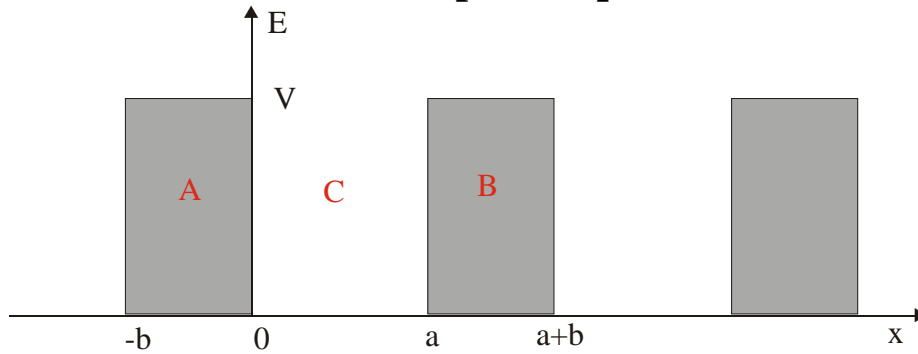


Potentiel périodique



Dans les zones A, B... l'équation de Schrödinger s'écrit : $\frac{d^2\Psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V)\Psi = 0$

Dans les zones C, elle s'écrit : $\frac{d^2\Psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}E\Psi = 0$

On pose : $p^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(V - E)$ et $q^2 = \frac{2m}{\hbar^2}E$ **On se limite au cas $E < V$.**

La fonction d'onde globale est de la forme $\Psi(x) = h(x).e^{ikx}$ ($k =$ nombre d'onde).

Comme le potentiel est périodique, on doit avoir $h(x + l) = h(x)$. (avec $l = a + b$)

Dans la zone A, on a : $\Psi_A(x) = Ae^{px} + Be^{-px}$

Dans la zone C, on a : $\Psi_C(x) = Ce^{iqx} + De^{-iqx}$

Dans la zone B, on a : $\Psi_B(x) = h(x)e^{ikx}$ or $\Psi_A(x - l) = h(x - l)e^{ik(x-l)}$

Soit $Ae^{p(x-l)} + Be^{-p(x-l)} = h(x-l)e^{ik(x-l)} = h(x)e^{ik(x-l)} = h(x)e^{ikx}.e^{-ikl} = \Psi_B(x).e^{-ikl}$

Donc $\Psi_B(x) = e^{ikl}(Ae^{p(x-l)} + Be^{-p(x-l)})$

On écrit la continuité de la fonction d'onde et de sa dérivée pour $x = 0$.

$$\Psi_A(0) = \Psi_C(0) \quad \text{et} \quad \left. \frac{d\Psi_A(x)}{dx} \right|_{x=0} = \left. \frac{d\Psi_C(x)}{dx} \right|_{x=0}$$

On tire : $A + B = C + D$ et $p(A - B) = iq(C - D)$

On écrit la continuité de la fonction d'onde et de sa dérivée pour $x = a$.

$$\Psi_B(a) = \Psi_C(a) \quad \text{et} \quad \left. \frac{d\Psi_B(x)}{dx} \right|_{x=a} = \left. \frac{d\Psi_C(x)}{dx} \right|_{x=a}$$

On tire : $Ce^{iqa} + De^{-iqa} = e^{ikl}(Ae^{-pb} + Be^{pb})$

et $iq(Ce^{iqa} - De^{-iqa}) = pe^{ikl}(Ae^{-pb} - Be^{pb})$

On obtient un système de 4 équations à 4 inconnues qui admet une solution si le déterminant de la matrice des constantes est nul.

Après un long et laborieux calcul, on tire :

$$\cos(kl) = \cos(qa).ch(pb) + \frac{1}{2} \left(\frac{p}{q} - \frac{q}{p} \right) \sin(qa).sh(pb)$$

Les valeurs possibles de k sont données par la relation ci-dessus. Or p et q dépendent de l'énergie E . Comme le cosinus doit être compris entre $+1$ et -1 , toutes les valeurs de E ne sont pas autorisées.

Les valeurs possibles de l'énergie forment des bandes permises séparées par des bandes interdites.