

République Algérienne Démocratique et Populaire  
Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique

UNIVERSITÉ CHADLI BENDJEDID - EL TARF



جامعة الشاذلي بن جديد - الطارف

FACULTÉ DES SCIENCES ET DE LA TECHNOLOGIE  
DÉPARTEMENT DE PHYSIQUE

# MÉMOIRE DE MASTER

DOMAINE : SCIENCE DE LA MATIÈRE

FILIÈRE : Physique

OPTION : Physique des Matériaux

## Thème

*Résolution de l'équation de Schrödinger avec le potentiel de  
Kronig\_Penney et le potentiel double delta de Dirac*

Présenté par :  
Souam Sara

Dirigé par :  
Dr. Foughali Toufik

### Jury de soutenance :

Dr. HAMDI Saleh	Président	MCA	Université - El Tarf
Dr. FOUGHALI Toufik	Rapporteur	Professeure	Université -El Tarf
Dr. BENAÏSSA Sihem	Examineur	MCB	Université -El Tarf

Année Universitaire : 2021/2022

## DEDICACES



*Je remercie le Dieu pour m'avoir donné la force d'accomplir ce travail pour aller plus loin In Chää Allah.*

*Je dédie ce travail à mes parents, ma mère pour ses encouragements et ses prières tout au long de mes études, mon père pour tout ce qu'il a fait pour que je puisse avoir ce résultat.*

*Je le dédie à mes frères et sœurs.*

*A tous mes amis sans citer les noms.*

**SARA**



# Remerciements

*Je remercie Dieu tout puissant de m'avoir donné le courage, la sante, la patience jusqu' à l'achèvement de ce mémoire*

*Je tiens, avant tout, à exprimer ma profonde gratitude à Monsieur Foughali Toufik, mon promoteur. Je le remercie pour sa gentillesse et sa disponibilité, j'ai eu le grand plaisir de travailler sous sa direction.*

*Mes remerciements à tous les membres de jury qui ont accepté de juger ce travail et d'y apporter leurs cautions.*

*Mes remerciements vont aussi à tous ceux qui ont contribué de près ou de loin à la concrétisation de ce travail pour leurs conseils, leurs encouragements et leurs soutiens.*

*Enfin, je tiens à exprimer ma profonde gratitude à ma famille qui j'ai toujours soutenues et à tout ce qui participe de réaliser ce mémoire.*

*Ainsi que l'ensemble des enseignants qui ont contribué à ma formation. Je voudrais également remercier tous les travailleurs de la bibliothèque et tous les travailleurs de l'université.*

**SARA**

## *Résumé*

L'objectif de ce travail consiste à résoudre l'équation de Schrödinger dans le cadre du modèle de Kronig-Penney et du modèle du potentiel double delta de Dirac pour, afin de trouver la structure des bandes d'énergie et d'examiner les propriétés de transport d'un superréseau, ou dans un cristal avec un potentiel périodique. Malgré que ces modèles sont des modèles très simplifiés des modèles réaliste, la structure de bande électronique obtenue à partir de ce modèle partage de nombreuses caractéristiques avec les structures de bande qui résultent de modèles plus sophistiqués.

**Mots clés :** Modèle de Kronig-Penney ; double potentiel  $\delta$  de Dirac, l'équation de Schrödinger, théorème de Bloch , superréseau .

*Abstract*

The objective of this work is to solve the Schrödinger equation within the framework of the Kronig-Penney model and the Dirac double-delta potential model for, in order to find the structure of the energy bands and to examine the properties transport of a superlattice, or in a crystal with a periodic potential. Although these models are very simplified models of realistic models, the electronic band structure obtained from this model shares many characteristics with the band structures that result from more sophisticated models.

**Key words:** Kronig-Penney Model , Double Dirac  $\delta$ -Potential, Bloch Theorem ,superlattice

## ملخص

الهدف من هذا العمل هو حل معادلة شرودنجر في إطار نموذج كرونينغ بيني ونموذج ديراك مزدوج دلتا المحتملة من أجل إيجاد بنية نطاقات الطاقة وفحص خصائص نقل الشبكة الفائقة ، أو في بلورة ذات احتمالية دورية. على الرغم من أن هذه النماذج عبارة عن نماذج مبسطة جدًا لنماذج واقعية ، إلا أن بنية النطاق الإلكتروني التي تم الحصول عليها من هذا النموذج تشترك في العديد من الخصائص مع هياكل النطاق التي تنتج عن نماذج أكثر تعقيدًا.

**الكلمات المفتاحية:** نموذج كرونينغ بيني , نموذج ديراك مزدوج دلتا المحتملة , الشبكة الفائقة , نظرية بلوخ

# ***SOMMAIRE***

<b>Remerciement</b>	<b>I</b>
<b>Dédicace</b>	<b>II</b>
<b>Résumé</b>	<b>III</b>
<b>Abstract</b>	<b>IV</b>
<b>ملخص</b>	<b>V</b>
<b>Table des matières</b>	<b>VI</b>
<b>Liste des figures</b>	<b>IX</b>

## **INTRODUCTION GENERALE**

### **CHAPITRE I : Le modele de Kronig-Penny**

<b>I.1</b> Présentation du modèle	<b>05</b>
<b>I.1.1</b> Superréseau	<b>05</b>
<b>I.1.2</b> Caractéristiques générales des superréseaux	<b>06</b>
<b>I.1.3.</b> Classification des superréseaux	<b>06</b>
<b>I.2.</b> Théorème de Bloch	<b>07</b>
<b>I.2.1</b> Conséquence du théorème de Bloch	<b>09</b>
<b>I.2.2.</b> Réseau direct et réseau réciproque	<b>10</b>
<b>I.2.3.</b> Zones de Brillouin	<b>10</b>
<b>I.2.4.</b> Zone de Brillouin irréductible	<b>11</b>
<b>I.3.</b> Formation des bandes d'énergie	<b>12</b>
<b>I.4.</b> Diagramme de bandes	<b>15</b>
<b>I-5</b> Formulation et solution du modèle de kronig-penney	<b>18</b>
<b>I.6</b> Structure de bande	<b>22</b>

### **CHAPITRE II: Le double potentiel $\delta$ de Dirac**

<b>II.1.</b> Introduction	<b>25</b>
<b>II.2</b> Double puits de potentiel de Dirac	<b>26</b>
<b>II.3.</b> Solution paire du double puits de potentiel de Dirac $\delta$	<b>27</b>
<b>II.4.</b> Solution impaire du double puits de potentiel de Dirac	<b>33</b>
<b>II.5.</b> États de diffusion du double puits de Dirac –Potentiel	<b>38</b>
<b>CONCLUSION GENERALE</b>	<b>43</b>
<b>REFIRENCE</b>	<b>45</b>
<b>ANNEXES</b>	<b>47</b>

## **LISTE DES FIGURES**

<i>Figure</i>	<i>Titre</i>	<i>Page</i>
<b>Chapitre I</b>		
<b>Figure. I.1</b>	Le super-réseau GaAs/AlAs et le profil du bas de la bande de conduction et du haut de la bande de valence perpendiculaires aux couches du super-réseau. (Eg1, Eg2) sont les bandes interdites de différents semi-conducteurs.	<b>06</b>
<b>Figure.I.2</b>	F. Bloch .	<b>07</b>
<b>Figure.I.3</b>	Tracé d'une fonction d'onde périodique : $\psi(x + a) = \psi(x)$ .	<b>08</b>
<b>Figure I.4</b>	Le potentiel périodique ressenti par un électron dans un réseau unidimensionnel d'atome (ligne mauve) et la schématisation avec des puits de potentiel carrés (ligne bleue).	<b>09</b>
<b>Figure I.5</b>	Première zone de Brillouin (ZN) d'un réseau carré. Les plans des Bragg sont tracés avec différents des couleurs.	<b>11</b>
<b>Figure I-6 :</b>	réseau réel, de la première zone de Brillouin et zone de Brillouin irréductible pour les réseaux 2D (a) carrés et (b) triangulaire .	<b>12</b>
<b>Figure I-7</b>	: un atome isolé d'hydrogène	<b>12</b>
<b>Figure I-8:</b>	deux 2 atomes d'hydrogène adjacents	<b>13</b>
<b>Figure I-9</b>	: Modèle qualitatif pour le Silicium	<b>13</b>
<b>Figure I-10</b>	: La Structure électronique du Silicium	<b>14</b>
<b>Figure I-11</b>	:La largeur de la bande interdite dépend (entre autre) de la distance inter-atomique $a_0$	<b>14</b>
<b>Figure I- 12:</b>	Structure de bande d'un réseau carré bidimensionnel de tiges cylindriques diélectriques ( $\epsilon=8.9$ ); modes TM et TE .	<b>17</b>
<b>Figure I- 13</b>	: Structure de bande d'un réseau diamant de sphères d'air dans un diélectrique à haute permittivité ( $\epsilon =13$ ).	<b>17</b>
<b>Figure I-14:</b>	Potentiel électrique dans un cristal unidimensionnel.	<b>18</b>
<b>Figure I-15</b>	: potentiel périodique de Kronig-Penney.	<b>19</b>

<b>Figure I-16 :</b>	Solution graphique du problème du modèle de Kronig-Penney. $f(\alpha a)$ est tracé en fonction de $(\alpha a)$	<b>22</b>
<b>Figure I-17</b>	: diagramme de dispersion	<b>23</b>
<b>Chapitre II</b>		
<b>Figure II.1</b>	les bandes permises et bandes interdites	<b>25</b>
<b>Figure II.2</b>	Un double puits de potentiel de Dirac $\delta$ .	<b>26</b>
<b>Figure. II.3</b>	Un double puits de potentiel de Dirac $\delta$ ( $E < 0$ ).	<b>27</b>
<b>Figure II.4</b>	: Tracé de $y - 1$ et $e^{-y}$ en fonction de $y$ sur le même cadre pour trouver la solution de l'équation $y - 1 = e^{-y}$	<b>31</b>
<b>Figure II.5</b>	Le tracé de la ligne droite $\frac{1}{2}y - 1$ et de la courbe $e^{-y}$ avec leur intersection.	<b>32</b>
<b>Figure II-6</b>	Le tracé de $2y - 1$ et $e^{-y}$ et leur intersection.	<b>33</b>
<b>Figure II-7</b>	Le tracé de $1 - \frac{1}{2}y$ et la courbe $e^{-y}$ et leur intersection en deux points.	<b>36</b>
<b>Figure II-8</b>	État propre symétrique typique d'un électron dans un double puits de potentiel $\delta$	<b>37</b>
<b>Figure II-9</b>	État propre antisymétrique typique d'un électron dans un double $\delta$ - potentiel.	<b>37</b>

# Erwin Schrödinger

Erwin Schrödinger, est né à Erdberg de Vienne, Autriche, le 12 Août 1887, était un physicien austro-irlandais lauréat du prix Nobel et avait développé un certain nombre de découvertes fondamentales en théorie quantique : L'équation de Schrödinger fournit des informations sur le système et décrit l'évolution du système au cours du temps.



En outre, il a été l'auteur de nombreux ouvrages sur divers aspects de la physique : mécanique statistique et thermodynamique, physique diélectrique, théorie des couleurs, électrodynamique, relativité générale et cosmologie, et il est également connu pour son expérience de pensée au « chat de Schrödinger ».

Le 4 janvier 1961, Schrödinger mourut de la tuberculose à l'âge de 73 ans à Vienne

# *Introduction Générale*

### **Introduction général :**

Puisque la physique classique est totalement inadéquate pour les phénomènes observés à l'échelle atomique, il est nécessaire d'élaborer un nouveau cadre conceptuel de la physique. Cette nouvelle théorie de l'univers physique est conventionnellement appelée « mécanique quantique ». Dans ses grandes lignes elle a été conçue entre 1925 et 1930 et elle est l'œuvre principalement de N.Bohr ,W .Heisenberg, E. Schrödinger et P . A.M. Dirac[1].

En mécanique quantique les phénomènes physiques sont décrits par la fonction d'onde, qui contient toutes les informations sur l'état du système et son comportement suit l'équation de Schrödinger. L'équation de Schrödinger est l'équation fondamentale de la mécanique quantique non relativiste. Elle joue en mécanique quantique le même rôle fondateur que l'équation de Newton en mécanique classique ou les équations de Maxwell en électromagnétisme. Elle décrit l'évolution temporelle de l'état d'un objet quantique représenté par une fonction d'onde. La mécanique quantique est basée sur la résolution de l'équation de Schrödinger, qui est une équation différentielle de second degré par rapport à la position et de premier degré par rapport au temps.

Les tentatives de résolution de l'équation de Schrödinger pour un réseau régulier de puits de potentiel datent des premiers jours de la mécanique quantique. En 1928, Bloch [1] a montré que les fonctions propres d'un réseau périodique infini sont de la forme d'ondes planes modulées par une fonction qui a la même périodicité que le réseau. Il a suggéré dans ses travaux qu'il y avait des niveaux d'énergie pour lesquels aucun état physique existe (les gaps d'énergie) et des bandes quasi-continues de niveaux d'énergie. La même conclusion a été atteinte de manière indépendante en utilisant l'approximation des liaisons fortes, dans laquelle les niveaux d'énergie discrets d'un électron dans un seul puits sont "éclatés" en bandes quasicontinues, et cela par la présence de puits voisins.

En 1930, Kronig et Penney[2] ont publié leur solution pour un réseau infini composé de puits de potentiel carrés équidistants. Un élément clé de leur analyse était que les solutions devaient être des ondes de Bloch, une hypothèse valable uniquement pour un réseau strictement infini. Ils ont donc invoqué les conditions aux limites périodiques, plutôt que d'exiger que la fonction d'onde doit être nulle (plutôt tendre

vers zéro) aux extrémités du réseau. Leur résultat a donné une relation entre le vecteur d'onde de Bloch et l'énergie de l'état sous la forme d'une équation transcendante impliquant les paramètres du réseau. Encore une fois, ils ont prédit des bandes d'énergie et les écarts entre elles, et ils ont fourni un moyen général pour calculer les limites entre les deux.

Le modèle de Kronig-Penny (KP) est un modèle à un seul électron. L'électron se déplace dans une dimension dans un cristal unidimensionnel de longueur  $L$ . Le potentiel périodique que les électrons subissent dans le réseau du cristal est approximé par une fonction périodique. Le modèle KP est un modèle quantique unidimensionnel fortement simplifié d'un cristal. Ce modèle a une solution analytique et permet donc des calculs simples. Cependant, les modèles réalistes nécessitent toujours des calculs numériques approfondis. Malgré les simplifications, la structure de bande électronique obtenue à partir de ce modèle partage de nombreuses caractéristiques avec les structures de bande qui résultent de modèles plus sophistiqués.

Le modèle de Kronig-Penny-Dirac est un cas particulier du modèle de Kronig-Penny, obtenu en prenant la limite quand l'épaisseur de l'un des deux semi-conducteur dans un super réseau tend vers 0 et le potentiel  $V_0$  tend vers l'infini, mais l'énergie potentielle  $U_0$  reste finie. Dans cette limite, chaque barrière rectangulaire devient une fonction  $\delta$  de Dirac.

Le but de ce mémoire est la résolution de l'équation de Schrödinger avec le potentiel de Kronig-Penny et le potentiel double delta de Dirac.

Le travail présenté dans ce mémoire est organisé comme suit :

- Le premier chapitre est consacré à la présentation du modèle de Kronig-Penny et du théorème de Bloch, réseau direct et réseau réciproque, formation des bandes d'énergie, diagramme de bandes, la formulation et la solution du modèle de Kronig-Penny, et la structure des bandes d'énergie.
- Dans le deuxième chapitre on présente les solutions paire et impaire de l'équation de Schrödinger avec le double puits de potentiel de Dirac, et on analyse l'état de diffusion dans ce dernier.
- On donne, dans l'annexe, un aperçu sur la théorie des bandes.

Enfin, notre travail est achevé par une conclusion générale.

# *Chapitre I*

## *Le modèle de kroning-penney*

## **I.1 Présentation du modèle :**

Le modèle Kronig-Penney est un modèle unique qui présente de nombreuses caractéristiques fondamentales de la structure électronique des cristaux réels, généralement considéré comme un modèle idéalisé et unidimensionnel d'un cristal. Il fait partie des modèles les plus simples possibles pour décrire les électrons dans un réseau périodique. Il a été prouvé qu'une bande interdite et donc des bandes d'énergie peuvent être obtenues pour un potentiel périodique unidimensionnel. Les mathématiques sont un peu complexes, mais ce modèle nous permettra de discuter qualitativement de plusieurs concepts importants. L'énergie potentielle considérée est  $V(x)$  d'un électron avec une séquence infinie de puits de potentiel de profondeur  $-V_0$  et de largeur  $a$ , disposés avec un espacement régulier. De plus, il est plus intéressant de résoudre l'équation de Schrödinger indépendante du temps. La structure de bande et donc les énergies permises et interdites pour un potentiel périodique peuvent être facilement obtenues et calculées, respectivement. Alors que ce modèle est une simplification excessive du potentiel 3D et de la structure de bande, il est également étendu pour inclure les effets des atomes d'impuretés. Le modèle Kronig-Penney est étroitement lié à la théorie des superréseaux de la physique des matériaux.

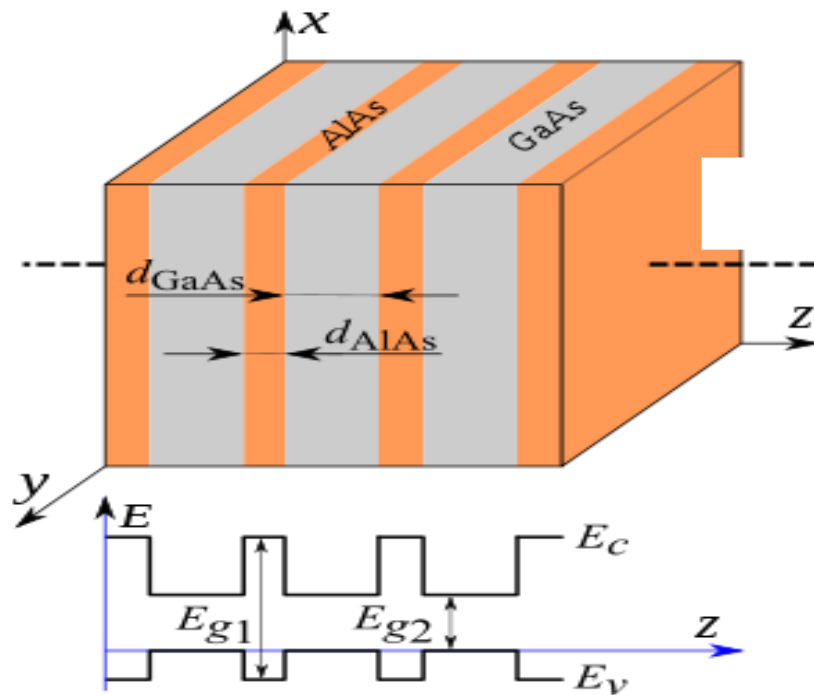
### **I.1.1 Superréseau :**

Un super réseau est une structure de couches périodiquement alternées de deux matériaux ou plus. L'épaisseur de chaque couche est généralement de l'ordre de quelques nanomètres. Au début du XXe siècle, le phénomène des super-réseaux a été découvert par diffraction des rayons X.

En 1970, EzakiReyuna et Zhu Zhaoxiang ont proposé le concept de superréseau en 1970. Ils ont envisagé que si des structures périodiques étaient développées en alternance avec deux matériaux semi-conducteurs bien adaptés au réseau, chacun d'une épaisseur inférieure à 100 nm. Les matériaux superréseaux sont des films multicouches dans lesquels deux composants différents croissent alternativement en couches minces de quelques nanomètres à dizaines de nanomètres et conservent une périodicité stricte, ce sont en fait des matériaux composites fins stratifiés sous une forme spécifique. Cela conduit à la modulation du potentiel périodique du réseau cristallin d'un solide.

### I.1.2 Caractéristiques générales des superréseaux

Les super-réseaux peuvent être fabriqués de différentes manières, mais les plus couramment utilisées sont **l'épitaxie par faisceau moléculaire** (L'épitaxie par jets moléculaires est une technique consistant à envoyer un ou plusieurs jets moléculaires vers un substrat préalablement choisi pour réaliser une croissance épitaxiale) et la **pulvérisation**. De cette manière, l'épaisseur du superréseau en plusieurs couches atomiques est atteinte. Par exemple : structure de superréseau typique sous la forme de  $[\text{Fe}_{20} \text{V}_{30}]_{20}$ , qui est essentiellement binaire avec 20 Å de fer (Fe) puis 30 Å de vanadium (V), se répétant 20 fois le long de l'axe du superréseau, épaisseur totale 1000 Å ou 100 nm. La qualité structurale du superréseau est testée en pratique par diffraction des rayons X, qui produit une structure résonnante de maxima. Selon la nature des composants, les superréseaux peuvent être appelés magnétiques, optiques ou semi-conducteurs.



**Figure I-1 :** Le super-réseau GaAs/AlAs et le profil du bas de la bande de conduction et du haut de la bande de valence perpendiculaires aux couches du super-réseau. ( $E_{g1}$ ,  $E_{g2}$ ) sont les bandes interdites de différents semi-conducteurs.

### I.1.3 Classification des superréseaux :

Les superréseaux sont divisés dans les catégories suivantes :

1. Superréseau compositionnel : Si une unité répétitive d'un matériau de super-réseau est composée de couches minces de deux matériaux différents, on l'appelle un superréseau compositionnel.
2. Superréseau de dopage : un nouveau type de matériau semi-conducteur à structure périodique artificielle obtenu en changeant alternativement le type de dopage dans le même semi-conducteur.
3. Superréseau multidimensionnel : Un superréseau dans lequel deux ou plusieurs matériaux forment une structure alternée périodique dans plusieurs dimensions est appelé un superréseau multidimensionnel. Les superréseaux multidimensionnels peuvent être développés par une combinaison de techniques de photolithographie, de gravure et de croissance de couche ultra-mince.

Avant d'analyser le modèle de Kronig-Penny, il est nécessaire de rappeler quelques notions de la physique des solides et de la mécanique quantique.

### **I.2. Théorème de Bloch :**



**Figure I-2 :F. Bloch**

Les ondes de Bloch sont les fonctions d'ondes décrivant les états quantiques des électrons soumis à un potentiel périodique. C'est notamment le cas du cristal parfait infini. Les électrons sont soumis à un potentiel périodique ayant la symétrie de translation des atomes constituant le cristal. [2]

Considérons une particule de masse  $m$  dans un potentiel unidimensionnel, supposons que le potentiel  $V(x)$  soit périodique, avec une période  $a$  : [3]

$$V(x + a) = V(x) \quad (\text{I-1})$$

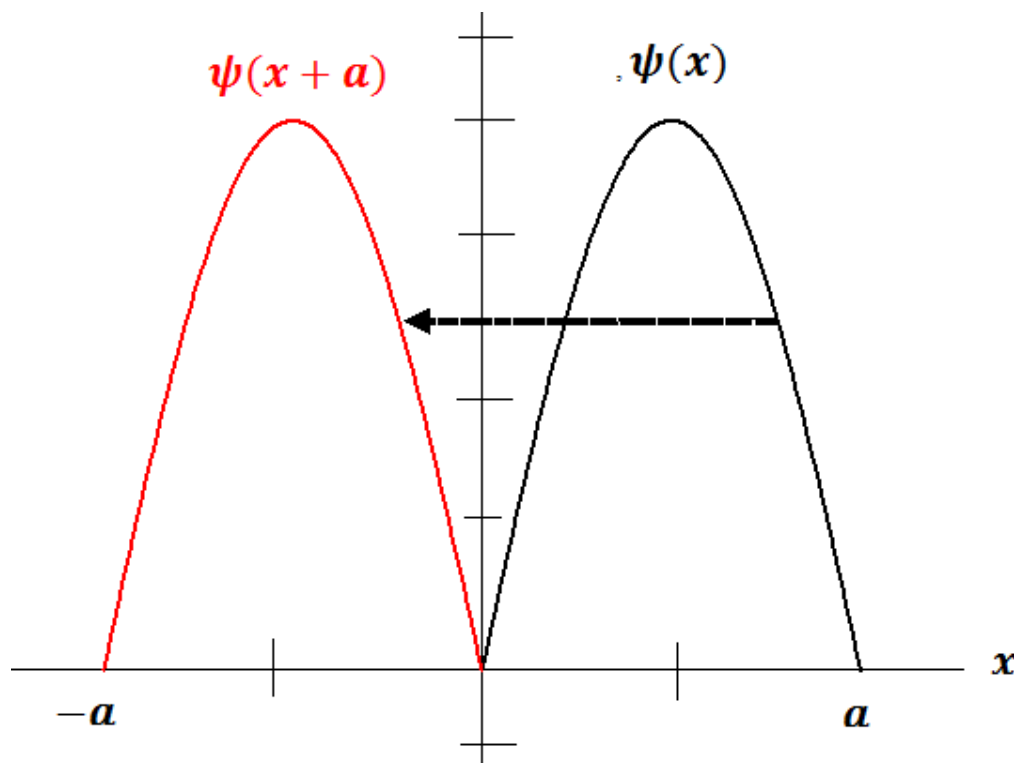
En termes plus formelles, on dit que le potentiel, et donc l'hamiltonien, sont invariants par translation de  $a$ . Quelles sont les conséquences de cette symétrie pour la fonction d'onde ?

Puisque l'hamiltonien ne change pas (est symétrique) par rapport à une translation de  $a$ , la densité de probabilité doit jouir de la même symétrie :

$$|\psi(x + a)|^2 = |\psi(x)|^2 \quad (\text{I-2})$$

Cela implique que la fonction d'onde ne peut changer que par un facteur de phase. On écrira cette phase comme le produit du pas  $a$  et d'un paramètre arbitraire  $k$  :

$$\psi(x + a) = e^{ika}\psi(x) \quad (\text{I-3})$$



**Figure I-3:** Tracé d'une fonction d'onde périodique :  $\psi(x + a) = \psi(x)$

Puisque  $\psi(x)$  et  $\psi(x + a)$  satisfont la même équation de Schrödinger, les nouvelles formes avec  $\psi(x)$  et  $\psi(x + a)$  sont identiques (Fig.I-3). Par conséquent, pour toute observable telle que la densité de probabilité associée à  $\psi(x)$ , doit également incarner cette invariance. Explicitement,  $\psi(x + a)$  peut s'écrire comme suit :

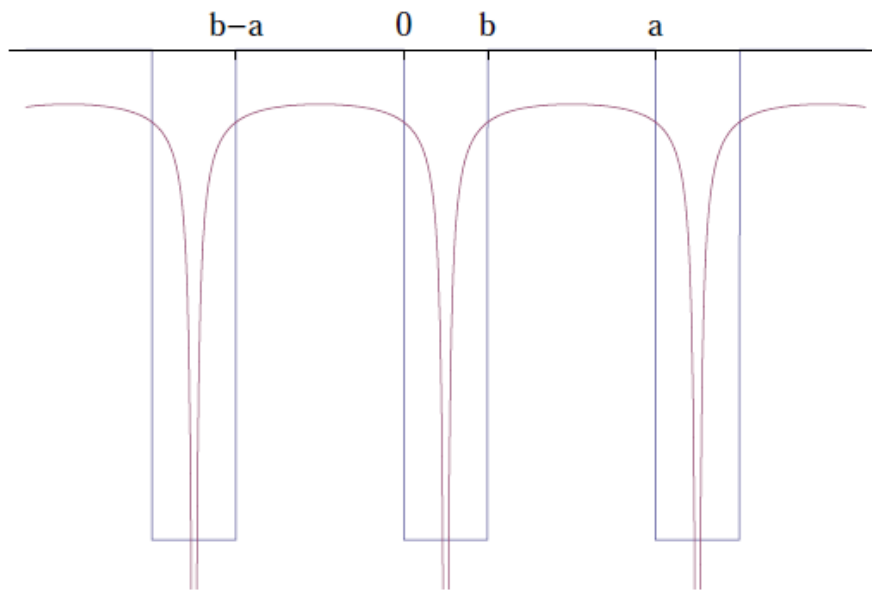
$$\psi(x + na) = e^{iu(a)}\psi(x), \quad (\text{I-4})$$

ou  $u(a)$  est une phase  $a$ -dépendante.

Cela signifie que  $\psi(x)$  et  $\psi(x + a)$  ne diffèrent que par une phase pure. Il est intéressant de noter que la forme fonctionnelle de  $u$  peut être déterminée si l'on prend en compte les éléments suivants que la densité de probabilité ne sera pas affectée par un nombre  $n$  de translations par  $a$ , c'est-à-dire :

$$|\psi(x + na)|^2 = |\psi(x)|^2 \quad (\text{I-5})$$

L'état de  $\psi(x + na)$  peut être évalué de deux manières différentes, par une seule ( $na$ ) et par une séquence de  $n$  traductions individuelles (chacune par  $a$ ) comme indiqué par les expressions ci-dessous :



**Figure I-4:** Le potentiel périodique ressenti par un électron dans un réseau unidimensionnel d'atome (ligne mauve) et la schématisation avec des puits de potentiel carrés (ligne bleue).

### I.2.1 Conséquence du théorème de Bloch :

Le théorème de Bloch introduit un vecteur d'onde  $k$ . Il est nommé pseudo-moment de l'électron. Cette quantité remplace le moment  $p/\hbar$  de l'électron lorsqu'on passe du problème d'un électron se mouvant dans un milieu continu à celui d'un électron se mouvant dans un potentiel périodique. Ce pseudo-moment n'est pas proportionnel à  $p$ . [4]

En effet la dérivation  $\frac{\hbar}{i} \nabla$  introduit un terme supplémentaire  $e^{ikr} \frac{\hbar}{i} \nabla u_{k,n}(r)$ . Ainsi,  $\psi(k,r)$  n'est pas un état propre de l'opérateur quantité de mouvement. D'une façon plus générale, la non-conservation de la quantité de mouvement et le non pertinence de cette grandeur dans le cadre d'un potentiel périodique d'étendue spatiale infinie peut sembler surprenante [5].

### I.2.2. Réseau direct et réseau réciproque :

Le réseau cristallin (réseau direct) est déterminé par la cellule unitaire. La plus petite cellule unitaire est appelée primitive. Elle est sous-tendue par les trois vecteurs fondamentaux  $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$  de telle façon que chaque vecteur de transition du réseau peut être mis sous la forme d'une combinaison linéaire des vecteurs de base :

$$\vec{R} = n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2 + n_3 \vec{a}_3 \quad (\text{I-6})$$

Avec  $n_1, n_2, n_3$  : entiers.

Le réseau réciproque est un réseau de l'espace de Fourier lié au cristal dans lequel le vecteur  $\vec{G}$ , appelé vecteur du réseau réciproque, est un vecteur de translation par lequel l'ensemble du réseau réciproque est construit.  $\vec{G}$  est défini par :

$$\vec{G} = u_1 \vec{b}_1 + u_2 \vec{b}_2 + u_3 \vec{b}_3, \quad (\text{I-7})$$

ou  $u_1, u_2, u_3$  sont des entiers arbitraires et :

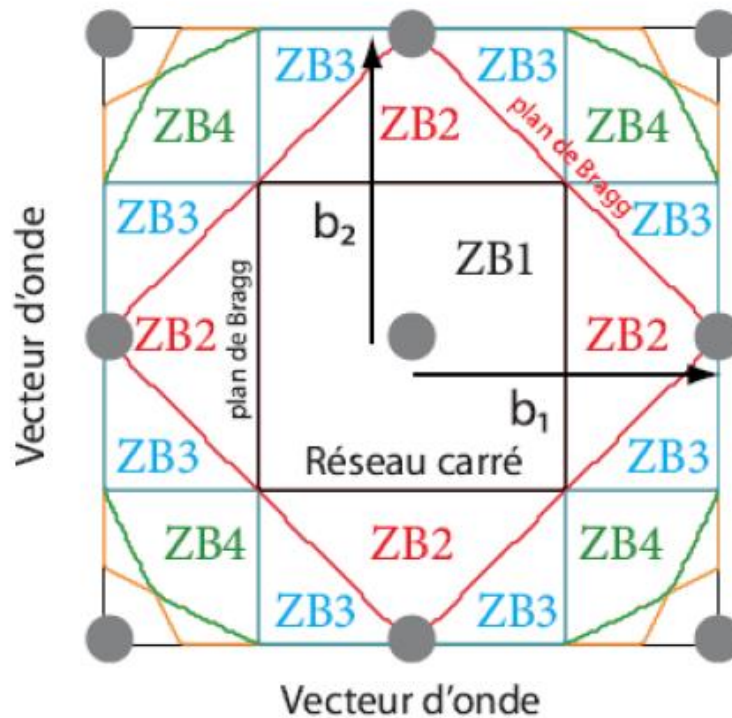
$$\vec{b}_1 = 2\pi \frac{\vec{a}_2 \times \vec{a}_3}{\vec{a}_1 \cdot \vec{a}_2 \times \vec{a}_3}, \quad \vec{b}_2 = 2\pi \frac{\vec{a}_1 \times \vec{a}_2}{\vec{a}_1 \cdot \vec{a}_2 \times \vec{a}_3}, \quad \vec{b}_3 = 2\pi \frac{\vec{a}_1 \times \vec{a}_3}{\vec{a}_1 \cdot \vec{a}_2 \times \vec{a}_3} \quad (\text{I-8})$$

Le réseau réciproque, et notamment la première zone de Brillouin, a une grande importance dans la propagation d'onde car les vecteurs d'onde sont toujours tracés dans l'espace de Fourier.

### I.2.3. Zones de Brillouin :

Les zones de Brillouin sont des régions qui partitionnent l'espace réciproque associé au cristal. Il en existe une infinité. Elles peuvent être définies à l'aide des plans de Bragg qui sont les plans médiateurs de l'ensemble des vecteurs formés par des combinaisons linéaires des vecteurs du réseau réciproque.

La définition de la nième zone de Brillouin est la suivante : ensemble des points pouvant être atteint depuis l'origine en croisant  $n - 1$  plans de Bragg (Figure I- 5)



**Figure I-5:** première zone de Brillouin (ZN) d'un réseau carré.  
Les plans des Bragg sont trace avec différent des couleurs.

#### I.2.4 Zone de Brillouin irréductible :

On appelle « zone de Brillouin irréductible » la plus petite surface qui permet de déduire la relation de dispersion dans tout l'espace réciproque. Elle correspond à la plus petite surface qui peut être utilisée pour reconstruire la première zone de Brillouin (ZB) en utilisant les symétries du réseau réciproque. Pour construire cette zone, nous nous plaçons au centre de la cellule d'origine  $G$  du réseau réciproque pour tracer des vecteurs joignant l'origine aux nœuds voisins de ce même réseau. Nous construisons ensuite les médiatrices de ces vecteurs. La plus petite aire interceptée par ces médiatrices est la zone de Brillouin irréductible. La( Figure I-6) donne une représentation graphique des réseaux réciproques, de la première ZB et de la ZB irréductible pour les réseaux 2D carrés et hexagonal.

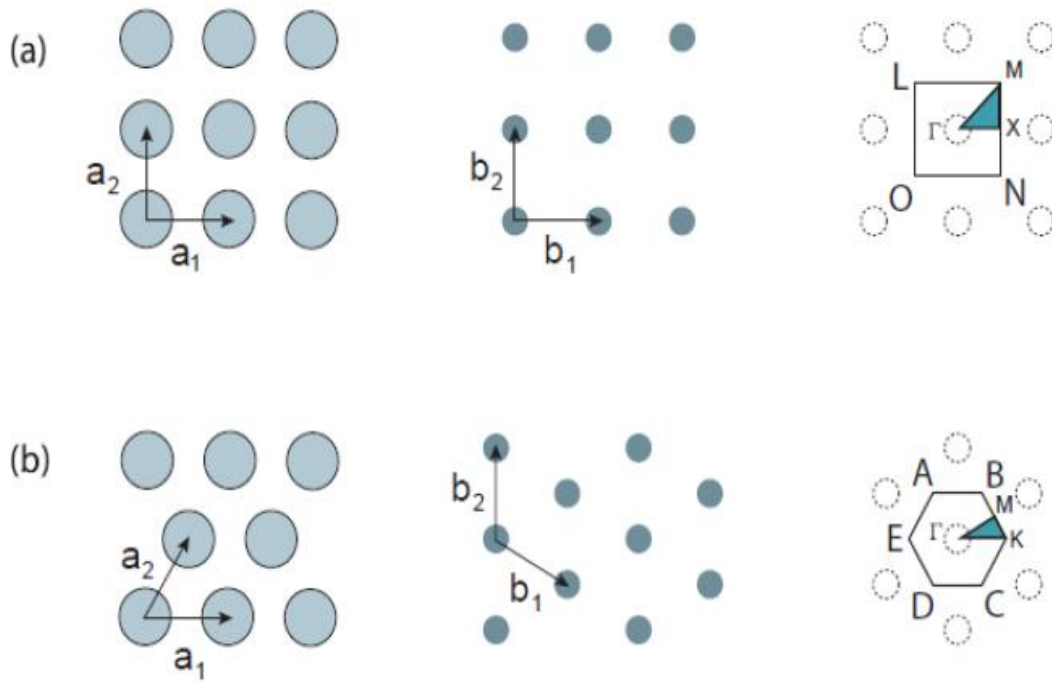


Figure I-6 : réseau réel, de la première zone de Brillouin et zone de Brillouin irréductible pour les réseaux 2D (a) carrés et (b) triangulaire

### I.3 Formation des bandes d'énergie :

- Modèle qualitatif :

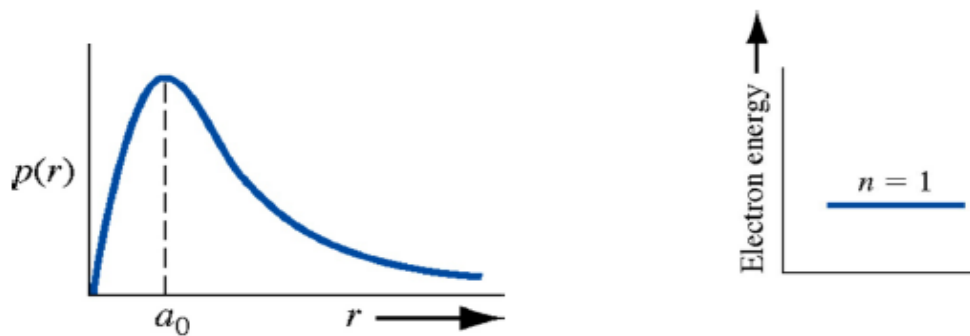


Figure I-7 : un atome isolé d'hydrogène

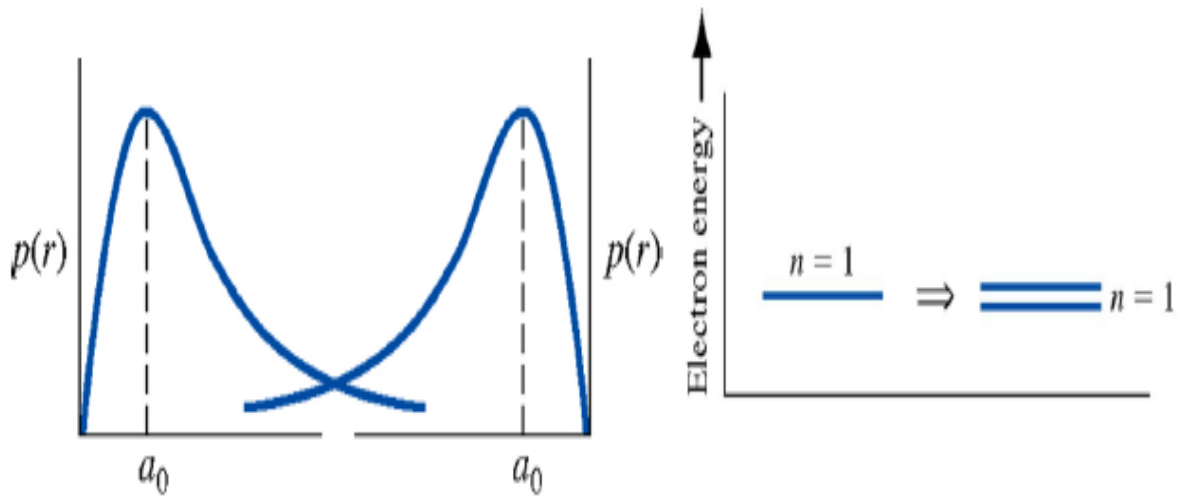


Figure I-8: deux 2 atomes d'hydrogène adjacents

- Modèle qualitatif pour le Silicium:
  - Structure électronique (14 électrons)
  - $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^2$

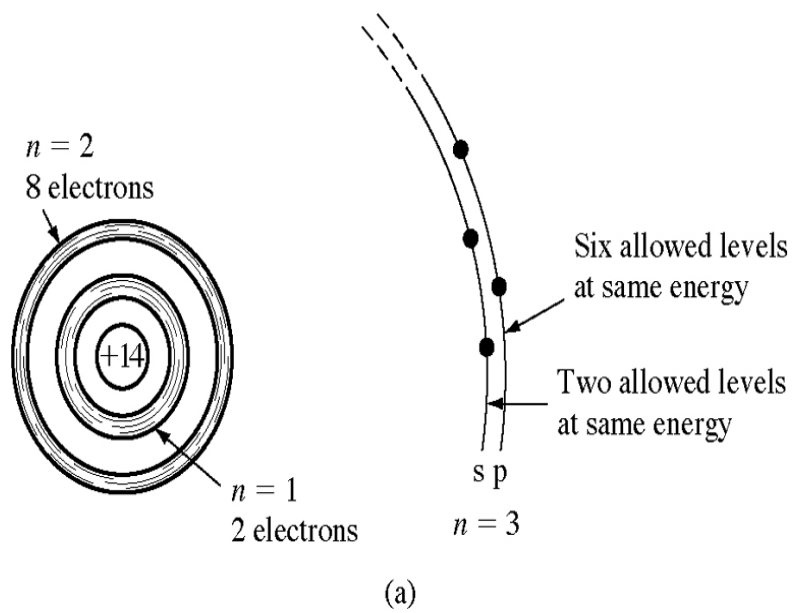


Figure I-9 :Modèle qualitatif pour le Silicium

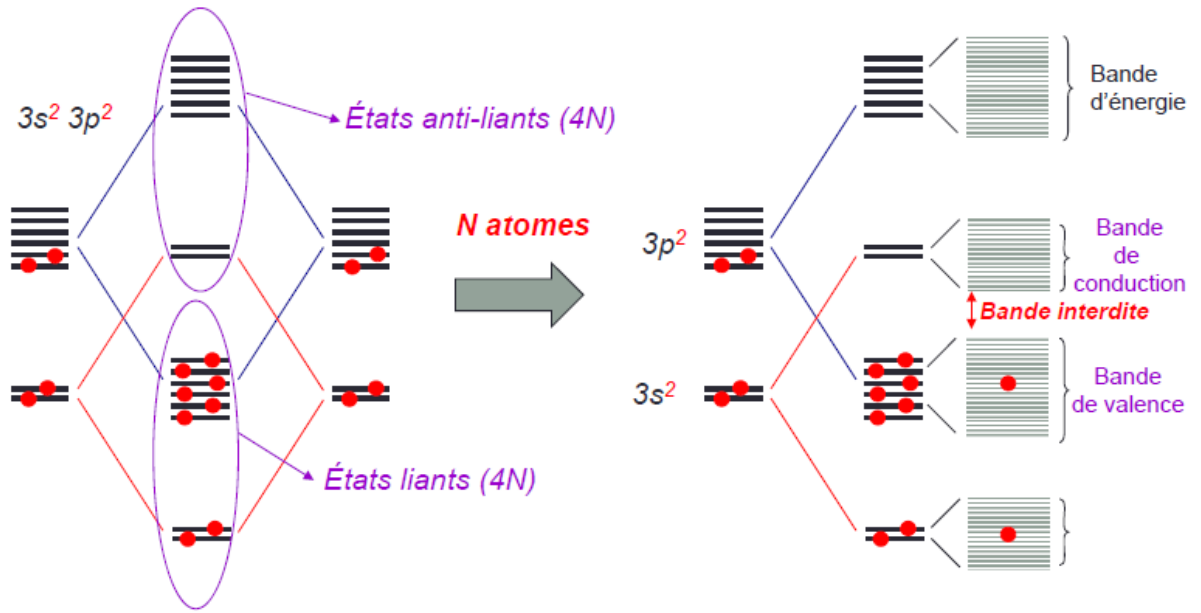
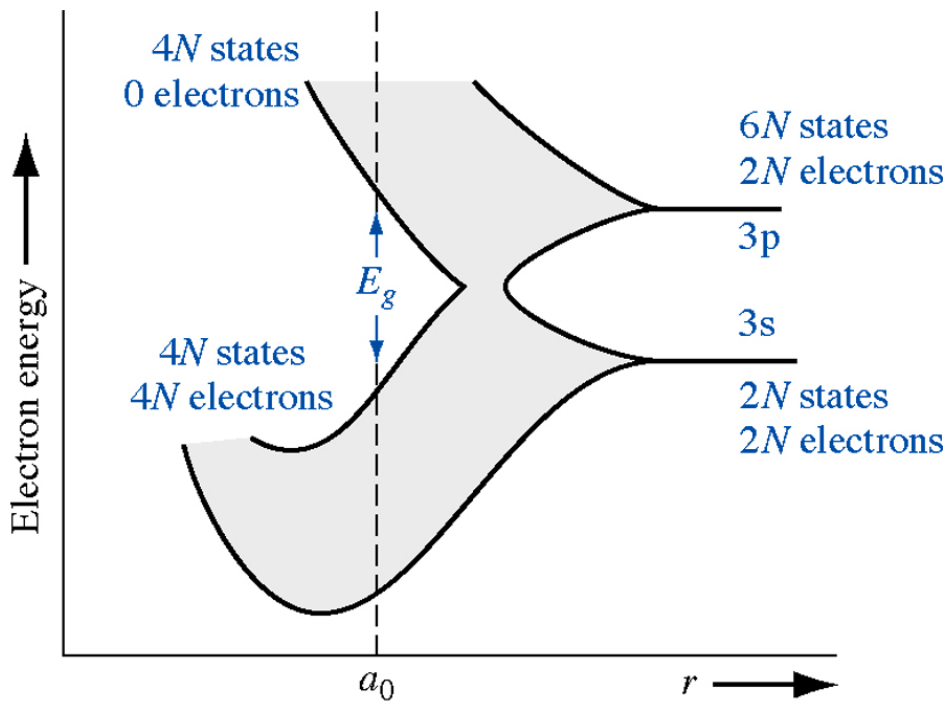


Figure I-10: La Structure électronique du Silicium



(b)

Figure I-11 : La largeur de la bande interdite dépend (entre autre) de la distance inter-atomique  $a_0$

**I-4. Diagramme de bandes :**

L'analogie avec la physique du solide permet de réutiliser tous les outils de la cristallographie liés à la périodicité du réseau. On peut associer à un cristal photonique une fonction diélectrique périodique  $\varepsilon(\vec{r}) = \varepsilon(\vec{r} + \vec{R})$ . Suivant la dimensionnalité de la structure, la constante diélectrique est une fonction périodique du système suivant  $N = 1, 2, 3$  directions de l'espace, et est invariante selon les  $(3 - N)$  autres directions. Le vecteur  $\vec{R}$  est une combinaison linéaire des vecteurs de base du réseau direct  $\{\vec{a}_i\}$ .

$$\vec{R} = l\vec{a}_1 + m\vec{a}_2 + n\vec{a}_3 \quad (\text{I-9})$$

Avec  $l, m, n$  entiers ;

Dans ce cas, le théorème de Bloch pour un problème aux valeurs propres nous permet de mettre les solutions sous la forme:

$$\vec{H}_k(\vec{r}) = \vec{u}_k(\vec{r})e^{i\vec{k}\vec{r}} \quad (\text{I-10})$$

Où  $\vec{u}_k(\vec{r})$  est une fonction périodique, de même période que la structure, et qui est complètement définie par les valeurs qu'elle prend dans la cellule unité:

$$\vec{u}_k(\vec{r}) = \vec{u}_k(\vec{r} + \vec{R}) \quad (\text{I-11})$$

En remplaçant  $\vec{H}_k(\vec{r})$  par sa forme d'onde de Bloch (I-10) dans l'équation maîtresse (I-12)

$$\vec{\nabla} \times \left( \frac{1}{\varepsilon(\vec{r})} \vec{\nabla} \times \vec{H}(\vec{r}) \right) = \left( \frac{\omega}{c} \right)^2 \vec{H}(\vec{r}), \quad (\text{I-12})$$

on obtient :

$$\widehat{\Theta}_k \vec{H}_k = \left( \frac{\omega(\vec{k})}{c} \right)^2 \vec{H}_k \quad (\text{I-13})$$

où  $\widehat{\Theta}_k$  est le nouvel opérateur hermitien qui dépend du vecteur d'onde  $\vec{k}$  :

$$\widehat{\Theta}_k = (i\vec{k} + \vec{\nabla}) \times \frac{1}{\varepsilon(\vec{r})} (i\vec{k} + \vec{\nabla}) \quad (\text{I-14})$$

$$\vec{\nabla} \times \frac{1}{\varepsilon(\vec{r})} \vec{\nabla} \times e^{i\vec{k}\vec{r}} \vec{u}_k(\vec{r}) = \left( \frac{\omega(\vec{k})}{c} \right)^2 e^{i\vec{k}\vec{r}} \vec{u}_k(\vec{r})$$

$$(i\vec{k} + \vec{\nabla}) \times \frac{1}{\varepsilon(\vec{r})} (i\vec{k} + \vec{\nabla}) \times \vec{u}_k(\vec{r}) = \left( \frac{\omega(\vec{k})}{c} \right)^2 \vec{u}_k(\vec{r}). \quad (\text{I-15})$$

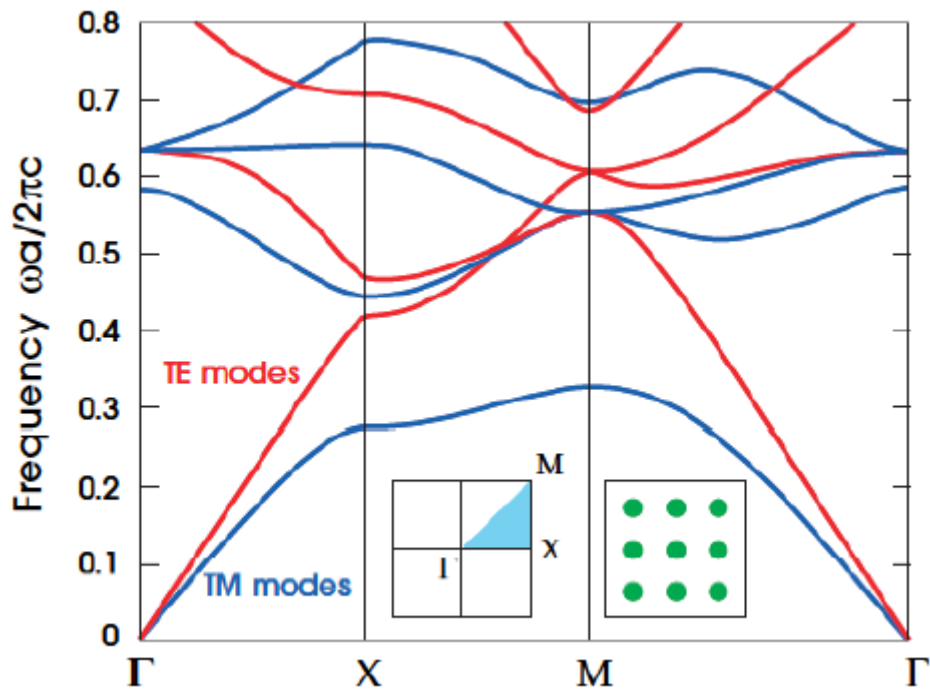
Ainsi,

$$\widehat{\Theta}_k \vec{u}_k(\vec{r}) = \left( \frac{\omega(\vec{k})}{c} \right)^2 \vec{u}_k(\vec{r})$$

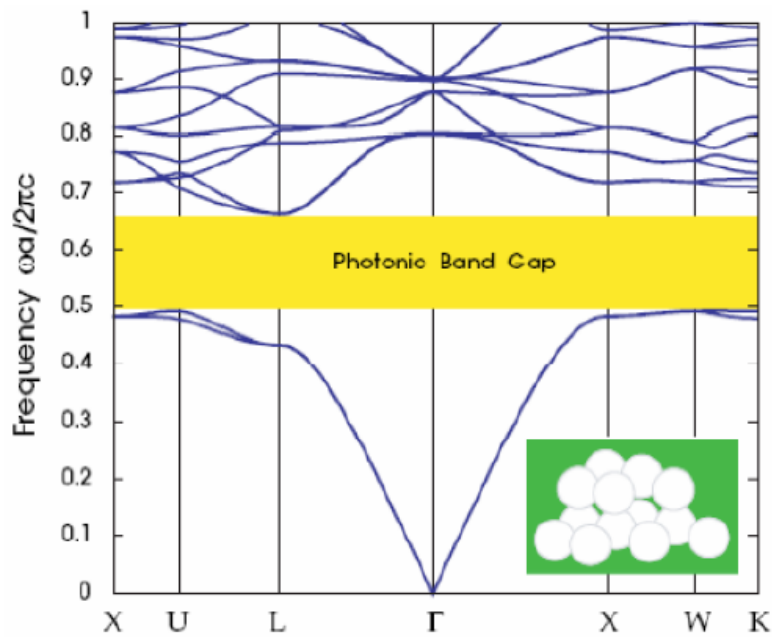
La résolution d'une telle équation, pour un vecteur d'onde  $k$  donné, conduit à un ensemble discret de valeurs propres  $\lambda_n(k)$ , fonctions du vecteur  $k$ , discriminées par un indice de bande entier  $n$ . Ces valeurs propres sont reliées aux fréquences propres du cristal par :

$$\lambda_n(\vec{k}) = \frac{\omega_n^2(\vec{k})}{c^2}$$

C'est l'ensemble des courbes de dispersion des fréquences propres  $\omega_n(\vec{k})$  qui constitue la structure de bandes du cristal photonique étudié. Ce diagramme de bandes est un élément crucial, car il donne une « cartographie » de tous les états électromagnétiques possibles pouvant exister dans la structure photonique. Les états propres associés à des valeurs propres différentes sont orthogonaux entre eux. A chaque état propre,  $\vec{H}_{r,\vec{k}}$  correspond une distribution précise du champ électromagnétique obéissant à certaines règles de symétrie.



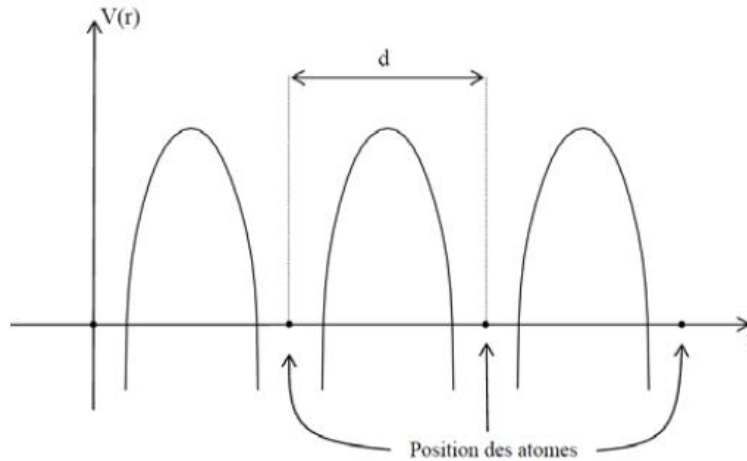
**Figure I-12:** Structure de bande d'un réseau carré bidimensionnel de tiges cylindriques diélectriques ( $\epsilon=8.9$ ); modes TM et TE



**Figure I-13:** Structure de bande d'un réseau diamant de sphères d'air dans un diélectrique à haute permittivité ( $\epsilon=13$ ).

### I.5 .Formulation et solution du modèle de kronig-penney :

La périodicité du potentiel électrique est modulée par la répartition régulière des ions positifs. Sa périodicité correspond au pas « d » du réseau cristallin. Cette représentation est donnée par la ( Figure I-14) [7].



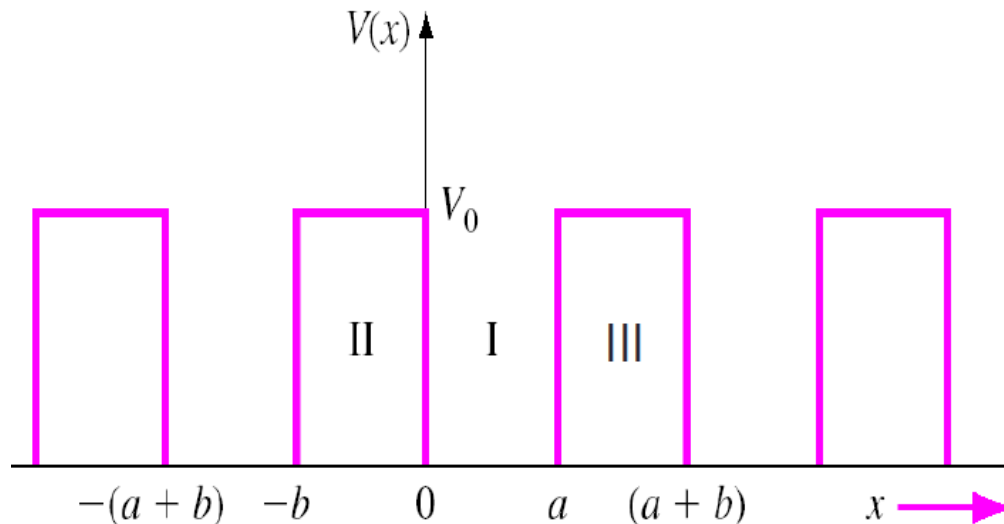
**Figure I-14:**Potentiel électrique dans un cristal unidimensionnel

Il faut résoudre l'équation de Schrödinger pour déterminer la fonction d'onde de l'électron en utilisant cette forme de potentiel électrique. L'équation d'onde de Schrödinger s'écrit sous la forme suivante :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + V(x)\psi(x) = E\psi(x) \quad (\text{I-16})$$

Ici  $\psi(\mathbf{x})$  est la particule de la fonction d'onde unique en  $x$ ,  $V$  l'intensité du potentielle et  $E$  l'énergie de la particule unique en unités de  $\frac{\hbar^2}{2m}$  avec  $m$  la masse électronique. Les deux extrémités du système sont supposées être connectées de façon ohmique à des fils parfaits (où l'électron se déplace librement).

Pour simplifier la résolution, on utilise le modèle de Kronig-Penney représenté par un puits de potentiel carré de hauteur de barrière  $V_0$  et de largeur de barrière  $b$  :



**Figure I-15 :** potentiel périodique de Kronig-Penney

La position des atomes est au centre de chaque puits de potentiel, et pour quitter l'atome, l'électron doit lutter contre la force d'attraction représentée par la barrière de potentiel.

L'énergie totale  $E$  de la particule est supposée telle que  $0 < E < V_0$ . Il faut alors résoudre l'équation d'onde de Schrödinger dans les deux régions suivantes  $0 < x < a$  et  $-b < x < 0$ , puis appliquer les conditions de continuité et de périodicité aux interfaces.

Dans l'intervalle  $0 < x < a$ , pour lequel  $V_0 = 0$  ; la fonction propre est une combinaison linéaire d'ondes planes qui se déplacent simultanément vers la droite et vers la gauche. L'équation (I-16), s'écrit :

$$\frac{d^2\psi_1(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E \psi_1(x) = 0 \quad (\text{I-17})$$

Dans l'intervalle  $-b < x < 0$ , pour  $V = V_0$ , correspondant à l'intérieur de la barrière, l'équation (I-16) s'écrit :

$$\frac{d^2\psi_2(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V_0) \psi_2(x) = 0. \quad (\text{I-18})$$

Avec  $E < V_0$  d'après les hypothèses.

Ainsi, la solution de l'équation (I-17) est donnée par :

$$\psi_1(x) = A e^{i\alpha x} + B e^{-i\alpha x} \quad (\text{I-19})$$

$$\text{Avec } \alpha = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

et la solution de (I-18) est donnée par :

$$\psi_2(x) = Ce^{\beta x} + De^{-\beta x} \quad (\text{I-20})$$

$$\text{Avec } \beta = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}}$$

La solution dans la région  $0 < x < a+b$  doit être reliée à la solution (I-20) de la région  $-b < x < 0$  d'après le théorème du Bloch :

La solution générale de l'équation d'onde sous la forme d'une fonction du Bloch.

$$\psi(a < x < a + b) = \psi(-b < x < 0) e^{ik(a+b)} \quad (\text{I-21})$$

Qui permet de définir le vecteur d'onde servant à indexer les solutions. Les coefficients A, B, C et D sont choisies de telle façon que  $\psi(x)$  et  $\frac{d\psi}{dx}$  soient continués au point  $x=0$  et  $x=a$ .

Ce sont les conditions aux limites usuelles pour un problème de mécanique quantique avec un puits de potentiel carré. En  $x=0$  :

$$A + B = C + D \quad (\text{I-22})$$

$$i\alpha A - i\alpha B = \beta C - \beta D \quad (\text{I-23})$$

En  $x = a$  et en utilisant l'équation (I-18), où  $\psi(a)$  et  $\psi(-b)$  exprimées du côté des barrières ne diffèrent que du facteur d'un facteur de phase  $e^{ik(a+b)}$ , on a :

$$Ae^{i\alpha a} + Be^{-i\alpha a} = e^{ik(a+b)}(Ce^{-\beta b} + De^{\beta b}) \quad (\text{I-24})$$

$$i\alpha(Ae^{i\alpha a} - Be^{-i\alpha a}) = \beta e^{ik(a+b)}(Ce^{-\beta b} - De^{\beta b}) = 0 \quad (\text{I-25})$$

Il est bien sûr possible de résoudre les équations (I-22), (I-23), (I-24), (I-25) en un système linéaire :

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & -1 & -1 \\ i\alpha & -i\alpha & -\beta & \beta \\ e^{i\alpha a} & e^{-i\alpha a} & -e^{ik(a+b)-\beta b} & -e^{ik(a+b)+\beta b} \\ i\alpha e^{i\alpha a} & -i\alpha e^{-i\alpha a} & -\beta e^{ik(a+b)-\beta b} & \beta e^{ik(a+b)+\beta b} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \\ C \\ D \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (\text{I-26})$$

Ce système d'équations n'admet des solutions non nulles, sauf si le déterminant de la matrice de gauche est nul. Après quelques manipulations algébriques assez fastidieuses, on peut dériver une contrainte sur  $k$ , en termes des paramètres du modèle, à partir de ce déterminant.

Nous obtenons

$$\frac{(\alpha^2 + \beta^2)}{2\alpha\beta} \sin(\alpha a) \sinh(\beta b) + \cos(\alpha a) \cosh(\beta b) = \cos[k(a + b)] \quad (\text{I-27})$$

Si les paramètres du modèle  $a$ ,  $b$ , et  $V_0$  ont des valeurs fixes, pour une valeur donnée de  $k$ , on recherche les valeurs de  $\alpha$  qui donneront une solution à cette équation transcendante.

Les états stationnaires d'énergie  $E(\alpha)$  associés à ces valeurs de  $\alpha$  est :  $\alpha = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$ .

Intuitivement, il y aura des valeurs de  $\alpha$  pour lesquelles il n'y a pas de valeurs réelles de  $k$  qui satisfont la solution de cette équation. Dans un tel cas, un trou dans le spectre des énergies prendra lieu.

La périodicité de la fonction delta serait utilisée pour obtenir une image plus simplifiée du résultat, c'est-à-dire, passage à la limite  $b \rightarrow 0$  et  $V_0 \rightarrow \infty$  de telle manière que

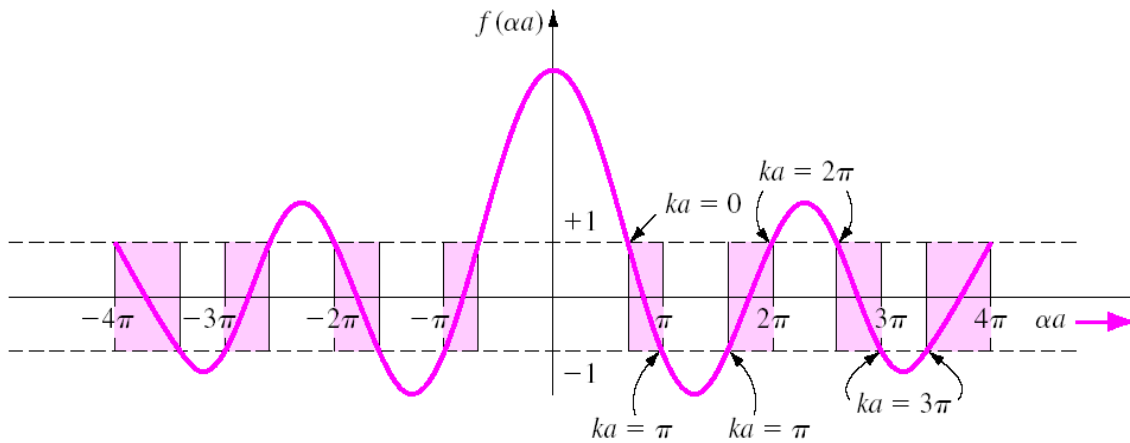
$P = \frac{\beta^2 b a}{2}$  est une quantité finie. A la limite  $\cosh \beta b \rightarrow 1$ , aussi  $\sin \beta b \rightarrow \beta b \ll 1$  et  $\beta \gg \alpha$ .

Alors,  $\beta^2 \propto V_0$

$$\lim_{V_0 \rightarrow \infty} (\beta^2 - k^2) \cong \beta^2. \quad (\text{I-28})$$

Puis l'éq. (I-27) peut être réduite à une forme plus concise :

$$P \left[ \frac{\sin \alpha a}{\alpha a} \right] + \cos(\alpha a) = \cos k a = f(\alpha a) \quad (\text{I-29})$$



**Figure I-16:** Solution graphique du problème du modèle de Kronig-Penney.  $f(\alpha a)$  est tracé en fonction de  $(\alpha a)$

Il devient plus constructif de considérer graphiquement la solution de l'Eq. (I-29), dont le côté gauche en fonction de  $(\alpha a)$  peut être tracé lorsque le côté droit- les plages de  $\cos(ka)$  - sont comprises entre  $-1$  et  $1$ , une solution pour les valeurs de  $k$  existe. Cependant, pour les valeurs non réelles de  $\alpha$ , aucune fonction propre d'énergie n'existe, c'est-à-dire que le spectre de solutions aura alors un écart dans les énergies admissibles. Cela signifie qu'aucune solution pour certaines énergies pour ce modèle peuvent être trouvées. Les figures (I-16) et (I-17) montrent les domaines de  $\alpha$  pour lesquels l'Eq. (I-29) a des solutions. Ici, la fonction de Bloch d'indice de vecteur d'onde  $k$  est plus significatif que  $K$ , qui a une relation pertinente avec l'énergie  $E_0(k) = \frac{\hbar^2}{2m} k^2$ .

## I.6 Structure de bande :

La théorie des bandes est un modèle quantique en physique des solides qui détermine les énergies possibles des électrons dans un solide et permet de comprendre la notion de conductivité électrique. Il est issu de la théorie des orbitales moléculaires.

Dans un solide, les niveaux d'énergie permis sont confinés dans une bande dont la largeur, de l'ordre de l'électron-volt, dépend du cristal et du recouvrement des orbitales atomiques. Les solides ont une structure de bandes; on distingue les bandes d'énergie permises, et les bandes d'énergie interdites voir la figure (I-17). [8]

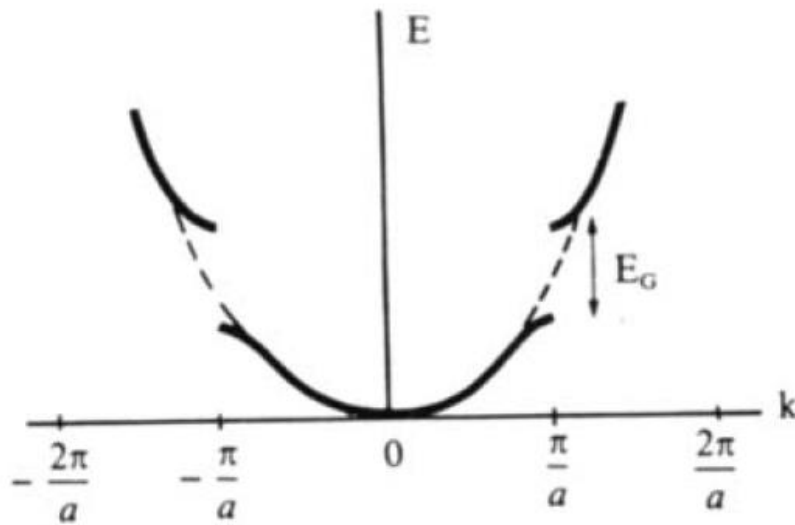


Figure I-17 : diagramme de dispersion

Sur la figure (I-17), apparaît en pointillés la parabole d'équation  $E_0(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2}{2m} \mathbf{k}^2$ . Cette parabole est obtenue dans l'équation (23) lorsque  $b$  tend vers zéro, c'est-à-dire quand la barrière de potentielle est transparente. Alors, on considère que les électrons sont dans un volume infini. La courbe  $E(k)$  ne s'éloigne de cette parabole qu'au voisinage des valeurs  $k = n \frac{\pi}{a}$ , en créant chaque fois une bande d'énergie interdite « band gap ». Cette dernière a la largeur  $E_G$  pour  $k = \pm \frac{\pi}{a}$ . Le domaine de l'espace des  $k$  compris entre  $+\frac{\pi}{a}$  et  $-\frac{\pi}{a}$ , s'appelle la première zone de Brillouin de la chaîne atomique. Le domaine constitué des deux segments  $[-\frac{2\pi}{a}; -\frac{\pi}{a}]$  et  $[\frac{\pi}{a}; +\frac{2\pi}{a}]$  constitue la seconde zone de Brillouin, etc.

## *Chapitre II*

### *Le Double potentiel $\delta$ de Dirac*

### II.1. Introduction :

Après avoir examiné le potentiel de Kronig-Penny, il est intéressant d'analyser le modèle de Kronig-Penny-Dirac, appelé aussi le modèle du peigne de Dirac, avec un potentiel de la forme

$V(x) = -\beta \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \delta(x - n a)$ ,  $\beta > 0$ . Ce modèle est une limite du modèle de Kronig-Penny, pour laquelle l'un des deux semi-conducteurs du superréseau est donné sous forme d'une couche très mince, d'où on obtient une structure de bande constituée de bandes d'énergies permises séparées par des bandes d'énergies interdites donnée par les valeurs de  $K = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$ , comme il est indiqué dans la figure. Ici,  $m$  et  $E$  sont la masse et l'énergie de l'électron respectivement.

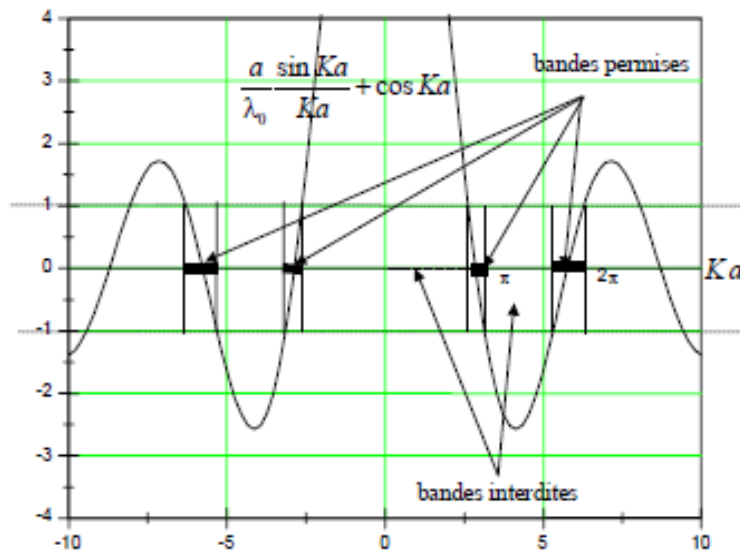


Figure II-1 : les bandes permises et bandes interdites

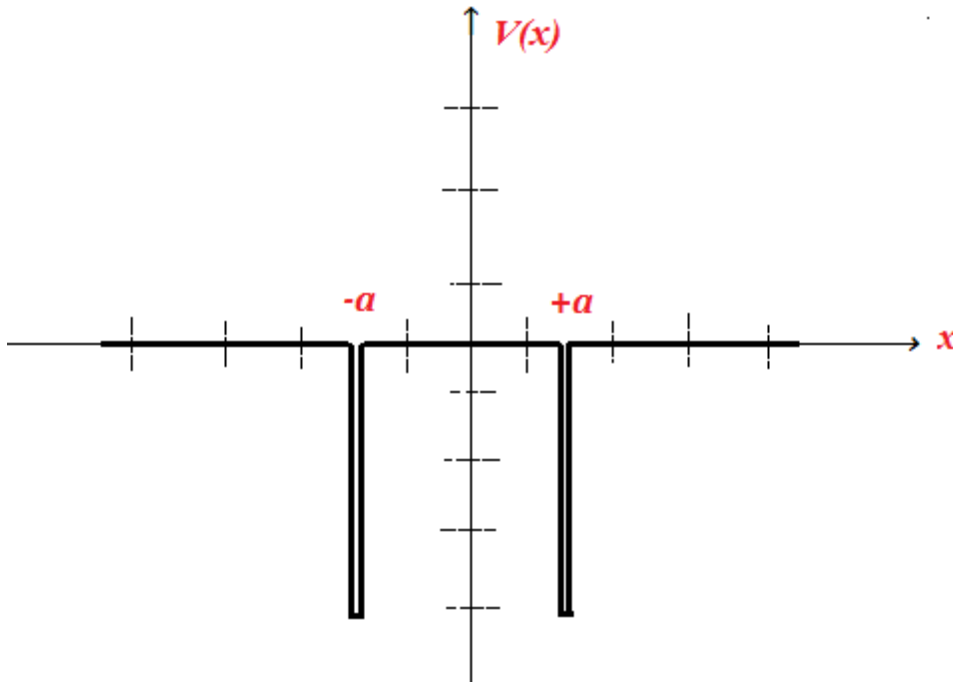
Pour simplifier l'étude de ce modèle, nous allons considérer une partie du peigne de Dirac, qui correspond à un double potentiel  $\delta$  de Dirac. Ce dernier modèle peut décrire un électron de valence d'une molécule linéaire biatomique soumise à l'influence de deux « coeurs » atomiques où les potentiels coulombiens sont matérialisés par les deux puits de potentiels attractifs  $\delta(x \pm a)$  distants de  $2a$ .

**II.2. Double puits de potentiel  $\delta$  de Dirac :**

Un potentiel à double fonction  $\delta$  de Dirac est de la forme

$$V(x) = -\beta[\delta(x + a) + \delta(x - a)], \quad (\text{II.1})$$

où  $\beta$  et  $a$  sont des constantes positives.



**Figure (II-2):** Un double puits de potentiel de Dirac  $\delta$ .

Nous souhaitons étudier le nombre d'états liés qu'il possède et trouver les énergies autorisées

possibles pour  $\beta = \frac{\hbar^2}{ma}$  et  $\beta = \frac{\hbar^2}{4ma}$ .

Le potentiel  $V(x)$  est une fonction paire, c'est-à-dire  $V(-x) = V(x)$ , alors  $\psi(x)$  peut toujours être considéré comme pair ou impair. Pour une énergie  $E$  donnée, si  $\psi(x)$  satisfait l'équation de Schrödinger indépendante du temps, il en est de même pour  $\psi(-x)$  et donc aussi pour la combinaison linéaire paire et impaire  $\psi(x) + \psi(-x)$ . La forme du potentiel  $\delta$  ci-dessus est appelée un puits de potentiel delta si  $\beta$  est négatif et une barrière de potentiel  $\delta$  si  $\beta$  est positif.

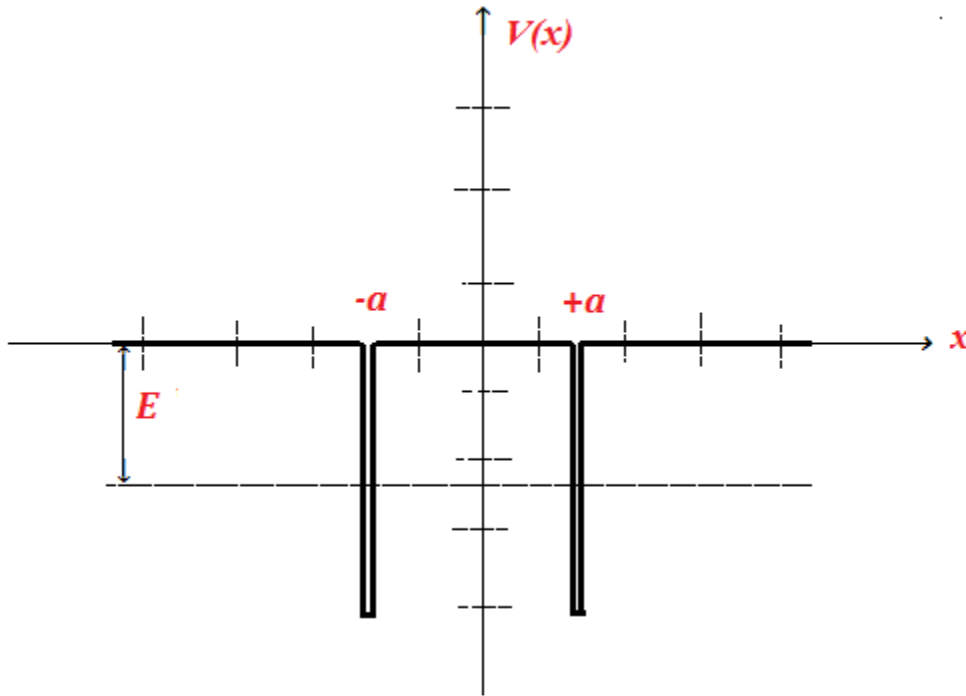
**II.3. Solution paire du double puits de potentiel de Dirac  $\delta$  :**

Dans les régions éloignées du potentiel  $\delta$ , où  $V(x) = 0$  (FigII-2 et FigII-3).

$$\hat{H} \psi = E \psi \quad (\text{II-2})$$

$$k = \frac{\sqrt{2m(-E)}}{\hbar} \quad (\text{II-3})$$

$E$  est négatif, donc  $k$  est réel.



**Figure II-3:** Un double puits de potentiel de Dirac  $\delta$  ( $E < 0$ ).

La solution paire la plus générale de  $\psi(x)$  est :

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{-kx} & x > a \\ Be^{-kx} + Ce^{kx} & 0 < x < a \\ Be^{kx} + Ce^{-kx} & -a < x < 0 \\ Ae^{kx} & x < -a \end{cases} \quad (\text{II-4})$$

où, dans la région  $x > a$ , la fonction d'onde s'écrit  $\psi(x) = De^{kx} + Ae^{-kx}$ . Si  $x \rightarrow \infty$ ,  $\psi(x)$  s'annule, donc  $D$  doit être nul. Et de même, pour la région  $x < -a$ , si  $x \rightarrow -\infty$ ,  $\psi$  s'annule également, donc  $D$  doit à nouveau être nul.

Puisque  $\psi(x)$  est une fonction d'onde bien définie, on applique les conditions de Born pour réduire le nombre de constantes. La fonction d'onde doit être continue en tout point, donc en appliquant cette condition en  $(x = a)$ , on obtient

$$Ae^{-kx} \Big|_{x=a} = Be^{-kx} + Ce^{kx} \Big|_{x=a} \quad (\text{II-5})$$

Puis

$$A = B + Ce^{2ka} \quad (\text{II-6})$$

Il est évident qu'aucune information ne serait extraite si la condition de continuité a été appliquée en  $(x = 0)$ , et  $(x = -a)$  ne fait que répéter  $(x = a)$ . Une autre condition qui doit être appliquée est la dérivée de la fonction d'onde, lorsque le potentiel est fini, la continuité doit être en tout point, donc en  $(x = 0)$ .

$$\frac{d\psi}{dx} \Big|_{(x=0; 0 < x < a)} = \frac{d\psi}{dx} \Big|_{(x=0; -a < x < 0)} \quad (\text{II-7})$$

Il s'ensuit que

$$B = C \quad (\text{II-8})$$

En appliquant l'équation (II-6) et l'équation (II-8) à l'équation (II-4), on obtient :

$$\psi(x) = \begin{cases} B(1 + e^{2ka})e^{-kx} & x > a \\ B(e^{-kx} + e^{kx}) & -a < x < a \\ B(1 + e^{2ka})e^{kx} & x < -a \end{cases} \quad (\text{II-9})$$

En insérant  $V(x) = -\beta[\delta(x + a) + \delta(x - a)]$  dans l'équation de Schrödinger indépendante du temps, ça devient

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} - \beta[\delta(x + a) + \delta(x - a)] \psi(x) = E\psi(x) \quad (\text{II-10})$$

L'idée est d'intégrer l'équation (II-10) de  $-\epsilon$  à  $+\epsilon$ , puis de prendre la limite lorsque  $\epsilon$  passe à  $a$ .

C'est-à-dire :

$$\int_{-\epsilon}^{+\epsilon} \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} - \beta[\delta(x + a) + \delta(x - a)] \psi(x) \right] dx = E \int_{-\epsilon}^{+\epsilon} \psi(x) dx \quad (\text{II-11})$$

$$\begin{aligned} & -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d\psi(x)}{dx} \Big|_{+\epsilon} - \frac{d\psi(x)}{dx} \Big|_{-\epsilon} - \lim_{\epsilon \rightarrow a} \beta \int_{-\epsilon}^{+\epsilon} \delta(x + a) \psi(x) dx - \lim_{\epsilon \rightarrow a} \beta \int_{-\epsilon}^{+\epsilon} \delta(x - a) \psi(x) dx \\ & = E \lim_{\epsilon \rightarrow a} \int_{-\epsilon}^{+\epsilon} \psi(x) dx \end{aligned} \quad (\text{II-12})$$

Notez qu'à la limite, le dernier terme du côté gauche et le terme du côté droit sont identiquement nuls, de sorte que nous nous retrouvons avec

$$\frac{d\psi}{dx} \Big|_{+\epsilon} - \frac{d\psi}{dx} \Big|_{-\epsilon} = \frac{-2m\beta}{\hbar^2} \psi(a) \quad (\text{II-13})$$

Maintenant, en laissant  $\epsilon$  aller à  $a$

$$\psi(x) = B(1 + e^{2ka})e^{-kx} \quad x > a \quad (\text{II-14})$$

$$\frac{d\psi}{dx} \Big|_{(+a)} = -kB(1 + e^{2ka})e^{-ka} \quad (\text{II-15})$$

Et pour,

$$\psi(x) = B(e^{-kx} + e^{kx}) \quad -a < x < a \quad (\text{II-16})$$

$$\frac{d\psi}{dx} \Big|_{(-a)} = B(-k e^{-ka} + e^{ka})$$

$$\left. \frac{d\psi}{dx} \right|_{(-a)} = -kB(1 - e^{2ka})e^{-ka} \quad (\text{II-17})$$

La dérivée discontinue en  $a$  donne

$$\Delta \left( \frac{d\psi}{dx} \right) = -\frac{2m\beta}{\hbar^2} \psi(a) \quad (\text{II-18})$$

$$-kB(1 + e^{2ka})e^{-ka} + kB(1 - e^{2ka})e^{-ka} = \frac{-2m\beta}{\hbar^2} \psi(a) = -2kBe^{ka} \quad (\text{II-19})$$

Mais, nous avons

$$\psi(a) = B(e^{-ka} + e^{ka}) \quad (\text{II-20})$$

$$-2kBe^{ka} = -\frac{2m\beta}{\hbar^2} B(e^{-ka} + e^{ka})$$

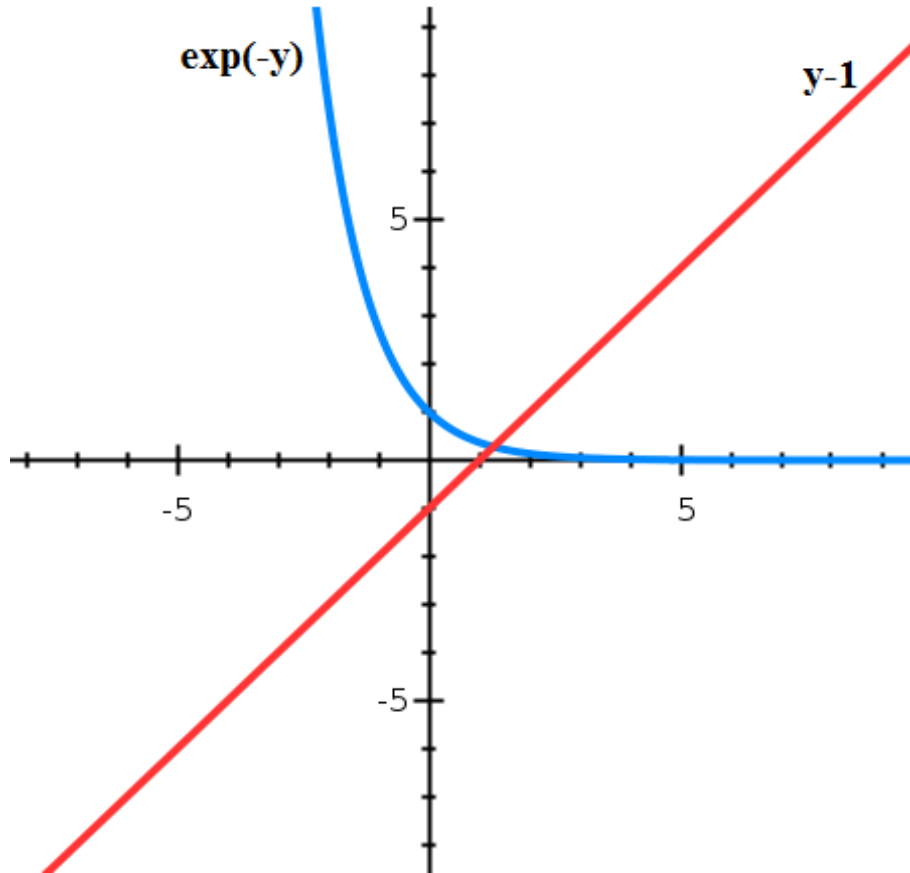
$$\frac{\hbar^2 k}{m\beta} - 1 = e^{-2ka} \quad (\text{II-21})$$

Pour obtenir une condition sur l'énergie, nous avons besoin de  $k$ , l'équation (II-21) est une équation transcendante en  $k$ , donc la résoudre numériquement est la seule solution possible. Nous pouvons voir la solution graphiquement en traçant le côté droit et le côté gauche et en cherchant les intersections.

Si nous introduisons les variables auxiliaires,  $y \equiv 2ka$  et  $\xi = \frac{\hbar^2}{2ma\beta}$ , l'équation (II-21) devient

$$y\xi - 1 = e^{-y} \quad (\text{II-22})$$

Nous traçons les deux côtés et cherchons les intersections. D'après les figures (II-3 – II-5), nous voyons que  $\xi$  et  $y$  sont tous deux positifs et il existe une et une seule solution pour  $\psi$  pair.



**Figure II-4:** Tracé de  $y - 1$  et  $e^{-y}$  en fonction de  $y$  sur le même cadre pour trouver la solution de l'équation  $y - 1 = e^{-y}$

Si  $\beta = \frac{\hbar^2}{2ma}$ , alors  $\xi = 1$  (la solution peut être vue autour de  $\xi = 1$  mais pour voir cela plus... clairement, nous pouvons utiliser un logiciel pour résoudre cette équation numériquement).

Donc,  $y = 1,27846$  (Fig. II-4). Puisque

$$k^2 = \frac{-2mE}{\hbar^2} = \frac{y}{(4a^2)} \quad (\text{II-23})$$

Ensuite, l'énergie

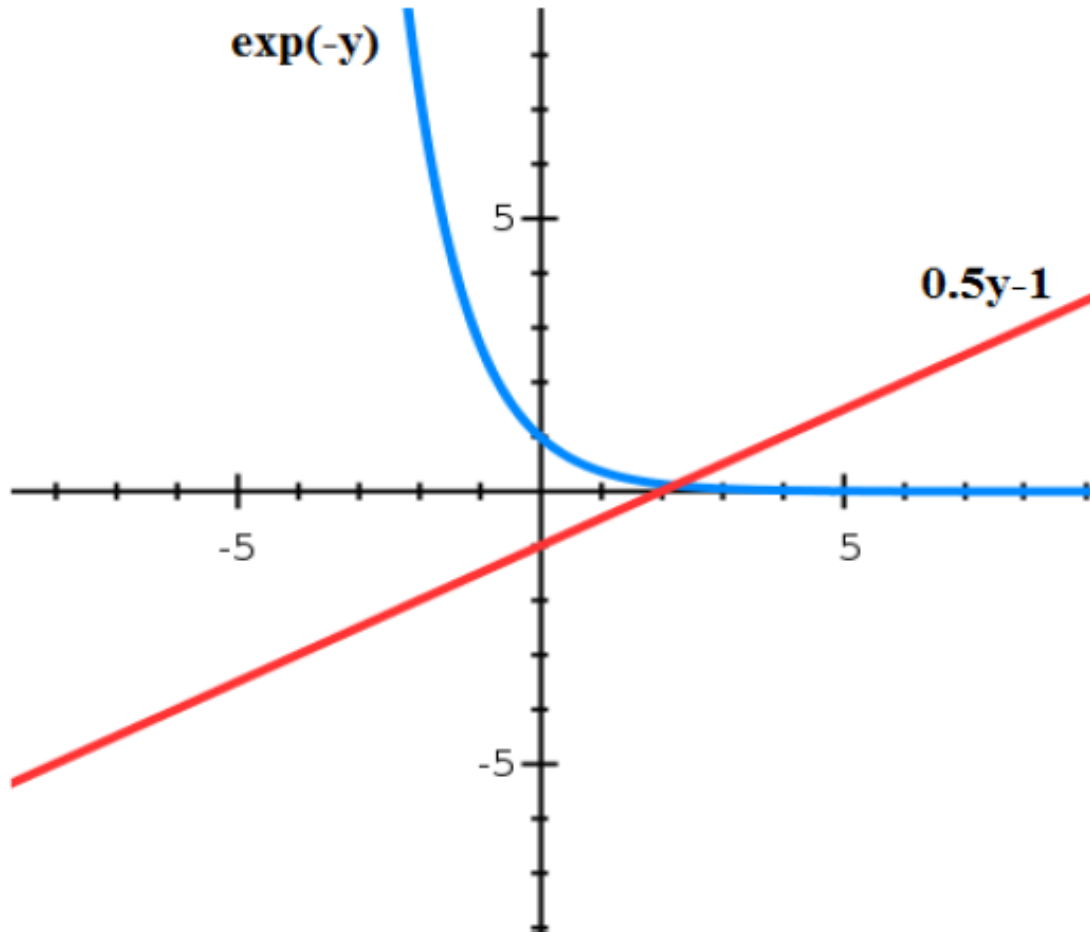
$$E = -\frac{(1,278)^2}{8} \left( \frac{\hbar^2}{ma^2} \right) = -0,204 \left( \frac{\hbar^2}{ma^2} \right) \quad (\text{II-24})$$

Si  $\beta = \left( \frac{\hbar^2}{ma^2} \right)$ , alors  $\xi = \frac{1}{2}$  (Fig. II-5) ;

$$e^{-y} = \frac{1}{2}y - 1 \Rightarrow y = 2,21772 \quad (\text{II-25})$$

Donc l'énergie

$$E = -0,615 \left( \frac{\hbar^2}{ma^2} \right) \quad (\text{II-26})$$



**Figure II-5** : Le tracé de la ligne droite  $\frac{1}{2}y - 1$  et de la courbe  $e^{-y}$  avec leur intersection.

Si  $\beta = \left( \frac{\hbar^2}{4ma} \right)$ , alors  $\xi = 2$  (Fig. II-6).

On aura :

$$e^{-y} = 2y - 1 \Rightarrow y = 0.738835 \quad (\text{II-27})$$

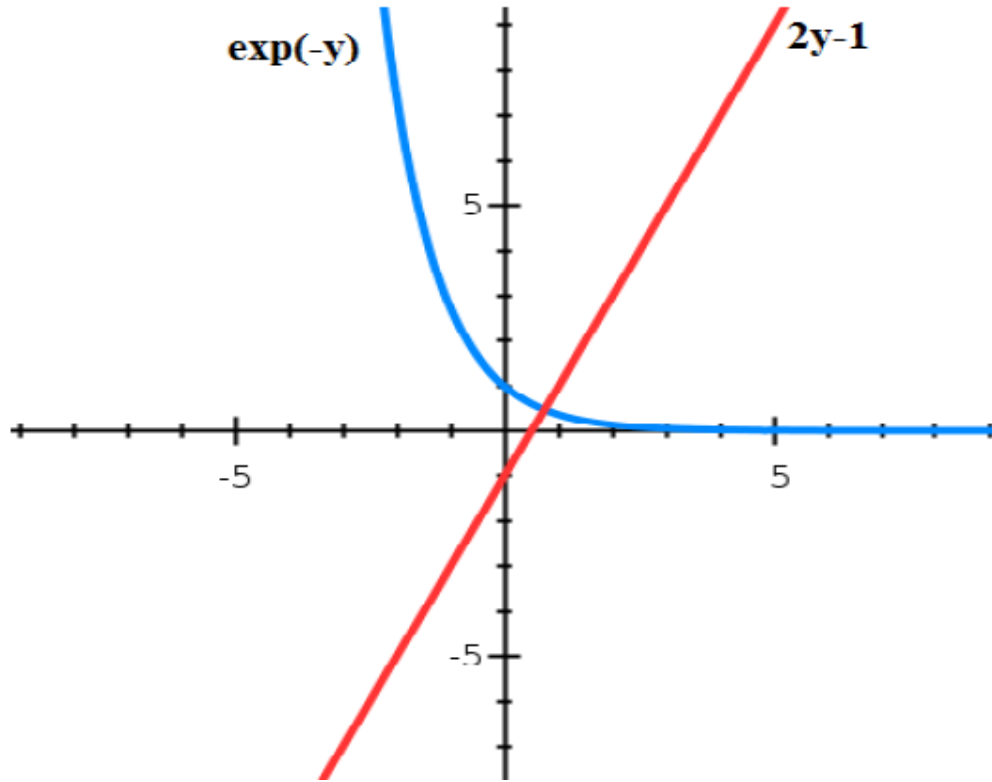


Figure II-6: Le tracé de  $2y - 1$  et  $e^{-y}$  et leur intersection.

Alors, l'énergie est

$$E = -0.0682 \left( \frac{\hbar^2}{ma^2} \right) \quad (\text{II-28})$$

#### II.4. Solution impaire du double puits de potentiel de Dirac

La solution impaire la plus générale de  $\psi(x)$  est :

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{-kx} & x > a \\ Be^{-kx} - Ce^{kx} & 0 < x < a \\ -Be^{kx} + Ce^{-kx} & -a < x < 0 \\ -Ae^{kx} & x < -a \end{cases} \quad (\text{II-29})$$

Comme précédemment, en  $(x = a)$  la condition de continuité donne :

$$\psi(x)|_{(x=a; x>a)} = \psi(x)|_{(x=a; -a < x < a)} \quad (\text{II-30})$$

$$Ae^{-ka} = Be^{-ka} - Ce^{ka}$$

$$A = B - Ce^{-2ka} \quad (\text{II-31})$$

Cette fois, la continuité de la dérivée en  $(x = 0)$  ne nous donne rien de nouveau, mais la continuité de la fonction d'onde elle-même nous donne

$$\Psi(x)|_{(x=0; 0 < x < a)} = \Psi(x)|_{(x=0; -a < x < 0)} \quad (\text{II-32})$$

$$Be^{-k(0)} - Ce^{k(0)} = -Be^{k(0)} + Ce^{-k(0)}$$

$$B - C = -B + C$$

Il s'ensuit que

$$B = C \quad (\text{II-33})$$

Ainsi, la fonction d'onde est :

$$\psi(x) = \begin{cases} B(1 + e^{2ka})e^{-kx} & x > a \\ B(e^{-kx} + e^{kx}) & a < x < -a \\ B(1 + e^{2ka})e^{kx} & x < -a \end{cases} \quad (\text{II-34})$$

Maintenant, nous suivons le même argument que précédemment pour obtenir

$$\frac{d\psi}{dx}\Big|_{(x=+a; x>a)} = \frac{d\psi}{dx}\Big|_{(x=-a; -a < x < a)} \quad (\text{II-35})$$

$$-kB(1 - e^{2ka})e^{-ka} = -Bk(1 + e^{2ka})e^{-ka} \quad (\text{II-36})$$

$$\Delta\left(\frac{d\psi}{dx}\right) = \left(\frac{d\psi}{dx}\right)_{+a} - \left(\frac{d\psi}{dx}\right)_{-a} \quad (\text{II-37})$$

$$= -kB(1 - e^{2ka})e^{-ka} + Bk(1 + e^{2ka})e^{-ka}$$

$$= 2kBe^{ka} \quad (\text{II-38})$$

Comme dans la solution paire, le dernier terme du côté gauche et le terme du côté droit de l'équation (II-12) sont identiquement nuls à la limite, de sorte que nous nous retrouvons avec

$$\left. \frac{d\psi}{dx} \right|_{+\varepsilon} - \left. \frac{d\psi}{dx} \right|_{-\varepsilon} = \frac{-2m\beta}{\hbar^2} \psi(a) \quad (\text{II-39})$$

$$\Delta \left( \frac{d\psi}{dx} \right) = \frac{-2m\beta}{\hbar^2} \psi(a) \text{ et } \psi(a) = B(e^{-ka} - e^{ka})$$

$$\Delta \left( \frac{d\psi}{dx} \right) = 2kBe^{ka} \quad (\text{II-40})$$

$$2kBe^{ka} = \frac{-2m\beta}{\hbar^2} B(e^{-ka} - e^{ka})$$

$$k = \frac{m\beta}{\hbar^2} (1 - e^{-2ka}) \quad (\text{II-41})$$

$$e^{-2ka} = 1 - \frac{\hbar^2 k}{m\beta} \quad (\text{II-42})$$

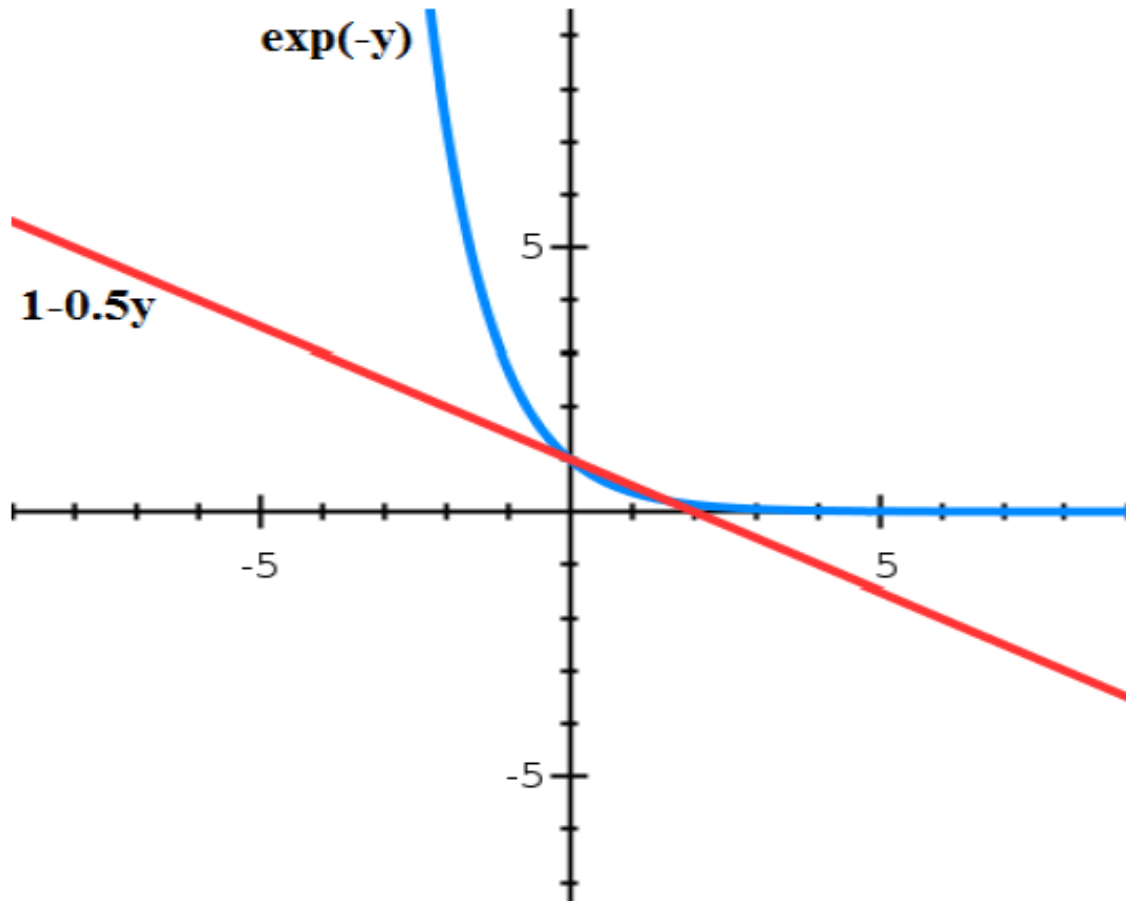
En introduisant les variables auxiliaires,  $y \equiv 2ka$  et  $\xi = \frac{\hbar^2}{2ma\beta}$ , l'équation (II-42) est converti en :

$$e^{-y} = 1 - \xi y \quad (\text{II-43})$$

Cette fois, il peut y avoir ou non une solution. Les deux graphes ont leurs *ordonnées* à 1. Cependant, si  $\xi$  est plus petit, il y aura une intersection, alors que si  $\xi$  est trop grand ( $\beta$  trop petit), il peut ne pas y en avoir. Notons que  $y = 0 \Rightarrow k = 0$  n'est pas une solution, puisque  $\psi$  est non normalisable. La pente de  $(1 - \xi y)$  est  $-\xi$  ; et la pente de  $e^{-y}$  à  $y = 0$  est  $-1$ . Donc, il y a une solution impaire  $\Rightarrow y < 1$  ou  $\beta > \left(\frac{\hbar^2}{2ma}\right)$ . Nous concluons qu'un état limite se produit si  $\beta < \frac{\hbar^2}{2ma}$  ; et deux états liés si  $\beta > \frac{\hbar^2}{2ma}$  (Fig. II-8).

Pour  $\beta = \frac{\hbar^2}{2ma} \Rightarrow \xi = \frac{1}{2}$  (Fig. II-7), puis

$$e^{-y} = 1 - \frac{1}{2}y \Rightarrow y = 1.59362 \quad (\text{II-44})$$

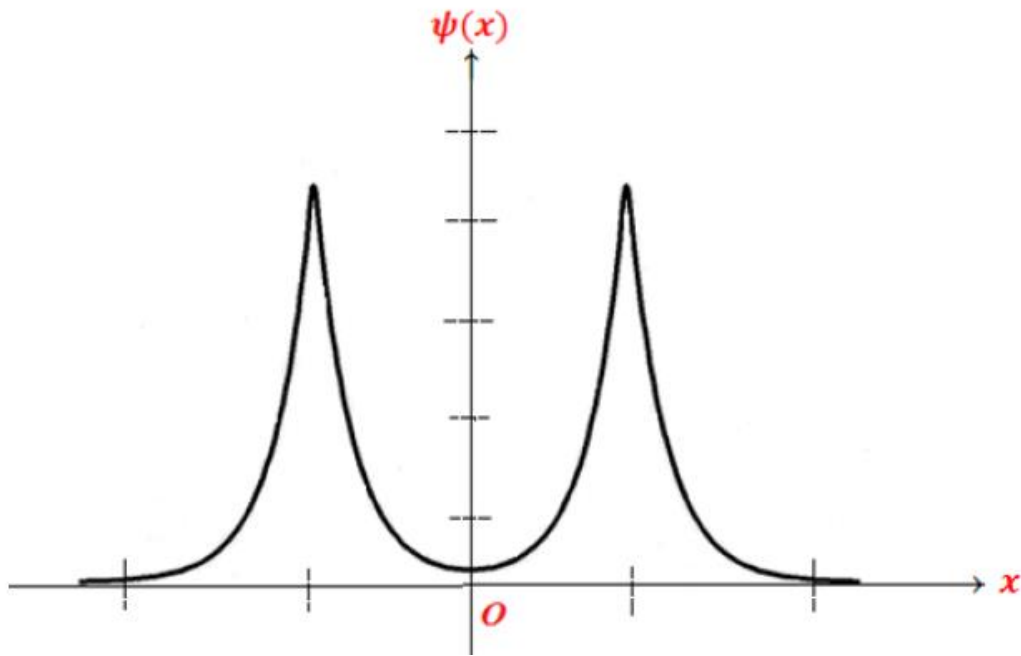


**Figure II-7:** Le tracé de  $1 - \frac{1}{2}y$  et la courbe  $e^{-y}$  et leur intersection en deux points.

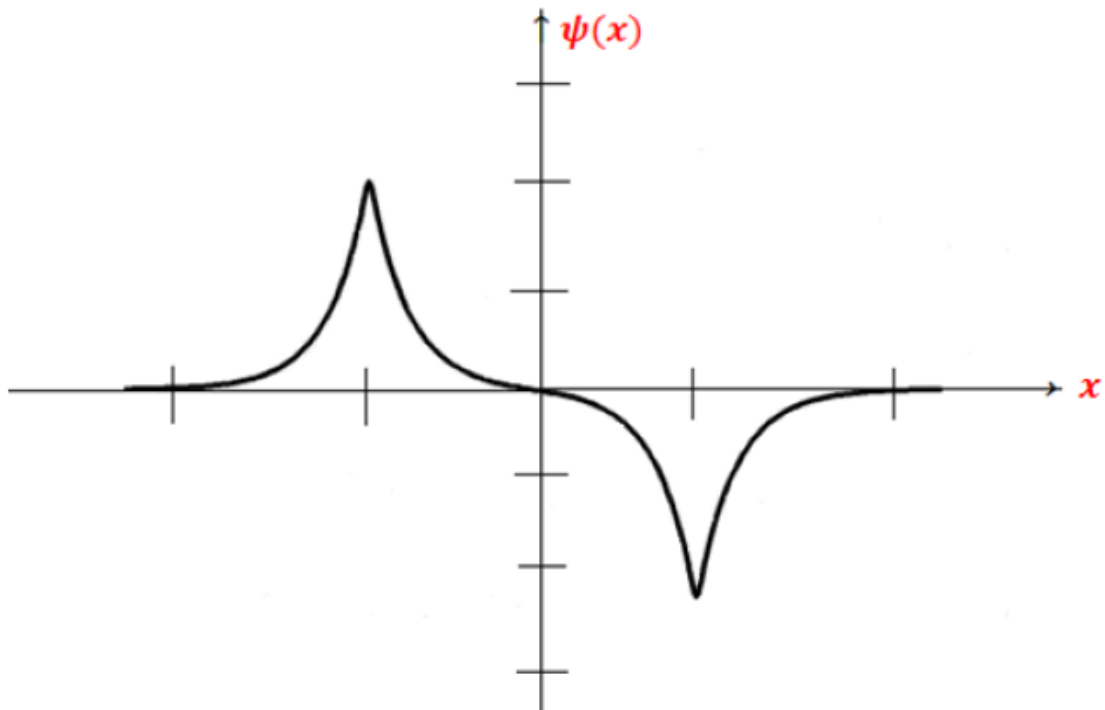
Alors l'énergie est :

$$E = -0.317 \left( \frac{\hbar^2}{ma^2} \right) \quad (\text{II-45})$$

Pour  $\beta = \frac{\hbar^2}{4ma}$  dans ce cas, il y a intersection sauf celle non physique à  $\xi = 0$ . Donc pour cette valeur de  $\beta$ , il n'existe pas d'état limite avec une fonction d'onde impaire (figure II-9).



**Figure II-8:** État propre symétrique typique d'un électron dans un double puits de potentiel  $\delta$



**Figure II-9:** État propre antisymétrique typique d'un électron dans un double  $\delta$ - potentiel.

**II-5. États de diffusion du double puits de Dirac –Potentiel :**

Dans les sections précédentes, nous avons examiné les états liés du double potentiel  $\delta$ . Dans cette section, nous allons examiner les états de diffusion de ce potentiel. À première vue, ce problème semblait être une extension triviale du cas du potentiel simple  $\delta$ -fonction. Pour un déferlement de particules incidentes depuis la gauche, une partie sera transmise, le reste étant réfléchi à la première fonction  $\delta$ . Parmi celles qui sont transmises, une autre fraction sera réfléchie à la deuxième fonction  $\delta$ , et celles qui restent seront transmises pour se déplacer vers la droite jusqu'à l'infini.

De nouveau, les particules qui sont réfléchies à la deuxième fonction  $\delta$  retourneront vers la gauche et une certaine fraction sera à nouveau réfléchie vers la droite lorsqu'elles feront face à la première fonction  $\delta$ . Le processus se répétera à l'infini en rebondissant entre les deux fonctions  $\delta$ , c'est-à-dire une infinité de réflexions et de transmissions. La meilleure façon de traiter ce problème est de se confronter à la procédure mathématique et de voir où elle nous mène. Puisque nous avons considéré que les particules entrent par la gauche, il n'y a donc pas de flux se déplaçant par la droite. Dans ce cas, la solution est asymétrique, c'est-à-dire que nous ne pouvons pas considérer une solution paire et une solution impaire à ce problème.

La solution la plus générale de  $\psi(x)$  dans ce problème est :

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{ikx} + Be^{-ikx} & x < -a \\ Ce^{ikx} + De^{-ikx} & -a < x < a \\ Fe^{ikx} & x > a \end{cases} \quad (\text{II-46})$$

Certaines constantes seront éliminées par l'application des conditions aux limites. La continuité de la fonction d'onde en  $(x = -a)$  donne

$$\psi(x)|_{(x=-a; x<-a)} = \psi(x)|_{(x=-a; -a<x<a)} \quad (\text{II-47})$$

$$Ae^{-ikx} + Be^{ikx} = Ce^{-ikx} + De^{ikx} \quad (\text{II-48})$$

De même, la continuité en  $(x = a)$  donne

$$\Psi(x)|_{(x=a; -a < x < a)} = \Psi(x)|_{(x=a; x > a)} \quad (\text{II-49})$$

$$C e^{ikx} + D e^{-ikx} = F e^{ikx} \quad (\text{II-50})$$

Nous pouvons être guidés par une seule fonction  $\delta$  à  $(x = 0)$ , où la même condition au changement de dérivée de  $\psi(x)$  à travers la fonction delta sera maintenant appliquée sauf pour la première à  $(x = \pm a)$  est satisfaite.

$$\Delta \left( \frac{d\Psi}{dx} \right) = \frac{-2m\beta}{\hbar^2} \Psi(\pm a) \quad (\text{II-51})$$

A  $(x = -a)$

$$\begin{aligned} \Delta \left( \frac{d\Psi}{dx} \right) &= ik [C e^{-ika} - D e^{ika} - A e^{-ika} + B e^{ika}] \\ &= \frac{-2m\beta}{\hbar^2} (A e^{-ika} + B e^{ika}) \end{aligned} \quad (\text{II-52})$$

De même, en  $(x = a)$ , nous avons

$$\begin{aligned} \Delta \left( \frac{d\Psi}{dx} \right) &= ik [F e^{ika} - C e^{ika} + D e^{-ka}] \\ &= \frac{-2m\beta}{\hbar^2} (F e^{ika}) \end{aligned} \quad (\text{II-53})$$

Il nous reste quatre équations à cinq inconnues qui sont  $A$ ,  $B$ ,  $C$ ,  $D$  et  $F$ . Le système d'équations qui est constitué des constantes peut être exprimé en termes de la constante  $A$ . Il est donc algébriquement simple à manipuler et à résoudre. L'utilisation d'un logiciel pour ce faire nous évitera un travail laborieux. Les résultats sont les suivants :

$$B = \frac{-iy[2y \sin(2ka) - 4k \cos(2ka)]}{y^2(e^{i4ka} - 1) + 4k(k - iy)} A \quad (\text{II-54})$$

$$C = \frac{-i2k(y + i2k)}{y^2(e^{i4ka} - 1) + 4k(k - iy)} A \quad (\text{II-55})$$

$$D = \frac{i2ky e^{i2ka}}{y^2(e^{i4ka} - 1) + 4k(k - iy)} A \quad (\text{II-56})$$

$$F = \frac{4k^2}{y^2(e^{i4ka}-1)+4k(k-iy)} A \quad (\text{II-57})$$

$$\text{Ou } y = \frac{2m\beta}{\hbar^2}.$$

La relation du coefficient de réflexion ( $R$ ) est :

$$R = \frac{|B|^2}{|A|^2} = \frac{2y^2(2k \cos(2ka) - y \sin(2ka))^2}{8k^4 + 4k^2y^2 + y^4 - 4ky^3 \sin(4ka) + y^2 \cos(4ka)[4k^2 - y^2]} \quad (\text{II-58})$$

De même, le coefficient de transmission ( $T$ ) est :

$$T = \frac{|F|^2}{|A|^2} = \frac{8k^4}{8k^4 + 4k^2y^2 + y^4 - 4ky^3 \sin(4ka) + y^2 \cos(4ka)[4k^2 - y^2]} \quad (\text{II-59})$$

Il est facile de vérifier que :

$$R + T = 1 \quad (\text{II-60})$$

Les taux de réflexion interne et de transmission peuvent être calculés de la même manière

$$T_{(internal)} = \frac{|C|^2}{|A|^2} = \frac{2y^2k^2 + 8yk^4}{8k^4 + 4k^2y^2 + y^4 - 4ky^3 \sin(4ka) + y^2 \cos(4ka)[4k^2 - y^2]} \quad (\text{II-61})$$

$$R_{(internal)} = \frac{|D|^2}{|A|^2} = \frac{2y^2k^2}{8k^4 + 4k^2y^2 + y^4 - 4ky^3 \sin(4ka) + y^2 \cos(4ka)[4k^2 - y^2]} \quad (\text{II-62})$$

En fait,

$$R_{(internal)} = T + T_{(internal)} \quad (\text{II-63})$$

Ce qui signifie que la somme des probabilités de ce qui est réfléchi par le second puits et de ce qui est transmis par celui-ci est égal à la probabilité de ce qui est transmis par le premier puits. Le premier rapport représente l'écoulement vers la droite après le premier puits.  $\delta$ -fonction, tandis que le second représente le flux vers la gauche, qui est évidemment plus petit que le premier.

Cette approche est logique, puisque nous nous attendons à ce que le flux principal arrive de la gauche, et que de ce qui est transmis par le premier puits, des fractions partielles seront transmises par le second puits et s'échapperont, tandis que certaines seront réfléchies vers le premier puits.

# *Conclusion générale*

### **CONCLUSION GENERALE :**

Un des objectifs de ce travail consiste à résoudre l'équation de Schrödinger dans le cadre du modèle de Kronig-Penney et du modèle du potentiel double delta de Dirac pour, afin de trouver la structure des bandes d'énergie et d'examiner les propriétés de transport d'un superréseau, ou dans un cristal avec un potentiel périodique.

Dans un premier lieu, nous nous sommes intéressés à étudier le modèle de Kronig-Penney, où nous avons utilisé le théorème de Bloch et les techniques classiques de la mécanique quantique pour effectuer cette étude. Nous avons constaté que le déplacement de l'électron, dans un réseau périodique de puits de potentiel carrés, induit l'apparition de bandes d'énergie séparées les unes des autres par des bandes d'énergie interdite, et que les fonctions d'onde associées avaient la forme d'ondes stationnaires qui s'étendent sur tout le réseau.

L'étude du modèle du double puits de potentiel delta de Dirac, qui représente un cas limite du modèle de Kronig-Penny, nous a permis d'analyser l'état de diffusion et de calculer coefficient de réflexion et coefficient de transmission. On a trouvé que la probabilité d'être transmis par le premier puits est égale à la somme des probabilités d'être réfléchi par le deuxième puits et étant transmis à travers celui-ci.

# *Références bibliographiques*

## Reference bibliographies

- [1]. Al-Jaber S. M., An-Najah J. Res., 22 167. (2008)
- [2]. Von Felix Bloch. Über quantenmechanik der electronen in kristallgittern. Z.Physik,(1928).
- [3]. R. de L.Kronig and W.G. Penney. Quantum mechanics of electrons in crystal lattices.Proc. R. Soc. Lond., (1930)
- [4]. Neil W. Ashcroft, N. David Mermin, Physique des solides [détail des éditions]
- [5]. O. Madelung, Introduction to Solid State Physics, Springer. ISBN 0-387-08516-5. (1981)
- [6]. Charles Kittel (trad. Nathalie Bardou, Évelyne Kolb), Physique de l'état solide [« Solidstate physics»], [détail des éditions] (1998)
- [7]. Yannick MERLE, Etude de la dispersion électronique dans les matériaux périodiques diélectriques bidimensionnels, Thèse de doctorat n° 47-2003, Université de Limoges, Novembre (2003)
- [8]. <http://www.futura-sciences.com/magazines/matiere/infos/dico/d/chimie-theorie-bandes-5040/>.
- [9]. [www.theo.phys.ulg.ac.be/wiki/uploads/c/c5/12-Kronig-Penney](http://www.theo.phys.ulg.ac.be/wiki/uploads/c/c5/12-Kronig-Penney)
- [10] P.W.Anderson. Absence of diffusion in certain random lattices. Physical Review,(1958).

# *Annexe*

# Théorie des bandes

En physique de l'état solide, la **théorie des bandes** est une modélisation des valeurs d'énergie que peuvent prendre les électrons d'un solide à l'intérieur de celui-ci. De façon générale, ces électrons n'ont la possibilité de prendre que des valeurs d'énergie comprises dans certains intervalles, lesquels sont séparés par des **bandes d'énergie interdites** (ou **bandes interdites**). Cette modélisation conduit à parler de **bandes d'énergie** ou de **structure de bandes**.

## 1. Niveau de Fermi

L'occupation des différents états d'énergie par les électrons suit la distribution de Fermi-Dirac. Il existe une énergie caractéristique, le niveau de Fermi, qui fixe, lorsque le matériau est à une température de zéro kelvin, le niveau d'énergie jusqu'où on trouve les électrons, c'est-à-dire le niveau d'énergie du plus haut niveau occupé. Le niveau de Fermi représente le potentiel chimique du système. Son positionnement dans le diagramme des bandes d'énergie est relié à la façon dont les bandes sont occupées.

- Dans les conducteurs, le niveau de Fermi est dans une bande permise qui est dans ce cas la bande de conduction. Les électrons peuvent alors se déplacer dans le système électronique, et donc circuler d'atomes en atomes.
- Dans les isolants et les semi-conducteurs, le niveau de Fermi est situé dans la bande interdite qui sépare les bandes de valence et de conduction.

## 2. Bandes de valences et bandes de conduction

Dans un atome isolé, l'énergie des électrons ne peut posséder que des valeurs discrètes et bien définies, par contraste au continuum d'énergie dans le cas d'un électron parfaitement libre (non lié à un atome). Dans un solide, la situation est intermédiaire : l'énergie d'un électron peut avoir n'importe quelle valeur à l'intérieur de certains intervalles. Cette propriété conduit à dire que le solide possède des bandes d'énergies permises, séparées par des bandes interdites. Cette représentation en bandes d'énergie est une représentation simplifiée et partielle de la densité d'états

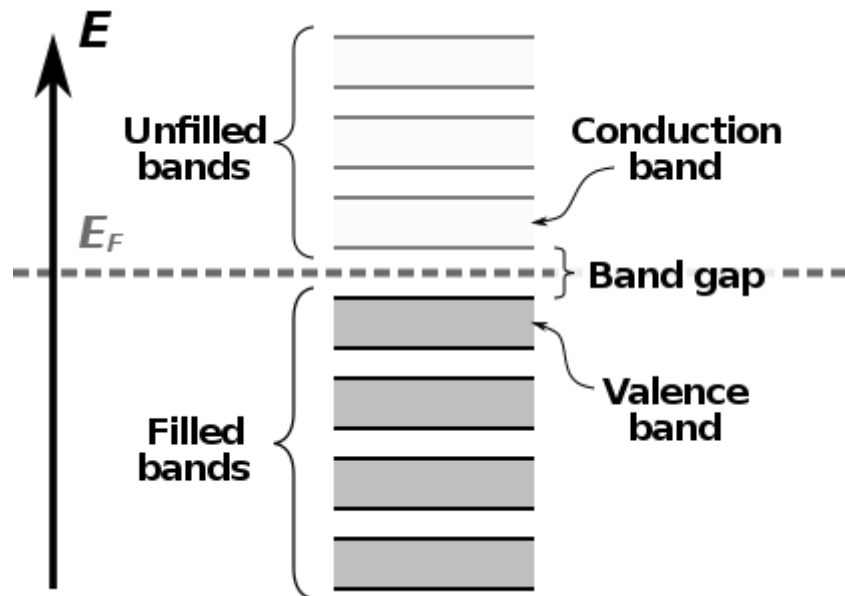
électroniques. Les électrons du solide se répartissent dans les niveaux d'énergie autorisés ; cette répartition dépend de la température et obéit à la statistique de Fermi-Dirac.

Lorsque la température du solide tend vers le zéro absolu, deux bandes d'énergie permises jouent un rôle particulier. La dernière bande complètement remplie est appelée « bande de valence ». La bande d'énergie permise qui la suit est appelée « bande de conduction ». Elle peut être vide ou partiellement remplie. L'énergie qui sépare la bande de valence de la bande de conduction est appelée le « gap » (fossé, interstice en anglais, bande interdite en français).

Les électrons de la bande de valence contribuent à la cohésion locale du solide (entre atomes voisins) et sont dans des états localisés. Ils ne peuvent pas participer aux phénomènes de conduction électrique. À l'inverse, les électrons de la bande de conduction sont délocalisés. Ce sont ces électrons qui participent à la conduction électrique. Les propriétés électroniques du solide dépendent donc essentiellement de la répartition des électrons dans ces deux bandes, ainsi que de la valeur du gap : dans le cas des isolants, les deux bandes sont séparées par un gap important. Pour les conducteurs, la bande de conduction est partiellement occupée, ce qui permet aux électrons de cette bande de passer aux niveaux d'énergies supérieures, sans violer le principe d'exclusion de Pauli, et participer ainsi à la conduction. Les semi-conducteurs possèdent quant à eux un gap suffisamment faible pour que des électrons aient une probabilité non négligeable de le franchir par simple excitation thermique lorsque la température augmente.

### **3. Ecart de bandes**

Dans les semi-conducteurs et les isolants, les deux bandes sont séparées par une bande interdite, tandis que dans les semi-métaux, les bandes se chevauchent. Une bande interdite est une plage d'énergie dans un solide où aucun état électronique ne peut exister en raison de la quantification de l'énergie. Dans le concept de bandes, l'écart d'énergie entre la bande de valence et la bande de conduction est la bande interdite. La conductivité électrique des non-métaux est déterminée par la susceptibilité des électrons à être excités de la bande de valence à la bande de conduction.



*Structure de bande de semi -conducteur*

Selon la façon dont ces bandes sont réparties, il est possible d'expliquer au moins schématiquement les différences de comportement électrique entre un isolant, un semi-conducteur et un conducteur.

#### 4. Métal, isolant et semi-conducteur

Lorsque la température tend vers 0 kelvin, on distingue donc trois cas selon le remplissage des bandes et la valeur du gap.

##### Premier cas

la bande de conduction est vide et le gap est grand (de l'ordre de 10 eV par exemple). Le solide ne contient alors aucun électron capable de participer à la conduction. Le solide est isolant.

##### Deuxième cas

la bande de conduction est vide mais le gap est plus faible (de l'ordre de 1 à 2 eV). Le solide est donc isolant à température nulle, mais une élévation de température permet de faire passer des électrons de la bande de valence à la bande de conduction. La conductivité augmente avec la température : c'est la caractéristique d'un semi-conducteur.

**Troisième cas**

la bande de conduction est partiellement occupée, même à une température de zéro kelvin, alors un faible champ électrique peut faire passer un électron aux niveaux d'énergies supérieurs, sans dépenser beaucoup d'énergie, le solide est alors conducteur.