

CPC 7 : Électrons faiblement liés.

Préliminaires

- 1) $\phi_k(x) = u_k(x) \exp(ikx)$, avec $u_k(x+na) = u_k(x)$.

En appliquant les conditions périodiques de BVK, on obtient ($L = Na$):

$$\phi_k(x+L) = \phi_k(x)$$

$$k = n \frac{2\pi}{L}, \quad n = 1, 2, \dots, N$$

- 2) Les vecteurs d'onde admissibles sont répartis dans l'espace réciproque d'une façon uniforme avec une densité $\frac{L}{2\pi}$. Le nombre d'états pour lesquels le module du vecteur d'onde est compris entre k et $k+dk$ est :

$$dN = g(k)dk = 4 \frac{L}{2\pi} dk = 2 \frac{L}{\pi} dk$$

Un premier facteur 2 tient compte du fait que les vecteurs d'onde dans les deux intervalles $[k, k+dk]$ et $[-k-dk, -k]$ ont le même module ; un second facteur 2 tient compte du spin.

En conclusion on a :

$$g(k) = 2 \frac{L}{\pi}$$

Partie 7.1

- 1) Si $V(x) = 0$, on obtient $\phi_k(x) = u_k \exp(ikx)$ où u_k ne dépend pas de x . La normalisation de ces états donne $u_k = \frac{1}{\sqrt{L}}$. L'énergie est donnée par :

$$E^0(k) = \frac{\hbar^2}{2m} k^2$$

- 2) Voir cours.

- 3) Nombre d'électrons $= N = \frac{L}{a} = \int_0^{k_F} g(k)dk = 2k_F \frac{L}{\pi}$

$$k_F = \pi/(2a) \quad \text{et} \quad E_F = \frac{\hbar^2}{2m} k_F^2$$

- 4) Pour obtenir la densité d'états en énergie, on effectue un changement de variable tels que :
 $g(k) dk = g(E) dE$

$$g(E) = \frac{L}{\pi} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{1/2} \frac{1}{\sqrt{E}}$$

Partie 7.2

1a) Pour déterminer les modifications à apporter à la courbe de l'énergie en fonction de k , il faut développer l'expression de $V(x)$ en ondes planes ($\exp(i g x)$; $g \in \text{R.R.}$) :

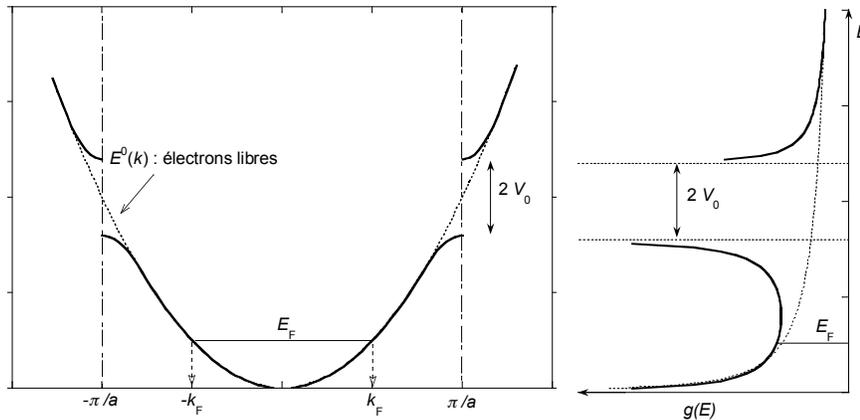
$$V(x) = -V_0 [\exp(i g_1 x) + \exp(-i g_1 x)]$$

Les vecteurs du R.R. concernés sont $g_1 = \pm \frac{2\pi}{a}$. D'après le cours, le calcul en perturbation montre qu'il apparaît une discontinuité de l'énergie quand k tend vers $g_1/2$, c'est-à-dire en bord de la première zone de Brillouin :

$$E(\pi/a -) = E^0(\pi/a) - V_0$$

$$E(\pi/a +) = E^0(\pi/a) + V_0$$

La bande d'énergie permise correspond à l'intervalle $[0 ; E(\pi/a -)]$.



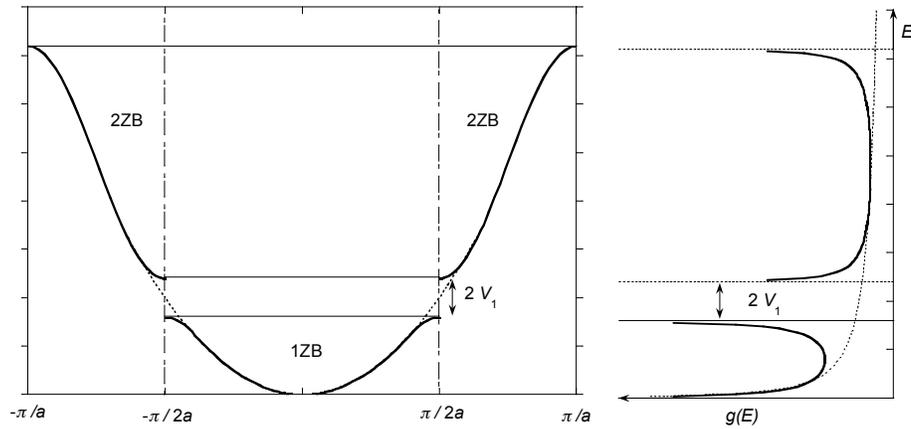
La première zone de Brillouin contient $(2\pi/a)/(2\pi/L) = N$ vecteurs d'onde admissibles, où N est le nombre de mailles. En tenant compte du spin, la 1ZB contient $2N$ états quantiques. En d'autres termes, la 1ZB peut contenir jusqu'à 2 électrons par maille. Comme dans une maille, un seul électron peut participer à la conduction, la bande permise est donc à moitié remplie. La chaîne est donc conductrice à 0 K. L'existence de ce potentiel périodique perturbe très peu les propriétés du système. En effet, le vecteur d'onde de Fermi k_F reste largement inférieur à $g_1/2 = \pi/a$.

1b) La nouvelle maille a pour longueur $b = 2a$. La nouvelle 1ZB correspond à

$$\left[-\frac{\pi}{b}; \frac{\pi}{b} \right] = \left[-\frac{\pi}{2a}; \frac{\pi}{2a} \right].$$

- 2) Les vecteurs du R.R. concernés par le développement du potentiel $V(x)$ sont $g_1 = \pm \frac{2\pi}{a}$ et $g_2 = \pm \frac{\pi}{a}$. Il y a de nouveau une ouverture en énergie au bord de la nouvelle 1ZB, c'est-à-dire en $g_2/2 = \pm \frac{\pi}{2a}$. Il y a toujours hiatus d'énergie (ouverture en énergie) en $g_1/2$, c'est à dire au bord de la nouvelle 2ZB.

Il existe donc une bande d'énergie interdite de largeur $2V_1$.



- 3) Une maille libre deux électrons, donc la première bande d'énergie est complètement remplie. On doit fournir une énergie minimale égale à $2V_1$ pour qu'un électron puisse occuper un niveau d'énergie de la deuxième bande. La chaîne est isolante à 0 K.

D'une façon générale quand une maille contient un nombre pair d'électrons, la dernière bande est toujours occupée : la chaîne est isolante. Ceci n'est plus vrai en 2D ou 3D car il peut y avoir recouvrement de bandes et le système peut se comporter comme un conducteur.