Correction TD N°4

Exo.1

1) Système d'équations

L'équation aux valeurs propres

$$\left.\begin{array}{r} H|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle \\ |\Psi\rangle = C_1|1\mathrm{S}\rangle_1 + C_2|1\mathrm{S}\rangle_2 \end{array}\right\} \Longrightarrow \; C_1H|1\mathrm{S}\rangle_1 + C_2H|1\mathrm{S}\rangle_2 = C_1E|1\mathrm{S}\rangle_1 + C_2E|1\mathrm{S}\rangle_2 \qquad (1)$$

${}_1\langle 1S|\ \mathrm{x}\ (1) \ \Longrightarrow$

$$C_1\ {}_1\langle 1S|H|1S\rangle_1 + C_2\ {}_1\langle 1S|H|1S\rangle_2 = C_1E\ {}_1\langle 1S|1S\rangle_1 \ + C_2E\ {}_1\langle 1S|1S\rangle_2$$

D'après les notations données, on a :

$$E_{1s}C_1 - V_2C_2 = EC_1 \quad (2)$$

${}_2\langle 1S|\ \mathrm{x}\ (1) \ \Longrightarrow$

$$-V_2C_1 + E_{1s}C_2 = EC_2 \qquad (3)$$

(2) et (3)

$$\left.\begin{array}{rr} (E_{1s} - E)C_1 - V_2C_2 = 0 & (4) \\ -V_2C_1 + (E_{1s} - E)C_2 = 0 & (5) \end{array}\right\}$$

2) Valeurs propres

Ce système séculaire n'a de solutions que dans le cas où son déterminant est nul.

$$\begin{vmatrix} (E_{1s} - E) & -V_2 \\ -V_2 & (E_{1s} - E) \end{vmatrix} = 0$$

$$(E_{1s} - E)(E_{1s} - E) - V_2^2 = 0$$

$$[E_{1s} - E - V_2][E_{1s} - E + V_2] = 0$$

$$E = \begin{cases} E_{1s} - V_2 & \longrightarrow E_l \quad (\text{énergie liante}) \qquad (6) \\ E_{1s} + V_2 & \longrightarrow \ E_a\ (\text{énergie antiliante}) \qquad (7) \end{cases}$$

3) Fonctions propres

a) E=E$_l$=E$_{1s}$ – V$_2$

Portons cette valeur dans (4) et (5), on obtient:

$$\left.\begin{array}{r} (E_{1s} - E_{1S} + V_2)C_1 - V_2C_2 = 0 \\ -V_2C_1 + (E_{1s} - E_{1S} + V_2)C_2 = 0 \end{array}\right\}$$

$$\left.\begin{array}{r} (E_{1s} - E_{1S} + V_2)C_1 - V_2C_2 = 0 \\ -V_2C_1 + (E_{1s} - E_{1S} + V_2)C_2 = 0 \end{array}\right\}$$

$$\left.\begin{array}{r} V_2C_1 - V_2C_2 = 0 \\ -V_2C_1 + V_2C_2 = 0 \end{array}\right\} \Longrightarrow C_1 = C_2 \qquad (8)$$

b) $E=E_l=E_{1s}+V_2$

$$\left.\begin{array}{r}-V_2C_1-V_2C_2=0\\-V_2C_1-V_2C_2=0\end{array}\right\}\Rightarrow C_2=-C_1 \qquad (9)$$

- Pour **$E=E_l=E_{1s}-V_2 \Rightarrow C_1=C_2$**

$$|\Psi\rangle = C_1\left[|1S\rangle_1+|1S\rangle_2\right]$$

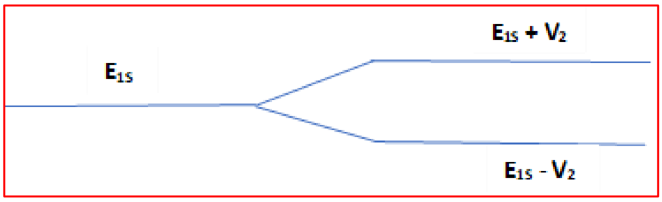
$$\langle\Psi|\Psi\rangle = 1 = \left[C_1^* \quad C_1^*\right]\begin{bmatrix}C_1\\C_1\end{bmatrix} = C_1^*C_1+C_1^*C_1 = 2\,C_1^2 \;\Rightarrow\; C_1=\frac{1}{\sqrt{2}}$$

$$|\Psi\rangle_l = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[|1S\rangle_1+|1S\rangle_2\right]$$

De même :

$$|\Psi\rangle_a = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[|1S\rangle_1-|1S\rangle_2\right]$$

4) Diagramme énergétique



5) Signification physique de C1 et C2

C_1^2= Probabilité de présence de l'électron sur le 1er atome

C_2^2= Probabilité de présence de l'électron sur le 2ème atome

6) Valeurs propres symétrique et antisymétrique

- **Valeur propre correspondant à la combinaison symétrique**

$E=E_l=E_{1s}-V_2$ correspond à $C_1=C_2$

- **Valeur propre correspondant à la combinaison antisymétrique**

$E=E_l=E_{1s}+V_2$ correspond à $C_2=-C_1$

Exo.2

1) Déterminant séculaire

L'équation aux valeurs propres est :

$$H\xi^i(z) = E\xi^i(z) \qquad (1)$$

$$\xi^i(z) = a_i\xi_1(z) + b_i\xi_2(z)$$

En adoptant la notation de Dirac :

$$|\xi^i(z)\rangle = a_i|\xi_1(z)\rangle + b_i|\xi_2(z)\rangle \qquad (2)$$

En reportant (2) dans (1) et en multipliant à gauche par $|\xi_1\rangle$ et en intégrant dans tout l'espace.

En refaisant la même chose avec $|\xi_2\rangle$, on obtient l'équation :

$$\left.\begin{array}{ll}(E_1+S-E)a_i+[(E_1-E)r+t]b_i=0 & (3)\\ [(E_1-E)r+t]a_i+\ (E_1+S-E)b_i=0 & (4)\end{array}\right\}$$

Le système (3) et (4) ne peut avoir de solutions autre que la solution banale '0' que si le déterminant est nul.

$$\Delta=\begin{vmatrix}(E_1+S-E) & (E_1-E)r+t\\ (E_1-E)r+t & (E_1+S-E)\end{vmatrix}=0$$

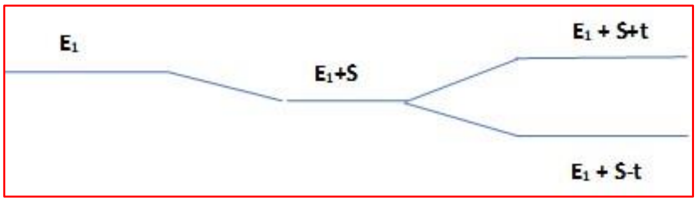
2) Valeurs propres

$$\Delta=0\ \Rightarrow\ (E_1+S-E)^2-[(E_1-E)r+t]^2=0$$

Si on néglige le recouvrement r, on obtient :

$$(E_1+S-E)^2-t^2=0\Rightarrow (E_1+S-E-t)(E_1+S-E+t)=0$$

Ce qui donne :$E=\begin{cases}E_1+S+t\\ E_1+S-t\end{cases}$



3) Signification physique de a_i et b_i

a_i^2 : Donne la probabilité de présence dans SC_1

b_i^2 : Donne la probabilité de présence dans SC_2

4)Valeurs propres symétrique et antisymétrique

- **Valeur propre correspondant à la combinaison symétrique**

$E=E_1+S-t$

- **Valeur propre correspondant à la combinaison antisymétrique**

$E=E_1+S+t$

Exo.3

3.1. Pénétration $\bar{Z}_m$ en fonction de b

$$\bar{Z}_m=\langle\xi_0|z|\xi_0\rangle=\int_0^\infty z\left(\frac{b^3}{2}\right)^{\frac{1}{2}}z\,e^{-\frac{bz}{2}}z\left(\frac{b^3}{2}\right)^{\frac{1}{2}}z\,e^{-\frac{bz}{2}}dz=\frac{b^3}{2}\int_0^\infty z^3e^{-bz}dz=\frac{b^3}{2}\cdot\frac{3!}{b^4}=\frac{3}{b}$$

$$\bar{Z}_m=\frac{3}{b}$$

3.2.1. Valeurs propres de l'énergie cinétique

$$\langle E_C\rangle=\left\langle\xi_0\middle|-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dz^2}\middle|\xi_0\right\rangle=-\frac{\hbar^2}{2m}\int_0^\infty \xi_0(z)\frac{d^2}{dz^2}\xi_0(z)dz$$

$$\xi_0(z) = \left(\frac{b^3}{2}\right)^{\frac{1}{2}} z \Rightarrow \xi_0'(z) = \left(\frac{b^3}{2}\right)^{\frac{1}{2}} \left(1 - b\frac{z}{2}\right) e^{-\frac{bz}{2}} \Rightarrow \xi_0''(z) = \left(\frac{b^5}{2}\right)^{\frac{1}{2}} \left(-1 + b\frac{z}{4}\right) e^{-\frac{bz}{2}}$$

$$\langle E_C \rangle = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{b^4}{2}\int_0^\infty z\left(1 - b\frac{z}{4}\right) e^{-\frac{bz}{2}}\, dz$$

$$\langle E_C \rangle = -\frac{\hbar^2 b^4}{4m}\left[\int_0^\infty z e^{-bz} - \frac{b}{4}\int_0^\infty z^2 e^{-bz} dz\right]$$

$$\langle E_C \rangle = \frac{\hbar^2 b^2}{8m}$$

3.2.2. Valeurs propres de l'énergie potentielle

$$\langle V \rangle = \langle \xi_0 | V_{dep}(z) + V_{inv}(z) + V_{im}(z) | \xi_0 \rangle = -\frac{\hbar^2}{2m}\int_0^\infty \xi_0(z)\left(V_{dep}(z) + V_{inv}(z) + V_{im}(z)\right)\xi_0(z) dz$$

a) Calcul de $\langle \boldsymbol{V_{dep}} \rangle$

$$\langle V_{dep} \rangle = \langle \xi_0 | V_{dep}(z) | \xi_0 \rangle = \frac{b^3 e^2 N_{dep}}{2\,\varepsilon_s}\left[\underbrace{\int_0^\infty z^3 e^{-bz}}_{\frac{6}{b^4}} - \frac{1}{2z_d}\underbrace{\int_0^\infty z^4 e^{-bz} dz}_{\frac{24}{b^5}}\right]$$

$$\langle V_{dep} \rangle = \frac{3e^2 N_{dep}}{\varepsilon_s b}\left(1 - \frac{2}{bz_d}\right)\Bigg|_{b=\frac{3}{z_m}} = \frac{3e^2 N_{dep}}{\varepsilon_s b}\left(1 - \frac{2}{3}\frac{z_{m0}}{z_d}\right)$$

$$\left.\begin{array}{r}\text{Comme Zm0 est de l'ordre de quelques dizaines d'Å} \\ \text{Zd est de l'ordre de quelques µm}\end{array}\right\} \Rightarrow \frac{2}{3}\frac{z_{m0}}{z_d} \ll 1 \Rightarrow \langle V_{dep} \rangle = \frac{3e^2 N_{dep}}{\varepsilon_s b}$$

$$\langle V_{dep} \rangle = \frac{3e^2 N_{dep}}{\varepsilon_s b}$$

b) Calcul de $\langle \boldsymbol{V_{inv}} \rangle$

$$\langle V_{inv}(z) \rangle = \frac{e^2}{\varepsilon_s}\sum n_i\left[z + \int_0^z (z' - z)|\xi_i(z')|^2 dz'\right]$$

$$\langle V_{inv}(z) \rangle = \frac{b^3}{2}\frac{e^2}{\varepsilon_s}\int_0^\infty \sum n_i\left[z + \int_0^z (z' - z)|\xi_i(z')|^2 dz'\right] z^2 e^{-bz} dz$$

Si on se limite à la 1ère sous bande (la plus peuplée), $\sum n_i = n_0 = n_s$

$$\langle V_{inv}(z) \rangle = \frac{b^3}{2}\frac{e^2 n_s}{\varepsilon_s}\int_0^\infty \left[z + \frac{b^3}{2}\int_0^z (z' - z) z'^2 e^{-bz'} dz'\right] z^2 e^{-bz} dz$$

L'intégrale sur z'

$$I = \int_0^z z' e^{-bz'} dz' - z \int_0^z z'^2 e^{-bz'} dz'$$

$$I = \left[-\frac{z^2}{b^2} - 4\frac{z}{b^3} - \frac{6}{b^4}\right] e^{-bz} - 2\frac{z}{b^3} + \frac{6}{b^4}$$

$$\langle V_{inv}(z)\rangle = \frac{b^3}{2}\frac{e^2 n_s}{\varepsilon_s}\int_0^\infty \left(z + \frac{b^3}{2}\left(\left(-\frac{z^2}{b^2} - 4\frac{z}{b^3} - \frac{6}{b^4}\right) e^{-bz} - 2\frac{z}{b^3} + \frac{6}{b^4}\right)\right) z^2 e^{-bz} dz$$

$$\langle V_{inv}(z)\rangle = \frac{b^3}{2}\frac{e^2 n_s}{\varepsilon_s}\left(-\frac{b\,24}{2(2b)^5} - 2\frac{6}{(2b)^4} - \frac{3\;\,2}{b\,(2b)^3} + \frac{3}{b}\frac{2}{b^3}\right) = \frac{33}{16}\frac{e^2 n_s}{\varepsilon_s b} \approx 2\frac{e^2 n_s}{\varepsilon_s b}$$

$$\langle V_{inv}(z)\rangle = \frac{33}{16}\frac{e^2 n_s}{\varepsilon_s b} \approx 2\frac{e^2 n_s}{\varepsilon_s b}$$

c) Calcul de $\langle V_{im}\rangle$

$$\langle V_{im}\rangle = \frac{1}{4\pi\varepsilon_s}\frac{\varepsilon_s - \varepsilon_i}{\varepsilon_s + \varepsilon_i}\frac{e^2}{2}\frac{b^3}{2}\int_0^\infty z\, e^{-bz} dz$$

$$\langle V_{im}\rangle = \frac{e^2}{16\pi\varepsilon_s}\frac{\varepsilon_s - \varepsilon_i}{\varepsilon_s + \varepsilon_i} b$$

3.3. Expression de l'énergie totale

$$E = \langle E_C\rangle + \langle V_{dep}\rangle + \frac{1}{2}\langle V_{inv}\rangle + \langle V_{im}\rangle$$

N.B. : Le ½ vient du fait que le terme $\langle V_{inv}\rangle$ représente l'énergie d'interaction électron-électron, il faut donc le deviser par 2 pour ne pas le comptabiliser 2 fois.

Dans le cas où on néglige le potentiel image, l'expression précédente s'écrit :

$$E = \frac{\hbar^2 b^2}{8m} + \frac{3e^2 N_{dep}}{\varepsilon_s b} + \frac{e^2 n_s}{\varepsilon_s b}$$

$$E = \frac{\hbar^2}{8m} b^2 + \frac{3e^2}{\varepsilon_s}\left(N_{dep} + n_s/3\right)\frac{1}{b}$$

3.4. Expression du paramètre b

$$\frac{dE}{db} = \frac{\hbar^2}{8m} b - \frac{3e^2}{\varepsilon_s}\left(N_{dep} + \frac{n_s}{3}\right)\frac{1}{b^2} = 0 \implies$$

$$b = \left[\frac{12\, e^2 m}{\hbar^2 \varepsilon_s}\left(N_{dep} + n_s/3\right)\right]^{\frac{1}{3}}$$

3.5. Expression de Zm

$$Z_m = \frac{3}{b} = \left[\frac{27\,\hbar^2 \varepsilon_s}{12\,e^2 m\left(N_{dep} + n_s/3\right)}\right]^{\frac{1}{3}}$$

3.6. Valeur de Zm pour Ndep=10^{-11} cm^{-2}, ns=10^{12} cm^{-2}

Zm≈30 Å