T.D. Physique du Solide
Master 1

T.D. # 6

Instabilité de Peierls

L'objet de ce TD est de montrer qu'un conducteur unidimensionnel est instable vis-à-vis d'une déformation du réseau atomique où les atomes se rapprochent pour former des paires. Cette instabilité se traduit alors par une transition métal-isolant.

1- On considère une chaîne de N atomes monovalents espacés régulièrement de a. On utilise le modèle des liaisons fortes pour lequel la relation de dispersion est donnée par (en ajustant l'origine des énergies à l'état k=0) : $E(k) = 2\gamma(1-\cos(ka))$. Déterminer la densité d'états g(E) en fonction de N et γ. Représenter graphiquement E(k) et g(E). Donner la valeur de l'énergie de Fermi E_F et de l'énergie moyenne par électron.

2- On envisage une déformation statique où les atomes sont alternativement déplacés de +U et -U. En considérant que les atomes sont couplés harmoniquement par une force élastique de constante β, calculer l'énergie de déformation statique de la chaîne :

$$E_p = \frac{\beta}{2}\sum_{i=1}^{N}(u_i - u_{i+1})^2 \quad \text{en fonction de N, U et } \beta.$$

3- On note "a" les atomes ayant subit un déplacement +U et "b" ceux ayant subit un déplacement
-U. La nouvelle périodicité de la chaîne est alors 2a (avec deux atomes par motif). Soit H est l'Hamiltonien de l'électron. On se propose de chercher les solutions du problème de la chaîne déformée sous la forme : $\Psi^k = A.\Psi^k_a+B.\Psi^k_b$ avec $<\Psi^k_a/\Psi^k_a> = <\Psi^k_b/\Psi^k_b> = 1/2$. On note $E_0/2 = <\Psi^k_a/H/\Psi^k_a> = <\Psi^k_b/H/\Psi^k_b>$ et on peut alors montrer que : $<\Psi^k_a/H/\Psi^k_b> = 1/2(\gamma_1+\gamma_2e^{-2ika})$ avec $E_0 = \gamma_1 + \gamma_2 \sim 2\gamma$.

Ecrire l'équation aux valeurs propres et calculer les deux valeurs propres $E^+(k)$ et $E^-(k)$. Représenter $E^+(k)$ et $E^-(k)$ dans la nouvelle zone de Brillouin et calculer la largeur de la bande interdite en fonction de γ_1 et γ_2. Calculer l'énergie électronique moyenne à partir de l'intégrale

$$\int_0^{\pi/2}\sqrt{1-(1-\eta^2)\sin^2(x)}\,dx \approx 1 + \frac{\eta^2}{2}\ln\left(\frac{2.43}{\eta}\right)$$

4- On suppose que $\gamma_1\gamma_2 / \gamma^2 \sim 1 - \alpha^2U^2$. Montrer que cette déformation est énergétiquement stable pour les faibles valeurs de U. Déterminer la valeur optimale de U.