

### CHAPITRE 3. Part 2 AMAS OU AGREGATS ATOMIQUES

#### Exercices

1. 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.

#### I. PLOTS QUANTIQUES SEMICONDUCTEURS

2. 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  $\epsilon$ . 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.

3. En utilisant le résultat de l'exercice précédent, évaluer l'énergie du photon émis par fluorescence ainsi que sa couleur pour un puits 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  $\epsilon_0$  la permittivité du vide.