



Physique des solides

Une introduction

Jean-michel.gillet@centralesupelec.fr



Déroulement du cours de physique des solides

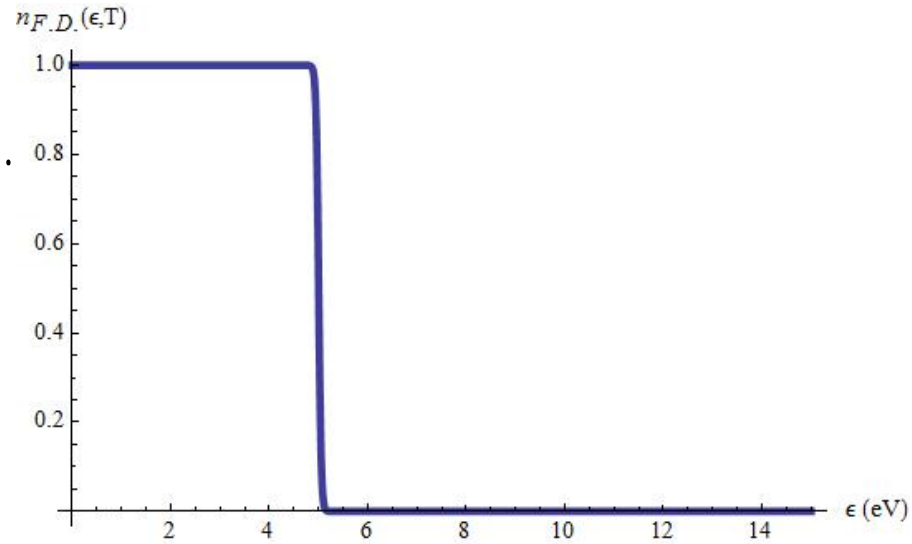
1. Gaz de fermions libres 
2. Elements de cristallographie 1
3. Elements de cristallographie 2
4. Phonons 1
5. Phonons 2
6. Théorie des bandes 1
7. Théorie des bandes 2
8. (Phénomènes quantiques de transport)



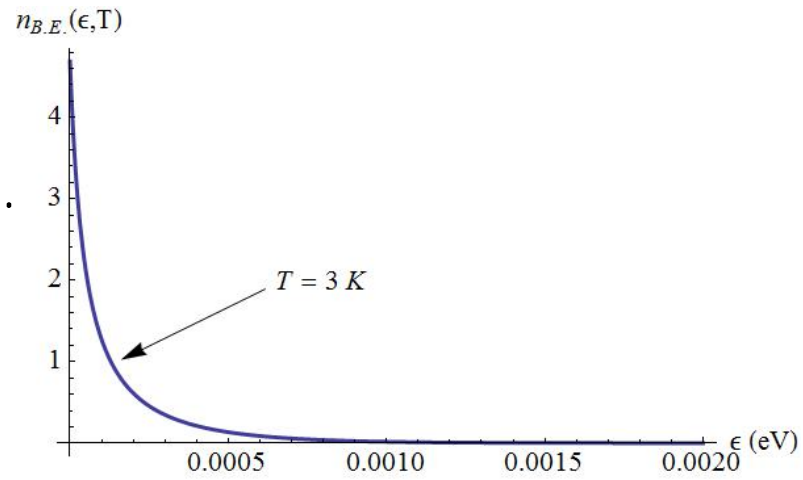
Là est la question ...

A $T=3\text{K}$ les électrons satisfont à une statistique telle que l'occupation des états suive la loi :

1)



2)





C1 Gaz de Fermions :

le métal de Drude à Sommerfeld

1. Introduction: les acteurs du cristal
2. Modèle classique : Drude, hauts et bas
3. Un 1er modèle quantique :
Sommerfeld
 1. Rappel : 1 électron dans une boîte
 2. N électrons dans une boîte à $T=0$
 3. N électrons dans une boîte à $T \neq 0$



1. Introduction

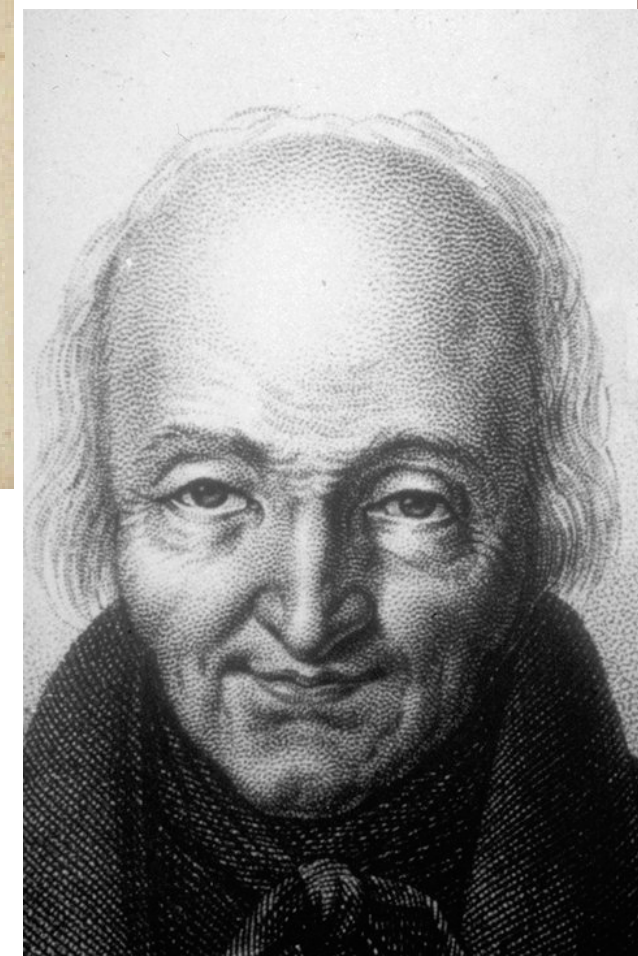
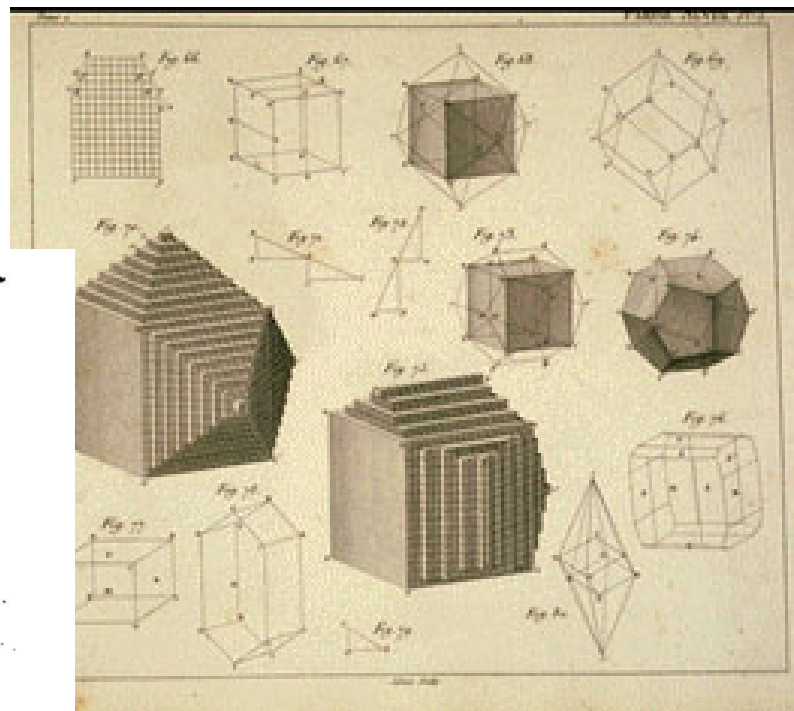
Empilement d'atomes

ÉLOGE HISTORIQUE

DE M. HAUY,

*Prononcé dans la séance publique de l'Académie
royale des sciences, le 2 juin 1823,*

PAR M. LE BARON CUVIER, SECRÉTAIRE-PERPÉTUEL.





1. Introduction

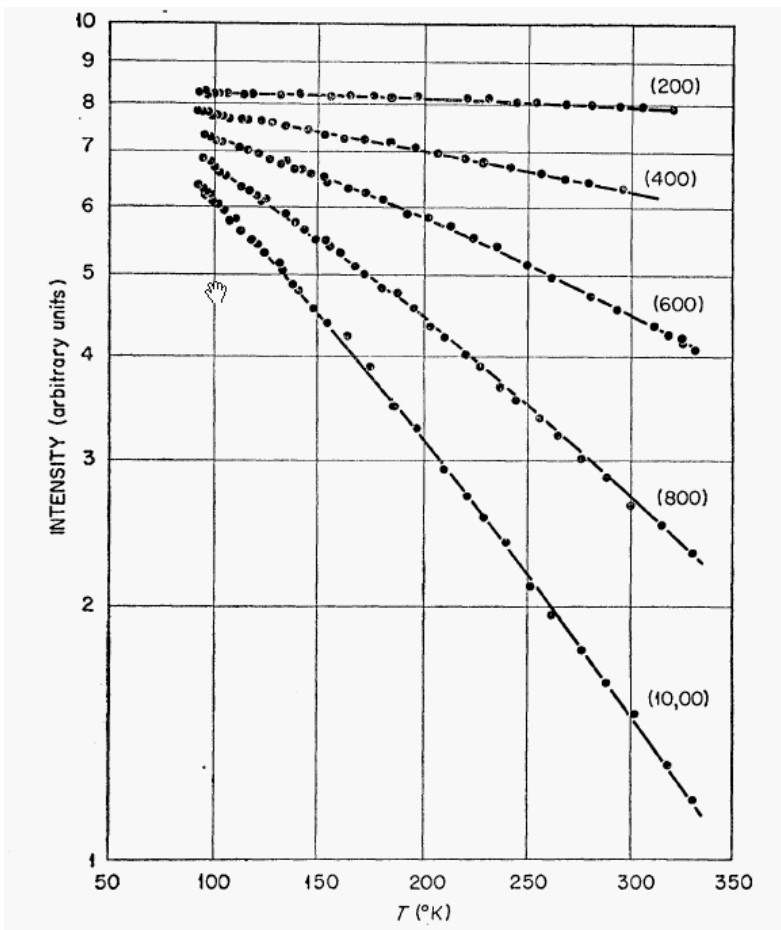
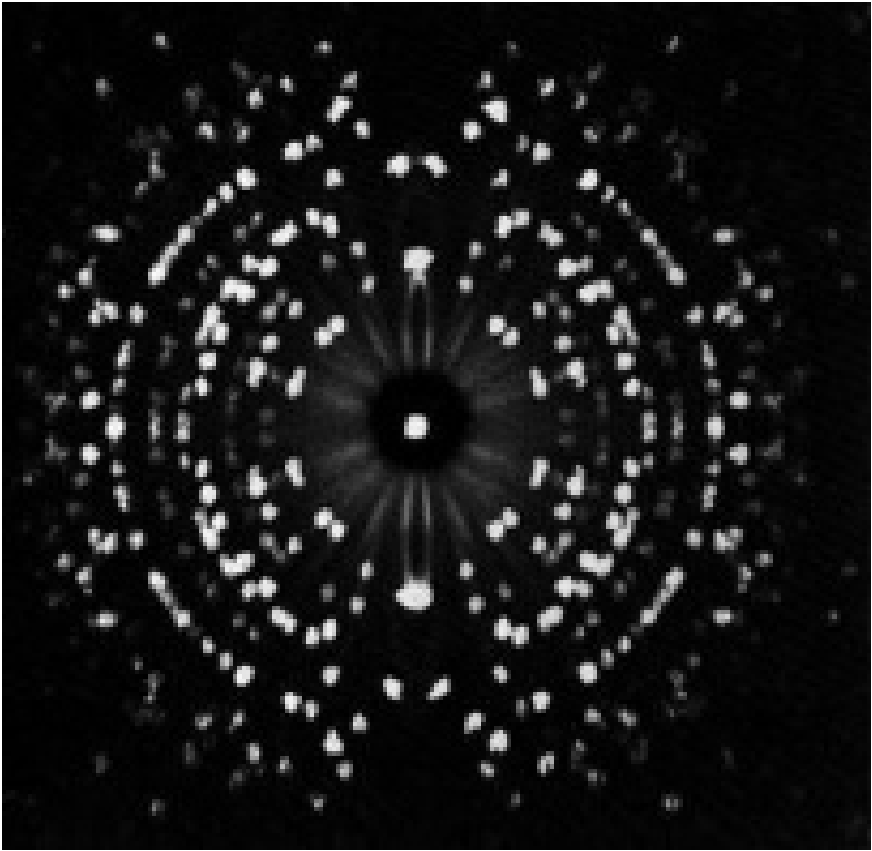


FIG. 2. The dependence of intensity on temperature for the (h00) reflections of aluminum.





1. Introduction

Empilement
d'atomes



Vibrations
(phonons)

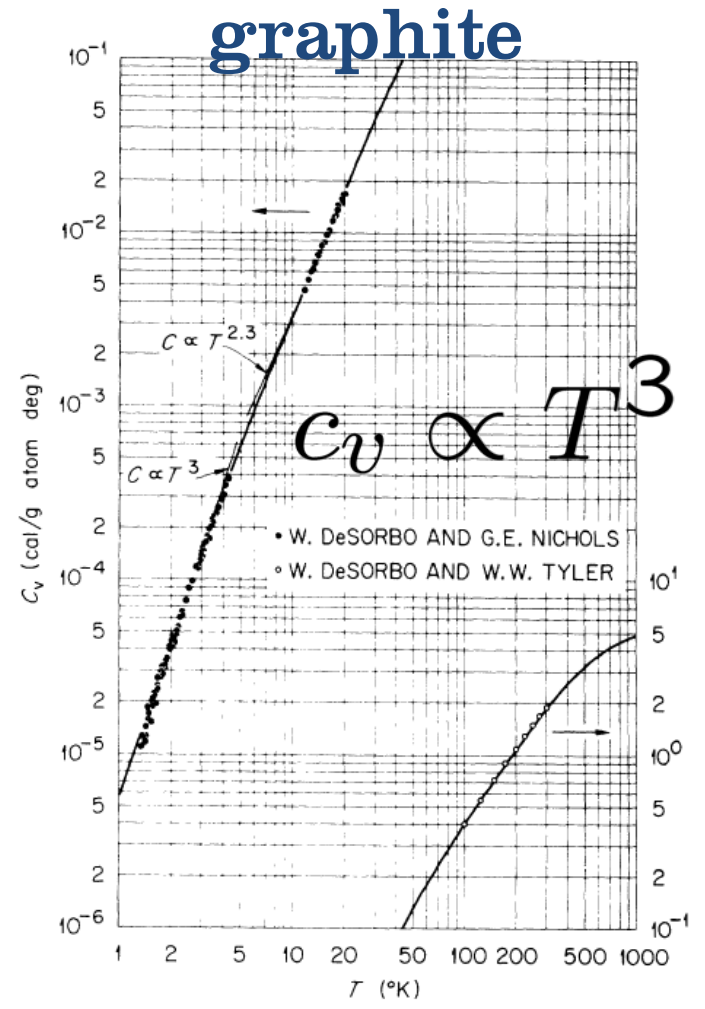


Statistique B.E.



Du gaz

... au solide





1. Introduction

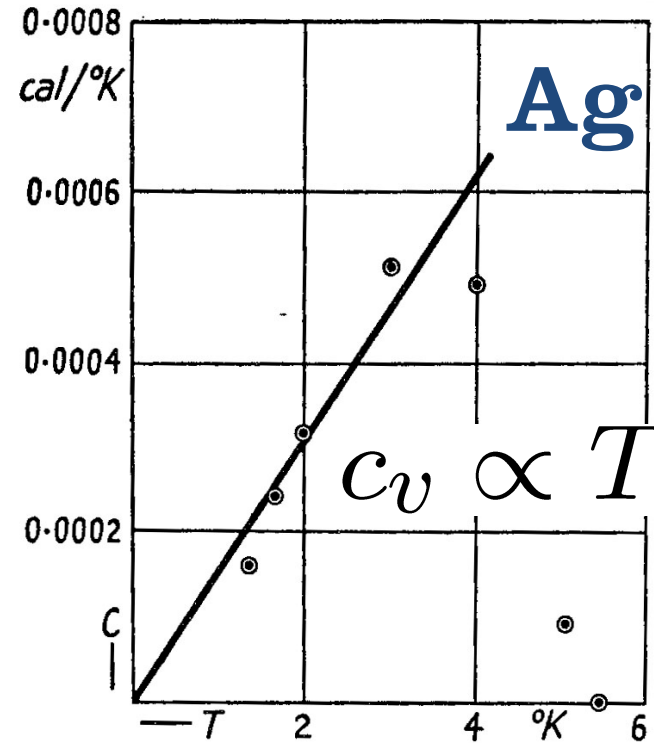
Empilement
d'atomes



Vibrations
(phonons)



Statistique B.E.



Linear term in the atomic heat of silver.
⊙ observed (Keesom and Kok);
full line calculated

Et les électrons ?



2. Modèle Classique : Drude

Hypothèses du modèle:

- Electrons indépendants
- Milieu de charge uniforme
- Description classique



2. Modèle Classique : Drude

$$\varepsilon = \frac{p^2}{2m}$$

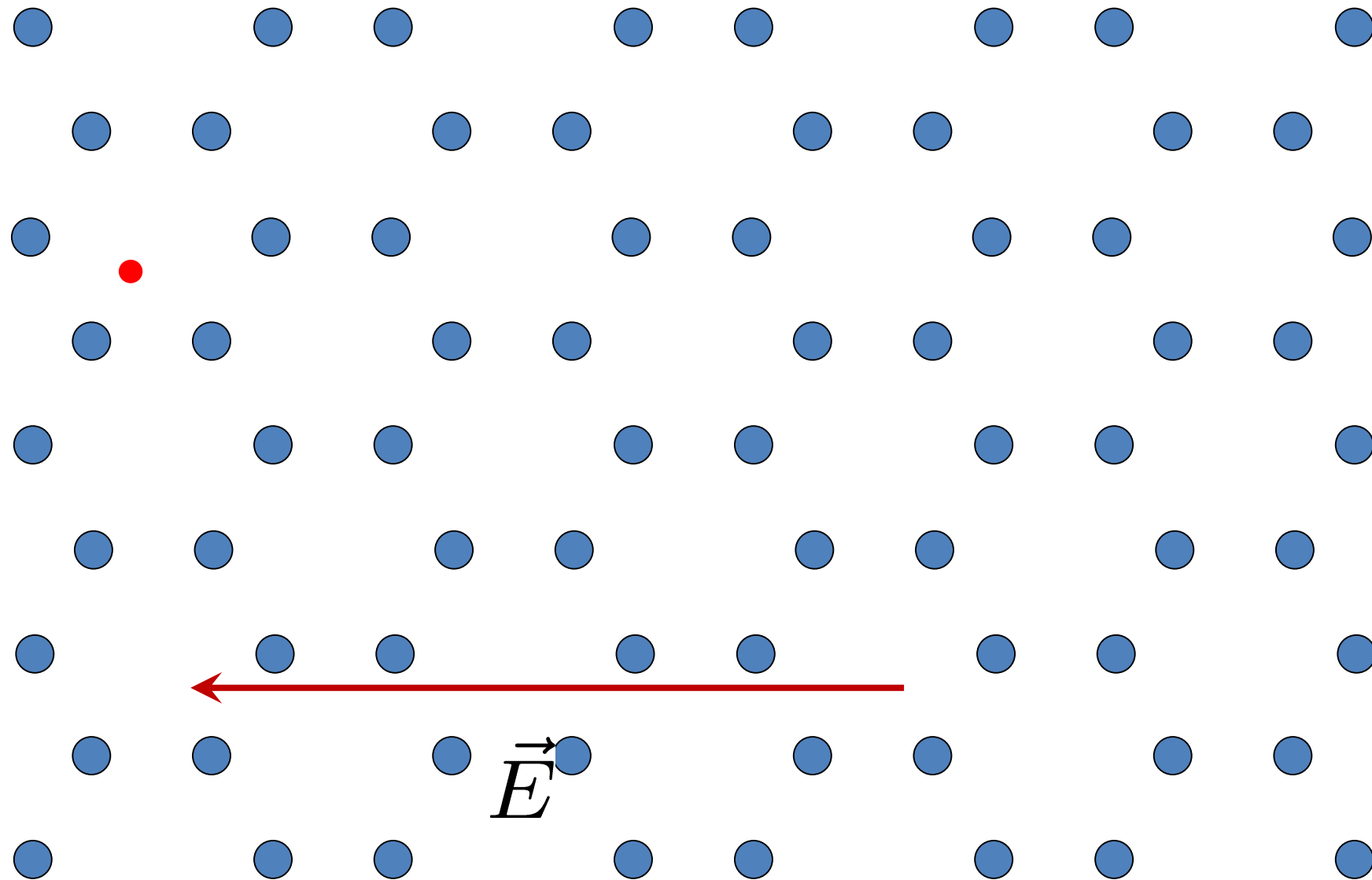


\vec{E}

Conductivité infinie ?



2. Modèle Classique : Drude





2. Modèle Classique : Drude

Hypothèses du modèle:

- Electrons indépendants
- Milieu de charge uniforme
- Description classique
- Frottement visqueux



2. Modèle Classique : Drude

$$\frac{d\vec{p}}{dt} = -\frac{\vec{p}}{\tau} + q\vec{E} \quad (\text{pfd}) \quad \vec{p} \rightarrow e^{-t/\tau}$$

Temps de libre parcours moyen

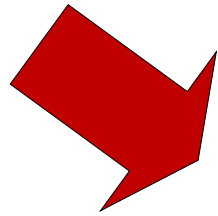
$$\langle \vec{p}_{\text{stat}} \rangle = q\tau \vec{E} \quad \langle \vec{v}_{\text{stat}} \rangle = \frac{q}{m} \tau \vec{E}$$

$$\vec{j} = \rho \langle \vec{v}_{\text{stat}} \rangle = \frac{nq^2}{m} \tau \vec{E} = \sigma \vec{E}$$



2. Modèle Classique : Drude

$$\sigma \approx 10^7 (\Omega\text{m})^{-1}$$



$$n\tau \approx 4 \times 10^{14} \text{s.m}^{-3}$$

$$\tau \approx 10^{-14}; 10^{-15} \text{sec}$$

?

$$\vec{j} = \rho \langle \vec{v}_{\text{stat}} \rangle = \frac{nq^2}{m} \tau \vec{E} = \sigma \vec{E}$$



2. Modèle Classique : Drude

$$U = \bar{E} = -\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta}$$

$$Z = \frac{\zeta^N}{N!} \quad \zeta = V \left(\frac{m}{2\pi\beta\hbar^2} \right)^{3/2} = \frac{V}{\lambda^3}$$

$$\bar{E} = \frac{3}{2} N k_B T \quad \blacktriangleright \quad c_v = \frac{\partial \bar{E}}{\partial T} = \frac{3}{2} N k_B$$



2. Modèle Classique : Drude

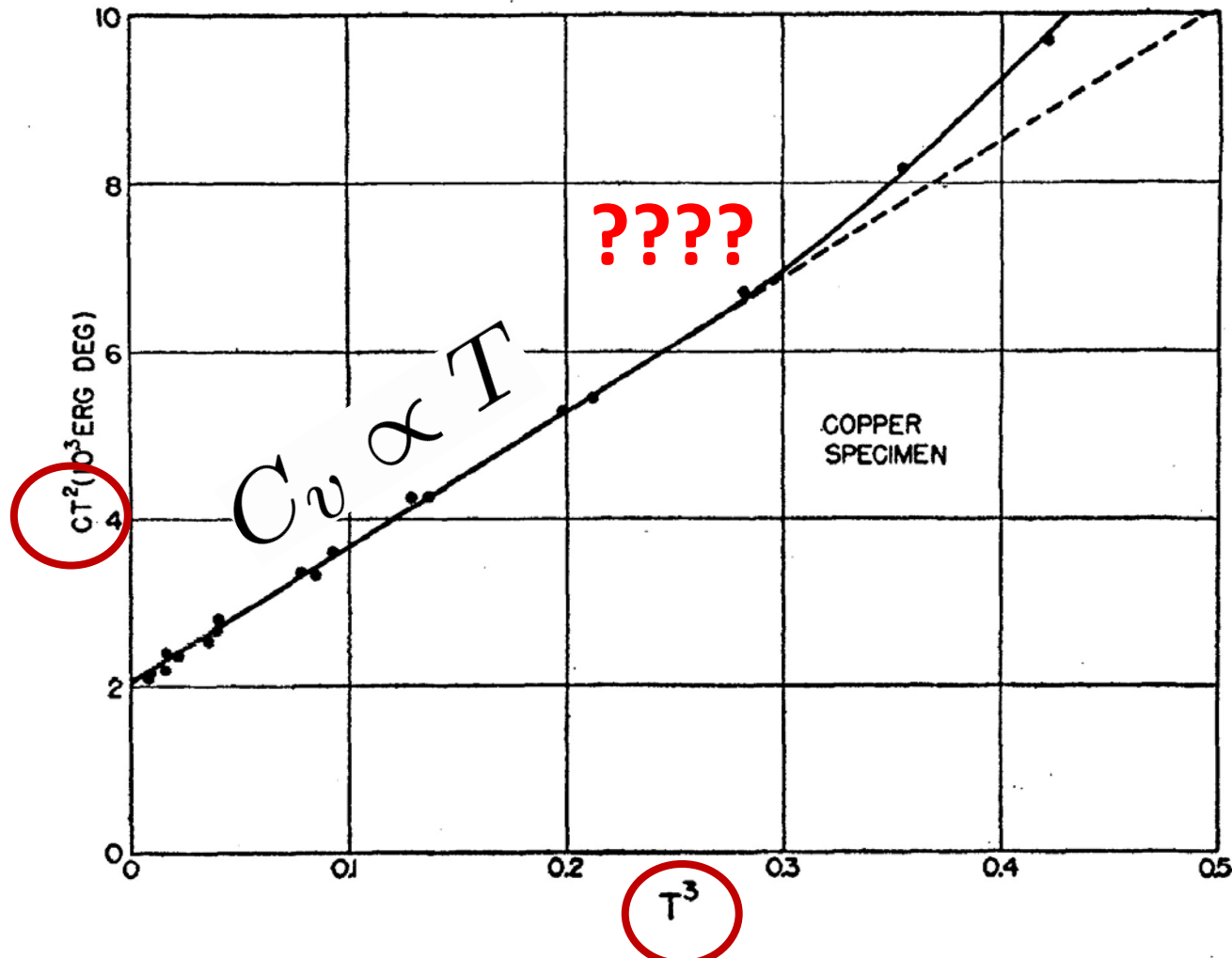


FIG. 3. Plot of CT^2 versus T^3 for copper specimen.



2. Un 1er modèle quantique : Sommerfeld

Rappel :
électron dans une boîte

$$\psi(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$$

$$n \in \mathbb{Z}$$

**Born-
von Karman
(BVK)**

$$k_x = n_x \frac{2\pi}{L_x}$$

$$k_y = n_y \frac{2\pi}{L_y}$$

$$k_z = n_z \frac{2\pi}{L_z}$$

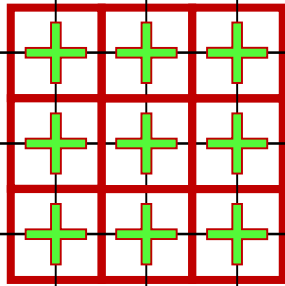
$$\varepsilon_{n_x, n_y, n_z} = \frac{h^2}{2m} \left(\frac{n_x^2}{L_x^2} + \frac{n_y^2}{L_y^2} + \frac{n_z^2}{L_z^2} \right)$$



2. Un 1er modèle quantique : Sommerfeld

Espace (2D) des vecteurs d'onde

$$\frac{2\pi}{L}$$



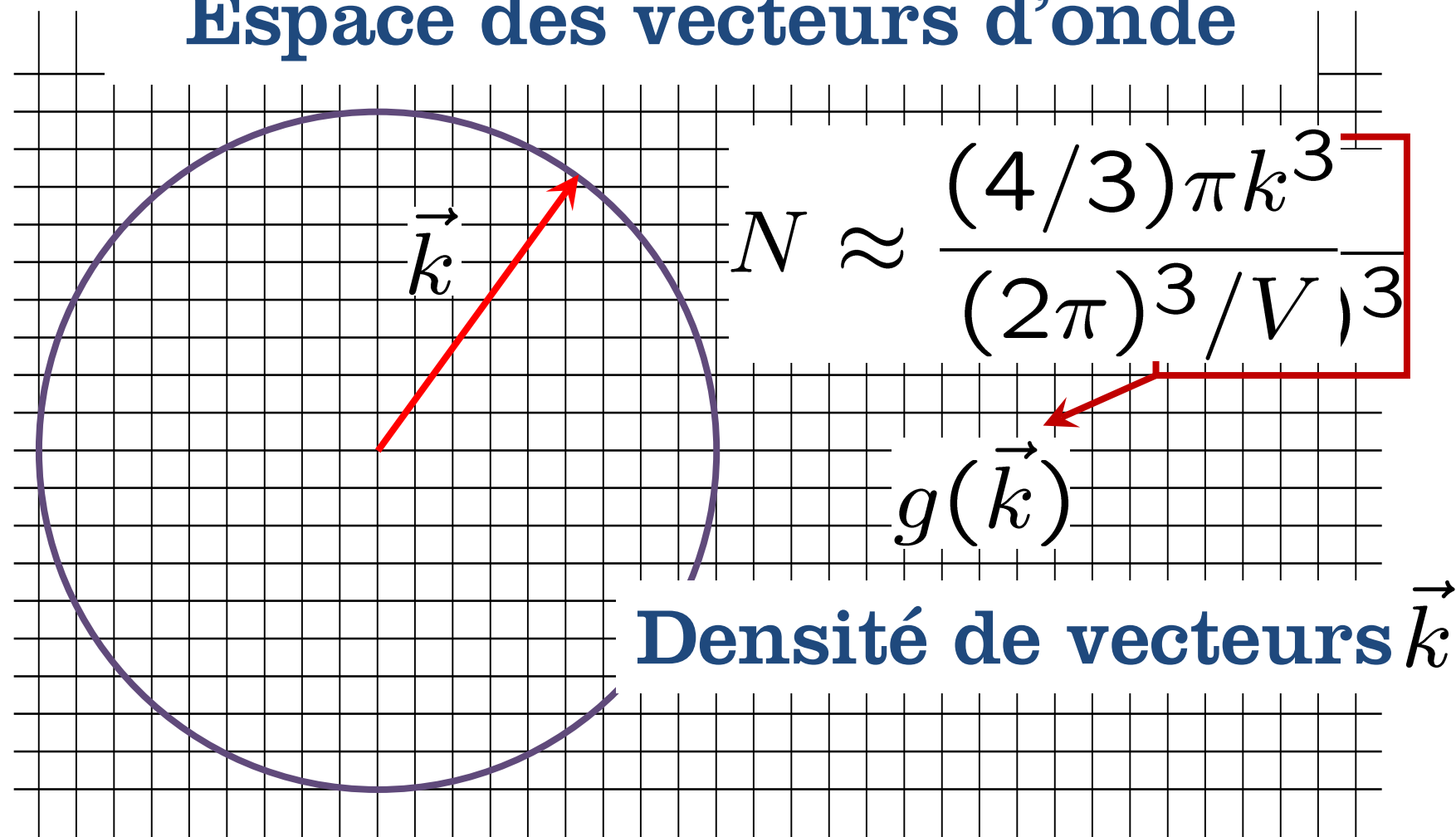
$$\delta S_k = \left(\frac{2\pi}{L}\right)^2$$

$$\text{À 3 D : } \delta V_k = \left(\frac{2\pi}{L}\right)^3 = \frac{(2\pi)^3}{V}$$



2. Un 1er modèle quantique : Sommerfeld

Espace des vecteurs d'onde

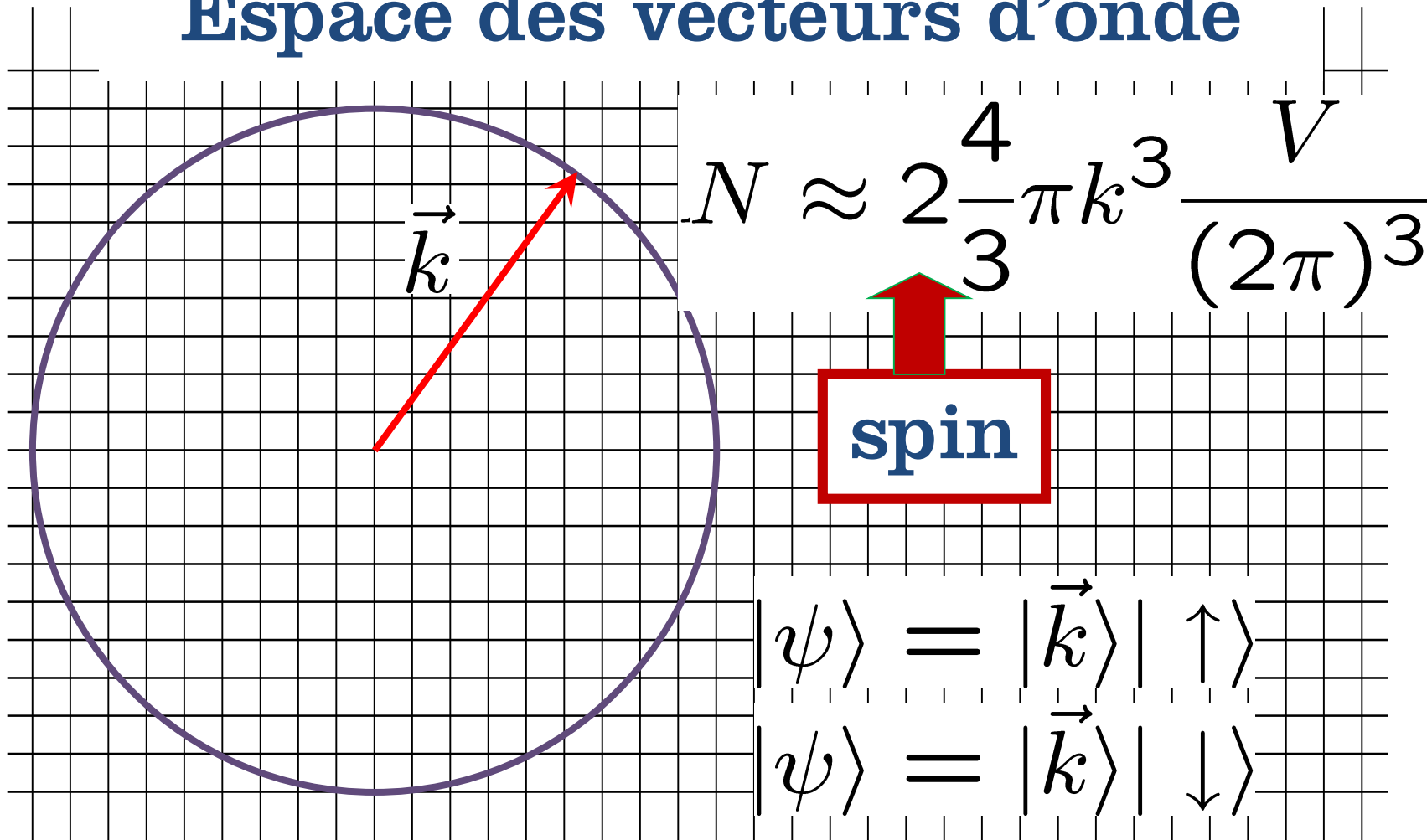


Densité de vecteurs \vec{k}



2. Un 1er modèle quantique : Sommerfeld

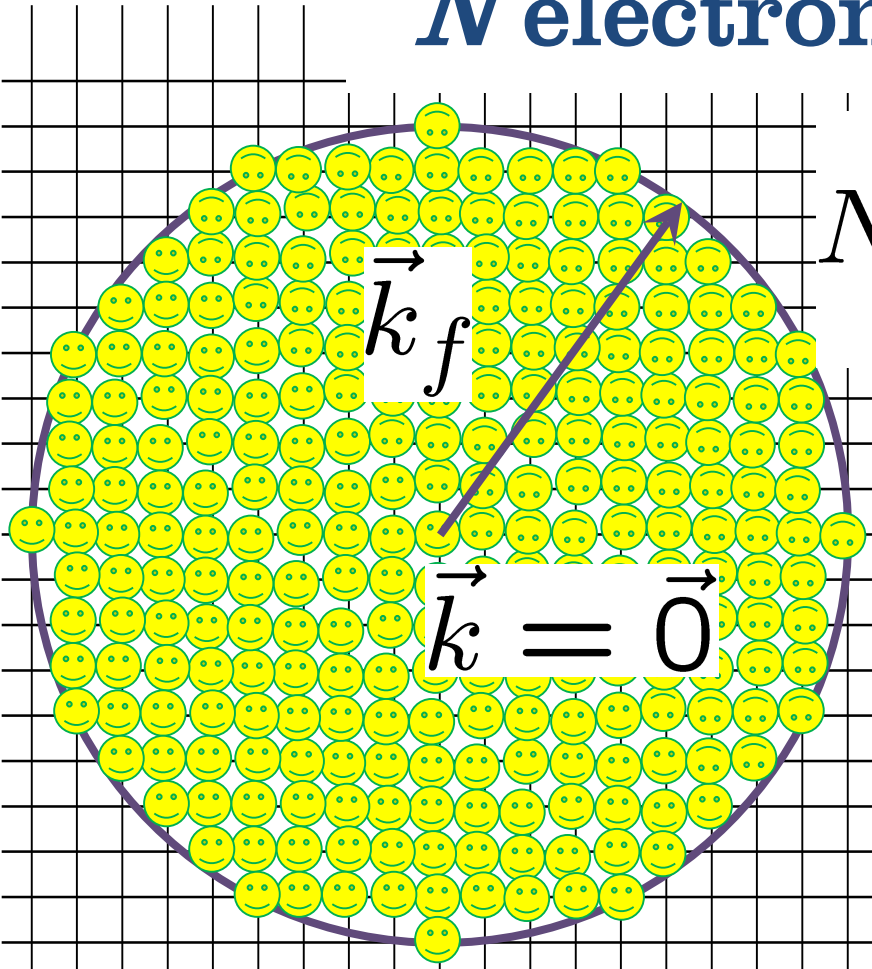
Espace des vecteurs d'onde





2. Un 1er modèle quantique : Sommerfeld

N électrons à $T=0$



$$N \approx 2 \frac{4}{3} \pi k^3 \frac{V}{(2\pi)^3}$$

$$\varepsilon(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

$$|\psi\rangle = |\vec{k}\rangle |\uparrow\rangle$$

$$|\psi\rangle = |\vec{k}\rangle |\downarrow\rangle$$



2. Un 1er modèle quantique : Sommerfeld

1 électron par
état quantique

$$N = 2 \frac{4}{3} \pi k_f^3 \frac{V}{(2\pi)^3}$$

$$N_{\text{occ}} = N_{\text{elec}}$$

$$\frac{N_{\text{elec}}}{V} = 2 \frac{4}{3} \pi k_f^3 \frac{1}{(2\pi)^3}$$

$$k_f = \left(3n\pi^2 \right)^{1/3}$$

Moment de Fermi



2. Un 1er modèle quantique : Sommerfeld

Energie de Fermi

$$\varepsilon_f = \frac{\hbar^2}{2m} (3n\pi^2)^{2/3}$$

C'est le dernier
niveau
d'énergie occupé
à température
nulle

$$n \approx 0,1 \text{ \AA}^{-3}$$

$$\varepsilon_f \approx 5 \text{ eV}$$

$$T_f \approx 6 \times 10^4 \text{ K} \quad v_f \approx 2 \times 10^6 \text{ m.s.}^{-1}$$

$$k_f = (3n\pi^2)^{1/3}$$

Moment de Fermi



2. Un 1er modèle quantique : Sommerfeld

Energie totale

$$E = \underbrace{\sum_{n_x} \sum_{n_y} \sum_{n_z}}_{\text{États occupés}} \frac{(2\pi)^2 \hbar^2}{2m} \left(\frac{n_x^2}{L_x^2} + \frac{n_y^2}{L_y^2} + \frac{n_z^2}{L_z^2} \right)$$

Difficile à calculer...



2. Un 1er modèle quantique : Sommerfeld

Energie totale

$$E = \int_{\text{occ}} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} 2g(\vec{k}) d^3k$$

$$g(\vec{k}) = \frac{V \hbar^3}{h^3} \quad g(\vec{k}) = \frac{V}{(2\pi)^3}$$

(apparté)



2. Un 1er modèle quantique : Sommerfeld

Energie totale

$$E = \int_0^{k_f} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} 2g(\vec{k}) 4\pi k^2 dk$$
$$g(\vec{k}) = \frac{V}{(2\pi)^3}$$



2. Un 1er modèle quantique : Sommerfeld

Energie totale

$$E = \int_0^{k_f} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} 2 \frac{V}{(2\pi)^3} 4\pi k^2 dk$$

EXO

$$\frac{E}{V} = \frac{3}{5} n \varepsilon_f$$

Énergie totale
par unité de volume

$$\bar{\varepsilon} = \frac{3}{5} \varepsilon_f$$

Énergie moyenne
par électron

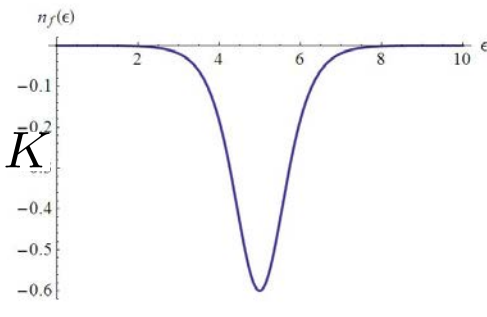
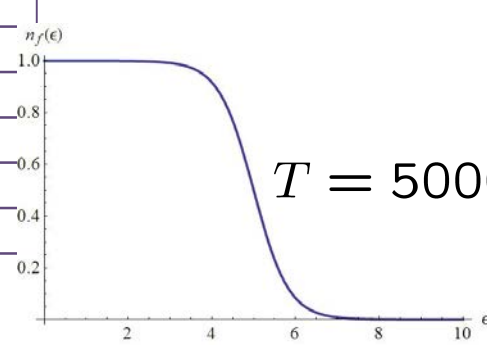
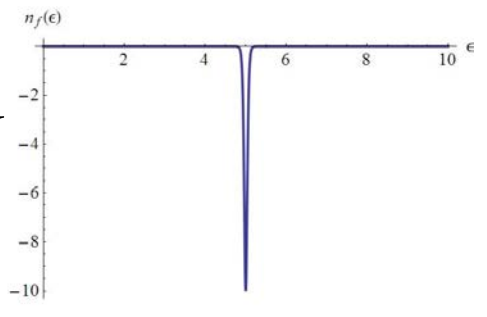
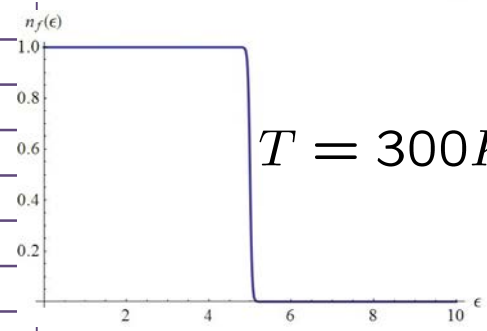
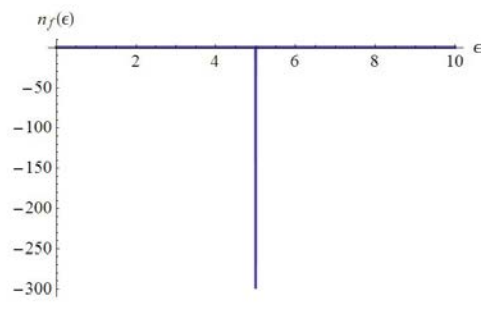
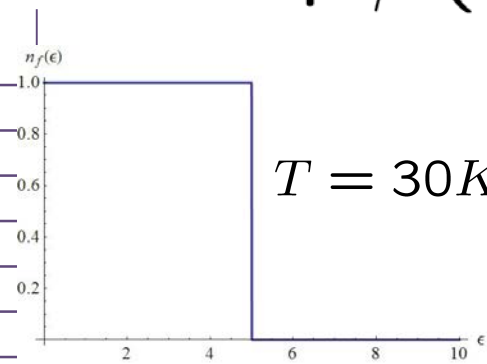
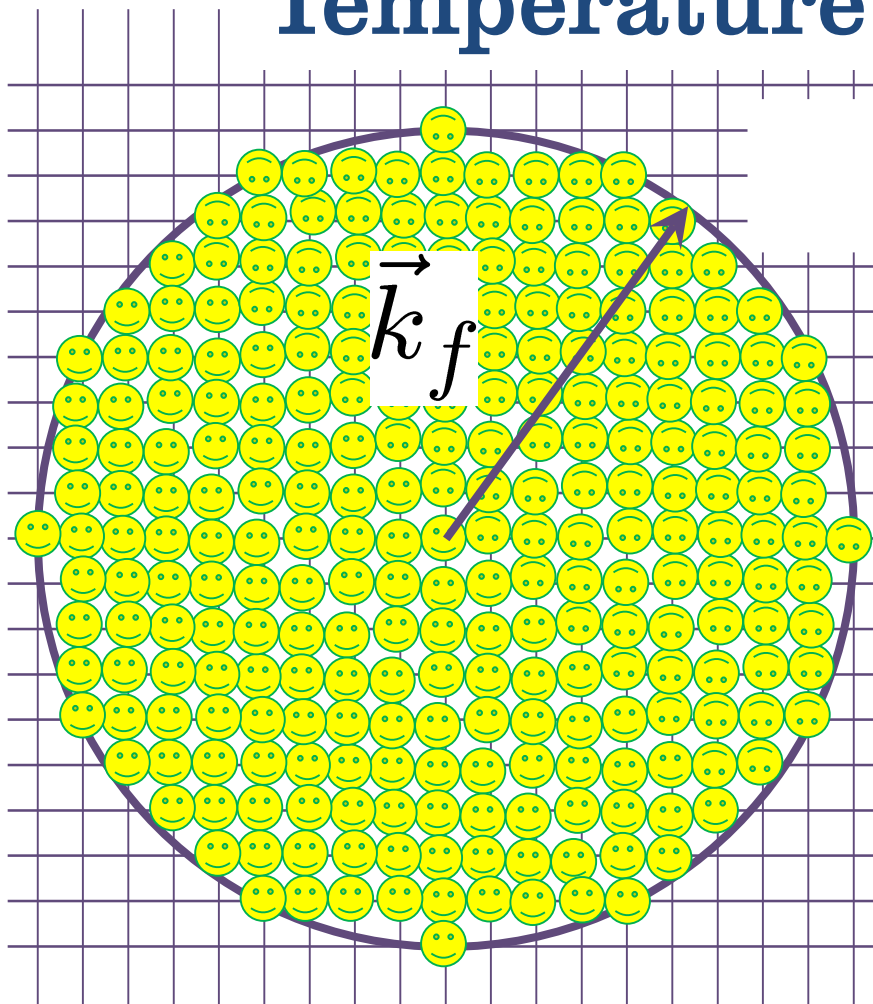


2. Un 1er modèle quantique :

Sommerfeld

$$n(\varepsilon) = \frac{1}{\exp \beta(\varepsilon - \mu) + 1}$$

Température **non nulle**





2. Un 1er modèle quantique : Sommerfeld

Température non nulle

$$m(\varepsilon) = \frac{1}{\exp \beta(\varepsilon - \mu) + 1}$$

$$E = \int_0^{k_f} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} 2g(\vec{k}) 4\pi k^2 dk$$



2. Un 1er modèle quantique : Sommerfeld

Température non nulle

$$n(\varepsilon_{\vec{k}}) = \frac{1}{\exp \beta(\varepsilon_{\vec{k}} - \mu) + 1}$$

$$E = \int_0^{\infty} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} n(\varepsilon_{\vec{k}}) 2g(\vec{k}) 4\pi k^2 dk$$

Nombre élémentaire d'états occupés



2. Un 1er modèle quantique : Sommerfeld

Température non nulle

$$n(\varepsilon) = \frac{1}{\exp \beta(\varepsilon - \mu) + 1}$$

$$E = \int_0^{\infty} \varepsilon \boxed{n(\varepsilon) g(\varepsilon) d\varepsilon}$$

→ Nombre élémentaire d'électrons dans
 $[\varepsilon, \varepsilon + d\varepsilon]$



2. Un 1er modèle quantique : Sommerfeld

Température non nulle

$$n(\varepsilon) = \frac{1}{\exp \beta(\varepsilon - \mu) + 1}$$

$$E = \int_0^{\infty} \varepsilon n(\varepsilon) g(\varepsilon) d\varepsilon$$

$$g(\varepsilon) = \frac{2g(\vec{k})4\pi k^2}{d\varepsilon/dk}$$

Relation de
dispersion



2. Un 1er modèle quantique : Sommerfeld

Température non nulle

$$n(\varepsilon) = \frac{1}{\exp \beta(\varepsilon - \mu) + 1}$$

$$N = \int_0^{\infty} n(\varepsilon) g(\varepsilon) d\varepsilon$$

Développement de Sommerfeld

$$\mu \approx \varepsilon_f \left(1 - \frac{\pi^2}{12} \left(k_B T / \varepsilon_f \right)^2 \right)$$

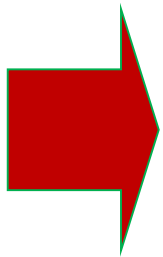


2. Un 1er modèle quantique : Sommerfeld

Température non nulle

$$n(\varepsilon) = \frac{1}{\exp \beta(\varepsilon - \mu) + 1}$$

$$E \approx \frac{3}{5} N \varepsilon_f + \frac{(2m)^{3/2}}{6\hbar^3} (k_B T)^2 \varepsilon_f^{1/2}$$



$$C_v \approx \frac{\pi^2}{2} k_B n \frac{T}{T_f}$$



2. Un 1er modèle quantique : Sommerfeld

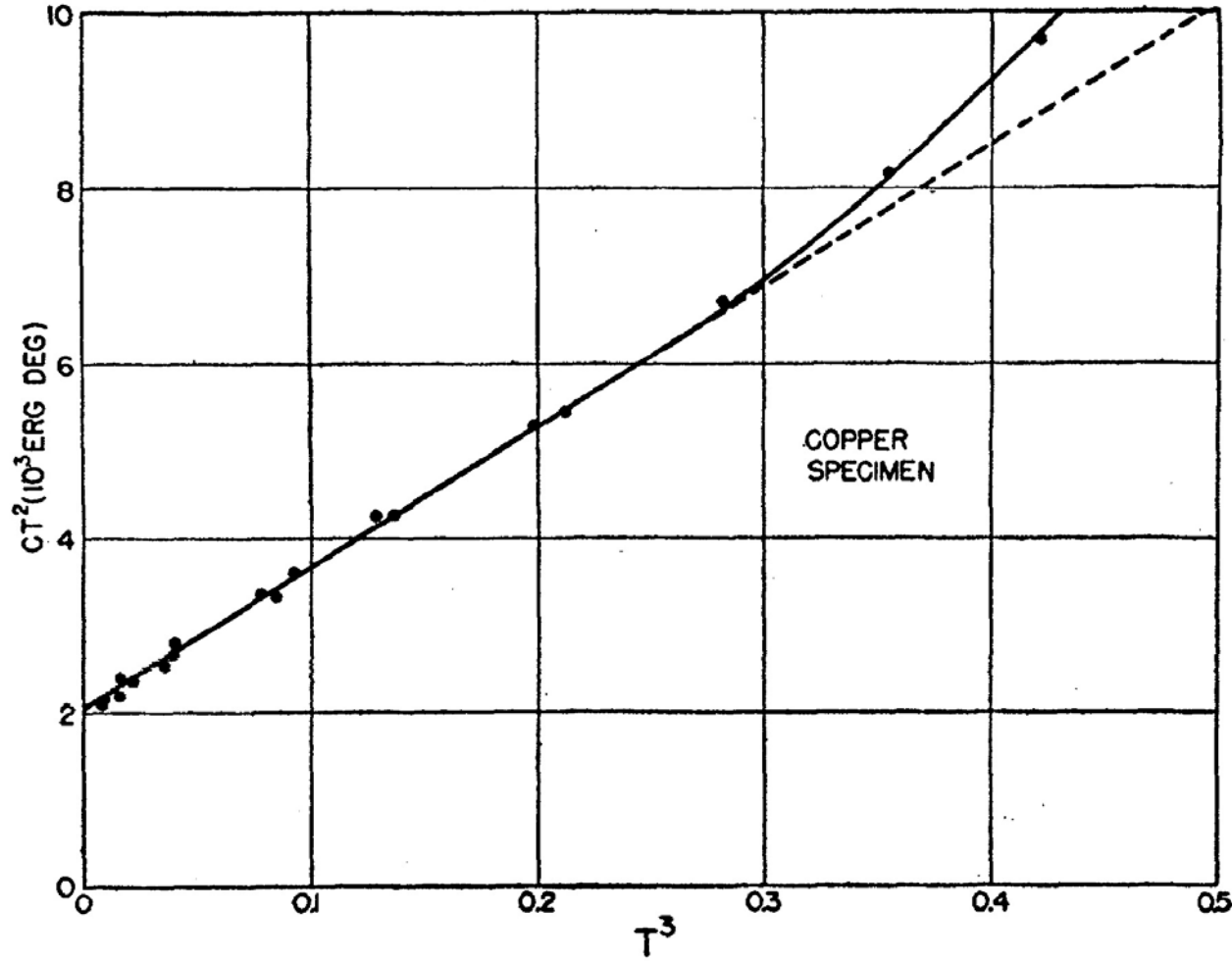


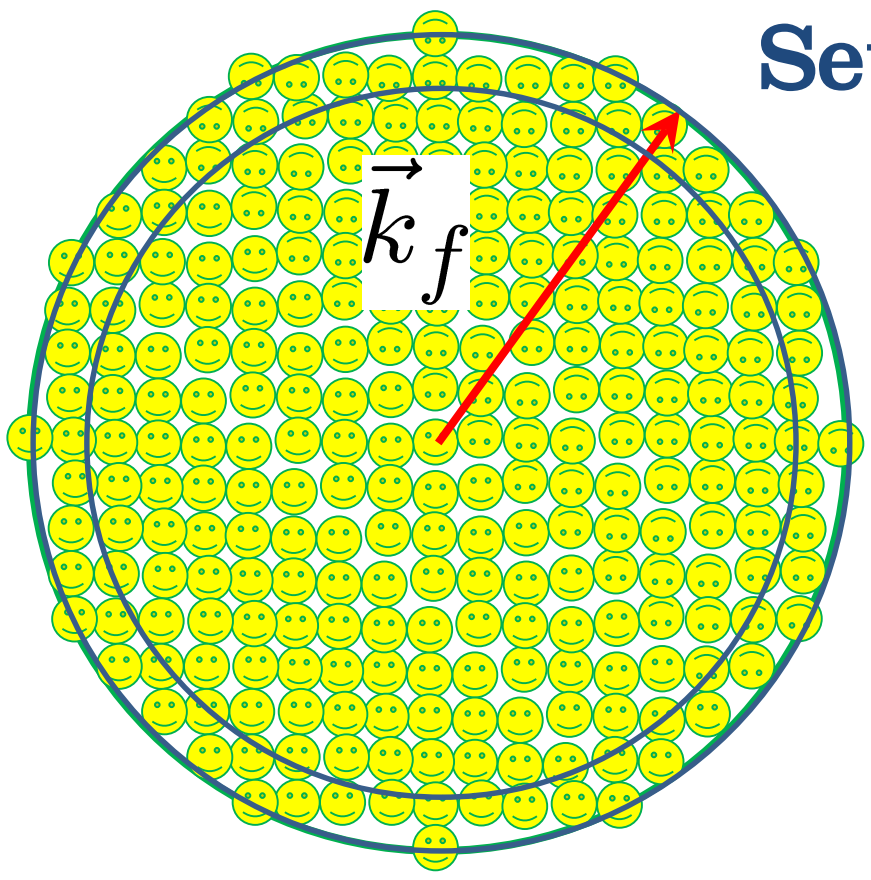
FIG. 3. Plot of CT^2 versus T^3 for copper specimen.



2. Un 1er modèle quantique : Sommerfeld

Estimation « à la louche »

Seuls ceux proches du
niveau de Fermi
participent

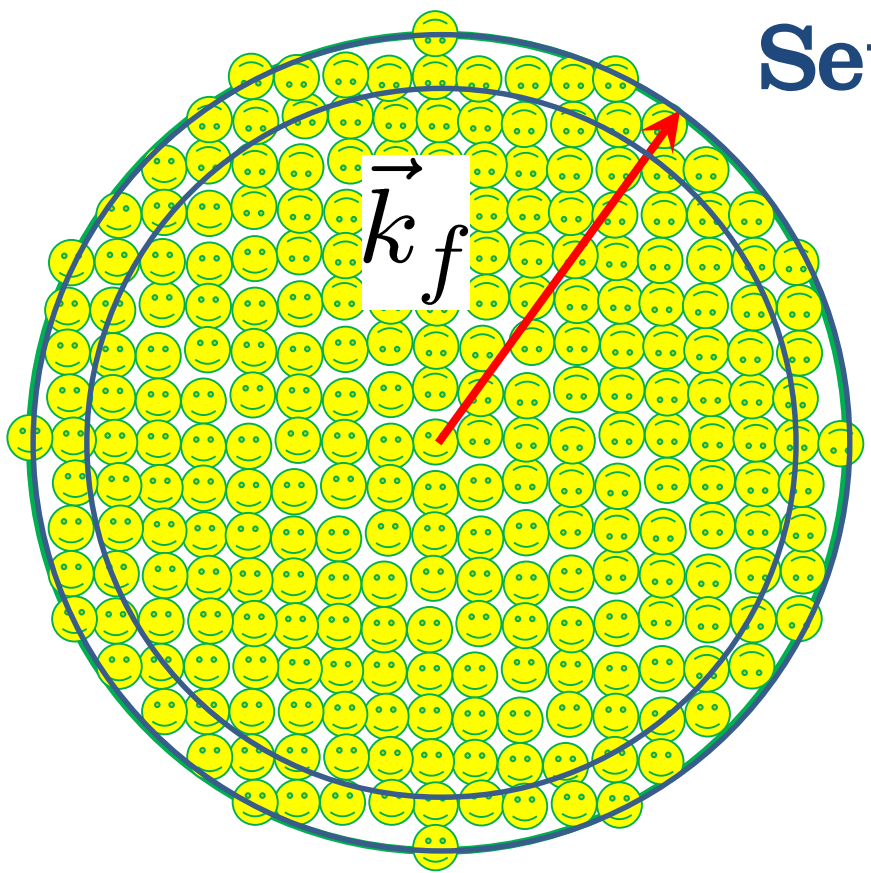


$$\frac{3}{2}k_B T \ll \varepsilon_f$$



2. Un 1er modèle quantique : Sommerfeld

Estimation « à la louche »



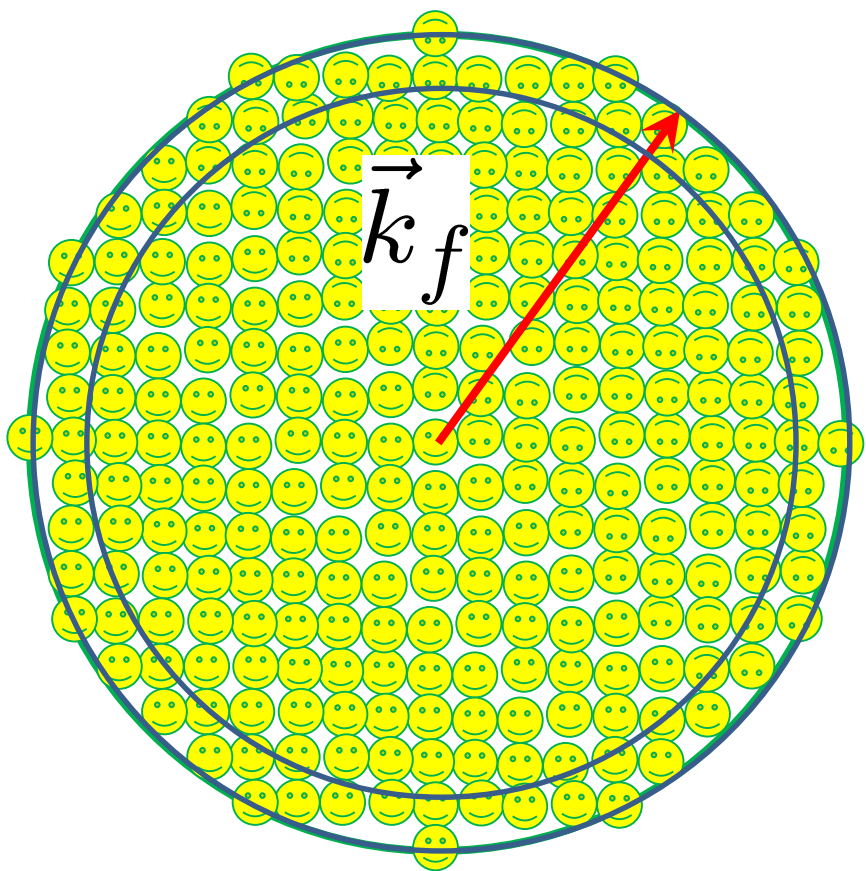
Seuls ceux proches du
niveau de Fermi
participent

$$\frac{3}{2}k_B T \ll \varepsilon_f$$



2. Un 1er modèle quantique : Sommerfeld

Estimation « à la louche »



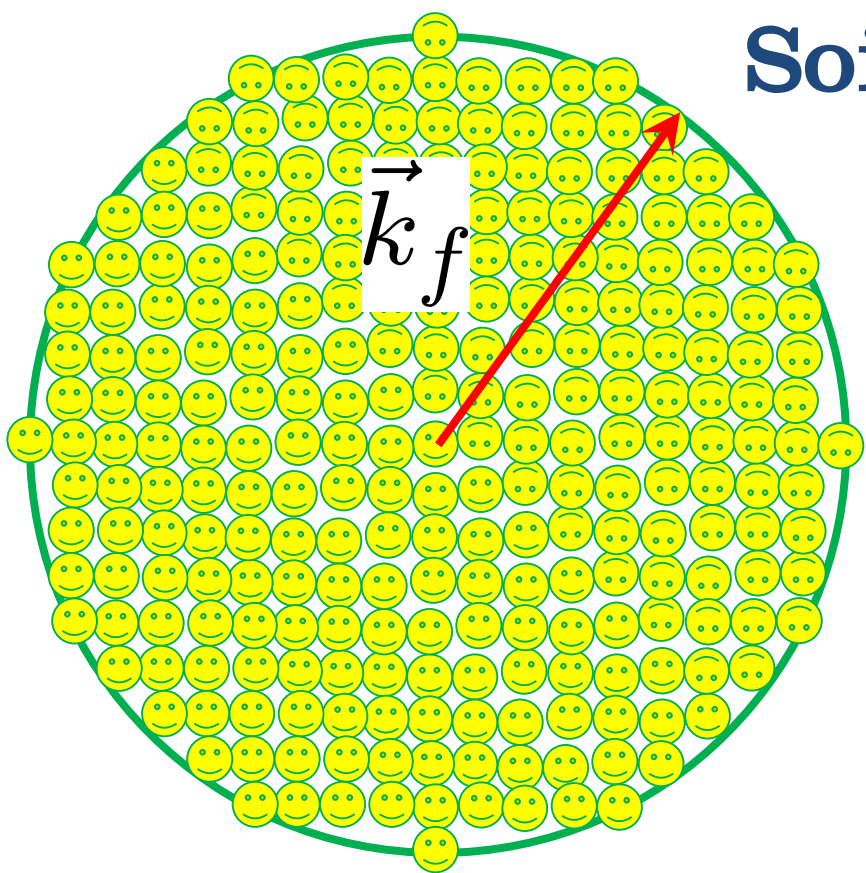
Il y en a donc
environ

$$g(\varepsilon_f) d\varepsilon_f \approx g(\varepsilon_f) \frac{3}{2} k_B T$$



2. Un 1er modèle quantique : Sommerfeld

Estimation « à la louche »



Soit une augmentation
de l'énergie totale

$$\Delta E \approx g(\varepsilon_f) \frac{3}{2} k_B T \times \frac{3}{2} k_B T$$

$$g(\varepsilon_f) d\varepsilon_f \approx g(\varepsilon_f) \frac{3}{2} k_B T$$

$$C_v \approx \frac{3}{2} k_B n \frac{T}{T_f}$$



2. Un 1er modèle quantique : Sommerfeld

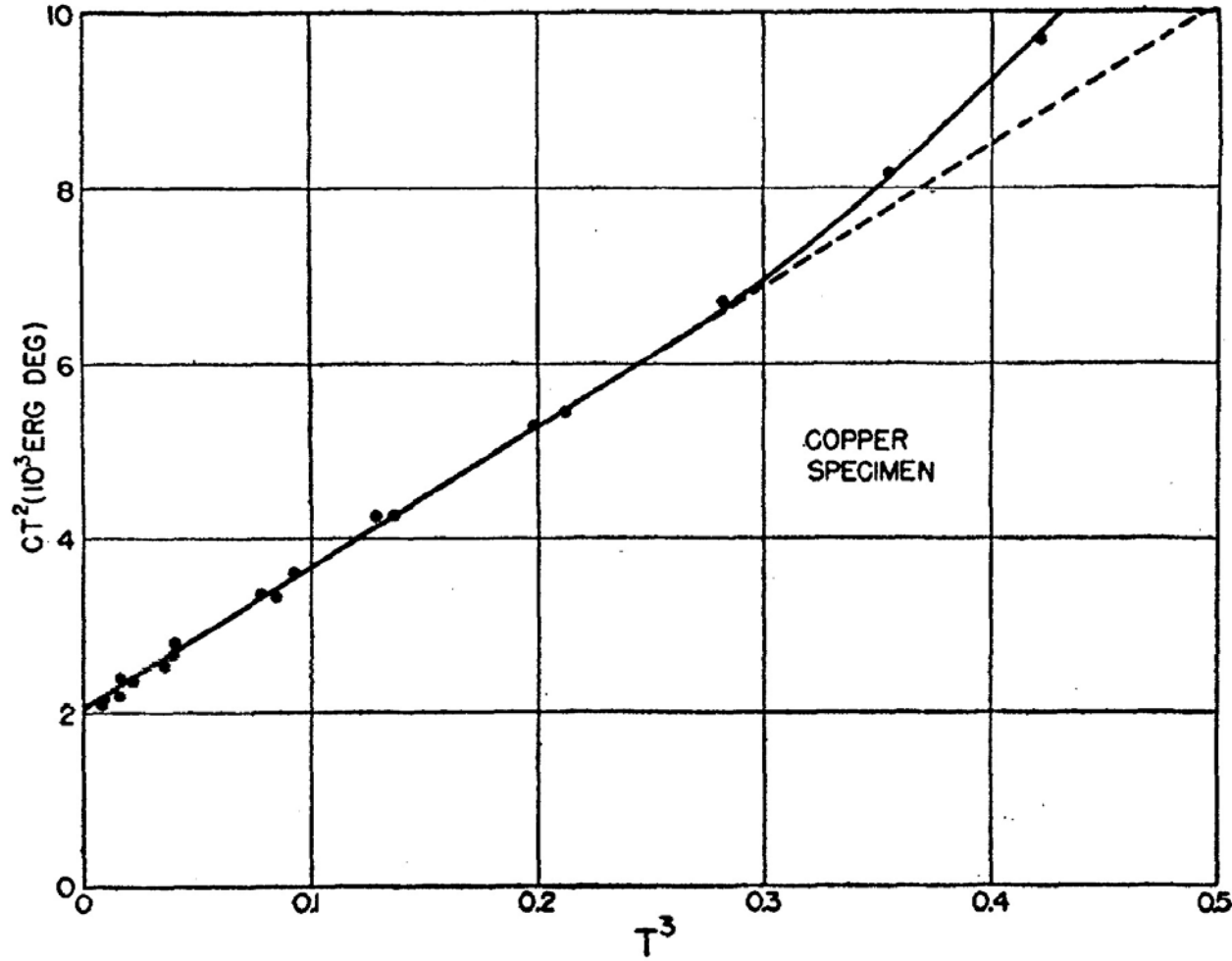


FIG. 3. Plot of CT^2 versus T^3 for copper specimen.