

# Devoir maison

## Physique des matériaux

INSA Rennes – 3 SGM

Tanneguy Blandin

Mars 2021

### Exercice 1 : Cristal bidimensionnel

#### A – Réseau

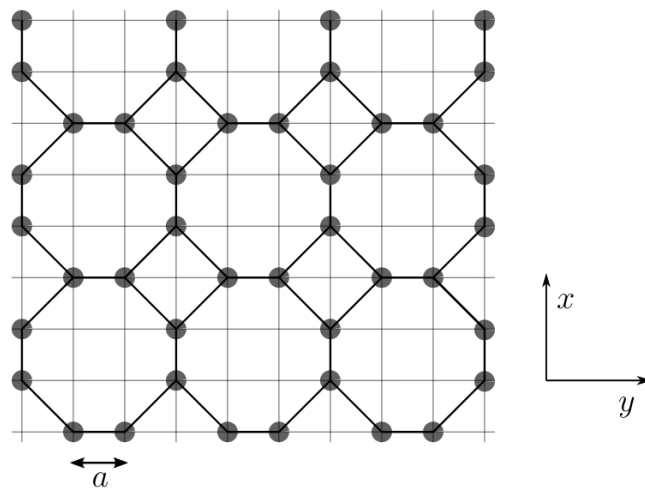


FIGURE 1 – Cristal 2D

1 Donner les coordonnées des vecteurs  $(\vec{a}, \vec{b})$  qui définissent une maille primitive de ce réseau dans le repère  $Oxy$  orthonormé, en fonction de  $a_0$ .

La maille est une maille carrée, les vecteurs de la maille élémentaire de ce réseau sont  $\vec{a} = (3a_0, 0)$  et  $\vec{b} = (0, 3a_0)$ . Cependant, la maille primitive ne doit être constituée que d'un unique noeud du réseau. AHHH

2 Préciser la nature du réseau direct et son paramètre de maille  $a$

3 Préciser le motif associé à ce cristal : nombre d'atomes et position en fonction des vecteurs  $\vec{a}$  et  $\vec{b}$

4 Calculer l'aire de la maille unitaire, en fonction de  $a_0$

5 Calculer le nombre d'atomes par unité de surface. Application numérique en m.

6 Exprimer les coordonnées des vecteurs du réseau réciproque  $(\vec{a}^*, \vec{b}^*)$ , en fonction de  $a_0$  dans le repère  $Oxy$

7 Dessiner le réseau réciproque et la première zone de Brillouin

8 Dans la première zone de Brillouin, placer les points  $\Gamma$ ,  $X$  de coordonnées  $(\pi/a, 0)$  et  $M$  de coordonnées  $(\pi/a, \pi/a)$ .

## B – Bandes d'énergie

On suppose que l'énergie des électrons de conduction est représentée par :

$$E_c(\vec{k}) = \alpha - 2\gamma(\cos(k_x a) + \cos(k_y a)) \quad (1)$$

1. En prenant l'équation 1 pour définir l'énergie des électrons de conduction, nous pouvons calculer l'énergie aux points caractéristiques de la maille en prenant  $\alpha = 2.5 \text{ eV}$  et  $\gamma = 0.5 \text{ eV}$  :

- En  $\Gamma$  ( $\vec{k} = (0, 0)$ ), nous avons :  $E_{c\Gamma} = \alpha - 4\gamma = 0.5 \text{ eV}$ .
- En  $X$  ( $\vec{k} = (\pi/a, 0)$ ), nous avons :  $E_{cX} = \alpha = 2.5 \text{ eV}$ .
- En  $M$  ( $\vec{k} = (\pi/a, \pi/a)$ ), nous avons :  $E_{cM} = \alpha + 4\gamma = 4.5 \text{ eV}$ .

2. En déterminant la ou les composantes de  $\vec{k}$  qui varie ou varient en fonction de la direction dans laquelle nous nous déplaçons dans le cristal, nous pouvons réécrire la fonction  $\vec{k}$  pour chaque direction :

- Sur la direction  $\Gamma X$  ou  $\Delta$ , nous pouvons définir  $\vec{k}$  en fonction de  $x$  de la manière suivante :

$$\begin{aligned} [0, \frac{\pi}{a}] &\rightarrow [0, \frac{\pi}{a}]^2 \\ x &\mapsto \vec{k} = (x, 0) \end{aligned}$$

Nous pouvons donc définir la variation de l'énergie dans cette direction :

$$x \in [0, \frac{\pi}{a}] \quad E_{c\Delta} = \alpha - 2\gamma(1 + \cos(ax)) \quad (2)$$

- Sur la direction  $\Gamma M$ , nous pouvons définir  $\vec{k}$  en fonction de  $x$  de la manière suivante :

$$\begin{aligned} [0, \frac{\pi}{a}] &\rightarrow [0, \frac{\pi}{a}]^2 \\ x &\mapsto \vec{k} = (x, x) \end{aligned}$$

Nous pouvons donc définir la variation de l'énergie dans cette direction :

$$x \in [0, \frac{\pi}{a}] \quad E_{c\Gamma X} = \alpha - 4\gamma \cos(ax) \quad (3)$$

- Sur la direction  $XM$ , nous pouvons aussi définir  $\vec{k}$  en fonction de  $x$  :

$$\begin{aligned} [0, \frac{\pi}{a}] &\rightarrow [0, \frac{\pi}{a}]^2 \\ x &\mapsto \vec{k} = (\frac{\pi}{a}, x) \end{aligned}$$

Nous pouvons donc définir la variation de l'énergie dans cette direction :

$$x \in [0, \frac{\pi}{a}] \quad E_{cXM} = \alpha - 2\gamma(\cos(ax) - 1) \quad (4)$$

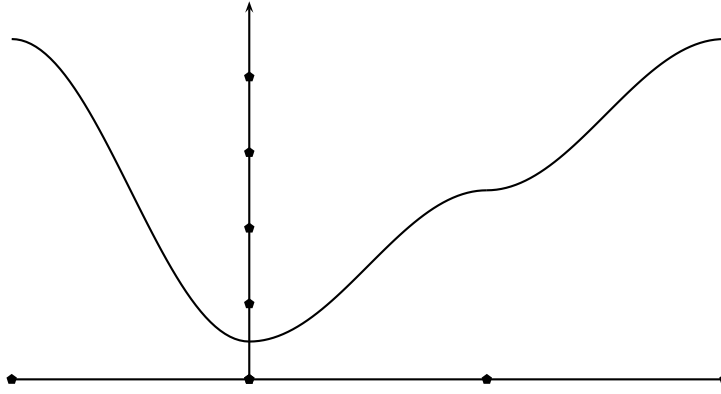


FIGURE 2 – Relation de dispersion

Nous pouvons représenter l'évaluation de l'énergie en fonction de la position sur les principales directions, c'est que que nous faisons sur la figure

3. Nous pouvons maintenant exprimer l'énergie dans un voisinage de  $\Gamma$  grâce à un développement limité :

$$\text{pour } k \text{ proche de } (0,0) \quad E(k_x, k_y) = \alpha - 4\gamma + 4a^2\gamma(k_x^2 + k_y^2) \quad (5)$$

Cette équation nous permet de définir la forme des lignes iso-énergie en fonction des directions des vecteurs d'ondes. Puisque nous considérons des lignes iso-énergie, nous posons  $E(k_x, k_y) = E_1$ .

Nous avons alors la relation suivante :

$$k_x^2 + k_y^2 = \frac{E_1 + 4\gamma - \alpha}{4a^2\gamma} \quad (6)$$

Cette relation correspond à l'équation d'un cercle, les lignes d'iso-énergie sont donc des cercles dans le domaines de vecteurs d'ondes. L'énergie est donc /isotrope/, ce qui nous permet de simplifier l'équation 5 en posant  $k$  comme la distance entre le point que l'on considère et le centre de la maille ( $k = \sqrt{k_x^2 + k_y^2}$ ) :

$$E(k) = \alpha - 4\gamma + 4a^2\gamma k^2 \quad (7)$$

4. À partir de la relation 7, nous pouvons calculer la masse effective des électrons au voisinage de  $\Gamma$ .

$$m^* = \frac{\hbar^2}{\frac{\partial^2 E}{\partial k^2}}$$

$$m^* = \frac{\hbar^2}{8a^2\gamma}$$

$m^* = \text{application numérique}$

## Exercice 2 : Méthode kp

1. Nous sommes en présence d'une équation aux valeurs propres qui peut s'écrire sous forme de matrice :  
Nous posons :

$$\hat{H}_{kp} = \begin{bmatrix} E_G + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} & Pk \\ Pk & \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \end{bmatrix} \quad |u_{n,k}\rangle = \begin{bmatrix} C_1 \\ C_2 \end{bmatrix}$$

Nous avons alors l'équation suivante, avec  $E$  un scalaire :

$$\hat{H} |u_{n,k}\rangle = E |u_{n,k}\rangle \Leftrightarrow \begin{bmatrix} E_G + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} & Pk \\ Pk & \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} C_1 \\ C_2 \end{bmatrix} = E \begin{bmatrix} C_1 \\ C_2 \end{bmatrix} \quad (8)$$

Nous pouvons réécrire cette relation sous la forme  $(\hat{H} - EI_2) |u_{n,k}\rangle = 0$ , or pour avoir une solution non-dégénérée à cette équation, il faut trouver une énergie  $E$  telle que l'image de la matrice  $\hat{H} - EI_2$  soit de 0, donc il faut en trouver un déterminant nul.

$$\begin{vmatrix} E_G + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} - E & Pk \\ Pk & \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} - E \end{vmatrix} = 0 \Leftrightarrow E^2 - E \left( E_G + 2 \left( \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \right) \right) + \left( \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \right)^2 + E_G \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} - P^2 k^2 = 0 \quad (9)$$

Nous calculons dans un premier temps le déterminant de ce polynôme du second degré en  $E$ , nous posons :  $P^2 k^2 = E_P \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0}$

$$\Delta = \left( E_G + 2 \left( \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \right) \right)^2 - 4 \left( \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \right)^2 - 4E_G \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + 4E_P \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0}$$

$$\Delta = E_G^2 + 4E_P \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0}$$

Nous pouvons donc maintenant utiliser l'équation de résolution des polynômes du second degré :

$$E_{c,v} = \frac{E_G}{2} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \pm \frac{1}{2} \sqrt{E_G^2 + E_P \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0}} \quad (10)$$

Les énergies  $E_G$  et  $E_P$  sont positives, tout comme le vecteur d'onde et la masse, la racine carrée présente dans l'équation 10 est donc réelle, ce qui correspond à la réalité. De plus, l'énergie de plus haut niveau semble correspondre à la bande de conduction et l'énergie la plus faible à la bande de valence, nous pouvons donc identifier les relations suivantes :

$$E_c = \frac{E_G}{2} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + \frac{E_G}{2} \sqrt{1 + 4 \frac{E_P}{E_G^2} \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0}} \quad (11)$$

$$E_v = \frac{E_G}{2} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} - \frac{E_G}{2} \sqrt{1 + 4 \frac{E_P}{E_G^2} \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0}} \quad (12)$$

**2.** Nous pouvons vérifier la validité de notre hypothèse précédente sur l'identité des bandes par un développement limité. Une bande qui présente une courbure positive est une bande de valence là où une bande qui présente une courbure positive est une bande de conduction.

L'objectif premier de notre développement limité est d'éliminer la racine carrée dans les équations 11 et 12. Nous avons donc besoin d'hypothèses sur les éléments présents dans cette racine. Nous supposons que  $\frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \ll \frac{E_G^2}{E_P}$  Donc nous avons  $\frac{E_P}{E_G^2} \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \ll 1$ . Nous pouvons alors réaliser l'approximation suivante :

$$\sqrt{1 + 4 \frac{E_P}{E_G^2} \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0}} \approx 1 + 2 \frac{E_P}{E_G^2} \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \quad (13)$$

En injectant la relation 13 dans les équations 11 et 12, nous obtenons de nouvelles expressions pour l'expression des énergies de conduction et de valence :

$$E_c = E_G + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \left( 1 + \frac{E_P}{E_G} \right) \quad (14)$$

$$E_v = \quad (15)$$

$$\text{TO BE CONTINUED} \quad (16)$$