

Cours Matière Condensée

Nathan

Chapitre 1. Cristaux en $d=3$

Solide = arrangement régulier d'atomes

1. définition d'un réseau

$$R = m_1 \vec{a}_1 + m_2 \vec{a}_2 + m_3 \vec{a}_3$$

Point de coordonnées entières dans la base \vec{a}_i

⚠ Choix de base non unique.

parcours de l'espace: cellule + translation

≠ type de cellules: cellule primitive
cellule conventionnelle

crystal = arrangement régulier d'atomes
↳ position dans cellules élémentaires.
+ réseau

A. Bravais (1850)	14 réseaux	en $d=3$
	5	" $d=2$
	1	" $d=1$

2. Réseau réciproque

ondes : * électromagnétiques
* déformation : phonon
* lumière dans un cristal

} $e^{i\vec{h}\cdot\vec{r}}$

2 vecteurs \vec{h} et \vec{h}' décrivent même ondes
sur un réseau si $e^{i\vec{h}\cdot\vec{R}} = e^{i\vec{h}'\cdot\vec{R}} \quad \forall \vec{R} \in \text{réseau}$

$$\vec{k} - \vec{k}' = \vec{G} \quad \text{et} \quad e^{i\vec{G} \cdot \vec{r}} = 1 \quad \forall \vec{r} \in \text{réseau}$$

$$\Leftrightarrow \vec{G} \cdot \vec{r} = 2\pi m \quad \forall \vec{r}$$

$\Leftrightarrow \vec{G}$ appartient au réseau réciproque

$$\vec{G} = h\vec{b}_1 + k\vec{b}_2 + l\vec{b}_3 \quad \vec{a}_i \cdot \vec{b}_j = 2\pi \delta_{ij}$$

en $d=3$: $\vec{b}_1 = 2\pi \frac{\vec{a}_2 \wedge \vec{a}_3}{\underbrace{a_1 \cdot (\vec{a}_2 \wedge \vec{a}_3)}}$

ou $\vec{b}_i = 2\pi \epsilon_{ijk} \frac{\vec{a}_j \wedge \vec{a}_k}{\underbrace{a_i \cdot (\vec{a}_j \wedge \vec{a}_k)}}$

Cellule de Wigner-Seitz du réseau réciproque
 zone de Brillouin = ensemble des valeurs
 possibles de \vec{h}

Lien avec la transformée de Fourier.

TF d'une fonction périodique possède des modes dans le réseau réciproque.

Par exemple $\rho(\vec{r}) = \sum_{\vec{r}} \delta(\vec{r} - \vec{r})$

à $d=1$: $\rho(x) = \sum_{m=-\infty}^{+\infty} \delta(x - am)$

$$\begin{aligned} \text{TF}(\rho(x))(k) &= \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{ikx} \rho(x) \\ &= \sum_{m=-\infty}^{+\infty} e^{ikma} \end{aligned}$$

$$= \frac{2\pi}{a} \sum_{m=-\infty}^{+\infty} \delta(k - \frac{2\pi m}{a})$$

en $d=3$: $\text{TF}(\rho(\vec{r})) = \sum_{\vec{r}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} = \frac{(2\pi)^3}{\vec{a}_i \cdot (\vec{a}_2 \wedge \vec{a}_3)} \cdot \sum_{\vec{G}} \delta(\vec{k} - \vec{G})$

Pour $f(\vec{r})$ périodique sur un réseau,
 $f(\vec{r}) = f(\vec{r} + \vec{R}) \quad \forall \vec{R} \in \text{réseau}$

$$\begin{aligned} \text{TF } |f\rangle &= \int d^3\vec{r} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} f(\vec{r}) \\ &= \sum_{\vec{R}} \int_{\text{cellule}} d^3\vec{r} e^{i\vec{k}\cdot(\vec{r} + \vec{R})} f(\vec{r} + \vec{R}) \\ &= \sum_{\vec{R}} \int_{\text{cellule}} d^3\vec{r} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}} f(\vec{r}) \end{aligned}$$

$$= \left(\sum_{\vec{R}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}} \right) \cdot \int_{\text{cellule}} d^3\vec{r} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} f(\vec{r})$$

$$\sum_{\vec{R}} \delta(\vec{k} - \vec{G})$$

\sim facteur de structure $S(\vec{k})$

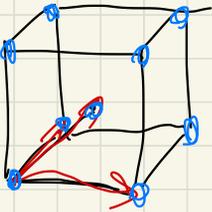
3. Réseau = famille de plans de \mathbb{R}^3

1 réseau: famille donnée indexée de façon unique par $\vec{G} \in$ réseau réciproque \perp plan

$$(\vec{n}, \vec{n}) \in \text{plan}, \quad (\vec{n} - \vec{n}) \cdot \vec{G} = 0$$

$$\vec{n} \text{ et } \vec{n}' \in \text{plan} \neq \text{plan}: (\vec{n} - \vec{n}') \cdot \vec{G} = 2\pi m$$

CC réseau de Bravais?



Chapitre 2 Diffraction des ondes par cristaux

1. Généralités

Sonde matériel de l'arrangement spatial d'une phase = diffraction



Problème de diffusion : observable = amplitude de transition de $|\vec{h}\rangle$ vers $|\vec{h}'\rangle$
 $\Gamma(\vec{h}, \vec{h}')$

$$\text{Intensité } I(\vec{h}, \vec{h}') = |\Gamma(\vec{h}, \vec{h}')|^2$$

rayons x, $\lambda \sim 10^{-2} \text{ to } 10 \text{ nm} \ll$ visible

sources : synchrotron.

Couplage $H = \frac{(\vec{p} + q\vec{A})^2}{2m}$

→ couplage dominant aux électrons

→ sensible à la taille \sim nuage e^- d'atomes
sensible aux atomes de grand Z .

neutrons : - non chargés, int^o avec noyau
sensible à la masse, isotopes
Sources: réactions nucléaires.

↳ peuvent être polarisés et
portent un spin.

⇒ source des propriétés
magnétiques.

2. Amplitude de diffusion.

On considère une int^o cristal \Leftrightarrow onde
Cristal = réseau + cellule élémentaire
+ potentiel d'int^o atome \Leftrightarrow onde
 $\psi_{\alpha\beta}(\vec{r})$

$$\begin{aligned}\Rightarrow V(\vec{r}) &= \sum_{i \text{ atomes}} \psi_{\alpha\beta}(\vec{r} - \vec{r}_i) \\ &= \sum_{\vec{R}} \sum_{\substack{\vec{x}_\alpha \\ \text{atome} \\ \text{cell.}}} \psi_{\alpha\beta}(\vec{r} - (\vec{R} + \vec{x}_\alpha))\end{aligned}$$

Règle d'onde Fermi

$$\Gamma(\vec{h}', \vec{h}) = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \langle \vec{h}' | V | \vec{h} \rangle \right|^2 \delta(E_{\vec{h}'} - E_{\vec{h}})$$

\vec{R} et R identiques: élastique

* inélastique: Avec quel degré de liberté dans le cristal une onde échange de l'énergie.

phonon: quanta de vibration.
electrons } relation de disp^o

