

SESSION 2004

Filière : 2^{ème} concours – Concours F/S (Paris)

PHYSIQUE

(Epreuve commune aux ENS Ulm et Lyon)

Durée : 3 heures

Les calculatrices ne sont pas autorisées

Rappels de mathématique et physique :

- * Moment dipolaire d'une distribution de charges ponctuelles :

$$\mathbf{D} = \sum_n Q_n \mathbf{r}_n, \text{ avec } \mathbf{r}_n \text{ le vecteur position de la charge } Q_n.$$

- * Développement limité au premier ordre en δ :

$$f(z - z_n - \delta) \approx f(z - z_n) - \delta \frac{df(z - z_n)}{dz} \quad (\text{D1})$$

- * On définit la transformée de Fourier :

$$\tilde{f}(\mathbf{k}) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} f(z) e^{i\mathbf{k}z} dz \quad (\text{T1})$$

- * Deux résultats concernant les intégrales à une dimension :

$$\sum_n f(z_n) \approx \frac{1}{\Delta} \int_{-\infty}^{+\infty} f(z) dz \quad \text{pour } z_n = n\Delta \quad (\text{R1})$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial f(z, u)}{\partial z} du = \frac{d}{dz} \int_{-\infty}^{+\infty} f(z, u) du \quad (\text{R2})$$

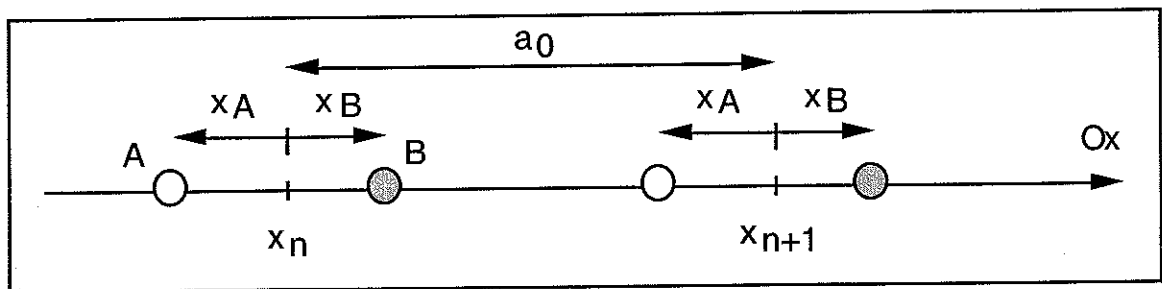
On utilisera les valeurs suivantes pour les constantes physiques et unités de conversion

- * la charge de l'électron : $e \approx -1,6 \times 10^{-19} \text{ C}$
- * la masse de l'électron : $m_0 \approx 9 \times 10^{-31} \text{ Kg}$
- * la masse du proton : $m_p \approx 1840 m_0$
- * la masse du neutron : $m_N \approx 1840 m_0$
- * la constante de Planck : $h = 2\pi \hbar \approx 6,6 \times 10^{-34} \text{ J s}$
- * $1 \text{ meV} = 1,6 \times 10^{-22} \text{ J}$
- * $1 \text{ \AA} = 10^{-4} \mu\text{m} = 10^{-10} \text{ m}$

Un électron se déplaçant au sein d'un cristal est perturbé par le mouvement des atomes. On discutera l'interaction de l'électron avec les vibrations du réseau atomique, dans le cadre d'un modèle classique idéalisé d'un cristal binaire unidimensionnel.

Un solide cristallin binaire est formé par l'arrangement périodique de deux atomes différents A et B. Le cristal de NaCl et celui d'arséniure de gallium (GaAs) en sont deux exemples. Dans les deux cas, on a un transfert de charge entre les atomes A et B, qui acquièrent une charge effective $q_A = -e^*$ et $q_B = +e^*$ ($e^* > 0$; ce transfert est important dans le NaCl et faible dans le GaAs).

A l'équilibre ($T = 0$ K), les atomes A et B sont disposés en un arrangement périodique de pas a_0 : $x_{AnE} = x_n + x_A$ et $x_{BnE} = x_n + x_B$, où $x_n = n a_0$ repère le n-ème nœud (ou site) sur l'axe Ox et x_A et x_B sont les positions relatives des atomes A et B par rapport à x_n . On a ainsi un atome A et un atome B par nœud du réseau périodique. On choisira l'origine de l'axe Ox de façon à avoir $x_A = -x_{BA} m_B / (m_B + m_A)$ et $x_B = x_{BA} m_A / (m_B + m_A)$, où $x_{BA} = x_B - x_A$ est la distance d'équilibre entre les deux atomes et m_A et m_B leurs masses (voir figure).



A température non nulle, les atomes effectuent des oscillations de petite amplitude autour de leurs positions d'équilibre. On notera $x_{An}(t) = x_{AnE} + u_{An}(t)$ et $x_{Bn}(t) = x_{BnE} + u_{Bn}(t)$ les positions instantanées des deux atomes associés au n-ème site.

Partie I : *Les vibrations du réseau cristallin.* On discutera dans cette partie quelques aspects de la dynamique des atomes dans le solide.

- I.1) Rappeler l'expression de l'énergie cinétique des deux atomes associés au n^{ième} nœud.
- I.2) On définit $M = m_B + m_A$, $\mu = m_B m_A / M$ et les coordonnées relative $r_n(t) = x_{Bn}(t) - x_{An}(t)$ et du centre-de-masse $R_n(t) = [m_B x_{Bn}(t) + m_A x_{An}(t)] / M$ pour les atomes du n^{ième} site. Montrer que l'on peut écrire $r_n(t) = x_{BA} + \delta_n(t)$ et

- $R_n(t) = x_n + \Delta_n(t)$, où $\delta_n(t)$ et $\Delta_n(t)$ seront explicités. Interpréter physiquement $\delta_n(t)$ et $\Delta_n(t)$ et montrer que ces grandeurs s'annulent quand le cristal est à l'équilibre.
- I.3) Réécrire l'énergie cinétique totale associée au $n^{\text{ième}}$ site en fonction des dérivées temporelles des variables $\delta_n(t)$ et $\Delta_n(t)$.
- I.4) Dans un solide, les mouvements des atomes sont des "vibrations collectives", c'est-à-dire, tous les atomes oscillent avec la même pulsation ω et les amplitudes des oscillations des atomes de même type ne sont pas indépendantes, mais gardent un rapport de phase bien défini : $u_{Bn}(t) = u_{B0} \cos(kx_n - \omega t)$ et $u_{An}(t) = u_{A0} \cos(kx_n - \omega t)$. Ecrire $\delta_n(t) = \delta_0 \cos(kx_n - \omega t)$ et $\Delta_n(t) = \Delta_0 \cos(kx_n - \omega t)$ et expliciter les amplitudes δ_0 et Δ_0 en termes de u_{B0} et u_{A0} . Interpréter physiquement la grandeur k .
- I.5) On distingue dans un cristal binaire deux types de vibrations du réseau : les vibrations "acoustiques" et les vibrations "optiques". Dans le premier cas, les atomes A et B d'un même site oscillent en phase ($u_{An} = u_{Bn}$), tandis que dans le second ces atomes oscillent en opposition de phase ($m_A u_{An} = -m_B u_{Bn}$). Evaluer les amplitudes δ_0 et Δ_0 dans chaque cas et montrer que ces deux types de vibrations font intervenir une seule des coordonnées relative ou du centre-de-masse des atomes. Schématiser le mouvement de l'ensemble des atomes du réseau dans la limite $k \rightarrow 0$ pour les deux types de vibrations et discuter physiquement cette limite.
- I.6) Quel est le rapport entre l'énergie totale d'un oscillateur harmonique et son énergie cinétique. Ecrire l'énergie totale E_1 associée aux vibrations optiques des atomes d'un site comme fonction de μ , ω et δ_0 . Quelle est l'énergie E_N des N paires d'atomes ?
- I.7) On définira la densité d'énergie $\rho = E_1/a_0$ comme l'énergie totale de vibration des atomes par unité de longueur. Donner l'amplitude d'oscillation comme fonction de ρ pour les vibrations optiques.
- I.8) En mécanique quantique, l'énergie totale E_N est "quantifiée", c'est-à-dire, $E_N = p \hbar \omega$, où $2 \pi \hbar$ est la constante de Planck et p un entier positif représentant le nombre de "quantum d'oscillation" (ou nombre de "phonons"). Trouver ρ et δ_0 comme fonctions de p (on notera $L = N a_0$).
- I.9) A.N. Calculer δ_0/a_0 dans le cas d'un quantum d'oscillation ($p = 1$) dans un cristal de GaAs de $5 \mu\text{m}$ de longueur. Paramètres pour le GaAs : $a_0 \approx 5 \text{ \AA}$; nombres de masse $A_{\text{Ga}} = 69$ et $A_{\text{As}} = 75$ et vibration optique d'énergie $\hbar \omega = 36 \text{ meV}$. Discuter ce résultat. Dans quel domaine spectral se trouvent les vibrations optiques du GaAs ? On rappellera d'autres systèmes atomiques présentant des vibrations dans le même domaine d'énergie.

Partie II : *Interaction électron - vibrations optiques dans le cristal.* On s'intéressera dans cette partie à l'interaction d'un électron avec les atomes du cristal, qui apparaît quand ces atomes effectuent des vibrations optiques.

- II.1)** Montrer que le moment dipolaire des atomes du $n^{\text{ième}}$ site s'écrit $D_n(t) = D_E + C_0 e^* \delta_n(t)$, où les constantes D_E et C_0 seront explicitées.
- II.2)** Un électron présent à l'intérieur du cristal interagit de façon électrostatique avec l'ensemble des dipôles oscillants. Pour étudier ce couplage, on écrira l'énergie potentielle d'interaction entre un électron (charge $e < 0$) placé au point x et une particule de charge e^* placée au point x^* comme $V_{\text{int}}(x-x^*) = e e^* A(x-x^*)$, où A est une fonction paire : $A(-z) = A(z)$. Quelle est la dimension physique de $A(x)$? Décrire son comportement asymptotique lorsque $z \rightarrow \pm \infty$?
- II.3)** Ecrire l'expression de l'énergie totale d'interaction $V_{\text{int}(A_n)}(x-x_{A_n}) + V_{\text{int}(B_n)}(x-x_{B_n})$ de l'électron avec les deux atomes du $n^{\text{ième}}$ nœud.
- II.4)** On utilisera (D1) pour montrer que la partie *dynamique* (c'est-à-dire, qui s'annule lorsque les atomes sont au repos sur le réseau périodique) de l'énergie totale d'interaction peut s'écrire sous la forme $V_{\text{int}(n)}(x-x_n) = C_1 e^* \delta_n(t) dA(x-x_n)/dx$, où la constante C_1 sera déterminée. Dans la suite, on utilisera l'expression de $\delta_n(t)$ en I.4.
- II.5)** L'énergie d'interaction totale vaut $V_{\text{int}}(x,t) = \sum_n V_{\text{int}(n)}(x-x_n)$. Pour l'évaluer, on utilisera initialement (R1) pour remplacer la somme sur les sites par une intégrale sur l'espace (on supposera que la région d'intégration peut être étendue à tout l'espace). On utilisera ensuite (R2) et puis (T1) pour montrer que $V_{\text{int}}(x,t)$ peut s'écrire sous la forme $V_{\text{int}}(x,t) = C_2 e^* \delta_0 k \tilde{A}(k) \sin(kx - \omega t)$, où la constante C_2 sera explicitée.

L'interaction considérée dans cette partie peut être généralisée pour les cristaux binaires à trois dimensions. Le couplage d'origine électrostatique de l'électron aux dipôles élémentaires engendrés par les vibrations optiques est connu sous le nom de couplage de Fröhlich. Il est particulièrement important dans l'étude du transport électronique dans un semiconducteur.