

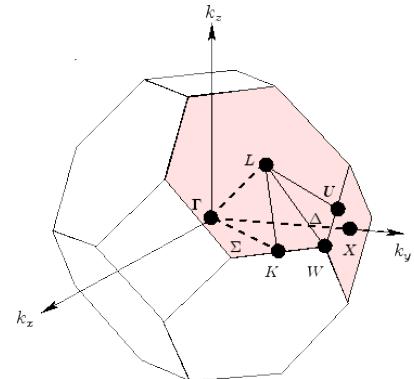
Lundi 7 Janvier 2013

Tous documents autorisés

$$N=6.02 \cdot 10^{23}, k_B=1.3810^{-23} \text{ (J/K)}, m_e=9.110^{-31} \text{ (kg)}, e=1.610^{-19} \text{ (C)}, h=6.610^{-34} \text{ (Js)}, \mu_B=9.310^{-24} \text{ (JT}^{-1})$$

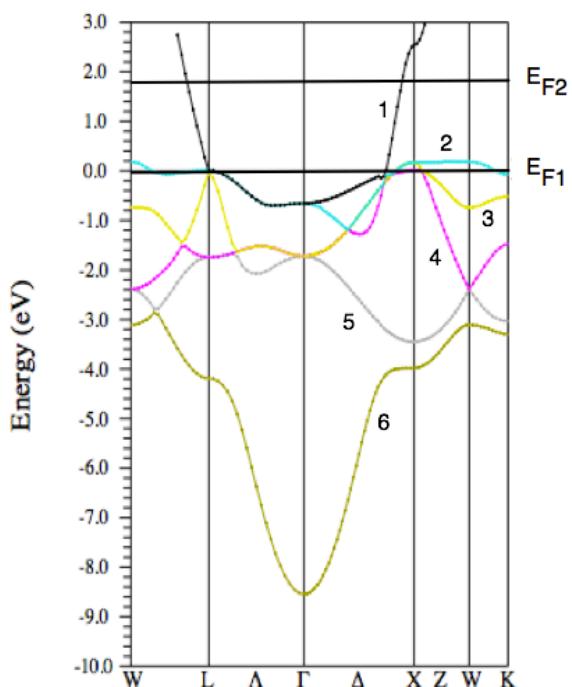
## A- Structure de bandes des systèmes cubiques faces centrées

De nombreux composés simples cristallisent dans la structure cubique faces centrées (on note  $a$  le paramètre de la maille cubique). L'objet de cet examen est d'en étudier les principales propriétés électroniques. De nombreuses questions sont à choix et vos réponses devront toujours être justifiées.



[1] Représentez le réseau de Bravais de cette structure, indiquez le nombre d'atomes présents dans la maille cubique et donnez les coordonnées des vecteurs de la maille primitive. La première zone de Brillouin est présentée ci-contre. Rappelez brièvement la définition de la première zone de Brillouin et du réseau réciproque. Quel est ici le réseau de Bravais de ce réseau réciproque.

[2] On s'intéresse tout d'abord au Nickel ( $3d^84s^2$ ) et au Cuivre ( $3d^{10}4s^1$ ). Pour ces deux éléments  $a$  est de l'ordre de  $3.6\text{\AA}$ . Leur structure de bandes est représentée ci-contre pour différentes directions de l'espace réciproque (voir la zone de



Brillouin pour la position des différents points  $k$ ). Les positions des niveaux de Fermi des deux éléments ont été reportées ( $E_{F1}$  et  $E_{F2}$ ). A quel élément correspond  $E_{F1}$  (et réciproquement lequel correspond à  $E_{F2}$ ).

[3] Ces éléments sont-ils des métaux ou des isolants ? Si le système est métallique, précisez quelles sont la ou les bandes intervenant dans la conduction. Pour chacune de ces bandes indiquez la nature des porteurs (électrons ou trous).

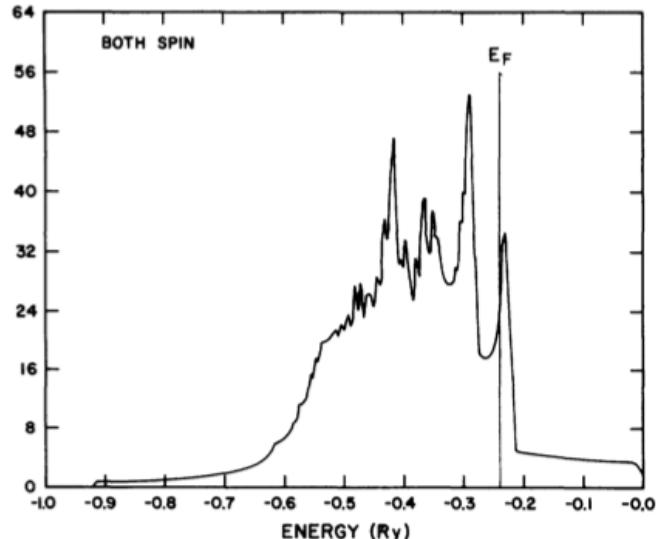
[4] On rappelle que pour le modèle d'électrons libres :

$$k_F[A^{-1}] = 3,1.Z^{1/3}/a[A] \quad E_F[eV] = 36,4.Z^{2/3}/a^2[A^2]$$

$$v_F[m/s] = 3,6.10^6.Z^{1/3}/a[A] \quad g(E_F)[\text{états}/eVA^3] = 0,04.Z^{1/3}/a[A]$$

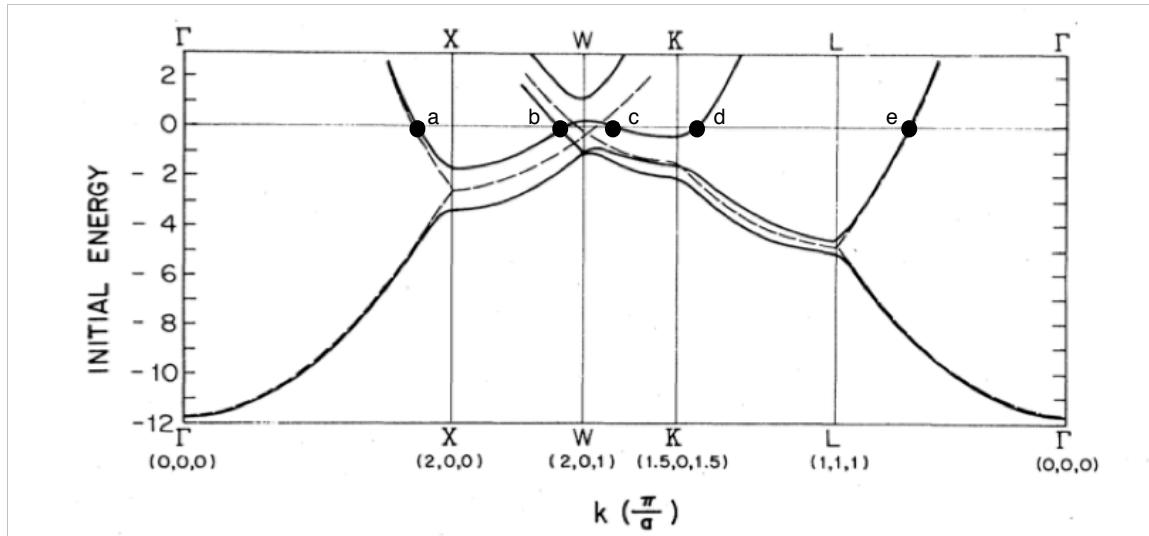
où  $Z$  est le nombre d'électrons dans le cube de côté  $a$ . Donnez les expressions littérales associées à chacun des coefficients numériques.

[5] La densité d'états calculée à partir des relations de dispersions présentées ci-dessus a été reportée sur la figure ci-dessous. Notez que les énergies sont ici données en Rydberg :  $1Ry=13.6eV$  et la valeur 0 a été choisie arbitrairement, la densité d'états est elle donnée en états/atome.Ry. La position du niveau de Fermi pour un des deux éléments est marquée par la ligne verticale (-0.24Ry) s'agit-il de Ni ou Cu ? A quelle valeur d'énergie  $x$  serait située le niveau de Fermi de l'autre élément ?



[6] Pour chacun des deux éléments donnez la valeur de la densité d'états au niveau de Fermi en états/eV.A<sup>3</sup>. Dans le cas du cuivre (1 électron par atome), comparez cette valeur à celle attendue pour un modèle d'électrons libres, conclusion. Exprimez pour cet élément la densité d'états à  $E_F$  en états/Jm<sup>3</sup>, en déduire la valeur du coefficient de Sommerfeld (en kJ/m<sup>3</sup>K<sup>2</sup>) et de la susceptibilité magnétique de Pauli (à T=0).

[7] La structure de bandes ci-dessous correspond à l'aluminium ( $3s^23p^1$ ). Le zéro des énergies (exprimées en eV) est ici pris au niveau de Fermi. Ce système est-il métallique ou isolant ? Les auteurs de ce calcul de bandes précisent qu'il a été obtenu « *à partir de quatre ondes planes et en utilisant uniquement les deux premiers termes de la décomposition en série de Fourier du potentiel* ». L'approche utilisée est-elle celle des électrons presque libres ou des liaisons fortes ? Expliquez brièvement la précision apportée par les auteurs en indiquant notamment à quel « potentiel » les auteurs font référence et donnez une valeur approchée des deux valeurs du potentiel auxquelles les auteurs font référence (à partir de la figure). A quoi correspondent les lignes pointillées reportées sur la figure.



[8] On considère désormais l'élément «  $Al^{2+}$  » qui ne possèderait qu'un seul électron de conduction par atome. Ce composé pourrait alors être très bien décrit par un modèle d'électrons libres, justifiez cette supposition. Quelle serait la valeur de  $k_F$  (en unité de  $\pi/a$ ) ?

[9] Utilisez la structure de bandes ci-dessus pour déterminer quelle serait alors la valeur de  $E_F$ . En déduire la valeur du paramètre de maille  $a$ .

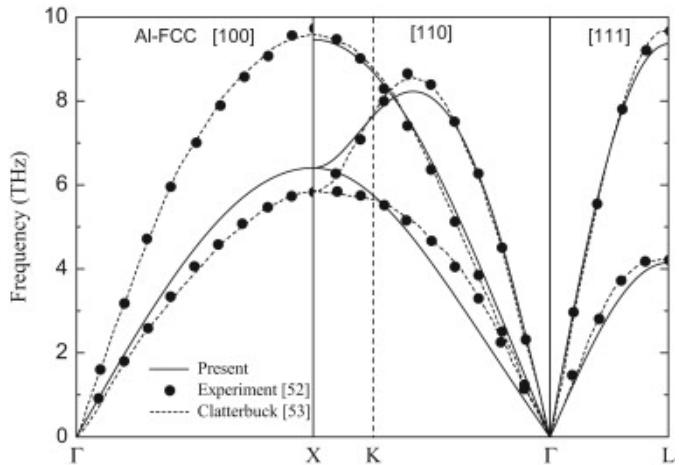
[10] Estimez les valeurs de  $dE/dk$  en  $E_F$  pour les 5 points (a,b,c,d,e) de la relation de dispersion (en eV.A). En déduire une valeur approchée de la vitesse quadratique

moyenne ( $\langle v^2 \rangle^{0.5}$ ) (en m/s) et comparez cette valeur à la vitesse de Fermi des électrons libres (l'aluminium possède 3 électrons de conduction par atome).

## B- Spectre de phonons et supraconductivité

[11] Le spectre de phonons de la structure cubique faces centrées est représentée ci-contre. De quels phonons s'agit-il ? Quel autre type de phonons pourrait-on avoir ? Pourquoi ne les a-t-on pas ici ?

[12] Déduire de ce spectre une valeur approchée de la vitesse du son dans l'aluminium (rappel  $\Gamma X = 2\pi/a$  et  $a \sim 4\text{Å}$ ).



[13] Donnez la valeur de la longueur d'onde de Debye de l'aluminium puis (en utilisant Q.12) celle de sa fréquence de Debye et de sa température de Debye.

[14] L'aluminium est un supraconducteur bien décrit par la théorie BCS, sa température critique est de l'ordre de 1.2K. Estimez la valeur de la longueur de pénétration de London de l'aluminium ainsi que celle de la longueur de cohérence (on utilisera pour cela la valeur de la vitesse de Fermi déterminée en Q.10 ou, à défaut, la valeur de  $v_F$  tirée d'une approximation électrons libres avec  $Z=12$  ( $3 \times 4$ )).

[15] Cet élément est-il un supraconducteur de type I ou de type II. Rappelez brièvement la différence entre ces deux types de supraconducteurs.