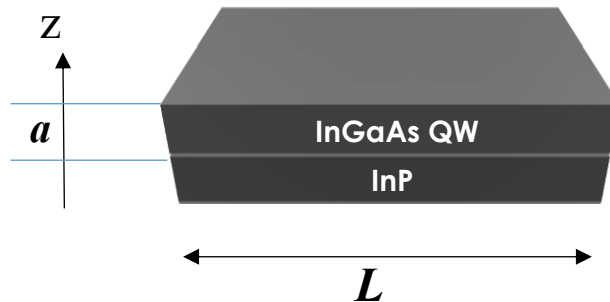


PHYSIQUE DU SOLIDE ET NANOSCIENCES

Exercice. Sous-bandes d'énergie dans un puits quantique



On fait croître un puits quantique (Quantum Well) d'InGaAs d'épaisseur a sur une surface d'InP par épitaxie par jets moléculaires (MBE). Lorsque les fractions d'atomes d'indium et de gallium dans la composition sont respectivement de 0.47 et 0.53, l'InGaAs possède le même paramètre de maille que l'InP. On parle alors d'une hétérostructure en accord de maille. Les électrons dans le puits sont considérés comme libres de se déplacer dans le plan (xOy). Par contre leur mouvement suivant la direction Oz est limité par l'épaisseur du puits ($0 \leq z \leq a$).

- 1) Ecrire l'équation de Schrödinger vérifiée par un électron dans le puits. On suppose que le potentiel à l'intérieur du puits est nul et que les électrons ont une masse m .
- 2) On cherche à résoudre cette équation par des solutions à variables séparées du type :

$$\Phi(x, y, z) = \varphi_x(x)\varphi_y(y)\varphi_z(z)$$

Développer l'équation de Schrödinger et montrer qu'elle peut s'exprimer sous la forme de trois équations différentielles indépendantes. On pourra poser :

$$k_x^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E_x \quad k_y^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E_y \quad k_z^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E_z$$

Quelle est l'expression de l'énergie totale E en fonction des composantes du vecteur d'onde k ?

- 3) En considérant que selon z la fonction d'onde φ_z vérifie l'équation

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \varphi_z}{\partial z^2} = E_z \varphi_z$$

donner l'expression de φ_z . En utilisant les conditions d'annulation de φ_z en $z = 0$ et $z = a$, donner les valeurs possibles de k_z et E_z .

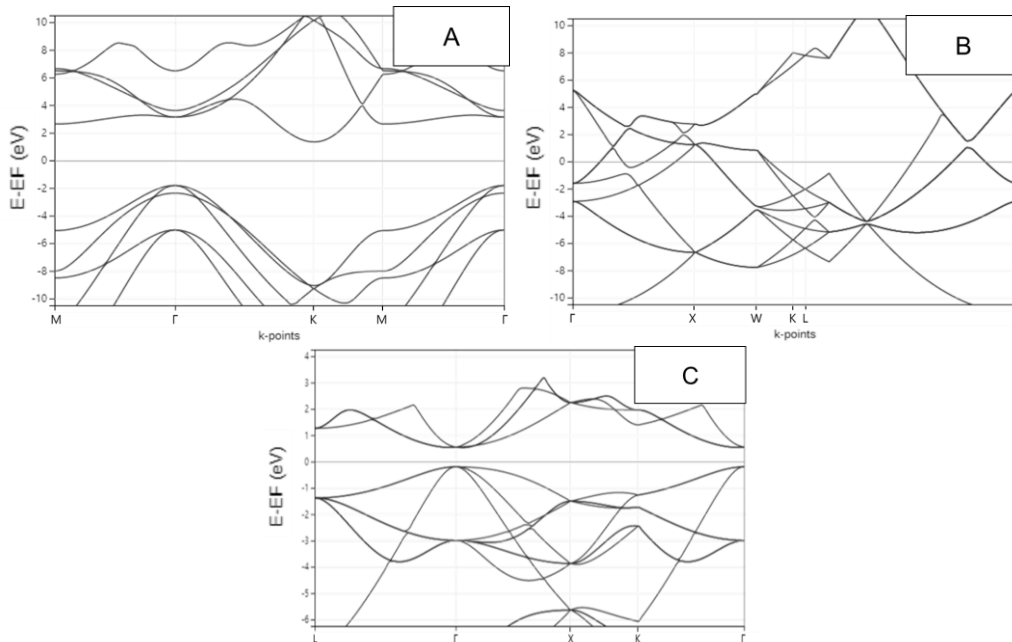
- 4) La taille de l'échantillon suivant x et y est $L_x = L_y \gg a$. On applique donc la condition aux limites périodique de Born-Von Karman à la fonction d'onde dans ces directions. Donner l'expression de φ_x et φ_y , et donner les valeurs possibles de k_x , k_y , E_x , et E_y .

- 5) Supposons que le puits quantique soit infiniment mince, correspondant au cas d'un gaz d'électrons libres bidimensionnel, et $L_x = L_y = L$. Cela correspond au cas où $\vec{k} = \vec{k}_x + \vec{k}_y$ et $\vec{k}_z = \vec{0}$. Calculer le nombre d'états $N(k)$ compris entre 0 et $k = \|\vec{k}\|$.
- 6) En déduire le nombre d'états énergie dans l'intervalle $[0, E]$ par unité de surface, $N(E)$. On rappelle que les électrons peuvent être dans 2 états de spins pour chaque état \vec{k} . En déduire la densité d'états électronique $n(E) = \frac{dN(E)}{dE}$ et vérifier qu'elle est constante en fonction de l'énergie.
- 7) Le puits quantique étudié a en réalité les dimensions suivantes : $a = 10 \text{ nm}$ et $L_x = L_y = 1 \text{ cm}$. Calculer, en électronvolts, la séparation entre les premiers niveaux d'énergie ΔE_x , ΔE_y et ΔE_z dans les trois directions de l'espace. La masse effective des électrons dans ce puits quantique est $m = 0.041m_e$. Dans quelles directions peut-on parler de quasi-continuum d'états ? Pourquoi peut-on dire que le spectre en énergie d'un puits quantique est constitué de sous-bandes d'énergie ?

Rappel : $\hbar = 1.1 \cdot 10^{-34} \text{ Js}$; $m_e = 9.1 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$; $1 \text{ eV} = 1.6 \cdot 10^{-19} \text{ J}$

Questions de cours

- 1) Donner le type de réseau et le motif de la structure cristallographique du silicium (appelé aussi structure diamant).
- 2) Quelle est la différence entre un métal et un isolant, d'un point de vue structure de bandes ? Indiquer, pour les schémas A, B et C suivants, lequel correspond à un métal, un semiconducteur et un isolant.



- 3) Qu'est-ce que l'espace réciproque ? Dans l'espace réel, on indique la position par un vecteur \vec{r} de coordonnées (x, y, z) . Quel est l'équivalent de \vec{r} dans l'espace réciproque ?
- 4) Qu'est-ce qu'un électron de valence ? Donner le nombre d'électrons de valence du phosphore, dont la configuration électronique est $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^3$.
- 5) Qu'est-ce qu'un phonon ? Donner au moins un exemple de processus physique dans lequel les phonons ont un rôle.