22 mai 2026

UNIVERSITÉ DE STRASBOURG
LICENCE DE PHYSIQUE (L3) - 2025/2026
Physique fondamentale - Sciences de la matière
PHYSIQUE DU SOLIDE - Examen final

Aucun document n'est autorisé.
Durée de l'examen : 2 heures.

I - Électrons quasi-libres dans une structure rectangulaire

On considère une structure cristalline bidimensionnelle dont la maille est décrite par un réseau de Bravais rectangulaire de dimensions $a_1 = 3$ Å et $a_2 = 4$ Å. Le motif associé est constitué d'un atome de l'espèce A en $(0, 0)$ et d'un atome de l'espèce B (chimiquement différent) en $(1/2, 1/2)$.

1. Caractériser le réseau réciproque bidimensionnel associé en utilisant la maille indiquée précédemment. Donner la symétrie et les dimensions de la première zone de Brillouin en situant les limites de zone dans les directions (10), (01) et (11).

2. Démontrer que pour un gaz d'électrons libres bidimensionnel, la relation entre le vecteur d'onde de Fermi k_F et la densité bidimensionnelle n d'électrons, en tenant compte du facteur de dégénérescence du spin, est $k_F = (2\pi n)^{1/2}$.

3. On suppose que chaque atome A et B de la structure cristalline définie précédemment fournit un électron de valence. Dans une approche d'électrons libres, calculer le vecteur d'onde k_F.

4. Représenter la "surface" (unidimensionnelle) de Fermi par rapport à la zone de Brillouin obtenue dans la partie 1. Est-elle entièrement contenue dans la première zone de Brillouin ?

5. Représenter, dans un schéma des zones réduites, la relation de dispersion des électrons libres selon les directions (10), (11) et (01) de l'espace réciproque, en plaçant dans chacun des trois diagrammes les bords de zone et le niveau de Fermi.

6. Une description plus réaliste de la relation de dispersion des électrons de valence doit tenir compte du potentiel périodique auquel sont soumis les électrons. Si le potentiel est faible, nous pouvons utiliser la théorie des électrons presque libres. Dans cette approche, pour quelles régions de la zone de Brillouin la correction est négligeable (deuxième ordre dans la perturbation) et pour quelles autres la correction est significative (premier ordre dans la perturbation) ? Aucun calcul ou dérivation n'est demandé pour répondre à cette question.

7. Représenter, dans l'approche des électrons presque libres, la relation de dispersion selon la direction (10) dans le schéma des zones réduites, en sachant que, pour cette direction, l'élément de matrice de la perturbation vérifie $|U(1,0)| = 0.5eV$.

8. Refaire la question précédente pour la direction (11), en sachant que $|U(1,1)| = 0.6eV$.

9. Sur la base des deux questions précédentes, le matériau est-il conducteur ou isolant ? Pourquoi ?

Constantes : $\hbar = 1.05 \times 10^{-34}$ Js, $m = 9.11 \times 10^{-31}$ kg, $1eV = 1.6 \times 10^{-19}$ J

II - Chaîne diatomique 1D

On considère une chaîne unidimensionnelle d'atomes formant un cristal 1D. Les atomes sont disposés avec des masses alternées de façon à ce que ceux avec indices pairs ($n = 2j$) ont une masse m_1, tandis que les atomes à indices impairs ($n = 2j + 1$) ont une masse m_2, avec n et j des nombres entiers. On suppose que les interactions entre atomes sont limitées aux plus proches voisins et modélisées par un potentiel harmonique de constante de couplage κ. L'énergie potentielle du système s'écrit :

$$V(x_1, ..., x_n, ...) = \frac{\kappa}{2} \sum_{n=-\infty}^{\infty} (x_{n+1} - x_n - a)^2 . \tag{1}$$

1. En imposant la condition d'équilibre mécanique d'une énergie potentielle minimale, montrer que la position de l'atome n à l'équilibre vérifie la condition $x_n^{\text{eq}} = na + C$, où C est une constante (indépendante de n).

2. Quelle est la périodicité du cristal ? En déduire la périodicité dans le réseau réciproque. Justifier pourquoi l'étude des oscillations pourra se limiter à la première zone de Brillouin $[-\pi/2a, \pi/2a]$.

3. Afin d'étudier les oscillations autour de la configuration d'équilibre, on pose $u_n(t) = x_n(t) - x_n^{\text{eq}}$. Montrer que les équations du mouvement pour les deux types d'atomes peuvent s'écrire, en fonction des nouvelles variables, comme

$$m_1 \frac{\mathrm{d}^2 u_{2j}}{\mathrm{d}t^2} = \kappa \left(u_{2j+1} + u_{2j-1} - 2u_{2j} \right) , \tag{2a}$$

$$m_2 \frac{\mathrm{d}^2 u_{2j+1}}{\mathrm{d}t^2} = \kappa \left(u_{2j+2} + u_{2j} - 2u_{2j+1} \right) . \tag{2b}$$

4. On cherche une solution de type onde plane pour les Eqs. (2), sous la forme

$$u_{2j}(t) = Ae^{i(2jak - \omega t)} , \qquad u_{2j+1}(t) = Be^{i((2j+1)ak - \omega t)} . \tag{3}$$

Montrer que ces deux équations peuvent s'écrire d'une façon matricielle comme

$$\begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = 0 , \tag{4}$$

en précisant les expressions des M_{ij} en fonction des paramètres m_1, m_2, κ, a, k et ω.

5. En déduire la relation de dispersion suivante :

$$\omega_{\pm}^2(k) = \kappa \frac{m_1 + m_2}{m_1 m_2} \left[1 \pm \sqrt{1 - \frac{4m_1 m_2}{(m_1 + m_2)^2} \sin^2(ka)} \right] . \tag{5}$$

6. On étudie la branche acoustique, correspondante au signe "$-$" dans la formule précédente. Montrer que $\omega_- \simeq ck$ lorsque $ka \ll 1$. Donner l'expression de c en fonction des données du problème. Quelle est son interprétation physique ? Montrer ensuite que $\omega_-^2(\pi/2a) = 2\kappa/\text{Max}(m_1, m_2)$.

7. On étudie désormais la branche optique, correspondante au signe "$+$" dans l'Eq. (5). Donner la valeur de $\omega_+^2(0)$ et montrer que $\omega_+^2(\pi/2a) = 2\kappa/\text{Min}(m_1, m_2)$.

8. Représenter l'allure des deux branches $\omega_\pm(k)$ dans la première zone de Brillouin. Quelle est la valeur du gap au bord de zone ?

9. Que se passe-t-il dans la limite $m_2 - m_1 \to 0$? Commenter ce résultat.