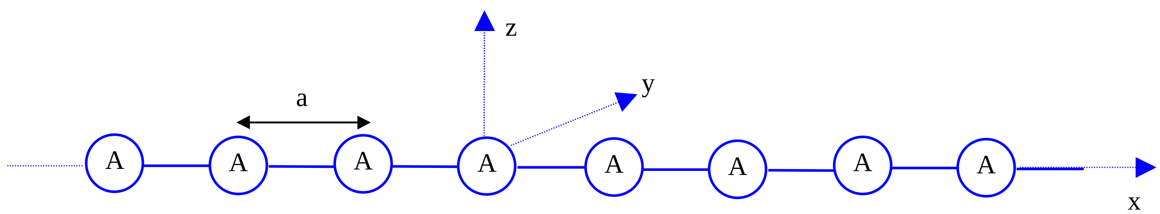
**ISEM 3** **le 24 Mai 2000**
**Exercices**
**Durée: 2$^{h}$**
**Sans document**
**Avec calculatrice**

# PHYSIQUE

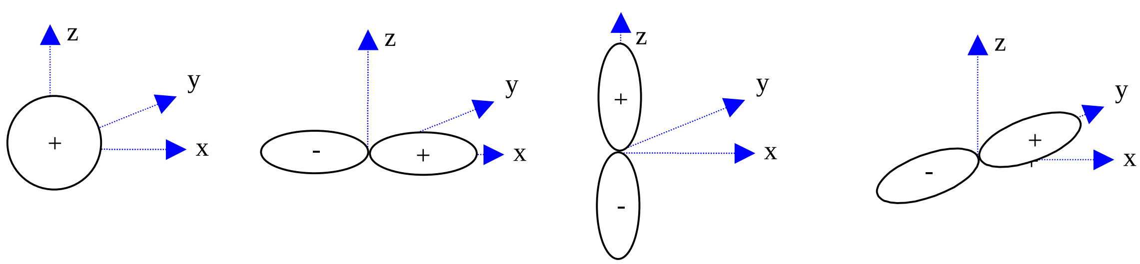
## ETUDE D'UNE CHAINE LINEAIRE MONOATOMIQUE




On désire traiter le problème de la chaîne linéaire monoatomique de paramètre a (a=distance entre deux premiers voisins) composée d'atomes possédant 6 électrons sur leur couche externe, afin d'illustrer de façon simple les propriétés des semi-conducteurs covalents. Les calculs de structure de bandes seront effectués par la méthode C.L.A.O., dans l'approximation des liaisons fortes aux premiers voisins.

**1.** Donner le réseau, le motif, le réseau réciproque, la première zone de BRILLOUIN.

**2.** Pour calculer la structure de bandes, on utilisera une base formée sur chaque atome i d'une fonction "s" $\varphi^i_s$, et de trois fonctions "p" $\varphi^i_{px}$, $\varphi^i_{py}$ et $\varphi^i_{pz}$. La fonction $\varphi^i_{px}$ est orientée le long de la chaîne linéaire tandis que les directions y et z sont perpendiculaires à la chaîne.




$\varphi^i_s$ $\varphi^i_{px}$ $\varphi^i_{pz}$ $\varphi^i_{py}$

Donner l'expression de la fonction d'onde d'essai $\Psi$ utilisée et le nombre de coefficients inconnus restant après l'application du théorème de BLOCH.

Que peut-on dire de $\langle \varphi^i_s | H | \varphi^j_{py} \rangle$, $\langle \varphi^i_s | H | \varphi^j_{pz} \rangle$, $\langle \varphi^i_{px} | H | \varphi^j_{pz} \rangle$, $\langle \varphi^i_{px} | H | \varphi^j_{py} \rangle$ et $\langle \varphi^i_{py} | H | \varphi^j_{pz} \rangle$ ? En déduire que le calcul des bandes issues des fonctions py ou pz est découplé de celui pour les fonctions s et px.

Donner l'expression des courbes E(k) issues des fonctions de BLOCH bâties à partir des fonctions $\varphi_{py}^{i}$ et $\varphi_{pz}^{i}$ en fonction de $\mathrm{E_P} = \left\langle \varphi_{p\alpha}^{i} \left| H \right| \varphi_{p\alpha}^{i} \right\rangle$ (où α=x, y ou z) et d'une intégrale de résonance $\beta_\pi = \left\langle \varphi_{py}^{i} \left| H \right| \varphi_{py}^{i+1} \right\rangle = \left\langle \varphi_{pz}^{i} \left| H \right| \varphi_{pz}^{i+1} \right\rangle$.

**3.** Pour traiter le cas des fonctions s et px de façon simple, on définit sur chaque atome i deux fonctions hybrides orthonormées:

$$\begin{cases} \varphi_+^i = \dfrac{1}{\sqrt{2}}\left(\varphi_s^i + \varphi_{px}^i\right) \\ \varphi_-^i = \dfrac{1}{\sqrt{2}}\left(\varphi_s^i - \varphi_{px}^i\right) \end{cases}$$

En négligeant les termes de dérive, calculer $\mathrm{E_H} = \left\langle \varphi_+^i \left| H \right| \varphi_+^i \right\rangle$ et $\Delta = \left\langle \varphi_+^i \left| H \right| \varphi_-^i \right\rangle$ en fonction de $E_p$ et $\mathrm{E_S} = \left\langle \varphi_s^i \left| H \right| \varphi_s^i \right\rangle$.

Représenter ces fonctions le long de l'axe 0x et expliquer pourquoi on ne retiendra comme terme interatomique que l'intégrale de résonance β (<0) entre fonctions hybrides pointant l'une vers l'autre. On donnera une expression générique de β en fonction de $\varphi_+^i$, $\varphi_-^j$ et H.

**4.** En utilisant les fonctions hybrides, calculer alors la relation de dispersion des bandes obtenues. Donner ensuite une représentation de <u>l'ensemble des courbes</u> E(k) obtenues sur le même graphique, en utilisant les valeurs suivantes:

$E_s$= -20eV, $E_p$= -16eV, β= -5.5eV, $\beta_\pi$= -0.4eV

**5.** Le sytème est-il isolant ou conducteur à 0°K? Justifier la réponse et donner les caractéristiques de la structure de bandes.

**6.** Calculer la masse effective $m_c^*$ pour les électrons au minimum $E_c$ de la bande de conduction et la masse effective $m_v^*$ des trous au maximum $E_v$ de la bande de valence.

**7.** Montrer que, dans l'approximation de la masse effective, on peut exprimer la concentration n d'électrons dans la bande de conduction et la concentration p de trous dans la bande de valence à l'équilibre thermodynamique sous la forme:

$$n = N_C \exp\left(\frac{E_F - E_C}{k_b T}\right) \quad et \quad p = N_V \exp\left(\frac{E_V - E_F}{k_b T}\right)$$

où $E_F$ est le niveau de FERMI et $k_b$ la constante de BOLTZMANN.

Donner les expressions de $N_c$ et $N_v$ , puis l'expression de n et p en fonction de $N_c$, $N_v$ et $E_g$=$E_c$-$E_v$. Déterminer la position du niveau de FERMI.

**8.** Application Numérique: Calculer $\frac{m_c^*}{m_0}, \frac{m_v^*}{m_0}, N_C, N_V$ à 300 K.

Données: a=3$\overset{\circ}{A}$, et on rappelle que $\int_0^{\infty} u^{-1/2} \exp(-u)\, du = \sqrt{\pi}$ .

**Liste de valeurs numériques utiles**:

| | |
|---|---|
| Constante de Planck: | h= 6.62x10$^{-34}$ J.s |
| Constante de Planck réduite: | $\hbar$ = 1.055x10$^{-34}$ J.s |
| Masse de l'électron: | $m_0$= 9.1x10$^{-31}$ Kg |
| Charge de l'électron: | q=-e= -1.6x10$^{-19}$ C |
| Electron-Volt: | 1 eV = 1.6x10$^{-19}$ J |