



PHYSIQUE DES SOLIDES

Neil W. Ashcroft et N. David Mermin

TRADUCTION PAR FRANCK BIET ET HAMID KACHKACHI



En couverture : Voir légende de la figure 15.6, page 345. Illustration réalisée par Éric Sault.

Édition originale : *Solid State Physics*, Niel W. Ashcroft and N. David Mermin. © Saunders College Publishing, 1976
(ISBN : 0-03-083993-9)

© 2002, **EDP Sciences**, 17, avenue du Hoggar, BP 112, Parc d'activités de Courtabœuf, 91944 Les Ulis Cedex A

Tous droits de traduction, d'adaptation et de reproduction par tous procédés réservés pour tous pays. Toute reproduction ou représentation intégrale ou partielle, par quelque procédé que ce soit, des pages publiées dans le présent ouvrage, faite sans l'autorisation de l'éditeur est illicite et constitue une contrefaçon. Seules sont autorisées, d'une part, les reproductions strictement réservées à l'usage privé du copiste et non destinées à une utilisation collective, et d'autre part, les courtes citations justifiées par le caractère scientifique ou d'information de l'œuvre dans laquelle elles sont incorporées (art. L. 122-4, L. 122-5 et L. 335-2 du Code de la propriété intellectuelle). Des photocopies payantes peuvent être réalisées avec l'accord de l'éditeur. S'adresser au : Centre français d'exploitation du droit, de copie, 3, rue Hautefeuille, 75006 Paris. Tél. : 01 43 26 95 35.

ISBN : 2-86883-577-5

N.W. Ashcroft
N.D. Mermin

Physique des solides

Traduit par

Franck Biet

Hamid Kachkachi



17, avenue du Hoggar
Parc d'activités de Courtabœuf, BP 112
91944 Les Ulis Cedex A, France

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 <i>s</i> 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

17.6	Effet d'écran de Lindhard dépendant de la fréquence	408
17.7	Effet d'écran dans l'approximation de Hartree-Fock	409
17.8	Théorie du liquide de Fermi	409
17.9	Diffusion électron-électron près de l'énergie de Fermi	410
17.10	Théorie du liquide de Fermi : quasi-particules	414
17.11	Théorie du liquide de Fermi : la fonction f	416
17.12	Théorie du liquide de Fermi : règles empiriques de conclusion	417
17.13	Problèmes	417
18	Effets de surface	421
18.1	Travail d'extraction	422
18.2	Potentiels de contact	429
18.3	Mesure des potentiels de contact	430
18.4	Émission thermoionique	430
18.5	Travaux d'extraction de quelques métaux choisis	434
18.6	Diffraction des électrons de basse énergie	434
18.7	Microscope ionique de champ	436
18.8	Niveaux électroniques de surface	438
18.9	Problèmes	440
19	Classification des solides	443
19.1	Classification des isolants	444
19.2	Cristaux ioniques	450
19.3	Halogénures alcalins (cristaux ioniques I-VII)	450
19.4	Cristaux III-V (mélange ionique et covalent)	460
19.5	Cristaux covalents	460
19.6	Cristaux moléculaires	462
19.7	Les métaux	463
19.8	Cristaux à liaison hydrogène	464
19.9	Problèmes	466
20	Énergie de cohésion	469
20.1	Cristaux moléculaires : les gaz nobles	472
20.2	Cristaux ioniques	477
20.3	Cohésion dans les cristaux covalents et les métaux	484
20.4	Problèmes	489
21	Défauts du modèle du réseau statique	493
21.1	Propriétés d'équilibre	494
21.2	Propriétés de transport	496
21.3	Interaction avec le rayonnement	497

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

Préface

Nous avons commencé la rédaction de cet ouvrage en 1968 pour combler un vide que chacun de nous ressentait intensément après plusieurs années passées à enseigner la physique des solides aux étudiants en physique, en chimie, en sciences de l'ingénieur et en science des matériaux de l'université de Cornell. Pour l'enseignement des deuxième et troisième cycle, nous avons recouru à une liste de lecture disparate, constitué d'une demi-douzaine de textes et de traités. Ce n'était que partiellement à cause de la grande diversité du sujet ; le problème principal résidait dans sa nature double. D'une part, une introduction à la physique des solides doit décrire de façon détaillée le vaste domaine des solides réels, en insistant sur les données significatives et en les illustrant par des exemples. D'autre part, il existe maintenant une théorie élémentaire des solides bien établie, avec laquelle tout étudiant sérieusement intéressé doit se familiariser.

À notre grande surprise, il nous a fallu sept ans pour produire ce dont nous avons besoin : un texte d'introduction d'un seul volume présentant les deux aspects du sujet, descriptif et analytique. Notre objectif était d'explorer la variété des phénomènes associés aux formes majeures de la matière cristalline, tout en jetant les bases d'une compréhension efficace des solides à l'aide de traitements clairs, détaillés et élémentaires des concepts théoriques fondamentaux.

Notre livre est conçu pour des cours d'introduction en deuxième et en troisième cycle. La mécanique statistique et la théorie quantique sont au cœur de la physique des solides. Bien que leurs formalismes ne soient utilisés que lorsque le besoin s'en fait sentir, nous avons essayé, particulièrement dans les chapitres les plus élémentaires, de tenir compte du fait que de nombreux lecteurs, en particulier ceux du deuxième cycle, n'ont pas encore acquis les connaissances techniques nécessaires. Autant que possible, nous avons clairement séparé les thèmes fondés entièrement sur des méthodes classiques de ceux exigeant un traitement quantique. Dans ce dernier cas, et dans des applications de la mécanique statistique, nous avons procédé avec soin à partir des principes fondamentaux que nous énonçons explicitement. Le livre est donc adapté à un cours d'introduction suivi en parallèle avec les premiers cours de théorie quantique et de mécanique statistique. Ce n'est que dans les

chapitres plus avancés et les appendices que nous supposons les lecteurs plus expérimentés.

Les problèmes situés en fin de chapitre sont étroitement liés au texte et se regroupent en trois catégories générales : (a) des étapes de routine de développement analytique sont parfois reléguées dans les problèmes, en partie pour éviter d'alourdir le texte avec des formules sans intérêt intrinsèque, mais, plus important, parce que de telles étapes sont mieux comprises si elles sont complétées par le lecteur à l'aide d'indications et de suggestions ; (b) des compléments du chapitre (que le spectre d'un ouvrage en deux volumes nous évitait d'inclure) sont présentés sous forme de problèmes quand ils se prêtent à ce type d'exposé ; (c) des applications numériques et analytiques supplémentaires sont données en problème, soit pour donner des informations complémentaires, soit pour tester des outils nouvellement acquis. Les lecteurs devraient donc examiner ces problèmes, même s'ils n'ont pas l'intention d'essayer de les résoudre.

Bien que nous ayons respecté l'adage selon lequel une image vaut mieux qu'un long discours, nous avons aussi conscience qu'une illustration uniquement décorative prendrait un espace qui pourrait être utilement rempli par une petite discussion. Le lecteur rencontrera ainsi des passages sans aucune illustration à côté de sections dont il pourra prendre connaissance en examinant uniquement les figures et leurs légendes.

Nous anticipons l'utilisation de ce livre à plusieurs niveaux en mettant principalement l'accent sur différents domaines. Un cours enseigné ne suit probablement pas les chapitres dans l'ordre où ils sont présentés ici, et nous les avons écrits de manière à permettre une sélection et un réarrangement faciles. L'enchaînement des chapitres suit certains thèmes majeurs du sujet, partant d'un premier exposé élémentaire et allant jusqu'à des aspects plus avancés, avec un minimum de digression.

Nous commençons le livre¹ avec les aspects élémentaires classiques [1] et quantiques [2] de la théorie des électrons libres dans les métaux, car celle-ci requiert un minimum de connaissances et introduit immédiatement, par l'entremise d'exemples choisis, presque tous les phénomènes auxquels la théorie des isolants, celle des semiconducteurs et celle des métaux doivent faire face. On épargne ainsi au lecteur l'impression qu'il ne peut rien comprendre sans maîtriser au préalable une multitude de définitions obscures (relatives aux structures périodiques) et d'explorations quantiques élaborées (des systèmes périodiques).

Les structures périodiques ne sont introduites qu'après une étude des propriétés métalliques [3] qui peuvent et ne peuvent pas être comprises sans rechercher les conséquences de la périodicité. Nous avons essayé d'alléger les difficultés liées à un premier contact avec le langage des systèmes périodiques (a) en séparant les conséquences très importantes de la seule symétrie de translation [4,5] des aspects restants, mais moins essentiels, liés aux rotations [7], (b) en séparant la description dans l'espace ordinaire [4] de celle

1. Les références aux numéros des chapitres sont données entre crochets.

dans l'espace réciproque moins familier [5], et (c) en séparant le traitement abstrait et descriptif de la périodicité de ses applications élémentaires à la diffraction des rayons X [6].

Armés de la terminologie des systèmes périodiques, les lecteurs peuvent poursuivre vers les chapitres abordant la résolution des difficultés du modèle des électrons libres des métaux ou, alternativement, ils peuvent s'embarquer directement vers l'étude des vibrations du réseau. Le livre suit la première ligne. Le théorème de Bloch est décrit et ses implications examinées [8] de manière générale, pour insister sur le fait que ses conséquences transcendent les cas pratiques instructifs et très importants des électrons presque libres [9] et des liaisons fortes [10]. La plus grande partie du contenu de ces deux chapitres s'adapte bien à un cours plus avancé, comme l'étude des méthodes utilisées pour calculer les structures de bandes réelles [11]. Nous introduisons ensuite la mécanique semi-classique et donnons ses applications élémentaires [12] avant de les incorporer dans la théorie semi-classique du transport plus élaborée [13]. La description des méthodes de mesure des surfaces de Fermi [14] est plus adaptée aux lecteurs avancés, mais la plus grande partie de l'étude des structures de bandes des métaux réels [15] s'incorpore facilement dans un cours élémentaire.

Mise à part la discussion de l'effet d'écran, un cours élémentaire peut éventuellement éluder les problèmes concernant l'approximation du temps de relaxation [16] et des interactions électron-électron [17].

Les travaux d'extraction et autres propriétés des surfaces [18] peuvent être abordés n'importe quand après l'étude de la symétrie de translation dans l'espace réel. Notre description de la classification conventionnelle des solides [19] a été séparée de l'analyse des énergies de cohésion [20]. Nous avons placé ces deux chapitres après l'introduction aux structures de bandes, car c'est en termes de structure électronique que les catégories se distinguent le plus nettement.

Pour motiver l'étude des vibrations du réseau (que les lecteurs peuvent aborder dès le chapitre 5), un résumé [21] dresse la liste des propriétés des solides qui ne peuvent être comprises sans les prendre en compte. Nous donnons une introduction élémentaire à la dynamique du réseau en traitant séparément les aspects classiques [22] et quantiques [23] du cristal harmonique. Les manières de mesurer les spectres des phonons [24], les conséquences de l'anharmonicité [25], et les problèmes spéciaux associés aux phonons dans les métaux [26] et les cristaux ioniques [27] sont étudiés à un niveau élémentaire, bien que certaines parties de ces quatre derniers chapitres puissent être réservées à un cours plus avancé. Aucun des chapitres sur les vibrations du réseau ne repose sur l'utilisation des opérateurs de création et d'annihilation de modes normaux ; ceux-ci sont décrits dans plusieurs appendices à l'attention des lecteurs qui veulent approfondir le sujet.

Les semiconducteurs homogènes [28] et hétérogènes [29] peuvent être examinés n'importe quand après l'introduction du théorème de Bloch et la

discussion élémentaire de la mécanique semi-classique. L'étude des défauts cristallins [30] peut être envisagée dès l'introduction des cristaux eux-mêmes, bien qu'ils se réfèrent à des parties de chapitres précédents.

Après une étude récapitulative du magnétisme atomique, nous examinons comment celui-ci est modifié dans un environnement solide [31], nous explorons l'échange et les autres interactions magnétiques [32], et nous appliquons à l'ordre magnétique les modèles qui en résultent [33]. Cette brève introduction au magnétisme et le texte de conclusion sur la supraconductivité [34] sont, dans une large mesure, indépendants. Ils sont placés à la fin du livre ; ainsi ces phénomènes peuvent être vus, non en termes de modèles abstraits, mais en tant que propriétés frappantes des solides réels.

C'est avec consternation que nous avons découvert qu'il est impossible, à la fin d'un projet de sept ans, élaboré non seulement à Cornell, mais aussi durant de longs séjours à Cambridge, Londres, Rome, Wellington et Jülich, de rappeler toutes les occasions où des étudiants, des stagiaires postdoctoraux, des visiteurs et des collègues nous ont fait des critiques inestimables, nous ont conseillé et donné des directives. Parmi d'autres, nous sommes redevables à V. Ambegaokar, B. W. Batterman, D. Beaglehole, R. Bowers, A. B. Bringer, C. di Castro, R. G. Chambers, G. V. Chester, R. M. Cotts, R. A. Cowley, G. Eilenberger, D. B. Fitch, C. Friedli, V. Heine, R. L. Henderson, D. F. Holcomb, R. O. Jones, B. D. Josephson, J. A. Krumhansl, C. A. Kukkonen, D. C. Langreth, W. L. McLean, H. Mahr, B. W. Maxfield, R. Monnier, L. G. Parratt, O. Penrose, R. O. Pohl, J. J. Quinn, J. J. Rehr, M. V. Romerio, A. L. Ruoff, G. Russakoff, H. S. Sack, W. L. Schaich, J. R. Schrieffer, J. W. Serene, A. J. Sievers, J. Silcox, R. H. Silsbee, J. P. Straley, D. M. Straus, D. Stroud, K. Sturm et J. W. Wilkins.

Une personne, cependant, a influencé presque tous les chapitres. Michael E. Fisher, « Horace White Professor » de chimie, de physique *et* de mathématiques, ami et voisin, rigoriste et poète, commença à lire le manuscrit il y a six ans et continua depuis lors, nous suivant sans relâche à la trace, à travers chaque chapitre et, à l'occasion, à travers les révisions et les re-révisions, se jetant sur les obscurités, condamnant les malhonnêtetés, décriant les omissions, nommant les axes, corrigeant les fautes, redessinant les figures, et *rendant souvent nos vies beaucoup plus difficiles par son insistance inflexible* à nous pousser à être plus cultivés, précis, intelligibles et minutieux. Nous espérons qu'il sera content de constater que nombre de ses apostilles rouges illisibles ont été suivies dans notre texte, et nous souhaitons connaître de sa part celles qui n'y sont pas.

L'un de nous (N.D.M) remercie tout particulièrement la fondation Alfred P. Sloan et la fondation John Simon Guggenheim pour leur soutien généreux aux étapes critiques de ce projet, et ses amis de l'Imperial College de Londres et de l'Istituto di Fisica *G. Marconi*, où des parties de ce livre ont été rédigées. Cet auteur est aussi profondément redevable à R. E. Peierls, qui lui a appris combien la physique des solides est une discipline

de beauté, de clarté et de cohérence. Le second auteur (N.W.A), ayant appris la discipline par J. M. Ziman et A. B. Pippard, n'a jamais ressenti de besoin de conversion. Il souhaite aussi reconnaître avec gratitude le soutien et l'hospitalité de la Kernforschungsanlage Jülich, de l'université Victoria de Wellington et du laboratoire Cavendish et du Clare Hall de Cambridge.

Ithaca N. W. Ashcroft
Juin 1975 N. D. Mermin

en termes de l'opérateur de quantité de mouvement, 941
 Translation d'un réseau de Bravais, 81
 Transmission (coefficient de), pour une barrière de potentiel, 174
 Travail d'extraction, 422
 de surfaces non équivalentes, 426
 et émission thermoionique, 430
 et potentiels de contact, 429
 table, 435
 Triclinique (système cristallin), 139
 Trigonal (système cristallin), 140
 exemples pris parmi les éléments, 150
 relation avec le système cubique, 140
 relation avec le système hexagonal, 147
 Triplet d'états, 805
 différence d'énergie singulet-triplet, 806
 Triplets (appariement de), 884
 Trivalents (métaux), 355
 Trous, 269, *voir aussi* Semi-classique (modèle) ; Semi-conducteurs
 et conduction dans les semi-conducteurs, 670
 et conductivité en courant continu, 297
 et effet Hall, 281
 masse effective, 271
 et pouvoir thermoélectrique, 306
 Trous (orbites de), 273
 dans les métaux nobles, 346
 Trous (surface de), 197
 dans l'aluminium, 357
 dans le plomb, 360
 Tube de Landau, 323
 Tunnel (effet)
 interprétation du mouvement des électrons de Bloch, 219
 entre un métal normal et un supraconducteur, 877
 et gap d'énergie, 877
 entre supraconducteurs
 effets Josephson, 896
 normal, 896

U

Ultrasonore (atténuation), 328
 dans les supraconducteurs, 879
 Umklapp (processus), 599
 et choix de la maille primitive, 599
 et conductivité thermique, 601
 et conservation du moment cristallin, 599
 "gel", 599
 et processus normal, 599
 et résistivité électrique, 628
 et traînage de phonons, 631

V

Valence (bande de), *voir* Bande de valence

Valence (électrons de), *voir* Electrons de valence
 van der Waals (forces de), 462
 dans les cristaux ioniques, 478
 origine, 466
 et potentiel de Lennard-Jones, 472
 van Hove (singularités de)
 dans la densité de niveaux de phonons, 553, 557
 dans la densité de niveaux électroniques, 172, 177
 dans le modèle des électrons presque libres, 203
 van Leeuwen (théorème de), 319, 770
 Van Vleck (paramagnétisme de), *voir* Paramagnétisme
 Vecteurs d'onde (densité de), 39, 161
 Vecteurs primitifs, 74
 algorithme de construction, 98
 Vibrations du réseau, *voir aussi*
 Anharmoniques (termes) ; Moment cristallin ; Debye (modèle de) ; Harmonique (approximation) ; Phonons ; Polarisation
 anomalies de Kohn, 615
 approximation harmonique, 504
 branche acoustique, 517, 520, 526
 branche optique, 517, 519, 526
 et chaleur spécifique, 506, 539
 et constante diélectrique des métaux, 615
 dans les cristaux ioniques, 636, 651
 densité d'énergie thermique, 540
 densité de modes normaux, 552
 dépendance en volume des fréquences, 584
 détermination du spectre
 par diffraction des rayons X, 953
 par diffusion de neutrons, 559
 par diffusion des neutrons, 952
 détermination du spectre par diffusion de la lumière, 573
 et diffraction des rayons X, 953
 et diffusion des électrons, 256, 625
 et dilatation thermique, 584, 589
 et effets anharmoniques, 502, 581
 interaction du rayonnement avec les —, 559
 et interactions à longue portée, 524, 528, 532
 matrice dynamique, 523
 dans les métaux, 611
 relation de Bohm-Staver, 614
 relation de dispersion détaillée, 631
 modèle d'Einstein, 548
 modèle d'Einstein du spectre, 554
 modèle de Debye, 544
 modèle de Debye du spectre, 554
 moment cristallin, 574, 939

opérateur de création et d'annihilation, 934
 paquets d'ondes, 591
 polarisation, 523, 934, 937
 et pouvoir thermoélectrique, 306
 d'un réseau à motif à une dimension, 515
 d'un réseau de Bravais monoatomique à une dimension, 511
 d'un réseau de Bravais monoatomique tridimensionnel, 520, 535
 d'un réseau tridimensionnel à motif, 526
 et résistivité électrique, 373, 496, 624
 résumé des conséquences physiques majeures, 494
 et singularités de van Hove, 553
 et supraconductivité, 882
 théorie classique, 501
 et théorie de l'élasticité, 527
 théorie quantique, 537, 933
 Vitesse des électrons de Bloch, 167, 915
 dans le modèle des liaisons fortes, 219
 Voisins (plus proches), 82
 Voltmètre (ce qu'il mesure), 304
 Voronoy (polyèdre de), 86
 Vortex dans les supraconducteurs, 875
 et quantum de flux magnétique, 875
 et théorie de Ginzburg-Landau, 893

W

Wannier (fonctions de), 221
 relations d'orthogonalité, 225
 utilisation, 223
 Whiskers, 760

Wiedemann-Franz (loi de), 23, *voir aussi*
 Conductivité thermique des métaux ; Lorentz (nombre de)
 dans le modèle semi-classique, 304
 théorie classique, 27
 succès accidentel, 28, 60
 dans la théorie des électrons libres, 60
 Wigner (cristal de), 817
 Wigner-Eckart (théorème de), 779, 796
 Wigner-Seitz (maille de), 85
 algorithme de construction, 86
 à deux dimensions, 97
 du réseau de Bravais cubique à faces centrées, 86, 97
 du réseau de Bravais cubique centré, 86, 97
 du réseau réciproque, *voir* Brillouin (première zone de)
 Wronskien, 176
 Wurtzite (structure de la), 459

X

X (rayons), *voir* Rayons X

Y

Yukawa (potentiel de), 406

Z

Zone d'appauvrissement, 705, *voir aussi*
 Jonction *p-n*
 Zone large, 199