

Jeudi 6 Janvier 2012

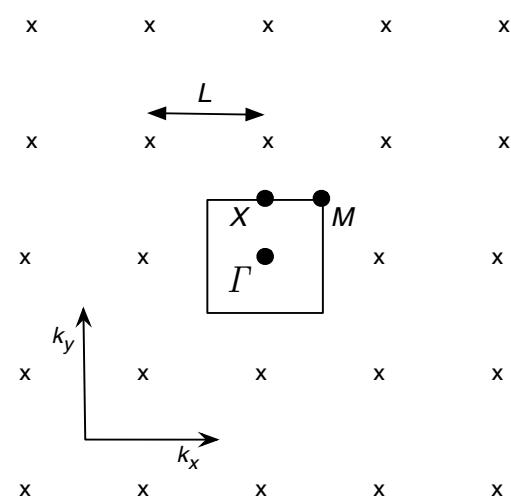
Tous documents autorisés

$$N=6.02 \cdot 10^{23}, k_B=1.38 \cdot 10^{-23} \text{ (J/K)}, m_e=9.11 \cdot 10^{-31} \text{ (kg)}, e=1.6 \cdot 10^{-19} \text{ (C)}, h=6.6 \cdot 10^{-34} \text{ (Js)}$$

A- Supraconducteurs à base de Fer

Découverts au printemps 2008, les supraconducteurs à base de Fer défrayèrent la chronique d'une part de par la présence du Fer (dont les propriétés magnétiques semblaient a priori incompatibles avec la supraconductivité) et d'autre part du fait de leur température critique particulièrement élevée, pouvant dépasser 50K pour certains de ces composés. Plusieurs familles ont été découvertes (La(F,O)FeAs, (Ba,K)Fe₂As₂,...) mais pour tous, la supraconductivité se développe au sein de plans de Fer (ici le plan Oxy) et on supposera dans la suite que l'on **peut traiter le problème à 2 dimensions**. La structure cristallographique de tous ces composés est tétragonale. Pour ceux traités ici on prendra $a=b=4.0\text{A}$ (et $c=8.6\text{A}$) et chaque cellule unité contient 1 atome de Fer.

1. le réseau réciproque associé est représenté sur la figure ci-contre. Les « x » correspondent aux différents nœuds de ce réseau et on note Γ le point de coordonnées (0,0). Le carré correspond à la 1^{ère} zone de Brillouin. Donnez la définition de cette 1^{ère} zone de Brillouin et tracez les 2^{ème} et 3^{ème} zone (on précisera brièvement la méthode utilisée pour tracer ces zones). Quelles sont les coordonnées des points X et M . Quelle est la valeur de L ?



2. Un calcul de la structure électronique (dans La_{0.8}Fe_{0.2}As) est présenté sur la figure ci-dessous.

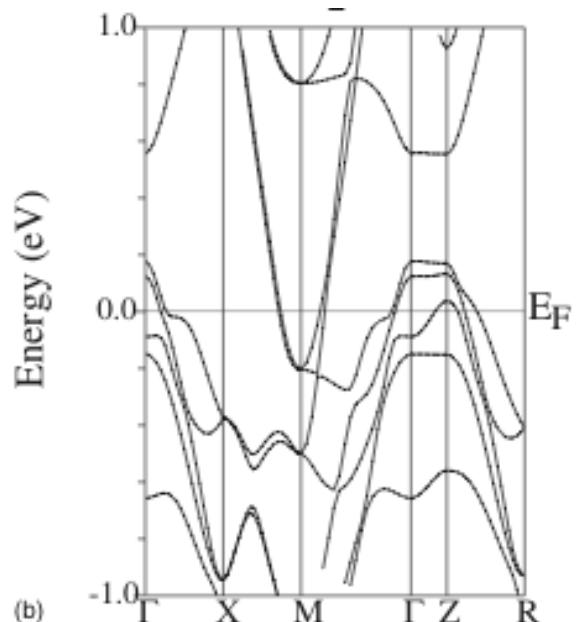
a) le composé est-il conducteur ou isolant (au dessus de la température critique correspondant à l'apparition de la supraconductivité) [justifiez brièvement votre réponse].

b) Quelle est la nature des porteurs aux points Γ et M . Pour chacun d'entre eux précisez la valeur de l'énergie de Fermi.

c) La direction ΓZ est la direction k_z , la relation de dispersion est-elle compatible avec l'hypothèse 2D faite en introduction.

3. Bien que la surface de Fermi soit composée de 4 « feuillets » (voir figure ci-dessus), on ne considérera dans la suite que 2 « doublets » centrés respectivement en Γ et M (constitués chacun de 2 feuillets supposés identiques). On suppose que les bandes correspondantes peuvent être décrites par un modèle d'électrons presque libres.

- a) Ce modèle vous semble-t-il adapté à la figure de dispersion présentée ?
- b) Représentez la surface de Fermi sur la figure de l'espace réciproque donnée en 1 (en hachurant les régions où sont présentes les porteurs de charge).
- c) En vous basant sur les valeurs de E_F déterminées en 2b, estimez la masse effective (m^*) des différents porteurs de charge ? Pourquoi cette masse effective est-elle différente de la masse de l'électron, m_e ? Les mesures expérimentales donnent $m^*/m_e \sim 1.8$ pour tous les porteurs, conclusion ?
- d) Estimez la valeur de la densité d'états pour chacun des 2 « doublets » de la surface de Fermi en états/J.m² puis en états/eV.cellule-unité.
- e) Les mesures de chaleur spécifique donnent un coefficient de Sommerfeld ~ 7 à 12 mJ/molK². Ces mesures sont-elles en accord avec 3d ?



f) Les mesures de chaleur spécifique font également apparaître un terme $\sim 0.4T^3$ (mJ/molK). Quelle est l'origine de ce second terme ? En déduire la température de Debye de ce composé, à quoi cette température correspond-elle ? Quelle autre température associée à ce type d'excitation pourrait-on définir ?

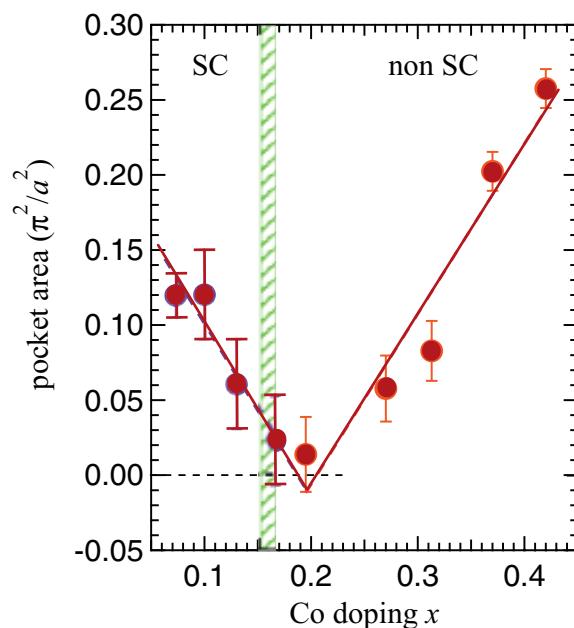
4. On mesure l'évolution de la taille du « doublet » de la surface de Fermi centrée sur le point Γ dans le système $\text{Ba}(\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x)_2\text{As}_2$ en fonction du taux de Co (figure ci-dessous). Les relations de dispersion sont très similaires à celles présentées ci-dessus (à quelques différences quantitatives près).

a) Expliquez qualitativement l'évolution de cette surface. Comment la surface de la poche centrée en M évolue-t-elle avec x ?

b) Comment la densité électronique varie-t-elle avec x ? Donnez l'expression reliant la taille de la surface de Fermi à cette densité électronique. Comparez cette expression à l'évolution observée ci-contre. Conclusion.

c) En considérant la relation de dispersion au point Γ est-il justifié de tracer un « V » continu pour schématiser l'évolution de la surface avec x ? (justifiez votre réponse)

5. Le composé est supraconducteur pour $0.03 < x < 0.17$. Le champ magnétique supérieur (H_{c2}) est extrêmement élevé pour tous les supraconducteurs à base de Fer. Il est de l'ordre de $\sim 50\text{T}$ (à $T=0\text{K}$) pour le composé étudié ici ($T_c \sim 20\text{K}$). Quel(s) autre(s) champ(s) caractéristique(s) pourrait-on définir ? En supposant que le gap supraconducteur est relié à la température critique par la loi prédite par la théorie BCS, déduire une valeur de la vitesse de Fermi des porteurs de charge. Cette valeur est-elle compatible avec la structure électronique discutée ci-dessus.



B- Transition de Mott

A la fin des années 1940 Newill Mott a proposé un modèle décrivant comment un matériau initialement isolant peut devenir métallique sous l'effet de la pression ou du dopage. Le résultat majeur de ce modèle est l'existence d'un « critère de Mott » permettant d'obtenir la concentration (ou la pression) critique associée à cette transition. On se propose ici de retrouver approximativement ce critère.

- 1) Lorsque le système est métallique, son énergie est principalement dominée par la partie cinétique. (électrons presque libres). Exprimez l'énergie moyenne (par électron) en fonction de la densité du gaz d'électrons, n .
- 2) A l'opposée, lorsque le système devient isolant, les fonctions d'onde des électrons de valence deviennent proches d'orbitales atomiques et l'interaction électrostatique avec le noyau joue alors un rôle important.
 - a). Estimez l'ordre de grandeur de l'énergie potentielle d'un électron en fonction de n (en supposant que chaque électron ne subit l'influence que d'un proton).
 - b). Estimez l'énergie cinétique associée en écrivant que $k \sim \pi/r$ où r est le rayon du volume moyen occupé par l'électron. Justifiez (brièvement) l'origine de l'expression choisie pour k .
3. Tracez l'évolution de l'énergie totale pour le diamant [dans lequel $\epsilon_r \sim 6$] (en eV) en fonction de n (en cm^{-3}) dans les deux cas. Commentez les différences pour n petit et n grand. En déduire qu'il existe une concentration critique (n_c) au dessus de laquelle le système est métallique. Exprimez n_c en fonction du rayon de Bohr $a_0 = h^2 \epsilon / \pi m e^2$.
4. La courbe ci-contre représente l'évolution de n_c avec a_0 dans plusieurs semi-conducteurs dopés. Cette courbe est-elle en accord avec le calcul réalisé en 3 ?

