République Algérienne Démocratique Populaire

Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique
Université Ibn Khaldoun – Tiaret
Faculté des Sciences de la Matière
Département de Physique
Module: Modélisation des Matériaux
2023 - 2024

1eme Année PM

Corrigé de L`examen

Questions de cours (6 pts)

1. La modélisation consiste à créer une représentation du système a étudier **(1pts)**
2. principe de la théorie de la DFT : Elle consiste en la réduction du problème à plusieurs corps en un problème à un seul corps dans un champ effectif prenant en compte toutes les interaction $\boldsymbol{E} = \boldsymbol{G}[\boldsymbol{\rho}(\vec{\boldsymbol{r}})]$ **(1pts)**
3. Modèle : C`est une représentation simplifiée d'un système ou d'un phénomène physique permettant de reproduire son fonctionnement, de l'analyser, de l'explique et d'en prédire certains aspects. **(1pts)**
4. Parmi les méthodes de calcul des structures électroniques, on peut citer

   APW, LAPW,LMTO, pseudo potential **(1pts)**
5. Elle consiste à déterminer les paramètres structurales du matériau a l`état d`équilibre correspondant à une énergie minimale **(1pts)**
6. Parmi ces propriétés structurales on cite: le volume de la maille V_0, le module de compressibilité B_0, l`énergie totale E_0 **(1pts)**
7. La simulation quantique permet de concevoir de nouveaux matériaux, son objectif est de comprendre des systèmes quantiques complexes. **(1pts)**
8. L`objectif et le principe de la mécanique quantique c`est de résoudre l`équation de Schrödinger et calculer les vecteurs et valeurs propres du système **(1pts)**

Exercice: 01 (6pts)

a) Le Silicium appartient à la colonne 4 **$\underline{(1pts)}$**

b) La condition de stabilité de ces matériaux c`est d`avoir une énergie totale minimale **$\underline{(1pts)}$**

c) D`après le tableau et les figures d`optimisation ,on peut dir que:

Si est stable dans la structure cubique fcc **$\underline{(0.5pts)}$**

d) *-Détermination du paramètre de maille du Silicium dans la phase cubique*

$$V_0 = \frac{a^3{}_0}{4} \; alors \quad a_0 = \sqrt[3]{4V_0} \quad \underline{(1pts)}$$

$$a_{0_{(Si)}} = \sqrt[3]{4(160)} = 4.55A$$

$$\boldsymbol{donc \quad a = b == c = 4.55A} \quad \textit{(0.5pts)}$$

- Calcul des paramètres de maille du Si dans la phase hexagonale

$$\mathrm{V} = \frac{\sqrt{3}}{2}\mathrm{a}^2 \;\; \text{avec} \;\; \frac{\mathrm{c}}{\mathrm{a}} = 1.65 \quad \textbf{(0.5pts)}$$

$$\boldsymbol{V_0 = \frac{\sqrt{3}}{2} \times (1.65)a_0{}^3 = \frac{(1.73)\times(1.65)}{2} a_0{}^3 = \frac{2{,}8545}{2} a_0{}^3}$$

$$\boldsymbol{2V_0 = 2{,}854a_0{}^3 \; alors \quad a_0 = \left(\frac{2V_0}{2.854}\right)^{1/3} = \left(\frac{2\times 541.99}{2{,}854}\right)^{1/3} =}$$

$$\boldsymbol{\left(\frac{1083{,}98}{2.854}\right)^{1/3} = 7{,}241 \; bohr = 3.830 \; A} \quad \textit{(0.5pts)}$$

$$\boldsymbol{\frac{c}{a} = 1.65 \; \text{donc} \quad c = 1.65 \times 3.83 = 6{,}3195 \; A}$$

$$\boldsymbol{a = b = 3.83 \; A \;\; et \;\; c = 6.319 \; A} \; \textit{(0.5pts)}$$

e) D`après le tableau des valeurs , on constate que les résultats calcules avec LDA sont proches de celles calcules expérimentalement **(0.5pts)**

Exercice:02 (06 points)

1. En comparant les résultats trouves expérimentalement et calcules par GGA, on remarque que les résultats sont presque les mêmes**. (0.5pts)**
2. La nature du gap pour chaque matériau est la suivante :

   Pour le Silicium : il a un gap indirect entre gamma et X $(\Gamma \longrightarrow X)$ qui correspond a $\Delta k \neq 0$ **(1pts)**

Même chose pour le compose SiC avec un gap indirect $(\Gamma \longrightarrow X)$ qui correspond a $\Delta k \neq 0$ **(1pts)**

3. L`effet de l`insertion du carbone dans le Silicium a un effet sur les propriétés structurales et électroniques de ce dernier , tout en remarquant une augmentation du volume et celle du module de compressibilité ainsi que l`effet sur la structure de bande qui croit aussi. (**1pts)**
4. Calcul de la longueur d`onde pour chaque matériau

$E_g = h\frac{c}{\lambda}$ alors $\lambda = h\frac{c}{E_g}$, **. (0.5pts)**

Applications Numérique

On sait que $1 \text{ eV} = 1.610^{-19}\text{J}$ et $1 \text{ J} = \text{kg.m}^2\text{s}^{-2}$

$E_{g(Si)} = 1.17 \text{ eV} \quad \lambda = \frac{6.62.10^{-34}}{1.17}\text{kgm}^2\text{s}^{-2}.\times\frac{3.10^8\text{m}}{1.6.10^{-19}\text{J}} = \frac{6.62\times3}{1.17\times1.6}.1.10^{-34+27}$

$\lambda_{Si} = \frac{19,86}{1,872}.10^{-7}\text{m} = 10.60.10^{-7} = 1.06.10^{-6}\text{m} = 1.06\mu\text{m}$

$\boldsymbol{\lambda_{Si} = 1.06\mu m}$ **(1pts)**

$$\lambda_{SiC} = \frac{6.62.10^{-34}}{2.24}\text{kgm}^2\text{s}^{-2} \times \frac{3.10^8}{1.6.10^{-19}}.\frac{\text{m}}{\text{J}} = \frac{6.62 \times 3}{2.24 \times 1.6}10^{-7}$$

$$\lambda_{SiC} = \frac{19.86}{3,584}.10^{-7}\text{m} = 5.541.10^{-7} = 0.5.10^{-6}\text{m} = 0.5\mu\text{m}$$

$\boldsymbol{\lambda_{SiC} = 0.5\mu m}$ ***(1pts)***