Faculté de physique et ingénierie
Université de Strasbourg

Université de Strasbourg

# TD10

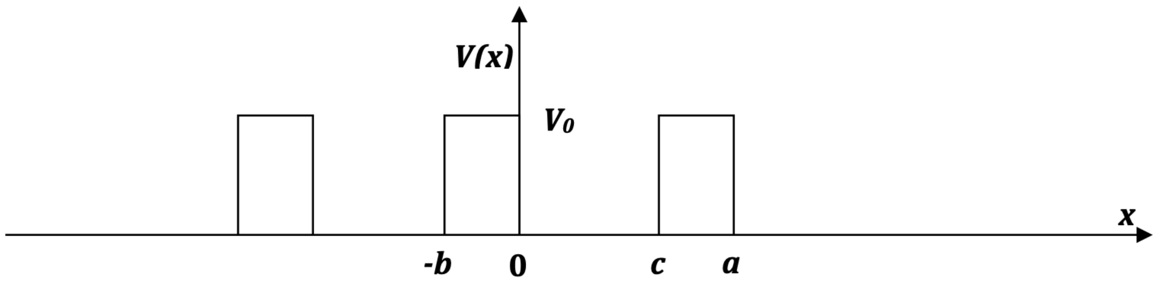
*Bernard Doudin*

Transcrit par
Pierre Guichard

L3 Semestre 6 2021

## 10.1 Fonctions de Bloch et bandes d'énergie : modèle de Krönig-Penney

On considère un électron soumis au potentiel en créneaux créé par $N$ ions équidistants de $a$, formant un réseau unidimensionnel. L'énergie potentielle est représentée ci-dessous.




$$\begin{array}{ll} -b < x < 0 & \qquad V(x) = V_0 \\ 0 < x < c & \qquad V(x) = 0 \end{array}$$

Avec $a = b + c$.

1. Pour chacune des deux régions, donner les expressions des solutions de l'équation de Schrödinger. On notera A, B, C et D les constantes d'intégration.
   On note $\alpha = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$ et $\beta = \frac{\sqrt{2m(E-V_0)}}{\hbar}$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x) + V(x)\psi(x) = E\psi(x)$$

- Région $V_0 = 0$, $x \in [0, c]$

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\psi_1 = -\frac{2m}{\hbar^2}E\psi_1$$

Alors,

$$\boxed{\psi_1 = A\exp(i\alpha x) + B\exp(-i\alpha x)}$$

- Région $V_0 \neq 0$, $x \in [c, a]$

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\psi_2 = -\frac{2m}{\hbar^2}(E - V_0)\psi_2$$

Alors,

$$\boxed{\psi_2 = C\exp(i\beta x) + D\exp(-i\beta x)}$$

2. D'après le théorème de Bloch, quand un électron est soumis à un potentiel périodique, sa fonction d'onde peut se mettre sous la forme :

$$\psi(x) = u_k(x) \times \exp(ikx)$$

avec $u_k(x) = u_k(x+a)$, où $a$ est la période.
Nous prenons des conditions périodiques $\psi(x) = \psi(x+Na)$. Déterminer l'expression de la fonction d'onde pour $c \leq x \leq a$ en précisant les valeurs discrètes que peut prendre le vecteur d'onde $k$.

Région $V_0 \neq 0$, $y \in [-b, 0]$ alors $x = a + y$,

$$\begin{aligned}\psi(x) &= \psi(a+y) \\ &= u_k(a+y)\exp(ik(a+y)) \\ &= \exp(ika)u_k(y)\exp(iky) \\ &= \exp(ika)\psi_2(x)\end{aligned}$$

On doit se servir de :

$$\psi_k(x) = \psi_k(x+Na) = u_k(x+Na)\exp(ik(x+Na)) = \exp(ikNa)\psi_k(x)$$

Donc,

$$\exp(ikNa) = 1 \Longrightarrow k = \frac{2\pi}{Na}n \qquad n \in \mathbb{Z}$$

Plus généralement,

$$\psi_k(x+na) = u_k(x+na)\exp(ik(x+na)) = \exp(ikna)\psi_k(x)$$

3. Déterminer les constantes A, B, C et D en écrivant la continuité des fonctions d'onde $\psi$ et de leurs dérivées premières $\mathrm{d}\psi/\mathrm{d}x$ en $x = 0$ et $x = c$.

Continuité en $x = 0$ :

$$\lim_{x\to 0^+} \psi_1(x) = \lim_{x\to 0^+} \psi_2(x) \Longrightarrow \boxed{A + B = C + D} \tag{1}$$

$$\lim_{x\to 0^+} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\psi_1(x) = \lim_{x\to 0^+} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\psi_2(x) \Longrightarrow \boxed{i\alpha(A+B) = i\beta(C+D)} \tag{2}$$

Continuité en $x = c$,

$$\lim_{x\to c^-} \psi_1(x) = \lim_{x\to c^+} \psi_2(x) = \lim_{x\to b^+} \psi_2(x)\exp(ika)$$

Alors,

$$\boxed{A\exp(i\alpha c) + B\exp(-i\alpha c) = \exp(ika)(C\exp(-i\beta b) + D\exp(i\beta b))} \tag{3}$$

$$\lim_{x\to c^-} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\psi_1(x) = \lim_{x\to b^+} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\psi_2(x)\exp(ika)$$

Alors,

$$\boxed{i\alpha(A\exp(i\alpha c) - B\exp(-i\alpha c)) = i\beta\exp(ika)(C\exp(-i\beta b) - D\exp(i\beta b))} \tag{4}$$

(1), (2), (3) et (4) forment un système de quatre équations linéaires d'inconnues A,B,C et D sous forme matricielle la solution est :

$$\begin{vmatrix} 1 & 1 & -1 & -1 \\ \alpha & -\alpha & -\beta & \beta \\ \exp(i\alpha c) & \exp(-i\alpha c) & -\exp(ika)\exp(-i\beta b) & -\exp(ika)\exp(i\beta b) \\ \alpha\exp(i\alpha c) & -\alpha\exp(-i\alpha c) & -\beta\exp(ika)\exp(-i\beta b) & \beta\exp(ika)\exp(i\beta b) \end{vmatrix} = 0$$

On aboutit à :

$$\boxed{\cos(ka) = \cos(\alpha c)\cos(\beta b) - \frac{\alpha^2+\beta^2}{2\alpha\beta}\sin(\alpha c)\sin(\beta b)}$$

4. On admettra que le système d'équations a une solution non triviale uniquement si l'égalité suivante est satisfaite :

$$\cos(ka) = \cos(\alpha c)\cos(\beta b) - \frac{\alpha^2+\beta^2}{2\alpha\beta}\sin(\alpha c)\sin(\beta b)$$

Vérifier que lorsque l'énergie potentielle est partout nulle on retrouve la relation des électrons libres.
Pour $V_0 = 0$, alors $\alpha = \beta$, et donc $\alpha^2 + \beta^2/2\alpha\beta = 1$,

$$\cos(\alpha c)\cos(\beta b) - \sin(\alpha c)\sin(\beta b) = \cos(a(b+c)) = \cos(\alpha a) = \cos ka$$

Et donc,

$$k = \alpha = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

Ainsi,

$$\boxed{E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}}$$

Ce qui est la solution pour les électrons libre.

5. On considère le cas de barrières très hautes et très fines où nous avons $qb \ll 1$, avec $iq = \beta$ et $E < V_0$.
   Montrer en explicitant $P$ que l'égalité de la question 4 se réduit à

$$\cos(ka) = P\frac{\sin(\alpha a)}{\alpha a} + \cos(\alpha a)$$

$$\lim_{\beta b \to 0^+} \sin(\beta b) = iqb \qquad \lim_{\beta b \to 0^+} \cos(\beta b) = 1$$

   Et

$$\begin{aligned} \alpha^2 + \beta^2 &= \frac{2m}{\hbar^2}(2E - V_0) \\ &\approx -\frac{2m}{\hbar^2}V_0 \end{aligned}$$

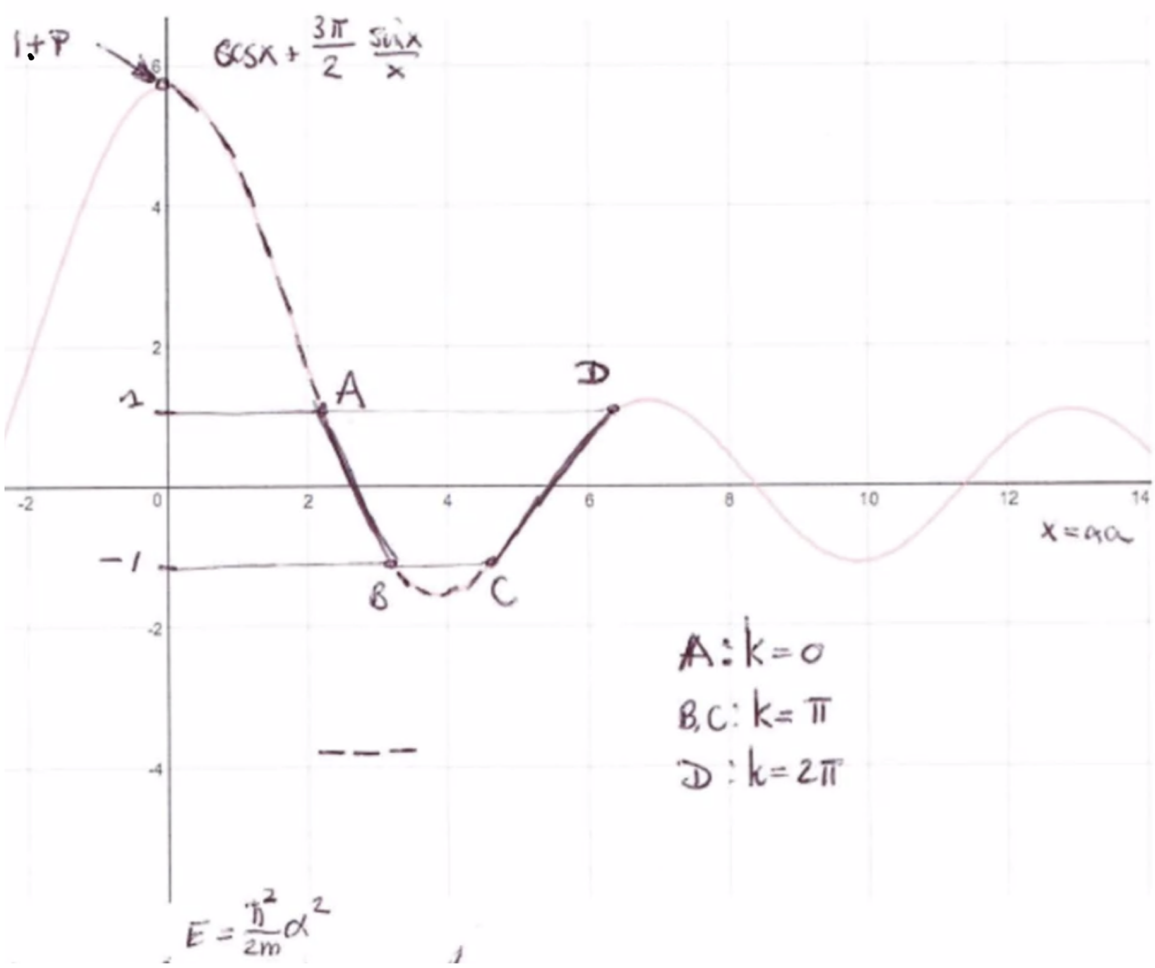
   Alors,

$$\begin{aligned} \cos(ka) &\approx \cos(\alpha c) + \frac{\frac{2mV_0}{\hbar^2}}{2\alpha iq} iqb \sin(\alpha c) \\ &\approx \cos(\alpha a) + \frac{mV_0 b}{\alpha \hbar^2} \sin(\alpha a) \end{aligned}$$

   Avec $E \ll V_0$ et $a \approx c$.
   Ce qui est bien l'équation recherchée avec

$$P = \frac{mV_0 ab}{\hbar^2}$$

6. Représenter graphiquement l'évolution du second membre de l'égalité en fonction de $\alpha a$ pour $P = 3\pi/2$ En déduire l'existence de bandes d'énergie permises et interdites. Combien d'états électroniques peut contenir chacune des bandes autorisées ?




L'axe $x$ est proportionnel à l'énergie et l'axe $y$ à $k$.

Les parties traitillées sont les zones sans valeur $ka$ solution de l'équation de la question 4, car le cosinus est compris entre 1 et $-1$.

Le nombre d'états (1D) : l'intervalle entre deux états est de $\Delta k = 2\pi/Na$, dans la première zone de Brillouin, de largeur $2\pi/a$, il y a donc $2\pi/a : 2\pi/Na$ états ; soit $N$ (par exemple sur la branche $B'AB$).

7. Que devient le spectre d'énergie quand $P$ tend vers l'infini ?

   Quand $P$ augmente, la pente de la courbe représentant représentant la solution augmente : $\alpha_A \to \alpha_B$, donc $E_A \to E_B = \hbar^2\pi^2/2ma^2$, c'est l'énergie de l'état fondamental d'une particule dans un puits (isolé) de longueur $a$, avec une faible dispersion.

8. Application numérique : Évaluer la largeur énergétique de la première bande permise et de la bande interdite qui suit pour $P = 3\pi/2$ et $a = 3$ Å.

$$\text{Point A} : 1 \approx \cos(\alpha a) + \frac{3\pi}{2}\frac{\sin(\alpha a)}{\alpha a} \qquad \alpha_A a \approx \frac{5}{6}\pi$$
$$\text{Point C} : -1 \approx \cos(\alpha a) + \frac{3\pi}{2}\frac{\sin(\alpha a)}{\alpha a} \qquad \alpha_c a \approx \frac{3}{2}\pi$$
$$\text{Largeur de bande} : E_B - E_A = \frac{\hbar^2}{2m}(\alpha_B^2 - \alpha_A^2) = \frac{\hbar^2}{2ma^2}\frac{11}{36}\pi^2$$
$$\text{Largeur de bande interdite} : E_C - E_B = \frac{\hbar^2}{2m}(\alpha_C^2 - \alpha_B^2) = \frac{\hbar^2}{2ma^2}\frac{5}{4}\pi^2$$