

Physique du solide et des semiconducteurs

1 Électrons libres : capacité calorifique, susceptibilité ...

Dans cette partie on considère N électrons indépendants dont la seule interaction est celle induite par le confinement à l'intérieur d'une boîte de volume V .

- Quelle simplification entraîne l'hypothèse d'absence d'interaction entre les électrons ?
- Ecrire l'équation de Schrödinger satisfaite par les fonctions d'onde stationnaires d'une particule quantique. Quelles sont les solutions, et les énergies ϵ associées, si l'on applique des conditions aux limites périodiques ?
- Définir et calculer la densité d'états $\rho(\epsilon)$ dans le cas des conditions aux limites périodiques.
- Rappeler l'expression de la distribution de Fermi-Dirac $f^{FD}(\epsilon, T, \mu)$ ainsi que sa signification. Représenter son allure pour différentes températures. $\epsilon \downarrow \text{à } T \rightarrow 0$
- Quelle condition fixe le potentiel chimique μ ? Expliciter la valeur du niveau de Fermi ϵ_F en fonction de la densité électronique volumique $n = N/V$. Retrouver l'ordre de grandeur de n et de ϵ_F dans un solide. Définir une échelle de température T_F associée au niveau de Fermi et la comparer aux températures usuelles.
- On suppose dans cette question que $T = 0$. Quelle est l'énergie totale des N électrons ? Comment peut-on définir une pression pour ce système de particules ? La calculer, ainsi que le module de compression $-V \frac{\partial p}{\partial V} \Big|_N$.
- On s'intéresse maintenant au régime des basses températures. On peut alors montrer (développements de Sommerfeld) que des intégrales du produit de la distribution de Fermi-Dirac par une fonction une fonction g régulière, peuvent se développer en puissances paires de T comme

$$I = \int_0^{+\infty} d\epsilon f^{FD}(\epsilon, T, \mu) g(\epsilon) = \int_0^{\mu} d\epsilon g(\epsilon) + \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 g'(\mu) + \mathcal{O}(T^4)$$

- Déterminer le comportement de la chaleur spécifique à l'ordre le plus bas en température en appliquant le développement de Sommerfeld au calcul du nombre de particules et de l'énergie. De quelle autre contribution à la chaleur spécifique doit-on tenir compte dans un solide ? Laquelle domine à basse température ?
- Quelle propriété des solides ne peut pas être expliquée dans le cadre du modèle des électrons libres ?

2 Structure de bande : électrons presque libres

IMP!!!

On considère un modèle de cristal à une dimension consistant en une rangée d'atomes identiques uniformément espacés de a , disposés le long de l'axe Ox . Une fraction des électrons de chaque atome est susceptible de se propager le long de la rangée en subissant le potentiel périodique des ions. L'énergie potentielle qui en résulte est de la forme $U(x) = V_1 \cos(gx)$ avec $g = 2\pi/a$. On prendra $V_1 > 0$. On suppose que V_1 est suffisamment faible pour que l'on puisse résoudre l'équation de Schrödinger par approximations successives.

- Donner, en fonction de leur vecteur d'onde k , la fonction d'onde $\psi_k^0(x)$ et l'énergie E_0 des électrons considérés quand $V_1 = 0$.
- V_1 est désormais différent de zéro et on cherche pour $\psi(x)$ des solutions sous la forme :

$$\psi_k(x) = \psi_k^0(x)v(x), \quad \text{où } v(x) = v(x+a).$$

L'énergie associée est $E = E_0 + E_1$. Justifier brièvement cette forme de la fonction d'onde.

3. Donner l'équation différentielle satisfaite par $v(x)$.
4. On décompose l'amplitude $v(x)$ en ondes planes

$$v(x) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} A_n e^{ignx},$$

Justifier cette décomposition.

5. Montrer que l'équation différentielle satisfaite par $v(x)$ peut se réécrire :

$$\sum_{n=-\infty}^{+\infty} e^{ignx} \left\{ \left[\frac{\hbar^2}{2m} (k + ng)^2 - E \right] A_n + \frac{V_1}{2} (A_{n-1} + A_{n+1}) \right\} = 0$$

En déduire les équations satisfaites par les coefficients A_n .

6. Donner les 3 équations obtenues pour $n = 0, 1$ et -1 .
7. On suppose que V_1 est petit et que l'on peut développer la solution autour de la solution pour $V_1 = 0$ (méthode des perturbations). Ainsi, on suppose $A_0 = 1$ et les autres A_n pour $n \neq 0$ d'ordre 1. On suppose enfin que l'énergie des solutions peut aussi s'écrire $E = E_0 + E_1$ où E_1 est au moins d'ordre 1. Avec ce jeu d'approximation, déduire, à l'ordre 1 en perturbation, les coefficients A_n ainsi que l'énergie E_1 . Commentaires ?
8. Montrer que la première contribution à l'énergie est d'ordre 2 en perturbation. Donner l'expression de l'énergie E_1 à l'ordre 2.
9. Montrer que les résultats ainsi obtenus sont en général compatibles avec les hypothèses faites à savoir $|A_n| \ll 1$ et $\frac{|E - E_0|}{E_0} \ll 1$ sauf quand $k \approx \pm \frac{\pi}{a}$.
Ordre de grandeur : Pour $a = 3\text{\AA}$, $U_1 = 2\text{eV}$. Calculez A_1 et A_{-1} ainsi que $|E - E_0|$ pour $k = \pi/2a$.
On donne $\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\pi}{2a} \right)^2 = 1\text{ eV}$.
- Quand $k \approx \pm \frac{\pi}{a}$, le développement n'est plus valide. Un nouveau jeu d'approximation est alors nécessaire, comme habituel en théorie des perturbations.
10. Pour étudier l'énergie d'un vecteur d'onde voisin de $k \approx \pi/a$, on considère désormais que dans l'expression de $v(x)$, le coefficient A_{-1} n'est plus négligeable, mais peut-être a priori d'ordre 1, les autres coefficients A_n (sauf A_0) étant toujours au moins d'ordre 1. Montrer que le coefficient A_{-1} intervient simultanément dans deux relations concernant les A_n . En déduire l'expression de les deux solutions possibles pour l'énergie E .
11. Quand k n'est plus au voisinage de π/a , l'énergie E obtenue à la question 10 doit être sensiblement égale à celle trouvée à la question 8. On pose $k = \pi/a + \Delta k$. En séparant le cas Δk positif et négatif, en déduire laquelle des deux solutions de la question 10 doit être sélectionnée selon le signe de Δk .
12. Dans le cas où Δk est petit devant $g/2$, donner l'expression simplifiée de E jusqu'à l'ordre 2 en puissance de $\Delta k/g$. En déduire l'existence d'une discontinuité pour $k = \pi/a$. Quelle est l'amplitude de cette discontinuité et la valeur prise alors par A_{-1} ? Remarques ?
13. Donner la forme de la courbe représentative $E = f(k)$ dans l'intervalle $-2\pi/a < k < 2\pi/a$, puis dans la première zone de Brillouin. Commentaires ?
14. L'élément considéré est mono-valent. Sera-t-il conducteur ou isolant ?
15. L'élément considéré est bi-valent. Sera-t-il conducteur ou isolant ?

TD Physique des solides

description de la physique des solides

↳ lié à aux propriétés électroniques

- ex:
- | cohésion
 - | conduction
 - | propriétés optiques

Ces propriétés ont souvent des traductions macroscopiques de phénomènes quantiques.

Phénomène quantiques:

- en général associés à la physique microscopique
- ↳ dualité onde/corpuscule
- effet tunnel

Pourtant, il y a des phénomènes macroscopiques associés à la physique quantique

- ferromagnétisme
- supraconductivité/superréactivité
(Bose - Einstein)
- Corps noir
- + conduction

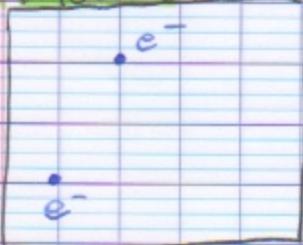
Physique quantique on peut l'apprécier en:

→ dynamique quantique (description dans forme d'ondes)
souscrite à l'Eq. de Schrödinger

→ statistique quantique pour des fermions indiscernables
↳ distribution de Fermi-Dirac

rg: En conduction on est pas strictement à l'équilibre (on apprécie les champs au matériau), or les perturbations sont faibles et n'arrivent pas à trop perturber l'équilibre.

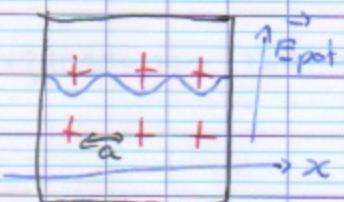
modèle: 1



- e^- dans une boîte et ne sortent pas! \rightarrow boîte de taille finie décrit les propriétés moyennes
- e^- indépendants \rightarrow pas de corrélations / SCZ entre eux. l'interaction avec les ions
- quantiques \rightarrow énergie et statut quantique

rg: modèle de champ moyen "lisse" les interactions entre e^-

modèle: 2



- les ions dans le matériau ont en plus une régularité
 - les e^- : \rightarrow longueur a
 - (+) l'interaction e^- ion est périodique et peut entrer en résonance avec une onde propre des e^- (lien à électrostatique) \rightarrow particule onde couplée
- \Rightarrow 2 longueurs d'onde du système: a et λ_{op}
- L'ouverture θ

TD

PSL

2

exercice 1

- N e^- indépendants

- e^- confinés à l'intérieur de V .

1) c^- sans interaction $\Rightarrow e^-$ indépendants !

2) Shrödinger Stationnaire \rightarrow donne une boîte d'états propres

$$\hookrightarrow \hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle$$

$$\text{où } \hat{H} = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V$$

\hookrightarrow interaction avec la boîte (i.e. ions),

On pose interaction \Rightarrow hors de la boîte
 ou dans la boîte.

$$\text{alors } -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi = E\Psi$$

On a des solutions: $\Psi(\vec{r}) = A e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}$ où: A est déterminé par la normalisation

$$\Rightarrow A = \frac{1}{\sqrt{V}}$$

où V est le volume de la boîte

rg: on n'a pas précisé \vec{k} on peut prendre $\vec{k}^2 = -\vec{k}'^2$

rg: pour ce calcul rester sur $-e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}$, \oplus simple que cosinus et sinus!

$$- \text{ par tracer } r: \int_V \alpha^2 r^2 / 4r^2 = 1 = \int d^2 r / A^2 = 1$$

$$\Rightarrow A^2 V = 1 \Rightarrow A = \frac{1}{\sqrt{V}}$$

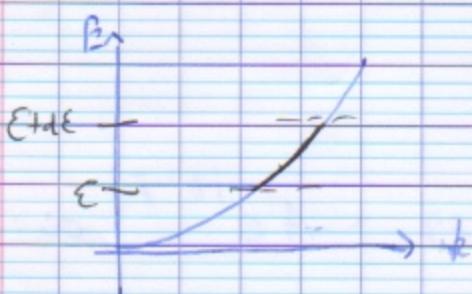
$$h = \frac{2\pi \beta}{\sqrt{\hbar^2}} \Rightarrow E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

Si on applique conditions limites périodiques $e^{ikL} = 1$

$\Rightarrow k^2 \cdot L^2 = 2\pi n \Rightarrow$ quantification des charges.

3) $\rho(\epsilon)$ = densité d'états

$\rho(\epsilon) d\epsilon$ = nombre d'états d'énergie entre ϵ et $\epsilon + d\epsilon$.



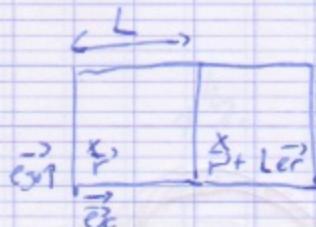
conditions limites périodiques artificielles (d'abord)

notre but est de définir une base de décomposition, ces conditions vont nous permettre de trouver cette base de décomposition de la position d'onde!

TD PSI

3

$$\Psi(\vec{r}') = \Psi(\vec{r}' + L\vec{e}_x) \text{ avec } L \text{ taille de la boîte.}$$



$$\text{alors } e^{i k' \cdot L \vec{e}_x} = 1 = e^{i k \cdot L \vec{e}_x} = e^{i k \cdot L \vec{e}_x}$$

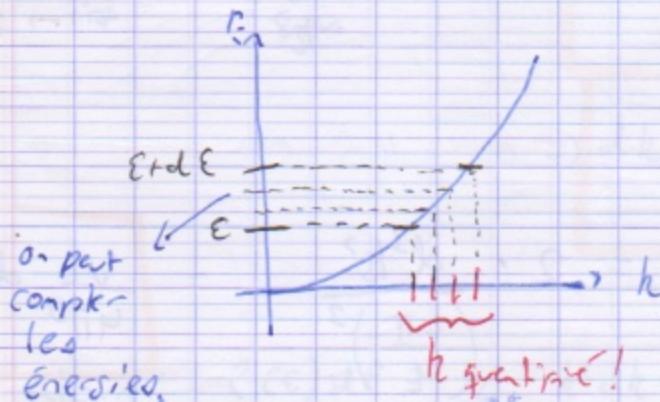
donc $\left[\frac{k'x}{L} \right] = 2\pi n \wedge \left(\frac{x}{L} \right)$ ou $n \in \mathbb{Z}$

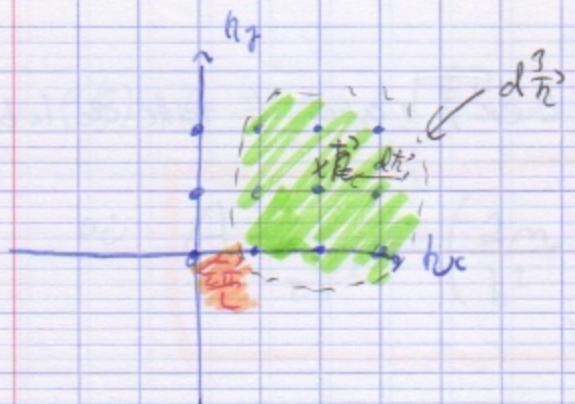
$\hookrightarrow k'$ quantifiée

rg: avec des conditions périodiques strictes ($\Psi(0) = 0$)
on obtiendrait $\sin\left(n \frac{\pi}{L} x\right) \Rightarrow n$ et $-n$ sont équivalents!

ceci est déconseillé car il a des subtilités en plus dans le calcul.

revenons sur Ψ : k' est quantifié!





nb. d'états à k' à $d^3 k$ près?

pour quantifier les états on prendra le volume $d^3 k'$ que on divisera par le volume d'un état!

Le nombre de vecteurs d'onde compris entre k' et k'' sera:

$$= \frac{d^3 k'}{\left(\frac{2\pi}{L}\right)^3}$$

rg: on est avec $d^3 k'$ très grand par rapport à $\frac{2\pi}{L}$

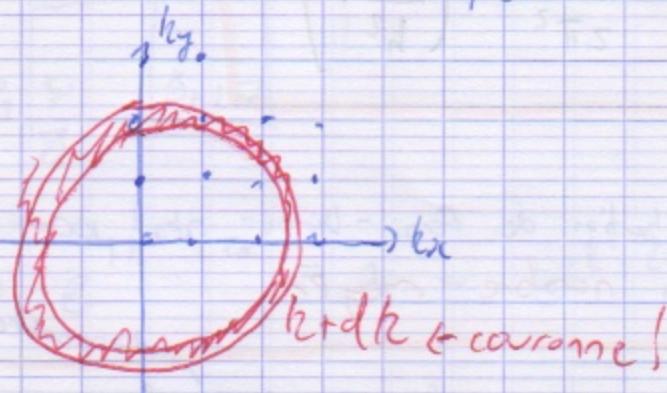
Or nous on veut le nb. d'états pas le nb. de vecteurs d'onde!

$$2 \text{ état d'}1e^- : \Psi = \underbrace{| \psi_{k'} \rangle}_{k'} \otimes \underbrace{| \psi_{k''} \rangle}_{k''} \rightarrow 2 \text{ états fct}$$

donc:

$$\bullet \rho(k') d^3 k' = 2 \cdot \frac{d^3 k'}{\left(\frac{2\pi}{L}\right)^3} = \boxed{\frac{V}{4\pi^3} d^3 k'}$$

- $\rho(k) dk = \text{nb d'états dont le module du vecteur dont le module du vecteur d'onde est } k + dk \text{ près.}$



surface sphérique $\cdot dk$

$$\text{donc } \rho(k) dk = \frac{V}{4\pi^3} k^2 dk \cdot 4\pi = \boxed{\frac{V}{\pi^2} k^2 dk}$$

$$\text{donc } \rho(E) dE = \rho(k) dk \quad \text{ou} \quad E = E(k) \\ E dE = E(k + dk).$$

$$\text{donc } E = \frac{k^2}{2m} \cdot \hbar^2 \Rightarrow k = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}} \cdot \sqrt{E}$$

$$\Rightarrow dk = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}} \cdot \frac{dE}{2\sqrt{E}}$$

$$\text{alors: } \rho(E) dE = \frac{V}{\pi^2} k^2 dk = \frac{V}{\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2} \frac{E dE}{2\sqrt{E}}$$

$$e(E) \propto e = A \sqrt{\sqrt{E}} dE$$

où

$$A = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2}$$

i) La distribution de Fermi-Dirac n'est pas une probabilité !
C'est un nombre moyen.

indiscernable et indépendante !

f^{FD} = nb. moyen de fermions dans un état état donné, qui a une énergie E dans un système à l'équilibre dans l'ensemble grand canonique.
 $\in (T, \mu)$.

$$= \frac{1}{e^{\frac{(E-\mu)}{k_B T}} + 1}$$

$$= \frac{1}{e^{\beta(E-\mu)} + 1} = f^{FD}$$

Pourquoi on s'intéresse à μ ? \Rightarrow Casse grand canonique.
 ↳ C'est plus simple

on se place dans l'ensemble grand canonique (où les calculs sont simples)

puis on utilise l'équivalence grand canonique / canonique.
 à condition que T soit le τ et:

$$N_{\text{canonique}} = N(\mu, T)_{\text{grand canonique}}$$

V
 variables que
 peut faire
 l'observateur

TD PS1

7.5

alors
$$N = \int_0^{\infty} dE \rho(E) f^{FD}(E, T, \mu).$$

à $T=0$: $\mu = E_F \rightarrow$ le potentiel chimique qui à $T=0$ assure $N=N(T=0, E_F)$.

- à $T=0$: $f^{FD} = \begin{cases} 1 & \text{si } E < E_F \\ 0 & \text{si } E > E_F \end{cases}$ car $\rho^{FD}(T=0) \xrightarrow{T \rightarrow 0} \frac{1}{e^{(E-E_F)/kT} + 1}$

$$\Rightarrow N = \int_0^{E_F} dE A V \sqrt{E} \cdot 1 = A V \left[\frac{2}{3} E_F^{3/2} \right]_0^{E_F}$$

$$N = \frac{2}{3} A V E_F^{3/2}$$

donc $E_F = \left(\frac{3N}{2V} \cdot \frac{1}{\frac{1}{2m} \left(\frac{2\pi}{h^2} \right)^{2/3}} \right)^{2/3}$

$$= \frac{h^2}{2m} \left(3\pi^2 \frac{N}{V} \right)^{2/3}$$

$$= \frac{h^2}{2m} k_F^2 \quad \text{où} \quad k_F = \left(3\pi^2 \frac{N}{V} \right)^{1/3}$$

$\sim 55 \text{ eV!}$

6) Si on s'intéresse à l'énergie totale U :

$$U = \int_0^{\infty} dE \rho(E) f^{FD}(E, T, \mu) E$$

↓
densité de
niveaux,

↓
nb moyen d'E
à un niveau.

↑
énergie d'un niveau.

$$\because T=0, \quad U = \int_0^{\epsilon_f} dE \epsilon A V \sqrt{\epsilon} \epsilon$$

$$= AV \int_0^{\epsilon_f} d\epsilon \epsilon^{3/2}$$

$$U = AV \frac{2}{5} \epsilon_f^{5/2}$$

$$\text{et } N = \frac{2}{5} AV \epsilon_f^{3/2}$$

$$\text{donc } \frac{U}{N} = \frac{3}{5} \epsilon_f \Rightarrow U = \frac{3}{5} N \epsilon_f$$

$$P = - \frac{\partial F}{\partial V} \Big|_{T,N}$$

$$\because T=0 \quad : \quad F = U - TS \\ = \underline{U} \quad \because T=0$$

$$\text{donc } P = - \frac{\partial U}{\partial V} \Big|_{T=0, N}$$

$$= - \frac{\partial}{\partial V} \left[\underbrace{\frac{3}{5} N \frac{\hbar^2}{2m} \left(2\pi^2 \frac{N}{V} \right)^{2/3}}_{B V^{-2/3}} \right]$$

$$P = + \frac{2}{3} B V^{2/3} = \frac{2}{3} \frac{U}{V}$$

TD PS 1

6

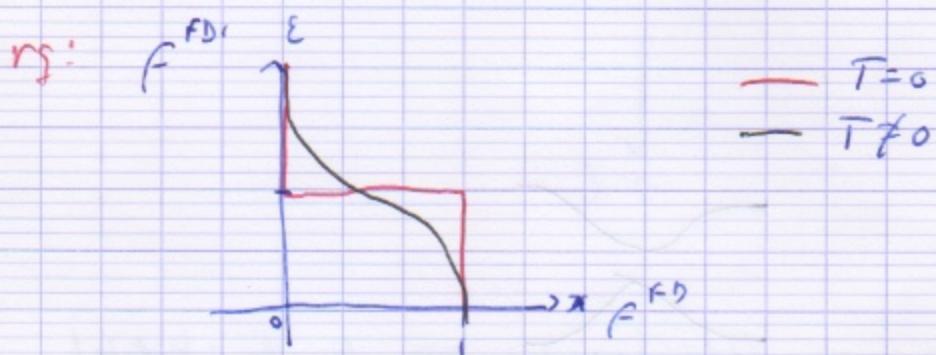
Pour des densités avec $a \approx 3\text{\AA}$, on trouve $P_N \approx 10^{10} \text{ Pa}$

C'est énorme !, mais on a aussi la cohésion des atomes du cristal qui assure que cette pression soit supportée !

Quand on fait passer un courant, à $100 \cdot 10^3 \text{ V}$, l'énergie apportée sera faible par rapport à l'énergie qui coûte déjà.

rg: à $T \neq 0$ $U = \int_0^{\infty} \epsilon_F dE$ donc ça se calcule pas correctement.

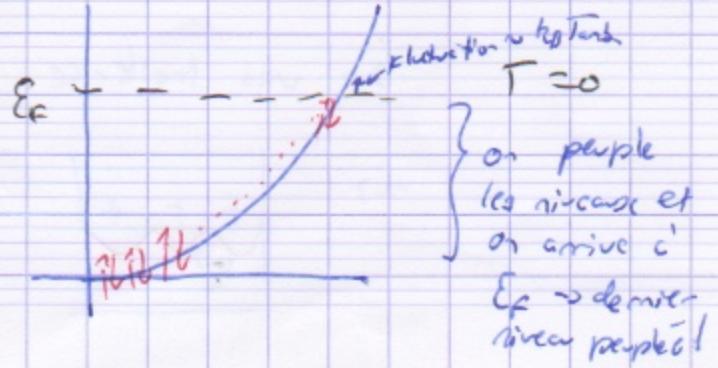
\Rightarrow développement de Sommerfeld !



normalement ϵ_F est par $T = 0$ ou $T_{\text{amb}} \ll T_F$

\Rightarrow on est très proche du cas $T = 0$ par rapport à T_F !

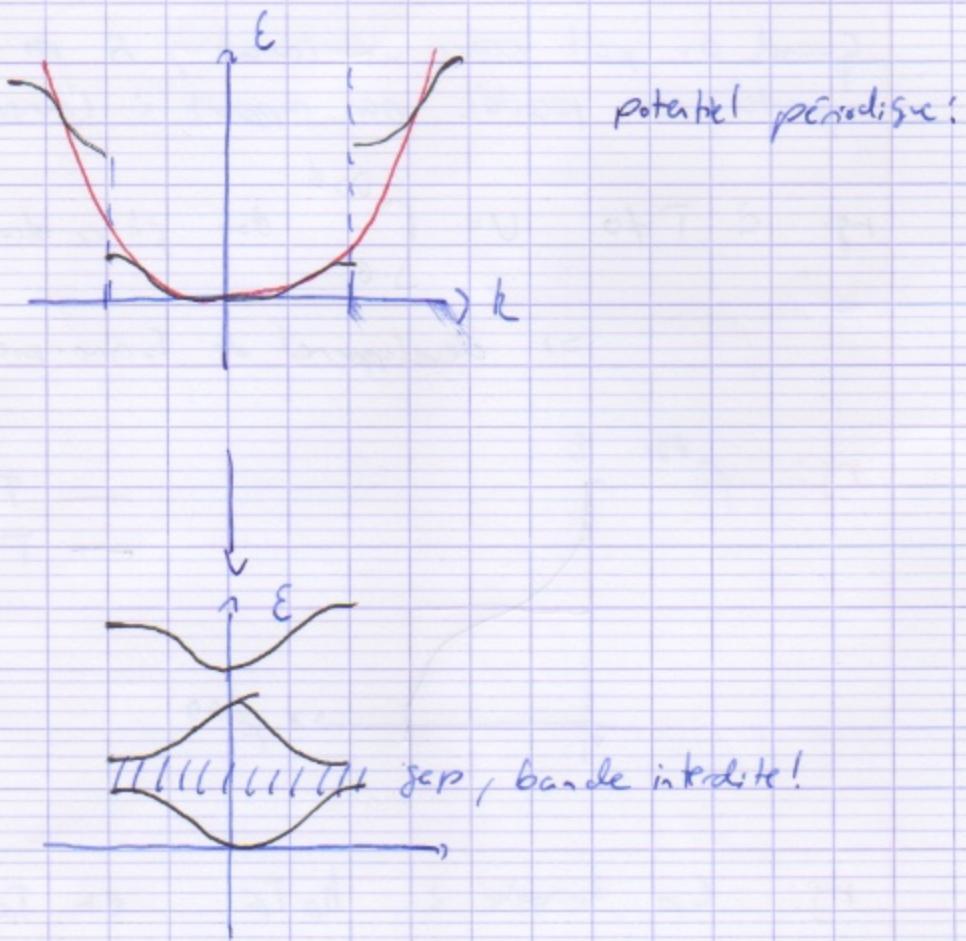
\hookrightarrow on est dans un cas où on a des petites fluctuations $\sim k_B T$ autour de ϵ_F :



de même, par homogénéité, $E_F = \frac{1}{2} m v_F^2$

$$\Rightarrow V_F \sim 10^6 \text{ m.s}^{-1}$$

↳ vitesse $\gg \sqrt{g_0 e z}$.



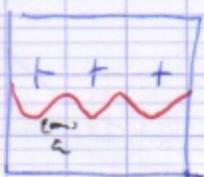
q- 7, 8 et 9 corrigées à part!

jeudi 16/06/2016 on a pris l'interaction $e^- - ion$.

→ on l'ajoute pour trouver la structure de bandes!

on va traiter ce potentiel en tant que perturbation!

2)



interaction $e^- / réseaux ionique$
périodique, faible (perturbation).

7

Exercice 2 Structure de bande

$$E_p = U(x) = V_1 \cos(sx) \quad V_1 > 0$$

1) quand $V_1 = 0 \rightarrow e^-$ libre

$$\Rightarrow \text{on utilise } H\psi = E\psi \text{ et on trouve } \psi^0(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{ikx}$$

$$\text{et } E^0 = \frac{\hbar^2}{2m} k^2.$$

2) On pose $\psi(x) = \psi^0(x) + \underbrace{\psi^-(x)}_{\text{perturbation.}}$

On gatrine avec le théorème de Bloch car on est dans un potentiel périodique sur a !

si non on peut dire que le système est périodique sur a
 \Rightarrow on cherche une solution périodique sur a

ici la périodicité est donnée par $|\psi(x)| = \frac{|\psi(x)|}{L}$

en effet on cherche ψ périodique sur a

3) Eq. de Schrödinger stationnaire:

$$\hat{H}\psi = E(\psi)$$

$$\text{donc } \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + U(x) \right] \Psi^*(x) V(x) = (E^* + E') \Psi^*(x)$$

$$\Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \left[e^{ihx} v(x) \right] + U(x) e^{ihx} v(x) = (E^* + E') e^{ihx} v(x)$$

$$\Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} e^{-ihx} \frac{d^2}{dx^2} \left[e^{ihx} v(x) \right] + U(x) v(x) = (E^* + E') v(x).$$

4) Décomposition en onde de Fourier de $v(x)$. Car périodique!

$$v(x) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} A_n e^{i \frac{2\pi n}{a} x}$$

$$\begin{aligned} 5) \text{ on a } & i \hbar \frac{d^2}{dx^2} (e^{ihx} v(x)) \quad \text{or} \quad e^{ihx} v(x) = \sum_n A_n e^{i(n\pi + h)x} \\ & = \frac{d^2}{dx^2} (e^{ihx} v(x)) = - \sum_n A_n (k\pi + h)^2 e^{i(n\pi + h)x} \end{aligned}$$

$$= -e^{ihx} \sum_n A_n (k\pi + h)^2 e^{i(n\pi + h)x}$$

$$\text{or } U(x) = V_1 \cos(sx) = \frac{V_1}{2} (e^{isx} + e^{-isx})$$

$$e^{isx} v(x) = e^{isx} \sum_n A_n e^{in\pi x} = \sum_n A_n e^{i(\frac{n}{a} + 1)sx}$$

8

$$\text{donc } e^{i\theta x} v(x) = \sum_n A_{n-1} e^{inx}$$

$$\text{de } \hat{n} e^{-i\theta x} v(x) = \sum_n A_n e^{inx}$$

alors notre équation se réécrit:

$$\frac{\hbar^2}{2m} \sum_n A_n (h+n\epsilon)^2 e^{inx} - (E_0 + E_1) \sum_n A_n e^{inx} + \frac{V_1}{2} \sum_n e^{inx} (A_{n+1} + A_{n-1}) = 0$$

$$\Rightarrow \sum_n e^{inx} \left\{ A_n \left[\frac{\hbar^2}{2m} (h+n\epsilon)^2 - (E_0 + E_1) \right] + \frac{V_1}{2} (A_{n+1} + A_{n-1}) \right\} = 0$$

$$\text{donc } V(x) \sum_n e^{inx} B_n = 0$$

$$\Leftrightarrow B_n = 0 \quad \forall n \quad (\text{unicité de la TF})$$

alors on déduit:

$$(E_0) \rightarrow A_n \left[\frac{\hbar^2}{2m} (h+n\epsilon)^2 - (E_0 + E_1) \right] + \frac{V_1}{2} (A_{n+1} + A_{n-1}) = 0 \quad \forall n$$

pb on a une infinité d'équations de ce type !

On doit faire des approximations raisonnables et réalisables

6) Si on écrit pour :

$$n=0 \Rightarrow A_0 \left[\frac{h^2}{2m} (k)^2 - (E_0 + E_1) \right] + \frac{V_1}{2} (A_{+1} + A_{-1}) = 0$$

$$n=1 \Rightarrow A_1 \left[\frac{h^2}{2m} (k+s)^2 - (E_0 + E_1) \right] + \frac{V_1}{2} (A_2 + A_0) = 0$$

$$n=-1 \Rightarrow A_{-1} \left[\frac{h^2}{2m} (k-s)^2 - (E_0 + E_1) \right] + \frac{V_1}{2} (A_0 + A_{-2}) = 0$$

7) $V(x) \Rightarrow \sum_n e^{inx} A_n$

quand $V_1 = 0$ alors $V^0(x) = 1$

$$\Rightarrow A_0^{(0)} = 1$$
$$A_n^{(n)} = 0 \quad \forall n$$

hypo : On suppose que on peut faire un échelot.
 $A_0 \sim 1$, c'est l'ordre de grandeur

et $A_n \approx 0 \quad \forall n$ avec $A_n \approx O(V_1)$

si $n \notin 0, 1$ et -1

alors l'équation (E₀) ne fait jamais intervenir A_n!



9

donc tous les $A_n \sim O(V_1)$ (par $n \neq -1, 0, 1$)

$$\text{alors } \frac{V_1}{2} (A_{n-1} + A_{n+1}) = O(V^2)$$

dans ce cas on pourra le négliger

$$\text{alors } A_n \left[\frac{\hbar^2}{2m} (h+s)^2 - E_0 \right] + o(V^2) = 0$$

générer ceci
Si non pl:
après! ↓

$$A_n \left[\frac{\hbar^2}{2m} h^2 + \frac{\hbar^2 n^2}{2m} + \frac{\hbar^2}{2m} (hs) - E_0 - E_1 \right] = o(V^2)$$

$$A_n \left[\frac{\hbar^2}{2m} (n^2 s^2 + hs) - E_1 \right] = o(V^2)$$

$$\text{or } E_1 = o(V_1) \Rightarrow \frac{\hbar^2}{2m} (n^2 s^2 + hs) - E_1$$

$$\sim \frac{\hbar^2}{2m} (n^2 s^2) + o(V_1)$$

+ grand que $o(V_1)$!

$$\text{donc } A_n \cdot (\text{choses}) = o(V^2) \Rightarrow A_n = o(V^4).$$

Pour $n=0$:

$$A_0 \left[\frac{\hbar^2}{2m} h^2 - E_0 - E_1 \right] + \frac{V_1}{2} (A_1 + A_{-1}) = 0$$

Pour $n=1$

$$A_1 \left[\frac{\hbar^2}{2m} (h+s)^2 - \frac{\hbar^2}{2m} h^2 - E_1 \right] = V_1 \frac{A_0}{2} + o(V^2)$$

E_0

$$\Rightarrow A_1 \left[\frac{\hbar^2}{2m} (s^2 + 2ks) - E' \right] = V_1 \frac{A_0}{2} + o(V_1^2)$$

Or pour A_0 on trouve :

$$A_0 \left[\frac{\hbar^2}{2m} h^2 - \frac{\hbar^2}{2} s^2 - E_1 \right] = -V_1 \underbrace{\left(A_1 + A_{-1} \right)}_{o(V^2)}$$

$$\Rightarrow E_1 = \frac{V_1}{2A_0} (A_1 + A_{-1}) = o(V^2)$$

$$\text{donc } A_1 \left[\frac{\hbar^2}{2m} (s^2 + 2ks) + o(V^2) \right] = V_1 \frac{A_0}{2} + o(V_1^2)$$

$$\Rightarrow A_1 = \frac{-V_1 A_0}{2 \left(\frac{\hbar^2}{2m} (s^2 + 2ks) \right)} + o(V_1^2)$$

pour $n=1$

$$\text{on trouvera } A_{-1} = \frac{-V_1 A_0}{2 \left(\frac{\hbar^2}{2m} s (s+2k) \right)} + o(V_1^2)$$

où A_0 est fixé par normalisation.



10

8) On a montré que $E_1 = \frac{V_1}{2A_0} (A_1 + A_{-1})$

Si on fait le calcul exact :

$$E_1 = -\frac{V_1^2}{4} \left\{ \frac{1}{g(s+2k)} + \frac{1}{g(s-2k)} + o(V_1) \right\}$$

$$E_1 = -\frac{V_1^2}{4 \frac{k^2}{2m} s} \left(\frac{1}{s+2k} + \frac{1}{s-2k} \right) + o(V_1^3)$$

9) Δ au dénominateur on a un terme $s - 2k$!

Si $s \approx |2k|$ on a une résonance! et alors notre hypothèses sur A_1, A_{-1} , et E_1 ne sont plus valables

\Rightarrow si $k = \pm \frac{\pi}{2}$ on a une résonance!

$$\Rightarrow k = \pm \frac{2\pi}{2a} = \pm \frac{\pi}{a} \leftarrow \text{bords de la zone de Brillouin!}$$



où on a ouverture de sept.

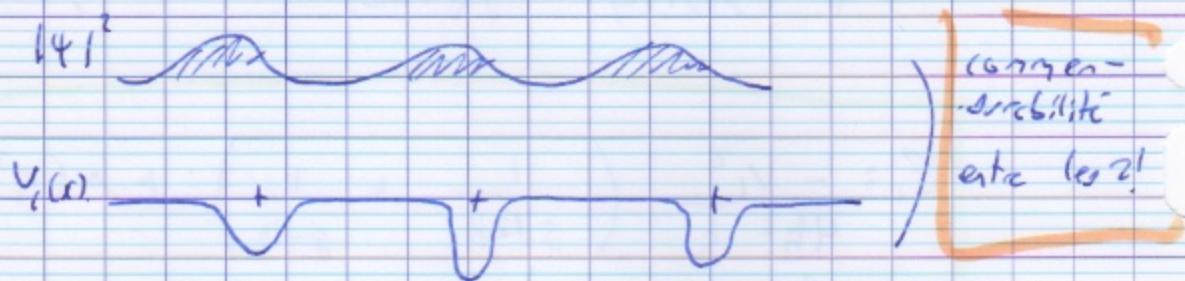
au voisinage de $k = \frac{\pi}{2} = \pm \frac{\pi}{a}$ alors $A_1 \approx 1$, tout comme A_0 !

on peut en faire une nouvelle hypothèse ($A_0 \neq 0, A_1 \approx V_1$)!



et on refait le calcul !

10 E_1 diverse en $k = \pm \frac{n\pi}{a}$ (bords de l'zone de Brillouin)
Il y a résonance entre l'onde de $\vec{k} = (\frac{n\pi}{a}, 0)$ et l'excitation (perturbation périodique par rapport au réseau de période a)



au voisinage de la résonance $k \approx \pm n\pi/a$ on reprend les

équations algébriques sur les A_n (traductions de l'équation de Schrödinger), au voisinage de $k = \frac{n\pi}{a}$

$$n=0 \quad \left[\frac{t\hbar^2}{2m} k^2 - E \right] A_0 + \frac{V_1 A_{-1}}{2} + o(V_1^2) = 0$$

$$n=1 \quad \left[\frac{t\hbar^2}{2m} \left(k - \frac{2\pi}{a} \right)^2 - E \right] A_{-1} + \frac{V_1 A_0}{2} + o(V_1^2) = 0$$

La solution précédente montre que A_{-1} diverge, donc on reprend le calcul en ne supposant plus que $A_{-1} = \cancel{o(V_1)}$

Alors, on impose pour trouver la solution que le déterminant = 0 pour avoir des solutions $\neq 0$

TD PS7

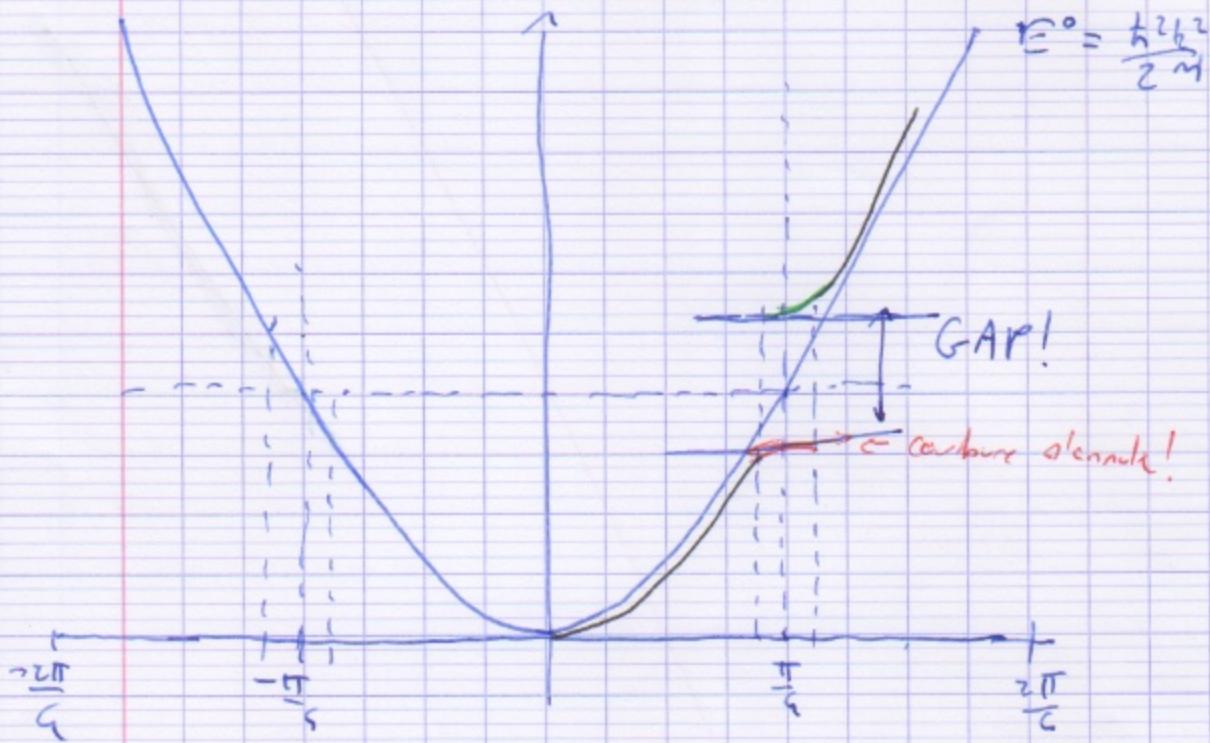
Q.M. Dans le cas de l'effet tunnel

1)

Alors on trouve (voir corrigé par calculs)

$$E = \frac{1}{2} \frac{\hbar^2}{2m} \left[h^2 + \left(k - \frac{\pi}{a} \right)^2 \right] \pm \frac{1}{2} \sqrt{\left(\frac{\hbar^2}{2m} \right) \left[h^2 - \left(k - \frac{\pi}{a} \right)^2 \right]^2 + V_0^2}$$

On a 2 solutions, il faut trancher avec la continuité!



On a trouvé $E^* = E^0 + E^1$ avec $E^1 < 0$ pour $|k| \geq \frac{\pi}{a}$ avec $k < \frac{\pi}{a}$
→ on choisit donc pour $k = \frac{\pi}{a}$ la solution \textcircled{f} pour se rappeler avec notre calcul perturbatif! et être en mesure de le croire —

pour $\frac{\pi}{a} < k$ mais! $k \geq \frac{\pi}{a}$ on avait $E^1 > 0$

⇒ on choisit la solution \textcircled{f} alors!

Ouverture d'un saut en énergie / zone interdite as il n'y a pas de solutions de l'équation de schrödinger de l'é avec une perturbation.

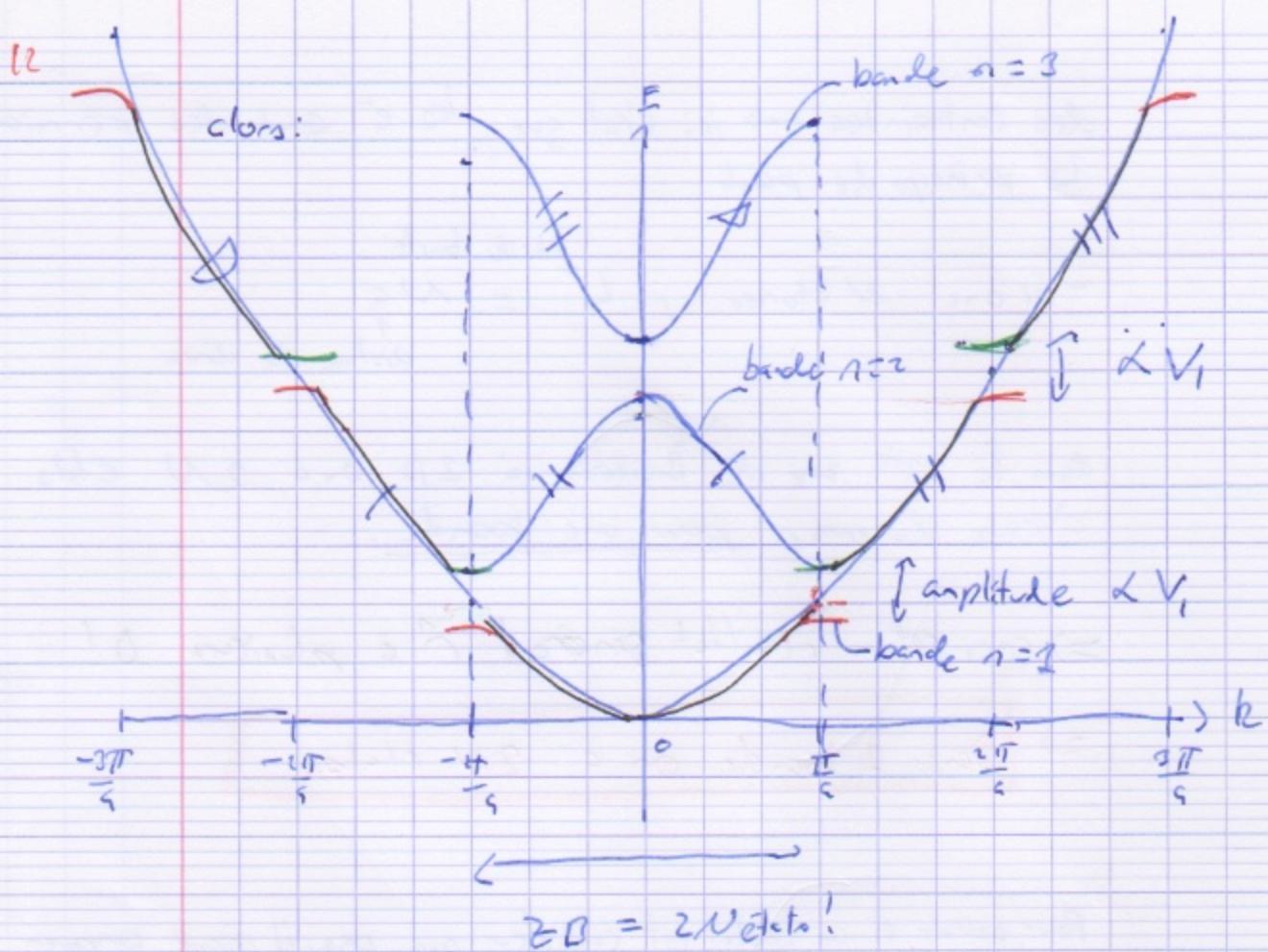


schéma en zone réduite: k et $k + \frac{2\pi}{\hbar}$ sont équivalents physiquement

- * Toujours une quantification des $k = \frac{n\pi}{L}$ liée aux conditions limites.
- * On vient d'obtenir les états à $1c^-$ liés à la dynamique quantique (équation de Schrödinger)
- * On considère N états supposés independants et à l'équilibre
 \Rightarrow Distribution de Fermi-Direc (qui résulte des pp de Pauli).
- à $T=0 \rightarrow$ on cherche l'état d'énergie minimale compte tenu

des contraintes \rightarrow ici c'est que les e^- sont des fermions
b) principe de pauli

- Si on a N atomes, $L^{\sqrt{\text{taille boite}}} = N_a$
 \uparrow autre chose.

dans la 2^{ème} zone de Brillouin à $T=0$ on a $2N$ états
c'est le nombre pour une bande.

\Rightarrow ceci est un résultat général à plusieurs d!

\Rightarrow Dans 1 bande on a $2N$ états.

Pour avoir qd un cristal soit conducteur ou pas, il faut comparer cette valeur avec le nombre d' e^- disponibles!

à $T=0$ ($T_{\text{amb}} \approx T=0$ à cause de $T_{\text{ambi}} \gg T_{\text{amb}}$)

Si on a un atome qui donne $z e^-$:

- si $z=1 \rightarrow$ la 1^{ère} bande est à $\frac{1}{2}$ remplie à $T=0$

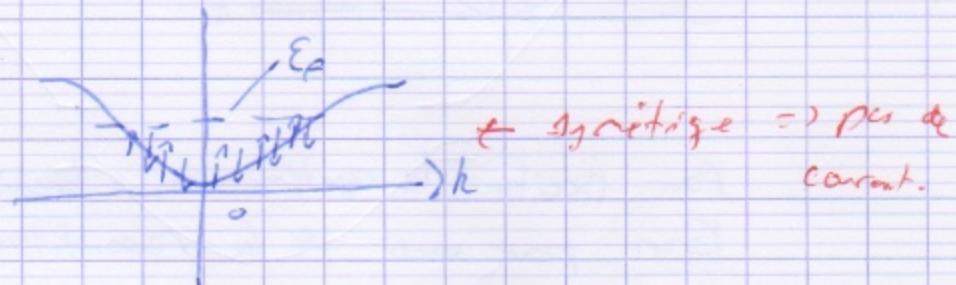


- si $z=2 \rightarrow$ la 1^{ère} bande est pleine!

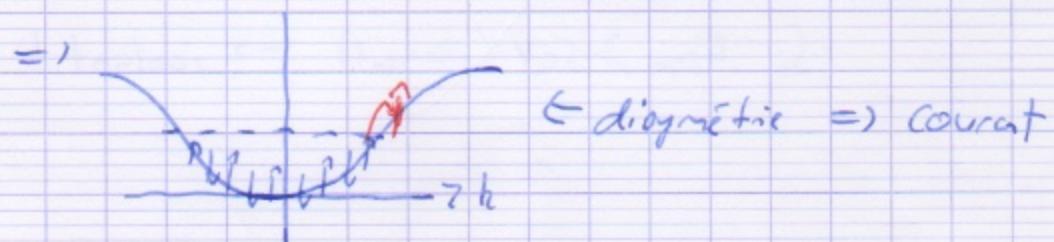
12

f) Si T est impair, à $T=0$ il y a forcément au moins une bande fractionnellement remplie (Dès que ce cas c'est remplie mais dans d'autres cas on peut avoir) dévachement des bandes \Rightarrow ch. remplie

Pour avoir un courant on doit rompre la symétrie autour de 0



On ne peut appliquer que des petits champs au cristal \Rightarrow on change l'état d'un e^- (on les cible)



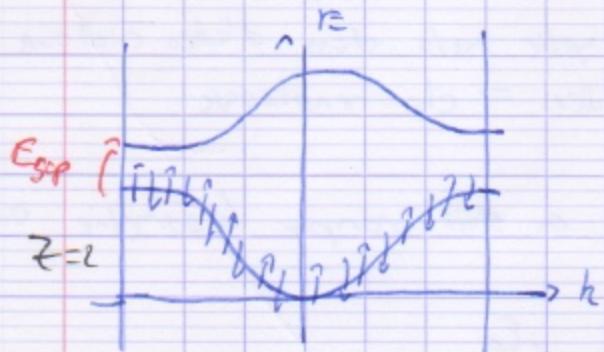
on peut ici déplacer l'é le plus proche de E_F (niveau de Fermi) à un autre état!

Une excitation est facile car il y a des états très voisins en énergie proches du niveau de Fermi
 \Rightarrow matériau conducteur!

rg: avec un champ électrostatique on déplace tous les e^-
 \Rightarrow disruption de la répartition \Rightarrow courant
le plus réaliste.

Si T est impair \rightarrow matériau conducteur

Si Z est pair ?



Pour exciter le système on a besoin de "franchir"
 E_{gap} pour sortir de la répartition d'équilibre à $T=0$.

Si $E_{gap} \lesssim 2\text{eV} \rightarrow$ "acceptable"
L \rightarrow semi-conducteur

Si $E_{gap} > 5\text{eV}$ (diamant) \rightarrow isolant !