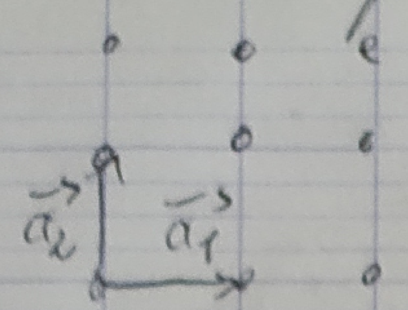
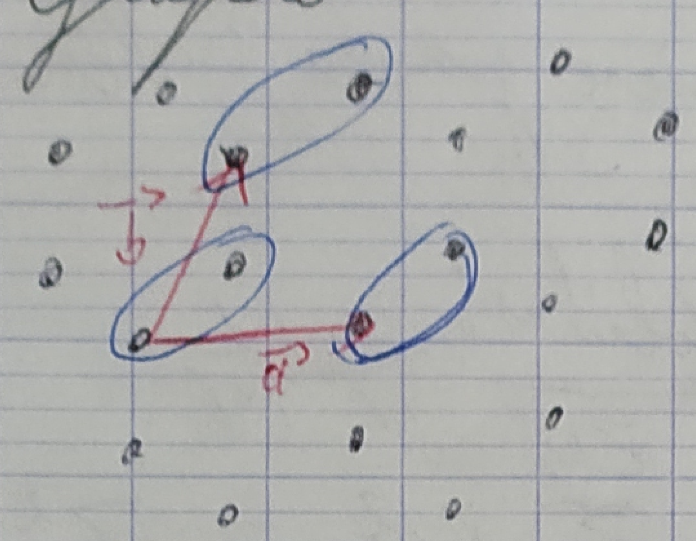
# Physique du solide :

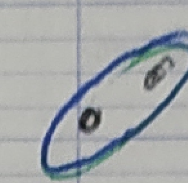
Ensemble des points définissant la périodicité du réseau (réseau de Bravais)




$$\vec{R} = n_1\vec{a_1} + n_2\vec{a_2} + n_3\vec{a_3}$$

exemple : Graphène



$\equiv$ motif

Réseau réciproque $\vec{a_1}^*, \vec{a_2}^*, \vec{a_3}^*$

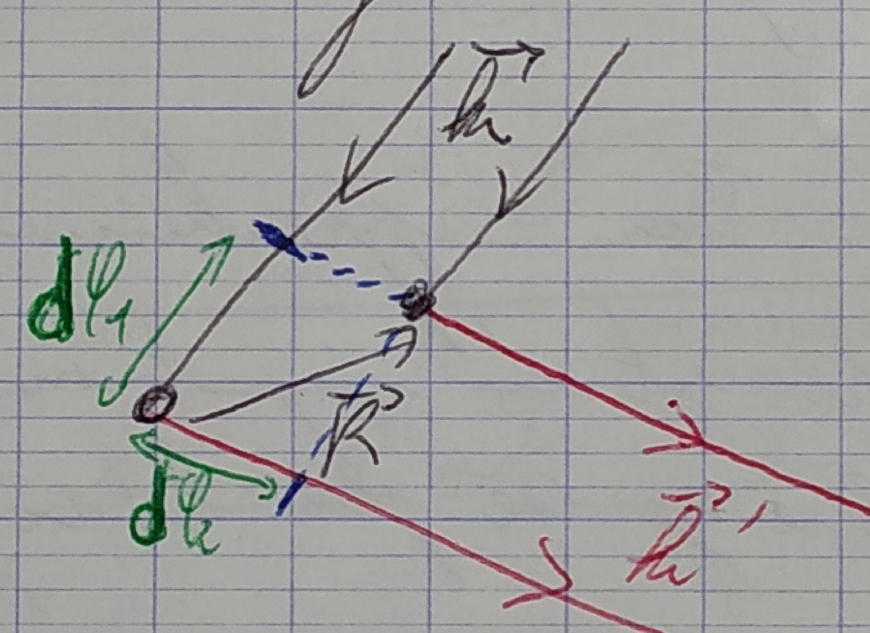
$$\vec{a_1}^* = 2\pi \frac{\vec{a_2}\wedge\vec{a_3}}{\vec{a_1}\cdot(\vec{a_2}\wedge\vec{a_3})} \Rightarrow \vec{a_i}^*\cdot\vec{a_j} = 2\pi\delta_{ij}$$

Pour tout $\vec{R}$ ∈ réseau de Bravais, pour tout $\vec{K}$ ∈ Réseau ~~de B~~ réciproque

$$\vec{K} = m_1\vec{a_1}^* + m_2\vec{a_2}^* + m_3\vec{a_3}^*$$

$$e^{i\vec{K}\cdot\vec{R}} = 1$$

Diffraction de rayons X :




$$d\varphi_1 = -\vec{k}\cdot\vec{R}$$
$$d\varphi_2 = \vec{k}'\cdot\vec{R}$$

$$e^{id\varphi} = e^{i(\vec{k}'-\vec{k})\cdot\vec{R}} = 1$$

diffraction efficace si pour tout $\vec{R}$

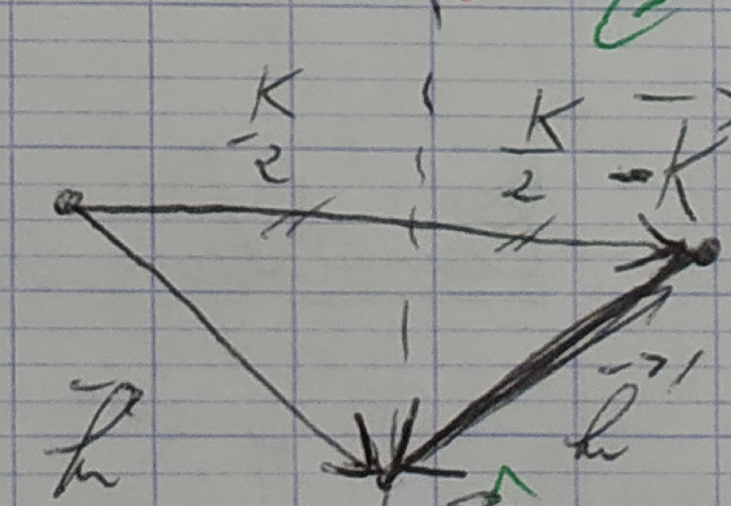
$$\Rightarrow \vec{k}' - \vec{k} = \vec{K}$$

Processus élastique

$$\|\vec{k}'\| = \|\vec{k}\|$$
$$k^2 = k^2 + K^2 - 2\vec{k}\cdot\vec{K}$$
$$\Rightarrow \frac{K^2}{2} = \vec{k}\cdot\vec{K}$$
$$\Downarrow$$
$$\frac{K}{2} = \vec{k}\cdot\frac{\vec{K}}{\|\vec{K}\|}$$

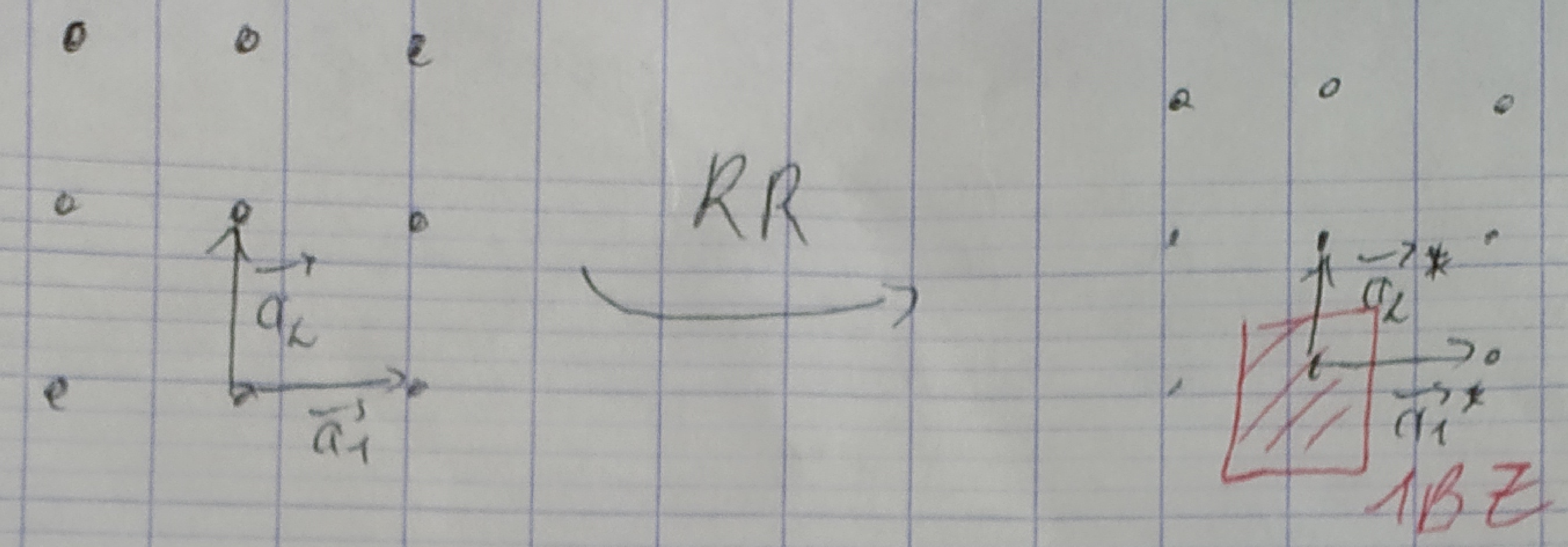
plan de Bragg

dessin faux ? à refaire




~~peut être aussi ici~~

→ Projection de $\vec{k} = \frac{K}{2}$ ⇒ donne longueur d'onde typique (rayons X)




↳ Choix : Première zone de Brillouin

## Structure électronique des solides :

$$H = \sum_{i=1}^{N} \underbrace{\frac{\overset{\text{grand } P}{P_i^2}}{2M}}_{\text{noyaux}} + \underbrace{\sum_{i=1}^{ZN} \frac{\overset{\text{petit } p}{p_i^2}}{2m}}_{\text{électrons}} + \frac{Z^2}{2}\underbrace{\sum_{i\neq j} \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 |\vec{R}_i-\vec{R}_j|}}_{\text{interaction noyaux-noyaux}}$$

$$- \underbrace{Z\sum_{i,j}\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0|\vec{R}_i - \vec{r}_j|}}_{\text{interactions électrons-noyaux}} + \frac{1}{2}\underbrace{\sum_{i\neq j}\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0|\vec{r}_i-\vec{r}_j|}}_{\text{interaction électron-électron}}$$

* Approximation de Born-Oppenheimer :
↳ Électrons se déplacent en voyant un potentiel ~~créé~~ ~~généré~~ statique généré par le noyau

* De plus on considère champ moyen (~~potentiel électron~~)
$U_{eff}$ de l'effet de tous les électrons

$$H = \sum_{i=1}^{N} \left(\frac{p_i^2}{2m} + U(\vec{r}_i)\right)$$

séparation ↳ $h = \frac{p^2}{2m} + U(\vec{r})$ avec $U(\vec{r}+\vec{R}) = U(\vec{r})$

pour tout $\vec{R} \in$ réseau de Bravais

Translation : $\hat{T}_{\vec{R}} = e^{i\vec{p}\cdot\vec{R}/\hbar}$

Invariance par translation $\Rightarrow [\hat{H}, \hat{T}_{\vec{R}}] = 0$

↳ cherchons valeurs propres de $\hat{T}_{\vec{R}}$

1D : $T_a = e^{\frac{ipa}{\hbar}}$ $\quad T_a^+ T_a = \mathbb{1}$

$\langle x | \psi \rangle = \psi(x)$

$\langle x | T_a | \psi \rangle = \int dp \underbrace{\langle x | T_a | p \rangle}_{e^{\frac{ipa}{\hbar}} \langle x | p \rangle} \langle p | \psi \rangle = \int dp \; e^{\frac{ip(x+a)}{\hbar}} \tilde{\psi}(p) = \psi(x+a)$

$\underbrace{\langle x | p \rangle}_{e^{\frac{ipx}{\hbar}}} \underbrace{\langle p | \psi \rangle}_{\tilde{\psi}(p)}$

États de Bloch : états propres de $T_{\vec{R}}$ et $H$

$$\psi_{n,\vec{k}}(\vec{r}+\vec{R}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}} \psi_{n,\vec{k}}(\vec{r}) \iff T_{\vec{R}} \psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \lambda_{n,\vec{k}} \psi_{n,\vec{k}}(\vec{r})$$

$$H | \psi_{n,\vec{k}} \rangle = \mathcal{E}_n(\vec{k}) | \psi_{n,\vec{k}} \rangle$$

2ème étape $\Longrightarrow$ $| \psi_{n,\vec{k}'} \rangle$ avec $\vec{k}' = \vec{k} + \vec{K}$

$$\psi_{n,\vec{k}'}(\vec{r}+\vec{R}) = e^{i\vec{k}'\cdot\vec{R}} \psi_{n,\vec{k}'}(\vec{r})$$

$$\Rightarrow \psi_{n,\vec{k}'}(\vec{r}) = \underbrace{e^{i\vec{K}\cdot\vec{R}}}_{1} e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}} \psi_{n,\vec{k}'}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}} \psi_{n,\vec{k}'}(\vec{r})$$

1 par définition du réseau réciproque

Donc $\vec{k}' = \vec{k} + \vec{K}$ est le même état propre de $\hat{T}_{\vec{R}}$ que $\vec{k}$

$\Rightarrow$ On se restreint à la première zone de Brillouin

Cas simple : Réseau 1D de pas a