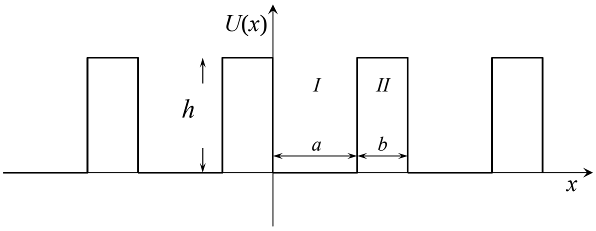
MASTER 1ère année – Physique de la matière condensée 2008/2009

TD 2 – Approximation des liaisons fortes

1. Application au potentiel de Kronig-Penney et généralisation au cas bidimensionnel



On étudie la relation de dispersion associée au potentiel périodique unidimensionnel, $U(x)$, du TD1 (potentiel de Kronig-Penney : voir figure ci-contre) en utilisant l'approximation des liaisons fortes. Comme base de fonctions, on choisira $\varphi_0(x) = A \exp(-|x| / a_0)$.

a. Discuter sous quelle condition le choix ci-dessus de $\varphi_0(x)$ est légitime. Quelle autre fonction pourrait-on adopter ?

b. Déterminer le coefficient de normalisation, A, pour φ_0.

c. Calculer le produit scalaire $\alpha \equiv < \varphi_0 \mid \varphi_1 >$, où $\varphi_1(x) = \varphi_0(x\text{-}L)$ et L est la période du potentiel. Discuter quelle condition doit remplir L par rapport à a_0 pour que $\alpha << 1$.

d. Pour un réseau unidimensionnel de N atomes, écrire explicitement la fonction de Bloch normalisée, formée par les fonctions φ_n, pour $\alpha << 1$.

e. Calculer explicitement le coefficient $\beta \equiv < \varphi_0 \mid U_0 \mid \varphi_1 >$ de la relation de dispersion ε_k illustrée au cours en fonction des paramètres h, a, b et a_0. Pour $kL << 1$ comparer la relation ε_k ainsi obtenue à celle de l'électron libre. Application numérique : dessiner le graphe de ε_k pour $h = 10$ eV, $a = 2a_0$, $b = 3a_0$ et $a_0 = 0.5$ Å.

f. Généraliser le résultat obtenu au cours pour la relation ε_k en 1D au cas d'un réseau carré en 2D. Discuter le résultat à l'aide d'un dessin des surfaces isoénergetiques en fonction de k_x et k_y.