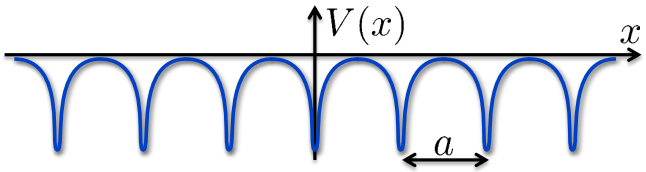
PC3 : Modèle de l'électron presque libre

On s'intéresse dans cet exercice à un modèle de cristal unidimensionnel comme celui vu lors du deuxième amphi. On écrit l'hamiltonien sous la forme

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m_e} + V(\hat{x})$$

où $V(x)$ est un potentiel périodique de période a.



Dans le cadre du modèle dit de l'électron *presque libre*, on suppose en outre que l'amplitude du potentiel périodique est suffisamment faible pour qu'on puisse considérer $\hat{V}$ comme une perturbation par rapport à l'hamiltonien $\hat{H}_0 = \hat{p}_x^2/(2m_e)$.

1. Cas de l'électron libre ($V = 0$)

(a) Rappeler, dans le cas où $V = 0$, l'expression des fonctions propres $\phi_q(x)$ – sans chercher à les normaliser – et des valeurs propres $E_0(q)$ en fonction du vecteur d'onde q.

(b) Afin de pouvoir normaliser les fonctions propres obtenues ci-dessus, on se limite au cas d'un cristal de longueur finie $L = Na$, où $N \gg 1$, et on utilisera les conditions aux limites périodiques (voir section 4.4 du livre) pour éviter les effets de bord. Ceci revient à supposer que les fonctions d'onde sont définies pour toute valeur de $x \in \mathbb{R}$ avec la condition $\psi(x + L) = \psi(x)$. Le produit scalaire hermitien entre deux états $|\psi_1\rangle$ et $\psi_2\rangle$ sera alors simplement défini par

$$\langle\psi_1|\psi_2\rangle = \int_{-L/2}^{L/2} \psi_1^*(x)\psi_2(x)dx$$

En déduire les valeurs permises pour q et l'expression correctement normalisée des fonctions propres $\phi_q(x)$.

(c) Vérifier explicitement que les états $|q\rangle$ (associés aux fonctions d'onde $\phi_q(x)$) sont orthonormés.

2. Approche qualitative. On considère une onde plane $\phi_q(x)$ se propageant dans le cristal. On décrit ici le rôle du potentiel atomique en supposant que chaque atome du cristal réfléchit partiellement l'onde incidente $\phi_q(x)$.

(a) Quel est le déphasage δ entre les ondes réfléchies par deux atomes consécutifs ?

(b) En déduire dans quelle situation le potentiel atomique va significativement modifier la fonction d'onde du système.

3. Éléments de matrice de $\hat{V}$. On rappelle qu'une fonction périodique comme $V(x)$ peut s'écrire sous la forme d'une série de Fourier

$$V(x) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} V_n \exp\left(i2\pi n\frac{x}{a}\right) \qquad \text{avec} \qquad V_n = \frac{1}{L}\int_{-L/2}^{L+2} V(x)\exp\left(-i2\pi n\frac{x}{a}\right)dx.$$

$V(x)$ étant une fonction réelle, on aura en outre $V_{-n} = V_n^*$.

(a) Exprimer l'élément de matrice $\langle q|\hat{V}|q'\rangle$ à l'aide des coefficients de Fourier V_n.

(b) Montrer que l'élément de matrice $\langle q|\hat{V}|q'\rangle$ est non nul seulement lorsqu'il existe une relation bien précise entre q et q'. Calculer le résultat obtenu dans ce cas.

4. Application de la méthode des perturbations

(a) Quelle est la dégénérescence du niveau d'énergie $E_0(q)$?

(b) Ecrire la matrice de la perturbation $\hat{V}$ restreinte à l'espace propre associé au niveau $E_0(q)$. Que dire des éléments non diagonaux ?

(c) Appliquer la méthode des perturbations au premier ordre

(d) Retrouve-t-on le résultat qualitatif obtenu à la question 2 ?

(e) Le résultat obtenu est-il physiquement acceptable ?

5. Prise en compte des niveaux quasi-dégénérés

(a) Pour une valeur donnée de q, montrer que l'hamiltonien $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$ laisse stable l'espace propre engendré par les états du type $\{|q + n2\pi/a\rangle, n \in \mathbb{Z}\}$.

(b) Pour q positif voisin de $n\pi/a$, montrer qu'il est légitime de se contenter de diagonaliser la restriction de l'hamiltonien à l'espace de dimension deux engendré par $|q\rangle$ et $|q - 2n\pi/a\rangle$.

(c) En déduire l'expression de $E(q)$ pour q voisin de $n\pi/a$.

(d) Représenter la fonction $E(q)$ pour l'ensemble des valeurs de q.

6. Théorème de Bloch

(a) Les résultats obtenus ci-dessus sont-ils conformes au théorème de Bloch ?

(b) Représenter les bandes d'énergies obtenues plus haut en fonction d'un vecteur d'onde $k \in [-\pi/a, \pi/a[$.