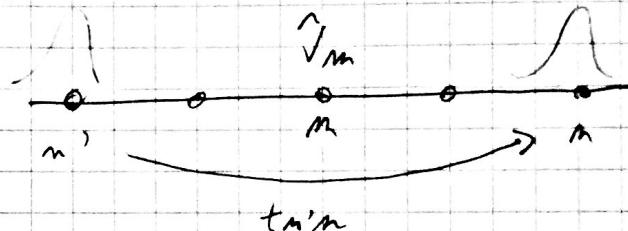


Approximation état électronique: $|\Psi\rangle = \sum_m \varphi_m |m\rangle$
 ↳ orbital ou charge atomique.
 LCAO (ou méthode des liaisons fortes).

$$H|m\rangle = \underbrace{\left(\frac{P^2}{2m} + \hat{V}_0\right)}_{\substack{\varepsilon_0 |m\rangle \\ \text{Energie de l'orbitale atomique.} \\ \text{Terme diagonale}}} |m\rangle + \sum_{l \neq m} \hat{V}_l |l\rangle$$

Termes non diagonaux.

$$\langle m' | H | m \rangle = \varepsilon_0 \delta_{m,m'} + \sum_{l \neq m} \langle m' | \hat{V}_l | m \rangle$$



Terme de transfert ou de saut:

$$\sum_{l \neq m} \langle m' | V_l | m \rangle = \begin{cases} V_0 & m' = m \\ -t & m' = m \pm 1 \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \rightarrow \text{Approximation}$$

$$\langle m' | H | m \rangle = (\varepsilon_0 + V_0) \delta_{m,m'} - t (\delta_{m'+1,m} + \delta_{m'-1,m}).$$

H dans la base $|m\rangle$:

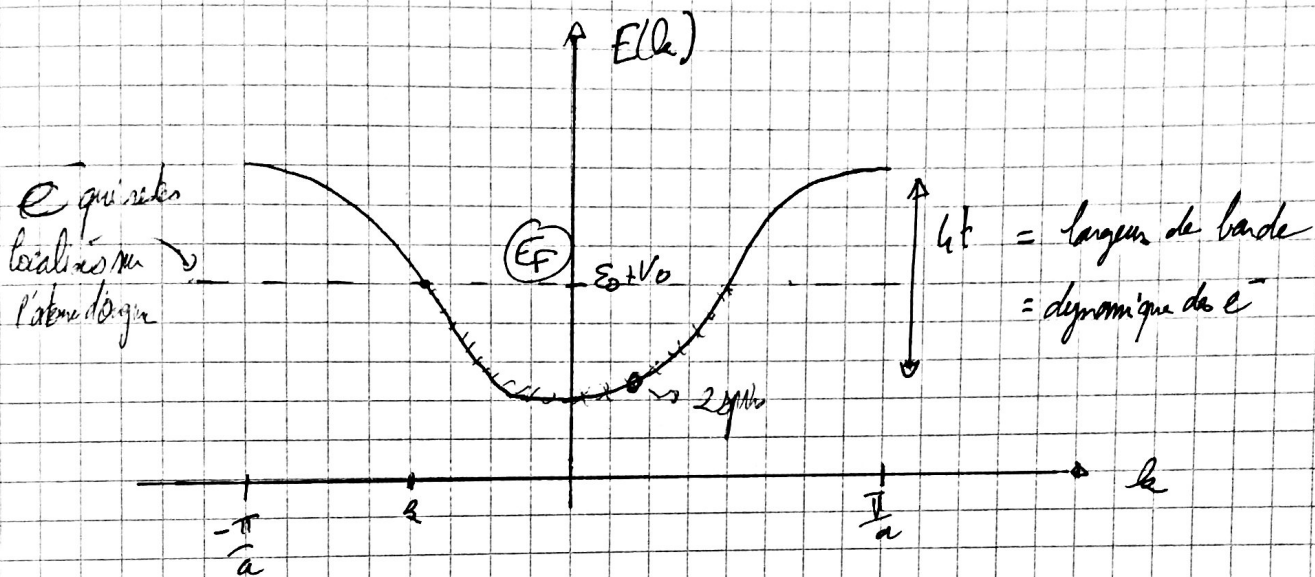
$$H = \begin{pmatrix} \varepsilon_0 + V_0 & -t & & & \\ -t & \varepsilon_0 + V_0 & -t & & \\ 0 & -t & \varepsilon_0 + V_0 & -t & \\ & & & \ddots & \\ & & & & \ddots \end{pmatrix}$$

Immunica par translation: onde $\psi_m = \frac{1}{\sqrt{N}} e^{-ikma}$
 discrete
 $\hookrightarrow$ nombre de cellule unite.

$k \in 1^{\text{re}}$ zone de Brillouin.
 $\hookrightarrow$ nombre quantique:

$$\sum_{n'} H_{mn'} \psi_{n'} = (E_0 + V_0) \psi_m - t (e^{-ika} + e^{ika}) \psi_m = E(k) \psi_m$$

$$E(k) = E_0 + V_0 - 2t \cos(ka)$$



• Analyse de relation de dispersion $\approx e^-$ quilibres

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

$\hookrightarrow$ bas de bande $E(k) \approx E_{\min} + t^2 a^2 k^2$

$\hookrightarrow$ masse effective $m^* = \frac{\hbar^2}{2ta^2}$

$E(k)$: energie pour $1 e^-$

Physstat: N cellule unite + 1 atome orbitale / cellule.
 $\hookrightarrow 1 e^- / \text{cellule}$.

Pauli $\rightarrow$ chaque état occupe au plus par 1 seul e^-
 + on remplit les états de + basse E .

Δ Jusqu'à présent on a regarder que les degs de liberté
 orbitaux $\rightarrow$ nombre quantique k