

PHYSIQUE DU SOLIDE
Phytem 2^{ème} année

EXAMEN 1^{ère} SESSION
Durée : 3h00

21 JANVIER 2013

Les deux exercices et le problème de magnétisme doivent être écrits sur des copies séparées.

EXERCICE 1 : Structure cristalline

1- a- Expliquez les termes

- (i) réseau
- (ii) base
- (iii) cellule élémentaire

b- Quel est le nombre de noeuds dans la cellule élémentaire du réseau cubique face centrée ?

2- Calculez les vecteurs de base (primitifs) du réseau réciproque de cette structure.

3- a- Expliquez ce que sont les *ordres manquants* dans la diffraction d'un cristal.

b- Si un cristal cubique, de côté $a = 0.42$ nm, est éclairé avec des rayons X de longueur d'onde 0.154 nm, à quels angles seront diffractés les 5 premiers ordres ?

c- Lesquels de ces ordres sont observés si le cristal a une structure cubique face centrée ?

4- Le cristal de RbF a une structure cubique face centrée avec une base de Rb^+ en $(0,0,0)$ et F^- en $(1/2,0,0)$.

a- Combien de plus proches voisins possède chaque ion ?

b- Comment sont-ils arrangés ?

5- L'énergie de cohésion par paire d'ions est donnée par :

$$U(r) = A \exp(-r/\rho) - \frac{\alpha q^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

où r est la distance au plus proche voisin, q la charge ionique et $\alpha = 1.748$.

a- Expliquez brièvement l'origine de ces deux termes dans l'expression de l'énergie.

b- Si $\rho = 0.03$ nm et si la distance d'équilibre entre les plus proches voisins est de 0.282 nm, quelle est la valeur de A ?

EXERCICE 2 : Modèle des liaisons fortes

On considère un solide cristallin unidimensionnel, décrit comme une chaîne de N atomes séparés par la distance a . On impose à la chaîne des conditions aux limites périodiques, qui réunissent l'atome 1 à l'atome N .

Dans le modèle des liaisons fortes d'un solide cristallin 1D, les éléments de matrice du hamiltonien H entre fonctions atomiques $\phi_j(r)$ centrées sur un site j sont données par :

$$\int \phi_i^*(r) H \phi_i(r) dr = -\alpha$$

$$\int \phi_i^*(r) H \phi_j(r) dr = -\beta \quad \text{si } i \text{ et } j \text{ sont plus proches voisins, } \int \phi_i^*(r) H \phi_j(r) dr = 0 \text{ sinon}$$

$$\text{On a aussi } \int \phi_i^*(r) \phi_j(r) dr = \delta_{ij}.$$

Les intégrales s'appliquent sur tout le cristal.

On prendra pour la fonction d'onde d'un électron de vecteur d'onde k dans le cristal la

$$\text{fonction suivante : } \psi_k(r) = \sum_{n=1}^N \gamma_k \phi_n(r)$$

- 1- Montrer que γ_k est de la forme $A e^{ikna}$ et calculer A pour que ψ_k soit normalisée.
- 2- Montrer, en imposant à la chaîne des conditions aux limites périodiques, que pour deux valeurs différentes (et autorisées) k et k' , les états ψ_k et $\psi_{k'}$ sont orthogonaux.

$$\text{Note : } a \sum_{i=1}^{n-1} q^i = a \frac{1-q^n}{1-q}$$

- 3- Calculer l'énergie de l'état représenté par ψ_k en fonction de k , α et β .
- 4- Représenter la relation de dispersion résultante dans la première zone de Brillouin. Quelle est la largeur de la bande formée par ces états ?
- 5- Calculer la masse effective pour un électron au voisinage du bas de cette bande, ainsi que pour un électron en haut de cette bande. Compte tenu du fait qu'une bande de valence d'un semiconducteur est en général plus étroite en énergie qu'une bande de conduction, déterminer si un *trou* dans un semiconducteur est plus lourd ou plus léger qu'un *électron*.
- 6- On applique un champ électrique F au système (dans la direction de la chaîne). Calculer le courant total dans le système lorsque la bande est pleine.

PROBLEME

Susceptibilité d'une poudre d'oxyde de manganèse

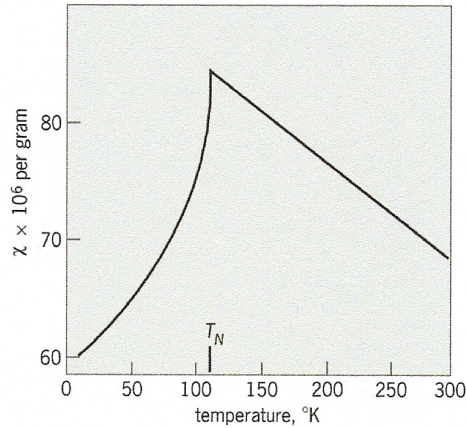


Figure 1 : Magnetic susceptibility of powdered manganese oxide. (After H. Bizette, C. F. Squire, and B. Tsai, 1938)

Nous allons étudier un composé antiferromagnétique : une poudre d'oxyde de manganèse. On peut considérer que ce composé est constitué de deux sous-réseaux identiques A et B de spins $\frac{1}{2}$. On appelle N le nombre de spins total, le volume de l'échantillon est V . Il y a $N/2$ spins sur le sous-réseau A et $N/2$ spins sur le sous-réseau B. Les spins du sous-réseau A (B) pourront être indicés comme \vec{S}_{iA} (\vec{S}_{iB}).

Le composé est placé dans un champ magnétique $\vec{B}_0 // 0z$.

Le hamiltonien du système s'écrit :

$$H_{AF} = g\mu_B \vec{B}_0 \cdot \sum_i \vec{S}_i + J \sum_{i,j \text{ ppv.}} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \quad \text{où } J > 0, \quad \mu_B = \frac{e\hbar}{2m_0} \text{ et } g \text{ est le facteur de Landé des spins}$$

considérés. « ppv. » signifie « plus proches voisins ».

Le moment magnétique du spin \vec{S} est défini par $\vec{m} = -g\mu_B \vec{S}$

Le facteur de Landé g des spins $\frac{1}{2}$ sera pris égal à 2.

On va considérer le problème selon l'axe fixé par le champ magnétique appliqué, donc selon $0z$. Donc finalement : $H_{AF} = 2\mu_B B_0 \sum_i S_i + J \sum_{i,j \text{ ppv.}} S_i \cdot S_j$, avec $S_i = \pm 1/2$

Dans le hamiltonien de Heisenberg, on ne considère que les interactions entre plus proches voisins, donc uniquement celles qui couplent les spins du sous-réseau A aux spins du sous-réseau B. Chaque spin S_{iA} possède p premiers voisins S_{jB} , et chaque spin S_{iB} possède p premiers voisins S_{jA} .

Valeurs numériques :

$$k_B = 1,38 \cdot 10^{-23} \text{ J.K}^{-1} \quad ; \quad \mu_B = 9,27 \cdot 10^{-24} \text{ J.T}^{-1} = 5,79 \cdot 10^{-5} \text{ eV.T}^{-1}$$

$$m_0 = 9,1 \cdot 10^{-31} \text{ kg} \quad ; \quad \hbar = 1,054 \cdot 10^{-34} \text{ J.s} \quad ; \quad \mu_0 = 4\pi \cdot 10^{-7} \text{ SI}$$

1- Approximation de champ moyen

On appellera $\langle S_A \rangle$ la valeur moyenne d'un spin du sous-réseau A, et $\langle S_B \rangle$ la valeur moyenne d'un spin du sous-réseau B.

a- Montrer pour chaque sous-réseau, dans l'approximation de champ moyen, H_{AF} s'écrit :

$$H_{AF} = 2\mu_B B_{eff}^A \cdot \sum_{i \in A} S_{iA} + 2\mu_B B_{eff}^B \cdot \sum_{i \in B} S_{iB}$$

avec $B_{eff}^A = B_0 + a \langle S_B \rangle$ et $B_{eff}^B = B_0 + a \langle S_A \rangle$

b- Donner l'expression de a en fonction de μ_B , J et p .

2- Calcul de l'aimantation :

a- Calculer l'aimantation M_A du sous-réseau A de spins $\frac{1}{2}$ en fonction de N/V , μ_B , $k_B T$ et B_{eff}^A et l'aimantation M_B du sous-réseau B de spins $\frac{1}{2}$ en fonction de N/V , μ_B , $k_B T$ et B_{eff}^B .

b- On pose $M_\infty = \frac{N}{V} \frac{\mu_B}{2}$. Montrer que

$$M_A = M_\infty \tanh \left[\frac{\mu_B}{k_B T} \left(B_0 - \frac{a M_B}{2 M_\infty} \right) \right] \quad \text{et} \quad M_B = M_\infty \tanh \left[\frac{\mu_B}{k_B T} \left(B_0 - \frac{a M_A}{2 M_\infty} \right) \right]$$

3- Calcul de l'aimantation sans champ magnétique

On suppose que $B_0 = 0$.

a- Montrer que M_A et M_B sont de signes opposés et montrer qu'alors, si on estime que $M_A = -M_B = M$, est solution, soit $M_{tot} = M_A + M_B = 0$, on retrouve pour M une expression analogue à celle obtenue lors de l'étude de l'aimantation ferromagnétique.

b- A l'aide d'une analyse graphique de l'aimantation M , montrer qu'il existe une température critique T_N , appelée température de Néel, au-delà de laquelle le composé est paramagnétique. Donner l'expression de T_N en fonction de p , J et k_B .

4- Calcul de la susceptibilité χ pour $T > T_N$:

On définit la susceptibilité par $\chi = \mu_0 \lim_{B_0 \rightarrow 0} \frac{\partial M_{tot}}{\partial B_0}$, où $M_{tot} = M_A + M_B$

Pour calculer χ , on va donc considérer B_0 petit. Dans ce cas, M_A et M_B seront petits aussi.

a- Montrer que $\chi(T) = \mu_0 \frac{N}{V} \frac{\mu_B^2}{k_B (T + T_N)}$.

b- Quelle est la valeur de χ quand T tend vers T_N ? Commenter en faisant ressortir la différence entre composés antiferromagnétique et ferromagnétique (que se passe-t-il pour χ lorsque T tend vers la température de Curie T_c ?).

5- Calcul de la susceptibilité χ pour $T < T_N$:

On écrit alors $M_A = M + \frac{1}{\mu_0} \chi_A B_0$ et $M_B = -M + \frac{1}{\mu_0} \chi_B B_0$, où M est

l'aimantation en champ nul du sous-réseau A, et $-M$ l'aimantation en champ nul du sous-réseau B (voir question 3)).

a- Montrer que $\frac{M_A}{M_\infty} = \tanh \left[\frac{\mu_B B_0}{k_B T} \left(1 - \frac{k_B T_N}{\mu_B \mu_0 M_\infty} \chi_B \right) + \frac{T_N}{T} \frac{M}{M_\infty} \right]$ et

$$\frac{M_B}{M_\infty} = \tanh \left[\frac{\mu_B B_0}{k_B T} \left(1 - \frac{k_B T_N}{\mu_B \mu_0 M_\infty} \chi_A \right) - \frac{T_N}{T} \frac{M}{M_\infty} \right]$$

b- On va considérer que B_0 , χ_A et χ_B sont suffisamment faibles pour pouvoir développer au premier ordre la tangente hyperbolique.

Note : $\tanh(x) = \tanh(x_0) + (x - x_0) \frac{d \tanh}{dx}(x_0)$ avec $\frac{d \tanh}{dx}(x) = 1 - \tanh^2(x)$

Montrer alors que $\chi_A = \chi_B$ et en déduire que $\chi = \chi_A + \chi_B$ est telle que

$$\chi(T) = \mu_0 \frac{N \mu_B^2}{V k_B} \frac{1 - \left(\frac{M}{M_\infty} \right)^2}{T + T_N \left(1 - \left(\frac{M}{M_\infty} \right)^2 \right)}$$

c- Etudier la limite de $\chi(T)$ quand $T \rightarrow T_N$ et quand $T \rightarrow 0$

d- Tracer sur un diagramme l'évolution de χ en fonction de la température.

6- Comparaison des résultats théoriques avec les résultats expérimentaux :

D'après la courbe expérimentale de la figure 1 montrant l'évolution expérimentale de la susceptibilité en fonction de la température de la poudre d'oxyde de manganèse, donner un ordre de grandeur de la constante d'interaction d'échange J , en supposant que le réseau est carré (et donc que les deux sous-réseaux A et B sont carrés également).