

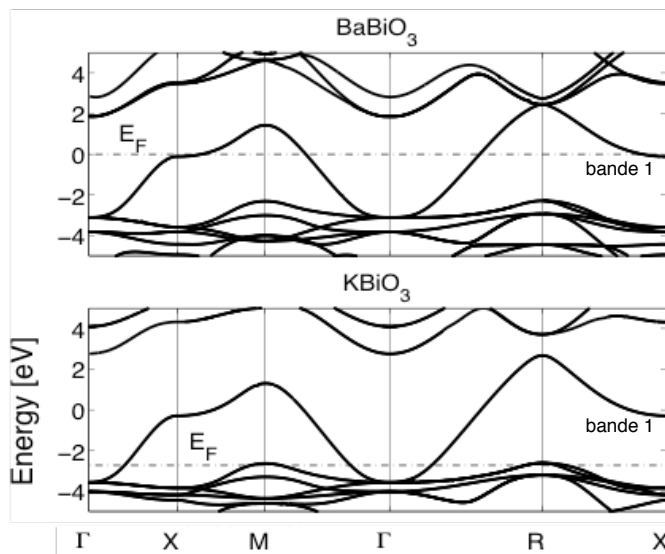
Examen de « Physique du Solide »

Jeudi 6 Janvier 2011

Tous documents autorisés

$$N=6.02.10^{23}, k_B=1.3810^{-23} \text{ (J/K)}, m_e=9.110^{-31} \text{ (kg)}, e=1.610^{-19} \text{ (C)}, h=6.610^{-34} \text{ (Js)}$$

Le système $K_xBa_{1-x}BiO_3$ cristallise dans une structure cubique (de paramètre $a = 4.28\text{\AA}$) : les Bi occupent les sommets du cube, les O les centres de faces et le centre du cube peut être occupé soit par un atome de K ou par un atome de Ba . Les relations de dispersion pour $x = 0$ et $x = 1$ sont représentées ci-dessous :



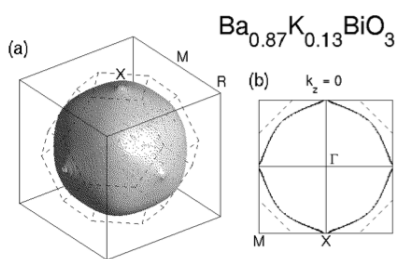
1. Le point Γ est ici le centre de la 1^{ère} zone de Brillouin, le point R le sommet du cube correspondant, le point X le centre de face et le point M le milieu d'arrête (voir schémas en Q5). Les énergies sont comptées à partir du *niveau de Fermi* pour $x = 0$ et dans la suite on supposera que l'on atteint le bas de la bande 1 pour $E \sim -3 \text{ eV}$ pour toutes les valeurs de x . Rappelez brièvement la signification (a) de la zone de Brillouin, et de l'espace réciproque (b) du niveau de Fermi et de la surface correspondante. Expliquez pourquoi le niveau de Fermi se décale vers le bas de E_F pour $x = 1$.

2. Ces deux composés sont-ils isolants ou conducteurs. Précisez la nature des porteurs (si le système est conducteur), et indiquez la présence d'éventuels « gaps » dans certaines directions (on précisera alors l'origine de ces éventuels gaps).

3. La figure ci-contre montre l'évolution de la densité d'états, $g(E)$, pour différentes valeurs de x (les différentes courbes ont été décalées verticalement et l'axe des ordonnées est donc ici totalement arbitraire). Tracez schématiquement l'évolution de cette densité d'états (par exemple pour $x=0$) jusqu'à -4 eV (a) en ne prenant en compte que la bande 1 (b) en incluant l'influence des autres bandes.

4. Expliquez qualitativement (en vous aidant des relations de dispersion présentées en Q1) l'origine (a) du « creux » pour $E \sim 1.5$ eV (b) du pic pour $E = -0.3$ eV.

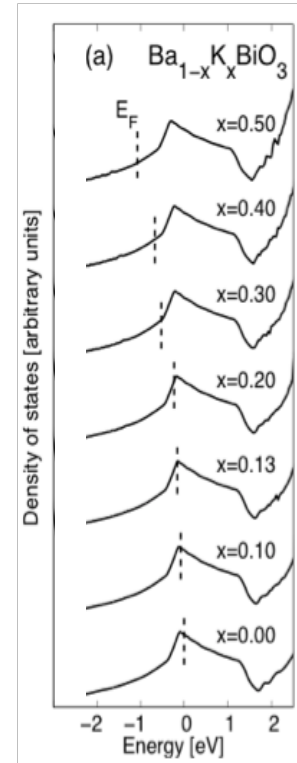
5. **Pour $x \sim 0.13$** , le niveau de Fermi est alors situé au niveau



de ce pic. Quelle conséquence cela aura-t-il sur (a) la conduction du système, (b) la chaleur spécifique électronique. La surface de Fermi est alors représentée ci-contre. Expliquez qualitativement l'origine du « pincement » au point X.

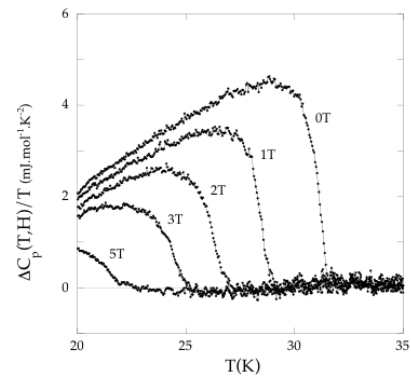
6. **Pour $x = 0$** , tracez schématiquement l'allure de cette surface de Fermi dans le plan $k_z = 0$ (voir le surface de Fermi pour $x=0.13$ ci-dessus). En fait pour cette composition, il apparaît une instabilité du type « onde de densité de charges »¹. Expliquez qualitativement ce qu'est une onde de densité de charges. Quelles en seront les conséquences sur la relation de dispersion et la conductivité.

7. **Pour $x > 0.37$** , le composé devient supraconducteur en dessous de 31K. En supposant que $g(E)$ puisse être décrit par un modèle d'électrons libres (avec une masse effective moyenne $m_{\text{eff}} \sim 0.6m_e$). Estimez la valeur de $g(E_F)$ (en états/eV.maille) pour cette valeur de x . En déduire la valeur du coefficient de Sommerfeld (en mJ/molK², pour une mole de $\text{K}_x\text{Ba}_{1-x}\text{BiO}_3$).



¹ liée à la valence du Bismuth qui ne peut prendre que les valeurs +III et +V alors que la formule chimique supposerait une valence +IV

8. Une mesure de chaleur spécifique conduit au résultat ci-contre (pour différentes valeurs du champ magnétique). ΔC_p correspond à la chaleur spécifique à laquelle a été soustraite la contribution des phonons ainsi que la contribution électronique des électrons dans l'état « normal » (non supraconducteur). Rappelez quelle est la dépendance en température de ces deux contributions. La température de Debye de ce composé est de l'ordre de 160K, estimez la valeur de ces deux contributions pour $T = 31K$, conclusion.



9. On peut montrer que l'amplitude du saut de chaleur spécifique à la transition (pour $H = 0T$) est de l'ordre de $\sim 2\gamma T_c$ (ou γ est le coefficient de Sommerfeld). En déduire la valeur de $g(E_F)$. La différence entre cette valeur et celle obtenue en Q7 peut-être reliée à une renormalisation de la masse effective lors du couplage électron - phonon qui conduit à la supraconductivité : $m^* = m_{eff} \cdot (1 + \lambda_{e-ph})$. Quelle est l'influence de cette renormalisation sur la valeur de E_F et sur celle de $g(E_F)$. En déduire la valeur de λ_{e-ph} .

10. Expliquez qualitativement l'origine du décalage en température de ΔC_p pour les valeurs non nulles du champ magnétique. Quel autre champ caractéristique existe-t-il dans un supraconducteur de type II.

11. **Pour $x=1$** , donnez la valeur de ΓX puis la valeur de k_F selon cette direction (pour la bande 1). En supposant que l'on puisse appliquer un modèle d'électrons libres, en déduire la valeur de la valence de ce composé (pour cette bande). Que note-t-on de particulier aux points M et R de la 1^{ère} zone de Brillouin.

12. De même donnez la valeur de k_F selon la direction ΓM . Que pensez-vous de l'hypothèse du modèle d'électrons libres. Comme pour la question Q6, tracez l'allure de la surface de Fermi dans le plan $k_z=0$.

13. Recalculez la valence en supposant que la surface de Fermi est carrée. Comment peut-on justifier (qualitativement) que cette surface puisse être carrée. En supposant que la relation de dispersion est parabolique (au voisinage du point Γ) déterminez la masse effective dans les directions ΓX et ΓM pour cette valeur de x .