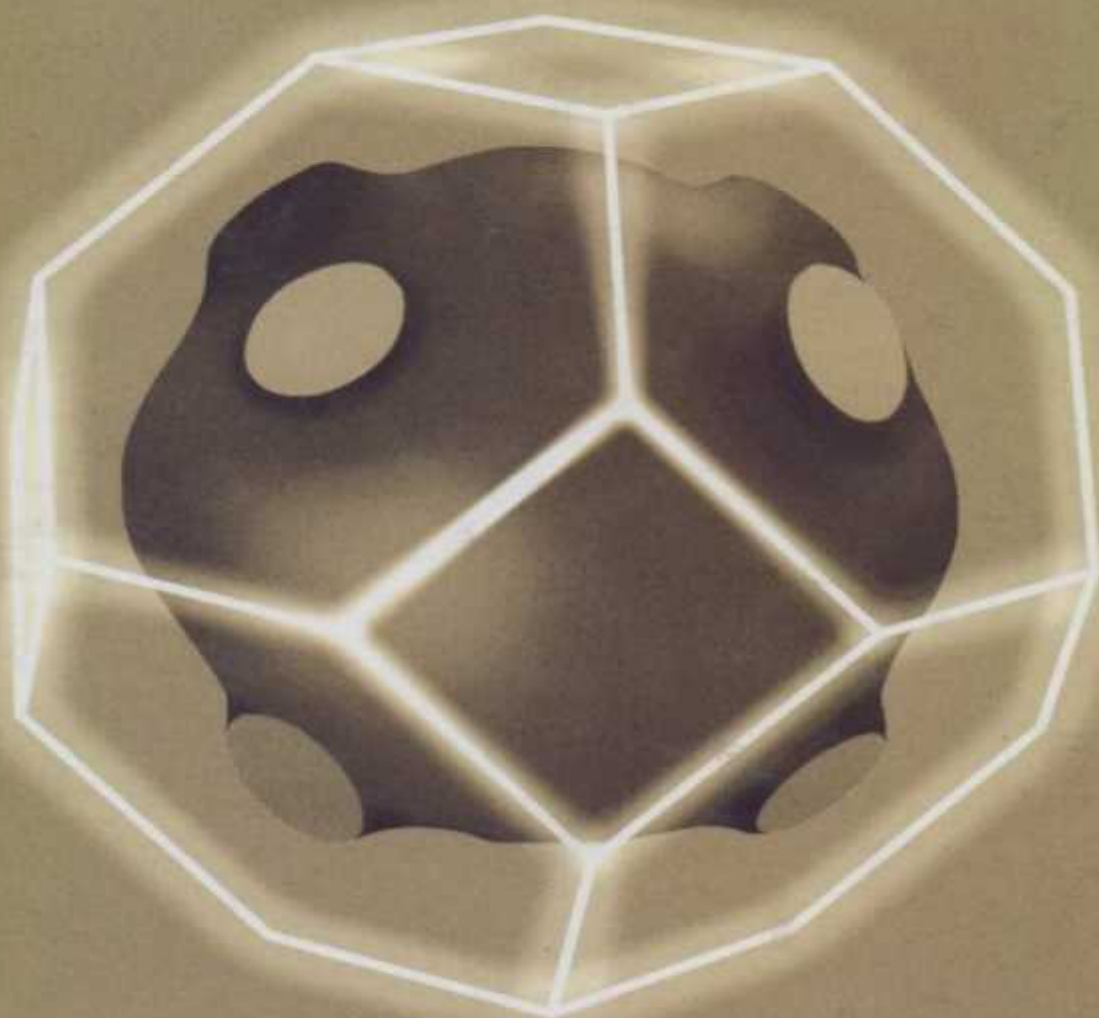




PHYSIQUE DES SOLIDES

V. Ashcroft et N. David Mermin

Traduction par FRANCK BIET ET HAMID KACHKACHI

©
P
ES

Table des matières

Préface	xv
Tables importantes	xxi
1 Théorie de Drude des métaux	1
1.1 Hypothèses fondamentales du modèle de Drude	2
1.2 Conductivité électrique d'un métal en courant continu	7
1.3 Effet Hall et magnétorésistance	13
1.4 Conductivité électrique en courant alternatif	18
1.5 Conductivité thermique d'un métal	23
1.6 Problèmes	30
2 Théorie de Sommerfeld des métaux	33
2.1 Propriétés de l'état fondamental d'un gaz d'électrons	35
2.2 Démonstration de la distribution de Fermi-Dirac	45
2.3 Propriétés thermiques du gaz d'électrons libres	48
2.4 Théorie de Sommerfeld de la conduction dans les métaux	56
2.5 Problèmes	62
3 Défauts du modèle des électrons libres	65
3.1 Difficultés du modèle des électrons libres	65
3.2 Récapitulation des hypothèses de base	68
4 Réseaux cristallins	73
4.1 Réseaux de Bravais	74
4.2 Réseaux infinis et cristaux finis	76
4.3 Illustrations supplémentaires et exemples importants	77
4.4 Note sur l'usage	80
4.5 Nombre de coordination	82
4.6 Maille primitive	82
4.7 Maille primitive ; maille conventionnelle	85
4.8 Maille primitive de Wigner-Seitz	85
4.9 Structure cristalline ; réseau à motif	87
4.10 Exemples importants de structures cristallines et de réseaux à motif	89
4.11 Autres aspects des réseaux cristallins	97
4.12 Problèmes	97

5	Le réseau réciproque	99
5.1	Définition du réseau réciproque	99
5.2	Le réseau réciproque est un réseau de Bravais	100
5.3	Réseau réciproque du réseau réciproque	101
5.4	Exemples importants	102
5.5	Volume de la maille primitive du réseau réciproque	103
5.6	Première zone de Brillouin	103
5.7	Plans réticulaires	104
5.8	Indices de Miller des plans réticulaires	106
5.9	Quelques conventions pour spécifier les direction	107
5.10	Problèmes	109
6	Détermination des structures cristallines...	111
6.1	Formulation de Bragg de la diffraction des rayons X par un cristal	112
6.2	Formulation de von Laue de la diffraction des rayons X par un cristal	113
6.3	Équivalence des formulations de Bragg et de von Laue	116
6.4	Géométries expérimentales suggérées par la condition de Laue	118
6.4.1	Construction d'Ewald	118
6.5	Diffraction par un réseau monoatomique à motif ; facteur de structure géométrique	123
6.6	Diffraction par un cristal polyatomique ; facteur de forme atomique	127
6.7	Problèmes	128
7	Classification des réseaux de Bravais...	131
7.1	Classification des réseaux de Bravais	132
7.2	Groupes d'espace et groupes ponctuels cristallographiques	140
7.3	Exemples pris parmi les éléments	149
7.4	Problèmes	151
8	Niveaux électroniques dans un potentiel périodique	155
8.1	Potentiel périodique	156
8.2	Théorème de Bloch	158
8.3	Première démonstration du théorème de Bloch	158
8.4	Conditions aux limites de Born-von Karman	160
8.5	Deuxième démonstration du théorème de Bloch	162
8.6	Remarques générales sur le théorème de Bloch	164
8.7	Surface de Fermi	167
8.8	Densité de niveaux	169
8.9	Problèmes	173

9 Électrons dans un potentiel périodique faible	179
9.1 Équation de Schrödinger pour un potentiel faible	180
9.2 Niveaux d'énergie près d'un seul plan de Bragg	185
9.3 Bandes d'énergie à une dimension	189
9.4 Courbes énergie-vecteur d'onde à trois dimensions	190
9.5 Bande interdite	191
9.6 Zones de Brillouin	192
9.7 Facteur de structure géométrique	196
9.8 Couplage spin-orbite	199
9.9 Problèmes	201
10 Méthode des liaisons fortes	207
10.1 Formulation générale	208
10.2 Bandes s de liaisons fortes	214
10.3 Remarques générales sur la méthode des liaisons fortes	217
10.4 Fonctions de Wannier	221
10.5 Problèmes	223
11 Autres méthodes pour calculer la structure de bandes	227
11.1 Caractéristiques générales des fonctions d'onde de la bande de valence	230
11.2 Méthode cellulaire	232
11.3 Méthode des ondes planes augmentées (OPA)	238
11.4 Méthode des fonctions de Green de Korringa, Kohn et Rostoker (KKR)	241
11.5 Méthode des ondes planes orthogonalisées (OPO)	245
11.6 Pseudopotentiel	248
11.7 Méthodes combinées	250
11.8 Problèmes	250
12 Modèle semi-classique de la dynamique des électrons	253
12.1 Description du modèle semi-classique	258
12.2 Commentaires et restrictions	259
12.3 Conséquences des équations du mouvement semi-classiques	263
12.4 Problèmes	285
13 Théorie semi-classique de la conduction dans les métaux	289
13.1 Approximation du temps de relaxation	290
13.2 Calcul de la fonction de distribution hors équilibre	291
13.3 Simplification de la fonction de distribution hors équilibre dans des cas particuliers	295
13.4 Conductivité électrique en courant continu	296
13.5 Conductivité électrique en courant alternatif	299
13.6 Conductivité thermique	300
13.7 Pouvoir thermoélectrique	304

13.8	Autres effets thermoélectriques	307
13.9	Conductivité semi-classique dans un champ magnétique uni- forme	308
13.10	Problèmes	308
14	Mesure de la surface de Fermi	313
14.1	Effet de Haas-van Alphen	314
14.2	Électrons libres dans un champ magnétique uniforme	319
14.3	Niveaux des électrons de Bloch dans un champ magnétique uniforme	321
14.4	Origine du phénomène oscillatoire	322
14.5	Effet du spin des électrons sur le phénomène oscillatoire	324
14.6	Autres méthodes d'exploration de la surface de Fermi	325
14.7	Problèmes	333
15	Structure de bandes de quelques métaux	335
15.1	Métaux monovalents	336
15.2	Métaux divalents	353
15.3	Métaux trivalents	355
15.4	Métaux tétravalents	359
15.5	Semi-métaux	360
15.6	Métaux de transition	362
15.7	Métaux de terres rares	365
15.8	Alliages	366
15.9	Problèmes	369
16	Au-delà de l'approximation du temps de relaxation	371
16.1	Sources de la diffusion des électrons	373
16.2	Probabilité de diffusion et temps de relaxation	374
16.3	Taux de variation de la fonction de distribution due aux collisions	375
16.4	Détermination de la fonction de distribution : équation de Boltzmann	377
16.5	Diffusion par des impuretés	380
16.6	Loi de Wiedemann-Franz	382
16.7	Règle de Matthiessen	384
16.8	Diffusion dans des matériaux isotropes	385
16.9	Problèmes	388
17	Au-delà de l'approximation des électrons indépendants	391
17.1	Échange : approximation de Hartree-Fock	394
17.2	Équations de Hartree-Fock pour des électrons libres	397
17.3	Effet d'écran (général)	401
17.4	Théorie de l'effet d'écran de Thomas-Fermi	404
17.5	Théorie de l'effet d'écran de Lindhard	407

22 Théorie classique du cristal harmonique	501
22.1 L'approximation harmonique	504
22.2 Approximation adiabatique	505
22.3 Chaleur spécifique d'un cristal classique	506
22.4 Modes normaux d'un réseau de Bravais monoatomique unidimensionnel	511
22.5 Modes normaux d'un réseau unidimensionnel à motif	515
22.6 Modes normaux d'un réseau de Bravais monoatomique tridimensionnel	520
22.7 Modes normaux d'un réseau tridimensionnel à motif	526
22.8 Relation avec la théorie de l'élasticité	527
22.9 Problèmes	532
23 Théorie quantique du cristal harmonique	537
23.1 Modes normaux et phonons	538
23.2 Forme générale de la chaleur spécifique du réseau	539
23.3 Chaleur spécifique à haute température	541
23.4 Chaleur spécifique à basse température	542
23.5 Chaleur spécifique aux températures intermédiaires : modèles de Debye et d'Einstein	544
23.6 Comparaison de la chaleur spécifique du réseau et de la chaleur spécifique électronique	551
23.7 Densité de modes normaux (densité de niveaux de phonons)	552
23.8 Analogie avec la théorie du rayonnement du corps noir	554
23.9 Problèmes	556
24 Mesure des lois de dispersion des phonons	559
24.1 Diffusion des neutrons par un cristal	560
24.2 Diffusion d'un rayonnement électromagnétique par un cristal	572
24.3 Représentation ondulatoire de l'interaction du rayonnement avec les vibrations du réseau	575
24.4 Problèmes	579
25 Effets anharmoniques dans les cristaux	581
25.1 Aspects généraux des théories anharmoniques	583
25.2 Équation d'état et dilatation thermique d'un cristal	584
25.3 Dilatation thermique ; paramètre de Grüneisen	587
25.4 Dilatation thermique des métaux	589
25.5 Conductivité thermique du réseau : approche générale	591
25.6 Conductivité thermique du réseau : théorie cinétique élémentaire	595
25.7 Second son	604
25.8 Problèmes	607

26 Phonons dans les métaux	611
26.1 Théorie élémentaire de la loi de dispersion des phonons	612
26.2 Anomalies de Kohn	615
26.3 Constante diélectrique d'un métal	615
26.4 Interaction électron-électron effective	618
26.5 Contribution des phonons à la relation énergie-vecteur d'onde électronique	620
26.6 Interaction électron-phonon	622
26.7 Résistivité électrique dépendante de la température des métaux	624
26.8 Modification de la loi en T^5 par les processus umklapp	628
26.9 Trainage de phonons	630
26.10 Problèmes	631
27 Propriétés diélectriques des isolants	635
27.1 Équations de Maxwell macroscopiques de l'électrostatique	636
27.2 Théorie du champ local	642
27.3 Théorie de la polarisabilité	646
27.4 Isolants covalents	657
27.5 Pyroélectricité	659
27.6 Ferroélectricité	662
27.7 Problèmes	665
28 Semi-conducteurs homogènes	669
28.1 Exemples de semi-conducteurs	673
28.2 Structures de bandes typiques des semi-conducteurs	677
28.3 Résonance cyclotron	679
28.4 Nombre de porteurs de charge à l'équilibre thermique	682
28.5 Niveaux d'impuretés	688
28.6 Population des niveaux d'impuretés à l'équilibre thermique	692
28.7 Densités de porteurs de charge à l'équilibre thermique des semi-conducteurs impurs	695
28.8 Bande de conduction due aux impuretés	697
28.9 Théorie du transport dans les semi-conducteurs non dégénérés	698
28.10 Problèmes	699
29 Semi-conducteurs hétérogènes	703
29.1 Modèle semi-classique	705
29.2 Jonction $p-n$ à l'équilibre	706
29.3 Schéma élémentaire de redressement par une jonction $p-n$	713
29.4 Aspects physiques généraux du cas hors équilibre	716
29.5 Théorie plus détaillée de la jonction $p-n$ hors équilibre	723
29.6 Problèmes	729

30 Défauts dans les cristaux	735
30.1 Défauts ponctuels : aspects thermodynamiques généraux . . .	736
30.2 Défauts et équilibre thermodynamique	740
30.3 Défauts ponctuels : conductivité électrique des cristaux ioniques	742
30.4 Centres colorés	743
30.5 Polarons	748
30.6 Excitons	749
30.7 Défauts linéaires : dislocations	752
30.8 Résistance mécanique des cristaux	757
30.9 Durcissement	759
30.10 Dislocations et croissance des cristaux	759
30.11 Whiskers	760
30.12 Observations des dislocations et d'autres défauts	761
30.13 Imperfections de surface : défauts d'empilement	761
30.14 Joints de grains de faible désorientation	762
30.15 Problèmes	763
31 Diamagnétisme et paramagnétisme	767
31.1 Aimantation et susceptibilité	768
31.2 Calcul des susceptibilités atomiques	769
31.3 Diamagnétisme de Larmor	773
31.4 Règles de Hund	775
31.5 Ions ayant une couche partiellement remplie	777
31.6 Désaimantation adiabatique	786
31.7 Paramagnétisme de Pauli	787
31.8 Diamagnétisme des électrons de conduction	792
31.9 Mesure du paramagnétisme de Pauli...	793
31.10 Diamagnétisme électronique dans les semi-conducteurs dopés .	794
31.11 Problèmes	795
32 Interactions des électrons et structure magnétique	801
32.1 Estimation des énergies d'interaction dipolaires magnétiques .	803
32.2 Propriétés magnétiques d'un système à deux électrons	804
32.3 Calcul de la différence d'énergie entre singulet et triplet . . .	806
32.4 Hamiltonien de spin et modèle de Heisenberg	810
32.5 Échange	813
32.6 Interactions magnétiques dans le gaz d'électrons libres	814
32.7 Le modèle de Hubbard	817
32.8 Moments localisés dans les alliages	818
32.9 Théorie de Kondo du minimum de résistance	820
32.10 Problèmes	822

33 Ordre magnétique	827
33.1 Types de structures magnétiques	828
33.2 Observation des structures magnétiques	832
33.3 Propriétés thermodynamiques à l'établissement de l'ordre magnétique	833
33.4 Propriétés à température nulle : état fondamental d'un corps ferromagnétique de Heisenberg	837
33.5 Propriétés à température nulle : état fondamental d'un corps antiferromagnétique de Heisenberg	839
33.6 Ondes de spin	840
33.7 Susceptibilité à haute température	845
33.8 Analyse du point critique	849
33.9 Théorie de champ moyen	852
33.10 Domaines	857
33.11 Facteurs de désaimantation	860
33.12 Problèmes	862
34 Supraconductivité	865
34.1 Température critique	868
34.2 Courants persistants	870
34.3 Propriétés thermoélectriques	871
34.4 Propriétés magnétiques : diamagnétisme parfait	871
34.5 Propriétés magnétiques : champ critique	873
34.6 Chaleur spécifique	875
34.7 Autres manifestations du gap d'énergie	877
34.8 Équation de London	879
34.9 Théorie microscopique : aspects qualitatifs	882
34.10 Prédictions quantitatives de la théorie microscopique élémentaire	886
34.11 Théorie microscopique et effet Meissner	891
34.12 Théorie de Ginzburg-Landau	892
34.13 Quantification du flux	893
34.14 Théorie microscopique et courants persistants	894
34.15 Effet tunnel pour les supercourants ; effets Josephson	896
34.16 Problèmes	899
A Résumé des relations numériques...	903
A.1 Gaz de Fermi idéal	904
A.2 Temps de relaxation et libre parcours moyen	904
A.3 Fréquence cyclotron	904
A.4 Fréquence de plasma	904
B Le potentiel chimique	905
C Le développement de Sommerfeld	907

D Développement en ondes planes des fonctions...	911
E Vitesse et masse effective des électrons de Bloch	915
F Quelques identités liées à l'analyse de Fourier...	917
G Principe variationnel pour l'équation de Schrödinger	919
H Formulation hamiltonienne...	921
I Théorème de Green pour les fonctions périodiques	923
J Conditions d'absence de transitions interbandes...	925
K Propriétés optiques des solides	927
K.1 Hypothèse de localité	927
K.2 Hypothèse d'isotropie	927
K.3 Nature conventionnelle de la distinction entre $\epsilon^0(\omega)$ et $\sigma(\omega)$	928
K.4 Réflectivité	929
K.5 Détermination de $\epsilon(\omega)$ à partir de la réflectivité mesurée	930
K.6 Relation entre ϵ et l'absorption interbandes dans un métal	930
L Théorie quantique du cristal harmonique	933
M Conservation du moment cristallin	939
M.1 Démonstration de la loi de conservation	941
M.2 Applications	943
N Théorie de la diffusion des neutrons par un cristal	947
N.1 Application à la diffraction des rayons X	953
O Termes anharmoniques et processus à n phonons	955
P Évaluation du facteur de Landé g	957
Index	959