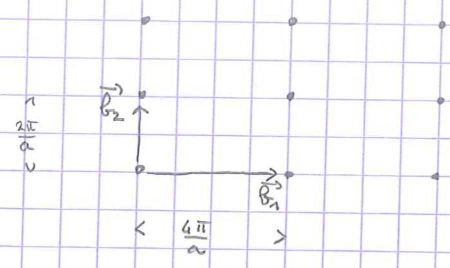
Corrigé partiel physique du solide 2018-19

I Réseau direct et réseau réciproque

1. Il faut trouver $\vec{b}_1, \vec{b}_2, \vec{b}_3$ tel que $\vec{a}_i \cdot \vec{b}_j = 2\pi \, \delta_{ij}$. Comme les $\vec{a}_i$ sont orthogonaux deux à deux on a $\vec{a}_i$ proportionnel à $\vec{b}_i$. En fixant le rapport avec $\vec{a}_i \cdot \vec{b}_i = 2\pi$,

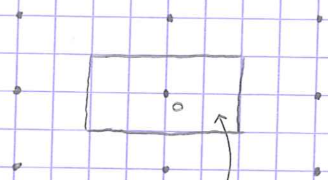
$$\vec{b}_1 = \left(\frac{4\pi}{a}, 0, 0\right) \qquad \vec{b}_2 = \left(0, \frac{2\pi}{a}, 0\right) \qquad \vec{b}_3 = \left(0, 0, \frac{2\pi}{a}\right)$$

2. Le réseau réciproque, projeté dans le plan $(\vec{b}_1, \vec{b}_2)$ est rectangulaire :



La 1ère zone de Brillouin est l'ensemble des points plus proches de l'origine que d'autres points du réseau elle se construit avec les plans médiateurs des segments reliant l'origine aux points du réseau.

On a donc :



$$1BZ = \left[-\frac{2\pi}{a}, \frac{2\pi}{a}\right] \times \left[-\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a}\right]$$

II Etats de Bloch

1. Selon le théorème de Bloch, les solutions $\psi(\vec{r})$ de l'équation de Schrödinger en présence d'un potentiel $V(\vec{r})$ qui a la périodicité d'un réseau de Bravais B peuvent être cherchées sous la forme $\psi(\vec{r}) = e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} u(\vec{r})$ où u a la périodicité de B.
De manière équivalent, ψ vérifie $\psi(\vec{r}+\vec{R}) = e^{i\vec{q}\cdot\vec{R}}\psi(\vec{r}) \quad \forall \vec{R} \in B$

2. L'opérateur d'impulsion $\vec{P} = -i\hbar\vec{\nabla}$ appliqué à $\psi(\vec{r}) = e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} u(\vec{r})$ donne

$$(\vec{P}\psi)(\vec{r}) = \hbar\vec{q}\,\psi(\vec{r}) - i\hbar\, e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} (\vec{\nabla}u)(\vec{r})$$

ψ est un état propre de $\vec{P}$ si et seulement si $\vec{\nabla}u$ est proportionnel à u, ce qui n'est possible que si u est de la forme $u(\vec{r}) = \text{cst}\; e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$, ce qui donne pour $\psi(\vec{r})$ une pure onde plane, qui ne sera pas en général solution de l'équation de Schrödinger pour $V \neq 0$

3. Si le réseau de Bravais est engendré par les vecteurs primitifs $(\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3)$, et que le système contient N_i motifs dans la direction i, les conditions aux limites périodiques imposent $\psi(\vec{r} + N_i\vec{a}_i) = \psi(\vec{r})$ pour $i = 1, 2, 3$. Les vecteurs d'onde qui apparaissent dans la décomposition de Fourier de ψ sont donc de la forme
$\frac{1}{N_1} m_1 \vec{b}_1 + \frac{1}{N_2} m_2 \vec{b}_2 + \frac{1}{N_3} m_3 \vec{b}_3$ avec $m_1, m_2, m_3 \in \mathbb{Z}$
Il y en a donc $N = N_1 N_2 N_3$ dans la 1ère zone de Brillouin

III Electrons dans un potentiel périodique faible à 2d

1. $V(x,y) = -U\left(e^{i\frac{2\pi}{a}x}+e^{-i\frac{2\pi}{a}x}\right)\left(e^{i\frac{2\pi}{a}y}+e^{-i\frac{2\pi}{a}y}\right) = \sum_{\vec K\in\tilde B}\tilde V_{\vec K}\, e^{i\vec K\cdot\vec r}$

où $\tilde V_{\vec K} = \begin{cases} -U & \text{si } \vec K \in \left\{\left(\frac{2\pi}{a},\frac{2\pi}{a}\right),\left(\frac{2\pi}{a},-\frac{2\pi}{a}\right),\left(-\frac{2\pi}{a},\frac{2\pi}{a}\right),\left(-\frac{2\pi}{a},-\frac{2\pi}{a}\right)\right\}\\ 0 & \text{sinon}\end{cases}$

2. $|\psi_{\vec q}\rangle = \sum_{\vec K\in\tilde B}\alpha_{\vec q+\vec K}\,|\vec q+\vec K\rangle$ où $|\vec K\rangle$ désigne l'onde plane de vecteur d'onde $|\vec K\rangle$

$H=\frac{\hat p^2}{2m}+V(\hat{\vec r})$, $H|\psi_{\vec q}\rangle = \sum_{\vec K\in\tilde B}\alpha_{\vec q+\vec K}\left[\underbrace{\frac{\hat p^2}{2m}|\vec q+\vec K\rangle}_{E^0(\vec q+\vec K)\,|\vec q+\vec K\rangle} + \sum_{\vec Q\in\tilde B}\tilde V_{\vec Q}\,\underbrace{e^{i\vec Q\cdot\hat{\vec r}}\,|\vec q+\vec K\rangle}_{|\vec q+\vec K+\vec Q\rangle}\right]$

$H|\psi_{\vec q}\rangle = E(\vec q)\,|\psi_{\vec q}\rangle \Rightarrow 0=\sum_{\vec K\in\tilde B}\alpha_{\vec q+\vec K}\left(E^0(\vec q+\vec K)-E(\vec q)\right)|\vec q+\vec K\rangle + \underbrace{\sum_{\vec K,\vec Q\in\tilde B}\alpha_{\vec q+\vec K}\,\tilde V_{\vec Q}\,|\vec q+\vec K+\vec Q\rangle}_{=\sum_{\vec K,\vec Q\in\tilde B}\alpha_{\vec q+\vec Q}\,\tilde V_{\vec K-\vec Q}\,|\vec q+\vec K\rangle}$

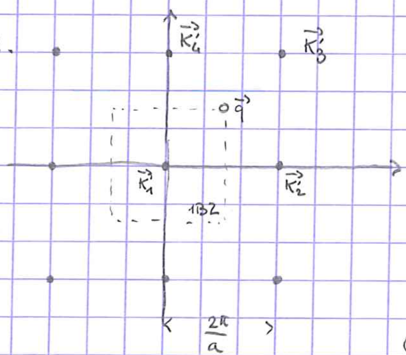
en changeant de variables dans la somme

Comme les $\{|\vec q+\vec K\rangle\}_{\vec K\in\tilde B}$ sont linéairement indépendants, on obtient l'équation du sujet

3. On suppose dans ce cas-là que seuls les coefficients $\alpha_{\vec q+\vec K_1},\dots,\alpha_{\vec q+\vec K_m}$ sont d'ordre 1, tous les autres étant d'ordre plus élevés dans la perturbation.

Dans la somme $\sum_{\vec Q\in\tilde B}\tilde V_{\vec K-\vec Q}\,\alpha_{\vec q+\vec Q}$ on peut donc se restreindre, à l'ordre le plus bas, à $\vec Q\in\{\vec K_1,\dots,\vec K_m\}$, ce qui conduit à l'équation de l'énoncé

4.



Les quatre vecteurs $\vec K_1'=\begin{pmatrix}0\\0\end{pmatrix}$, $\vec K_2'=\begin{pmatrix}\frac{2\pi}{a}\\0\end{pmatrix}$, $\vec K_3'=\begin{pmatrix}\frac{2\pi}{a}\\\frac{2\pi}{a}\end{pmatrix}$, $\vec K_4'=\begin{pmatrix}0\\\frac{2\pi}{a}\end{pmatrix}$ conduisent à $E^0(\vec q-\vec K_1') = \dots = E^0(\vec q-\vec K_4')$

Comme $\tilde V_{\vec K}\neq 0$ seulement le long des diagonales, ces quatre niveaux ne sont couplés que deux à deux.

On peut considérer par exemple $\alpha_{\vec q}$ et $\alpha_{-\vec q}$, solution de

$$\begin{cases}\left(E(\vec q)-E^0(\vec q)\right)\alpha_{\vec q} = -U\,\alpha_{-\vec q}\\ \left(E(\vec q)-E^0(\vec q)\right)\alpha_{-\vec q} = -U\,\alpha_{\vec q}\end{cases}$$

, qui a une solution non triviale pour

$$\det\begin{pmatrix}E(\vec q)-E^0(\vec q) & U\\ U & E(\vec q)-E^0(\vec q)\end{pmatrix} = 0,$$

soit $E_\pm(\vec q) = E^0(\vec q)\pm|U|$