

# Niveau de Fermi dans un SC Intrinsèque

On considère [un semiconducteur intrinsèque] à température quelconque.

1) On constate que [la bande de conduction] n'est pas totalement vide. Quel est le type de porteurs dans cette bande et d'où proviennent-ils.

2) Montrer que dans le cas de semiconducteurs de largeur de bande interdite (Gap) de l'ordre de l'eV, on peut confondre dans [certaines conditions] de Fermi-Dirac par la statistique de Maxwell-Boltzmann.

3) Montrer que la densité d'électrons de conduction  $n_c$  et la densité de trous de valence  $p_v$  peuvent se mettre sous la forme:

$$n_c = \int_{E_{min}}^E g_c(E) f(E) dE = \int_{E_{min}}^E g_c(E) e^{-\frac{E-E_F}{kT}} dE$$

$$= \int_{E_{min}}^{\infty} g_c(E) e^{-\frac{E-E_F}{kT}} dE \quad n = N_c \exp\left(-\frac{E_c - E_f}{kT}\right)$$

$$= \int_{E_c}^{\infty} 4\pi \left(\frac{2m^*}{h^2}\right)^{\frac{3}{2}} \sqrt{E-E_c} e^{-\frac{E-E_F}{kT}} dE \quad p = N_v \exp\left(-\frac{E_f - E_v}{kT}\right)$$

$$= 4\pi \left(\frac{2m^*}{h^2}\right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{(E_c-E_f)}{kT}} \quad E_c \text{ est le bas de la bande de conduction, } E_v \text{ le sommet de la bande de valence et } N_c$$

( $N_v$ ) la densité équivalente d'états de conduction (de valence). On définira l'expression de  $N_v$  et  $N_c$ .

4) Montrer que le produit  $n.p$  est donné par

$$n.p = N_c N_v \exp\left(-\frac{E_g}{kT}\right) = n_i^2$$

5) Déterminer la position du niveau de Fermi intrinsèque en fonction du gap, de  $kT$  et des masses effectives de conduction et de valence.

$$p = \int_{E_{min}}^{E_v} g_v(E) \cdot f_p(E) \cdot dE$$

$$f_p(E) = 1 - f_m(E) \approx 1 - e^{-\frac{E-E_F}{kT}}$$

$$f_p(E) \approx 1 - \frac{1}{1 + e^{\frac{E-E_F}{kT}}} = \frac{1}{1 + e^{\frac{E-E_F}{kT}}} \rightarrow \text{Approximation de MB.}$$

$$\text{Calculer: } n_i \times p_i = ? = n_i^2 \quad n_0 = p_0 = n_i \quad \text{Densité intrinsèque de porteurs}$$

$$N_c \cdot \exp\left(-\frac{E_c - E_f}{kT}\right) \times N_v \cdot \exp\left(-\frac{E_v - E_f}{kT}\right)$$

$$= N_c \cdot N_v \exp\left(-\frac{(E_c - E_v)}{kT}\right)$$

$$= N_c N_v \exp\left(-\frac{E_g}{kT}\right) = n_i^2$$

Densité intrinsèque  $n_i$

$$n_i = \sqrt{N_c N_v} \cdot \exp\left(-\frac{E_g}{2kT}\right)$$

$n_i$  si  $T \uparrow$

$n_i \uparrow$  si  $E_g \downarrow$

6. où est positionné  $E_f$ ?

$$n_0 = p_0 \rightarrow N_c \exp\left(-\frac{E_c - E_f}{kT}\right) = N_v \exp\left(-\frac{E_v - E_f}{kT}\right)$$

$$kT \cdot \ln \frac{N_c}{N_v} = -E_f + E_v - E_f + E_c$$

$$E_f = \frac{E_c + E_v}{2} + \frac{kT}{2} \ln \frac{N_v}{N_c} \approx \frac{E_c + E_v}{2}$$

$$E_{fi} = \frac{E_c + E_v}{2} + \frac{3}{4} kT \ln \left(\frac{m_v^*}{m_n^*}\right) \approx \frac{E_c + E_v}{2}$$

$\approx 500 \text{ meV}$  trop petit  $\approx 20 \text{ meV}$

## Densité d'électrons de conduction dans un S.C extrinsèque.

On a montré que dans le cas de semiconducteurs non dégénérés, les densités d'électrons et de trous peuvent se mettre sous la forme:

$$n = N_c \exp\left(-\frac{E_c - E_f}{kT}\right)$$

$$p = N_v \exp\left(-\frac{E_f - E_v}{kT}\right)$$

où  $N_C$  et  $N_V$  sont les densités équivalentes d'états de conduction et de valence respectivement. Soit  $E_D$  et  $E_A$  les niveaux énergétiques des atomes donneurs ( en densité  $N_D$ ) et accepteurs ( $N_A$ ) introduits dans le matériau.

1) Montrer que la probabilité d'occupation du niveau  $E_D$  se met sous la forme:

$$f(E_d) = \frac{1}{2 + e^{\frac{E_d - E_f}{kT}}}$$

On montre que la probabilité de non occupation du niveau  $E_A$  s'écrit:

$$f(E_a) = \frac{1}{2 + e^{\frac{E_f - E_a}{kT}}}$$

2) Vérifier que le nombre d'électrons piégés sur le niveau donneur s'écrit:

$$n_D = \frac{1}{1 + \frac{1}{2} e^{\frac{E_d - E_f}{kT}}}$$

et que le nombre d'électrons piégés sur le niveau  $E_A$  s'écrit:

$$n_a = \frac{1}{1 + 2e^{\frac{E_a - E_f}{kT}}}$$

3) Si on définit par  $N_V$  le nombre d'électrons dans la bande de valence, montrer que le nombre d'électrons total (à 0 K) dans le semiconducteur s'écrit:

$$N_V + N_D$$



## Modèle de Kronig Penney- suite-

Au cours du TD Kronig -Penney, nous avons montré que les bandes d'énergie permises pouvaient être déterminées par la résolution de l'équation : équation.

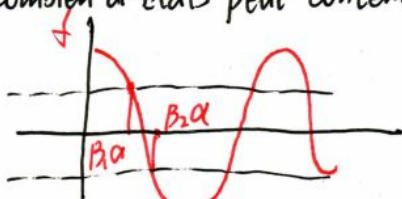
$$\cos(Ka) = \frac{\alpha^2 - \beta^2}{2\alpha\beta} \sin(\beta c) \operatorname{sh}(\alpha b) + \cos(\beta c) \operatorname{ch}(\alpha b)$$

avec  $\alpha = \left[ \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2} \right]^{1/2}$  et  $\beta = \left[ \frac{2mE}{\hbar^2} \right]^{1/2}$

L'équation se simplifie en  $\cos(Ka) = P \frac{\sin(\beta a)}{\beta a} + \cos(\beta c)$  avec  $P = \frac{m\eta a}{\hbar^2}$

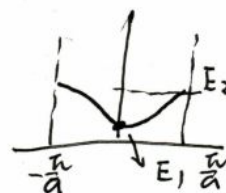
1. Représenter graphiquement l'évolution du deuxième membre de l'égalité en fonction de  $\beta a$  avec  $P = \frac{3\pi}{2}$ . En déduire l'existence de bandes d'énergie alternativement permises et interdites. Combien d'états électroniques peut contenir chacune des bandes autorisées ? Remarque.
2. En opérant par approximations successives, évaluer la largeur énergétique de la première bande autorisée et de la bande qui la suit avec  $P = \frac{3\pi}{2}$  et  $a = 0.3 \text{ nm}$ .
3. Donner l'expression littérale puis la valeur numérique de la masse effective  $m^*$  des particules au sommet de la première bande autorisée.

Combien d'Etats peut contenir une bande d'Energie.



$$E_1 = \frac{\hbar^2 \beta_1^2}{2m}$$

$$E_2 = \frac{\hbar^2 \beta_2^2}{2m}$$



les extrema de Bandes sont déterminés.

pour  $\cos(ka) = \pm 1 \Leftrightarrow ka = \pm \pi$ .

$-\pi < ka < +\pi$  mais

$k = \frac{2\pi}{L} \times p$

$-\pi < \frac{2\pi}{N} p \leq \pi$

$-\frac{N}{2} \leq p \leq \frac{N}{2}$

Ponc  $p = N$   $-\frac{N}{2} < p < \frac{N}{2}$

donc si  $N$  est le nombre de mailles (Atomes) il y aura  $N$  valeurs discrètes du tseado

$k$  et donc  $N$  valeurs discrètes de l'energie

supposons  $L = 1 \text{ cm} = 10^8 \text{ Å}$   $a \approx 10 \text{ Å}$

$1D: N = 10^7 \gg 1$   $3D: N^3 = 10^{24} / \text{cm}^3$

le nombre d'atomes  
 $L = N \times a$

$\frac{L}{a} = N$

④ système à 4 équations et 4 inconnues.

$$\begin{aligned} A+B &= C+D \\ i\alpha(A-B) &= \beta(C-D) \\ Ae^{i\alpha c} + Be^{-i\alpha c} &= (Ce^{\beta b} + De^{-\beta b})e^{i\alpha a} \\ i\alpha(Ae^{-i\alpha c} - Be^{i\alpha c}) &= \beta e^{i\alpha a}(Ce^{\beta b} - De^{-\beta b}) \end{aligned}$$

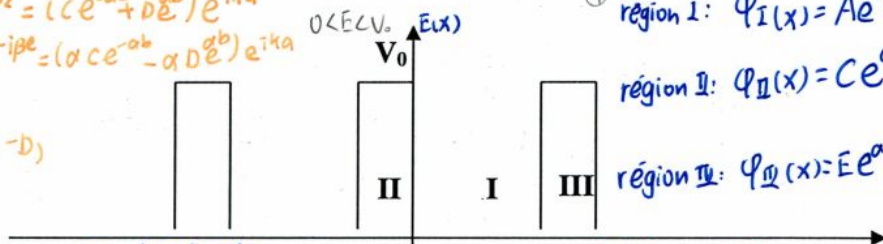
condition limite en  $0, c$   
ou  
condition limite en  $0, -b$

## Potentiel en créneaux – modèle de Kronig et Penney

Afin d'établir l'existence de bandes d'énergie, alternativement permises et interdites qui apparaissent quand les électrons sont soumis à un potentiel périodique, on se propose d'étudier le comportement d'un électron soumis à un potentiel créé par les atomes du cristal. Ces atomes sont équidistants de «  $a$  » dans un réseau unidimensionnel.

③

$$\begin{aligned} Ae^{i\beta b} + Be^{-i\beta b} &= (Ce^{-\alpha b} + De^{\alpha b})e^{i\alpha a} \\ i\beta A - i\beta B - \alpha Ce^{-\alpha b} + \alpha De^{\alpha b} &= (i\alpha C - i\alpha D)e^{i\alpha a} \\ A+B &= C+D \\ i\beta(A-B) &= \alpha(C-D) \end{aligned}$$



① région I:  $\varphi_I(x) = Ae^{i\beta x} + Be^{-i\beta x}$

région II:  $\varphi_{II}(x) = Ce^{\alpha x} + De^{-\alpha x}$

région III:  $\varphi_{III}(x) = Ee^{\alpha x} + Fe^{-\alpha x} = \varphi_{II}(x) \times e^{i\alpha(x-a)}$

(3)  $A+B-C-D=0$

(4)  $i\beta A - i\beta B - \alpha C + \alpha D = 0$

(1) - - - - -  
(2) - - - - - 1. Donner les solutions de l'équation de Schrödinger dans la région I, puis dans la région II (on appellera les constantes d'intégration A, B, C et D).

2. Théorème de Bloch : quand un électron est soumis à un potentiel périodique, sa fonction d'onde obéissant aux conditions cyclique de BVK  $\Psi(x) = \Psi(x + Na)$ , peut être mise sous la forme d'une onde de Bloch :

$$\Psi_n(x) = u_{nk}(x)e^{ikx} \quad \text{avec } u(r) = u(x+a) \text{ } a \text{ étant la période.}$$

Donner en fonction de C et D l'expression de la fonction d'onde dans la région III et préciser la séquence des valeurs discrètes que peut prendre le « pseudo » vecteur d'onde  $k$ .

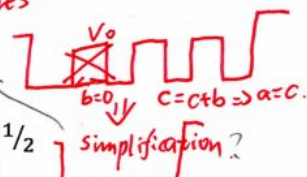
3. On détermine les constantes d'intégration en écrivant la continuité des fonctions d'ondes et de leur dérivée première en  $x=0$  et  $x=c$ . Montrer que le système d'équations ainsi obtenu ne possède une solution non triviale que si :

⑥

$$\begin{aligned} b=0 \quad \text{sh}(\alpha b) &= \frac{e^{\alpha b} - e^{-\alpha b}}{2} = 0 \\ \text{ch}(\alpha b) &= \frac{e^{\alpha b} + e^{-\alpha b}}{2} = 1 \\ \Rightarrow \cos(ka) &= \cos(\beta c) \quad a=c(b=0) \\ \cos(\beta a) &= \cos(\beta a) \Leftrightarrow k=\beta \\ E &= \frac{\hbar^2 \beta^2}{2m} \end{aligned}$$

$$\cos(ka) = \frac{\alpha^2 - \beta^2}{2\alpha\beta} \sin(\beta c) \text{sh}(\alpha b) + \cos(\beta c) \text{ch}(\alpha b)$$

$$\text{avec } \alpha = \left[ \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2} \right]^{1/2} \quad \text{et} \quad \beta = \left[ \frac{2mE}{\hbar^2} \right]^{1/2}$$

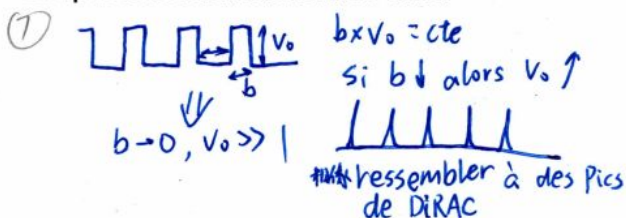


4. Vérifier que lorsque l'énergie potentielle est nulle partout, on retrouve la relation  $E=f(k)$  des électrons libres.

5. On se place maintenant dans ces conditions :  $b \rightarrow 0$  et  $V_0 \gg 1$  et

on pose  $\eta = bV_0$  et  $P = \frac{m\eta a}{\hbar^2}$

Simplifier la relation donnée en 3.



$$\Rightarrow \cos k a = \frac{P \sin \beta a}{\beta a} + \cos(\beta a)$$

$$\cos ka = \frac{\alpha^2 - \beta^2}{2\alpha\beta} \sin(\beta c) \text{sh}(\alpha b) + \cos(\beta c) \text{ch}(\alpha b)$$

$b \rightarrow 0$  ( $b \neq 0$ )

$V_0 \gg 1 \Leftrightarrow V_0 \gg E$  E: Energie des électrons

$\text{sh}(\alpha b) \approx \alpha b + \dots$

$b \rightarrow 0$

$\text{ch}(\alpha b) \approx 1$

$V_0 \gg E$

$$\alpha = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}} \approx \sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2}} \quad \beta = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

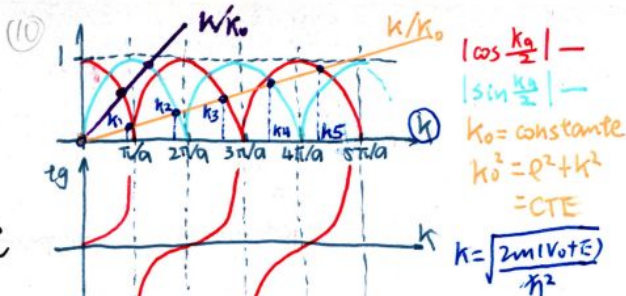
$$\Rightarrow \cos ka = \frac{\alpha^2}{2\beta} b \sin \beta a + \cos \beta a$$

$$= \frac{2mV_0}{\hbar^2 \times 2\beta} b \sin \beta a + \cos \beta a$$

$$\cos ka = \frac{P}{\beta a} \sin \beta a + \cos \beta a$$



- ③ mathématiquement  $\frac{d^2\psi}{dx^2} + \psi = 0$   $\begin{cases} \oplus \rightarrow \text{onde plane} \\ \ominus \rightarrow \text{onde évanescence} \end{cases}$   
physiquement:  $\frac{d^2\psi}{dx^2} + \psi = 0$   
région  $\begin{cases} E > V(x) \rightarrow \text{onde plane} \\ E < V(x) \rightarrow \text{onde évanescence} \end{cases}$



## Puits de potentiel

Soit un puits de potentiel symétrique de largeur  $a$ . On supposera que l'énergie  $E$  de la particule est:

⑧  $\psi_I(x) = A_1 e^{ikx} + A_1' e^{-ikx}$   
 $\psi_{II}(x) = A_2 e^{ikx} + A_2' e^{-ikx}$   
 $\psi_{III}(x) = A_3 e^{ikx} + A_3' e^{-ikx}$   
 $A_1' = 0$  et  $A_3 = 0$   
 $-\infty < -a/2$   $a/2 < +\infty$   
sinon divergence. (diverge)

④ on se garde  
on utilise les conditions  
aux limites  
 $-V_0 < E < 0$   
I. III  
 $V(x) = 0$   $E < V(x) = 0 \Rightarrow$  onde évanescence.

II  $V(x) = -V_0$   $E > -V_0 = V(x) \rightarrow$  onde plane

Comment trouve l'équation aux  
valeurs propres:

Astucieux (Hint)

$$\frac{A_3}{A_1} = \dots = 0 \text{ car } A_3 = 0$$

$$-V_0 < E < 0 \quad (1)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x)$$

① I II  $\rightarrow V(x) = 0$   
et  $-V_0 < E < 0$   
 $\rightarrow$  onde évanescence.

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} \psi = 0 \rightarrow \frac{d^2\psi}{dx^2} - \left(1 - \frac{2mE}{\hbar^2}\right) \psi = 0$$

$$-a/2$$

$$a/2$$

I

E

II

$-V_0$

III

région II.

$V(x) = -V_0$

$-V_0 < E < 0 \rightarrow$  onde plane.

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} - V_0 \psi = E\psi$$

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (V_0 + E) \psi = 0 \Rightarrow \frac{d^2\psi}{dx^2} + k^2 \psi = 0$$

3 et 4.  $k^2$  correspondance.

1- Ecrire l'équation de Schrödinger relative aux trois régions et les solutions des  
fonctions d'ondes correspondantes.

On posera:  $\rho^2 = -2mE/\hbar^2$ .

⑥ conditions aux limites.

$$\psi_I(-a/2) = \psi_{II}(-a/2)$$

$$\psi_I'(-a/2) = \psi_{II}'(-a/2)$$

2- Montrer que l'équation aux valeurs propres s'écrit:

$$\rho = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \quad (2)$$

$$k = \sqrt{\frac{2m(V_0 + E)}{\hbar^2}} \quad (3)$$

$$A_1 e^{-\rho x/2} = A_2 e^{-ikx/2} + A_2' e^{ikx/2} \quad (1)$$

$$\rho A_1 e^{-\rho x/2} = ik A_2 e^{-ikx/2} - ik A_2' e^{ikx/2} \quad (2)$$

$$(1) \times ik + (2) \rightarrow (\rho + ik) A_1 e^{-\rho x/2} = 2ik A_2 e^{-ikx/2}$$

$$\rightarrow A_2 = \frac{(\rho + ik)}{2ik} A_1 \left| \cos\left(\frac{ka}{2}\right) \right| = \frac{k}{k_0}$$

$$(1) \times ik - (2) \rightarrow ik A_1 e^{-\rho x/2} = 2ik A_2' e^{ikx/2}$$

$$\rightarrow A_2' = \frac{(\rho - ik)}{2ik} A_1 \left| \cos\left(\frac{ka}{2}\right) \right| = \frac{k}{k_0}$$

$$\text{avec } k_0 = \sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2}} = \sqrt{k^2 + \rho^2} \quad (5)$$

4- Résoudre graphiquement les équations ci dessus pour déterminer les valeurs  
propres du système (les énergies).

④  $\rho_{k_0} = -\sin\left(-\frac{ka}{2}\right) = \sin\frac{ka}{2}$   
 $\frac{k}{k_0} = \cos\left(-\frac{ka}{2}\right) = \cos\frac{ka}{2}$   
 $\tan\frac{ka}{2} = \frac{\rho}{k} > 0 \rightarrow \tan\frac{ka}{2} > 0$   
 $\rho_{k_0} = \sin\left(-\frac{ka}{2}\right) = -\sin\frac{ka}{2}$   
 $\frac{k}{k_0} = -\cos\left(-\frac{ka}{2}\right) = -\cos\frac{ka}{2}$   
 $\tan\frac{ka}{2} = \frac{\rho}{k} > 0$

⑦ en  $a/2$ .

(4)  $A_2 e^{ikx/2} + A_2' e^{-ikx/2} = A_3 e^{\rho x/2} + A_3' e^{-\rho x/2}$   
 $ik A_2 e^{ikx/2} - ik A_2' e^{-ikx/2} = \rho A_3 e^{\rho x/2} - \rho A_3' e^{-\rho x/2}$   
 $(3) \times \rho + (4) \rightarrow \sin\left(\frac{ka}{2}\right) = \frac{k}{k_0}$   
 $(\rho + ik) A_2 e^{ikx/2} + (\rho - ik) A_2' e^{-ikx/2} = 2\rho A_3 e^{\rho x/2}$

②  $\tan\left(\frac{ka}{2}\right) < 0$   
on exprime  $A_2$  et  $A_2'$  en fonction de  $A_1$

$$\frac{A_2}{A_1} = \frac{e^{-\rho a}}{4 \tan \frac{ka}{2}} \left[ (\rho + ik) e^{ik a/2} - (\rho - ik) e^{-ik a/2} \right]$$

ou  $A_3 = 0 \Rightarrow \left(\frac{\rho + ik}{\rho - ik}\right)^2 = e^{-2ika} \rightarrow \left(\frac{\rho - ik}{\rho + ik}\right)^2 = e^{2ika}$

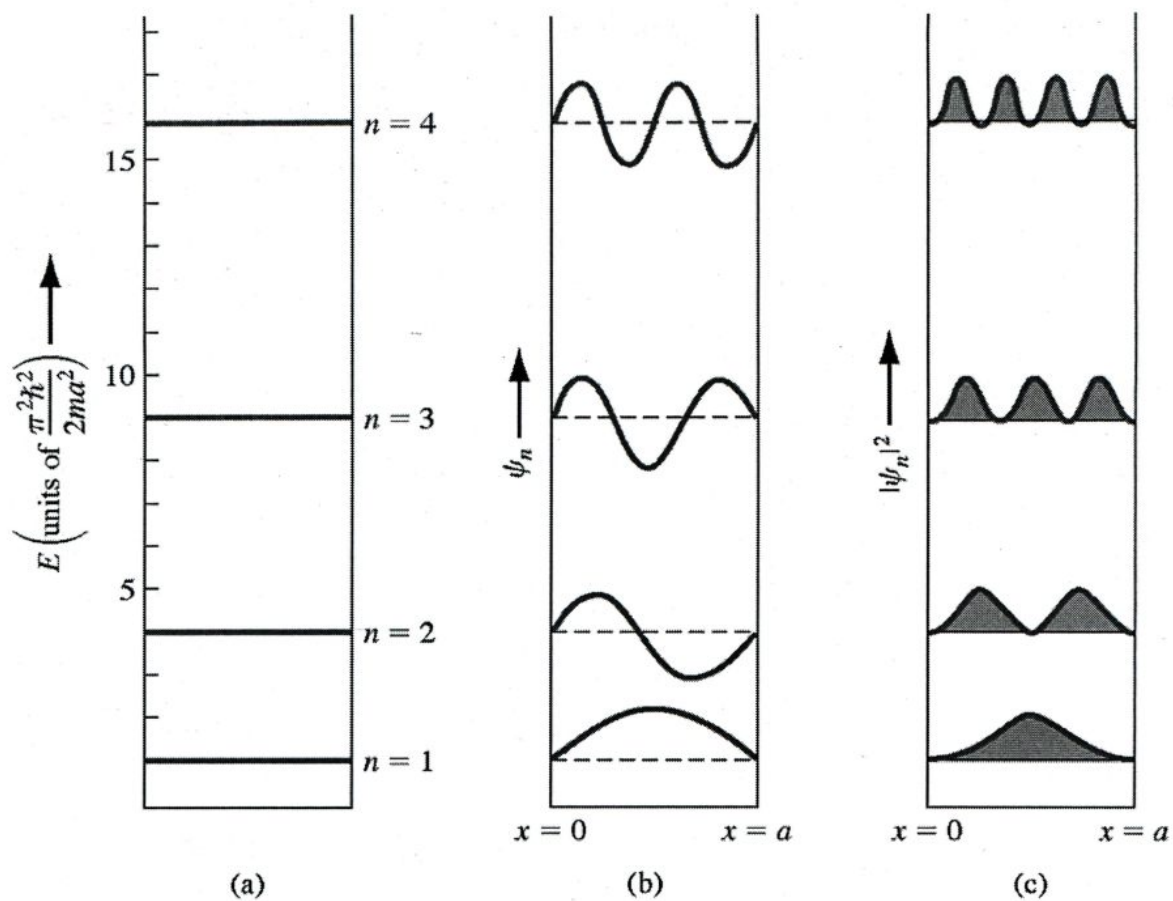
$$\left(\frac{\rho - ik}{\rho + ik}\right)^2 = e^{2ika}$$

$$\left(\frac{\rho - ik}{\rho + ik}\right) = e^{ika}$$

$$\left(\frac{\rho - ik}{\rho + ik}\right) = -e^{-ika}$$

$$\frac{(\rho - ik)(\rho + ik)}{(\rho + ik)^2} = -e^{-ika} = \frac{\rho^2 + k^2}{(\rho + ik)^2} = -e^{-ika}$$

$$\frac{(\rho + ik)^2}{k_0^2} = -e^{-ika} = i^2 e^{-ika} \rightarrow \rho \frac{\rho + ik}{k_0} = \pm i e^{-ika}$$



particule dans un puits de potentiel infini

$$\left| \frac{A_3}{A_1} \right|^2 = T = \frac{4k^2 p^2}{4k^2 p^2 + (k^2 - p^2)^2 \sinh^2 \rho a}$$

$$= \frac{4E(V_0 - E)}{4E(V_0 - E) + V_0^2 \sinh^2 \rho a}$$

$$\cosh(x) = \frac{e^x + e^{-x}}{2}$$

$$\sinh(x) = \frac{e^x - e^{-x}}{2}$$

$$\begin{cases} \psi = A e^{ikx} + B e^{-ikx} \\ \psi = A e^{ikx} + B e^{-ikx} \end{cases}$$

$\rho$  : k 无单位  
x 的单位 : m  $\rightarrow [\rho][k]$  单位 :  $m^{-1}$

1. Ecrire l'équation de Schrödinger relative aux trois régions et la forme des solutions correspondantes. On posera :

$k$  = vecteur d'onde  $[k] = [p] = m^{-1}$   $k = \frac{2\pi}{\lambda}$   $\rightarrow [k] = m^{-1}$

$k$  à 1 dim  $\rightarrow$  nombre d'onde  
dimension (unité)  
cest des  $m^{-1}$

$$\rho = \left[ \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2} \right]^{1/2} \text{ et } k = \left[ \frac{2mE}{\hbar^2} \right]^{1/2}$$

2. Supposons que la particule (1 électron par exemple) vienne de la gauche.

$T = ?$   $E = 1eV$   $V_0 = 2eV$   $a = 1\text{\AA}$   $\rightarrow T = 78\%$

• Définir et calculer le coefficient de Transmission de la barrière

• En déduire le coefficient de réflexion

• Pour un électron, calculer la portée de l'onde évanescente

• Refaire le calcul pour un proton (masse = 1840 \* masse électron)

• conclusion

Si on remplace l'électron par 1 proton.

$$m_e = 9.1 \times 10^{-31} \text{ kg}$$

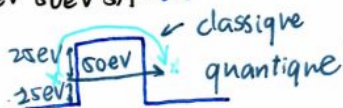
$$m_{\text{proton}} = 1840 \times m_e$$

$$T = ? \quad (E = 1eV \text{ et } V_0 = 2eV)$$

$$= 0$$

$$\frac{1}{\rho_{\text{proton}}} = 0.045 \text{\AA} \ll 1 \text{\AA}$$

E	V <sub>0</sub>	a	T
1eV	2eV	1\AA	78%
1eV	2eV	5\AA	2.4%
25eV	50eV	1\AA	2.4%
25eV	50eV	5\AA	0%

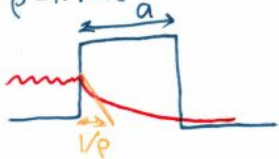


$$E = 1eV \text{ et } V_0 = 2eV$$

$\rightarrow \frac{1}{\rho}$  = Portée de l'onde

$$\rho = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}}$$

$$\frac{1}{\rho} = 1.95 \text{\AA}$$





$$\text{Proba} = |\Psi(x) \Psi^*(x)|$$

③

$$= i \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{2n\pi}{a}x\right) \times i \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{2n\pi}{a}x\right)$$

$$= \frac{2}{a} \sin^2 \frac{2n\pi}{a}x$$

$$k = \frac{2mE}{\hbar^2} \Rightarrow E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{n^2 \pi^2}{a^2}$$

$$E_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2ma^2}$$

$E_1, E_2$  et  $E_3$ : 3 premières énergies en eV  
 $h = 6.62 \times 10^{-34} \text{ J.s}$   $\hbar = \frac{h}{2\pi} \approx 1.04 \times 10^{-34} \text{ J.A.}$

$$m_e = 9.1 \times 10^{-31} \text{ kg} \quad a = L = 3 \text{ Å}$$

$$E_1 = \frac{1 \times (1.04 \times 10^{-34})^2 \times (3.14)^2}{2 \times 9.1 \times 10^{-31} \times (3 \times 10^{-10})^2} = 6.64 \times 10^{-19} \text{ en Joule}$$

$$1 \text{ eV} = 1.6 \times 10^{-19} \text{ J} \Rightarrow E_1 = 4.16 \text{ eV} \quad E_2 = 4 \times E_1 = 16.7 \text{ eV} \quad E_3 = 9 \times E_1 = 37.6 \text{ eV}$$

## Électrons libres dans un système à une dimension: puits de potentiel

④



infini

PSEUDO CONTINUE

On considère un puits infini de longueur  $L$  selon lequel les électrons peuvent se mouvoir librement ( $V=0$ ). En dehors du puits, le potentiel (l'énergie potentielle) est infini te. ( $V=\infty$  pour  $x \geq L$  et  $x \leq 0$ ), voir figure ci dessous:

①

$$\Psi_I(x) = \Psi_{II}(x) = 0 \quad (V=\infty)$$

$\Rightarrow \Psi_I(x) \neq 0 \Leftrightarrow$  la particule est entre 0 et  $a$

$$\Psi_{II}(x) = A e^{ikx} + B e^{-ikx} \quad k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

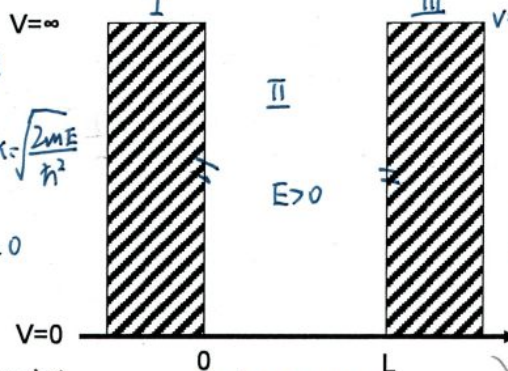
Conditions aux limites:

$$\Psi_I(0) = \Psi_{II}(0) = 0 \quad \Psi_{II}(a) = \Psi_{III}(a) = 0$$

$$A+B=0 \Rightarrow A=-B$$

$$\Psi_{II}(x) = A(e^{ikx} - e^{-ikx}) = 2iA \left( \frac{e^{ikx} - e^{-ikx}}{2i} \right) = C \sin kx$$

Questions



②

Probabilité de trouver la entre 0 et  $a$  est égale à 1

$$\Rightarrow \text{proba} = |\Psi(x)|^2$$

$$\Rightarrow \int_0^a |\Psi(x)|^2 dx = 1 = C^2 \int_0^a \sin^2 kx dx = 1 = C^2 \int_0^a \sin^2 \left( \frac{n\pi}{a}x \right) dx = 1$$

$$\int_0^a \sin^2 \left( \frac{n\pi}{a}x \right) dx = C^2 \int_0^a \left( 1 - \cos \frac{2n\pi}{a}x \right) dx$$

$$= C^2 \left[ x - \frac{a}{2n\pi} \sin \frac{2n\pi}{a}x \right]_0^a = C^2 \left[ a - 0 - [0 - 0] \right] = \frac{C^2 a}{2} = 1$$

$$\Rightarrow C^2 = \frac{2}{a} \Rightarrow C = \sqrt{\frac{2}{a}} \quad C = 2i \sqrt{\frac{2}{a}}$$

$$C = \sqrt{\frac{2}{a}}$$

a. Donner la forme générale des solutions de l'équation de Schrödinger. Quelles sont ces solutions aux limites (0 and L).

b. À partir de (a), déterminer les niveaux d'énergie (quantifiés). Calculer les trois premiers niveaux d'énergie d'un electron dans le puits  $E_1, E_2$  and  $E_3$ . On donne, pour l'atome considéré  $L=3 \text{ Å}$ .

c. Dans le cas d'un metal ( $L=3 \text{ mm}$ ), calculer une nouvelle fois  $E_1, E_2$  and  $E_3$ . Représenter  $E$  versus  $k$  dans ce cas.  $E_1 = 4.18 \times 10^{-14} \text{ eV}$   $E_2 = 16.72 \times 10^{-14} \text{ eV}$   $E_3 = 37.62 \times 10^{-14} \text{ eV}$

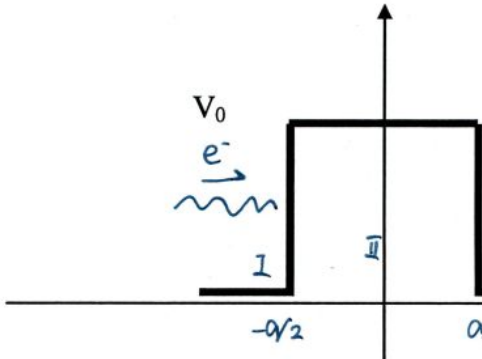
## Barrière de potentiel symétrique

Soit une barrière de potentiel symétrique de largeur  $a$ . On supposera que l'énergie  $E$  de la particule est telle que  $0 < E < V_0$ .

$$\Psi_I(x) = A_1 e^{ikx} + B_1 e^{-ikx} \rightarrow \text{onde plane X}$$

$$\Psi_{II}(x) = A_2 e^{px} + B_2 e^{-px} \rightarrow \text{X onde évanescence}$$

$$\Psi_{III}(x) = A_3 e^{ikx} + B_3 e^{-ikx}$$



$$0 < E < V_0$$

I et III: onde plane X

II ( $E < V_0$ ): X onde évanescence

$$T = \frac{V_t}{V_i} \cdot \frac{A_3 \cdot A_3^*}{A_1 \cdot A_1^*} = \frac{V_t}{V_i} \left| \frac{A_3}{A_1} \right|^2$$

$$\text{si } A_3 \text{ et } A_1 \text{ réels } V_t = V_i = 1$$

Conditions aux limites:

$$A_1 + B_1 = A_2 + B_2 \leftarrow \Psi_I(0) = \Psi_{II}(0)$$

$$ikA_1 - ikB_1 = pA_2 - pB_2 \leftarrow \Psi_I'(0) = \Psi_{II}'(0)$$

$$A_3 e^{ika} + B_3 e^{-ika} = A_2 e^{pa} + B_2 e^{-pa} \leftarrow \Psi_{II}(a) = \Psi_{III}(a)$$

$$ikA_3 e^{ika} - ikB_3 e^{-ika} = pA_2 e^{pa} - pB_2 e^{-pa} \leftarrow \Psi_{II}'(a) = \Psi_{III}'(a)$$



$$2R_A + 2R_B = \sqrt{3}a$$

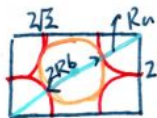
$$a = 2R_A$$

$$a + 2R_B = a\sqrt{3}$$

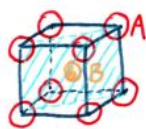
$$2R_B = a(\sqrt{3} - 1)$$

$$R_B = \frac{a(\sqrt{3} - 1)}{2} = 0.75\text{\AA}$$

voisine. Déterminer le volume de café une fois que ces grains ont moulus (on supposera une densité d'assemblage de 100%)



9. Un cristal est composé de deux éléments A et B. le cristal est un CC avec les éléments A à chaque sommet du cube et l'élément B au centre. Le rayon effectif de l'élément A est 1,02 Å. On suppose que les éléments sont des sphères dont les surfaces des éléments A sont en contact avec les éléments A plus proches voisins. Calculer le rayon maximum de l'atome B qui s'adaptera dans cette structure et la densité volumique (#/cm³) des atomes A et B.



#/cm³

Atomes A →  $\frac{1}{(2.04 \times 10^{-8})^3}$

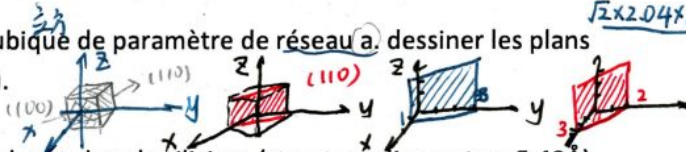
Atomes B →  $\frac{1}{(2.04 \times 10^{-8})^3}$

1 Atome A =  $8 \times \frac{1}{8}$

1 Atome B =  $1 \times 1$

Volume du cube =  $a^3 = (1.02 \times 2 \times 10^{-8})^3$

10. Soit trois plans réticulaires dans un cubique de paramètre de réseau a. dessiner les plans suivants : (100), (110) (310) and (230).



11. Calculer la densité des électrons de valence dans le silicium (structure diamant, a=5.43Å).

Silicium:  $4e^-$  de valence

Diamant: 8 Atomes / cube / maille  $\Rightarrow \frac{8 \times 4}{a^3} = \frac{32}{(5.43 \times 10^{-8})^3} = 2 \times 10^{23} \text{ cm}^{-3} = 2 \times 10^{29} \text{ m}^{-3}$

12. (a) des atomes de Phosphore, à une de  $5 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ , sont ajoutés dans un échantillon de silicium. Supposons que les atomes de phosphores sont distribués de façon homogène à travers le silicium. Quelle est la fraction du poids de phosphore ? si des atomes de Bore à une concentration de  $10^{18} \text{ cm}^{-3}$ , sont ajoutés dans le matériau de la partie (a), déterminer la fraction du poids du Bore.

Poids Atomique: 相对原子质量

P: phosphore: 30.98 ≈ 31

B: Bore: 10.82 ≈ 11

Si: silicium: 28.07 ≈ 28

a) Fraction Poids du Phosphate

$$\frac{5 \times 10^{16} \times 30.98}{5 \times 10^{22} \times 28.07} \approx 1.1 \times 10^{-6}$$

Si + P + B

$$\frac{10^{18} \times 10.8}{5 \times 10^{16} \times 31 + 5 \times 10^{22} \times 28} \approx \frac{10^{18} \times 11}{5 \times 10^{22} \times 28} \approx 7.7 \times 10^{-6}$$



1 Atome au centre  
du cube Poids = 1  
8 Atomes aux sommets  
des arêtes : Poids  $\frac{1}{8}$   
 $8 \times \frac{1}{8} + 1 \times 1 = 2$



3 Atomes aux sommets  
des Arêtes + 6 Atomes  
au milieu des 6 faces  
 $8 \times \frac{1}{8} + 6 \times \frac{1}{2} = 4$

## Exercice 1

### Crystal - Structures cristallines

cfc: Ppt P40.

$$bnc = \frac{a^2}{4} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \end{pmatrix} = \frac{a^2}{4} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$a \cdot (bnc) = \frac{a}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \cdot \frac{a^2}{4} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{a^3}{8} [1+1+1] = \frac{a^3}{4}$$

$$cc: a \cdot (bnc) = \frac{a^2}{4} \begin{pmatrix} -1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 \end{pmatrix} = \frac{a^2}{4} \begin{pmatrix} 2 \\ 2 \\ 2 \end{pmatrix}$$

$$a \cdot (bnc) = \frac{a}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \cdot \frac{a^2}{4} \begin{pmatrix} 2 \\ 2 \\ 2 \end{pmatrix} = \frac{a^3}{2} [2+2+2] = \frac{a^3}{2}$$

1. Trouver le nombre d'atomes dans les cellules unit de :

- Cubique faces centrées 面心立方  $8 \times \frac{1}{8} + 6 \times \frac{1}{2} = 4$
- Cubique centré 体心立方  $8 \times \frac{1}{8} + 1 = 2$
- Diamant 金刚石结构  $8 \times \frac{1}{8} + 6 \times \frac{1}{2} + 4 = 8$

2. Calculer le volume de la maille.

- d'1 cs
- d'1 cc
- d'1 cfc

$$\begin{aligned} \vec{a}_1 &= \frac{a}{2} (\vec{i} + \vec{j} - \vec{k}) \\ \vec{a}_2 &= \frac{a}{2} (-\vec{i} + \vec{j} + \vec{k}) \\ \vec{a}_3 &= \frac{a}{2} (\vec{i} - \vec{j} + \vec{k}) \end{aligned}$$

$$V = \vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)$$

Produit scalaire

$$\begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} d \\ e \\ f \end{pmatrix} = (ad + be + cf)$$

Produit vectoriel

$$\begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix} \wedge \begin{pmatrix} d \\ e \\ f \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} bf - ce \\ cd - af \\ ae - bd \end{pmatrix}$$

外国人的叉乘写法.

3. Donner l'équation du plan coupant x en 3a, y en 2b et z en 2c

$$2 \frac{x}{a} + 3 \frac{y}{b} + 3 \frac{z}{c} = 6$$

4. Déterminer la rangée [u,v,w] qui passe par les couples de noeuds cités:

- a. 432 et 120 [3,1,2]
- b. 321 et 131 [2,-1,0]
- c. 001 et -101 [1,0,0]

10,12 - 13,21  $\rightarrow$  [3,1]  $\rightarrow$  [3,2] - [0,1]  $\rightarrow$  [3,1]  
Pour déterminer du rangée [u,v],  
il faut déterminer le l'noeud après l'origine

5. Indexer (donner les indices de Miller) des plans réticulaires qui déterminent respectivement sur les axes OX OY et OZ les segments suivants

1a 2b 2c  
2a 1b 1c  
-3a 1b 2c  
 $\infty$  2b 2c

plan n°1 211  
n°2 122  
n°3  
n°4

6. Calculer la distance interreticulaire dans le cas général. Appliquer ce résultat à une structure cubique simple

在一般情况. 应用 结果  $\rightarrow$  简单立方结构.

7. Le paramètre de réseau du GaAs est 5.65 Å. Déterminer le nombre d'atomes de Ga et As par  $\text{cm}^3$ . GaAs: Ga est en site CFC, As décalé/Ga all 1/4 de Diagonale

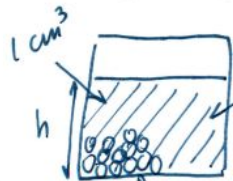
Dans 1 maille: il y a 4Ga et 4As

$a = 5.65 \text{ Å}$

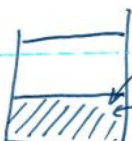
$$\frac{4}{a^3} = \frac{4}{(5.65 \times 10^{-8})^3} = 2.22 \times 10^{22} \text{ Atomes/cm}^3$$

8. Un matériau, de volume  $1 \text{ cm}^3$ , est composé d'une structure CFC avec une constante de réseau de 2,5 mm. Les "atomes" dans ce matériau sont en fait des grains de café. On suppose que ces grains de café sont des sphères dures avec chaque sphère en contact avec sa plus proche

晶体常数. 2.5mm.



café en grains  
structure cfc



café moulu

calculer le facteur de remplissage  
cfc: combien d'Atomes dans 1 cfc

$$\text{volume occupé par les 4 Atomes} = 4 \times \frac{4}{3} \pi R^3$$

$$\text{volume du cube: } a^3 = (2.5)^3 \times 10^9$$

$$\frac{4 \times \frac{4}{3} \pi R^3}{(2.5)^3 \times 10^9} = 74\%$$

Diamant:  
combien d'Atomes

$$\frac{8 \times \frac{4}{3} \pi R^3}{a^3} = \frac{8 \times \frac{4}{3} \pi R^3}{(\frac{4}{3})^3 \times R^3} = 34\%$$

$$a\sqrt{3} = 8R$$