Mécanique quantique – L3

Sylvain Nascimbène

Séance de tutorat du 13 novembre 2019

Bandes d'énergie dans un potentiel périodique

---

1 Théorème de Bloch

On considère le mouvement unidimensionnel d'une particule de masse m décrite par sa fonction d'onde $\psi(x)$ dans un potentiel $V(x)$ périodique. Pour le moment, on ne spécifie pas la forme exacte du potentiel $V(x)$, et on note d la période spatiale.

1. Écrire l'équation aux valeurs propres vérifiée par $\psi(x)$.

Afin de faciliter la résolution de cette équation, nous allons exploiter les symétries du problème. On introduit à cet effet l'opérateur de translation $\hat{T}_d$, qui agit sur les fonctions d'onde par

$$\left[\hat{T}_d\psi\right](x) = \psi(x-d).$$

2. Quelle est l'action de $\hat{T}_d$ sur $|x\rangle$? Montrer que $\hat{T}_d$ est unitaire et calculer $\hat{T}_d^\dagger$.
3. Montrer que la périodicité du potentiel $V(x)$ implique $[\hat{H}, \hat{T}_d] = 0$.
4. Pourquoi est-il possible de diagonaliser simultanément $\hat{H}$ et $\hat{T}_d$?
5. Montrer que toute valeur propre λ de $\hat{T}_d$ peuvt s'écrire $\lambda_q = \exp(-iqd)$ pour un unique réel $q \in [-\pi/d, \pi/d[$.
6. En déduire le théorème de Bloch : si $\psi(x)$ est une fonction propre commune à $\hat{H}$ et $\hat{T}_d$, alors il existe un unique réel $q \in [-\pi/d, \pi/d[$ et une unique fonction $u(x)$, périodique de période d tels que pour tout x,
$$\psi(x) = e^{iqx}u(x).$$
7. Donner l'équation différentielle vérifiée par $u(x)$.

2 Resolution du modèle Kronig–Penney

On considère dans cette partie le potentiel de Kronig–Penney

$$V(x) = \frac{\hbar^2\mu}{2m}\sum_{p\in\mathbb{Z}}\delta(x-pd),$$

où $\delta(x)$ est la fonction de Dirac. On rappelle que la fonction d'onde $\psi(x)$ est continue, et que sa dérivée présente un saut à travers un potentiel dirac, soit

$$\psi'(pd^+) - \psi'(pd^-) = \mu\psi(pd).$$

Conformément au théorème de Bloch, on cherche des états propres $|\psi\rangle$ de H, d'énergie E, sous la forme d'états propre de $\hat{T}_d$ avec valeur propre e^{-iqd}.

8. Résoudre l'équation de Schrödinger en introduisant deux constantes d'intégration, et donner les deux relations que satisfont ces constantes, traduisant les conditions aux limites trouvées précédemment.
9. Montrer que les conditions aux limites périodiques imposent la relation de dispersion $\cos qd = \cos kd + \frac{\mu}{2k} \sin kd$
10. En déduire la structure de bandes.