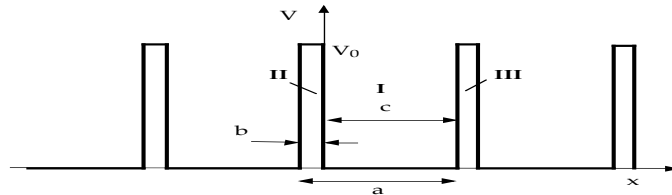


T.D. Physique du Solide Master 1

T.D. # 4

Modèle de Krönig - Penney

On se propose d'étudier le comportement d'un électron soumis au potentiel représenté ci-dessous



a- Donner les solutions de l'équation de Schrödinger dans les régions I et II (on note $\alpha^2 = 2mE/\hbar^2$ et $\beta^2 = 2m(E-V_0)/\hbar^2$). A l'aide du théorème de Bloch, exprimer la fonction d'onde dans la région III en fonction de celle dans la région II. Préciser les valeurs que peut prendre le vecteur d'onde k (on utilisera les conditions aux limites périodiques et on note L la longueur de la chaîne).

b- Appliquer les conditions aux limites en $x=0$ et $x=c$ et en déduire la relation de dispersion (sous la forme d'un déterminant).

Ce déterminant peut s'écrire: $\cos(ka) = \cos(\alpha c)\cos(\beta b) - \frac{\alpha^2 + \beta^2}{2\alpha\beta}\sin(\alpha c)\sin(\beta b)$

c- Que devient cette relation pour (i) $V_0 \rightarrow 0$ et (ii) $E \ll V_0$ et $qb \ll 1$ ($\beta = iq$). Tracer l'allure du membre de droite en fonction de αc . En déduire l'existence de bandes permises et interdites. Les schémas ci-dessous représentent l'évolution des relations de dispersion pour V_0 croissant (10, 100, et 1000eV, $a=5\text{\AA}$, $b=0.1\text{\AA}$): commenter cette évolution. Par approches successives retrouver la largeur de la première bande interdite pour $V_0 = 100\text{eV}$

