Master en Sciences Physiques

Nanophysique PHYS-F-475

CHAPITRE 3. AMAS OU AGREGATS ATOMIQUES (bis)

Exercices

I. CRISTAUX

1. Déterminer vous meme le nombre de plus proches voisins dans les plans (100), (110) et (111) pour la structure BCC.

2. Trouver l'équivalent de l'équation de Thompson-Gibbs pour un cristal en équilibre avec de la vapeur en minimisant l'énergie libre de Gibbs du système. Comme dans la construction de Wulff, décomposer le cristal en domaines pyramidaux. Montrer que la taille de ce cristal est déterminée par la supersaturation, c'est-à-dire la différence de potentiel chimique entre les phases vapeur et cristalline, $\Delta\mu = \mu_\mathrm{v} - \mu_\mathrm{c}$, ainsi que par le volume moléculaire de la phase cristalline.

3. Effectuer la construction de Wulff pour un cristal bidimensionnel dont la tension superficielle est donnée par

$$\gamma(\theta) = \gamma_0(1 + \epsilon \cos 4\theta) \qquad \text{avec} \qquad \epsilon \ll 1$$

4. Obtenir la tension superficielle en fonction de l'orientation de la ligne de surface pour un cristal bidimensionnel sur un réseau carré en supposant que les atomes ayant un nombre de voisins égal à $j = 1, 2, 3, 4$ ont autant de liaisons d'énergie $\epsilon_j < 0$ et que la température est nulle. Calculer la tension superficielle en comptant les atomes ayant différents nombres de voisins dans la géométrie de la figure ci-dessous où chaque terrasse de n atomes est suivie d'une marche avec un atome. Finalement, donner la tension superficielle en fonction de l'angle θ entre la ligne tangente aux marches et une surface plate sans marche. Quelles conditions les énergies de liaison, doivent-elles satisfaire pour que la tension superficielle soit non-négative comme il se doit?

5. Effectuer la construction de Wulff pour un cristal bidimensionnel de réseau carré dont

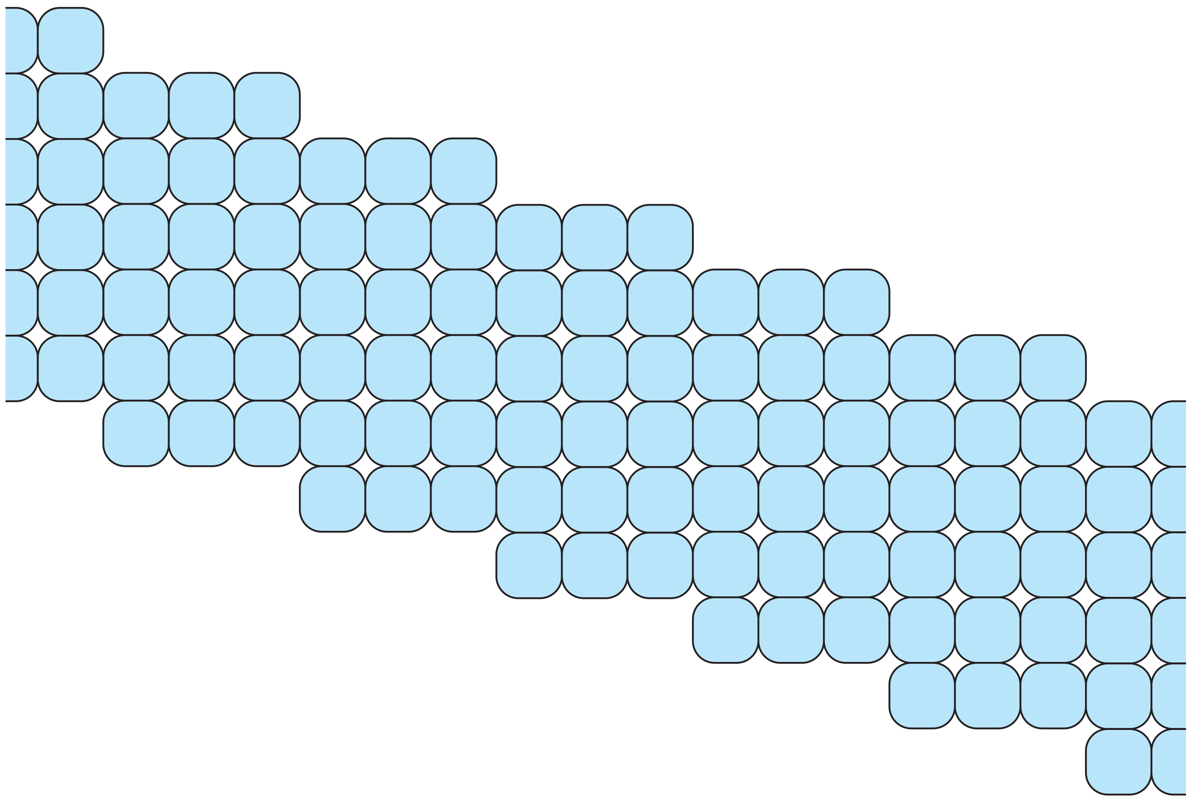

FIG. 1: Cristal bidimensionnel de réseau carré dont la ligne de surface se compose de terrasses avec $n = 3$ atomes suivies de marches avec un atome.

la tension superficielle est celle de l'exercice précédent. Discuter des différentes formes du cristal en fonction d'un paramètre unique approprié.

II. POTENTIEL D'IONISATION

6. L'énergie potentielle électrostatique d'une charge q à une distance r du centre d'une sphère conductrice de rayon R est donnée par

$$U(r|R) = -\frac{q^2}{4\pi\epsilon_0 r} - \frac{q^2 R^3}{8\pi\epsilon_0 r^2(r^2 - R^2)}$$

d'après J. D. Jackson, *Classical electrodynamics*, 3rd edition (Wiley, New York, 1999). En déduire le potentiel d'ionisation d'une goutte métallique sphérique de rayon R en termes du potentiel d'ionisation d'une interface plane du même métal, c'est-à-dire du travail de sortie du métal.

III. PLOTS QUANTIQUES SEMICONDUCTEURS

7. On considère une sphère semiconductrice de rayon R dans le vide. Pour le matériau semiconducteur lui-même, la bande de conduction est séparée de la bande de valence par le "gap" d'énergie E_g et la permittivité est égale à ϵ. La masse effective des électrons de la bande de conduction est notée par m_e et celle des trous de la bande de valence par m_h. Pour les électrons et les trous, on suppose que le bord du plot sphérique forme une barrière infinie, c'est-à-dire que le travail d'extraction des électrons est infini.

   Lors de l'absorption d'un photon UV par le plot quantique, un électron e^- est excité depuis la bande de valence, où il se crée un trou h^+, vers la bande de conduction. Après une relaxation non-radiative, la paire e-h se retrouve dans l'état de plus basse énergie du hamiltonien suivant

$$\hat{H} = E_g - \frac{\hbar^2}{2m_e}\,\nabla_e^2 - \frac{\hbar^2}{2m_h}\,\nabla_h^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon\|\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_h\|}$$

   qui reprend les énergies cinétiques de l'électron et du trou, ainsi que l'énergie coulombienne attractive entre les deux. Déterminer en fonction du rayon R du plot quantique l'énergie du photon émis par fluorescence lorsque l'électron se recombine avec le trou pour rejoindre la bande de valence. Dans ce but, on traitera l'interaction coulombienne comme une perturbation vis-à-vis de l'énergie cinétique totale et on utilisera le fait que la fonction d'onde du niveau fondamental d'une particule dans un puits sphérique de potentiel carré avec barrière infinie est donnée par

$$\phi_0(r) = \frac{N}{r}\,\sin\frac{\pi r}{R}$$

   où N est une constante de normalisation. (En effet, faire la calcul qui a donnés les résultats présentés dans la cours.)

8. En utilisant le résultat de l'exercice précédent, évaluer l'énergie du photon émis par fluorescence ainsi que sa couleur pour un plot quantique semiconducteur en sulfure de cadmium CdS pour lequel $E_g = 2,58$ eV, $m_e = 0,19\,m_{e0}$, $m_h = 0,8\,m_{e0}$ et $\epsilon = 5,7\,\epsilon_0$ où m_{e0} est la masse de l'électron dans le vide et ϵ_0 la permittivité du vide.