

— 2007/2008 —

SOLIDE 01/08

- 0a En présence d'une interaction $\bar{\sigma}/\text{ions}$ $\psi = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \mu_{\vec{k}}(\vec{r})$, l'ensemble des points $\vec{k}$ ($\hbar\vec{k}$ = moment cristallin) compose le réseau réciproque
 $\vec{\sigma}_j = 2\pi \frac{\vec{a}_i \wedge \vec{a}_k}{V}$ $k = m \frac{2\pi}{L}$: CLP ou $\frac{\pi}{L}$: CLF
- 1 0b réseau direct hexagonal $\Rightarrow$ R.R hexagonal (tourné de 60°)
- 2.5.1a Niveau de Fermi = énergie du dernier état occupé à $T=0$
- OS 1.5 gaps dus à l'interaction e/ions $\Delta_n \sim 4\text{eV}$ $\Delta_L \sim 3\text{eV}$
1. c liaison covalente : mise en commun des électrons (couches externes)
 $\rightarrow$ assurent la stabilité du solide (cohésion). Autres solides
- AS ioniques (int électrostatique), moléculaires (van der Waals) + métaux
1. d seules π coupent $E_F \rightarrow$ conduction. Le point d'intersection est proche du bord de zone (k) $\rightarrow$ bande presque pleine : "mauvais" conducteur
2. a E libres avec masse effective $m^* = \hbar^2 / \partial^2 E / \partial k^2$ dans $k_x - k_y$
 $\rightarrow$ liaison forte selon k_z . Les liaisons σ sont issues de p_{xy} : principalement dans le plan $x-y$: interaction entre plans faible : d'où liaisons fortes $\parallel k_z$
- 1 2.5 Très peu de dispersion le long de ΓA ($\parallel k_z$) donc γ faible
- OS 2. c $E_F^\sigma \sim 0.5\text{eV}$ ^{à 1eV} (si origine en haut de bande)
- OS 2. d $E_F^\pi \sim 1.5\text{eV}$ ^{à 2eV} (si origine en L)
- 1 3. a $\sigma : g(E) : m_\sigma^* L^2 / \pi \hbar^2$
 $\pi : g(E) : \frac{m_\pi^* L^3}{\pi \hbar^2} \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$
3. b dev de Sommerfeld $\rightarrow E = E_0 + \frac{\pi^2}{8} (kT)^2 g(E_F) \rightarrow C = \frac{\pi^2}{3} k_B^2 g(E_F) T$
on peut écrire $\frac{\pi^2}{3} [g(E_F) \times k_B T] \times k_B \propto N_{\text{val}} k_B$
3. c $C_\sigma = 1.2 \times 0.45 = 0.54 \text{ mJ/molK}^2$
- 0.5 $g_\sigma(E_F) = 8.6 \times 10^{41} \text{ et/Jmol} = 0.23 \text{ et/eV maille}$
- $C_\pi = 1.2 \times 0.55 = 0.66 \text{ mJ/molK}^2$
- 0.5 $g_\pi(E_F) = 10.5 \times 10^{41} \text{ et/Jmol} = 0.28 \text{ et/eV maille}$
- 1 3. d $g_\sigma = \frac{m L^2}{\pi \hbar^2} = \frac{0.7 m_e \times 2 \sin 60}{\pi \hbar^2} = 0.24 \text{ et/eV maille}$ OK
- 1 3. e $N = \int_0^{E_F} g(E) dE = g(E_F) \times E_F = 0.12 \text{ tr/maille} \sim 5 \times 10^{13} \text{ tr/cm}^2$
- 1 3. f $\left(\frac{m_\pi^*}{m_e}\right)^{3/2} = \frac{0.28}{0.24} \sim 1$ OK

1 3.g $g(E) = \frac{3}{2} \frac{m}{E_F} \approx 0.28 \text{ e/maille} \sim 10^{22} \text{ e/cm}^3$

Question Sonus

- 1 V : cylindre (ondules) le long de ΓK
 1 π : fore centrés en A de section elliptique (quasi circulaire en fait) autour de L

- 0.5 4a γ : contribution électronique
 0.5 β : phonons (branches acoustiques)
 0.5 δ : corrections (autres contributions)

1 ~~4b~~ $\beta: 5.1/10^{-3}$ $\Theta_D^3 = \frac{12}{5} \pi^2 \hbar^3 v_k^3 / \beta \rightarrow \Theta_D \sim 1000 K$

0.5 4b phonons = modes de vibrations collectifs des ions
 0.5/0.5 4d branches acoustiques entre 0 et 30 meV : $2T + 1L$

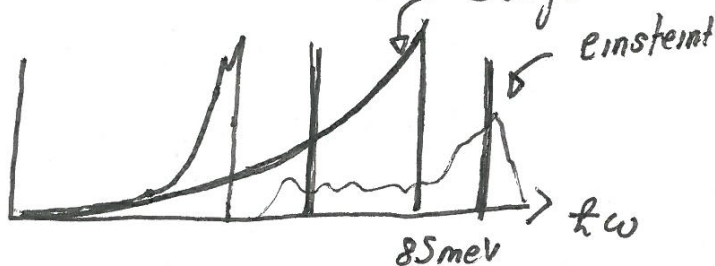
1 4e $\omega = vk$ $k \sim \frac{\pi}{a} \sim 10^{10} \text{ m}^{-1}$
 $\hookrightarrow \hbar\omega = 60 \text{ meV}$ $\omega = 9.1 \cdot 10^{13} \text{ s}^{-1}$ $v \approx 2 \cdot 10^3 \text{ m/s}$

1 4f en bord de zone $\omega = 30 \text{ meV} = \sqrt{\frac{2C}{\pi}}$ $C \approx 5 \cdot 10^4 \text{ J/m}^2$

0.5 4g branches optiques 30 à 90 meV : 2 atomes différents dans maille
 +0.5

2 4h $g_D(\omega) = \frac{3\omega^2}{2\pi^2 v^3}$ $\omega < \omega_D$ $g_E(\omega) = m \delta(\omega - \omega_E)$

$\hbar\omega_D = \hbar\Theta_D \rightarrow \hbar\omega_D \sim 85 \text{ meV}$ Debye



1

-2008/2009-

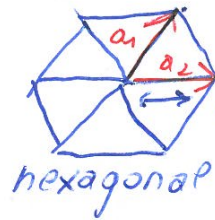
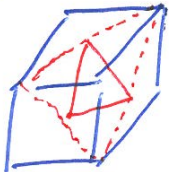
1.5 A 1.3 remplissage non "continu" des bandes, ouverture du gap dans toutes les directions depend de V et structure: ces diamants graphites

1.5 2.3 T^2 car $C_p \propto T$: Sommerfeld - equipartition non applicable

1.5 3.2 T^2 car T^d donc T^3 a 3D uniquement

B 1a

1.5



$$a_1 \begin{pmatrix} 1/2 \\ \sqrt{3}/2 \end{pmatrix}$$

ou $1/\sqrt{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ $1/\sqrt{2} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$
ou colonnes equivalentes

$$a_2 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$a/\sqrt{2} = 2.58 \text{ \AA}$$

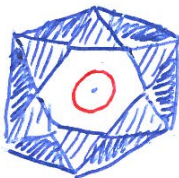
1 1b $1/2$ par triangle de surface $(a/\sqrt{2})^2 \times \sqrt{3}/2$
→ densité $\frac{2}{\sqrt{3}a^2} = 0.18 \cdot 10^{10} \text{ e/m}^2$ ($1.8 \cdot 10^{15} \text{ e/cm}^2$)

2a k = vecteur d'onde ($p \neq \hbar k$) $\Psi = u_k e^{i\vec{k}\vec{r}}$ $k = n \frac{2\pi}{L}$

2 $a_i^* b_j = 2\pi \delta_{ij}$ (ou $a_1 = \frac{2\pi 5 \text{ \AA}}{a(5 \text{ \AA})}$ etc...)

$a^* a = b^* b = 2\pi$ $a^* b = a b^* = 0$ ou 2D

1.5 2b $b_1^x = 0, b_1^y = 4\pi/\sqrt{3}$ $b_2^x = 2\pi$ $b_2^y = -\frac{2\pi}{\sqrt{2}}$ hexagone tourne de 30°



$$\Gamma\pi = \frac{2\pi\sqrt{2}}{\sqrt{3}a} = 0.82 \text{ \AA}^{-1}$$

2

3a origine en E_F
3b on lie sur les courbes $E_F = 0.41 \text{ eV}$

4a

k	0	0.02	0.04	0.06	0.08	0.1	0.12	0.14	0.16	0.18	0.20
$E - E_F$	0.415	0.413	0.400	0.383	0.353	0.318	0.275	0.224	0.163	0.099	0

→ on verifie que $\frac{E}{\hbar^2} = \text{de } 1.5 \cdot 10^{-38} = \frac{\hbar^2}{2m^*}$

3.5

→ $m^* = 3.5 \cdot 10^{-31} \text{ kg} \sim 0.4 m_e$ idem pour ΓK

4b ΓK identique a $\Gamma\pi \Rightarrow SF = \text{cercle}$

1

$k_F \approx 1/4 \Gamma\pi$: SF loin des bord de zone de Brillouin ok pour electrons presque libre

4c $g(E)dE = 2 \times 2 \pi k^2 dk \times \frac{1}{L} \left(\frac{2\pi}{L} \right)^2 \rightarrow g(E) = \frac{mS}{\pi \hbar^2} \quad S = \frac{\sqrt{3}}{2} a^2$

3

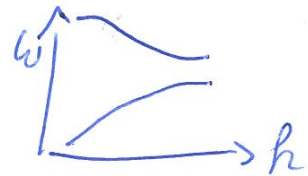
$g(E) = 1.6 \times 10^{18} \text{ et/evm}^2 = 0.1 \text{ et/ev/cellume}$

tres inferieure a la pos du cuivre

$M = g(E) \times E_F = 4 \times 10^{-2} \text{ e/cellule} \ll 1$ 50% surface 90% volume

2

$\vec{E} \cdot \vec{a}$: mode de vibration collective
2 sites $\Rightarrow$ mode optique



1

↳ acoustique 0/12 THz 0/50 meV
optique 10/15 THz 45/62 meV

0.5 c 3 branches 2T+1L (degenerate's pour certaines directions)

d $\hbar \omega_D \sim \hbar \omega_D \approx 500 \text{ K}$ (vraie valeur 200K)

1.5

$C_p \propto T^3$

e $D(\omega) \propto \omega^2$ acoustique et $S(\omega - \omega_E)$ optique

2



A - Modèle de Drude 6pts

— 2009/2010 —

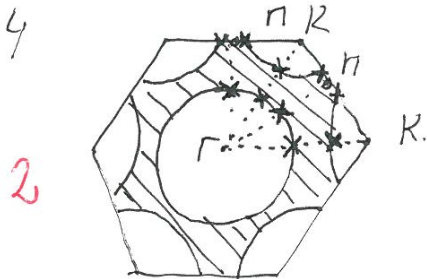
1. La théorie cinétique des gaz ne peut pas être appliquée aux e^- du solide du fait de leur densité $\gg$ gaz $\rightarrow$ la statistique de Fermi-Dirac doit être utilisée. La vitesse n'est pas $\propto T^{1/2}$ (équation non applicable) mais fixée par l'énergie de Fermi. 2
2. Les ions peuvent en effet être considérés comme immobiles. 1
3. Un modèle consistant à traiter les e^- comme indépendants est rarement exact (e^- libres) $\rightarrow$ interactions avec le réseau modifient l'énergie et $E(k) \neq \hbar^2 k^2 / 2m$. Les corrélations e^-/e^- peuvent être importantes mais hors programme. Modèle e^- presque libre ou liaisons fortes OK. 1.5
4. Non les ions ne sont pas la source de la résistance puisqu'ils sont répartis périodiquement. La résistivité est due aux défauts et/ou aux phonons qui brisent la périodicité. La notion de libre parcours moyen reste applicable (via la diffusivité). 1.5

6

B. Propriétés électroniques

1. La transition de Peierls est liée à une dimérisation de la chaîne atomique conduisant à un doublement de la maille. Dans les systèmes monovalents le bord de ZB est alors $= k_F$ conduisant à une ouverture de gap à $E_F \Rightarrow$ abaissement de l'énergie électronique compensant le coût en énergie élastique lié à la déformation du réseau. Comme on a alors un gap à E_F cette transition s'accompagne d'une TI . À 2D le gap ne s'ouvre pas simplement dans toutes les directions et le système reste métallique : c'est le cas ici. 1.5
2. $\Gamma\Gamma$ (0x) : OK pour les 3 bandes 1 et 2 = trous, 3 = électrons (prochodan)
 ΓK (0y) : " 1 = trou en Γ , 2 = trous en Γ et K ,
 3 = électrons entre Γ et K .
 ΓA (0z) : seul 1 coupe E_F = trou en Γ . 1.5
3. La 1^{re} ZB est hexagonale donc le réseau direct l'est également. Les tB sont définis à partir des plans médiateurs du Réseau Reciproque un vecteur $\vec{k}$ se trouve dans la N^{ème} ZB s'il coupe (N-1) plans. 1.5
- La surface de Fermi est définie par l'ensemble de vecteur k pour lesquels $E = E_F$. L'interaction e^- /réseau est particulièrement forte si $\vec{k}$ est proche d'un bord de ZB.

correspond à la bande 1 : en effet seul la bande 1 coupe EF & prolong de ΓA
 La bande 2 est constituée des trous autour des points Γ et K c'est donc bien
 la surface de Fermi #2. On remarque notamment que cette bande coupe $K\Gamma$
 à mi-chemin alors que pour la bande 3 l'intersection est très proche de Γ



5 O_y et O_x sont équivalents et correspondent donc à k_x et k_y
 par élimination $k_z = k_z$. La galette est aplatie selon k_z cette
 direction a donc la masse la plus faible $m_z = 0.46 m_e$ et $m_x = 2.27 m_e$

6. $dN = \frac{2}{4} \frac{d^3 k}{(\frac{2\pi}{L})^3}$ on découpe la galette en couches
 spin densité

circulaire d'épaisseur dk_z et de rayon $\sqrt{k_x^2 + k_y^2}$, le volume
 associé à cette couche est $\pi(k_x^2 + k_y^2)dk_z$. La relation
 de dispersion nous donne $k_x^2 + k_y^2 = \frac{2m_1}{\hbar^2} E - \frac{m_1}{m_2} k_z^2$.

pour avoir N on intègre donc entre $-k_{max}$ et $+k_{max}$ qui correspondent
 à $k_x^2 + k_y^2 = 0$ soit $k_{max} = \sqrt{\frac{2m_2 E}{\hbar^2}}$, le deuxième facteur 2 provient
 du fait que l'on a écrit l'intégrale entre 0 et k_{max} et non pas $-k_{max}$ et
 $+k_{max}$. On a donc

$$N = \frac{4L^3}{4\pi^2 \beta_L} \int_0^{\sqrt{2m_2 E}/\hbar} \pi \left(\frac{2m_1}{\hbar^2} E - \frac{m_1}{m_2} k_z^2 \right) dk_z$$

$$= \frac{L^3}{2\pi^2} \left[\frac{2m_1 E}{\hbar^2} \sqrt{\frac{2m_2 E}{\hbar^2}} - \frac{m_1}{m_2} \cdot 3 \left(\frac{2m_2 E}{\hbar^2} \right)^{3/2} \right] = \frac{L^3}{3\pi^2} \left(\frac{2E}{\hbar^2} \right)^{3/2} \sqrt{m_1^2 m_2}$$

$$\text{et } g(E) = \frac{dN}{dE} = \frac{L^3}{2\pi^2} \left(\frac{2}{\hbar^2}\right)^{3/2} \sqrt{m_1^2 m_2} \sqrt{E}$$

$$= \frac{L^3}{\pi^2 \hbar^2} \sqrt{2 m_1^2 m_2 E / \hbar^2}$$

$$m_1 = 2.37 \times 9.1 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$$

$$m_2 = 0.46 \times 9.1 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$$

$$E_F = 0.4 \times 13.6 \times 1.6 \cdot 10^{-19} \text{ J}$$

1

0.5

$$g(E) = 1.6 \cdot 10^{47} \text{ et/m}^3 \text{ J} = 0.025 \text{ et/ev} \frac{1}{\text{\AA}^3} \sim 1.6 \text{ et/ev Nb}$$

7. Si on avait des cylindre parfait, on serait dans le cas 2D
 et la densité d'état serait $\frac{mL^2}{\pi \hbar^2} = \text{cte}$
 SUPRACONDUCTIVITE

1 § 7 La Cp s'écrit sous la forme $C = \gamma T + \beta T^3 + \dots$

0.5 donc on s'attend à ce que $\frac{C}{T} = \gamma + \beta T^2 + \dots = \text{droite}$

0.5

$$\gamma \sim 6 \text{ mJ/K}^2 \text{ gat}$$

$$\beta \sim 150 \mu\text{J/K}^4 \text{ gat}$$

Température de Debye relie aux PHONONS = modes de vibration collectif des ions

1

$$\beta = 234 \text{ K}^3 \text{ m} / \sigma_D^3 \rightarrow \sigma_D \sim 220 \text{ K}$$

1

$$\text{et } \gamma = \frac{\pi^2}{3} k_B^2 g(E_F) \text{ soit } g(E_F) = 9.6 \cdot 10^{42} \text{ etat/J gat}$$

$$= 2.5 \text{ etat/ev NbSe}_2$$

2. H_{c1} = pénétration des vortex

0.5 H_{c1} = transition état mixte / état normal.

0.5 Cp mesure H_{c2}

$$0.5 H_{c2}(0) \sim 10 T = \frac{\Phi_0}{2\pi \xi_L} \text{ soit } \xi \approx 56 \text{ \AA}$$

$$\text{et } \frac{\hbar v_F}{\pi \Delta} = \xi \quad v_F = \frac{\pi \Delta \xi}{\hbar} \text{ et } \frac{2\Delta}{k T_C} \sim 3.5$$

$$T_C \sim \sqrt{50} \sim 7 \text{ K} \text{ soit } \Delta \approx 1.7 \cdot 10^{-22} \text{ J}$$

1

$$\text{et } v_F = 2.8 \cdot 10^5 \text{ m/s}$$

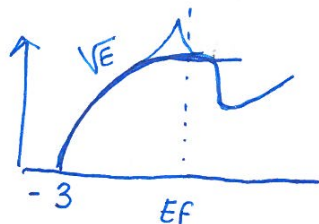
- 2010/2011 -

Q1 : (a) 1^{re} ZB = cellule de Wigner Seitz du RR.
 $\rightarrow$ N^o ZB $\rightarrow$ $\vec{k}$ coupe N-1 plans médians (Bragg)
 RR : point $\vec{k} \rightarrow \vec{a}_i \cdot \vec{b}_j = 2\pi \delta_{ij}$

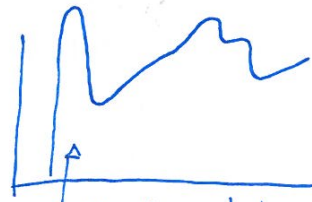
(b) Fermi = dernier état occupé à $T=0$ SF : ensemble des points $\vec{k}$ dont $E < E_F$

Ba²⁺ et K⁺ donc #e conduction diminue avec x : le niveau Fermi $\downarrow$

Q2 (a)



(b)



bandes très plates vers 3-4 eV

Q3 (a) "creux" = ouverture du gap en X : pas d'états selon ΓX et $X\Gamma$

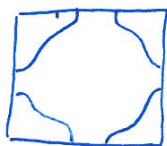
(b) pic : $\partial E / \partial k \rightarrow 0$ en X à -0.3 eV $\rightarrow$ renforcement de la DOS $\propto 1/\partial E / \partial k$ (van Hove)

Q4 $x=0.13$ forte DOS $\Rightarrow$ (a) forte σ (sauf si $D \downarrow$)

$\Rightarrow$ (b) fort $\chi \propto \frac{\pi^2}{3} N k_B^2$

1 pincement = interaction $\bar{e}$ /réseau lorsque SF proche plan de Bragg

Q5 $x=0$



1 E_F coupe relation de dispersion donc système devrait être conducteur (même si gap selon ΓX) : $\pi\Gamma\Gamma$ = formation ODC (ou corrélations)

Q6 $g(E) = \frac{L^3}{2\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} \sqrt{E}$ pour $x=0.37$ $E_F: -0.8$ eV
 $\rightarrow \Delta E = 3 - 0.8 = 2.2$ eV
 $= 3 \cdot 10^{16}$ et/J m³ ≈ 0.38 et/eV maille

$\chi = \frac{\pi^2}{3} k_B^2 g(E_F) = 19$ J/m³ K² $= 10 \times 1000 \times (4.28 \cdot 10^{-10})^3 \times 6.02 \cdot 10^{23}$
 $= 0.9$ mJ/mol K²

Q7 $C_0 = \gamma T = 0.9 \times 31 = 28 \text{ mJ/mol K}$

Q8 1 $C_p = \beta T^3$ $\beta T^3 = 234 \left(\frac{T}{\Theta_D}\right)^3 n k_B = 14000 \text{ mJ/mol K}$

2 la contribution des phonons domine très largement la C_p
 1 à cette température $C_e/C_p \sim 0.2\%$

Q9 $\frac{\Delta C_p}{T_c} \sim 4.5 \text{ mJ/mol K}^2 = 2\gamma$

1 $\rightarrow \gamma = 2.2 \text{ mJ/mol K}^2$

$$N = \frac{2}{(2\pi/L)^3} = 2 \times \frac{\frac{4}{3}\pi k_F^3}{(2\pi/L)^3} \rightarrow k_F \text{ ne dépend pas de } m^*$$

 mais $E_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m^*} \propto \frac{1}{m^*}$ 1
 et $g(E) = \frac{L^3}{2\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2} \sqrt{E} \propto m^{3/2} \times \frac{1}{m^{1/2}} \propto m^*$ 1

donc $\gamma \propto m^*$ est multiplié par 1.4 dep.

et $\Delta_{ep} = \frac{2.2}{0.9} - 1 \approx 1.4$ 1

Q10 le décalage de Δ_{cp} est lié au décalage de la transition

1 normal. supra sous champs pour $H = H_{c2}(T)$

2 1 autre champ = H_{c1} : fin de l'état Meissner ($\rightarrow$ vortex)

Q11 1 $x=1$ conducteur car E_F coupe relation de dispersion (aucun gap)

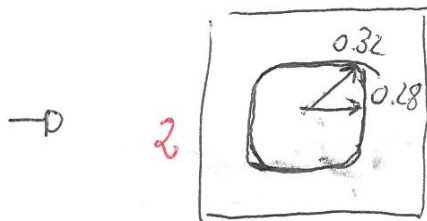
$\Gamma x = \frac{1}{2} \times \frac{2\pi}{a} = \frac{\pi}{a}$ et $k_F = 0.38 \Gamma x$
 $= 0.28 \text{ \AA}^{-1}$ 0.5

$$\frac{2 \times \frac{4}{3}\pi k_F^3}{(2\pi)^3} = n/L^3 = Z/a^3$$
 0.5
 $Z = \frac{8\pi}{3} \times \left(\frac{0.38\pi}{8\pi/3}\right)^3 \approx \frac{\pi}{3} (0.38)^3$ 0.5
 ~ 0.06

1 pour cette valeur de x E_F coupe également d'autres bandes aux points Γ et $R \rightarrow$ trous qui "compensent" les e^- de la bande 1.

Q12 $k_F \sim 0.31 \Gamma \pi = 0.31 \times \sqrt{2} \frac{\pi}{a} = 0.32 \text{ \AA}^{-1}$ 0.5 $> k_F$ selon Γx

la SF n'est pas sphérique : modèle e^- libre pas exact.



Q13

$$\frac{Z}{a^3} = \frac{2 \times (Z k_f)^3}{(Z \pi)^3} = \frac{2 k_f^3}{\pi^3}$$

en prenant $k_f \sim 0.28$ $Z \sim 0.11$ 1

forme de la SF influence par symétrie de la 1^{re} ZB qui est ici carrée → donc SF également carrée 1

5

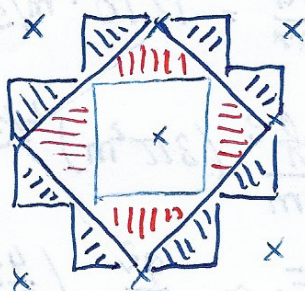
$$E_F \sim -2.2 \text{ eV} \rightarrow DE \sim 0.8 \text{ eV} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad 1$$

$$\Gamma_X : m = 3.9 \cdot 10^{-31} \text{ kg} = 0.37 m_e \quad 0.5$$

$$\Gamma_{\Pi} : m = 4.5 \cdot 10^{-31} \text{ kg} = 0.48 m_e \quad 0.5$$

2011/2012

Supraconducteurs à base de fer



un point P se situe dans la N^{ème} ZB si le vecteur $\vec{r}_P$ coupe N-1 plan médiateur

$$\times \left(\frac{0}{\frac{\pi}{a}} \right) \quad n \left(\frac{\pi}{\frac{\pi}{a}} \right) \quad L = \frac{2\pi}{a}$$

le système est conducteur car plusieurs bandes (ici 3) coupent le niveau de Fermi

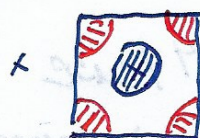
Γ : trous $E_F \sim 0.18 \text{ eV}$

π : électrons $E_F \sim 0.20 \text{ eV}$

la relation de dispersion est très plate le long de $\Gamma Z = k_z$ indiquant une forte localisation dans cette direction $\rightarrow 2D \text{ OK}$

Pour les bandes coupant E_F la dispersion est forte (plusieurs eV) $\vec{P}$ presque libres OK

$\times \quad \times \quad \times \quad \rightarrow \epsilon \bar{c} \rightarrow k_F \sim 0.3 \text{ Å}^{-1} : 0.93 \text{ Å}^{-1}$
 3 trous $\rightarrow k_F \sim \frac{\Gamma X}{4} : 0.20 \text{ Å}^{-1}$



$$m^* = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2E_F} \rightarrow m_e \text{ dans les deux cas}$$

la valeur expérimentale est plus forte = corrélations

A 2D $g(E) = \frac{m^*}{\hbar^2 \pi} \text{ états/Jm}^2 = 5.2 \cdot 10^{37} \text{ ét/Jm}^2 \times 2$

soit $10.4 \cdot 10^{37} \times 1.6 \cdot 10^{-19} \times (1.4 \cdot 10^{-10})^2 = 2.7 \text{ ét/eV maille}$
 pour chacun des deux "doublets" 2 bandes pour passer en 3

Sommerfeld $\gamma = \frac{\pi^2}{3} g(E_F) \times k_B^2 = 2 \times \frac{\pi^2}{3} \times 10.4 \cdot 10^{37} \times (1.4 \cdot 10^{-23})^2 \times \frac{1}{C}$

et le volume molaire est $= \frac{N_A}{\rho} = 12 \cdot 10^3 \text{ mol/m}^3 \uparrow \text{ feuillets} = 156 \text{ J/m}^3 \text{ K}^2$

donc $\gamma \approx 13 \text{ mJ/molK}^2$ en supposant que $m^* : 1.8 m_e$ pour toutes les bandes
 l'accord est satisfaisant

le terme βT^3 est associé aux phonons (acoustiques)

$$\beta T^3 = 234 \text{ m} \left(\frac{T}{\Theta_D} \right)^3 k_B = (234 \times N \times k_B) \left(\frac{T}{\Theta_D} \right)^3 \approx 2000 \left(\frac{T}{\Theta_D} \right)^3 \text{ J/molK}^2$$

la mesure donne $0.4 \cdot 10^{-3} \rightarrow \Theta_D = 170 \text{ K}$

Pour les modes optiques on peut introduire la température d'Einstein

Lorsque le niveau de Fermi monte la taille de la SF en Γ diminue jusqu'à disparaître puis une nouvelle poche (d'électrons) s'ouvre. La poche d' ϵ en Γ ne fait elle que grandir

l'aire de la SF (πk_F^2) croît comme la densité n à 2D $\rightarrow$ évolution linéaire en x

Pour les supraconducteurs de type II on a H_{c2} et H_{c1}
 $H_{c2} = \Phi_0 / 2\pi \xi^2 \rightarrow \xi = 2.5 \text{ nm}$ et dans BCS $\xi \sim \hbar v_F / 5 k_B T_c$
 $\rightarrow v_F : 3.5 \cdot 10^4 \text{ m/s}$ à comparer à $v_F : \frac{\hbar k_F}{m^*} = 1.2 \cdot 10^4 \text{ m/s}$

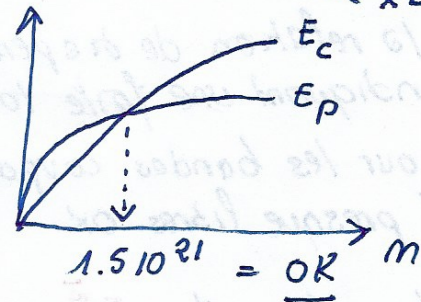
Transition de Mott

$$E_c = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} \text{ et } m = \frac{k_F^3}{3\pi^2} \quad E_c = \frac{\hbar^2}{2m} (3\pi^2 m)^{2/3}$$

$$E_p : \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0 r} \text{ et } m = \frac{1}{4/3\pi r^3} \quad E_p \sim \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{4}{3}\pi m \right)^{1/3} \propto E_c$$

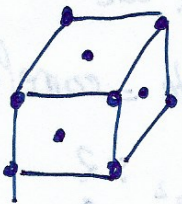
$$m: \text{at}/\text{km}^3 \begin{cases} E_c = 3.3 \cdot 10^{-5} m^{2/3} [\text{eV}] \\ E_p = 3.8 \cdot 10^{-8} m^{1/3} [\text{eV}] \end{cases}$$

$$E_c \sim E_p \Rightarrow m_c^{1/3} a_0 \sim 0.2$$



2012-2013

Cubiques faces centrées



atomes : 1 (coin) + 6 x 1/2 (faces) = 4 / cube

vecteurs de la maille primitive $a(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$ et permutations
 RR $\vec{a}_i \cdot \vec{b}_j = 2\pi \delta_{ij}$ 1er ZB R me coupe aucun plan médiateur

Reseau = cfc $\Rightarrow$ RR = CC

$$Ni : 3d^8 4s^2 = 10e^-$$

$$Cu : 3d^{10} 4s^1 = 11e^-$$

$E_F/Cu > E_F/Ni$ car plus d'électrons
 $Cu = E_F2$ et $Ni = E_F1$

les deux sont des métaux (au moins une bande coupe E_F)

Cu : électrons en Γ Ni : trous en X (et W) compensés par $\bar{e}$ en Γ

$$1 \text{ at } z=4 \quad a=3.6 \text{ \AA} \quad k_F = 1.3 \text{ \AA}^{-1}, E_F = 7.1 \text{ eV}, v_F = 1.6 \cdot 10^6 \text{ m/s}, g: 0.02 \text{ et/at Ry}$$

E_F se situe près d'un pic $\rightarrow$ bande plate: il s'agit du Ni

$$\Delta E : 1.8 \text{ eV} = 0.13 \text{ Ry}, \text{ pour le cuivre } x = -0.24 + 0.13 = -0.11$$

Si on prend la formule $\bar{e}$ libre pour Cu : $g = 0.02 \times 11.7 \times 13.6 \approx 3.2 \text{ et/at Ry}$
 en bon accord avec la courbe $\text{\AA}^3/\text{at} \quad \text{eV/Ry}$

$$\gamma = \frac{\pi^2}{3} g(E_F) k_B^2 : 80 \text{ J/m}^3 \text{K}^2$$

$$\chi_p : g(E_F) \mu_B^2 : 10 \cdot (\text{attention au unite' = T})$$

Aluminium

Approche utilisée = $\bar{e}$ presque libres, potentiel = interaction électrostatique entre électrons et ions. Les valeurs des gaps en bord de ZB sont $\sim 2/U_k$ les pointillés sont les paraboles $\bar{e}$ libres et on n'a pas $\sim 1 \text{ eV}$ en x si on n'avait qu'un seul électron E_f serait bien plus bas et couperait la bande dans la partie parabolique pour laquelle $\bar{e}$ libres OK.

En prenant $k_f = 3.1 Z^{1/3} / a = 3.1 \times \frac{4^{1/3}}{\pi} \times \frac{\pi}{a} \sim 1.2 \frac{\pi}{a}$

4 atome/cube cfc

et pour cette valeur de k_f E_f serait $\sim -8.5 \text{ eV}$ sur la courbe soit 3.3 eV au dessus de $E(\Gamma)$ et $E_f = 36.4 Z^{2/3} / a^2 \rightarrow a \sim 5 \text{ \AA}$

$$\partial E / \partial k = \frac{\hbar^2 k_f}{m^*} = \hbar v_f$$

$$v_f = 0.16 \times \partial E / \partial k \times 10^6 \text{ m/s} \quad [\text{eV. \AA}]$$

	a	b	c	d	e	
$\partial E / \partial k$	12	-4.5	-4.5	10.5	12.5	eV \AA
v_f	1.9	-0.7	-0.7	1.7	2.0	10^6 m/s

$\rightarrow \bar{v} \sim 1.5 \times 10^6 \text{ m/s}$ et pour $\bar{e}$ libre $Z = 3 \times 4 = 12$ $\bar{v} : 1.6 \text{ m/s}$

phonons : il s'agit des branches acoustiques $\omega = v k$ pour $k \rightarrow 0$

$$v = \text{vitesse du son} = \frac{\partial \omega}{\partial k} = \frac{2\pi \times 10^{13}}{2 \times 0.8 \times 10^{10}} \sim 4000 \text{ m/s} \quad (\text{en fait } 5000 \text{ m/s})$$

$$\frac{4}{3} \pi k_D^3 = (2\pi)^3 \times \frac{N}{V} \quad \frac{1}{V} \sim (4 \text{ \AA})^3 \rightarrow k_D = 1.5 \text{ \AA}^{-1}, \quad \omega_D = v k_D = 6.2 \times 10^{13} \text{ rad/s}$$

$$\text{et en fin } \theta_D = \hbar \omega_D / k_B = 440 \text{ K.}$$

$$\text{supraconductivité : } \xi = \frac{\hbar v_f}{5 k_B T_c} \sim 1.9 \text{ nm. et } \lambda = \left(\frac{m}{\mu_0 n e^2} \right)^{1/2} = 20 \text{ nm}$$

$\lambda / \xi \ll 1/\sqrt{2}$ il s'agit d'un supraconducteur de type I, comme tous les métaux simples (sauf Nb). Les types II sont caractérisés par l'existence d'un état mixte (vortex) séparant l'état Meissner ($B=0$) de l'état normal.

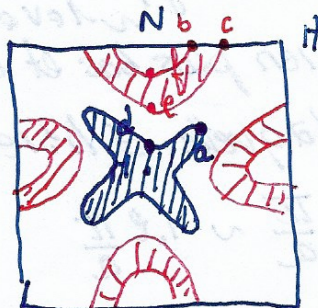
2013/2014

TiSe₂ $\rightarrow$ VOIR TD à la fin

2014/2015

Niobium

zB delimitées par plans médiateurs = points R pour lesquels l'interaction avec les ions est forte → ouverture gap
Seul 2 et 3 coupe EF et sont donc pertinentes: 2: trous en R et 3 = électrons en B, A et entre p et Γ, 1 et 1' n'ont pas de SF



Point B, bande #3

$$k_F \sim 0.1 \text{ HN} \sim 0.06 \frac{\pi}{a}$$

$$E_F \sim 0.4 \text{ eV}$$

$$m^* = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2E_F} = 2.5 \cdot 10^{-32} \text{ kg} = 0.03 m_e$$

$m \approx \frac{k_F^3}{2\pi^2}$ mais l'approximation isotrope n'est ici clairement pas appropriée

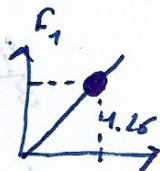
$$v_F = \frac{\hbar k_F}{m^*} = 2.3 \cdot 10^6 \text{ m/s}$$

la masse effective au point R est clairement très anisotrope.
la SF en "étoile" n'est pas circulaire et $k_{F,RH} \gg k_{F,RN}$
Pour la DOS → voir DM.

Supraconducteur à haute T_c

$k_F \sim 0.6 \text{ HN} \sim 0.6 \sqrt{2} \frac{\pi}{a} \sim 0.7 \cdot 10^{10} \text{ m}^{-1}$ → surface $\pi k_F^2 \sim 1.5 \cdot 10^{20}$
pour des $\bar{e}$ libres $k_F \sim \sqrt[2.5]{\frac{2.5}{a}} \sim 0.7 \cdot 10^{10} \text{ m}^{-1}$ OR et $(\frac{2\pi}{a}) \sim 2.6 \cdot 10^{10}$
environ 57% de la 1^{re} zB → en accord avec $z = 1.26$ ($z=1 \Rightarrow 50\%$)

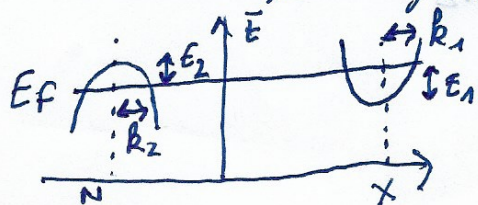
$$\text{à 2D } 2 \times \frac{\pi k_F^2}{(2\pi)^2} = \frac{z}{a^2} \rightarrow S_F = \pi k_F^2 = \frac{z}{2} \left(\frac{2\pi}{a}\right)^2 \quad F_1 = \frac{z}{2}$$



ODC = interaction $\bar{e}$ -phonons → reconstruction de la maille élémentaire z
le coût élastique de cette déformation est compensé par ouverture de gaps à EF
 a est $\times 3$ donc la 1^{re} zB est $3^2 = 9 \times$ plus petite

ici k_F (rayon des cercles noirs) $\approx 0.42 \times (\frac{2\pi}{a}) \Rightarrow F_1 = \pi \times (0.42)^2 \approx 0.55$
en bon accord avec $\frac{z}{2} = 0.55$.

après reconstruction la fraction pour les $\bar{e}$ (carré) est $\sim 13\%$ et pour les trous $\sim 4\% \times 2$: une grande partie de la SF est détruite par (1 poche) (2 poches)
l'ouverture des gaps. on notera ici que la SF reconstruite présente des poches d'électrons alors que le système est initialement dopé en trous.



$$E_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m^*} \rightarrow \begin{cases} e \sim 0.15 \pi/a : k_1 \\ z \sim 0.05 \pi/a : k_2 \end{cases}$$

$$m^* \rightarrow \begin{cases} e \sim 1.65 \\ t \sim 0.45 \Rightarrow \frac{E_1}{E_2} \sim 3 \end{cases}$$

A 2D $g(E_F) = \frac{\sqrt{2} m^*}{\sqrt{\pi} \hbar^2} (e/\text{Jm}^2)$ et $\gamma = \frac{\pi^2}{3} g(E_F) k_B^2 T / m^2 K^2$.

$\bar{e}$ $g(E_F) = 4.8 \cdot 10^{37} \text{ et/Jm}^2$ et $\gamma = \frac{\pi^2}{3} \times \frac{m^*}{\pi \hbar^2} \times a^2 \times N \times k_B^2$.

e $g(E_F) = 2.6 \cdot 10^{37} \text{ et/Jm}^2 = 2,6 \text{ mJ/molK}^2$
 $\gamma = 1.4 \text{ mJ/molK}^2$ } $\gamma_{\text{tot}} \sim 4.0 \text{ mJ/molK}^2$

Pour $z=1$ le système devrait être métallique (bande à moitié pleine) mais les interactions $e\bar{e}$ (correlations) le rendent isolant.

2015/2016

Carbone $\rightarrow$ voir TD à la fin.

2016/2017

KBoB₂O₃

ZB Brillouin = espaces délimités par plans médiateurs (plan de Bragg) pour lesquels interaction $\bar{e}$ -ions forte $\rightarrow$ gap.
 N° ZB si $\vec{r}$ coupe $N-1$ plan, réseau réciproque $\vec{a}_i \cdot \vec{r} = 2\pi s_i$
 Espace des $k \rightarrow \psi = \mu_k(r) e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$ (Bloch)

$E_F \sim 0.7 \text{ eV} \rightarrow k_F \sim 0.4 \frac{\pi}{a} \sim 0.3 \text{ \AA}^{-1} \rightarrow m^* \sim \hbar^2 k_F^2 / 2E_F \sim 0,5$

"Creux" pour $E \sim 1.8 \text{ eV} \rightarrow$ "gap nul" au point R
 "pic" pour $E \sim -0.3 \text{ eV} \rightarrow$ bande plate au point X
 Bo²⁺ et K⁺ lorsque x augmente le # d'électrons baisse $\rightarrow E_F \downarrow$
 "pincement" en X ($\Rightarrow$ proximité du plan de Bragg : interaction $\bar{e}$ /ion déforme la SF $\bar{e}$ libre $\rightarrow$ un gap est entrain de s'ouvrir
 E_F coupe la bande 1 $\rightarrow$ métal : $\bar{e}$ en Γ (ou trous en Γ , R pour $x=0$)

Gap nul en $\Gamma \rightarrow$ semi-métal ($E_F=0$)

au voisinage de $E=0$ les bandes sont

paraboliques, à 3D $g \propto \sqrt{E}$, $A = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m^*}{\hbar^2} \right)^{3/2}$

$A \sim \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{\Delta k^2}{\Delta E} \right)^{3/2}$ $\left. \begin{array}{l} \Delta E \sim 0.5 \text{ eV} \\ \Delta k \sim 0.5 \frac{\pi}{a} \end{array} \right\} \rightarrow A \sim 0.2 \text{ et/eV}^{3/2} \text{ maille } a = 4.3 \text{ \AA}$

$N_e = \int_{0=E_F} g(E) f(E) dE$ on peut prendre $g(E) = A\sqrt{E}$ car $f(E) \rightarrow 0$ $E \rightarrow \infty$
 $f(E) = 1/[e^{(E-\mu)/kT} + 1]$

$N_e = \int_{-\infty}^0 g(E) \left(1 - \frac{1}{e^{(E-\mu)/kT} + 1} \right) dE$ Δ bornes intégrales fausses dans l'énoncé.
 $\Rightarrow$ on a écrit ici $N_e = N_e(T=0) - N_e(T \neq 0)$
 en fait bas de la bande $\beta = 1/k_B T, \mu =$ potentiel chimique

$$N_t = \int_{-\infty}^0 g(\epsilon) \frac{e^{\beta(\epsilon-\mu)}}{e^{\beta(\epsilon-\mu)} + 1} d\epsilon = \int_0^{\infty} \frac{A\sqrt{\epsilon}}{e^{\beta\mu} e^{\beta\epsilon} + 1} d\epsilon = A[k_B T]^{1.5} \int_0^{\infty} \frac{\sqrt{x}}{e^{\beta\mu} e^{\beta\epsilon} + 1} dx$$

$\xrightarrow[\text{changement variable } \epsilon \equiv -\epsilon]{\text{changement variable } x \equiv \beta\epsilon}$

$$\text{et } N_e = \int_0^{\infty} \frac{A\sqrt{\epsilon} d\epsilon}{e^{-\beta\mu} e^{\beta\epsilon} + 1}$$

donc comme $N_t = N_e$ (neutralité) $e^{\beta\mu} = e^{-\beta\mu} \Rightarrow \mu = 0$.

le calcul de $\bar{\epsilon}$ est identique mais l'intégrale contient un terme ϵ

($\int \epsilon g(\epsilon) f(\epsilon) d\epsilon$) donc le changement variable conduit à $T^{2.5}$

E_0 est l'énergie moyenne à $T=0 \rightarrow C = \partial E / \partial T = [2.5B] T^{1.5}$

dans un métal classique on a $C = \gamma T$ mais ce calcul (Sommerfeld)

suppose que $g(\epsilon) \sim \text{cte}$ (sur une largeur kT) ce qui n'est pas le cas ici

supraconductivité = appariement des $\bar{e}$ ($k_1 - k_2$) médiée par l'interaction

Pour $x = 0.4$ $\epsilon \sim -0.7$ donc $\sim 2.8 \text{ eV}$ au dessus du bas de la bande

(voir figure) et $v_F = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \epsilon}{\partial k} \sim \frac{1}{\hbar} \times \frac{4 \text{ eV}}{10^{10} \text{ m}^{-1}} \sim 0.4 \cdot 10^6 \text{ m/s}$

pente locale

donc $\xi = \hbar v_F / 2\pi k_B T_c \sim 10^{-8} \text{ m}$ et $H_{c2} = \frac{\phi_0}{2\pi \xi^2} \sim 3T$

pour $H < H_{c2}$ (et $H > H_{c1}$) $\rightarrow$ existence d'un état mixte = vortex

$x=1$ la relation de dispersion donne $k_F \sim 0.3 \text{ \AA}^{-1}$

$n = k_F^3 / 3\pi^2 \approx 10^{27} \text{ e/m}^3$ pour une densité $\frac{1}{0.3} = 1.3 \cdot 10^{28} \rightarrow k$

soit $z \sim 1/13 \sim 7\%$

interactions $\bar{e}$ /ion de forme la SF $\rightarrow$ cubique $k_F \sim 0.4 \frac{\pi}{a}$

le volume de la SF est $(2k_F)^3$ et $z = \frac{2 \cdot \frac{(2k_F)^3}{(\frac{2\pi}{a})^3}}{\frac{(2\pi)^3}{a^3}} \approx 13\%$

↑ spin ← volume 1er ZB

2017/2018

Supraconducteurs organiques

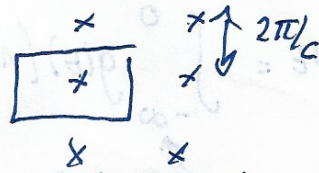
- conduction faible // a $\rightarrow$ liaisons fortes $\rightarrow$ dispersion faible
- plans bc = conducteurs, dispersion plus grande

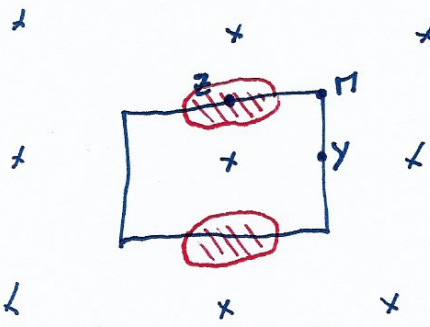
RR = rectangle $b^* = 2\pi/b$, $c^* = 2\pi/c$

1 bande s x 4 molécule $\Rightarrow$ 4 bandes

en l'absence d'ions $\text{Cu}(\text{NCS})_2^-$ il y aurait

$4 \times 2 = 8 \bar{e} \rightarrow$ toutes les bandes seraient pleines $\rightarrow$ ISOLANT





≡ trous autour de z = bande 1

• z $k_F \sim 0.4 \pi \sim 0.4 \frac{\pi}{a} \sim 0.1 \text{ \AA}^{-1}$ pour $E_F \sim 0.1 \text{ eV}$
 $m_c^* = \hbar^2 k_F^2 / 2 E_F \sim 3.4 \cdot 10^{-3} \sim 0.4 m_e$
 • z $k_F \sim 0.6 \pi \sim 0.6 \frac{\pi}{a} \sim 0.22 \text{ \AA}^{-1}$ $E_F \sim 0.1 \text{ eV}$
 $m_b^* \sim 2 m_e$

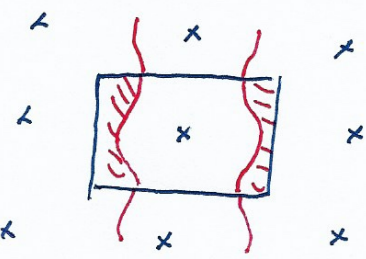
$\Delta N = 2 \times \frac{d^2 k}{(2\pi/L)} \rightarrow m = 2 \frac{\pi k_{Fc} k_{Fs}}{(2\pi)^2} \sim 3.5 \cdot 10^{13} \text{ tr/cm}^2$ (la SF = ellipse)

$E = \frac{\hbar^2 q^2}{2 m^*} (n + 1/2)$

l'Hamiltonien d'une particule sous champ $\Leftrightarrow$ oscillateur harmonique pour 10 oscillations ($\Delta n = 10$) $B: 10.7 \text{ T} \rightarrow 13 \text{ T}$

$S_F = \frac{2\pi q}{\hbar} \frac{\Delta n}{\Delta(1/B)} \sim 6 \cdot 10^{18} \text{ m}^{-2}$ $\frac{1}{B} 0.093 \rightarrow 0.077 \rightarrow \Delta(1/B) = 0.016 \text{ T}^{-1}$
 et $\pi k_F^3 k_{Fc} \sim 7 \cdot 10^{18} \text{ m}^{-2}$ OK.

Si $R = 0$ le système devient supraconducteur, il existe un champ critique H_{c2} qui augmente lorsque T diminue



≡ $\bar{e}$ le long que $c^* =$ bande 2

$S_F \sim$ lignes (faiblement ondulées)

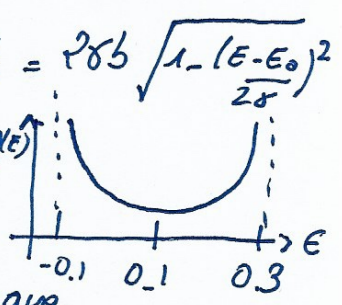
caractéristique d'un système 1D : $\Delta k_z = 0$
 $\Rightarrow \Delta z = 0$ donc transport selon y

les densités de trous et $\bar{e}$ sont égales car on a $6\bar{e}$ donc $\Leftrightarrow$ 3 bandes pleines

$E = E_0 + \hbar \delta \cos k_b$ largeur de la bande = $0.4 \text{ eV} = 4\delta$, $\delta = 0.1 \text{ eV}$
 $E_0 =$ milieu $\sim 0.1 \text{ eV}$

$g(E) dE = 2 \times \frac{d^2 k}{(2\pi/L)} \quad (2D) \quad \text{et} \quad dE/dk = 2\delta b \sin k_b = 2\delta b \sqrt{1 - \left(\frac{E-E_0}{2\delta}\right)^2}$
 donc $\rightarrow \frac{g(E)}{L} = 1 / [\pi \delta b \sqrt{1 - \left(\frac{E-E_0}{2\delta}\right)^2}]$

ODC = déformation du réseau par interaction $\bar{e}$ /phonons conduisant à l'ouverture d'un gap $\rightarrow$ diminution $E_{\text{electronique}}$
 il faut pour cela que $k_F =$ bord de ZB soit $k_F = \pi/b^*$



ici $k_F \sim 0.2 \pi \sim 0.2 \pi / b$ donc $b^* \sim 5b$.

2018/2019

Cet examen reprenait les problèmes posés en 2017/2018 (en partie) et 2014/2015 (en partie)

Remarque $\sigma = g(E_F) e^2 v_F^2 \tau \propto g(E_F) \propto g_0 + \delta g (\cos(2\pi E_F / \hbar \omega_c))$
 donc $R \propto \frac{1}{\sigma} \propto \frac{1}{g_0 + \delta g \cos(\dots)} \propto \frac{1}{g_0} (1 - \frac{\delta g}{g_0} \cos(\dots)) \propto R_0 + \delta R \cos(\dots)$



Ti : $[\text{Ar}] 3d^2 4s^2 \rightarrow 4\bar{e}$ (la note précise que les $2\bar{e}$ $4s^2$ sont transférés dans les bandes pld)

Se : $[\text{Ar} 3d^{10} 4s^2] 4p^4 \rightarrow 4\bar{e} \times 2$ car 2 atomes de Se

TOTAL = $12\bar{e}$ soit un "équivalent" de 6 bandes pleines
les trous dans les bandes 6 et 7 sont compensés par autant d'électrons dans bande 5

états 3d du Ti $\rightarrow$ 5 bandes

états 4p du Se $\rightarrow$ 3 bandes $\times$ 2 atomes

} 11 bandes au total (partiellement hybridées)

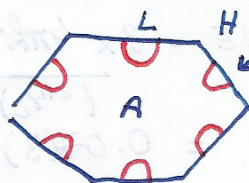
le système est bien métallique car le niveau de Fermi coupe ici 3 bandes (#5, 6 et 7). Les autres bandes sont non pertinentes car loin de E_F

bande 5 : électrons en L

bande 6 : trous en Γ/A

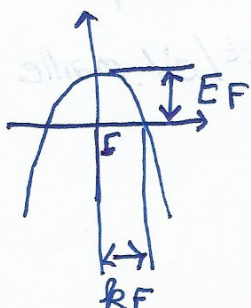
bande 7 : trous en Γ

- la bande 5 est étroite ($\sim 2 \text{ eV}$), elle pourra être décrite par le modèle des liaisons fortes (cohérent avec état atomique d) ou contraire la bande 7 est large ($> 3 \text{ eV}$ ici) et le modèle des $\bar{e}$ libre est probablement mieux adapté (ouverture des gaps en bords de zones de Brillouin)



surface de Fermi de la bande 5 "cercles" (approximation parabolique) autour des points L

la bande 7 ne coupe pas E_F dans le plan ALH $\rightarrow$ pas de surface de Fermi dans ce plan.



	bande 5	bande 7
k_F	$0.1 \text{ \AA}^{-1}$	$0.08 \text{ \AA}^{-1}$
E_F	0.06 eV	0.15 eV
m^*/m_e	0.8	0.16
e/cm^3	$0.5 \cdot 10^{20} (e)$	$0.2 \cdot 10^{20} (t)$
$v_F (\text{m/s})$	$1.6 \cdot 10^5$	$5.8 \cdot 10^5$

dans une approximation parabolique

$$m^* = \hbar^2 k_F^2 / 2E_F$$

$$N/L^3 = k_F^3 / 3\pi^2 \text{ (voir } \bar{e} \text{ libres)}$$

$$v_F = \hbar k_F / m^*$$

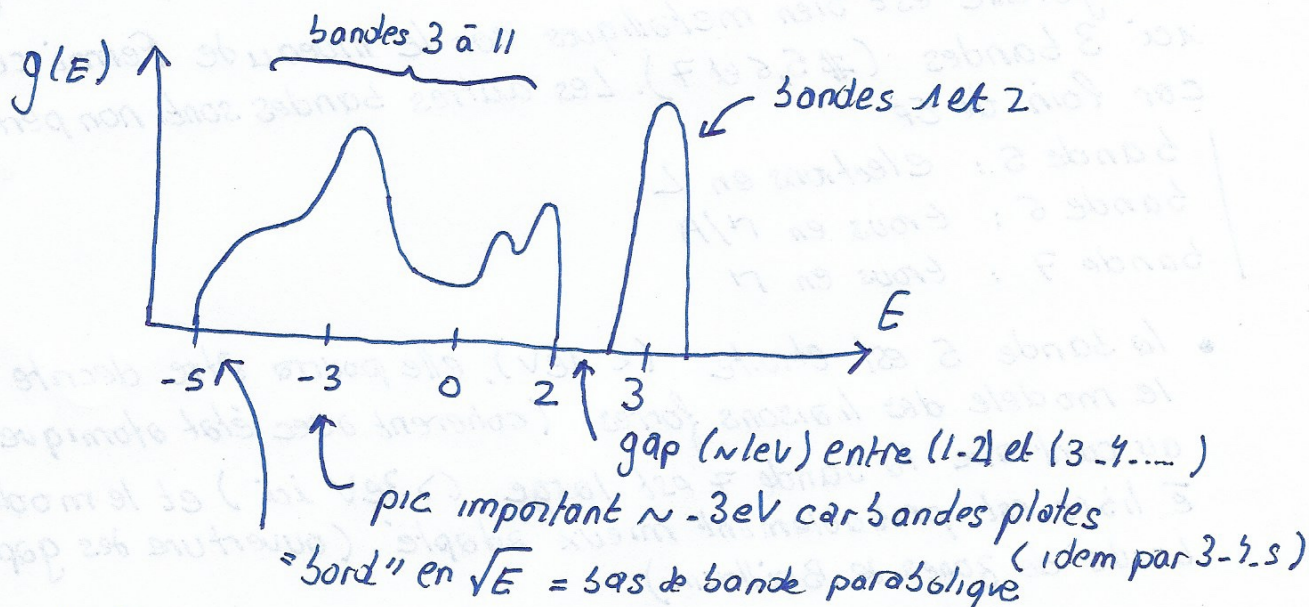
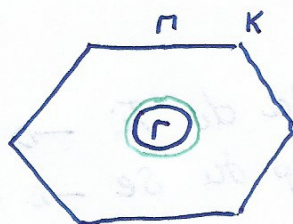
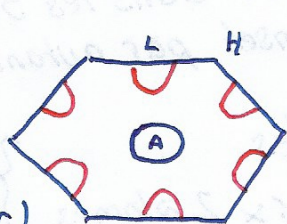
- bande 6 = $\bar{c}$ presque libres dans le plan Oxy ($\Gamma K \Gamma$) mais fortement liés le long de Oz (dispersion faible en ΓA)
largeur de la bande = 0.2 eV (le long de ΓA) = 4γ
donc $\gamma = 50 \text{ meV}$

En faisant un DL de $2\gamma \cos k_3 c = E - \gamma c^2 k_3^2$

on trouve $m^* = \frac{\hbar^2}{2\gamma c^2} = 2 \times m_e$

$= \frac{\hbar^2 k_3^2}{2m^*}$

- bande 5 (sphère autour de L)
- bande 6 (sphère autour de Γ)
- bande 7 (cylindre le long de $A\Gamma$)



Bande 5 : SF = sphère en L $\Rightarrow g(E) dE = 2 \times \frac{4\pi k^2 dk}{(2\pi/L)^3}$ (cf $\bar{c}$ libres)

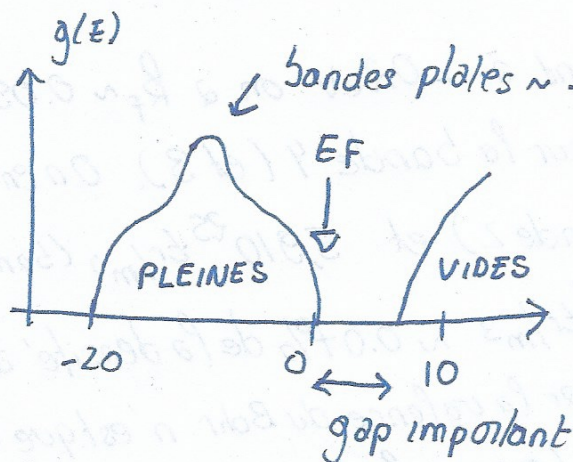
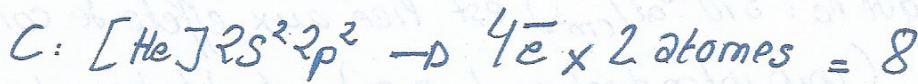
$$\frac{g(E)}{L^3} = \frac{m^* k_F}{\pi^2 \hbar^2} = 0.07(3) \text{ et/eV.maille}$$

bande 7 : SF = cylindre le long de $A\Gamma$ $g(E) dE = 2 \times \frac{2\pi k dk}{(2\pi/L)^2}$

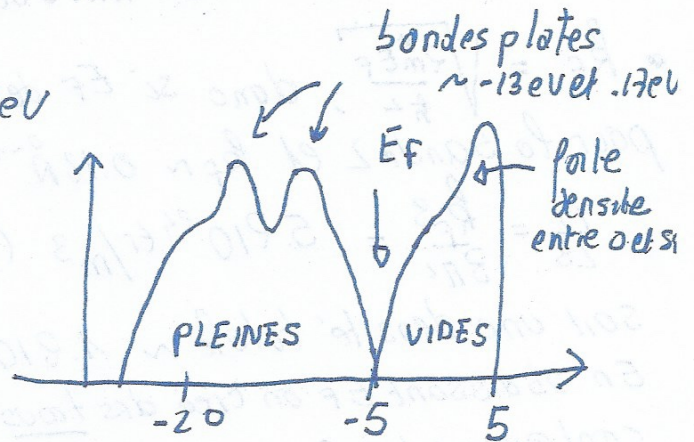
si on veut la densité par unité de volume maille élémentaire on divise par C

$$\frac{g(E)}{L^2 c} = \frac{m^*}{\pi \hbar^2 c} = 0.01(1) \text{ et/eV.maille}$$

Variétés allotropiques du Carbone

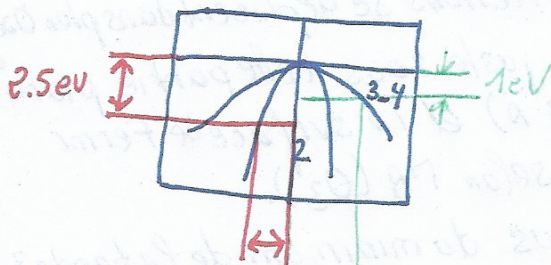


les $8e^-$ occupent les bandes 1 à 4, toutes ces bandes sont donc pleines et un gap les sépare des bandes supérieures $\rightarrow$ ISOLANT



les bandes 1 à 4 sont pleines et E_F se situe au niveau du "pincement" $\sim -6 \text{ eV}$. La densité d'états s'annule mais il n'y a pas de gap $\rightarrow$ SEMI-MÉTAL

- Pour le diamant la bande 1 se situe loin de E_F , elle est donc non pertinente, les 3 autres présentent un comportement parabolique au voisinage de Γ (trous), 3 et 4 sont équivalentes le long de ΓL , 2 et 3 sont équivalentes le long de ΓK .



3 n'est donc pas isotropes mais néanmoins cette anisotropie est à négliger car l'énoncé nous invite à supposer que les bandes sont isotropes

$$0.3 \Gamma L \sim 0.2 \Gamma X \sim 0.2 \frac{\pi}{a} = 0.19 \text{ \AA}^{-1} = \text{bande 2}$$

$$0.3 \Gamma K \sim 0.3 \Gamma X \sim 0.3 \frac{\pi}{a} = 0.27 \text{ \AA}^{-1} \text{ bande 4}$$

(on prendra $a = 3.56 \text{ \AA}$)

et l'approximation parabolique nous permet d'écrire

$$m^* = \hbar^2 k_F^2 / 2 E_F = \frac{(1.0 \cdot 10^{-34})^2 \times (0.19 \cdot 10^{10})^2}{2 \times (2.5 \times 1.6 \cdot 10^{-19})} = 0.45 \cdot 10^{-31} \text{ kg} = 0.05 m_e$$

et pour la bande 4 (et 3)

$$m^* = 2.3 \cdot 10^{-31} \text{ kg} = 0.25 m_e$$

- La transition métal-isolant évoquée dans l'énoncé (pour une concentration critique $n_c: 3 \cdot 10^{23} \text{ at/cm}^3$) est liée aux effets de corrélation = interaction $\bar{e}-\bar{e}$ (voir introduction du DRT) : c'est la transition de Mott
- $k_F = \sqrt{\frac{2m^*E_F}{\hbar^2}}$, donc si E_F descend à -0.2 eV on a $k_F \sim 0.05 \text{ \AA}^{-1}$ pour la bande 2 et $k_F \sim 0.1 \text{ \AA}^{-1}$ pour la bande 4 (et 3). On en déduit $\frac{N}{L^3} = \frac{k_F^3}{3\pi^2} = 5.2 \cdot 10^{24} \text{ tr/m}^3$ (bande 2) et $5.9 \cdot 10^{25} \text{ tr/m}^3$ (bande 3 et 4) soit une densité totale $\sim 1.2 \cdot 10^{26} \text{ tr/m}^3 \sim 0.07\%$ de la densité atomique. En abaissant E_F on crée des trous car la valence du Bohr n'est que de 3 contrairement à C pour lequel $Z=4$. Lorsque le taux de Bohr est important la structure électronique change (figure de droite). On conserve des trous en Γ mais il apparaît également des électrons en L. La surface de Fermi est alors constituée de poches d'électrons centrées sur ces points L ainsi qu'une poche (sphérique) de trous en Γ .
- Pour le graphite, on note que la relation de dispersion est parfaitement plate entre Γ et A (direction O_3) : la propagation est donc nulle le long de cette direction ($v = \frac{1}{\hbar} \partial E / \partial k = 0$) et les électrons se déplacent dans le plan O_1O_2 .
- Si $E_F = -1.3 \text{ eV}$, le niveau de Fermi se trouve juste sous cette partie plate (bande 1 et 2). On aurait des trous en Γ (et A) et la surface de Fermi serait un cylindre centré en Γ et aligné selon ΓA (O_3).
- Si $E_F = -1.8 \text{ eV}$: E_F se situe juste au dessus du minimum de la bande 2 en K (et H). On aurait cette fois des électrons dont la SF serait des cylindres centrés sur les points K ($\parallel O_3$). Idem pour la bande 1 mais avec des cylindres plus grands englobant K et Γ .
- Autour de H, $E(k)$ est LINEAIRE. $\partial^2 E / \partial k^2 = 0$ et la masse effective est donc indéterminée ($m^* = \pm \infty$). En fait comme pour les photons qui présentent eux aussi une relation de dispersion linéaire $E = \hbar ck$, cette masse est alors nulle.