

# Propriétés électriques des métaux

- Ordre atomique et théorie des bandes
- Théorie classique de la conductivité (modèle de Drude ou de l'électron libre)
- Mobilité des électrons
- Résistivité et température
- Conductivité des alliages (règle de Nordheim)

# Contenu du cours: variation

Date	Thème
12 Sept	Introduction, que c'est les propriétés fonctionnelles <b>Chapitre 1.</b> Introduction au cours <b>Chapitre 2.</b> Structure de la matière solide
19 Sept	<b>Chapitre 3.</b> Conduction dans les métaux
26 Sept	<b>Chapitre 4.</b> Conduction dans les matériaux ioniques + Introduction au propriétés diélectrique
3 Oct	<b>Chapitre 5.</b> Constantes diélectriques + Introduction au propriétés optiques
10 Oct	<b>Chapitre 6.</b> Modèle classique interaction + Propriétés optiques électrons libres
17 Oct	Serie nr 1 d'exercices
31 Oct	Visites laboratoires
7 Nov	<b>Chapitre 7.</b> Bandes et effet sur les propriétés optiques et électriques
14 Nov	Pitch visite
21 Nov	<b>Chapitre 8:</b> Propriétés magnétiques
28 Nov	<b>Chapitre 9:</b> Propriétés thermiques
5 Dec	Série nr 2 exercices
12 Dec	<b>Chapitre 10:</b> Propriétés des matériaux nano
19 Dec	Simulation Examen + Q&A

**INDIQUEZ ICI VOTRE PRESENCE POUR LES VISITES AUX LABORATOIRES AVANT LE 30/09:**

[https://docs.google.com/spreadsheets/d/1\\_IIQf9p2XSAOpb5OhQClpG4Aj4RdC8BrT4MKFvgq5Tw/edit?usp=sharing](https://docs.google.com/spreadsheets/d/1_IIQf9p2XSAOpb5OhQClpG4Aj4RdC8BrT4MKFvgq5Tw/edit?usp=sharing)

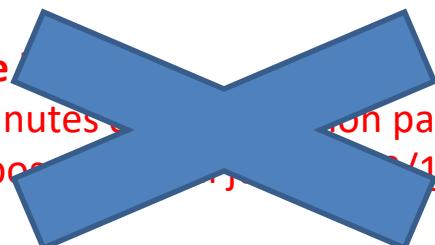
**Activité évalué pendant le semestre**

**Série nr 1:**

- Disponible sur Moodle le 10/10
- Rendu sur Moodle le 31/10 à 13h00

**Pitch de**

- 5 minutes par group
- Diapositives 28/11 à 13h00

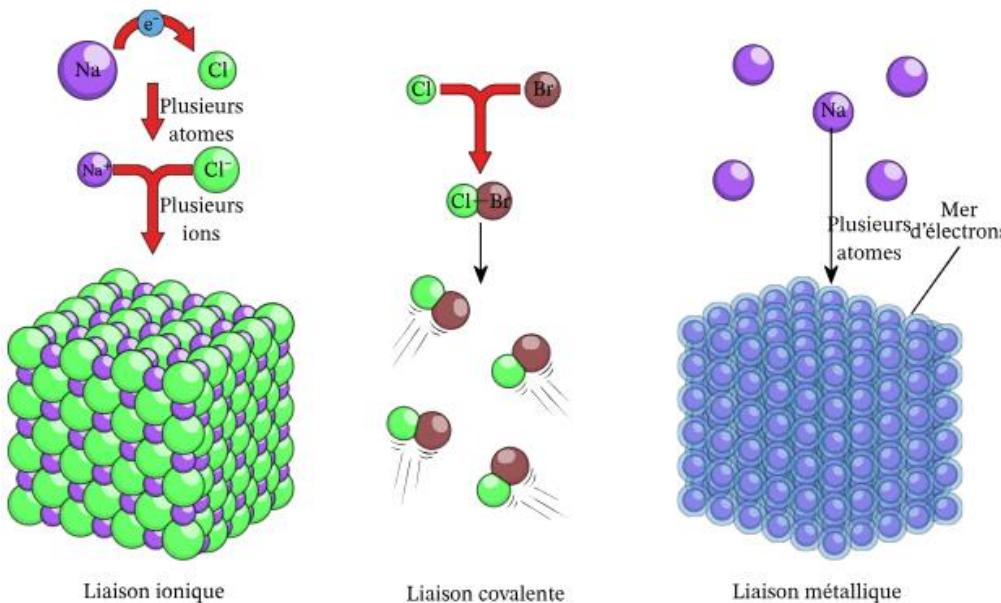


**Avec TAs**

**Série nr 2:**

- disponible sur Moodle le 28/11
- Rendu sur Moodle le 12/12 à 13h00

# Le cours de la semaine passée en bref

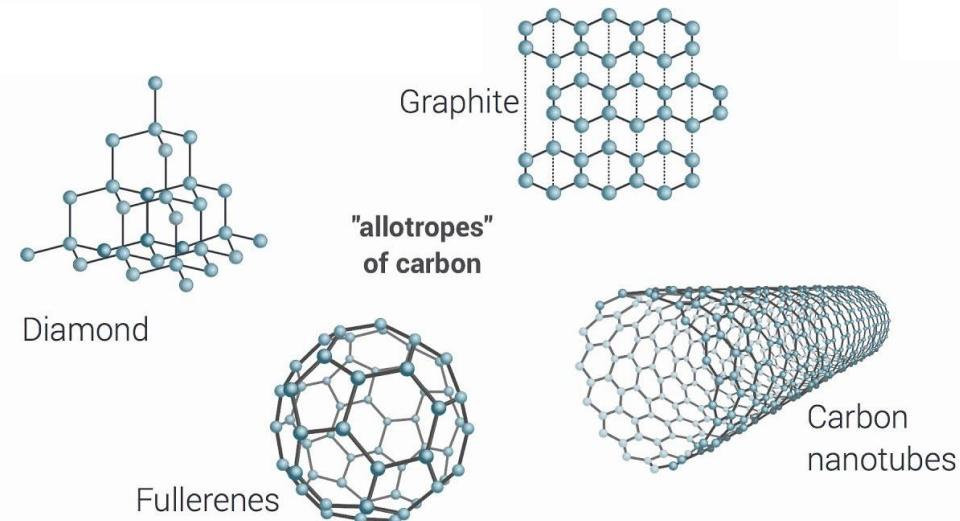


## Les liaisons

Periodic table of the elements																			
period	group	Alkali metals			Halogens			Noble gases			Rare-earth elements (21, 39, 57-71)			Lanthanoid series			Actinoid elements		
		1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	
1	H	Li	Be	Mg	Na	Al	Si	P	Cl	Ar	K	Ca	Sc	B	C	N	O	F	
2														B	C	N	O	F	
3	11	12	13	14	15	16	17												
4	19	20	21	22	23	24	25	26	27	28	29	30	31	32	33	34	35	36	
5	37	38	39	40	41	42	43	44	45	46	47	48	49	50	51	52	53	54	
6	Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe	
7	55	56	57	58	59	72	73	74	75	76	77	78	79	80	81	82	83	84	
	Cs	Ba	La	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Og	
	87	88	89	104	105	106	107	108	109	110	111	112	113	114	115	116	117	118	
	Fr	Ra	Ac	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Ds	Rg	Cn	Nh	Fl	Mc	Lv	Ts	Og	
lanthanoid series		56	59	60	61	62	63	64	65	66	67	68	69	70	71				
actinoid series	7	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu				
		90	91	92	93	94	95	96	97	98	99	100	101	102	103				
		Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr				

<sup>a</sup>Numbering system adopted by the International Union of Pure and Applied Chemistry (IUPAC). © Encyclopædia Britannica, Inc.

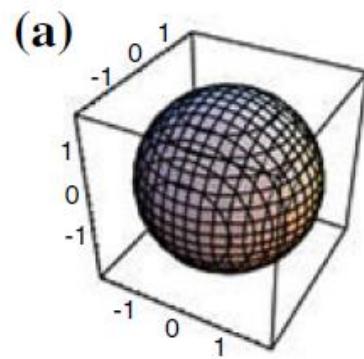
# Nature chimique



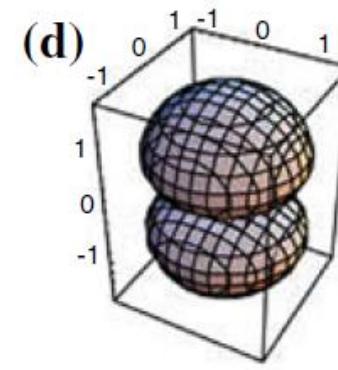
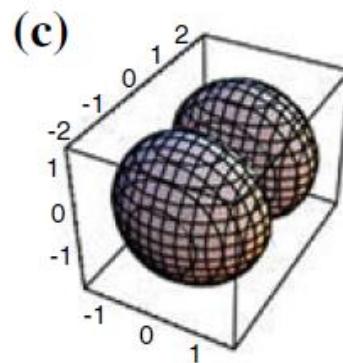
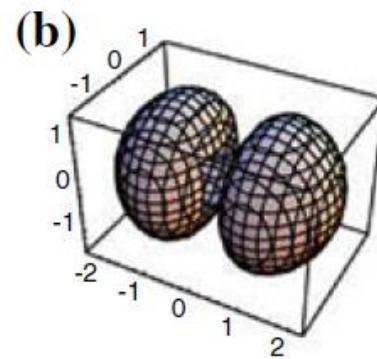
## L'ordre des atoms

# Les orbitaux atomiques

Orbital s avec une symétrie sphérique

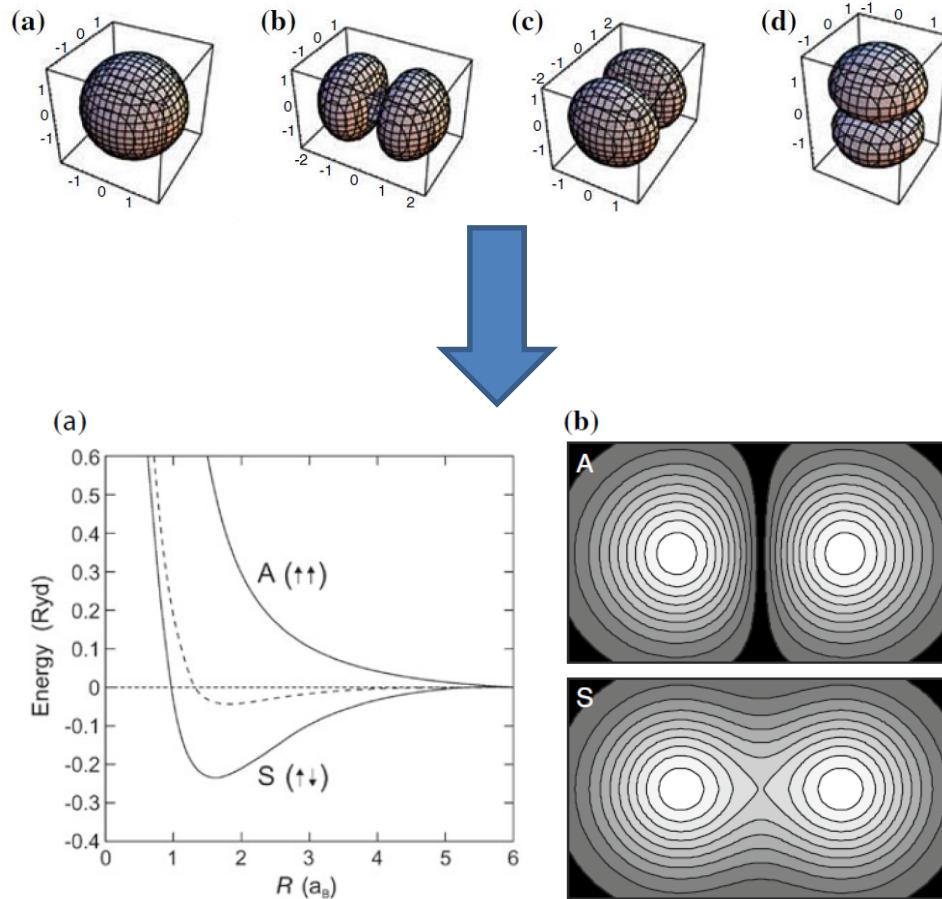


Orbitaux p avec deux lobes en direction x, y et z

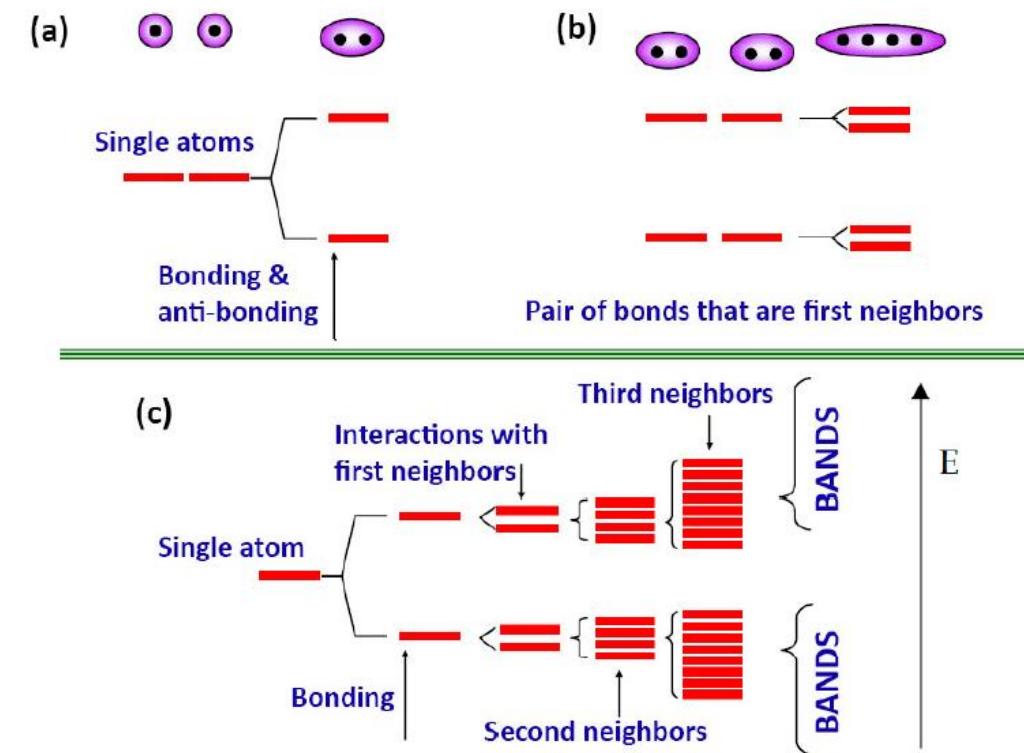


La distribution des électrons dans les niveaux d'énergie atomique (configuration électronique) est liée à leur répartition dans l'espace. Les orbitaux atomiques décrivent les régions de positionnement probable des électrons

# Les orbitaux moléculaires

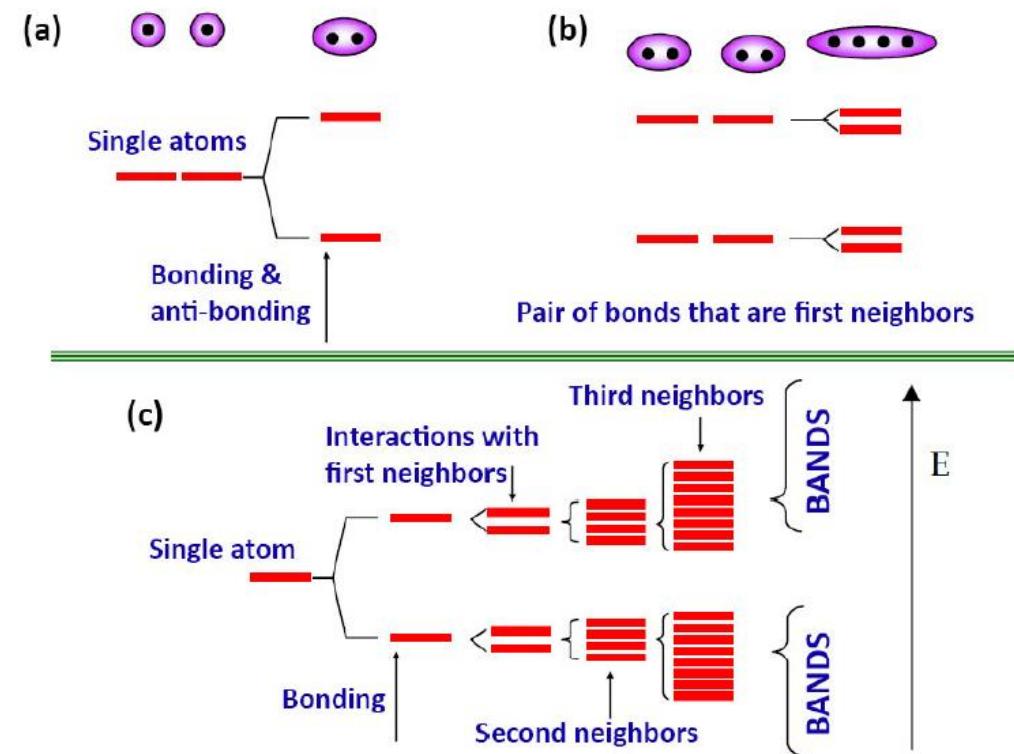


Energie de liaison pour une molécule  $H_2$



# Ordre atomique

Les interactions entre les atomes d'un solide définissent l'environnement énergétique des états électroniques (électrons) et les modes vibrationnels du réseau

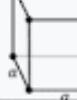


# Symétrie de cristaux

Les cristaux sont des matériaux 3D, donc non seulement la distance entre les atomes, mais aussi la symétrie cristalline est importante

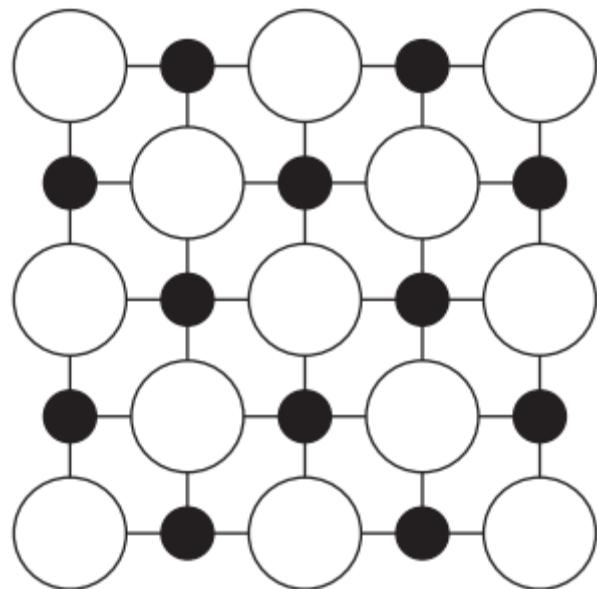
## Principe de von Neumann :

Toute propriété physique macroscopique d'un matériau doit avoir au moins la symétrie de sa structure cristalline.

		primitif	bases-centré	centré	faces-centré
triclinique					
monoclinique		$\beta \neq 90^\circ$ $a \neq c$ 	$\beta \neq 90^\circ$ $a \neq c$ 		
orthorhombique		$a \neq b \neq c$ 	$a \neq b \neq c$ 	$a \neq b \neq c$ 	$a \neq b \neq c$ 
tétragonal		$a \neq c$ 	$a \neq c$ 		
hexagonal	rhombohédral	$\alpha \neq 90^\circ$ 			
	hexagonal	$\gamma = 120^\circ$ 			
cubique					

# Exercice: Symétrie de cristaux (10 minutes)

Na Cl

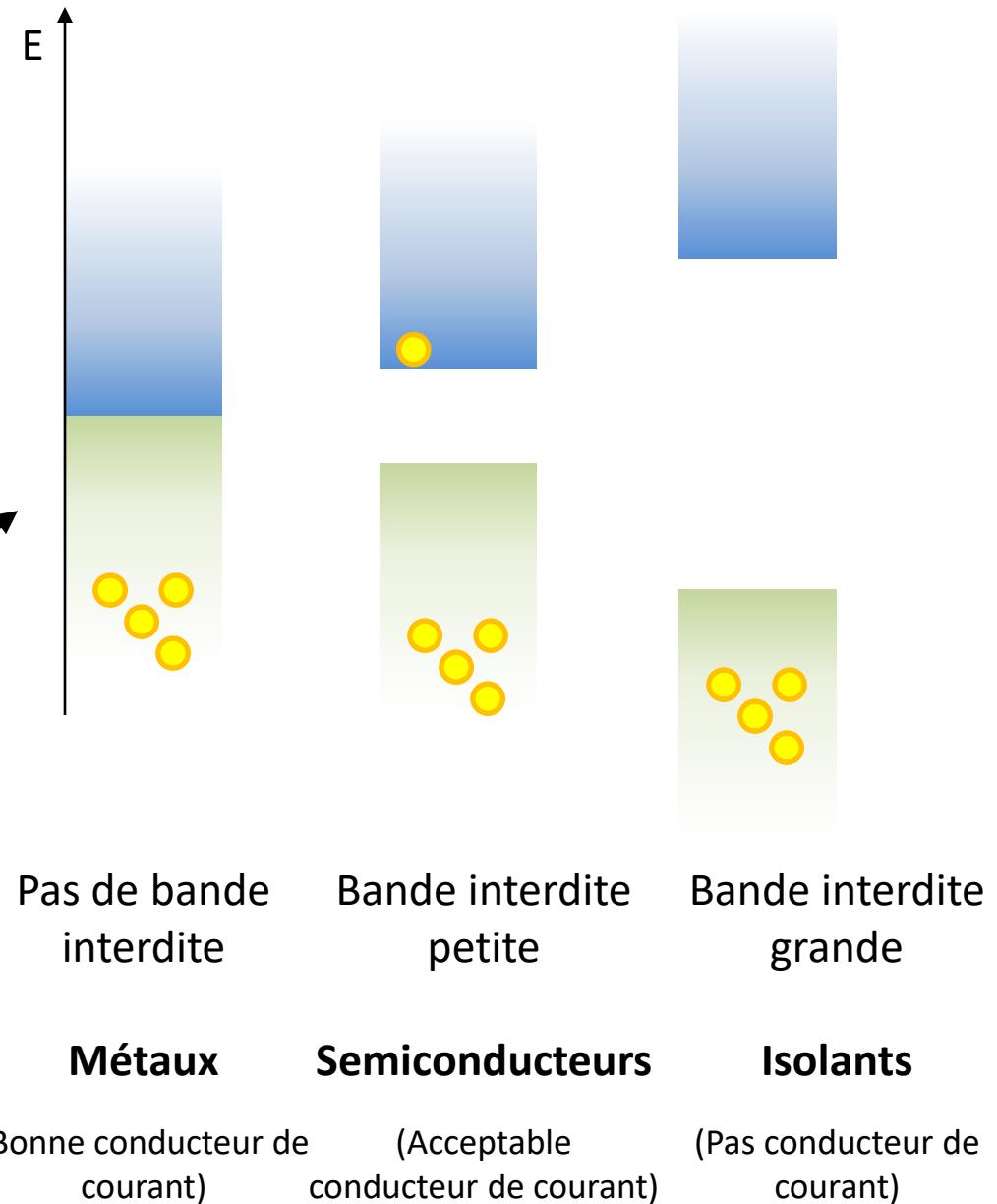
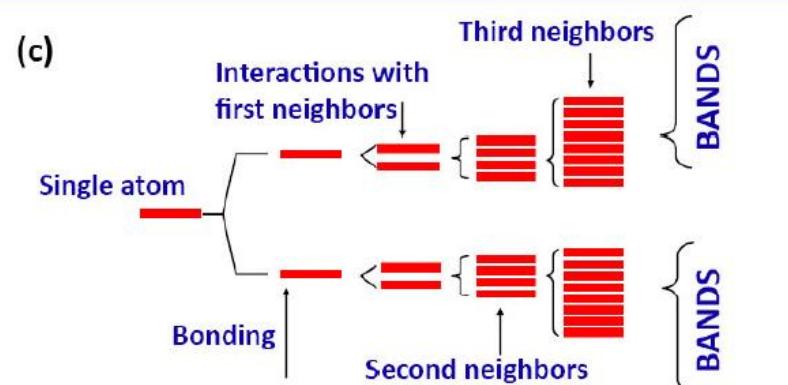
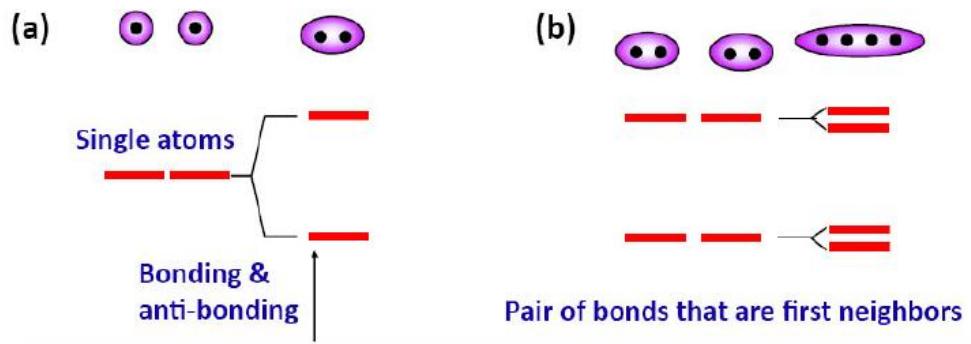


**Q1:** Pouvez-vous indiquer 2 directions équivalentes (D1, D2) et des directions non équivalentes (D1, D3) ?

**Q2:** Est-ce que les propriétés mesurées par D1 et D2 sont les mêmes ? Et les propriétés mesurées par D1 et D3 ?



# Théorie de bande



# Densité d'états

La densité d'états  $g(E)$  correspond au nombre d'états trouvés dans une gamme d'énergies données.

Elle est définie de la façon suivante :

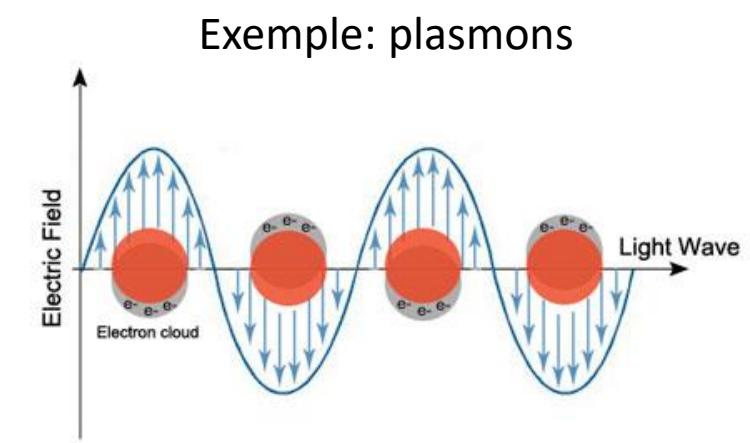
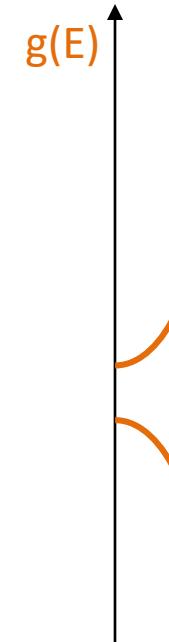
$$N = g(E) dE$$

Avec  $N$  le nombre d'états dans la gamme  $E$  et  $E+dE$

## Etats délocalisés et excitation collectives

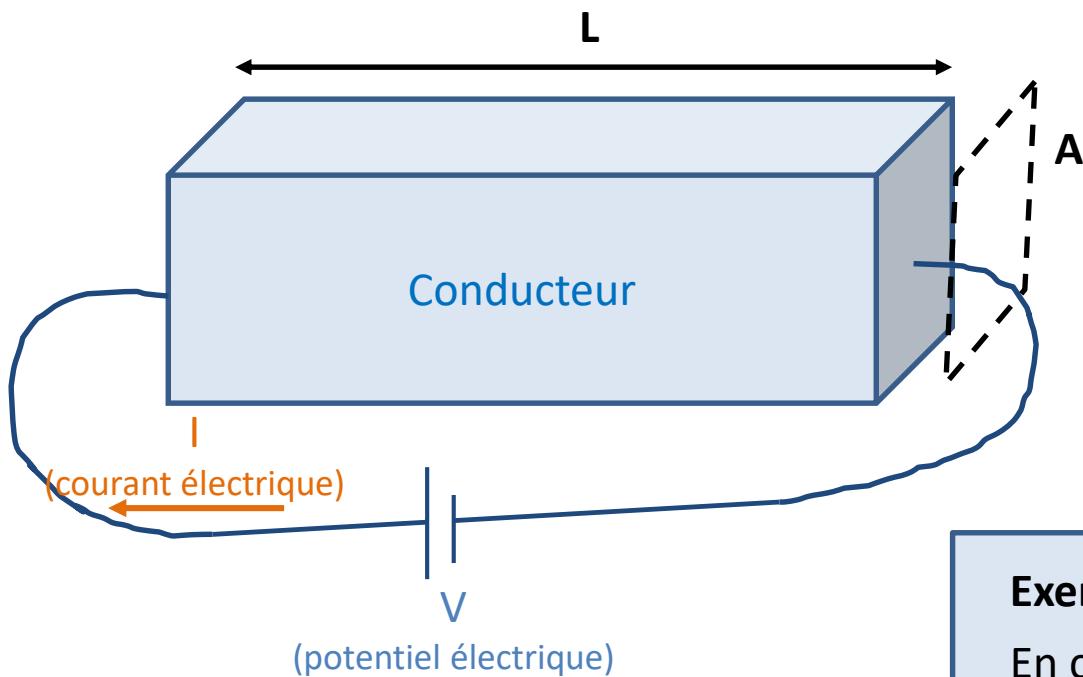
Les électrons délocalisés ‘bougent’, ils se propagent dans le solide grâce à la formation des bandes électroniques.

C'est cette délocalisation qui permet l'existence d'oscillations collectives dans la totalité du cristal plutôt que dans chaque atome.



Pause 5 minutes

# Lois de Ohm



## 1ère Loi de Ohm

$$V = R * I$$

Ou  $R$  est la résistance de l'objet

## 2eme Loi de Ohm

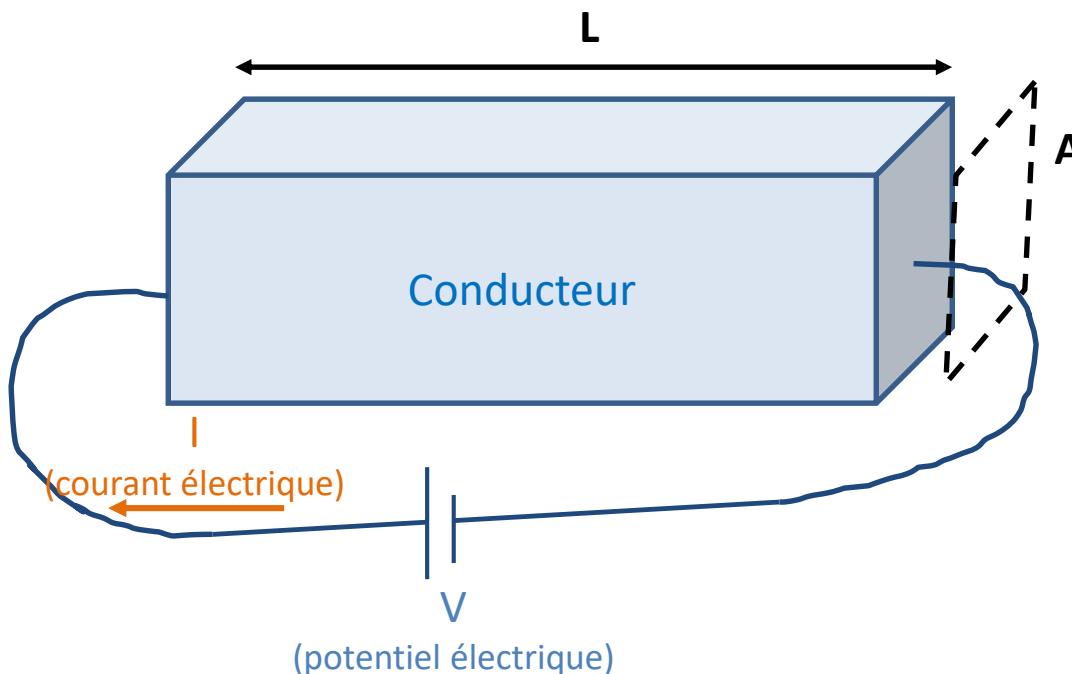
$$R = \rho * \frac{L}{A}$$

Ou  $L$  est la longueur de l'objet,  
 $A$  sa surface de la section transverse et  
 $\rho$  est la résistivité du matériau

### Exercice (5 minutes)

En considérant  $E = \frac{dV}{dx}$  ( $x$  est la direction de la courant),  
pouvez-vous déduire la relation entre la densité de courant  $j$  et  
le champs électrique  $E$ ?

# Lois de Ohm



## 1<sup>ere</sup> Loi de Ohm

$$V = R * I$$

Ou  $R$  est la résistance de l'objet

## 2<sup>eme</sup> Loi de Ohm

$$R = \rho * \frac{L}{A}$$

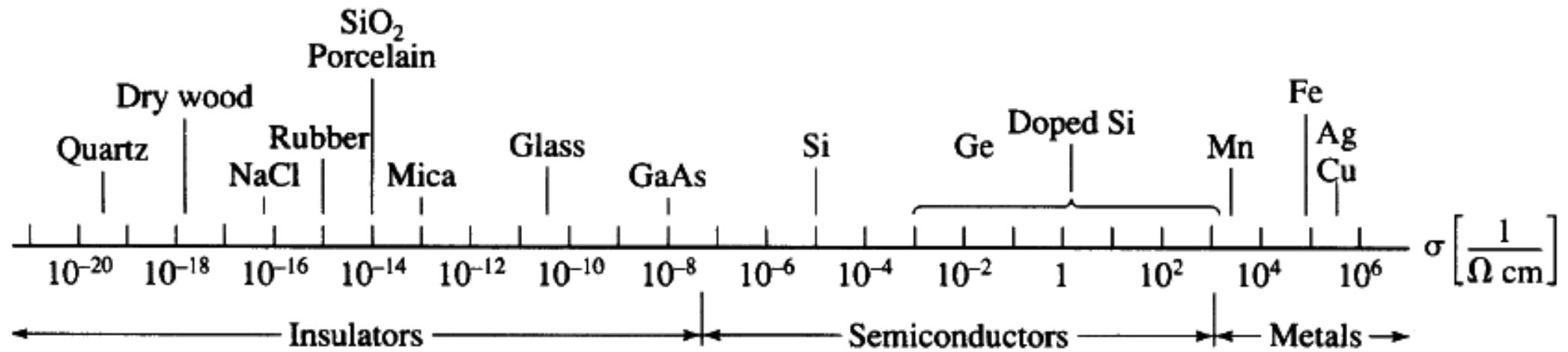
Ou  $L$  est la longueur de l'objet,  
 $A$  sa surface de la section transverse et  
 $\rho$  est la résistivité du matériel

$$E = \frac{dV}{dx} = \frac{dR}{dx} * I = \rho * \frac{1}{A} * I = \rho * j$$

$$j = \frac{1}{\rho} * E = \sigma * E$$

ou  $\sigma$  est la conductivité du matériau

# Matériaux et conductivité



Q (5 minutes):

Sur la base de l'échelle de conductivité, indiquez les matériaux utilisés pour ::

- Fils de haute/basse tension
- Isolant de haute tension
- Cellule solaire

# Modèle classique de la conductivité (modèle de Drude)

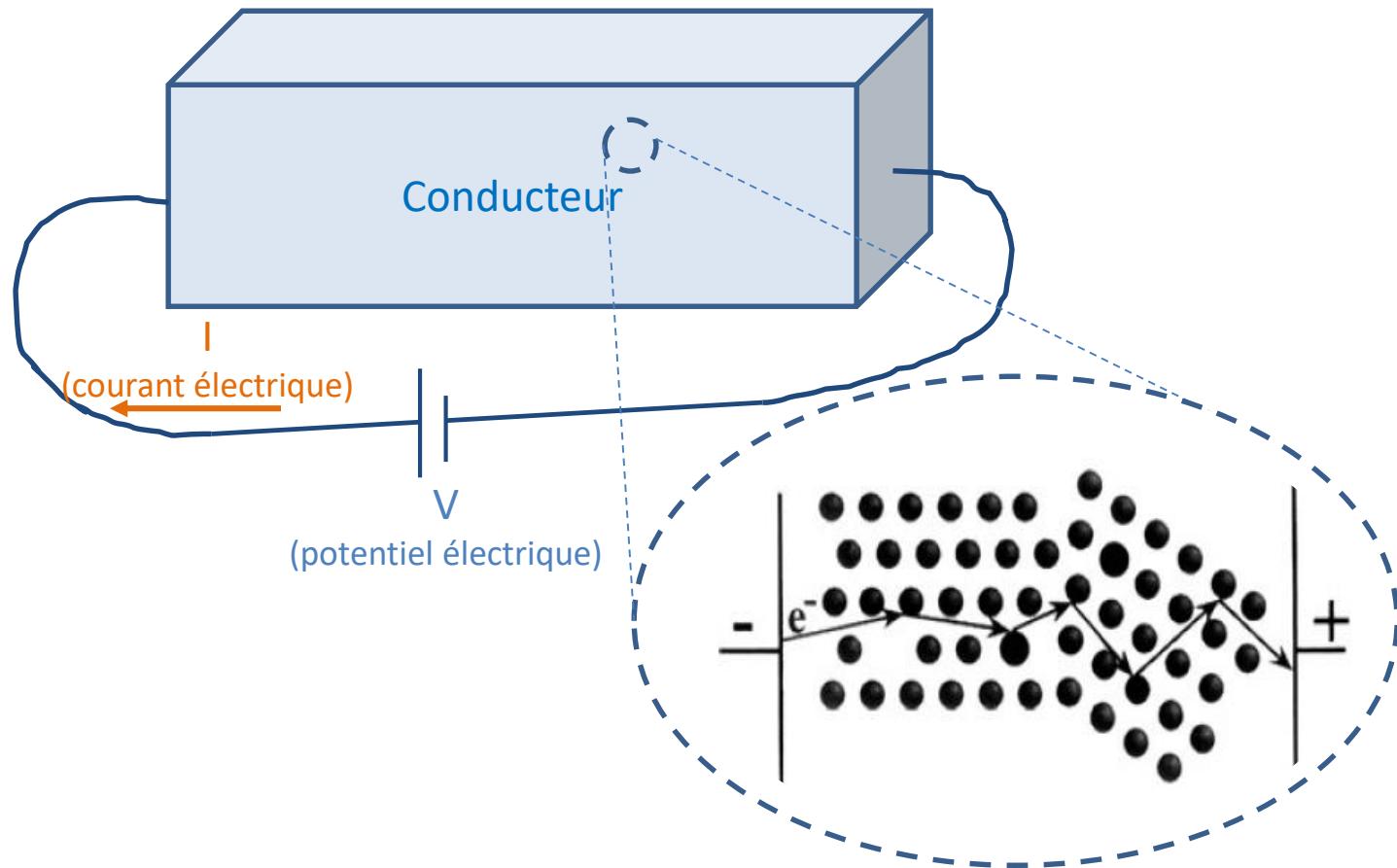
Le courant électrique est transporté par un gaz d'électrons ou plasma.

Celui-ci est formé par les électrons de valence des atomes du matériau conducteur. La densité d'électrons serait donc  $N=N_v * \delta$

Ou  $N_v$  est le nombre d'électrons de valence par atome et  $\delta$  la densité atomique du matériau.

Avec des valeurs de  $N_v$  de l'ordre de 1 (métaux monovalent), ceci traduit à une densité d'électrons entre  $10^{22}$  et  $10^{23}$  atomes/cm<sup>3</sup>.

Les électrons dans le solide 'bougent' de façon indéterminée dans toutes les directions. Lorsque l'on applique un champ électrique, les électrons sont accélérés par une force égale à  $eE$ .



# Modèle classique de la conductivité (modèle de Drude)

Modèle de mouvement des électrons par la Loi de Newton

$$m \frac{dv}{dt} = -eE$$

Modèle de mouvement des électrons par la Loi de Newton modifié

$$m \frac{dv}{dt} + \gamma v = e * E$$

ou  $\gamma v$  est une force de friction d'un milieu visqueux telle que:

$$\frac{dv}{dt} = 0 \rightarrow \gamma = \frac{eE}{v_f}$$

ou  $v_f$  est la vitesse à l'état stationnaire



$$v = v_f \left( 1 - \exp \left( -\frac{eE}{mv_f} t \right) \right)$$

$$\begin{cases} v = v_f \left( 1 - \exp \left( -\frac{t}{\tau} \right) \right) \\ v_f = \frac{\tau e E}{m} \end{cases}$$

# Modèle classique de la conductivité (modèle de Drude)

$$v_f = \frac{\tau e E}{m}$$

ou  $\tau$  est le temps moyen entre collisions

$$j = \sigma E = N * v_f * e$$

ou  $N$  est la densité d'électrons libres

$$\sigma = \frac{N * e^2 * \tau}{m}$$

La conductivité augmente:

- avec la densité d'électrons libres ( $N$ );
- quand  $\tau$  augmente (s'il y a moins de collisions avec le réseaux cristalline)

Concepts liés:

1) Libre parcours moyen : la distance moyenne parcourue entre collisions  $l = v_f \tau$

2) Mobilité : La mobilité ( $\mu$ ) est définie comme le coefficient de proportionnalité entre la vitesse moyenne des électrons et le champ électrique applique :  $v_f = \mu E$  donc est étroitement lié au temps de relaxation  $\tau$ .

En effet:

$$\left\{ \begin{array}{l} \sigma E = N * v_f * e \\ v_f = \mu E \end{array} \right.$$



$$\sigma = N * \mu * e$$

Donc la mobilité quantifie la facilité avec laquelle les électrons peuvent se déplacer à travers un conducteurs lorsqu'on applique un champ électrique.

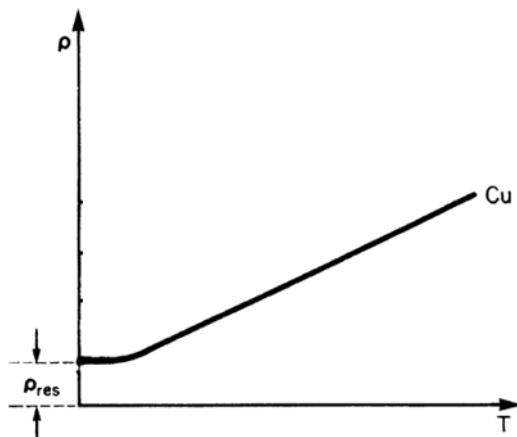
# Résistivité et température dans les métaux

La résistivité des métaux décroît de façon linéaire avec la température jusqu'à une valeur finie.

$$\rho_2 = \rho_1 * [1 - \alpha(T_2 - T_1)]$$

Ou  **$\alpha$  est le coefficient linéaire en température de la résistivité**. On peut comprendre ceci si on considère que les atomes ne restent pas immobiles dans leur position sur le réseau cristallin. Ils vibrent et oscillent autour de leur position d'équilibre.

La résistivité à  $T=0K$ ,  $\rho_{res}$ , est considérée comme étant celle due aux imperfections du cristal et ne dépend pas de  $T$ .



## Loi de Matthiesen

En considérant:

$$\sigma = \frac{N * e^2 * \tau}{m}$$

ou  $\tau$  est le temps moyen entre collisions

Et:

$$f = \frac{1}{\tau}$$

ou  $f$  est la fréquence moyenne de collisions

Plusieurs source de collisions donne un fréquence de collision totale

$$f_{tot} = \sum_i \frac{1}{\tau_i} \longrightarrow \rho_{tot} = \sum_i \rho_i$$

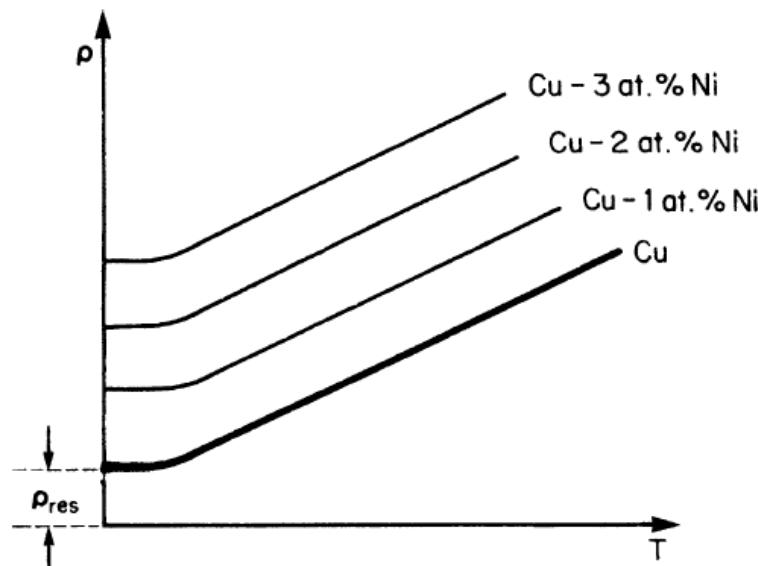
Pour exemple dans le métaux:

$\rho_{tot} = \rho_{th} + \rho_{imp} + \rho_{def}$	Contribution défaut réseau
Contribution thermique	Contribution impuretés

# Résistivité dans les alliages métalliques

$$\rho_{tot} = \rho_{th} + \rho_{imp} + \rho_{def}$$

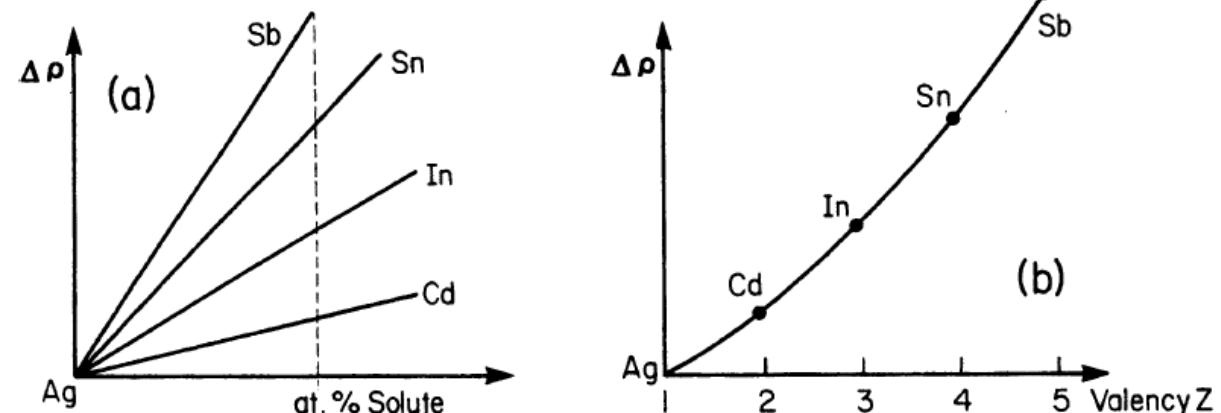
Contribution thermique
Contribution impuretés
Contribution défaut du réseau



Résistivité en fonction de la température pour différentes compositions de l'alliage CuNi

## Origines de $\rho_{imp}$ :

- Atomes de taille différente crée une forte variation dans le réseau. La probabilité de collision augmente
- Les atomes ayant des nombres différents d'électrons de valence peuvent créer des charges locales.
- Les atomes ayant des nombres différents d'électrons peuvent apporter ou enlever des électrons au total d'électrons libres.



## Règle de Nordheim (alliages pas ordonné):

$$\rho = x_A \rho_A + x_B \rho_B + C x_A x_B$$

Ou C dépend du matériau.

Cette règle ne tient pas compte des changement dans la densité d'états ou de la formation de phases ordonnées.

