

Suivi chapitre III :

*) Origine des bandes interdites :

*) Modèle d'électrons quasi-libres :

La structure électronique d'un solide $\equiv$ l'électron $\equiv$ (1)

$\rightarrow$ On a (noyaux, z électrons) $\Rightarrow$ le nombre des particules étudiées $\approx (z+1)N$, noyau, et 3 degrés de liberté $\Rightarrow$ le nombre de équations différentielles $3N(z+1)$ Solution impossible

Approximations utiles :

1) Les noyaux immobiles par rapport aux électrons (différence de masse) (Approximation adiabatique)
2) Pas d'interaction ($\bar{e}-\bar{e}$) (Approximation de l'électron indépendant).

$$\text{d'où : } \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots) = \psi_1(\vec{r}_1) \psi_2(\vec{r}_2) \dots = \prod_i \psi_i(\vec{r}_i)$$

$$\text{et } E = \sum_i E_i$$

$$\text{Alors : } \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 \psi_i + U \psi_i = E_i \psi_i \right] \rightarrow \text{problème}$$

U est le potentiel cristallin (interaction : $\bar{e}$ -ion).
d'après ce potentiel on ajoute d'autres approxi.

$\left\{ \begin{array}{l} \text{- Modèle d'e-quasi libre } (U \ll \rightarrow \text{théorème de perturbation}) \\ \text{- Modèle d'e-fortement lié } \rightarrow \text{le potentiel est atomique : } U = U_{\text{at}} + (\delta U \ll : \text{théorème de perturbation}) \end{array} \right.$

potentiel cristallin:

$$U(\vec{r}) = U(\vec{r} + \vec{R}) \text{ périodique}$$

d'où : $U(\vec{r}) = \sum_{\vec{G}} U_{\vec{G}} e^{i\vec{G} \cdot \vec{r}}$ / $U_{\vec{G}}$ sont les coefficients de Fourier

tel que: $U_{\vec{G}} = \int U(\vec{r}) e^{-i\vec{G} \cdot \vec{r}} d\vec{r}$

$$U^*(\vec{r}) = U(\vec{r}) = \sum_{\vec{G}} U_{\vec{G}} e^{i\vec{G} \cdot \vec{r}} = \sum_{-\vec{G}} U_{-\vec{G}} e^{-i\vec{G} \cdot \vec{r}}$$

$$U^*(\vec{r}) = \sum_{\vec{G}} U_{\vec{G}}^* e^{-i\vec{G} \cdot \vec{r}} \quad / \quad U_{\vec{G}}^* = U_{-\vec{G}}$$

$$U(\vec{r}) = U(-\vec{r})$$

d'où $U(\vec{r})$ est centrosymétrique

on a: $\left. \begin{matrix} U_{-\vec{G}} = U_{\vec{G}} \\ U_{-\vec{G}} = U_{\vec{G}}^* \end{matrix} \right\} \rightarrow U_{\vec{G}} = U_{\vec{G}}^* \left(\begin{matrix} \text{donc } U_{\vec{G}} \text{ sont} \\ \text{centrosymétriques} \\ \text{et réelles} \end{matrix} \right)$

$$\begin{aligned} \rightarrow U(\vec{r}) &= \sum_{\vec{G}} U_{\vec{G}} e^{i\vec{G} \cdot \vec{r}} = \sum_{\vec{G} > 0} U_{\vec{G}} (e^{i\vec{G} \cdot \vec{r}} + e^{-i\vec{G} \cdot \vec{r}}) \\ &= 2 \sum_{\vec{G} > 0} U_{\vec{G}} \cos \vec{G} \cdot \vec{r} \end{aligned}$$

$$\vec{G} \cdot \vec{r} = Gx \quad / \quad G = \frac{2\pi}{a} n$$

d'où: $U(x) = 2 \sum_n U_n \cos \frac{2\pi n}{a} x$

$\rightarrow$ condition de Bragg:

$$\vec{k} + \vec{G} = \vec{k}' \rightarrow (\vec{k} + \vec{G})^2 = (\vec{k}')^2 \quad / \quad k = k'$$

$$k^2 + 2\vec{k} \cdot \vec{G} + G^2 = k^2 \rightarrow 2\vec{k} \cdot \vec{G} = -G^2$$

$$\rightarrow \underline{\underline{k = \frac{G}{2} = \frac{n\pi}{a}}}$$

→ Approximation de l'électrostatisme spinosité-libre

$$U \ll \cdot \text{ (pert.)}$$

$$\psi_+ = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{iKx}, \psi_- = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{-iKx}$$

→ Approximation d'ordre 1; (pour les états dégénérés)

$$\Delta E_+ = \langle + | U | + \rangle$$

$$U = 2 \sum_n U \cos \frac{2\pi n}{a} x$$

$$\rightarrow \Delta E_+ = \frac{U}{L} \int_0^L \cos^2 \frac{m\pi}{a} x \sum_n U \cos \frac{2\pi n}{a} x dx$$

$$\cos^2 \alpha = \cos^2 \alpha - \sin^2 \alpha = \cos^2 \alpha - (1 - \cos^2 \alpha) = 2\cos^2 \alpha - 1$$

$$\cos^2 \alpha = \frac{1}{2} (1 + \cos 2\alpha)$$

$$\Delta E_+ = \frac{U}{L} \int_0^L (1 + \cos \frac{2\pi m}{a} x) \sum_n U \cos \frac{2\pi n}{a} x dx$$

$$= \frac{U}{L} \left\{ \sum_n \int_0^L U \cos \frac{2\pi n}{a} x dx + \sum_n \int_0^L U \cos \frac{2\pi n}{a} x \cos \frac{2\pi m}{a} x dx \right\}$$

$$\delta_{nm} = \begin{cases} 0 & \text{si } n \neq m \\ 1 & \text{si } n = m \end{cases}$$

$$\cos \frac{2\pi n}{a} x$$

$$\int_0^L dx =$$

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

$$\Delta E_+ =$$

$$\cos \frac{2\pi}{a} m x \sqrt{2}$$

$$\text{donc: } \Delta E_+ = +U_m$$