

# DS PHYSIQUE DU SOLIDE - 19 MARS 2020

## Exercice

$$1) -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Phi = E \Phi$$

$$2) -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2} \varphi_y \varphi_z + \varphi_x \frac{\partial^2 \varphi_y}{\partial y^2} \varphi_z + \varphi_x \varphi_y \frac{\partial^2 \varphi_z}{\partial z^2} \right) = E \varphi_x \varphi_y \varphi_z$$

On divise par  $\Phi$ . La division est valable si  $\varphi_x, \varphi_y, \varphi_z \neq 0$ . On peut montrer qu'on obtient le même résultat pour les valeurs de  $(x, y, z)$  telles que  $\Phi = 0$ .

On pose  $E = E_x + E_y + E_z$  tel que

$$\begin{cases} -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\varphi_x} \frac{\partial^2 \varphi_x}{\partial x^2} = E_x \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\varphi_y} \frac{\partial^2 \varphi_y}{\partial y^2} = E_y \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\varphi_z} \frac{\partial^2 \varphi_z}{\partial z^2} = E_z \end{cases}$$

On obtient  $\frac{\partial^2 \varphi_x}{\partial x^2} + k_x^2 \varphi_x = 0$  ; de même pour  $y$  et  $z$

$$\Leftrightarrow \boxed{E = \frac{\hbar^2}{2m} (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2)}$$

$$3) \varphi_z(z) = A_z e^{i k_z z} + B_z e^{-i k_z z}$$

$$\varphi_z(0) = A_z + B_z \Rightarrow B = -A$$

$$\varphi_z(a) = A_z \cdot 2i \sin(k_z a) = 0$$

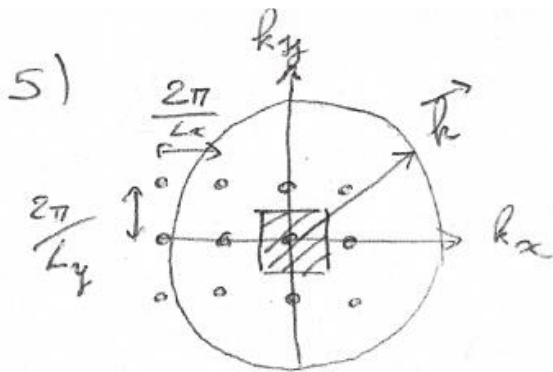
$$\boxed{k_z = \frac{m_z \pi}{a}} \quad m_z \in \mathbb{N}^* \quad \text{et} \quad E_z = \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{m_z \pi}{a} \right)^2$$

$$4) \varphi_x(0) = \varphi_x(L_x) \quad \text{et} \quad \varphi_x = A_x e^{i k_x x} \quad (B_x = 0 \text{ car BVK on néglige l'onde réfléchi})$$

$$1 = e^{i k_x L_x}$$

$$\boxed{k_x = \frac{2\pi m_x}{L_x}} \quad \text{avec} \quad m_x \in \mathbb{Z}^* \quad \boxed{E_x = \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{2\pi m_x}{L_x} \right)^2}$$

$$\text{De même,} \quad \boxed{k_y = \frac{2\pi m_y}{L_y}} \quad m_y \in \mathbb{Z}^* \quad E_y = \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{2\pi m_y}{L_y} \right)^2$$



$N(\vec{k})$  est le nombre d'états (o) dans le cercle de rayon  $\|\vec{k}\|$

$$N(\vec{k}) = \frac{\text{Aire du disque}}{\text{Surface par état}} = \frac{\pi R^2}{\left(\frac{2\pi}{L}\right)^2}$$

$$N(\vec{k}) = \frac{k^2 L^2}{4\pi}$$

6)  $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$  (avec  $k = k_x + k_y$ )  
 $E = E_x + E_y$

donc  $N(E) = \frac{L^2}{4\pi} \left( \frac{2mE}{\hbar^2} \right) \times 2 \frac{1}{L^2} = \frac{mE}{\pi \hbar^2}$   
 (le 2 est la dérivée de  $k^2$  par rapport à  $E$ )

~~$n(E)$~~   $n(E) = N'(E) = \frac{m}{\pi \hbar^2}$  ne dépend pas de  $E$ .

7)

$$\Delta E_x = E_2 - E_1 = \frac{\hbar^2}{2m^*} \left( \frac{2\pi}{L} \right)^2 (2^2 - 1^2) = \frac{(1,1 \cdot 10^{-34})^2 \times 4\pi^2 \times 3}{2 \times 0,041 \times 9,1 \times 10^{-31} \times (10^{-2})^2}$$

$$= 1,92 \cdot 10^{-31} \text{ J} = 1,2 \cdot 10^{-12} \text{ eV} = \Delta E_y$$

$$\Delta E_z = \frac{\hbar^2}{2m^*} \left( \frac{\pi}{a} \right)^2 (2^2 - 1^2) = \frac{(1,1 \cdot 10^{-34})^2}{2 \times 0,041 \times 9,1 \times 10^{-31} \times (10^{-8})^2} \times \pi^2 \times 3$$

$$= 4,8 \cdot 10^{-20} \text{ J} \approx 0,3 \text{ eV}$$

$\Rightarrow x, y$  prendent un continuum d'états  
 $z$  sous bande tous les 0,3 eV.

## Questions de cours

1. Réseau CFC avec 2 atomes par motif
2. Métal -  $E_F$  dans une bande d'états peuv. Isolant ;  $E_F$  dans le gap  
A. Isolant B. métal C. Semiconducteur (gap plus petit)
3. Espace réciproque : transformée de Fourier de l'espace réel.  
Equivalent de  $\vec{r}$  dans l'espace réciproque :  $\vec{k}$
4. Electron de valence : election sur les orbitales de nombre quantique principal le plus élevé (Reponse acceptable : couche d'énergie la plus élevée)  
Phosphore  $3s^2 3p^3$  :  $2+3 = 5$  électrons de valence
5. Une vibration du réseau cristallin  
Processus physique : capacité thermique, viscosité, acoustique, relax optique, ...