

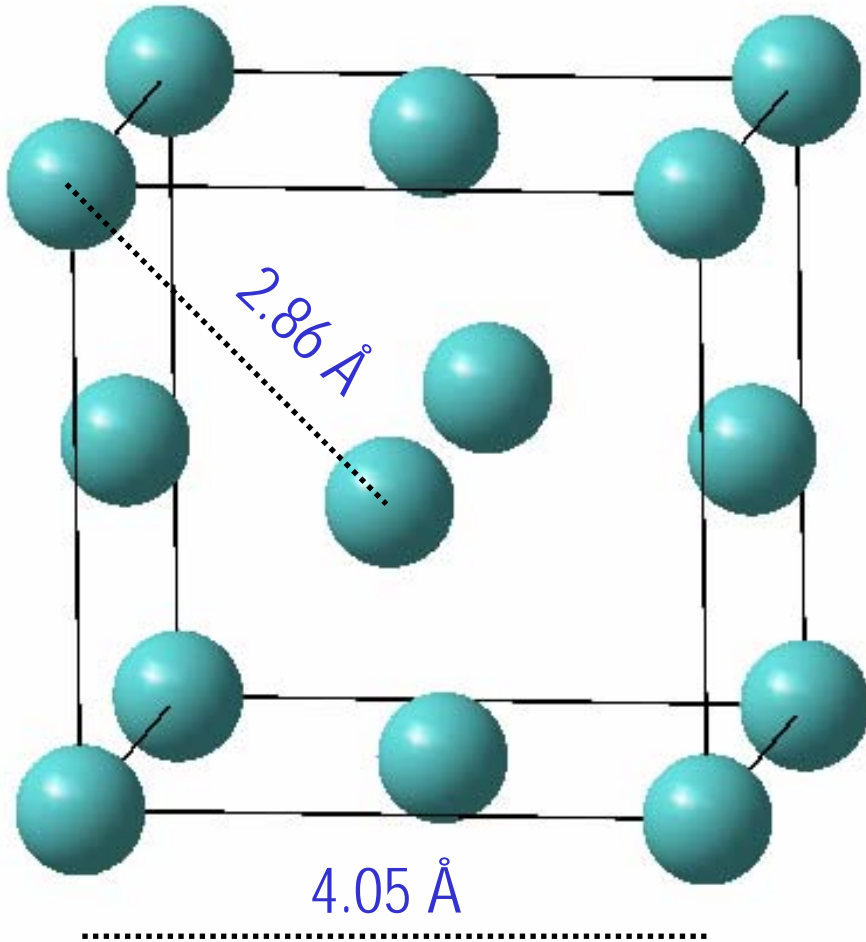
COURS II

1. Approximation des électrons quasi-libres
2. Effet de la perturbation $U(x)$ sur la relation de dispersion de l'électron libre
3. Bandes d'énergie, zones de Brillouin
4. Indice de bande
5. Formation du « gap » d'énergie aux points critiques

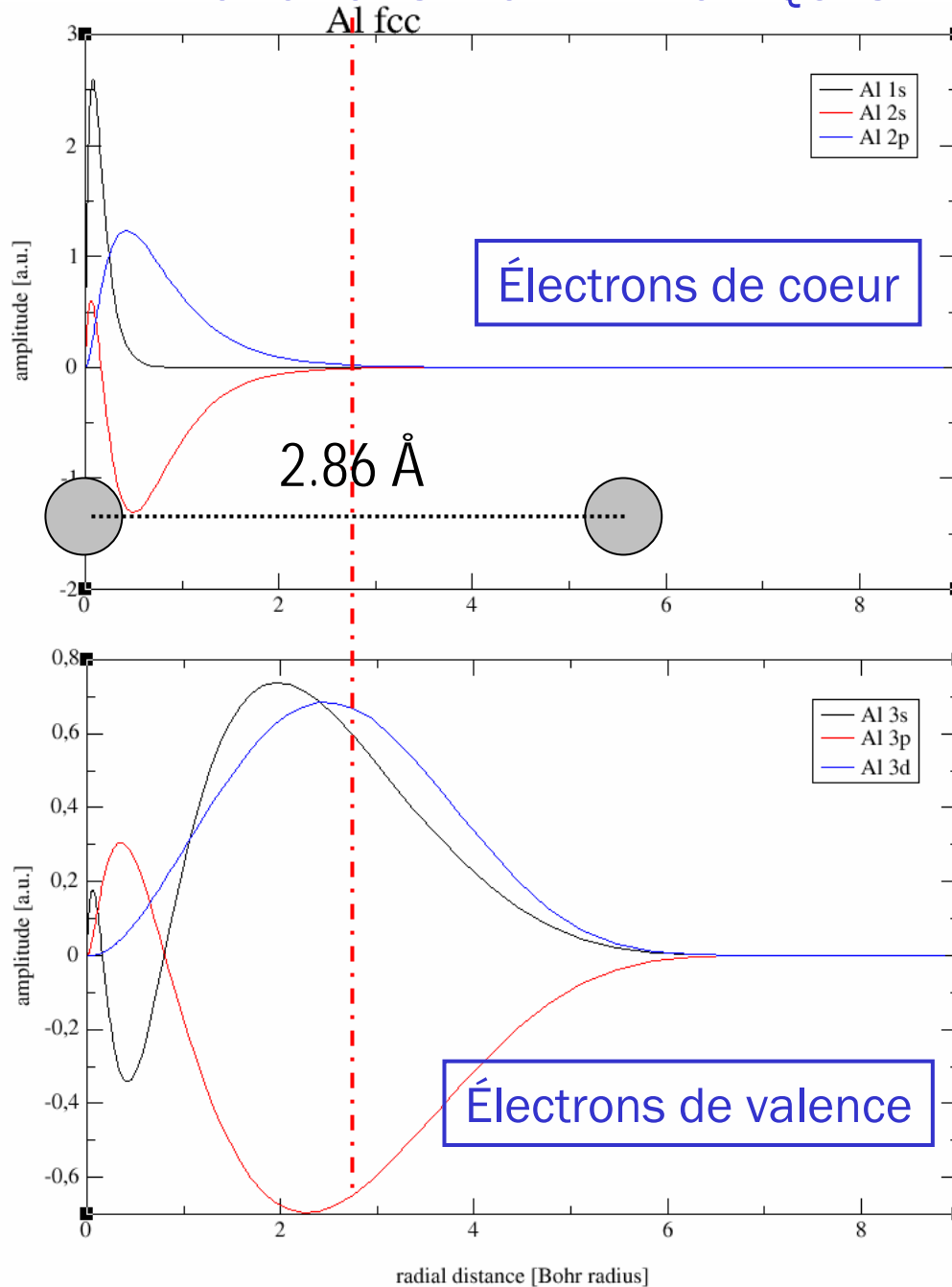
APPROXIMATIONS

1. Electrons quasi-libres
2. Electrons fortement liés

1. L'APPROXIMATION DES ELECTRONS QUASI-LIBRES POUR LES MÉTAUX SIMPLÉS (ex. Al)



FONCTIONS D'ONDE ATOMIQUES



Approximation des électrons quasi-libres

Dans cette approximation, il suffit de limiter le développement de $U(x)$ au premier terme (par simplicité, on choisit $U_0=0$) :

$$U(x) \approx U_{-1} e^{-ig_1 x} + U_1 e^{ig_1 x}$$

où $U_{-1} = U_1^*$, car $U(x)$ est réelle.

L'effet de cette perturbation sur la relation de dispersion ε_k au voisinage du point de dégénérescence $k=g_1$ est calculé en résolvant le déterminant 2x2 :

$$\begin{vmatrix} \varepsilon_k - \varepsilon_k^{(-1)} & -U_{-1} \\ -U_1 & \varepsilon_k - \varepsilon_k^{(0)} \end{vmatrix} = 0$$

On obtient la relation de dispersion:

$$\varepsilon_k = \frac{\varepsilon_k^{(-1)} + \varepsilon_k^{(0)}}{2} \pm \sqrt{\frac{\varepsilon_k^{(-1)} - \varepsilon_k^{(0)}}{2} + \Delta^2}$$

où $\Delta = |U_{-1}| = |U_1|$

Approximation de l'électron quasi-libre: Effet du potentiel périodique sur la relation de dispersion

