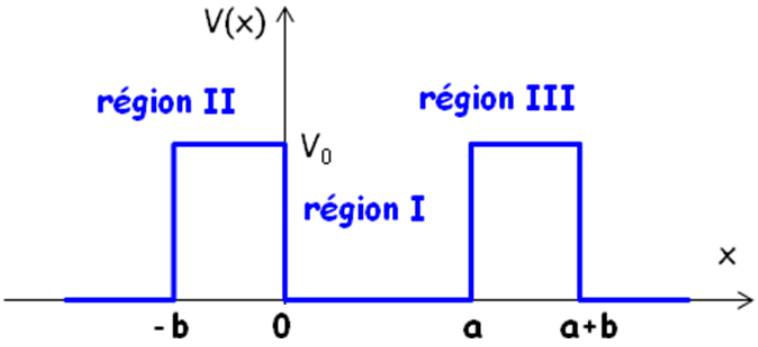
Série 3

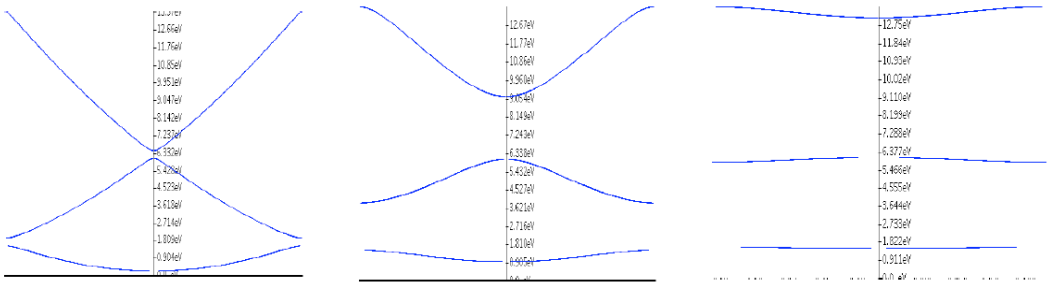
Exercice 1: On se propose d'étudier le comportement d un électron soumis au potentiel représenté ci-dessous :



1) Donner les solutions de l'équation de Schrödinger dans les régions I et II (on note $\alpha^2 = 2mE/\hbar^2$ et $\beta^2 = 2m(E - V_0)/\hbar^2$). A l'aide du théorème de Bloch, exprimer la fonction d'onde dans la région III en fonction de celle dans la région II. Préciser les valeurs que peut prendre le vecteur d'onde k (on utilisera les conditions aux limites périodiques et on note L la longueur de la chaîne).
2) Appliquer les conditions aux limites en x=0 et x=a et en déduire la relation de dispersion (sous la forme d'un déterminant). Ce déterminant peut s'écrire:

$$\cos\left[k(a+b)\right] = \cos(\alpha a)\cdot\cos(\beta b) - \frac{\alpha^2+\beta^2}{2\alpha\beta}\sin(\alpha a)\cdot\sin(\beta b)$$

3) Que devient cette relation pour : (i) $V_0 \to 0$ et (ii) E << V_0 et qb << 1 (β = iq).
4) Tracer l'allure du membre de droite en fonction de α a.
5) En déduire l'existence de bandes permises et interdites.
6) Les schémas ci-dessous représentent l'évolution des relations de dispersion pour V_0 croissant (10, 100, et 1000eV, a+b=5A°, b=0.1A°) : commenter cette évolution. Retrouver la largeur de la première bande interdite pour V_0 =100eV



Série 3 Solution

Exercice :

1) les solutions de l'équation de Schrödinger.

Dans la zone I… l'équation de Schrödinger s'écrit $\frac{d^2\psi}{dx^2}+\frac{2mE}{\hbar^2}\psi=0$

Posons $\alpha^2=2mE/\hbar^2$ $\qquad \frac{d^2\psi_2(x)}{dx^2}-\alpha^2\psi_2(x)=0$

La solution est : $\psi_I(x)=Ae^{i\alpha x}+Be^{-i\alpha x}$

Dans les zones II, III… l'équation de Schrödinger s'écrit $\frac{d^2\psi}{dx^2}+\frac{2m}{\hbar^2}(E-V)\psi=0$

posons $\beta^2=2m(E-V_0)/\hbar^2$

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}+\beta^2\psi(x)=0$$

La solution dans la zone II est : $\psi_{II}(x)=Ce^{i\beta x}+De^{-i\beta x}$

Remarque: Si $E>Vo$ alors β **est reel**

Si $0<E<Vo$ alors $\beta=iq$ **est imaginaire pur**, alors on aura $q=\sqrt{2m(V_0-E)/\hbar^2}$

Le cristal a une longueur $L=N(a+b)$. Le théorème de Bloch ainsi que les conditions périodiques aussi appelées conditions de Born von Kermann nous permettent de préciser les valeurs discrètes possible du vecteur d'onde k, soit:

$$\left.\begin{array}{l}\psi(x+N(a+b))=\psi(x)\\ \psi(x)=u_k(x)e^{ikx}\\ u_k(x)=u_k(x+(a+b))\end{array}\right\}\Rightarrow e^{ikN(a+b)}=1\Rightarrow k=\frac{2\pi}{L}m \quad (m\in\mathbb{Z})$$

Exprimons la fonction d'onde dans la région III en fonction de celle dans la région II à l'aide du théorème de Bloch

Dans la région III $a<x<(a+b)$

$$\psi_{III}(x)=u(x)e^{ikx}$$

$$Or \quad \psi_{II}(x-(a+b)) = u_k(x-(a+b))e^{ik(x-(a+b))}$$
$$= u_k(x)e^{ikx}e^{-ik(a+b)}$$
$$= \psi_{III}(x)e^{-ik(a+b)}$$

Donc $\psi_{III}\left(x\right) = e^{ik(a+b)}\,\psi_{II}\left(x-(a+b)\right)$

2) La fonction d'onde ainsi que sa dérivée doivent être continues en $x = 0$ et en $x = a$. Avec la connaissance de la forme de la fonction d'onde dans la région III nous obtenons le système suivant qui est homogène en (A, B, C, D):

<u>en $x = 0$</u>

$$\psi_I(0) = \psi_{II}(0) \quad \Rightarrow A + B = C + D$$
$$\dot{\psi}_I(0) = \dot{\psi}_{II}(0) \Rightarrow \alpha(A-B) = \beta(C-D)$$

<u>en $x = a$</u>

$$\psi_I(a) = \psi_{III}(a) \quad \Rightarrow Ae^{i\alpha a} + Be^{-i\alpha a} \qquad = e^{ik(a+b)}\left[Ce^{-i\beta b} + De^{i\beta b}\right]$$
$$\dot{\psi}_I(a) = \dot{\psi}_{III}(a) \quad \Rightarrow \alpha(Ae^{i\alpha a} - Be^{-i\alpha a}) = e^{ik(a+b)}\beta\left[Ce^{-i\beta b} - De^{i\beta b}\right]$$

Donc on a :

$$\begin{array}{lllll}
A & +\ B & -\ C & -\ D & = 0 \\
A\alpha & -B\alpha & -C\beta & +D\beta & = 0 \\
Ae^{i\alpha a} & +Be^{-i\alpha a} & -Ce^{ik(a+b)}e^{-i\beta b} & -De^{ik(a+b)}e^{i\beta b} & = 0 \\
A\alpha e^{i\alpha a} & -B\alpha e^{-i\alpha a} & -C\beta e^{ik(a+b)}e^{-i\beta b} & +D\beta e^{ik(a+b)}e^{i\beta b} & = 0
\end{array}$$

Ce qui peut s'écrire sous la forme :

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & -1 & -1 \\ \alpha & -\alpha & -\beta & +\beta \\ e^{i\alpha a} & e^{-i\alpha a} & -e^{ik(a+b)}e^{-i\beta b} & -e^{ik(a+b)}e^{i\beta b} \\ \alpha e^{i\alpha a} & -\alpha e^{-i\alpha a} & -\beta e^{ik(a+b)}e^{-i\beta b} & +\beta e^{ik(a+b)}e^{i\beta b} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \\ C \\ D \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

La fonction d'onde ne pouvant être nulle partout cette homogénéité implique que le déterminant de ce système doit être nul, soit :

$$\cos\left[k(a+b)\right] = \cos(\alpha a)\cdot\cos(\beta b) - \frac{\alpha^2+\beta^2}{2\alpha\beta}\sin(\alpha a)\cdot\sin(\beta b)$$

3) (i) Dans le cas ou $V_0 \to 0$ ou b=0, nous retrouvons $k = \alpha$ soit $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ et la fonction d'onde d'une particule libre : $\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$

(ii) Dans le cas ou $0 \le E \le V_0 \Rightarrow \beta = iq$ est imaginaire pur, nous trouvons:

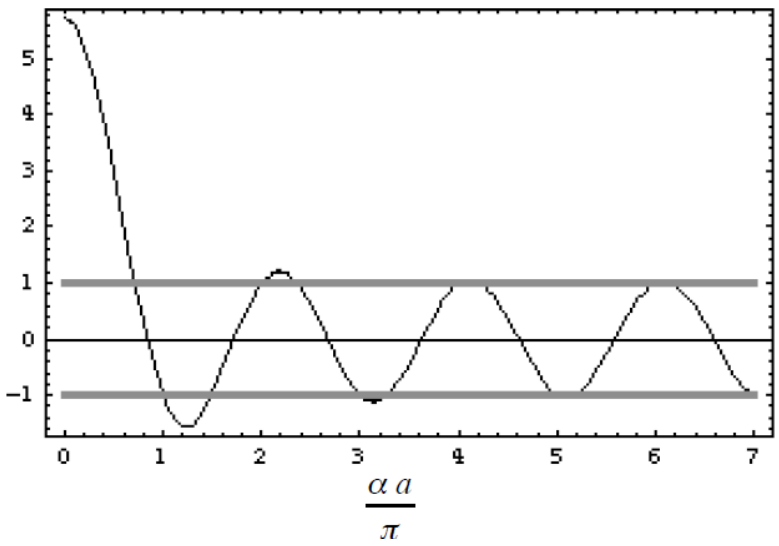
$$\cos[k(a+b)] = \cos(\alpha a)\cdot\cosh(qb) + \frac{q^2-\alpha^2}{2\alpha q}\sin(\alpha a)\cdot\sinh(qb)$$

Si E << V_0 et qb << 1 (β = iq). La condition supplémentaire ***qb << 1*** *est imposée, elle correspond au cas particulier des* niveaux de hautes énergies dans un cristal *q << 1 et au cas des puits larges* ***b << a,*** *c'est à*-dire à des niveaux d'énergie proche du haut des puits, *V - E << V*. Nous aurons les approximations suivantes:

$$\left.\begin{array}{l}\cosh(qb) \approx 1 \\ \sinh(qb) \approx qb \\ q^2 - \alpha^2 = \frac{2mV}{\hbar}\end{array}\right\} \Rightarrow \cos[ka] = \cos(\alpha a) + ab\frac{mV}{\hbar}\frac{\sin(\alpha a)}{\alpha a} \quad (*)$$

D'où l'expression de $P = ab\frac{mV}{\hbar}$

4) Traçons l'allure du membre de droite en fonction de αa. $y = \cos(\alpha a) + P\frac{\sin(\alpha a)}{\alpha a}$ avec $P = \frac{3\pi}{2}$ nous voyons apparaître des bandes d'énergie autorisées limitées par les deux lignes horizontales grisées en +1 et -1.



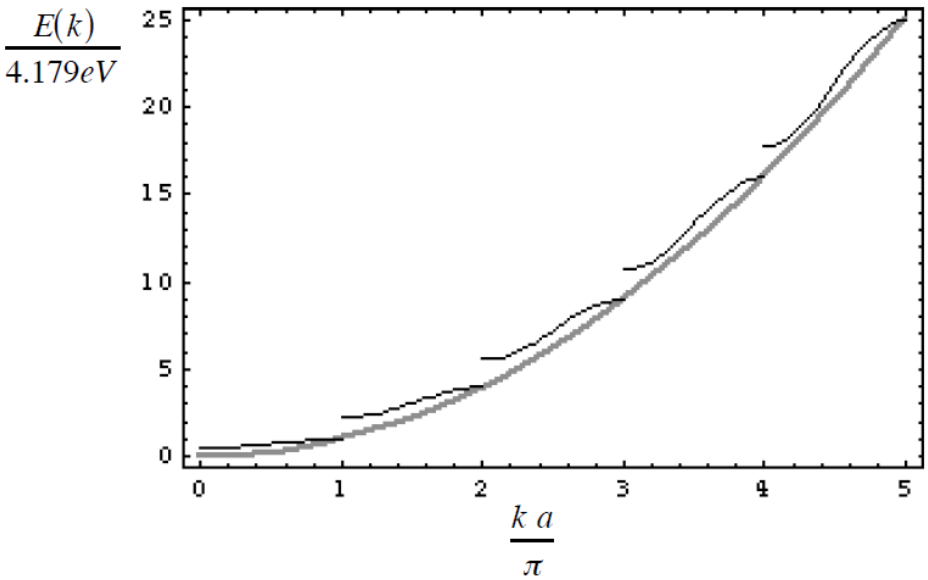
5) En déduire l'existence de bandes permises et interdites.

Compte tenu de l'égalité du second membre avec le cosinus du premier membre, il apparaît une alternance de zones où valeur de $\frac{\alpha a}{\pi}$ est permise et des zones où celle-ci est interdite car ne pouvant constituée une solution à l'équation (*). La définition de α amène à une conclusion identique pour ce qui concerne l'énergie de la particule. **Celle-ci se répartit en bande d'énergie permise et en bande d'énergie interdite. Les bandes permises forment un quasi continuum de niveau d'énergie pour les raisons évoquées dans le TD2**

Chaque fois que $\alpha a = m\pi \ (avec\ m \in \mathbb{Z})$ nous retrouvons le cas de la particule libre.

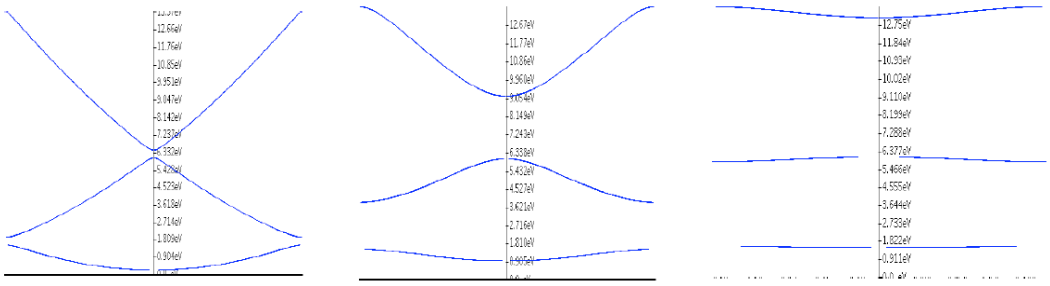
Ainsi pour $P = \frac{3\pi}{2}$ nous avons les bandes d'énergie successives suivantes :

$$\frac{\alpha a}{\pi} \in [0.71635, 1[\cup [1.5, 2[\cup [2.36039, 3[\cup [3.27353, 4[\cup [4.21753, 5[$$



La courbe en grisée correspond à la particule libre

6) Les schémas ci-dessous représentent l'évolution des relations de dispersion pour V_0 croissant (10, 100, et 1000eV, a+b=5A°, b=0.1A°) : commenter cette évolution. Retrouver la largeur de la première bande interdite pour V_0 =100eV



Pour les sommets des bande, nous retrouvons le cas de la particule libre.

La remarque énoncée ci-dessus : **si *k* est une solution alors** $\pm k + \frac{2\pi m}{a}$ *où* $m \in \mathbb{Z}$ permet de compléter le diagramme de dispersion en symétrisant et périodisant l'esquisse ci-dessus.

L'annulation de la dérivée en de la fonction *E(k)* au abcisses *kπ/ a* = entier n'a pas été démontré mais le sera au cours du calcul du paragraphe 3.

Le nombre d'états par bande est donné par:

$-\pi \le ka \le \pi \;\Rightarrow\; -\pi \le \frac{2\pi m}{N} \le \pi \;\Rightarrow\; -\frac{N}{2} \le m \le \frac{N}{2}$ soit *N* valeurs possibles donc 2*N* électrons par motif cristallin.

Pour $P \to \infty$ nous devons avoir $\sin(\alpha(a+b)) \to 0$ et donc $\alpha a = m\pi \;(avec\; m \in \mathbb{Z})$, les puits deviennent infiniment profonds, indépendants les uns des autres avec leurs niveaux d'énergie discrets.

6°) Application numérique:

Énergie des cinq premières bandes en eV:

{2.14432,4.17859}, {9.40182,16.7143}, {23.2808,37.6073} {44.7779,66.8574}, {74.3271,104.465}

Pour la première bande le bas correspond à une énergie de 2.14432 eV.

Pour la première bande le haut correspond à une énergie de 4.17859 eV.

Pour la deuxième bande le bas correspond à une énergie de 9.40182 eV.

La largeur de la première bande interdite est donc de 5.22323 eV.

7°) La différentiation de (3) par rapport à k conduit à l'expression:

$$\sin[ka] = \left(\sin(\alpha a) - P \frac{d}{d(\alpha a)} \left(\frac{\sin(\alpha a)}{\alpha a} \right) \right) \frac{d\alpha}{dk} = F_P(\alpha a) \frac{d\alpha}{dk}$$

Chaque fois que $\sin(ka) = 0$, c'est-à-dire en bas et en sommet de bande, $\frac{d\alpha}{dk} = 0$ car $F_P(\alpha a) \neq 0$. Par suite les bas et les sommets de bandes ont des formes paraboliques.

En poursuivant la dérivation à l'ordre suivant, pour le sommet et le bas de bande nous obtenons :

$$\frac{d^2\alpha}{dk^2} = \frac{\cos(ka)}{F_P(ka)}$$

Application au haut de la première bande.

Nous avons $\alpha = k = \frac{\pi}{a}$, par suite $F_P(\alpha a) = \frac{P}{a}$ et $\frac{d^2\alpha}{dk^2} = -a\frac{\pi}{P}$

Pour l'électron libre nous avons $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$, nous appellerons masse effective $m^* = \frac{\hbar^2}{\partial^2 E / k^2}$ qui redonne bien la masse de l'électron lorsqu'il est libre.

En revenant à la définition de $E = \frac{\hbar^2 \alpha^2}{2m}$ nous obtenons $\frac{d^2E}{dk^2} = \frac{\hbar^2}{m}\left(\left(\frac{d\alpha}{dk} \right)^2 + \alpha \frac{d^2\alpha}{dk^2} \right)$

En haut de la première bande $\frac{d^2E}{dk^2} = -\frac{\hbar^2\pi^2}{mP}$, la masse effective est alors:

$$m^* = -\frac{2}{3\pi} m = -0.212m$$

AUTRES COMMENTAIRES.

Les fonctions d'onde des électrons dans le cristal sont de la forme $u_a(x)e^{ikx}$ où $u_a(x)$ possède la périodicité du réseau.. À l'échelle macroscopique nous ne retiendrons que le terme en e^{ikx} ; l'électron ressemble à un électron libre: onde plane de vecteur d'onde *k* défini modulo $\frac{2\pi}{a}$

Néanmoins la relation $E(k)$ est modifiée et nous voyons apparaître des bandes d'énergie permises et interdites.

Le bas et le haut de ces bandes correspondent au voisinage de $ka = P\pi$ et sont décrites par l'équation $E_b\,(ou\ E_h) = E_{b_0}\,(ou\ E_{h_0}) + \dfrac{\hbar^2(k-P\pi)^2}{2m*}$ où $E_b\,(ou\ E_h)$ sont les énergies en bas (ou en haut) de celles ci.

L'électron se comporte comme s'il avait une énergie potentielle $E_b\,(ou\ E_h)$, un quantité de mouvement $\hbar(k-P\pi)$, une masse m* (pouvant être négative), et une énergie cinétique

$$\frac{P^2}{2m*} = \frac{\hbar^2(k-p\pi)^2}{2m*}$$