ELEC2330 Séance 1 : Solutions

EXERCICES 1 (Equations de Schrödinger)

Premier cas : électrons soumis à un seul puits de potentiel

Pour • $E > V_1$: électron libre
• $E<-V_0$: électron lié au noyau
• $-V_0<E<V_1$: électron faiblement lié $\Rightarrow$ intéressant pour la conduction

Etablissons l'expression de l'équation de Schrödinger dans les différentes régions

Région I

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\Phi(x)}{dx^2} - V_0\,\Phi(x) = E\,\Phi(x) \qquad (1)$$

Région II et III

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\Phi(x)}{dx^2} + V_1\,\Phi(x) = E\,\Phi(x) \qquad (2)$$

Posons $\alpha = \sqrt{\frac{(V_0+E)\ 2m}{\hbar^2}}$ $\qquad \beta = \sqrt{\frac{(V_1-E)\ 2m}{\hbar^2}}$

$\Rightarrow$ Région I $\qquad \Phi'' + \alpha^2\Phi = 0 \qquad \Rightarrow \qquad \Phi_I(x) = Ae^{i\alpha x} + Be^{-i\alpha x}$

Région II et III $\qquad \Phi'' - \beta^2\Phi = 0 \qquad \Rightarrow \qquad \begin{cases}\Phi_{II}(x) = Ce^{\beta x} + De^{-\beta x} \\ \Phi_{III}(x) = Ee^{\beta x} + Fe^{-\beta x}\end{cases}$

Conditions aux limites :

• En $x = \pm\infty$ Φ reste fini
$\Rightarrow E = 0\ (x \to +\infty),\ D = 0\ (x \to -\infty)$

Par exemple, pour la région III $(x \to +\infty)$, lorsque l'on impose E=0, ceci implique que pour des valeurs d'énergie $E < V_1$ (et pour x>a), la fonction d'onde Φ_{III} devient une exponentielle décroissante. En effet, pour $E<V_1$, β est réel. En d'autres termes, dans ces conditions, la probabilité de présence de l'électron au-delà de la barrière de potentiel est non nulle mais devient rapidement très faible (décroît exponentiellement) une fois la barrière franchie. Pour des valeurs d'énergie $E>V_1$, la fonction d'onde Φ_{III} devient une fonction périodique et reste finie quelque soit x. La particule se déplace alors librement.

- En $\left.\begin{matrix} x=0 \\ x=a \end{matrix}\right\}$ continuité de Φ et de Φ'

$\Rightarrow \quad \Phi_{II}(0)=\Phi_I(0) \qquad \Phi_I(a)=\Phi_{III}(a)$

$\quad \Phi'_{II}(0)=\Phi'_I(0) \qquad \Phi'_I(a)=\Phi'_{III}(a)$

$\Rightarrow \ A+B=C \qquad Ae^{i\alpha a}+Be^{-i\alpha a}=Fe^{-i\beta a}$

$\quad i\alpha A-i\alpha B=\beta C \qquad i\alpha Ae^{i\alpha a}-i\alpha Be^{-i\alpha a}=-\beta Fe^{-\beta a}$

Pour que ce système ait une solution non nulle : det |M|=0

(Equation homogène : $1^{\text{ère}}$ solution $A=B=C=D=E=F=0$

$2^{\text{ème}}$ solution $\neq 0$ si $\det|M|=0$)

$$\det|M|=0 \Leftrightarrow \begin{vmatrix} 1 & 1 & -1 & 0 \\ i\alpha & -i\alpha & -\beta & 0 \\ e^{i\alpha a} & e^{-i\alpha a} & 0 & -e^{-\beta a} \\ i\alpha e^{i\alpha a} & -i\alpha e^{-i\alpha a} & 0 & \beta e^{-\beta a} \end{vmatrix}=0$$

$$\Leftrightarrow e^{2i\alpha a}=\left[\frac{\beta-i\alpha}{\beta+i\alpha}\right]^2$$

$$\Leftrightarrow (\beta+i\alpha)^2e^{i\alpha a}=(\beta-i\alpha)^2e^{-i\alpha a}$$

Cas limite :

$V_1\rightarrow\infty$, l'électron se trouve obligatoirement dans le puits de potentiel (e lié)

$$\Rightarrow \beta\rightarrow\infty \Rightarrow \left[\frac{\beta-i\alpha}{\beta+i\alpha}\right]^2=1$$

$$\Rightarrow e^{2i\alpha a}=1 \quad \text{soit} \quad e^{i\alpha a}=\pm 1$$

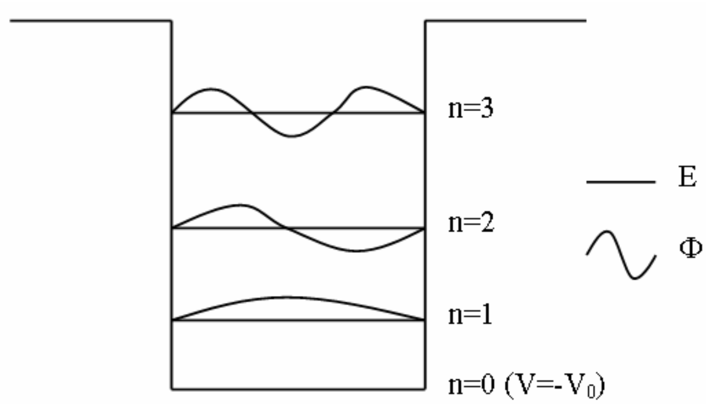
$$\Rightarrow \cos(\alpha a)+i\sin(\alpha a)=\pm 1 \ \Leftrightarrow \alpha a=n\pi \qquad (n\in N)$$

$$\Rightarrow \alpha=\frac{n\pi}{a}$$

$$\Rightarrow \frac{n\pi}{a}=\sqrt{\frac{(V_0+E)\ 2m}{\hbar^2}}$$

$$\Rightarrow E=\left(\frac{n\pi}{a}\right)^2\frac{\hbar^2}{2m}-V_0$$

$\Rightarrow$ L'énergie est quantifiée



Deuxième cas : électrons soumis à un double puits de potentiel

Région I et III

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\Phi(x)}{dx^2}-V_0\,\Phi(x)=E\,\Phi(x)$$

Région II

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\Phi(x)}{dx^2}+V_1\,\Phi(x)=E\,\Phi(x)$$

Posons $\alpha=\sqrt{\frac{(V_0+E)\;2m}{\hbar^2}}$ $\qquad\beta=\sqrt{\frac{(V_1-E)\;2m}{\hbar^2}}$

$\Rightarrow$ Région I et III $\quad\Phi''-\alpha^2\Phi=0\quad\Rightarrow\quad\begin{cases}\Phi_I(x)=Ae^{i\alpha x}+Be^{-i\alpha x}\\ \Phi_{III}(x)=Ee^{i\alpha x}+Fe^{-i\alpha x}\end{cases}$

Région II $\quad\Phi''+\beta^2\Phi=0\quad\Rightarrow\quad\Phi_{II}(x)=Ce^{\beta x}+De^{-\beta x}$

Conditions aux limites :

- La particule est localisée à l'intérieure du puits

$\Rightarrow\Phi(x)$ doit être nulle en a et en $-(a+b)$

$\Rightarrow\Phi_{III}(a)=Ee^{i\alpha a}+Fe^{-i\alpha a}=0$

$\Phi_I(-(a+b))=Ae^{-i\alpha(a+b)}+Be^{i\alpha(a+b)}=0$

La dérivée n'a pas de sens car la fonction d'onde n'a pas d'existence en dehors du puits. Dans ce cas (potentiel $\to+\infty$ en a ou en -(a+b)), la probabilité de présence de l'électron dans cette région est nulle.

- En $\left.\begin{array}{l}x=0\\x=-b\end{array}\right\}$ continuité de Φ et de Φ'

$\Rightarrow\quad\Phi_{II}(0)=\Phi_{III}(0)\qquad\Phi_I(-b)=\Phi_{III}(-b)$

$\Phi'_{II}(0)=\Phi'_{III}(0)\qquad\Phi'_I(-b)=\Phi'_{III}(-b)$

$\Rightarrow\quad C+D=E+F\qquad Ae^{-i\alpha b}+Be^{i\alpha b}=Ce^{-\beta b}+De^{\beta b}$

$\beta C-\beta D=i\alpha E-i\alpha F\qquad i\alpha Ae^{-i\alpha b}-i\alpha Be^{i\alpha b}=\beta Ce^{-\beta b}-\beta De^{\beta b}$

On a 6 équations à 6 inconnues. Pour obtenir une solution non triviale (non nulle), le déterminant du système doit être nul.

$$\det|M| = 0 \Leftrightarrow \begin{vmatrix} 0 & 0 & 1 & 1 & -1 & -1 \\ 0 & 0 & \beta & -\beta & -i\alpha & i\alpha \\ e^{-i\alpha b} & e^{i\alpha b} & -e^{-\beta b} & -e^{\beta b} & 0 & 0 \\ i\alpha e^{-i\alpha b} & -i\alpha e^{i\alpha b} & -\beta e^{-\beta b} & \beta e^{\beta b} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & e^{i\alpha a} & e^{-i\alpha a} \\ e^{-i\alpha(a+b)} & e^{i\alpha(a+b)} & 0 & 0 & 0 & 0 \end{vmatrix}$$

$$\Leftrightarrow e^{-2i\alpha a}\left[e^{-\beta b}(\beta+i\alpha)^2 - e^{\beta b}(\beta-i\alpha)^2\right] - 2e^{-\beta b}\left(\alpha^2+\beta^2\right) +$$
$$2e^{\beta b}\left(\alpha^2+\beta^2\right) + e^{2i\alpha a}\left[e^{-\beta b}(\beta-i\alpha)^2 - e^{\beta b}(\beta+i\alpha)^2\right] = 0$$

Cas limite :

i) $V_1 = -V_0$

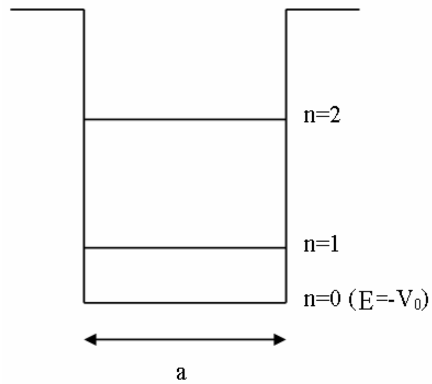
$$\Rightarrow \beta = i\alpha$$
$$\Rightarrow \left(\alpha^2+\beta^2\right) = 0$$
$$\Rightarrow \det|M| = 0 \Leftrightarrow -4\alpha^2 \cdot e^{-2i\alpha a} \cdot e^{-i\alpha b} + 4\alpha^2 \cdot e^{2i\alpha a} \cdot e^{i\alpha b} = 0$$
$$\Leftrightarrow e^{-2i\alpha a} \cdot e^{-i\alpha b} = e^{2i\alpha a} \cdot e^{i\alpha b}$$
$$\Leftrightarrow e^{-i\alpha(2a+b)} = e^{i\alpha(2a+b)}$$
$$\Leftrightarrow e^{i\alpha(2a+b)} = \pm 1$$
$$\Leftrightarrow \alpha(2a+b) = n\pi \qquad (n \in N)$$
$$\Leftrightarrow \alpha = \frac{n\pi}{(2a+b)}$$
$$\Rightarrow E = \left(\frac{n\pi}{2a+b}\right)^2 \frac{\hbar^2}{2m} - V_0$$

On obtient un puits de potentiel de longueur (2a+b)

ii) $V_1 \to \infty;\ b \to \infty$

$$\Rightarrow \beta \to \infty \quad (\beta >> \alpha)$$
$$\Rightarrow e^{-\beta} \to 0$$
$$\Rightarrow \det|M| = 0 \Leftrightarrow e^{-2i\alpha a} + e^{2i\alpha a} = +2 \text{ (On néglige le double produit; pas de terme en } \beta\text{)}$$
$$\Leftrightarrow \cos(2\alpha a) - i\sin(2\alpha a) + \cos(2\alpha a) + i\sin(2\alpha a) = +2$$
$$\Leftrightarrow \cos(2\alpha a) = +1$$
$$\Leftrightarrow 2a\alpha = 2n\pi \qquad (n \in N)$$
$$\Leftrightarrow \alpha = \frac{n\pi}{a}$$
$$\Rightarrow E = \left(\frac{n\pi}{a}\right)^2 \frac{\hbar^2}{2m} - V_0$$

On obtient un puits de potentiel de hauteur infinie de largeur a :



iii) $V_1 \to \infty;\ b \to 0\ ;bV_1$ de valeur finie

$$\Rightarrow \beta \to \infty$$

$$\Rightarrow \beta \cdot b \to 0 \text{ (car tjrs} < b \cdot V_1 \text{ qui est fini)}$$

$$\Rightarrow e^{(\pm\beta \cdot b)} \to 1$$

$$\text{Simplifications}: (\beta + i\alpha)^2 = \beta^2 + 2i\alpha\beta - \alpha^2 \approx \beta^2 + 2i\alpha\beta \quad (\beta >> \alpha)$$

$$(\beta - i\alpha)^2 = \beta^2 - 2i\alpha\beta - \alpha^2 \approx \beta^2 - 2i\alpha\beta \quad (\beta >> \alpha)$$

$$\alpha^2 + \beta^2 \approx \beta^2 \qquad (\beta >> \alpha)$$

$$\det|M| = 0 \Leftrightarrow \beta^2 e^{-2i\alpha a}\left[e^{-\beta b} - e^{\beta b}\right] - 2\beta^2\left[e^{-\beta b} - e^{\beta b}\right] + \beta^2 e^{2i\alpha a}\left[e^{-\beta b} - e^{\beta b}\right]$$

$$+ 2i\,\alpha\beta\, e^{2i\alpha a}\left[e^{-\beta b} + e^{\beta b}\right] - 2i\,\alpha\beta\left[e^{-\beta b} + e^{\beta b}\right] = 0$$

$$\Leftrightarrow \underbrace{\beta^2\left[e^{-\beta b} - e^{\beta b}\right]\left[e^{-2i\alpha a} + e^{2i\alpha a} - 2\right]}_{\to 0} + 4i\,\alpha\beta\left[e^{-2i\alpha a} - e^{2i\alpha a}\right] = 0$$

$$\Leftrightarrow 4i\,\alpha\beta\left[e^{-2i\alpha a} - e^{2i\alpha a}\right] = 0$$

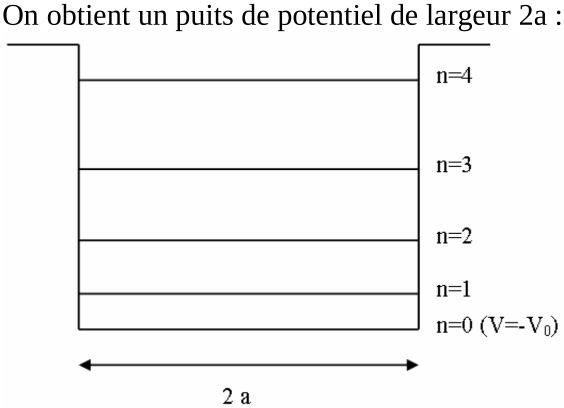
$$\Leftrightarrow \left[e^{-2i\alpha a} - e^{2i\alpha a}\right] = 0$$

$$\Leftrightarrow 2a\alpha = n\pi \qquad (n \in N)$$

$$\Leftrightarrow \alpha = \frac{n\pi}{2a}$$

$$\Rightarrow E = \left(\frac{n\pi}{2a}\right)^2 \frac{\hbar^2}{2m} - V_0$$

On obtient un puits de potentiel de largeur 2a :



Lorsque l'on a deux puits collés l'un à l'autre, on a deux fois plus de niveaux d'énergie. C'est par ex. équivalent à deux mailles d'un réseau cristallin collées l'une à l'autre.

EXERCICES 2 (Fonctions de distribution)

Métal $\left(\mu - E_c\right)_0 = \frac{h^2}{8m_c}\left(\frac{3n}{\pi}\right)^{2/3}$

$$\left(\mu - E_c\right) = \left(\mu - E_c\right)_0 \cdot 1 - \frac{\pi^2}{12}\left(\frac{kT}{\left(\mu - E_c\right)_0}\right)^2$$

1. n=3.10^{28} atomes/m^3

$\left(\mu - E_c\right)_0 = 5{,}636.10-19 \text{ J} = 3{,}522\,\text{eV}$
$\left(\mu - E_c\right)_{300} = 3{,}522\,\text{eV}$

<u>Rem</u> : L'énergie de Fermi d'un métal reste pratiquement constante en fonction de la température et égale à $\left(\mu - E_c\right)_0$. On a fait l'hypothèse que n ne change pas avec T, mais ceci n'est valable que pour un métal, il en va autrement pour un semiconducteur.

2. a) E=μ+0,5eV$\Rightarrow$ E-μ=0,5eV

A 300K : $f_{FD} = \frac{1}{e^{(E-\mu)/kT} + 1} = 4{,}448.10^{-9}$

$$f_{MB} = \frac{1}{e^{(E-\mu)/kT}} = 4{,}448.10^{-9}$$

b) $f_{FD} = 0{,}01 \Rightarrow e^{(E-\mu)/kT} = 99$

$$\Rightarrow \frac{(E-\mu)}{kT} 4{,}595 \Rightarrow T = 1262{,}78\,\text{K}$$

$$f_{MB} = 0{,}01 \Rightarrow T = \frac{E-\mu}{k\ln(100)} = 1259{,}99\,\text{K}$$