

Master 1 de Physique, Université Grenoble - Alpes

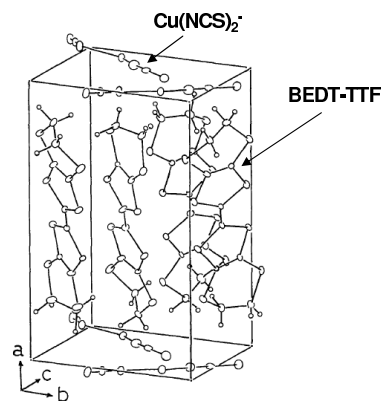
Examen de « Physique du Solide II »

Vendredi 18 Mai 2017 - 1 page A4/RV autorisée

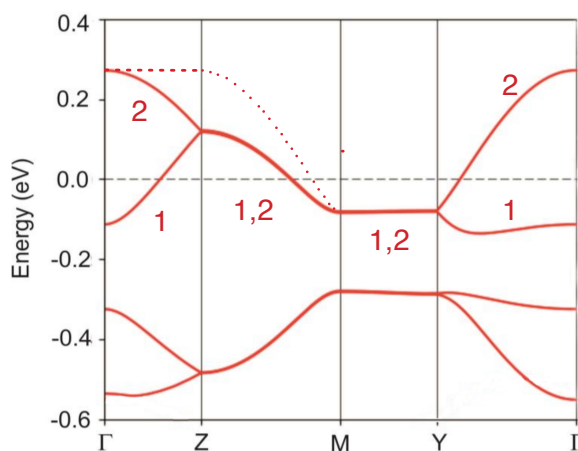
$$N=6.02.10^{23}, k_B=1.3810^{-23} \text{ (J/K)}, m_e=9.110^{-31} \text{ (kg)}, e=1.610^{-19} \text{ (C)}, h=6.610^{-34} \text{ (Js)}$$

On considère le composé organique $(\text{BEDT-TTF})_2\text{Cu}(\text{NCS})_2$ où (BEDT-TTF) est une molécule organique polycyclique appelée biséthylène-dithiolo-tetrathiafulvalène et $\text{Cu}(\text{NCS})_2^-$ un complexe linéaire. Le détail des formules chimiques n'intervient pas dans le problème.

Ce composé est un solide de structure **orthorhombique** (la maille est un parallélépipède rectangle, voir Figure 1, ci-contre) de paramètres de maille : $a = 16.2 \text{ \AA}$, $b = 8.4 \text{ \AA}$ et $c = 13.1 \text{ \AA}$. L'empilement des molécules organiques est dense dans les plans (b,c) mais les molécules sont plus éloignées suivant l'axe a . On peut alors considérer le cristal comme un empilement alterné suivant l'axe a de molécules organiques (assurant la conduction du système) séparées par des plans d'ions $\text{Cu}(\text{NCS})_2^-$. Le transport électronique suivant l'axe a est alors beaucoup plus faible que celui dans les directions b et c .



1. La dispersion des bandes va-t-elle être faible ou forte (distinguer les différentes directions et justifier brièvement votre réponse) ? Dans la suite, on négligera complètement le transport suivant l'axe a pour se ramener à un problème de structure de bandes **2D** (dans les plans (b,c)). Quelle est la symétrie du réseau réciproque et donner ses vecteurs de base c^* et b^* . Faire un schéma du réseau réciproque et construire la première zone de Brillouin.
2. La maille élémentaire 2D comporte **4 molécules de BEDT-TTF**, portant chacune une orbitale de type s . Combien de bandes ces orbitales vont-elles former ? Chaque molécule organique possède 2 électrons. La structure électronique est représentée sur la Figure 2 ci-contre. Les coordonnées des points du réseau réciproque sont $\Gamma=(0,0,0)$, $Y=(0,1,0)$, $Z=(0,0,1)$ et $M=(0,1,1)$? Quelle serait la position du niveau de Fermi s'il n'y avait pas de plans d'ions $\text{Cu}(\text{NCS})_2^-$. Ce système serait-il alors métallique ou isolant (justifier votre réponse) ?
3. Compte tenu des plans $\text{Cu}(\text{NCS})_2^-$, il y a un transfert partiel de charges des molécules organiques vers les complexes ioniques et les 4 molécules organiques cèdent 2 électrons aux complexes $\text{Cu}(\text{NCS})_2^-$. Le niveau Fermi correspond alors à l'énergie nulle sur la structure électronique ci-contre. Tracer schématiquement l'allure de la surface de Fermi correspondant à la bande 1 (ligne continue rouge) dans le plan ΓYZ . Donner une



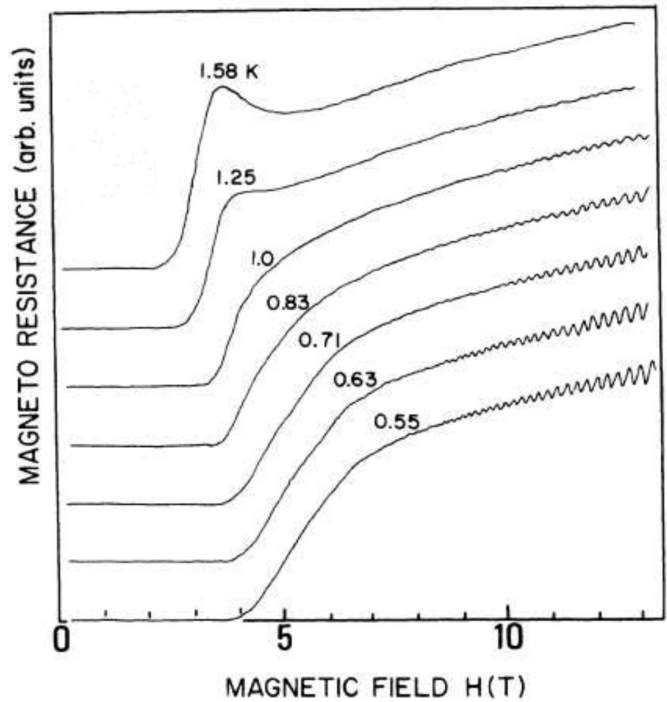
estimation de la masse effective dans les directions Oy et Oz ainsi que de la densité électronique pour cette bande.

4. La Figure 3 ci-contre présente l'évolution de la résistance en fonction du champ magnétique. Au dessus de $\sim 8\text{T}$ des oscillations sont clairement visibles (à basses températures). Sous champ, l'énergie peut s'écrire :

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

(on suppose ici que le système est isotrope). Justifier cette écriture. La période des oscillations (en $1/B$) est alors directement reliée à la taille (S_F) de la surface de Fermi (dans le plan (b,c)) :

$$\Delta(1/B) = \frac{2\pi q}{\hbar S_F} \Delta(n)$$



En déduire la valeur de S_F et vérifier que cette valeur est compatible avec la relation de dispersion (Figure 2 ci dessus).

5. Comme vous pouvez le constater, la résistance est nulle en dessous d'une valeur de B de plus en plus grande lorsque T diminue (les courbes obtenues aux différentes températures ont été arbitrairement décalées), expliquer ce comportement.
6. On s'intéresse désormais à la bande 2. Tracer schématiquement l'allure de la surface de Fermi correspondant à cette bande (2eme courbe continue rouge) dans le plan XYZ . Justifier que l'on peut considérer cette bande comme quasi-1D (préciser la direction dont on parle). Indiquer la nature des porteurs pour chacune des deux bandes. Que peut-on dire des densités surfaciques de trous et d'électrons dans les plans (b,c) ?
7. Si le système était parfaitement 1D, la relation de dispersion serait donnée par la courbe en pointillés de la figure 2. On pourrait alors écrire :

$$E = E_0 + 2\gamma \cos(kb)$$

Donner la densité d'états $g(E)$ (on calculera tout d'abord dE/dk et on précisera les valeurs de E_0 et γ) et tracer cette courbe.

8. Cette bande est susceptible de subir une instabilité du type onde de densité de charges. Rappeler brièvement l'origine de ce type d'instabilité et, dans le cas présent, quelle serait la nouvelle valeur du paramètre de maille.