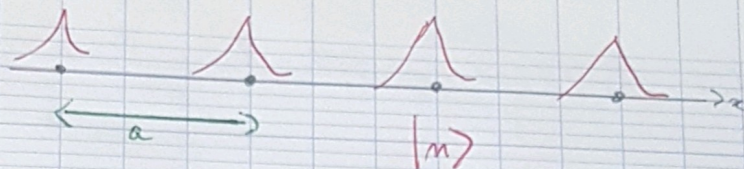


fonctions d'onde
piquées sur les atomes



hyp: - on se limite aux ddt électroniques

- recouvrement entre orbitales négligé: $\langle n|m \rangle = \delta_{nm}$

état d'un électron: $H = \frac{p^2}{2m} + \sum_m \underbrace{V(\vec{r} - \vec{x}_m)}_{\hat{V}_m}^{ma}$

approximation: un état électronique est donné par une CL des orbitales électroniques de chaque atome:

$$|\psi\rangle = \sum_n \phi_n |n\rangle \quad \text{où } |n\rangle \text{ est un état propre de:}$$

$$\hat{H}_n = \frac{p^2}{2m} + V(\vec{r} - \vec{x}_n) \text{ d'énergie } \epsilon_0$$

↳ c'est la méthode des liaisons fortes (tight binding): on délocalise les e^- .

$$\text{Alors } H|n\rangle = \left(\frac{p^2}{2m} + \hat{V}_n \right) |n\rangle + \sum_{m \neq n} \hat{V}_m |n\rangle$$

$$\Rightarrow \langle m' | H | n \rangle = \epsilon_0 \delta_{nm'} + \sum_{m \neq n} \langle m' | \hat{V}_m | n \rangle$$

terme de transfert

Approximation du terme de transfert: ce terme traduit le fait que l' e^- saute de l'orbitale $n \rightarrow n'$, noté $t_{nn'}$:

$$t_{nn'} = \begin{cases} V_0 & \text{si } n' = n \\ -t & \text{si } n' = n \pm 1 \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}$$

(= on se limite aux couplages entre plus proches voisins).

MC3

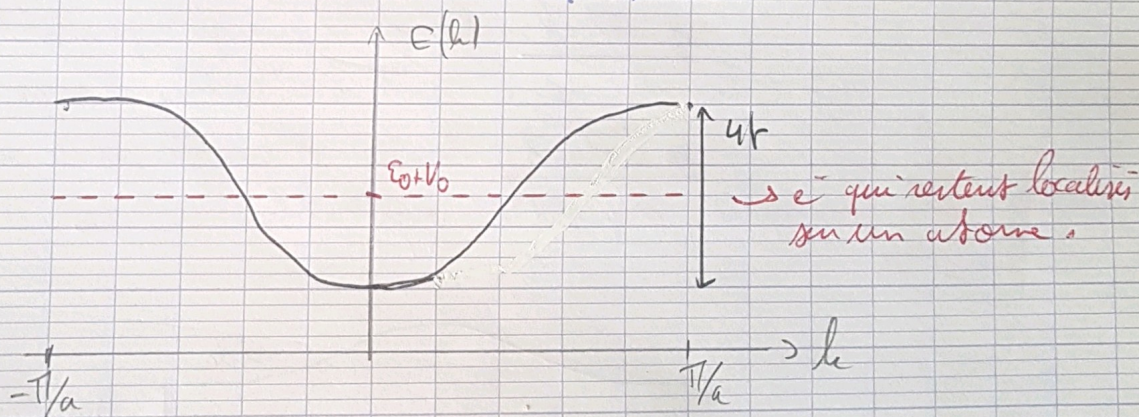
$\Rightarrow \langle n' | H | n \rangle$ est une matrice triangulaire:

$$\begin{pmatrix} \epsilon_0 + V & -t & 0 & \dots & 0 \\ -t & \epsilon_0 + V - E & \dots & \dots & \dots \\ 0 & -t & \dots & \dots & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & \dots & \dots & 0 \end{pmatrix} = (H_{nn'}) =$$

$$H_{nn'} = \langle n' | \hat{H} | n \rangle = \delta_{nn'} (\epsilon_0 + V_0) - t (\delta_{n, n+1} + \delta_{n, n-1})$$

• L'invariance du hamiltonien par translation $\Rightarrow \hat{x}$ et $\hat{H}$ sont simultanément diagonalisables $\Rightarrow$ on cherche des solutions en onde: $\psi_n = \frac{1}{\sqrt{N}} e^{-ikna}$.

$$\begin{aligned} \langle \psi | \hat{H} | n \rangle &= \sum_{n'} H_{nn'} \psi_{n'} = (\epsilon_0 + V_0) \psi_n - t (e^{-ika} + e^{ika}) \psi_n \\ &= E(k) \psi_n \\ \Rightarrow E(k) &= \epsilon_0 + V_0 - 2t \cos(ka) \end{aligned}$$



• analyse de la relation de dispersion: hors de bande:

$$E(k) \approx E_{\min} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}$$

$\rightarrow$ on considère des e^- libres: $E = \frac{p^2}{2m} = \frac{(\hbar k)^2}{2m}$

$\hookrightarrow$ les e^- de hors de bande sont des e^- libres avec une masse effective m^* : $\frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ $\Rightarrow m^* = \frac{\hbar^2}{2ta^2}$

- $E(k)$: énergie pour $1e^-$.

On place $2e^-$ par cellule unité : il y a un ddl de spin.

$\Rightarrow$ pour chaque k , 2 états possibles.

- Dans l'état fondamental, on peuple les états d'énergie $E \leq E_0 + V_0 \Rightarrow$ l'énergie du niveau le plus élevé est appelée énergie de Fermi : $E_F = E_0 + V_0$.

E_F est aussi le potentiel chimique : énergie à fournir pour apporter $1e^-$ supplémentaire.

- On veut donner de l'E au gaz d' e^- . Quels états peuvent acquies de l'énergie?

↳ on prend un état à $E \leq E_0 + V_0$, on l'envoie à $E > E_0 + V_0$
 $\rightarrow$ coût énergétique plus faible $\Rightarrow E_0 + V_0 = E_F$ est bien l'énergie caractéristique pour la dynamique du système.

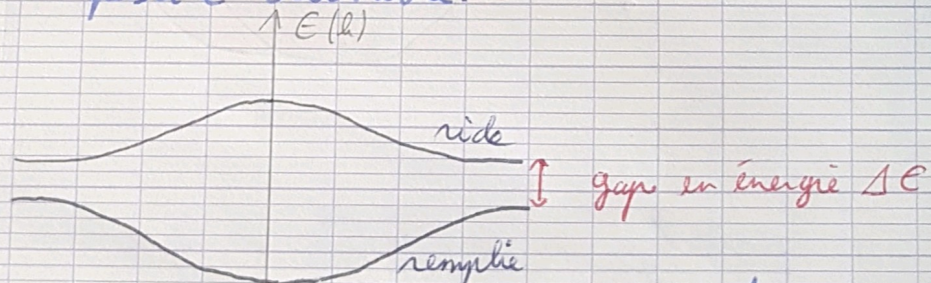
- ODG : température de Fermi : $T_F = \frac{E_F}{k_B} \approx 10^5 K$

$\Rightarrow$ gaz d' e^- à $T_{amb} \sim$ gaz d' e^- à $T=0$.

- Conduction:

■ métal : bande d'énergie partiellement remplie : $E_F \in$ bande, les e^- sont excitables $\Rightarrow$ mise en mouvement.

■ isolant : bande d'énergie vide ou complètement remplie $\Rightarrow$ pas d' e^- excitable.



$\Delta E \lesssim 0,04 eV$
 $\Rightarrow$ semi-conducteur