .

2. Au cours de leurs mouvements sous l'action du champ électrique \vec{E} , les porteurs de charge subissent des chocs de la part des ions (supposés fixes) du conducteur. Ces chocs sont équivalents à une force de frottement visqueux \vec{f} d'expression: $\vec{f} = -m\vec{v}/\tau$, où τ le temps de relaxation (durée moyenne entre deux chocs consécutifs).

a) Ecrire le principe fondamental de la dynamique puis en déduire l'équation différentielle que satisfait la vitesse \vec{v} des électrons.

b) Montrer que ce modèle de conduction permet de retrouver la loi d'Ohm en régime permanent. Exprimer la conductivité électrique σ du métal et la mobilité μ des porteurs de charge en fonction de q , m , n et τ .

3. Le cuivre de conductivité électrique $\sigma = 5,88 \cdot 10^5 \text{ (ohm-cm)}^{-1}$ cristallise dans une structure cubique à faces centrées de paramètre de réseau $a = 3,61 \text{ \AA}$. On admettra que chaque atome de ce métal libère un seul électron libre. Déterminer la concentration n en électrons libres du cuivre puis évaluer le temps de relaxation τ entre collisions.

Exercice 2 : Quelques propriétés physiques du lithium

Le lithium (Li), de masse atomique 7 et de masse volumique 546 kg.m^{-3} , est un métal qui cristallise dans le système cubique de paramètre de réseau $a = 3,48 \text{ \AA}$. Les électrons de valence de ce métal (un par atome) se comportent comme des électrons libres.

1. Indiquer la nature du réseau de Bravais du lithium puis calculer sa concentration n en électrons libres.

2. Préciser la forme de sa surface de Fermi et l'expression littérale puis la valeur numérique de sa dimension caractéristique k_F (vecteur d'onde de Fermi).

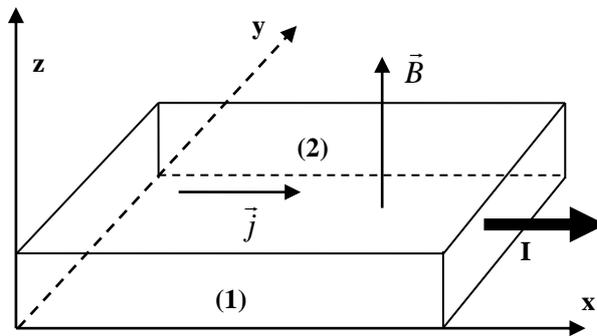
3. Calculer l'énergie de Fermi du lithium E_F , sa température de Fermi T_F et la vitesse v_F des électrons libres les plus rapides.

4. Sachant que la résistivité ρ du lithium est de l'ordre de 10^{-5} ohm.cm à la température ambiante, donner à cette température la valeur du temps de relaxation « τ » des électrons de conduction et le libre parcours moyen l de ces électrons.

5. Evaluer la vitesse d'entraînement « v_e » que les électrons de conduction prennent sous l'action d'un champ électrique de 1 volt/m et la comparer avec la vitesse de Fermi.
6. Après avoir rappeler la loi de Widemann-Franz (loi qui relie la conductivité thermique K et la conductivité électrique σ), évaluer K du lithium à la température ambiante.

Exercice 3 : Effet Hall

On considère une plaquette conductrice parallélépipédique de section rectangulaire de largeur a , de très faible épaisseur b ($b \ll a$) et de très grande longueur. Les porteurs de charge q ($q < 0$) de ce conducteur ont une densité volumique n et une vitesse moyenne d'entraînement \vec{v} en régime permanent. La plaquette est parcourue par un courant constant I de densité uniforme $\vec{j} = nq\vec{v}$, et elle est placée perpendiculairement à un champ magnétique constant et uniforme $\vec{B} = B\vec{e}_z$.



1. Montrer qualitativement que, sous l'effet de la force de Laplace à laquelle sont soumis les porteurs de charge, il apparaît, entre les faces (1) et (2) du conducteur, un champ électrique transverse parallèle à la direction \vec{e}_y . Préciser le sens de ce champ.
2. Montrer qu'après un régime transitoire, les porteurs de charges sont soumis à l'action du champ magnétique \vec{B} et d'un champ électrique uniforme \vec{E}_H (champ de Hall) dont les effets se compensent. Etablir que ce champ \vec{E}_H s'écrit: $\vec{E}_H = -R_H \vec{j} \wedge \vec{B}$ où l'on exprimera la valeur de la constante (ou coefficient) de Hall, R_H , en fonction de la concentration n et de la charge q .
3. Déterminer la différence de potentielle de Hall $U_H = V_2 - V_1$, apparaissant entre les faces (1) et (2) de la plaquette. Exprimer U_H en fonction de B , I , b , q et n .
4. On considère un ruban de cuivre de 10 cm de longueur, de largeur $a = 10$ cm et d'épaisseur $b = 1$ cm parcouru par un courant de 100 A, placé dans un champ $B = 1,75$ T. Le cuivre est de conductivité électrique $\sigma = 5,88 \cdot 10^5$ (ohm-cm) $^{-1}$ et de densité d'électrons libres $n = 8,5 \cdot 10^{28}$ m $^{-3}$. Calculer U_H , E_H et le champ électrique E responsable du courant.

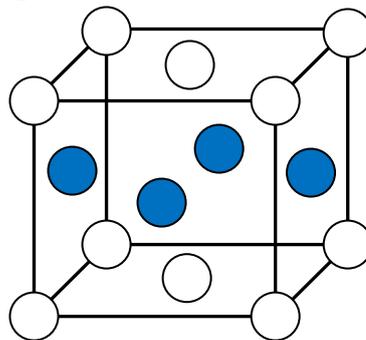
On donne: Masse d'un électron $m = 9,1 \cdot 10^{-31}$ kg ; Charge d'un électron: $-e = -1,6 \cdot 10^{-19}$ C ; Nombre d'Avogadro $N_A = 6,02 \cdot 10^{23}$ mol $^{-1}$; Constante de Boltzmann $k_B = 1,38 \cdot 10^{-23}$ J.K $^{-1}$; Constante de Planck $h = 6,6262 \cdot 10^{-34}$ J.s.

Examen, Session Ordinaire (Durée: 1h 30 min)
 Module 30: Physique des Matériaux I

Exercice 1: Structure de l'alliage Pt-Co

L'alliage platine-cobalt (*Pt-Co*), comprenant 50% d'atomes de platine et 50% d'atomes de cobalt, peut exister à la température ambiante sous une forme tétragonale (ou quadratique) ordonnée stable. Les atomes du platine occupent les sommets et les centres de face normales à Oz , alors que les atomes du cobalt occupent les centres des faces normales à Ox et les centres des faces normales à Oy (voir figure). Les caractéristiques de la maille du composé *Pt-Co* sont:

$$\begin{cases} a = b, c = \delta a \text{ avec } \delta < 1 \\ \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ \end{cases}$$



1. Dans le cas d'un réseau tétragonal simple, déterminer les vecteurs $(\vec{A}, \vec{B}, \vec{C})$ du réseau réciproque puis en déduire la distance inter-réticulaire d_{hkl} entre deux plans consécutifs de la famille (hkl) .
2. En assimilant les atomes de l'alliage *Pt-Co* à des sphères dures, exprimer les rayons atomiques du platine r_{Pt} et du cobalt r_{Co} en fonction de « a » et δ . En déduire l'expression de la compacité C de cet alliage en fonction de δ .
3. Déterminer le facteur de structure F_{hkl} des réflexions possibles du système *Pt-Co* en fonction des facteurs de diffusion atomique f_{Pt} et f_{Co} . Montrer que F_{hkl} peut prendre deux expressions différentes (forte et faible intensité) suivant la parité des entiers h, k et l .
4. Enumérer les sept premières raies permises non équivalentes (angle de Bragg croissant) de l'alliage *Pt-Co*. Présenter les résultats sous forme d'un tableau:

N° de la raie	1	2	3	4	5	6	7
$(h \ k \ l)$							
F_{hkl}							

Exercice 2: Cohésion dans un métal

Dans un cristal métallique, l'énergie potentielle d'interaction d'un atome avec ses premiers proches voisins peut s'écrire sous la forme:

$$\begin{aligned}u(r) &= u_1(r) + u_2(r) \\ &= zAe^{-pr} - \sqrt{z}Be^{-qr}\end{aligned}$$

où z représente le nombre de premiers voisins (ou coordinence) et les paramètres (A, B, p, q) sont des constantes positives.

Dans cette expression, le premier terme décrit la répulsion due au recouvrement des orbitales électroniques alors que le deuxième terme rend compte de l'attraction interatomique.

1. Tracer sur un même graphe l'allures de chacune des fonctions $u_1(r)$, $u_2(r)$ et $u(r)$.
2. Soit r_0 la distance à l'équilibre entre deux atomes proches voisins. Déterminer l'expression de r_0 en fonction des paramètres z, p, q, A et B .
3. Exprimer, à l'équilibre, le terme de répulsion $u_1(r_0)$ et le terme d'attraction $u_2(r_0)$ en fonction de l'énergie de cohésion par atome $E_C = u(r_0)$. En déduire la condition que doit satisfaire le rapport p/q pour que les atomes du métal se lient.
4. En tenant compte de l'expression de r_0 , montrer que E_C peut prendre la forme:

$$E_C = Cz^\alpha$$

Donner les expressions de la constante C et l'exposant α .

5. Le module de compression B d'un matériau cristallin à l'équilibre obéit à la relation:

$$B = V \left. \frac{d^2U}{dV^2} \right]_{r=r_0}$$

où U l'énergie potentielle totale du cristal et V son volume. On suppose que V peut s'écrire: $V = N\lambda r^3$, où λ est une constante qui dépend de la structure du cristal.

- a) Montrer que le module de compression B peut prendre la forme:

$$B = -\frac{pq}{9\lambda r_0} E_C$$

- b) En déduire l'expression de B dans le cas de la structure cubique à faces centrées.

Examen, Session de Rattrapage (Durée: 1h 30 min)
Module 30: Physique des Matériaux I

Exercice 1: Structure de l'alliage Pd-Cu₃

L'alliage palladium-cuivre (Pd-Cu₃), comprenant 25% d'atomes de palladium et 75% d'atomes de cuivre, cristallise sous une forme cubique ordonnée stable. Les atomes de palladium occupent les sommets alors que les atomes de cuivre occupent les centres des faces. Soient $(\vec{a}, \vec{b}, \vec{c})$ les vecteurs de base de la maille cubique du composé Pd-Cu₃ et « a » son paramètre de réseau.

1. Dessiner la maille de ce composé puis préciser la nature de son réseau de Bravais ainsi que les coordonnées de son motif.
2. Les atomes du composé Pd-Cu₃ sont assimilés à des sphères dures et on pose $\delta = r_{Pd}/r_{Cu}$, où r_{Pd} et r_{Cu} sont les rayons atomiques du palladium et du cuivre. Déterminer l'expression de la compacité C de cet alliage en fonction de δ puis calculer sa valeur numérique en prenant $\delta=1,075$.
3. Déterminer les vecteurs $(\vec{A}, \vec{B}, \vec{C})$ du réseau réciproque ainsi que le volume engendré par ces vecteurs. En déduire l'expression de la distance inter-réticulaire d_{hkl} entre deux plans consécutifs de la famille (hkl).
4. Exprimer le facteur de structure F_{hkl} du système Pd-Cu₃ en fonction des facteurs de diffusion atomique f_{Pd} et f_{Cu} . Discuter les conditions d'obtention de raies permises et montrer que F_{hkl} peut prendre deux expressions suivant la parité des entiers h, k et l.
5. Enumérer les sept premières réflexions permises non équivalentes (angle de Bragg croissant) de l'alliage Pd-Cu₃. Présenter les résultats sous forme d'un tableau:

N° de la raie	1	2	3	4	5	6	7
(h k l)							
F_{hkl}							

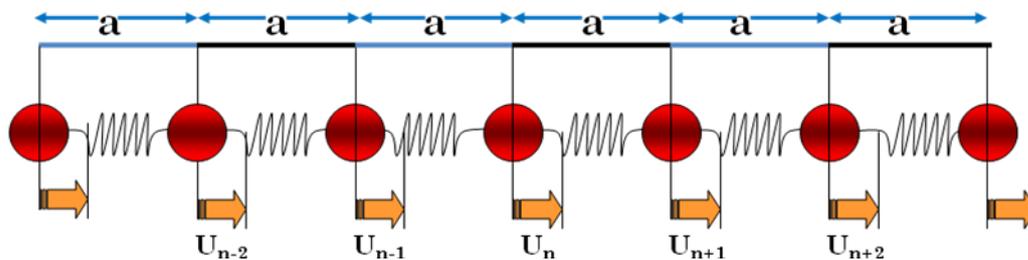
6. En envoyant un rayonnement X de longueur d'onde $\lambda = 1,5 \text{ \AA}$ sur le système Pd-Cu₃, la mesure donne un angle de diffusion $2\theta = 23^\circ$ pour la première raie. Calculer, en utilisant la loi de Bragg-Laüé, le paramètre de maille a du système Pd-Cu₃. En déduire les rayons atomiques r_{Pd} et r_{Cu} .

Exercice 2: Vibrations d'une chaîne monoatomique

On considère une chaîne atomique composée d'atomes identiques de masse m et de paramètre de réseau « a ». Sous l'action de la température, les atomes de cette chaîne s'agitent et subissent des déplacements par rapport à leurs positions d'équilibre. Soit u_n le déplacement du n -ième atome par rapport à sa position d'équilibre. La force de rappel F_n exercée sur l'atome n , par tous les autres atomes, prend la forme:

$$F_n = \sum_{p \neq n} C_p (u_{n+p} - u_n)$$

où C_p est la constante de rappel entre l'atome n et l'atome $(n + p)$.



1. En se limitant aux interactions entre un atome et ses plus proches voisins caractérisées par la constante de rappel C , établir l'équation du mouvement de l'atome n .
2. On cherche des solutions en forme d'ondes planes d'amplitude u_0 et de vecteur d'onde K :

$$u_n = u_0 e^{i(x_n K - \omega t)}$$

où $x_n = na$ est la position d'équilibre de l'atome n .

Déterminer la relation de dispersion $\omega = f(K)$ des vibrations de la chaîne atomique.

3. Tracer l'allure graphique de $\omega = f(K)$ dans la première zone de Brillouin $\left[\frac{-\pi}{a}, \frac{\pi}{a} \right]$.

4. La vitesse du groupe (ou vitesse du paquet d'ondes) est définie par:

$$v_g = \frac{d\omega}{dK}$$

Etablir l'expression de v_g puis tracer son allure dans la première zone de Brillouin. En déduire la vitesse de son.

Examen, Session Ordinaire (Durée: 1h 30 min)
 Module 30: Physique des Matériaux I

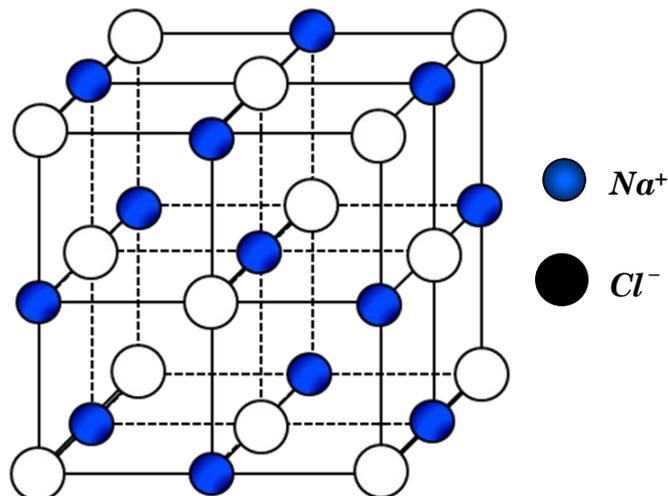
Questions de cours (4 points)

1. Définir le réseau réciproque et donner les relations entre ses vecteurs de base $(\vec{A}, \vec{B}, \vec{C})$ et les vecteurs de base du réseau direct $(\vec{a}, \vec{b}, \vec{c})$.
2. Etablir, en utilisant un schéma explicatif, la loi de diffraction de Bragg.
3. Définir une liaison de type métallique et donner ses principales propriétés.

Exercice 1 (8 points)

La figure ci-dessous présente la structure de chlorure de sodium ($NaCl$), comprenant 50% d'ions Cl^- et 50% d'ions Na^+ . Ce système cristallise dans un réseau cubique à faces centrées de paramètre $a = 5,64 \text{ \AA}$ avec un motif composé d'un ion Cl^- en $(0, 0, 0)$ et d'un ion Na^+ en $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$.

Figure 1: Structure $NaCl$



1. Etant donné que les masses molaires du sodium et du chlore sont $M_{Na} = 23 \text{ g/mol}$ et $M_{Cl} = 35,5 \text{ g/mol}$, calculer la masse volumique ρ du cristal $NaCl$. On rappelle que le nombre d'Avogadro est $N^{\circ} = 6,02 \cdot 10^{23}$.
2. Exprimer le facteur de structure $F(h, k, l)$ de $NaCl$ en fonction des facteurs de diffusion atomique f_{Na} et f_{Cl} . Montrer que $F(h, k, l)$ peut s'écrire sous la forme:

$$F(h, k, l) = F_r(h, k, l) \cdot F_m(h, k, l, f_{Na}, f_{Cl})$$

où $F_r(h, k, l)$ une fonction associée au réseau de Bravais et $F_m(h, k, l, f_{Na}, f_{Cl})$ une fonction associée au motif de la structure $NaCl$.

3. Quelles sont les conditions que doivent satisfaire h , k et l pour avoir des raies de diffraction sur l'écran? Montrer que $F(h, k, l)$ peut prendre deux expressions différentes (forte ou faible intensité) suivant la parité des entiers h , k et l .

4. Enumérer les sept premières raies permises non équivalentes (angle de Bragg croissant) du système $NaCl$. Présenter les résultats sous forme d'un tableau:

N° de la raie	1	2	3	4	5	6	7
$(h k l)$							
$F(h, k, l)$							

Exercice 2 (8 points)

En 1907, Einstein propose un modèle théorique permettant de déterminer la capacité calorifique d'un solide cristallin due aux vibrations atomiques à une température T . Dans ce modèle, on assimile les N atomes du cristal à des oscillateurs harmoniques quantiques. L'énergie d'un oscillateur à une dimension a pour expression:

$$\varepsilon_n = (n + 1/2)h\omega$$

où n est nombre entier positif ou nul ($n = 0, 1, 2, \dots$), h la constante de Planck réduite et ω la pulsation de l'oscillateur harmonique.

1 Avant d'entamer l'étude du modèle d'Einstein, rappeler la définition de la capacité calorifique puis donner son comportement (d'un point de vue expérimental) à haute et à basse température.

2 Montrer que l'énergie totale U (énergie interne) des N oscillateurs à 3 dimensions peut s'écrire:

$$U = 3Nh\omega \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{\exp(\beta h\omega) - 1} \right)$$

3. Etablir l'expression de la capacité calorifique à volume constant C_V du cristal. En posant $\theta_E = h\omega/k_B$ (appelée température d'Einstein), donner la nouvelle expression de C_V .

4. Tracer l'allure de C_V en fonction de la température.

5. Déterminer la loi de variation de C_V à haute température ($T \gg \theta_E$) et sa loi de variation à basse température ($T = \theta_E$). Comparer ces résultats aux résultats expérimentaux. Comment peut-on expliquer la discordance entre le modèle d'Einstein et l'expérience à basse température ?

Examen, Session de Rattrapage (Durée: 1h 30 min)
 Module 30: Physique des Matériaux I

Exercice 1

L'arséniure de gallium est un composé de formule brute $GaAs$ appartenant à la famille des semiconducteurs III-V. Les atomes de gallium occupent les sites de la maille cubique à faces centrées et les atomes d'arsenic occupent quant à eux 4 des 8 sites tétraédriques de cette maille (figure 1). Le paramètre de réseau du cristal $GaAs$ est $a = 5,65 \text{ \AA}$.

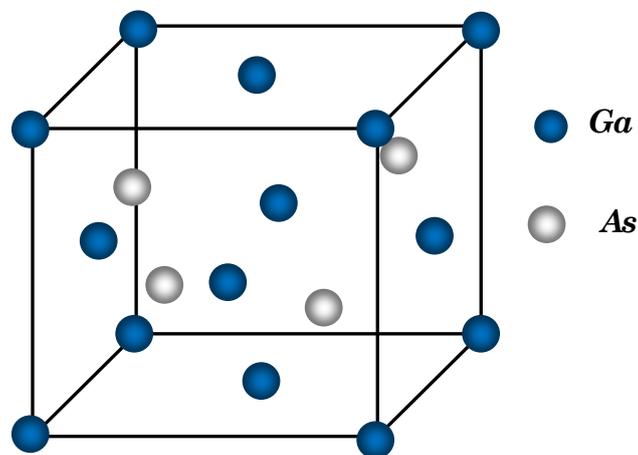


Figure 1: Structure cristalline du composé GaAs

1. Etant donné que les masses molaires du gallium et de l'arsenic ont pour valeurs $M_{Ga} = 69,72 \text{ g.mol}^{-1}$ et $M_{As} = 74,92 \text{ g.mol}^{-1}$, déterminer la masse volumique ρ de $GaAs$. Le nombre d'Avogadro étant $\mathcal{N} = 6,02.10^{23}$.

2. Exprimer le facteur de structure $F(h, k, l)$ de ce cristal en fonction des facteurs de diffusion atomique f_{Ga} et f_{As} . Montrer que $F(h, k, l)$ peut s'écrire sous la forme:

$$F(h, k, l) = F_r(h, k, l) F_m(h, k, l, f_{Ga}, f_{As})$$

où $F_r(h, k, l)$ une fonction associée au réseau de Bravais et $F_m(h, k, l, f_{Ga}, f_{As})$ une fonction associée au motif du composé $GaAs$.

3. Donner les conditions que doivent satisfaire les indices h, k et l pour que la diffraction soit satisfaite. Enumérer les sept premières raies permises non équivalentes (angle de Bragg croissant) du système $GaAs$. Présenter les résultats sous forme d'un tableau:

N° de la raie	1	2	3	4	5	6	7
$(h \ k \ l)$							
$F(h, k, l)$							

4. En envoyant un rayonnement X de longueur d'onde $\lambda = 1,5 \text{ \AA}$ sur un échantillon de GaAs, déterminer l'angle de diffraction θ pour les 7 premières raies. Présenter les résultats sous forme d'un tableau :

N° de la raie	1	2	3	4	5	6	7
$(h \ k \ l)$							
$\sin \theta$							
θ (degré)							

Exercice 2

On considère une chaîne linéaire constituée de $2N$ ions équidistants de r et de charges alternativement égales à $\pm q$ (figure 2). L'énergie totale d'interactions $U(r)$ des $2N$ ions d'un cristal ionique peut s'écrire sous la forme:

$$U(r) = U_1(r) + U_2(r) = N \left[z \frac{A}{r^p} - \alpha \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right]$$

où z le nombre de premiers voisins, A et p des constantes positives, α la constante de Madelung.

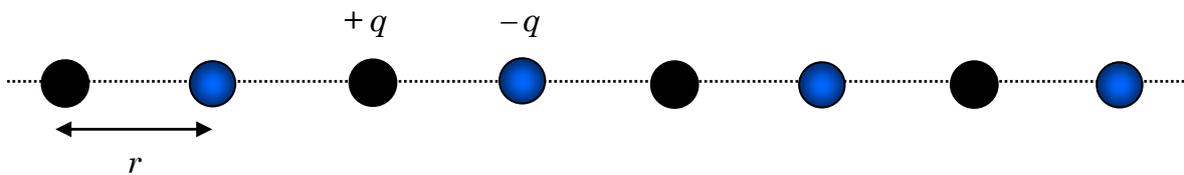


Figure 2: Cristal ionique linéaire

1. Rappeler la définition d'une liaison ionique puis préciser la nature physique de chacun des deux termes d'interactions $U_1(r)$ et $U_2(r)$. Tracer sur un même graphe les allures des fonctions $U_1(r)$, $U_2(r)$ et $U(r)$.

2. Montrer que la constante de Madelung α de la chaîne linéaire peut s'écrire: $\alpha = 2\ln 2$.

On pourra utiliser le développement suivant: $\ln(1+x) \approx \sum_{n \geq 1} (-1)^{n-1} \frac{x^n}{n}$.

3. On désigne par r_0 la distance à l'équilibre entre deux ions voisins. Etablir l'expression littérale de r_0 en fonction des paramètres du cristal.

4. Déterminer l'expression de l'énergie de cohésion (ou énergie totale à l'équilibre) de la chaîne ionique. Quelle est la condition que doit satisfaire le paramètre p pour que les $2N$ ions de la chaîne se lient ?

Examen, Session Ordinaire (Durée: 1h 30 min)
Module 30: Physique des Matériaux I

Exercice 1

Le cuivre (de symbole Cu) est un métal de transition qui cristallise dans la structure cubique à faces centrées (figure 1). Si on remplace les atomes de cuivre des huit sommets du cube par des atomes d'or (de symbole Au), on obtient le composé $AuCu_3$ (figure 2). Soient f_{Cu} et f_{Au} les facteurs de diffusion atomique de Cu et Au respectivement.

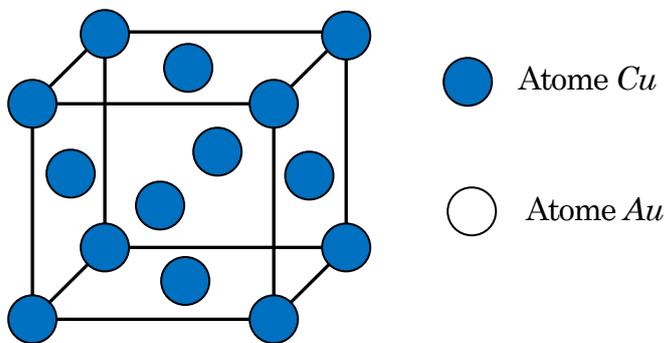


Figure 1 : Cristal de Cu

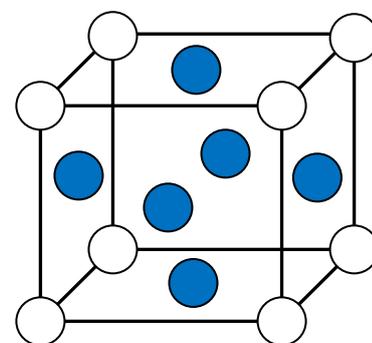


Figure 2 : Alliage $AuCu_3$

- Déterminer le facteur de structure $F_{hkl}(Cu)$ du cuivre. Donner les conditions que doivent satisfaire les entiers h , k et l pour avoir des raies permises. Enumérer les six premières raies permises non équivalentes (angle de Bragg croissant).
- Déterminer le facteur de structure $F_{hkl}(AuCu_3)$ du système $AuCu_3$. Mettre ce facteur sous la forme:

$$F_{hkl}(AuCu_3) = F_{hkl}(Cu) + \Delta$$

Donner l'expression du terme Δ .

- Discuter les conditions d'obtention de raies permises et montrer que $F_{hkl}(AuCu_3)$ peut prendre deux expressions différentes suivant la parité des entiers h , k et l .
- Donner les six premières réflexions permises non équivalentes du système $AuCu_3$. Présenter les résultats sous forme d'un tableau:

N° de la raie	1	2	3	4	5	6
$(h \ k \ l)$						
$F_{hkl}(AuCu_3)$						

5. En envoyant un rayonnement X de longueur d'onde $\lambda = 1,54 \text{ \AA}$ sur le système $AuCu_3$, la mesure donne un angle de diffusion $2\theta = 23^\circ$ pour la première raie. Calculer, en utilisant la loi de Bragg-Laüé, le paramètre de maille a du système $AuCu_3$.

Exercice 2

Le chlorure de sodium $NaCl$ cristallise dans un réseau cubique à faces centrées (voir figure 3). Ce cristal contient N molécules, soit $2N$ ions: N ions Na^+ (charge $+e$) et N ions Cl^- (charge $-e$). En notant r la distance entre premiers voisins, l'énergie totale d'interactions $U(r)$ des N molécules du cristal $NaCl$ peut être mise sous la forme:

$$U(r) = U_1(r) + U_2(r) = N \left[z \lambda e^{-r/\rho} - \alpha \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right]$$

z le nombre de premiers voisins, λ et ρ des constantes positives, α la constante de Madelung.

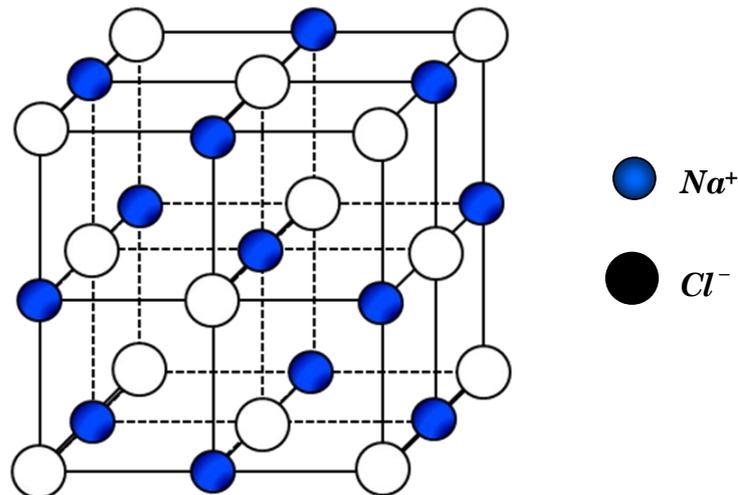


Figure 3: Structure du chlorure de sodium, $NaCl$

1. Décrire brièvement l'origine énergétique des deux termes $U_1(r)$ et $U_2(r)$. Tracer sur un même graphe les allures des fonctions $U_1(r)$, $U_2(r)$ et $U(r)$.

2. Soit r_0 la distance à l'équilibre entre deux ions voisins Na^+ et Cl^- . Etablir la relation à partir de laquelle on peut calculer r_0 en fonction des données du système.

3. Déterminer l'expression de l'énergie de cohésion à l'équilibre $U(r_0)$. En déduire la condition que doit satisfaire le rapport $\frac{r_0}{\rho}$ pour que les ions Na^+ et Cl^- se lient.

4. Le module de compression B à l'équilibre obéit à la relation: $B = V \left. \frac{d^2U}{dV^2} \right]_{r=r_0}$ où V

est le volume total du cristal.

a) Exprimer V en fonction de r et N puis calculer $\frac{dV}{dr}$.

b) Déterminer l'expression du module de compression B .

Examen, Session de Rattrapage (Durée: 1h 30 min)
 Module 30: Physique des Matériaux I

Exercice: Crystal de type « diamant »

Le silicium (de symbole Si) cristallise dans la structure de type diamant (figure ci-dessous). Le réseau de Bravais de cette structure est un cubique à faces centrées (cfc) et le motif est composé de deux atomes: l'un en $(0, 0, 0)$ et l'autre en $(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4})$. Soient $(\vec{a}, \vec{b}, \vec{c})$ les vecteurs de base de la maille cubique tels que: $\vec{a} = a\vec{i}$, $\vec{b} = a\vec{j}$, $\vec{c} = a\vec{k}$ où $(\vec{i}, \vec{j}, \vec{k})$ sont les vecteurs unitaires le long des axes (Ox, Oy, Oz) et a le paramètre de maille.

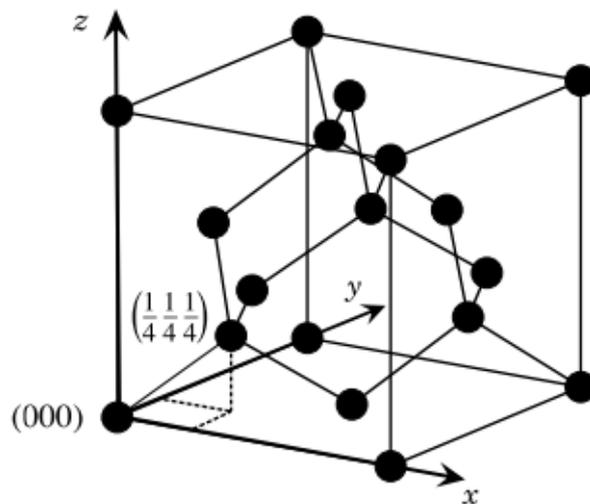


Figure 1 : Structure de type diamant

Partie A

1. En assimilant les atomes à des sphères dures et sachant que les premiers voisins se touchent suivant la grande diagonale, déterminer la compacité C de la structure diamant. Présenter C sous forme de pourcentage (%).
2. Exprimer la masse volumique ρ du silicium en fonction de son paramètre du réseau a , de sa masse molaire M et du nombre d'Avogadro N° . Calculer sa valeur numérique.
3. Déterminer les vecteurs de base $(\vec{a}_0, \vec{b}_0, \vec{c}_0)$ de la maille primitive ainsi que les angles (α, β, γ) entre ces vecteurs. En déduire le volume de cette maille.
4. Déterminer les vecteurs de base du réseau réciproque $(\vec{A}, \vec{B}, \vec{C})$ associés à la maille élémentaire puis en déduire le volume engendré par ces vecteurs.

Partie B

1. Donner les coordonnées des atomes formant la structure diamant et déterminer l'expression du facteur de structure $F(h, k, l)$ de ce cristal.

2. Montrer que $F(h, k, l)$ peut s'écrire sous la forme d'un produit de deux fonctions:

$$F(h, k, l) = F_R(h, k, l) F_M(h, k, l)$$

où $F_R(h, k, l)$ une fonction associée au réseau de Bravais et $F_M(h, k, l)$ une fonction associée au motif de la structure diamant.

Donner les conditions que doivent satisfaire les indices h, k et l pour que la diffraction soit satisfaite.

3. Enumérer les cinq premières raies permises non équivalentes (angle de Bragg croissant) de cette structure. Présenter les résultats sous forme d'un tableau:

N° de la raie	1	2	3	4	5
$(h \ k \ l)$					
$F(h, k, l)$					

4. En envoyant un rayonnement X de longueur d'onde $\lambda = 1,5 \text{ \AA}$ sur un échantillon de silicium, déterminer l'angle de diffraction θ pour les 5 premières réflexions permises. Présenter les résultats sous forme d'un tableau:

N° de la raie	1	2	3	4	5
$(h \ k \ l)$					
$\sin \theta$					
θ (degré)					

Données

Paramètre de réseau du silicium: $a = 5,43 \text{ \AA}$

Masse molaire du silicium: $M = 28,09 \text{ g/mol}$

Nombre d'Avogadro: $N = 6,02 \cdot 10^{23}$

Examen, Session Ordinaire (Durée: 1h 30 min)
Module 30: Physique des Matériaux I

Exercice 1 (8 points)

1. Le platine, de masse atomique $M = 195,08$ g/mol et de masse volumique $\rho = 21,45$ g.cm⁻³, cristallise dans le système cubique de paramètre de réseau $a = 3,92$ Å. On note n le nombre d'atomes par maille et $N_A = 6.02 \cdot 10^{23}$ mol⁻¹ le nombre d'Avogadro.

- Déterminer n puis indiquer la nature du réseau de Bravais (cubique simple, cubique centré ou cubique à faces centrées) du platine.
- En déduire le rayon atomique de cet élément.

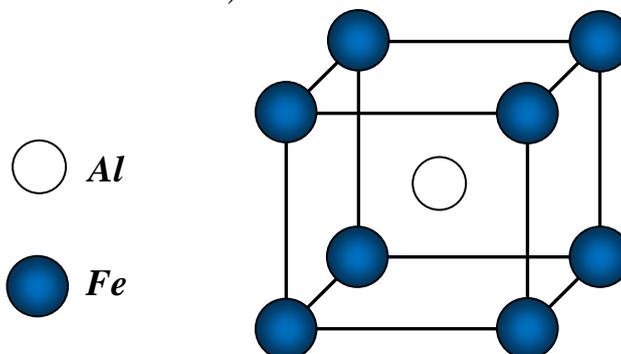
2. Dans un cristal de gaz rare (ou cristal à liaisons de Van der Waals), le potentiel d'interaction entre deux atomes distant de r peut s'écrire sous la forme:

$$u(r) = u_1(r) + u_2(r) = -\frac{A}{r^6} + \frac{B}{r^{12}} ; \text{ où } A \text{ et } B \text{ des constantes positives.}$$

- Décrire brièvement l'origine énergétique pour chacun des termes $u_1(r)$ et $u_2(r)$. Tracer sur un même graphe les allures des fonctions $u_1(r)$, $u_2(r)$ et $u(r)$.
- Donner les principales propriétés des cristaux de gaz rares.

Exercice 2 (12 points)

L'aluminure de fer $FeAl$ est un alliage métallique composé de 50% de fer et 50% d'aluminium. Il se cristallise dans une structure cubique de type B2 (voir figure ci-dessous). Soient $(\vec{a}, \vec{b}, \vec{c})$ les vecteurs de base portés par les trois axes de la maille cubique tels que: $\|\vec{a}\| = \|\vec{b}\| = \|\vec{c}\| = a$ (paramètre de réseau).



- Préciser la nature du réseau de Bravais ainsi que le motif de cette structure.
- On suppose que les atomes du composé $FeAl$ sont assimilés à des sphères dures et on pose $\delta = r_{Fe}/r_{Al}$, où r_{Fe} et r_{Al} les rayons atomiques du Fer et d'aluminium respectivement.

Déterminer l'expression de la compacité C de cet alliage en fonction de δ puis calculer sa valeur numérique sachant que $\delta = 1,12$.

3. Déterminer les vecteurs de base $(\vec{a}_0, \vec{b}_0, \vec{c}_0)$ de la maille primitive ainsi que les vecteurs de base du réseau réciproque $(\vec{A}, \vec{B}, \vec{C})$ associés à cette maille. En déduire le volume engendré par ces vecteurs.

4. Déterminer le facteur de structure F_{hkl} du système $FeAl$ en fonction des facteurs de diffusion atomique f_{Fe} et f_{Al} . Montrer que F_{hkl} peut prendre deux expressions différentes (une pour les fortes intensités et l'autre pour les faibles intensités).

5. Enumérer les sept premières raies permises non équivalentes (angle de Bragg croissant) de l'alliage $FeAl$. Présenter les résultats sous forme d'un tableau:

N° de la raie	1	2	3	4	5	6	7
$(h\ k\ l)$							
F_{hkl}							

6. Une expérience de diffraction avec un rayonnement X de longueur d'onde $\lambda = 1,5 \text{ \AA}$ sur le système $FeAl$ donne un angle de diffusion $2\theta = 40^\circ$ pour la première raie de forte intensité. Calculer, en utilisant la loi de Bragg-Laüé, le paramètre de maille a de l'alliage $FeAl$ puis en déduire les rayons atomiques r_{Fe} et r_{Al} .

Examen, Session de Rattrapage (Durée: 1h 30 min)
Module 30: Physique des Matériaux I

Questions diverses

1. On considère l'équation suivante:

$$hx + ky + lz = m$$

- Que représente cette équation ?
 - Déterminer les indices de Miller et le numéro d'ordre du plan contenant les nœuds $(0, 1/2, 1/2)$, $(1, 0, 1)$ et $(3/2, 1/2, 0)$.
2. Représenter, sur une maille cubique, chacun des plans suivants: $(0\ 1\ 0)$, $(0\ 0\ 2)$, $(1\ 0\ 1)$ et $(1\ 1\ 1)$.
3. Etablir, en utilisant un schéma explicatif, la loi de diffraction de Bragg.
4. Dans le cadre d'une liaison ionique et en notant r la distance entre premiers voisins, l'énergie potentielle d'interactions $u(r)$ par molécule peut s'écrire :

$$u(r) = u_1(r) + u_2(r) = z \lambda e^{-r/\rho} - \alpha \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

- Décrire brièvement l'origine énergétique des deux termes $u_1(r)$ et $u_2(r)$. Tracer sur un même graphe les allures des fonctions $u_1(r)$, $u_2(r)$ et $u(r)$.
- Donner les principales propriétés des cristaux ioniques.

Exercice

Le tungstène (symbole W) est un métal qui cristallise dans le système cubique de paramètre de réseau $a = 3,16 \text{ \AA}$. Sa masse atomique et sa masse volumique sont respectivement $M = 183,84 \text{ g/mol}$ et $\rho = 19,3 \text{ g.cm}^{-3}$. Soient $(\vec{a}, \vec{b}, \vec{c})$ les vecteurs de base de la maille conventionnelle de ce système.

- Calculer le nombre n d'atomes par maille du tungstène puis indiquer la nature de son réseau de Bravais. Le nombre d'Avogadro étant $N^\circ = 6.02 \cdot 10^{23} \text{ mol}^{-1}$.
- En assimilant les atomes à des sphères dures, déterminer l'expression puis la valeur numérique de la compacité C du tungstène. Présenter C en forme de pourcentage (%).
- Déterminer les vecteurs de base $(\vec{a}_0, \vec{b}_0, \vec{c}_0)$ de la maille primitive ainsi que les angles (α, β, γ) entre ces vecteurs. En déduire le volume de cette maille.
- Déterminer les vecteurs de base du réseau réciproque $(\vec{A}, \vec{B}, \vec{C})$ associés à la maille élémentaire puis en déduire le volume engendré par ces vecteurs.

5. Exprimer le facteur de structure F_{hkl} en fonction des indices de Miller (h,k,l) et du facteur de diffusion atomique f du tungstène. Donner les conditions que doivent satisfaire (h,k,l) pour avoir des taches de diffraction.

6. Présenter sous forme d'un tableau, les sept premières raies permises non équivalentes (angle de Bragg croissant) de ce système.

N° de la raie	1	2	3	4	5	6	7
$(h\ k\ l)$							
F_{hkl}							

Examen, Session Ordinaire (Durée: 1h 30 min)
 Module 30: Physique des Matériaux I

Exercice 1 (10 points)

Le sulfure de zinc ZnS est un composé qui cristallise dans un système cubique et la structure est connue sous le nom « *blende* ». Cette structure est la même que celle du diamant, mais composés de deux types d'atomes différents: le zinc (Zn) et le soufre (S). On désigne par $(\vec{a}, \vec{b}, \vec{c})$ les vecteurs de base de la maille conventionnelle du composé ZnS et « a » son paramètre de réseau.

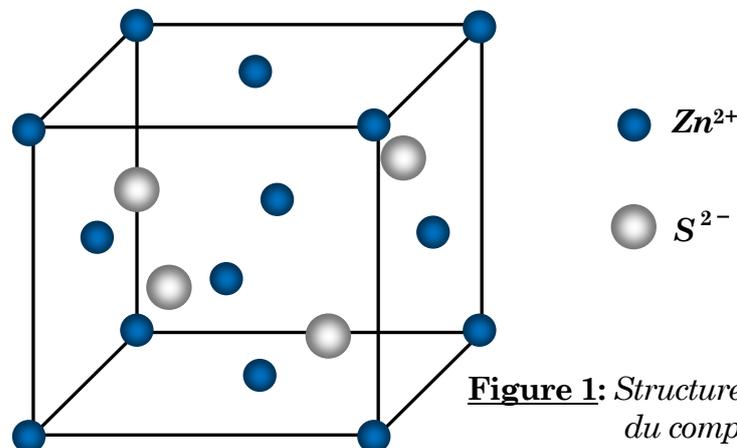


Figure 1: Structure cristalline du composé ZnS

1. Préciser la nature du réseau de Bravais ainsi que le motif du cristal ZnS .
2. Déterminer le nombre de premiers voisins Z (coordination), tout en précisant leurs coordonnées et leur nature chimique, pour:
 - i) un ion Zn^{2+} ayant pour coordonnées $(0, 0, 0)$.
 - ii) un ion S^{2-} ayant pour coordonnées $(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4})$.
3. Les atomes sont assimilés à des sphères dures tels que les rayons ioniques de Zn^{2+} et S^{2-} ont pour valeurs $r_{Zn^{2+}} = 0,74 \text{ \AA}$ et $r_{S^{2-}} = 1,84 \text{ \AA}$. Estimer la valeur du paramètre de réseau « a » puis calculer la compacité C de la structure ZnS (Présenter C en %).
4. Calculer la masse volumique ρ du composé ZnS , sachant que les masses molaires du zinc et du soufre sont $M_{Zn} = 65,37 \text{ g.mol}^{-1}$ et $M_S = 32,06 \text{ g.mol}^{-1}$. Le nombre d'Avogadro étant $\mathcal{N} = 6,02.10^{23}$.
5. Déterminer les vecteurs de base $(\vec{a}_0, \vec{b}_0, \vec{c}_0)$ de la maille primitive ainsi que les angles (α, β, γ) entre ces vecteurs. En déduire le volume de cette maille.
6. Déterminer les vecteurs de base du réseau réciproque $(\vec{A}, \vec{B}, \vec{C})$ associés à la maille élémentaire de la structure ZnS . En déduire le volume engendré par ces vecteurs.

Exercice 2 (10 points)

On considère un système cristallin composé de N atomes et dont la cohésion est assurée par des liaisons de type Van der Waals. Le potentiel d'interaction entre deux atomes distants de r_{ij} peut se mettre sous la forme:

$$u(r_{ij}) = -\frac{A}{r_{ij}^n} + \frac{B}{r_{ij}^p}$$

où (A, B) des constantes positives caractéristiques de chaque cristal et (n, p) des entiers positifs.

1. Rappeler l'origine de chacun des deux termes contenus dans le potentiel d'interaction puis donner les principales propriétés des cristaux de Van der Waals.
2. En désignant par r la distance entre proches voisins, déterminer l'expression de l'énergie totale d'interaction $U(r)$ des N atomes de ce cristal. On limitera la sommation au Z premiers voisins.
3. Etablir la relation à partir de laquelle on peut calculer la distance d'équilibre r_0 en fonction des données du système.
4. Montrer que l'énergie de cohésion $U(r_0)$ du cristal peut se mettre sous la forme:

$$U(r_0) = \frac{C}{r_0^n}$$

Donner l'expression de la constante C puis en déduire la condition qui permet de satisfaire la cohésion du cristal.

5. On suppose par la suite que le système cristallise dans une structure cubique à faces centrées avec $n = 6$ et $p = 12$. A l'équilibre, le module de compression B d'un solide cristallin peut être obtenu à partir de la relation:

$$B = V \left. \frac{d^2U}{dV^2} \right]_{r=r_0} \quad \text{où } V \text{ le volume total du cristal.}$$

- a) Exprimer V en fonction de r et N puis calculer $\frac{dV}{dr}$.
- b) Déterminer l'expression de B .

Examen, Session de Rattrapage (Durée: 1h 30 min)
Module 30: Physique des Matériaux I

Exercice 1

L'aluminium (symbole Al) est un métal qui cristallise dans le système cubique de paramètre de réseau $a = 4,05 \text{ \AA}$. Sa masse atomique et sa masse volumique sont respectivement $M = 27 \text{ g/mol}$ et $\rho = 2,7 \text{ g.cm}^{-3}$. On désigne par $(\vec{a}, \vec{b}, \vec{c})$ les vecteurs de base de la maille conventionnelle de ce système.

- Déterminer la nature du réseau de Bravais de l'aluminium puis dessiner sa maille conventionnelle. Le nombre d'Avogadro étant $N^\circ = 6.02 \cdot 10^{23} \text{ mol}^{-1}$.
- Donner les coordonnées des premiers et des seconds voisins autour d'un atome quelconque pris comme origine.
- En utilisant l'approximation selon laquelle les atomes sont assimilés à des sphères dures, déterminer l'expression puis la valeur numérique de la compacité C de l'aluminium. Présenter C en forme de pourcentage (%).
- Déterminer les vecteurs de base $(\vec{a}_0, \vec{b}_0, \vec{c}_0)$ de la maille primitive ainsi que les angles (α, β, γ) entre ces vecteurs. En déduire le volume de cette maille.
- Déterminer les vecteurs de base du réseau réciproque $(\vec{A}, \vec{B}, \vec{C})$ associés à la maille élémentaire puis en déduire le volume engendré par ces vecteurs.

Exercice 2

1. On considère les deux structures cubiques: cubique centré et cubique à faces centrées. Déterminer le facteur de structure F_{hkl} pour chacune de ces structures puis donner les conditions que doivent satisfaire (h, k, l) pour avoir des taches de diffraction. Enumérer dans chaque cas, sous forme d'un tableau, les sept premières raies permises non équivalentes (angle de Bragg croissant).

N° de la raie	1	2	3	4	5	6	7
$(h \ k \ l)$							
F_{hkl}							

2. Au cours d'une expérience utilisant la méthode des poudres, nous avons enregistré les diagrammes de diffraction de deux cristaux cubiques A et B qui cristallisent dans l'une des deux formes suivantes: cubique centré ou cubique à faces centrées. Les mesures des angles

de diffusion 2θ (entre les rayons directement transmis et ceux relatifs aux deux premiers anneaux) donnent les résultats suivants:

Angle de diffraction	Cristal A	Cristal B
$2\theta_1$ (1 ^{er} anneau)	30°	40°
$2\theta_2$ (2 ^{ème} anneau)	43°	46,5°

- a) Rappeler l'objectif d'une expérience de diffraction aux rayons X pour les solides cristallins puis donner une description brève de la méthode des poudres.
- b) Démontrer, en utilisant un schéma explicatif, la loi de diffraction de Bragg. Pourquoi utilise-t-on les rayons X dans l'analyse des structures cristallines ?
- c) En utilisant les résultats obtenus par la méthode des poudres, déterminer la structure cristalline de chaque cristal.
- b) Calculer dans chaque cas le paramètre de maille « a » sachant que la longueur d'onde du rayonnement X utilisé est $\lambda = 1,5 \text{ \AA}$.

Examen, Session Ordinaire (Durée: 1h 30 min)
Module 34: Physique des Matériaux II

Exercice 1: Electrons libres à une dimension

On considère un réseau linéaire de N atomes identiques équidistants de « a ». Les atomes de ce système sont supposés monovalents, c'est-à-dire chaque atome possède un électron dans sa bande de conduction. Ces électrons sont susceptibles de se mouvoir librement le long du réseau.

1. On cherche des fonctions d'onde $\varphi(x)$ des électrons libres, solutions de l'équation de Schrödinger, dans le cas des conditions aux limites périodiques (CLP) de périodicité L . Déterminer l'expression de $\varphi(x)$ ainsi que celle des niveaux d'énergie $E(k)$.
2. En déduire les caractéristiques de Fermi (vecteur d'onde k_F , niveau E_F , température T_F) de ce métal linéaire. Calculer leurs valeurs numériques (pour E_F donner sa valeur en joule puis en électron-volt).
3. Etablir l'expression de la densité d'états électroniques $D(E)$ dans l'espace des énergies. Donner cette expression en fonction de E_F et indiquer l'allure de la courbe correspondante.
4. Retrouver l'expression de E_F à partir de $D(E)$ et en déduire l'énergie moyenne \bar{E} d'un électron de ce métal.
5. Les calculs précédents ont été effectués à l'état fondamental correspondant à $T = 0\text{K}$. Pour une température T non nulle, on doit tenir compte dans les calculs de la distribution de Fermi-Dirac :

$$f(E) = \frac{1}{\exp[(E - \mu)/k_B T] + 1}, \text{ où } \mu \text{ est le potentiel chimique}$$

En partant de la relation permettant de fixer le nombre N d'électrons libres, déterminer l'évolution de μ en fonction de la température T ($T \ll T_F$). On pourra utiliser le développement I donné ci-dessous.

On donne: $a = 3 \text{ \AA}$; $m = 9,1 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$; $k_B = 1,38 \cdot 10^{-23} \text{ J K}^{-1}$; $h = 6,62 \cdot 10^{-34} \text{ J.s}$

$$I = \int_0^\infty \frac{E^\alpha}{e^{\frac{\beta(E-\mu)}{\gamma}} + 1} dE \approx \gamma^{\alpha+1} \left(\frac{1}{\alpha+1} + \frac{\alpha\pi^2}{6\beta^2} \right)$$

Exercice 2: Paramagnétisme des particules de spin $\frac{1}{2}$

On considère un système paramagnétique de n particules (atomes ou ions) par unité de volume, en équilibre avec un thermostat à la température T . Chaque particule possède un moment magnétique $\vec{\mu}$ proportionnel à son moment cinétique \vec{j} : $\vec{\mu} = -g\mu_B\vec{j}$, où g est le facteur de Landé et μ_B le magnéton de Bohr. Sous l'action d'un champ magnétique uniforme \vec{B} dirigé suivant l'axe OZ , chaque particule acquiert une énergie magnétique d'expression: $E_m = mg\mu_B B$, où $m = -j, -j+1, \dots, +j$.

On s'intéresse dans cette étude aux particules de spin un-demi ($j=1/2$ et $g=2$) et on suppose que le système peut être décrit par la statistique de Maxwell-Boltzmann.

1. Rappeler la définition d'un système paramagnétique en précisant son comportement vis-à-vis d'un champ magnétique extérieur.

2. Soit P_m la probabilité pour qu'une particule se trouve au niveau d'énergie E_m . Déterminer les probabilités des deux états d'énergie ($m = -1/2$ et $m = 1/2$) d'une particule.

En déduire les occupations de ces deux états.

3. Etablir l'expression du moment magnétique moyen $\langle \mu \rangle$ d'une particule. En déduire l'aimantation M de l'échantillon.

4. Tracer l'allure de M en fonction de $x = \frac{\mu_B B}{k_B T}$. Que représente la valeur $n\mu_B$?

5. En présence d'un champ magnétique faible (ou à haute température), montrer que la susceptibilité paramagnétique χ de ce système peut s'écrire sous la forme: $\chi \approx \frac{C}{T}$, où C est

la constante de Curie à déterminer.

Examen, Session de Rattrapage (Durée: 1h 30 min)
Module 34: Physique des Matériaux II

Exercice 1

On considère un métal dans lequel les électrons sont susceptibles de se déplacer librement. Les N atomes de ce métal occupent un volume V et sont supposés monovalents (chaque atome possède un seul électron dans sa bande de conduction). On se propose d'étudier ce système en utilisant les conditions aux limites périodiques (de périodicité L_x suivant Ox , L_y suivant Oy , L_z suivant Oz).

1. Soit ψ la fonction d'onde d'un électron libre dont l'énergie cinétique est notée E . On suppose que ψ est une fonction à variables séparées qui peut s'écrire sous la forme:

$$\psi(x, y, z) = \varphi(x)\varphi(y)\varphi(z)$$

Rappeler l'équation différentielle à laquelle obéit la fonction d'onde ψ et montrer que cette équation peut se scinder en trois équations suivantes:

$$\frac{d^2\varphi(x)}{dx^2} + k_x^2\varphi(x) = 0; \quad \frac{d^2\varphi(y)}{dy^2} + k_y^2\varphi(y) = 0; \quad \frac{d^2\varphi(z)}{dz^2} + k_z^2\varphi(z) = 0$$

Donner l'expression de $k_x^2 + k_y^2 + k_z^2$

2. Les solutions des équations précédentes sont des ondes progressives de la forme :

$$\varphi(x) = A \exp(ik_x x); \quad \varphi(y) = B \exp(ik_y y); \quad \varphi(z) = C \exp(ik_z z)$$

Montrer que les conditions aux limites périodiques imposent la quantification du vecteur d'onde \vec{k} et de l'énergie cinétique E de l'électron. Donner leurs expressions en fonction de nombres quantiques tels que (n_x, n_y, n_z) et de (L_x, L_y, L_z) .

En déduire l'expression complète de la fonction d'onde résultante $\psi(x, y, z)$.

3. Dans l'hypothèse où $L_x = L_y = L_z = L$, donner:

- les fonctions d'onde pour les 2 premiers niveaux d'énergie distincts,
- l'expression de l'énergie pour chaque niveau,
- la dégénérescence de chaque niveau (négliger le spin dans cette énumération).

4. Etablir l'expression de la densité d'états électroniques $D(E)$ dans l'espace des énergies. Tracer l'allure de la courbe $D(E)$.

5. Déterminer, à partir de $D(E)$, l'expression du nombre total N d'électrons libres ainsi que celle de l'énergie totale U de ce gaz électronique. Exprimer U en fonction de N et E_F (niveau de Fermi) puis en déduire l'énergie moyenne d'un électron de ce métal.

Exercice 2

On considère un conducteur de n atomes d'argent (Ag) par unité de volume. Les électrons de valence de ce métal (un par atome) se comportent comme des électrons libres.

1. L'argent cristallise dans le système cubique de paramètre de réseau $a = 4,09 \text{ \AA}$. Sa masse atomique est $M = 107,87 \text{ g/mol}$, sa masse volumique est $\rho = 10475 \text{ kg.m}^{-3}$. Indiquer la nature du réseau de Bravais (cubique simple, cubique centré ou cubique à faces centrées) de l'argent puis en déduire sa concentration n .

2. En utilisant la sphère de Fermi, déterminer le vecteur d'onde de Fermi k_F , l'énergie de Fermi E_F , la température de Fermi T_F et la vitesse v_F des électrons les plus rapides. Exprimer ces grandeurs en fonction de n puis calculer leurs valeurs numériques.

3. Sous l'action d'un champ électrique \vec{E} uniforme, les électrons du conducteur se déplacent à une vitesse moyenne \bar{v} et leurs chocs avec le reste du réseau sont équivalents à une force de frottement visqueux $\vec{f} = -\frac{m\bar{v}}{\tau}$ (τ = durée moyenne entre deux chocs). Après avoir écrit le principe fondamental de la dynamique, déterminer l'expression de la vitesse moyenne \bar{v} des électrons.

4. Montrer que ce modèle de conduction permet de retrouver la loi d'Ohm en régime permanent. Exprimer la conductivité électrique σ du métal et la mobilité μ des électrons en fonction de e , m , n et τ .

5. La résistivité électrique de l'argent est égale à $1,6 \cdot 10^{-6} \text{ ohm.cm}$ à la température ambiante. Les électrons de conduction de ce cristal sont supposés soumis à l'action d'un champ électrique de 10 volt/m . Calculer le temps de relaxation τ et la vitesse moyenne \bar{v} de ces électrons.

On donne:

La masse d'un électron: $m = 9,1 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$

La charge d'un électron: $q = -e = -1,6 \cdot 10^{-19} \text{ C}$

Le nombre d'Avogadro: $N_A = 6,02 \cdot 10^{23} \text{ mol}^{-1}$

La constante de Boltzmann: $k_B = 1,38 \cdot 10^{-23} \text{ J K}^{-1}$

La constante de Planck: $h = 6,62 \cdot 10^{-34} \text{ J.s}$

Examen, Session Ordinaire (Durée: 1h 30 min)
Module 34: Physique des Matériaux II

Exercice 1 : Quelques propriétés physiques de l'argent

On considère un échantillon composé de N atomes d'argent de volume V . L'argent de symbole chimique Ag est un métal qui cristallise dans le système cubique de paramètre de réseau $a = 4,09 \text{ \AA}$. Sa masse atomique est $M = 107,87 \text{ g/mol}$, sa masse volumique est $\rho = 10500 \text{ kg.m}^{-3}$. On suppose que les électrons de valence de ce métal (un par atome) se comportent comme des électrons libres.

1. Déterminer la nature du réseau de Bravais (cubique simple, cubique centré ou cubique à faces centrées) de l'argent puis calculer la concentration n d'électrons libres.
2. Préciser la forme de sa surface de Fermi et déterminer l'expression littérale puis la valeur numérique de sa dimension caractéristique k_F (vecteur d'onde de Fermi).
3. Calculer l'énergie de Fermi E_F (en joule puis en électron-volt) de l'argent. En déduire sa température de Fermi T_F . Que représente l'énergie de Fermi ?
4. Etablir l'expression de la densité d'états $D(E)$ des électrons libres puis tracer son allure.
5. La densité d'états électroniques peut se mettre sous la forme: $D(E) = A\sqrt{E}$, où A est une constante. Expliciter A en fonction de N et E_F puis déterminer l'énergie moyenne \bar{E} d'un électron de valence de l'argent.
6. Les valeurs expérimentales de la conductivité électrique et la conductivité thermique de l'argent sont successivement $\sigma = 6,21 \text{ (ohm.cm)}^{-1}$ et $K = 4,29 \text{ W cm}^{-1} \text{ K}^{-1}$ pour $T = 300 \text{ K}$. Calculer le rapport $K/\sigma T$ et le comparer au résultat théorique (loi de Wiedemann-Franz).

Exercice 2: Paramagnétisme des molécules de spin $S = 1$

Une assemblée de molécules O_2 sans interactions entre elles, uniformément répartie avec une densité n (nombre de molécules par unité de volume), est en équilibre thermique avec un thermostat de température absolue T . Chaque molécule possède un moment cinétique \vec{S} et un moment magnétique associé $\vec{\mu}$ d'expression:

$$\vec{\mu} = -g \frac{e}{2m} \vec{S}, \text{ où } g \text{ est le facteur de Landé.}$$

Ce système est placé dans un champ magnétique \vec{B} uniforme porté par l'axe OZ ($\vec{B} = B\vec{e}_z$) et la composante S_z de \vec{S} peut prendre les trois valeurs suivantes: $-\hbar, 0, +\hbar$. Les molécules se répartissent donc sur trois niveaux d'énergie (E_{-1}, E_0, E_{+1}).

On pose $x = g\mu_B B/k_B T$, où k_B la constante de Boltzmann et μ_B le magnéton de Bohr ($\mu_B = e\hbar/2m$).

1. Déterminer la probabilité P_m pour chacun des trois niveaux d'énergie E_m ($m = -1, 0, +1$) de la molécule en fonction de x . En déduire les occupations (nombres de particules) N_m ($m = -1, 0, +1$) de ces 3 niveaux.

2. Montrer que le moment magnétique moyen $\langle \mu_z \rangle$ d'une molécule dans la direction OZ peut s'écrire sous la forme:

$$\langle \mu_z \rangle = A \frac{2shx}{1 + 2chx}$$

Donner l'expression de A .

3. En déduire l'expression de l'aimantation M de l'échantillon puis tracer son allure en fonction de x . Quelle est l'expression de l'aimantation à saturation M_S ?

4. Montrer qu'en champ magnétique faible (ou à haute température), l'aimantation M est proportionnelle au champ appliqué B . En déduire la susceptibilité magnétique χ de ce système sous la forme $\chi \approx C/T$ où C est la constante de Curie à déterminer.

On donne:

Masse d'un électron $m = 9,1 \cdot 10^{-31}$ kg

Charge d'un électron: $e = 1,6 \cdot 10^{-19}$ C

Nombre d'Avogadro $N_A = 6,02 \cdot 10^{23}$ mol⁻¹

Constante de Boltzmann $k_B = 1,38 \cdot 10^{-23}$ J K⁻¹

Constante de Planck $h = 6,62 \cdot 10^{-34}$ J.s

Examen, Session de Rattrapage (Durée: 1h 30 min)
Module 34: Physique des Matériaux II

Exercice 1

On considère un cristal de forme rectangulaire de côtés (L_x, L_y) sur lequel les électrons sont susceptibles de se déplacer librement. Soit ψ la fonction d'onde d'un électron libre dont l'énergie cinétique est notée E . On suppose que ψ est une fonction à variables séparées qui peut se mettre sous la forme:

$$\psi(x, y) = \varphi(x)\varphi(y)$$

1. Rappeler l'équation différentielle à laquelle obéit la fonction d'onde ψ et montrer que cette équation peut se scinder en deux équations: une pour $\varphi(x)$ et l'autre pour $\varphi(y)$.
2. Les solutions des équations précédentes sont des fonctions sinusoidales de formes:

$$\varphi(x) = A \sin(k_x x) + B \cos(k_x x); \quad \varphi(y) = C \sin(k_y y) + D \cos(k_y y)$$

Montrer que les conditions aux limites fixes imposent la quantification du vecteur d'onde \vec{k} . Donner les expressions de ses composantes (k_x, k_y) puis en déduire l'expression de l'énergie E .

3. En utilisant la condition de normalisation, déterminer l'expression finale de la fonction d'onde résultante $\psi(x, y)$.
4. Dans l'hypothèse où $L_x = L_y = L$, donner (sous forme d'un tableau):
 - les fonctions d'onde pour les 4 premiers niveaux d'énergie distincts,
 - l'expression de l'énergie pour chaque niveau,
 - la dégénérescence de chaque niveau (négliger le spin dans cette énumération).

Exercice 2

On considère un métal de n atomes monovalents par unité de volume. Les électrons de valence de ce conducteur sont assimilés à des électrons libres. Sous l'action d'un champ électrique \vec{E} uniforme, ces électrons se déplacent à une vitesse moyenne \vec{v} et leurs chocs avec le reste du réseau sont équivalents à une force de frottement visqueux \vec{f} d'expression:

$$\vec{f} = -\frac{m\vec{v}}{\tau}$$

où τ est le temps de relaxation (durée moyenne entre deux chocs consécutifs).

1. Ecrire le principe fondamental de la dynamique puis déterminer l'expression de la vitesse moyenne \bar{v} des électrons.
2. Montrer que ce modèle de conduction permet de retrouver la loi d'Ohm en régime permanent. Exprimer la conductivité électrique σ du métal et la mobilité μ des électrons en fonction de e , m , n et τ .
3. Le conducteur en question est supposé être le cuivre qui cristallise dans un système cubique de paramètre de réseau $a = 3,61 \text{ \AA}$. Sa masse atomique est $M = 63,54 \text{ g/mol}$, sa masse volumique est $\rho = 8960 \text{ kg.m}^{-3}$. Déterminer la nature du réseau de Bravais du cuivre puis calculer sa concentration n .
4. Sachant que les électrons de conduction du cuivre sont soumis à l'action d'un champ électrique $E = 10 \text{ volt/m}$, calculer le temps de relaxation τ et la vitesse moyenne v de ces électrons. La résistivité électrique du cuivre étant égale à $1,7.10^{-6} \text{ ohm.cm}$ à la température ambiante.

On donne:

La masse d'un électron: $m = 9.1 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$

La charge d'un électron: $q = -e = -1.6 \cdot 10^{-19} \text{ C}$

Le nombre d'Avogadro: $N_A = 6.02 \cdot 10^{23} \text{ mol}^{-1}$

Examen, Session Ordinaire (Durée: 1h 30 min)
 Module 34: Physique des Matériaux II

Exercice 1: Vibrations d'une chaîne monoatomique

On considère une rangée d'atomes identiques de masse m et de paramètre de réseau « a ». On repère la position d'équilibre du n -ième atome par x_n et le déplacement par rapport à sa position d'équilibre par u_n . La force de rappel F_n exercée sur l'atome n , par tous les autres atomes, peut se mettre sous la forme:

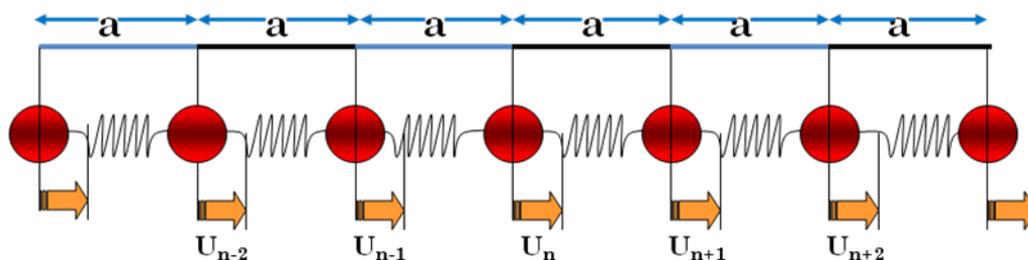
$$F_n = \sum_{p \neq n} C_p (u_{n+p} - u_n)$$

où C_p est la constante de rappel entre l'atome n et l'atome $(n + p)$.

On cherche des solutions en forme d'ondes planes d'amplitude u_0 et de vecteur d'onde K :

$$u_n = u_0 e^{i(x_n K - \omega t)}$$

où $x_n = na$ est la position d'équilibre de l'atome n .



1. On se limite aux interactions entre un atome donné et ses plus proches voisins caractérisées par la constante de rappel C .

a) Donner l'équation du mouvement de l'atome n .

b) Etablir la relation de dispersion $\omega = f(K)$ des vibrations de la chaîne atomique. Tracer l'allure graphique de $\omega = f(K)$ dans la première zone de Brillouin.

c) Déterminer l'expression de la vitesse du groupe v_g puis en déduire la vitesse de son v_s .

2. On tient compte maintenant des premiers et seconds voisins et on désigne par C_1 et C_2 les constantes de rappel correspondantes respectivement.

a) Etablir la nouvelle équation du mouvement de l'atome n .

b) Montrer que la pulsation ω des vibrations atomiques peut se mettre sous la forme:

$$\omega^2(K) = f_1(K) + f_2(K)$$

où $f_1(K)$ est la contribution des premiers voisins et $f_2(K)$ celle des seconds voisins.

Donner les expressions de $f_1(K)$ et $f_2(K)$.

Exercice 2: Electrons libres dans un cristal bidimensionnel

Une lame métallique ayant la forme d'un carré de côté L est composée de N atomes monovalents: chaque atome possède un seul électron dans sa bande de conduction. Les électrons de ce cristal bidimensionnel sont susceptibles de se déplacer librement. On se propose d'étudier ce système en utilisant les conditions aux limites périodiques (de périodicité L suivant Ox , L suivant Oy).

1. On suppose que la fonction d'onde ψ d'un électron libre, dont l'énergie cinétique est notée E , peut se mettre sous la forme:

$$\psi(x, y) = \varphi(x)\varphi(y)$$

Rappeler l'équation différentielle à laquelle obéit la fonction d'onde ψ et montrer que cette équation peut se scinder en deux équations suivantes:

$$\frac{d^2\varphi(x)}{dx^2} + k_x^2\varphi(x) = 0; \quad \frac{d^2\varphi(y)}{dy^2} + k_y^2\varphi(y) = 0$$

Donner l'expression de $k_x^2 + k_y^2$.

2. Les solutions des équations précédentes sont des ondes progressives de la forme:

$$\varphi(x) = A \exp(ik_x x); \quad \varphi(y) = B \exp(ik_y y)$$

a) Montrer que les conditions aux limites périodiques imposent la quantification des composantes (k_x, k_y) du vecteur d'onde \vec{k} et de l'énergie cinétique E de l'électron.

b) En utilisant la condition de normalisation, trouver l'expression finale de la fonction d'onde résultante $\psi(x, y)$.

3. Déterminer les expressions des caractéristiques de Fermi (vecteur d'onde k_F , niveau E_F , température T_F) de ce métal bidimensionnel.

4. Etablir l'expression de la densité d'états électroniques $D(E)$ dans l'espace des énergies. Faire apparaître E_F dans l'expression de $D(E)$ puis tracer sa courbe correspondante.

5. Retrouver l'expression de E_F (obtenue dans la question 3) à partir de $D(E)$ puis calculer l'énergie moyenne \bar{E} d'un électron de ce métal.

Examen, Session de Rattrapage (Durée: 1h 30 min)
Module 34: Physique des Matériaux II

Exercice 1: Electrons libres à une dimension (CLF)

Un réseau linéaire de longueur L est composé de N atomes équidistants de $a = 4\text{Å}$. Les atomes de ce système sont supposés monovalents, c'est-à-dire chaque atome possède un électron dans sa bande de conduction. Chaque électron, de masse m et d'énergie E , peut se déplacer librement le long du réseau.

1. La fonction d'onde $\psi(x)$ d'un électron libre peut se mettre sous la forme:

$$\psi(x) = A \sin(kx) + B \cos(kx)$$

Rappeler l'équation différentielle à laquelle obéit la fonction d'onde $\psi(x)$ puis en déduire l'expression de l'énergie E .

2. Montrer que les conditions aux limites fixes (CLF) imposent la quantification du vecteur d'onde \vec{k} et de l'énergie cinétique E de l'électron.
3. En utilisant la condition de normalisation, trouver l'expression finale de la fonction d'onde $\psi(x)$ de l'électron libre.
4. Déterminer les expressions et les valeurs numériques des caractéristiques de Fermi (vecteur d'onde k_F , niveau E_F , température T_F) de ce réseau linéaire.
5. Etablir l'expression de la densité d'états électroniques $D(E)$ dans l'espace des énergies puis déterminer l'énergie totale U des N électrons libres en fonction de E_F .

Exercice 2: Quelques propriétés physiques du cuivre

Le cuivre (symbole Cu) est un conducteur qui cristallise dans le système cubique de paramètre de réseau $a = 3,60\text{Å}$. Sa masse atomique et sa masse volumique sont respectivement $M = 63,54\text{ g/mol}$ et $\rho = 8960\text{ kg.m}^{-3}$. Les électrons de valence de ce métal (un par atome) se comportent comme des électrons libres.

1. Préciser la nature du réseau de Bravais (cubique simple, cubique centré ou cubique à faces centrées) du cuivre puis calculer la concentration n d'électrons libres.
2. En considérant une portion d'un conducteur cylindrique de section droite S et parcouru par un courant continu d'intensité I , montrer que la densité de courant \vec{j} peut s'écrire: $\vec{j} = nq\vec{v}$, où \vec{v} la vitesse moyenne des électrons libres et q leur charge.
3. Evaluer l'ordre de grandeur de la vitesse moyenne v des électrons de conduction dans un fil de cuivre de section $S = 1\text{ mm}^2$ parcouru par un courant d'intensité $I = 10\text{ A}$.

4. Sachant que la conductivité électrique du cuivre est $\sigma = 5,9 \cdot 10^5 \text{ (ohm-cm)}^{-1}$, déterminer la valeur du temps de relaxation τ des électrons de conduction et le libre parcours moyen l de ces électrons.

5. Rappeler la loi de Wiedemann-Franz qui relie la conductivité thermique K et la conductivité électrique σ puis évaluer K du cuivre à la température ambiante ($T = 300 \text{ K}$).

On donne:

La masse d'un électron: $m = 9.1 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$

La charge d'un électron: $q = -e = -1.6 \cdot 10^{-19} \text{ C}$

Le nombre d'Avogadro: $N_A = 6.02 \cdot 10^{23} \text{ mol}^{-1}$

La constante de Boltzmann: $k_B = 1.38 \cdot 10^{-23} \text{ J K}^{-1}$

La constante de Planck: $h = 6,62 \cdot 10^{-34} \text{ J.s}$

Examen, Session Ordinaire (Durée: 1h 30 min)
Module 34: Physique des Matériaux II

Exercice 1: Capacité calorifique d'un réseau bidimensionnel (modèle de Debye)

On considère un réseau plan composé de N atomes et occupant une surface $S = L^2$ (système à deux dimensions décrit dans la plan xOy par exemple). Sous l'action de la température, les atomes de ce cristal vibrent et les ondes de vibrations correspondantes peuvent s'écrire sous la forme:

$$u(x, y) = u_0 e^{i(xK_x + yK_y - \omega t)}$$

1. En se plaçant dans le cadre des Conditions aux Limites Périodiques (CLP):

- Montrer que les composantes du vecteur d'onde \vec{K} sont quantifiées.
- Préciser l'espace occupé par les vecteurs d'ondes \vec{K} puis déterminer la densité de vibrations $D(\vec{K})$.

2. On suppose par la suite que la relation de dispersion des phonons $\omega(K)$ peut être décrite convenablement par la relation $\omega = vK$ (approximation de Debye), où v la vitesse de son.

- En déduire l'expression de la densité de vibrations $D(\omega)$ (ou densité de modes) pour chacun des deux modes de vibrations.
- Déterminer la valeur maximale de la fréquence de vibration ω_D (ou fréquence de coupure de Debye).

3. En procédant aux changements de variables $x = \beta \hbar \omega$ et $x_D = \beta \hbar \omega_D = \theta_D / T$ (où θ_D la température de Debye), montrer que l'énergie interne U due aux vibrations du réseau bidimensionnel peut se mettre sous la forme:

$$U(T) = AT \left(\frac{T}{\theta_D} \right)^2 \int_0^{x_D} \frac{x^2}{e^x - 1} dx$$

Donner l'expression de la constante A .

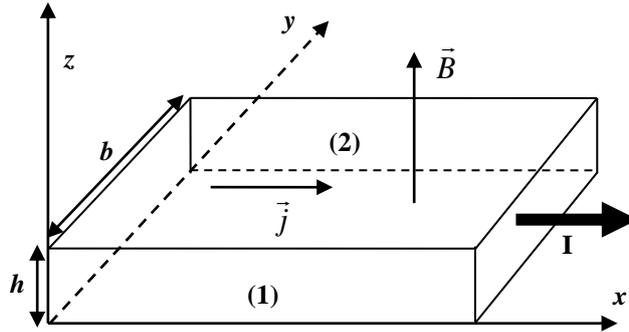
4. Déterminer les expressions de $U(T)$ à haute température ($T \gg \theta_D$) et à basse température ($T = \theta_D$). On pourra utiliser le résultat de l'intégrale suivante:

$$\int_0^{\infty} \frac{x^2}{e^x - 1} dx = 2,4$$

5. En déduire les expressions de la capacité calorifique à volume constant $C_V(T)$ à haute température ($T \gg \theta_D$) et à basse température ($T = \theta_D$). Tracer l'allure de $C_V(T)$.

Exercice 2 : Effet Hall dans un métal

Une plaquette métallique rectangulaire, d'épaisseur h et de largeur b , est représentée sur la figure suivante. La conduction électrique est assurée par des porteurs de charge q ($q < 0$) mobiles et dont le nombre par unité de volume est n . La plaquette est parcourue par un courant d'intensité I , uniformément réparti sur la section de la plaque avec la densité volumique $\vec{j} = j\vec{e}_x$ ($j > 0$). Elle est placée dans un champ magnétique constant et uniforme $\vec{B} = B\vec{e}_z$ ($B > 0$), créé par des sources extérieures.



1. Montrer que la densité de courant \vec{j} peut s'écrire $\vec{j} = nq\vec{v}$, où \vec{v} la vitesse moyenne des porteurs de charges libres.
2. Sous l'effet du champ magnétique extérieur \vec{B} , il va y avoir accumulation de charges sur les faces (1) et (2) de la plaquette. Expliquer ce phénomène et donner un schéma de la répartition de charges.
3. Montrer qu'en régime permanent (c'est-à-dire après que les charges soient accumulées), il y aura apparition d'un champ électrique uniforme \vec{E}_H (dit champ de Hall) d'expression:

$$\vec{E}_H = R_H j B \vec{e}_y$$

Donner l'expression de la constante de Hall R_H .

4. Déterminer la différence de potentielle de Hall $U_H = (V_2 - V_1)$ apparaissant entre les faces (1) et (2) de la plaquette. Montrer que U_H s'écrit:

$$U_H = -\frac{R_H I B}{h}$$

En quoi la mesure de cette tension de Hall peut-elle être utile ?

5. On considère une plaquette d'aluminium, de largeur $b = 3$ cm et d'épaisseur $h = 1$ mm, parcourue par un courant $I = 10$ A et placée dans un champ magnétique $B = 750$ mT. La mesure de la tension de Hall donne la valeur $U_H = 75$ mV.

Déterminer la concentration n d'électrons libres ainsi que la vitesse moyenne v de ces électrons.

Examen, Session de Rattrapage (Durée: 1h 30 min)
Module 34: Physique des Matériaux II

Exercice 1

On considère un métal composé de N atomes monovalents (chaque atome possède un seul électron dans sa bande de conduction) et occupant un volume V . On se propose d'étudier les états des électrons susceptibles de se déplacer librement en utilisant les conditions aux limites périodiques (de périodicité L suivant les trois directions Ox , Oy et Oz). La fonction d'onde d'un électron libre peut se mettre sous la forme $\varphi(\vec{r}) = Ae^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$, où A la constante de normalisation et \vec{k} le vecteur d'onde.

1. Rappeler l'équation différentielle à laquelle obéit la fonction d'onde $\varphi(x, y, z)$ et donner l'expression de l'énergie E d'un électron libre.
2. Montrer que les conditions aux limites périodiques imposent la quantification du vecteur d'onde \vec{k} et de l'énergie E de l'électron libre. Donner leurs expressions en fonction de nombres quantiques tels que (n_x, n_y, n_z) .
3. En utilisant la condition de normalisation, déterminer l'expression complète de la fonction d'onde $\varphi(x, y, z)$.
4. Préciser la forme de la surface de Fermi, occupée par les N électrons libres du métal, puis déterminer ses caractéristiques (vecteur d'onde k_F , niveau E_F , température T_F).
5. Etablir l'expression de la densité d'états électroniques $D(E)$ dans l'espace des énergies puis tracer son allure.
6. Déterminer, à partir de $D(E)$, l'expression du nombre total N d'électrons libres ainsi que celle de l'énergie totale U de ce gaz électronique. Exprimer U en fonction de N et E_F .

Exercice 2

On se propose dans cet exercice d'utiliser le modèle d'Einstein (établi en 1907) pour déterminer la capacité calorifique d'un solide cristallin due aux vibrations atomiques. Dans ce modèle, les N atomes du cristal sont assimilés à des oscillateurs harmoniques quantiques. L'énergie d'un oscillateur à une dimension prend l'expression suivante:

$$\varepsilon_n = (n + 1/2)h\omega$$

où n est nombre entier positif ou nul ($n = 0, 1, 2, \dots$), h la constante de Planck réduite et ω la pulsation de l'oscillateur harmonique.

1. Montrer que l'énergie totale U des N oscillateurs harmoniques à 3 dimensions peut s'écrire sous la forme:

$$U = 3Nh\omega \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{\exp(\beta h\omega) - 1} \right)$$

2. Etablir l'expression de la capacité calorifique à volume constant $C_V(T)$ de ce cristal.

3. En remplaçant ω par ω_E (fréquence d'Einstein) et en posant $\theta_E = h\omega_E/k_B$ (température d'Einstein), donner la nouvelle expression de $C_V(T)$.

4. Déterminer la loi de variation de $C_V(T)$ à haute température ($T \gg \theta_E$) et sa loi de variation à basse température ($T \ll \theta_E$).

5. Tracer l'allure de $C_V(T)$ en fonction de la température puis comparer cette courbe aux résultats expérimentaux. Comment peut-on expliquer la discordance entre le modèle d'Einstein et l'expérience à basse température ?

Examen, Session Ordinaire (Durée: 1h 30 min)
Module 34: Physique des Matériaux II

Exercice 1: Capacité calorifique d'un réseau cristallin (Modèle de Debye)

On se propose dans cet exercice d'utiliser le modèle de Debye (établi en 1912) pour déterminer la capacité calorifique d'un solide cristallin due aux vibrations atomiques. Ce cristal de N atomes est supposé de forme cubique avec un volume $V = L^3$. A une température T donnée, les atomes du solide vibrent et les ondes de phonons correspondantes peuvent s'écrire sous la forme:

$$u(x, y, z) = u_0 e^{i(\vec{K} \cdot \vec{r} - \omega t)}$$

où \vec{K} et ω sont respectivement le vecteur d'onde et la pulsation de l'onde de vibration.

1. En utilisant les Conditions aux Limites Périodiques (CLP) de Born von Karman:

- Montrer que les composantes du vecteur d'onde \vec{K} sont quantifiées.
- Préciser l'espace occupé par les vecteurs d'ondes \vec{K} des phonons puis déterminer la densité de vibrations $D(\vec{K})$.

2. Par la suite, on suppose que la relation de dispersion des phonons $\omega(\vec{K})$ peut s'écrire sous la forme $\omega = vK$ (approximation de Debye), où v la vitesse de son.

- En déduire l'expression de la densité de vibrations (ou densité de modes) $D(\omega)$ pour chacun des trois modes de vibrations. Tracer l'allure de $D(\omega)$.
- Déterminer l'expression de la fréquence maximale de vibration ω_D (fréquence de coupure de Debye). En déduire la température de Debye θ_D .

3. Donner l'expression de l'énergie interne totale U due aux vibrations des atomes. En utilisant les changements de variables $x = \beta \hbar \omega$ et $x_D = \beta \hbar \omega_D = \theta_D / T$, montrer que U se mettre sous la forme:

$$U(T) = AT \left(\frac{T}{\theta_D} \right)^3 \int_0^{x_D} \frac{x^3}{e^x - 1} dx$$

Quelle est l'expression de la constante A ?

4. Etablir les expressions de $U(T)$ à haute température ($T \gg \theta_D$) et à basse température

($T = \theta_D$). On pourra utiliser le résultat de l'intégrale suivante: $\int_0^\infty \frac{x^3}{e^x - 1} dx = \frac{\pi^4}{15}$

5. En déduire les expressions de la capacité calorifique à volume constant $C_V(T)$ à haute température ($T \gg \theta_D$) et à basse température ($T = \theta_D$). Tracer l'allure de $C_V(T)$ en fonction de la température puis comparer cette courbe aux résultats expérimentaux.

Exercice 1: Conduction dans un Métal

On considère un barreau métallique de forme cylindrique, de section S et de longueur L . Sous l'action d'un champ électrique \vec{E} uniforme appliqué le long de ce cylindre, les électrons libres de ce conducteur se déplacent à une vitesse \vec{v} . On désigne par n la concentration en électrons libres et q ($q < 0$) la charge portée par chacun de ces porteurs.

1. Le conducteur en question est supposé être le nickel (Ni) qui cristallise dans un système cubique de paramètre de réseau $a = 3,52 \text{ \AA}$. Sachant que les atomes du nickel sont bivalents (chaque atome libère deux électrons), déterminer la nature de son réseau de Bravais ainsi que sa concentration n . La masse atomique et la masse volumique du nickel sont: $M = 58,69 \text{ g/mol}$ et $\rho = 8,9 \text{ g.cm}^{-3}$.

2. Montrer que la densité de courant \vec{j} induite par le champ électrique \vec{E} peut s'écrire sous la forme: $\vec{j} = nq\vec{v}$.

3. Au cours du mouvement, chaque électron de charge q et de masse m est soumis à l'action des deux forces suivantes: $\vec{F} = q\vec{E}$ et $\vec{f} = -\frac{m\vec{v}}{\tau}$.

a) Définir la nature physique de chacune de ces forces puis donner la signification de τ .

b) Ecrire le principe fondamental de la dynamique et déterminer l'expression de la vitesse \vec{v} des électrons libres en régime permanent. En déduire leur mobilité μ .

4. En utilisant la loi d'Ohm, exprimer la conductivité électrique σ du métal en fonction de q , m , n et τ . La résistivité électrique du nickel étant égale à $7.10^{-6} \text{ \Omega.cm}$, estimer la valeur du temps de relaxation τ .

5. Rappeler la loi de Wiedemann-Franz (loi qui relie la conductivité thermique K et la conductivité électrique σ) puis évaluer K du nickel à la température ambiante ($T = 300 \text{ K}$).

On donne:

La masse d'un électron: $m = 9.1 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$

La charge d'un électron: $q = -e = -1.6 \cdot 10^{-19} \text{ C}$

Le nombre d'Avogadro: $N_A = 6.02 \cdot 10^{23} \text{ mol}^{-1}$

La constante de Boltzmann: $k_B = 1.38 \cdot 10^{-23} \text{ J K}^{-1}$

Examen, Session de Rattrapage (Durée: 1h 30 min)
Module 34: Physique des Matériaux II

Problème: Gaz d'électrons libres

Un matériau métallique occupant un volume V est composé de N atomes monovalents. Les électrons de sa bande de conduction peuvent être traités par « l'approximation des électrons libres ». Dans ce modèle et en utilisant les conditions aux limites périodiques (de périodicité L suivant les trois directions Ox , Oy et Oz), la fonction d'onde associée à chaque électron libre peut s'écrire sous la forme :

$$\varphi(\vec{r}) = A e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$$

où A la constante de normalisation et \vec{k} le vecteur d'onde.

1. Déterminer la constante A puis établir l'équation différentielle à laquelle obéit la fonction d'onde $\varphi(\vec{r})$. En injectant l'expression de $\varphi(\vec{r})$ dans cette équation, déduire l'énergie E d'un électron libre.
2. En utilisant les conditions aux limites périodiques, montrer que les composantes du vecteur d'onde \vec{k} sont quantifiées. En déduire l'expression quantifiée de l'énergie E de l'électron libre.
3. Préciser la forme de l'espace de Fermi engendré par les N électrons libres du métal. En déduire les expressions de ses caractéristiques suivantes: Vecteur d'onde k_F , Niveau E_F , Température T_F .
4. Le lithium et le cuivre cristallisent respectivement dans le réseau cubique centré de paramètre $a_{Li} = 3,48 \text{ \AA}$ et le réseau cubique à faces centrées de paramètre $a_{Cu} = 3,61 \text{ \AA}$. Déterminer pour chacun de ces métaux les valeurs numériques de la concentration n , k_F , E_F , et T_F . Présenter les résultats sous forme d'un tableau.

Métal	Concentration n	k_F	E_F	T_F
Lithium				
Cuivre				

5. Etablir l'expression de la densité d'états électroniques $D(E)$ dans l'espace des énergies puis tracer son allure. Représenter E_F et $D(E_F)$ sur cette même courbe.

6. Déterminer l'expression du nombre total N d'électrons libres en fonction E_F et $D(E_F)$.
7. Soit U l'énergie totale du gaz d'électrons libres dans l'état fondamental, correspondant à $T = 0$ K. Etablir l'expression de U en fonction de N et E_F puis en déduire l'énergie moyenne d'un électron libre de ce gaz électronique.
8. Lorsque le gaz d'électrons libres se trouve plongé dans une température T non nulle, les calculs de ses grandeurs physiques doivent tenir compte de la distribution de Fermi-Dirac:

$$f(E) = \frac{1}{\exp[(E - \mu)/k_B T] + 1}$$

où μ est le potentiel chimique.

- a) Que représente cette distribution ? Tracer sur le même graphe, les allures de $f(E)$ pour deux températures T_1 et T_2 (on suppose que T_2 est supérieur à T_1).
- b) Donner, sous formes d'intégrales, les nouvelles écritures du nombre N d'électrons libres et l'énergie totale $U(T)$.
- c) En partant de l'écriture précédente du nombre N d'électrons libres, déterminer l'évolution de μ en fonction de la température T . On pourra utiliser le résultat du développement I .

On donne:

Masse d'un électron $m = 9,1 \cdot 10^{-31}$ kg

Constante de Boltzmann $k_B = 1,38 \cdot 10^{-23}$ J K⁻¹

Constante de Planck $h = 6,62 \cdot 10^{-34}$ J.s

$$I = \int_0^\infty \frac{E^\alpha}{e^{\frac{\beta(E-\mu)}{\gamma}} + 1} dE \approx \gamma^{\alpha+1} \left(\frac{1}{\alpha+1} + \frac{\alpha\pi^2}{6\beta^2} \right)$$