Chapitre 21

TTL : Modèle de Kronig-Penney

Le but est de comprendre comment un potentiel périodique donne naissance à des bandes d'énergie permises et interdites pour un électron dans un cristal.

On considère un électron dans un cristal modélisé par un potentiel périodique unidimensionnel de type Kronig-Penney :

— Le potentiel est constitué de barrières de hauteur $V_0 = 1.5\,\mathrm{eV}$ et de largeur $c = 0{,}3\,\mathrm{nm}$.

— Entre les barrières, l'électron évolue librement sur une distance $b = 0{,}6\,\mathrm{nm}$.

— La période du potentiel est donc $a = b + c = 0{,}9\,\mathrm{nm}$.

On choisit l'origine telle que :

— Région libre : $V(x) = 0$, $x \in [0\,;b[$

— Région de barrière : $V(x) = V_0$, $x \in [-c\,;0[$

21.1 Relation de dispersion

On se place d'abord dans le cas où l'énergie E de l'état propre de l'électron est inférieure à V_0.

1. Écrire l'équation de Schrödinger dans les deux régions $[-c\,;0[$ et $[0\,;b[$.
2. Donner les formes générales des solutions dans chaque région.
3. Écrire les conditions de continuité à imposer sur $\psi(x)$ et $\psi'(x)$ en $x = 0$.
4. Rappeler le théorème de Bloch. En déduire l'expression de la fonction d'onde dans l'intervalle $[b\,;a[$.
5. Écrire les conditions de continuité à imposer sur $\psi(x)$ et $\psi'(x)$ en $x = b$.
6. Montrer que l'équation de dispersion s'écrit dans le cas $0 < E < V_0$:

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

   avec :

$$\alpha = \sqrt{\tfrac{2mE}{\hbar^2}}, \quad \beta = \sqrt{\tfrac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}}$$

7. Reprendre la même méthodologie pour établir l'équation de dispersion dans le cas $V_0 < E$:

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

   avec :

$$\alpha = \sqrt{\tfrac{2mE}{\hbar^2}}, \quad \kappa = \sqrt{\tfrac{2m(E - V_0)}{\hbar^2}}$$

21.2 Bandes d'énergie

8. À l'aide d'un outil numérique (Python, MATLAB, etc.), tracer $\cos(ka)$ en fonction de $E \in [0\,;10]\,\mathrm{eV}$.
9. Identifier les intervalles d'énergie pour lesquels $|\cos(ka)| \leq 1$. Ce sont les **bandes permises**.
10. Tracer $E(k) - \langle V \rangle$ dans la demi-zone de Brillouin : $k \in [0\,;\pi/a]$.
11. Commenter la forme des courbes obtenues, en les comparant aux courbes du modèle du réseau vide.
12. Comparer les largeurs des deux premières bandes interdites obtenues à celles attendues dans le modèle des électrons faiblement liés (presque libres) utilisant la méthode de perturbation. Conclure quant à l'importance de la correction au second ordre dans ce dernier modèle.

Chapitre 22

TTL : $-V_0 \cos(2\pi x/a)$

Le but est de comprendre comment un potentiel périodique sinusoïdal donne naissance à une bande d'énergie interdite pour un électron dans un cristal.

On considère un électron dans un cristal modélisé par un potentiel périodique unidimensionnel sinusoïdal :

$$V(x) = -V_0 \cos(2\pi/a\, x) \tag{22.1}$$

1. Écrire l'équation de Schrödinger. On note $\Phi(x)$ la fonction d'onde d'énergie propre E.
2. Rappeler la forme générale de la fonction d'onde de Bloch et vérifier qu'elle peut être écrite sous la forme :
$$\Phi(x) = \sum_{n\in\mathbb{Z}} c_n e^{i(k+n2\pi/a)x} \tag{22.2}$$

On considère les unités réduites pour la position $X = x/a$ et pour l'énergie $\varepsilon = E/V_0$. On défini la masse $m_0 = \hbar^2/(V_0 a^2)$

3. Montrer que l'équation aux valeurs propres devient :
$$-\frac{1}{2}\eta f''(X) - \cos(2\pi X) f(X) = \varepsilon f(X) \tag{22.3}$$
où η est un nombre sans dimension qu'on précisera et $f(x/a) = \Phi(x)$.
4. Développer $f(X)$ de la même manière que la relation (22.2). On notera $K = k\,a$.
5. Montrer alors que l'on obtient le système d'équations suivant :
$$-\frac{1}{2}c_{n-1} + \frac{1}{2}\eta(K + 2\pi n)^2 c_n - \frac{1}{2}c_{n+1} = \varepsilon\, c_n \tag{22.4}$$

Pour résoudre ce système et ainsi trouver une approximation de la fonction d'onde, on propose de limiter la somme infinie de termes $\sum_{n\in\mathbb{Z}}$ à une somme finie $\sum_{n=-5}^{n=5}$. Le système (22.4) devient alors une équation aux valeurs propres :

$$\mathbf{M}\mathbf{c} = E\,\mathbf{c} \tag{22.5}$$

où $\mathbf{c}$ est le vecteur $(c_{-5}, \cdots, c_{-1}, c_0, c_1, \cdots, c_5)$ et $\mathbf{M}$ une matrice hermitienne (réelle symétrique).

6. On considère la cas où $\eta = 1$. À l'aide d'un outil numérique (Python, MATLAB, etc.), déterminer les valeurs propres $\varepsilon(K)$ en faisant varier K dans l'intervalle $[0, \pi]$ par un pas de $0{,}05$. Tracer les relations de dispersion ainsi trouvées. Déterminer la largeur de la première bande interdite, E_g, qui apparait en $K = \pi$ ($k = \pi/a$).
7. Reprendre les mêmes calculs pour $\eta = 5$ et pour $\eta = 0{,}2$. Conclure en comparant E_g à la valeur prédite par la méthode de perturbation utilisée dans le modèle des électrons presque libres (faiblement liés).