

A- Structure électronique du Niobium

Le **Niobium** cristallise dans une structure cubique centrée, dont la maille cubique a pour arête $a=3.3\text{\AA}$.

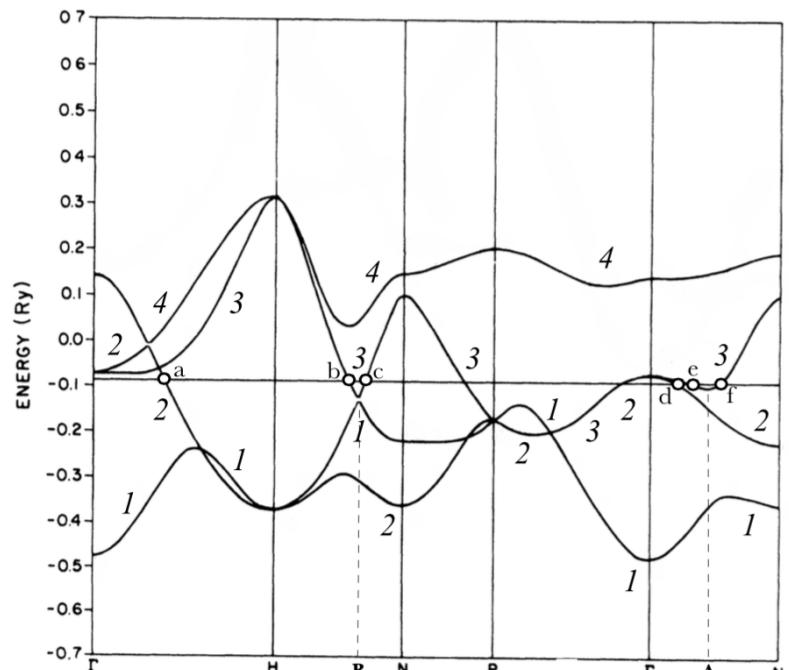
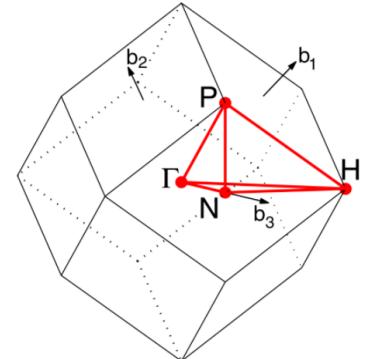
[1] La 1^{ere} zone de Brillouin est représentée ci-contre. Rappelez brièvement la définition des zones de Brillouin, en précisant notamment leur importance pour la détermination de la structure électronique des solides.

[2] Sa structure de bandes est donnée ci dessous.

Donnez la nature (électrons ou trous) des porteurs de charge intervenant dans les propriétés électroniques de cet élément, en indiquant les bandes pertinentes pour ces propriétés. La position du niveau de Fermi est indiquée par la ligne horizontale à -0.09 Ry (environ -1.2eV).

[3] On s'intéresse à la surface de Fermi dans le plan $\Gamma\text{N}\text{H}$ ¹. Reportez les points a, b, c, d, e et f dans ce plan. Tracez (schématiquement) la forme des surfaces de Fermi associées aux bandes 2 et 3. Comment sont les surface de Fermi pour les bandes 1 et 4.

[4] Donnez une valeur approximative :



¹ On notera que la 1^{ere} zone de Brillouin défini dans ce plan un carré de sommet H et dont N occupe le centre des arêtes avec $\Gamma\text{N} = \pi/a$.

- (i) du vecteur de Fermi k_F ,
- (ii) de m^*/m_e (où m^* est la masse effective et m_e la masse de l'électron),
- (iii) de la densité de porteurs² (par cm^3) et,
- (iv) de la vitesse de Fermi (en m/s)

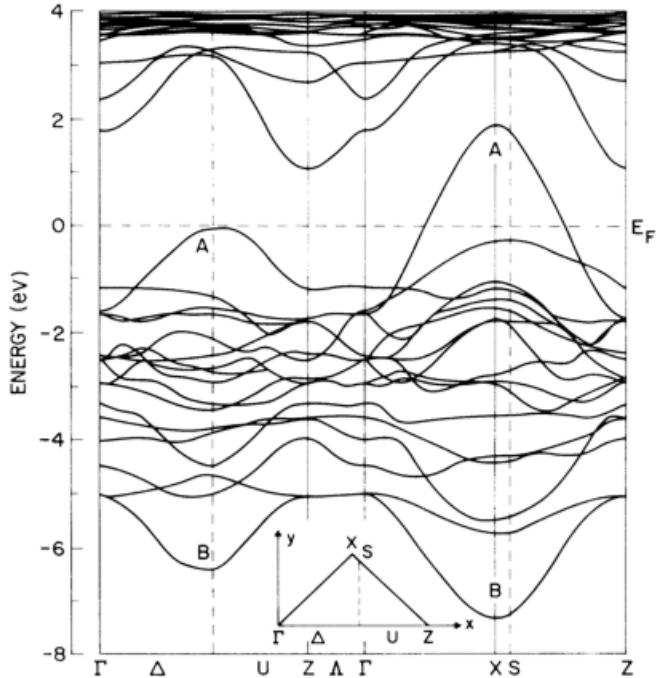
au point B (bande 3). Que peut-on dire de la masse effective au voisinage du point Γ (bande 2).

[6] Tracez schématiquement l'allure de la densité d'états totale entre -0.5 Ry et 0.5 Ry à partir de la structure de bandes donnée ci-dessus. Commentez les points particuliers de cette courbe.

B- Supraconducteurs à haute température critique

Les supraconducteurs à haute température critique sont des systèmes lamellaires et leur structure électronique peut être considérée comme bi-dimensionnelle, dans un réseau carré de paramètre $a=3.9\text{\AA}$. La structure électronique calculée dans un de ces composés est représentée ci-contre³ pour **Z=1.26 trous/maille** (obtenue par dopage chimique).

[7] Donnez la valeur de k_F issue du calcul de la structure électronique et comparez cette valeur à celle tirée d'un modèle d'électrons libres (en l'occurrence ici des « trous libres »). Quelle est la fraction (F_1) de la 1^{ere} zone de Brillouin occupée par la surface de Fermi. Donnez⁴ la relation traduisant l'évolution de cette fraction F_1 avec Z et tracez un graphe $F_1(Z)$ théorique. Reportez votre valeur sur ce graphe, conclusion.



² On supposera ici que le système est isotrope.

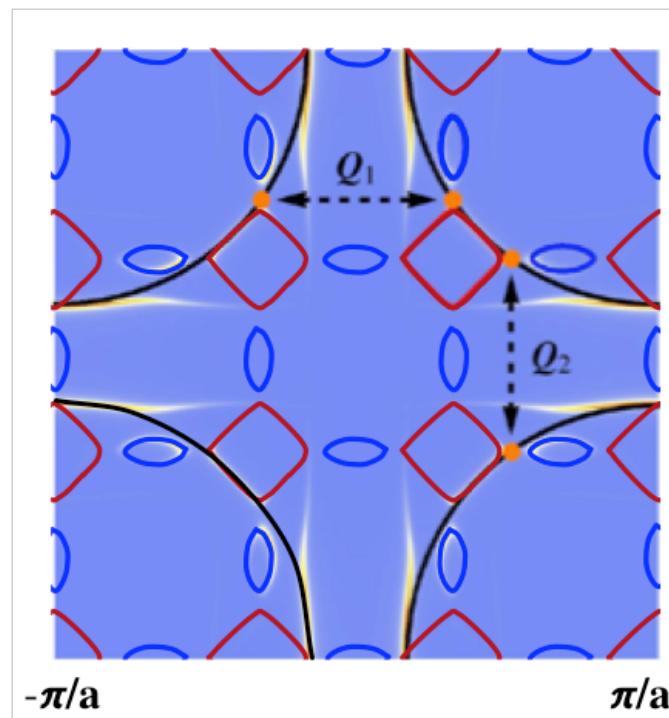
³ Le point X a pour coordonnées $(\pi/a, \pi/a, 0)$.

⁴ On suppose ici que la structure électronique n'est pas affectée par le dopage

[8] La surface de Fermi obtenue pour **Z=1.11** est représentée sur la figure ci-dessous (traits noirs). Pour cette valeur de Z, le système subit une reconstruction de type « onde de densité de charges » (dans le plan Oxy) avec un triplement du paramètre de maille. Rappelez brièvement les ingrédients du mécanisme standard de la formation des ondes de densité de charges. Comment la 1^{ere} zone de Brillouin est-elle affectée par cette reconstruction. La surface de Fermi calculée après reconstruction est représentée par les « carrés » rouges (électrons) et les « ellipses » bleues (trous). Estimez la fraction F_1 (voir Q7) avant et après reconstruction et reportez ces valeurs sur la courbe théorique tracée en Q7. Ces valeurs sont-elles qualitativement en accord avec ce que l'on peut attendre dans le cas de la formation d'une onde de densité de charges. Combien a-t-on de « poches » d'électrons et de trous dans la 1^{ere} zone de Brillouin après reconstruction.

[9] Les masses effectives mesurées pour ces « poches » sont respectivement $1.65m_e$ (pour les électrons) et $0.45m_e$ (pour les trous). Tracez schématiquement les relations de dispersion après reconstruction dans les directions ΓX et XN^5 . Estimez la densité d'états associée à ces « poches » et donnez le coefficient de Sommerfeld correspondant.

[10] La reconstruction n'est plus présente pour **Z =1** mais le système s'avère cependant être isolant. Cette observation est-elle en accord/désaccord avec la courbe $F_1(Z)$ tracée en Q7 ? Commentez cet accord/désaccord.



⁵ de coordonnées respectives $\Gamma=(0,0,0)$, $X=(\pi/3a, \pi/3a, 0)$ et $N=(\pi/3a, 0, 0)$.