Examen du 29/03/21

I) Structure du composé FeSn

1) réseau hexagonal

2) 3 atomes de Fer $Fe(\frac{1}{2},0,0)$; $Fe(0,\frac{1}{2},0)$; $Fe(\frac{1}{2},\frac{1}{2},0)$

3 atomes d'étain $Sn(0,0,0)$; $Sn(\frac{1}{3},\frac{2}{3},\frac{1}{2})$; $Sn(\frac{2}{3},\frac{1}{3},\frac{1}{2})$

3) $\|\vec{a}\| = \|\vec{b}\| = 2d$ $\quad \vec{a}(d, -d\sqrt{3}, 0)$ $\quad \vec{b}(d, d\sqrt{3}, 0)$

4) RR hexagonal

$$\left.\begin{aligned} \vec{a}^*\cdot\vec{a} &= a^*_x d - a^*_y d\sqrt{3} = 2\pi \\ \vec{a}^*\cdot\vec{b} &= a^*_x d + a^*_y d\sqrt{3} = 0 \end{aligned}\right\} \quad \vec{a}^*\left(\frac{\pi}{d}; -\frac{\pi}{d\sqrt{3}}; 0\right) ; \quad \vec{b}^*\left(\frac{\pi}{d}; \frac{\pi}{d\sqrt{3}}; 0\right); \vec{c}^* = \frac{2\pi}{c}\vec{z}$$

$$\|\vec{a}^*\| = \|b^*\| = 2\pi/d\sqrt{3}$$

5) $$G^2_{hkl} = h^2 a^{*2} + k^2 b^{*2} + 2hk\,\vec{a}^*\cdot\vec{b}^* + l^2 c^{*2} = \frac{4\pi^2}{3d^2}(h^2+k^2) + 2hk\frac{2\pi^2}{3d^2} + \frac{4\pi^2}{c^2}l^2$$

$$\Rightarrow \quad G_{hkl} = \frac{2\pi}{d\sqrt{3}}\sqrt{h^2+k^2+hk+\frac{3d^2}{c^2}l^2}$$

6) $$S_{hkl} = b_{Sn}\left(1 + e^{2\pi i\left(\frac{h}{3}+\frac{2k}{3}+\frac{l}{2}\right)} + e^{2\pi i\left(\frac{2h}{3}+\frac{k}{3}+\frac{l}{2}\right)}\right) + b_{Fe}\left(e^{i\pi h} + e^{i\pi k} + e^{i\pi(h+k)}\right)$$

$I_{hkl} \propto |S_{hkl}|^2$; pas d'extinctions systématiques

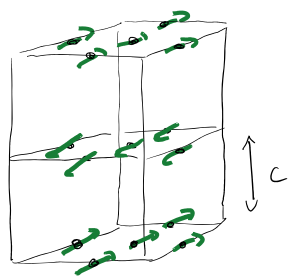
7) Diffraction ssi $\vec{q} = \vec{k}_f - \vec{k}_i$ le vecteur de diffusion $\in$ RR

$$\Rightarrow \quad q = \frac{4\pi}{\lambda}\sin\theta = G_{hkl} \quad \Rightarrow \quad \sin\theta = \frac{\lambda}{2d\sqrt{3}}\sqrt{h^2+k^2+hk+\frac{3d^2}{c^2}l^2}$$

8) $\sin\theta_{110} = \frac{\lambda}{2d}$; $\quad 2\theta_{110} \simeq 21.9°$ $\quad \Rightarrow \quad d \simeq 2.67$ Å

$\sin\theta_{002} = \frac{\lambda}{c}$; $\quad 2\theta_{002} \simeq 26.5°$ $\quad \Rightarrow \quad c \simeq 4.43$ Å

9) Structure ferromagnétique dans le plan $(\vec{a},\vec{b})$ (maille inchangée)
et antiferromagnétique selon $\vec{c}$ (doublement de la maille dans cette direct°)



II Susceptibilité Magnétique

1) Chaque atome de Fer a 4 premiers voisins équivalents dans le même plan (1er terme de $\mathcal{H}$) et 2 voisins equivalents juste au dessus et juste en dessous (2e terme).
En supposant un échange direct, J_{ij} décroit rapidement avec la distance Fe-Fe et on peut donc penser que $|J'| < |J|$.
(Les échanges avec les voisins encore plus éloignés seront encore plus faible et on les néglige.)

2) $$\mathcal{H}_i = \left(-\sum_j 2J_{ij}\vec{S}_i - \sum_k 2J_{ik}\vec{S}_k + g\mu_B\vec{B}_a\right)\cdot\vec{S}_i$$
$$= -\left(-g\mu_B\vec{S}_i\right)\cdot\left[\frac{1}{g\mu_B}\left(-2J\sum_j\vec{S}_i - 2J'\sum_k\vec{S}_k\right) + \vec{B}_a\right]$$
$$= -\vec{\mu}_i \cdot \vec{B}_i$$

3) $$\vec{B}_m = -\frac{4\langle\vec{S}\rangle}{g\mu_B}\left(2J + J'\right) + \vec{B}_a$$

4) $$\vec{B}_m = \frac{4\vec{M}}{ng^2\mu_B^2}\left(2J+J'\right) + \vec{B}_a \Rightarrow \lambda = \frac{4(2J+J')}{ng^2\mu_B^2}$$

5) M_S est l'aimantation maximale ("aimantation à saturation") atteinte lorsque tous les moments sont parfaitement alignés $\Rightarrow M_S = n \times \underbrace{g\mu_B S}_{\mu}$

6) $$M \simeq n\frac{S+1}{3S} \times \frac{g^2\mu_B^2 S^2}{k_B T}\left(B_a + \lambda M\right) = C H_a + \frac{\lambda C}{\mu_0} M \quad \text{avec } C = \mu_0 \frac{g^2\mu_B^2 S(S+1)}{3k_B}$$
$$\Rightarrow M = \chi H_a = \frac{C}{T-\theta} H_a \; ; \quad \theta = \frac{C\lambda}{\mu_0} = \frac{4(2J+J')S(S+1)}{3k_B}$$

7) $\theta = 173\,K > 0 \Rightarrow 2J + J' > 0 \Rightarrow$ l'interaction totale est de nature ferromagnétique

8) $J' < 0$ (AF) et $J > 0$ (F) (sinon $\theta < 0$ car $|J| > |J'|$)
correspond bien à une structure magnétique F dans le plan, AF de plan à plan.

III Structure de bandes

1) $\psi_{\vec k}(\vec r + \vec R_{mn}) = e^{i\vec k.\vec R_{mn}}\, \psi_{\vec k}(\vec r)$ $\quad \forall\, \vec R_{mn} \in$ Reseau Direct

$\rightarrow \alpha_{mn} = e^{i\vec k.\vec R_{mn}}\alpha_{00}$; $\beta_{mn} = e^{i\vec k.\vec R_{mn}}\beta_{00}$; $\gamma_{mn} = e^{i\vec k.\vec R_{mn}}\gamma_{00}$

2) $H|\psi_{\vec k}\rangle = \varepsilon\, \psi_{\vec k}$; en projetant successivement sur ϕ_{00}^A, ϕ_{00}^B et ϕ_{00}^C :

$$\begin{cases} -t(\beta_{00}+\beta_{-1,0}) - t(\gamma_{00}+\gamma_{-1-1}) = -t(1+e^{-i\vec k.\vec a})\beta_{00} - t(1+e^{-i\vec k.(\vec a+\vec b)})\gamma_{00} = \varepsilon\alpha_{00} \\ -t(\alpha_{00}+\alpha_{10}) - t(\gamma_{00}+\gamma_{0-1}) = -t(1+e^{i\vec k.\vec a})\alpha_{00} - t(1+e^{-i\vec k.\vec b})\gamma_{00} = \varepsilon\beta_{00} \\ -t(\alpha_{00}+\alpha_{11}) - t(\beta_{00}+\beta_{01}) = -t(1+e^{i\vec k.(\vec a+\vec b)})\alpha_{00} - t(1+e^{i\vec k.\vec b})\beta_{00} = \varepsilon\gamma_{00} \end{cases}$$

solution non nulle ssi le déterminant s'annule

$$\begin{vmatrix} \varepsilon' & 1+e^{-i\vec k.a} & 1+e^{-i\vec k.(\vec a+\vec b)} \\ 1+e^{i\vec k.\vec a} & \varepsilon' & 1+e^{-i\vec k.\vec b} \\ 1+e^{i\vec k.(\vec a+\vec b)} & 1+e^{i\vec k.\vec b} & \varepsilon' \end{vmatrix} = 0$$

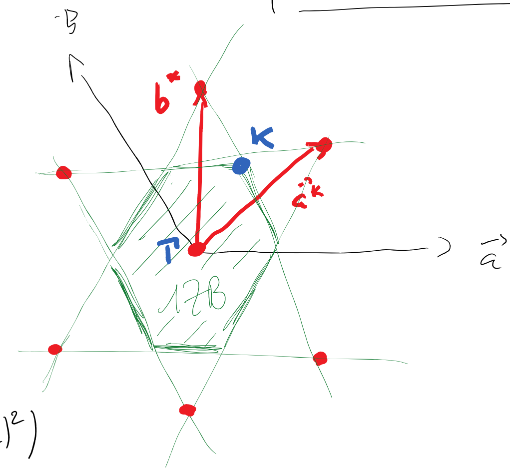
$p_1 = 1+e^{-i\vec k.\vec a}$

$p_2 = 1+e^{-i\vec k.(\vec a+\vec b)}$

$p_3 = 1+e^{-i\vec k.\vec b}$

3) $\vec a = (d, -d\sqrt3, 0)$; $\vec b\,(d, d\sqrt3, 0)$

$\vec a^* = \left(\frac{\pi}{d}, -\frac{\pi}{d\sqrt3}, 0\right)$; $\vec b^*\left(\frac{\pi}{d}, \frac{\pi}{d\sqrt3}, 0\right)$



4) Pour $\vec k \simeq \vec 0$ (point Γ)

$$\vec p(\vec k) \simeq 4 - \frac{(\vec k.\vec a)^2}{2} - \frac{(\vec k.\vec b)^2}{2} - \frac{[\vec k.(\vec a+\vec b)]^2}{2}$$

$$\simeq 4 - \frac{d^2}{2}\left((k_x - k_y\sqrt3)^2 + (k_x+k_y\sqrt3)^2 + (2k_x)^2\right)$$

$$\simeq 4 - \frac{d^2}{2}\left(2k_x^2 + 2\times 3k_y^2 + 4k_x^2\right)$$

$$\simeq 4 - 3d^2k^2$$

$$\Rightarrow \varepsilon_{1,2}(\vec k) \simeq -t\left[1 \pm \sqrt{9 - 6d^2k^2}\right]$$

$$\simeq -t\left[1 \pm 3\sqrt{1 - 2d^2k^2/3}\right]$$

$$\begin{cases} \varepsilon_1(\vec k) \simeq -4t + t d^2k^2 \\ \varepsilon_2(\vec k) \simeq 2t - t^2d^2k^2 \end{cases}$$

$\Rightarrow$ bandes isotropes, paraboliques près de Γ avec $m_1^* = \frac{\hbar^2}{2td^2}$; $m_2^* = -\frac{\hbar^2}{2td^2}$

5) $-2 < p(\vec k) \leq 4 \quad \Rightarrow \quad \varepsilon_1 \geq -4t$ et $\varepsilon_2 \leq 2t$

$\Rightarrow 0 \leq \sqrt{1+2p(\vec k)} \leq 3$ $\qquad$ $\varepsilon_1(\vec k=0)$ et $\varepsilon_2(\vec k=0)$ sont bien des extrema

6) $\rho_i(\varepsilon)d\varepsilon = 2\pi k\,dk \times \underbrace{\frac{2_{\uparrow\downarrow}}{(2\pi)^2}}_{g(\vec{k})} = \frac{k\,dk}{\pi} \Rightarrow \rho_i(\varepsilon) = \frac{m_i^*}{\pi\hbar^2 k}k \Rightarrow \rho_i(\varepsilon) = \frac{m_i^*}{\pi\hbar^2}$

7) schéma

$$p(\vec{\Gamma K}) = 1 + \cos\left(\frac{2\pi}{3}\right) + \cos\left(\frac{2\pi}{3}\right) + \cos\left(\frac{4\pi}{3}\right) = -\frac{1}{2}$$

$$\Rightarrow \varepsilon_1(\vec{\Gamma K}) = \varepsilon_2(\vec{\Gamma K}) = -t$$

et $\varepsilon_1(\vec{k}) \leq -t$ et $\varepsilon_2(\vec{k}) \geq -t$ d'après leurs expressions ; elles sont donc toutes 2 extrémales en Γ

avec la question 5) $\Rightarrow$ largeur de la bande $\varepsilon_1 = -t-(-4t) = 3t$

" " " $\varepsilon_2 = +2t - (-t) = 3t$

8) $\vec{k} = \frac{\vec{a}^* + \vec{b}^*}{3} + \varepsilon_x \vec{x} + \varepsilon_y \vec{y}$

$$p(\vec{k}) = 1 + \cos\left(\frac{2\pi}{3} + d\varepsilon_x - d\sqrt{3}\,\varepsilon_y\right) + \cos\left(\frac{2\pi}{3} + d\varepsilon_x + d\sqrt{3}\,\varepsilon_y\right) + \cos\left(\frac{4\pi}{3} + 2d\varepsilon_x\right)$$

$$= 1 - \frac{1}{2}\left[1 - \frac{d^2}{2}(\varepsilon_x - \varepsilon_y\sqrt{3})^2\right] - d(\varepsilon_x - \sqrt{3}\,\varepsilon_y)\frac{\sqrt{3}}{2} -$$

$$- \frac{1}{2}\left[1 - \frac{d^2}{2}(\varepsilon_x + \varepsilon_y\sqrt{3})^2\right] - d(\varepsilon_x + \sqrt{3}\,\varepsilon_y)\frac{\sqrt{3}}{2}$$

$$- \frac{1}{2}\left[1 - 2d^2\varepsilon_x^2\right] + 2d\varepsilon_x\frac{\sqrt{3}}{2}$$

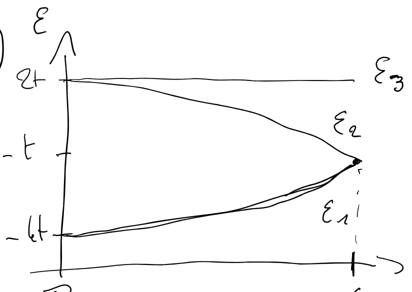
$$= -\frac{1}{2} + \frac{d^2}{4}(2\varepsilon_x^2 + 6\varepsilon_y^2 + 4\varepsilon_x^2)$$

$$p(\vec{k}) \simeq -\frac{1}{2} + \frac{3d^2}{2}\|\vec{k} - \vec{\Gamma K}\|^2 \Rightarrow \sqrt{1 + 2p(\vec{k})} \simeq d\sqrt{3}\,\|\vec{k} - \vec{\Gamma K}\|$$

$$\Rightarrow \begin{cases} \varepsilon_1(\vec{k}) \simeq -t - dt\sqrt{3}\,\|\vec{k} - \vec{\Gamma K}\| \\ \varepsilon_2(\vec{k}) \simeq -t + dt\sqrt{3}\,\|\vec{k} - \vec{\Gamma K}\| \end{cases} \qquad \underline{v_F = dt\sqrt{3}} \quad \simeq \text{graphène}$$

9) largeur bande 3 $= 0$; $\rho_3(\varepsilon) \simeq \delta(\varepsilon - 2t)$; états localisés dans l'espace direct (pas de dispersion en $\vec{k}$)

10)



11) N atomes $\Rightarrow$ N OA $\Rightarrow$ 2N états électroniques

$\Rightarrow \frac{2N}{3}$ états / bande

12) N électrons dans 2N états $= 1/2$ remplissage

$\Rightarrow \varepsilon_1$ pleine, ε_2 demi-remplie $\left(\frac{2N}{3} + \frac{N}{3}\right)$

ε_F au milieu de la bande 2 – Métal

13) On détecte l'énergie et le vecteur d'onde des électrons photoémis $\Rightarrow \varepsilon(\vec{k})$

on voit ε_2 et ε_3 proches de Γ

$\varepsilon_2(k=0.5) \simeq 0.6$ eV $\Rightarrow t \sim 0.17$ eV