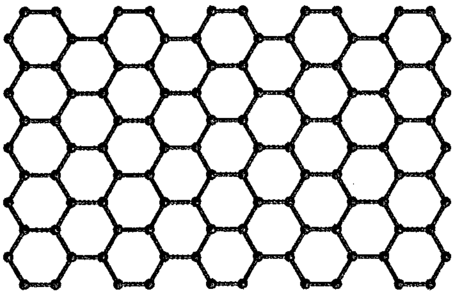
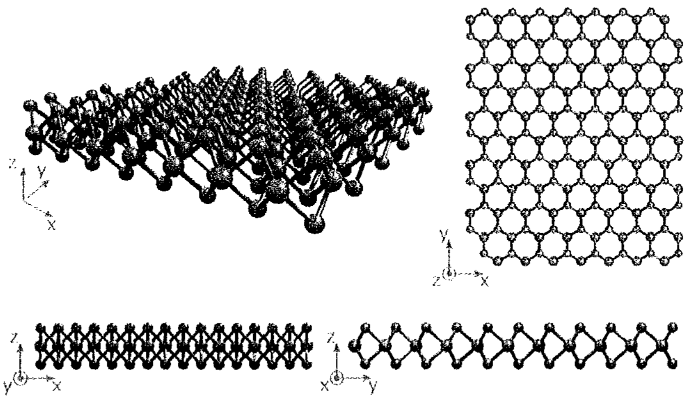
L3 PFA

Question 1 – Mailles et réseaux à deux dimensions (12 pts)

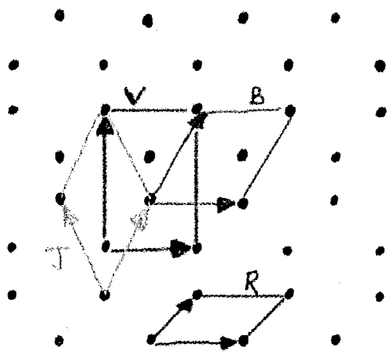


Graphène



Monocouche de MoS_2

Dessinez les mailles primitives du graphène et d'une monocouche de MoS_2 sur les figures ci-dessus en indiquant quels sont les atomes du motif de chaque cristal bidimensionnel.



Entourer la ou les lettres correspondant à des mailles primitives du réseau représenté ci-contre. Chaque point représente un atome identique.

Question 2 – Mailles et réseaux à deux dimensions (8 pts)

Un réseau carré monoatomique a pour vecteurs primitifs $\vec{a}_1 = a(1,0)$ et $\vec{a}_2 = a(0,1)$.

1. Démontrez que les vecteurs $\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{a}(1,0)$ et $\vec{b}_2 = \frac{2\pi}{a}(0,1)$ sont des vecteurs primitifs du réseau réciproque associé à ce réseau cristallin.
2. La densité électronique $\rho(\vec{u})$ du réseau cristallin bidimensionnel peut s'écrire :
$$\rho(\vec{u}) = \rho_{00} + \rho_{10}\exp(i\vec{b}_1.\vec{u}) + \rho_{-10}\exp(-i\vec{b}_1.\vec{u}) + \rho_{01}\exp(i\vec{b}_2.\vec{u}) + \cdots$$
où $\vec{u}$ est un vecteur quelconque dans le plan (XY) du réseau.
Justifiez la validité de cette équation.
Donnez la formule générale de ce développement et donnez la signification des termes ρ_{ij}.

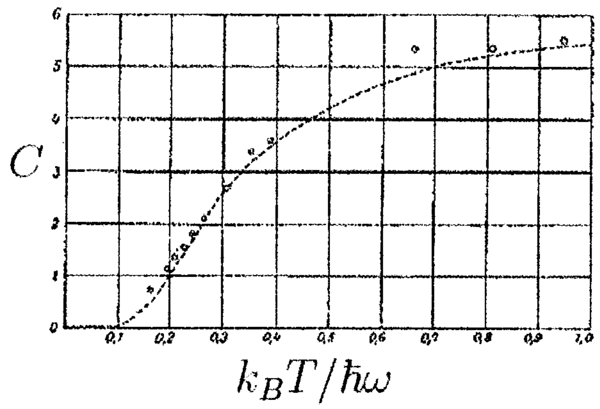
Question 3 – Fonction de structure (12 pts)

Soit un faisceau monochromatique de RX incident sur un échantillon. Ce faisceau sera représenté par une onde plane de vecteur $\vec{k}_{inc}$ et le faisceau diffusé par une onde plane de vecteur $\vec{k}_s$. On notera $\vec{q} = \vec{k}_{inc} - \vec{k}_s$. La diffusion est élastique.

1. Démontrez que l'intensité mesurée au niveau du détecteur, placé loin de l'échantillon, est proportionnelle à la fonction de structure $I(\vec{q}) = |\rho(\vec{q})|^2$
2. Que devient cette relation pour un échantillon cristallin ?

<u>Question 4 – Modèle d'Einstein (8 pts)</u>

Cette figure extraite de l'article d'Einstein [Ann. Phys. 22, 180, (1907)] représente la chaleur spécifique C du diamant en fonction de la température T mesurée (points) et calculée par Einstein (courbe en trait interrompu).
La constante de Boltzmann est $k_B = 1.38064852\ 10^{-23}\ J/K$ et la constante de Planck est $\hbar = 1.0545718\ 10^{-34}\ J\ s^{-1}\ rad^{-1}$. L'unité de C dans la courbe est $cal\ mole^{-1}$.



Pour expliquer les données expérimentales, Einstein postule un modèle d'oscillateur harmonique isotrope associé à chaque atome avec une fréquence caractéristique dépendant de la nature du solide. Pour le diamant cette fréquence correspond à $\omega_E = 1.7136\ 10^{14}\ rad/s$ et à une température caractéristique $T_E = \frac{\hbar\omega_E}{k_B}$=1309 K.

1. Vers quelle valeur la courbe ci-dessus tend-elle à haute température ? Cette valeur est-elle caractéristique du diamant ?
2. Démontrez que la fonction de partition d'un oscillateur harmonique *unidimensionnel* en équilibre thermique est
$$Z = \frac{1}{2\ sinh(\beta\hbar\omega/2)}$$
où $\beta = (k_BT)^{-1}$.
3. En déduire que l'énergie moyenne d'un oscillateur harmonique *unidimensionnel* en équilibre thermique est
$$< \epsilon >= \hbar\omega\ [< n > +1/2]$$
où $< n >$ est la distribution de Bose-Einstein à potentiel chimique nul.
Pour un oscillateur harmonique tridimensionnel isotrope, cette énergie doit être <u>multipliée par 3.</u>
4. Einstein démontre à partir de l'énergie de l'oscillateur harmonique quantique (point 3) que la chaleur spécifique est donnée par la formule suivante où R est la constante des gaz parfaits (1.987 $cal\ mole^{-1}\ K^{-1}$) :
$$C = 3R\ (\beta\hbar\omega)^2 \frac{\exp{(\beta\hbar\omega)}}{(\exp(\beta\hbar\omega) - 1)^2}$$
Le facteur 3 tient compte du caractère tridimensionnel du cristal et cette formule est représentée par le trait interrompu dans la figure ci-dessus.
Déduire et commenter les comportements à basses températures et à hautes températures de ce modèle de C.