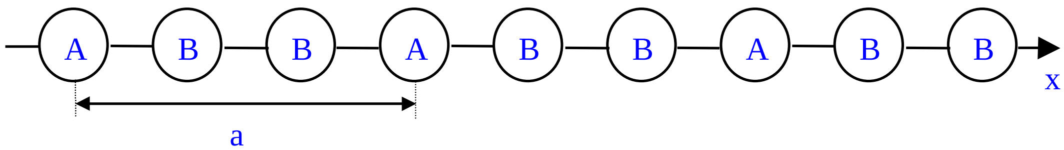
ISEM 3 **le 16 juin 2000**
EXAMEN
Durée: 4^h
Tout document autorisé
Avec calculatrice

PHYSIQUE DES SOLIDES

Rédiger les deux problèmes sur copies séparées

Problème 1: Structure de bandes d'un solide unidimensionnel (≈ 10 points)

On considère le cristal unidimensionnel suivant de longueur L (N=nombre de mailles), où A et B sont des atomes de nature différente. Chaque atome A possède 2 électrons sur sa couche de valence, chaque atome B possède 1 électron sur sa couche de valence et la distance a vaut 8 $\mathring{A}$.



Pour étudier la structure de bandes de ce solide dans l'approximation des liaisons fortes, on considérera une orbitale de type "s" sur chaque atome A (φ_{sA}) et une orbitale de type "s" sur chaque atome B (φ_{sB}) et on notera:

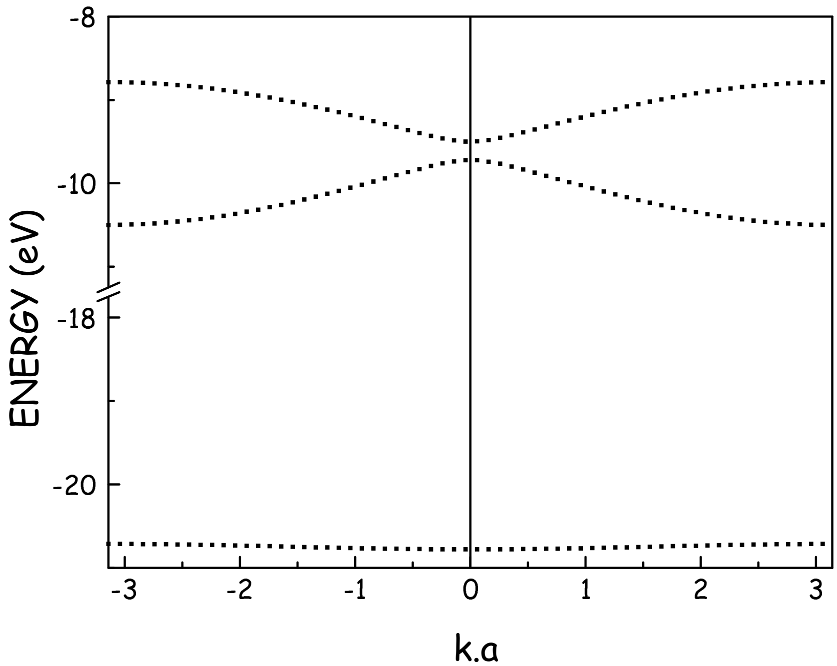
$E_A = \langle \varphi_{sA} | \hat{H} | \varphi_{sA} \rangle$=-20eV
$E_B = \langle \varphi_{sB} | \hat{H} | \varphi_{sB} \rangle$=-10eV
$\beta = \langle \varphi_{sA} | \hat{H} | \varphi_{sB} \rangle$=-2eV si A et B sont premiers voisins
$\Delta = \langle \varphi_{sB} | \hat{H} | \varphi_{sB'} \rangle$=-0.5eV si B et B' sont premiers voisins de type « B »

1. Préciser les données cristallographiques de ce solide (maille élémentaire, motif primitif, réseau et réseau réciproque, zone de Brillouin).

2. En précisant, mais sans chercher à le résoudre, le système obtenu, expliquer comment on pourrait déterminer la structure de bandes de ce matériau par la méthode des liaisons fortes aux premiers voisins (en ne retenant qu'une fonction "s" par atome A et une fonction "s" par atome B).

3. Préciser les niveaux d'énergie accessibles aux électrons lorsque $\Delta = 0$ (ou si Δ est beaucoup plus faible que les autres énergies). A quoi est alors équivalent ce système? Préciser dans ce dernier cas le remplissage des niveaux et la position du niveau de FERMI à T=0° K. A T≠0° K, préciser en fonction du niveau de FERMI E_F et de a l'expression des concentrations d' électrons (ou de trous si cette notion vous semble pertinente) sur les différents niveaux.

4. La résolution numérique du système du 2. fournit le résultat suivant:



On a trouvé pour k=0 les valeurs : -20.778 eV, -9.721 eV et –9.50 eV.

Par ailleurs, autour de k=0, les deux courbes supérieures sont assimilables à des arcs de paraboles donnés numériquement par :

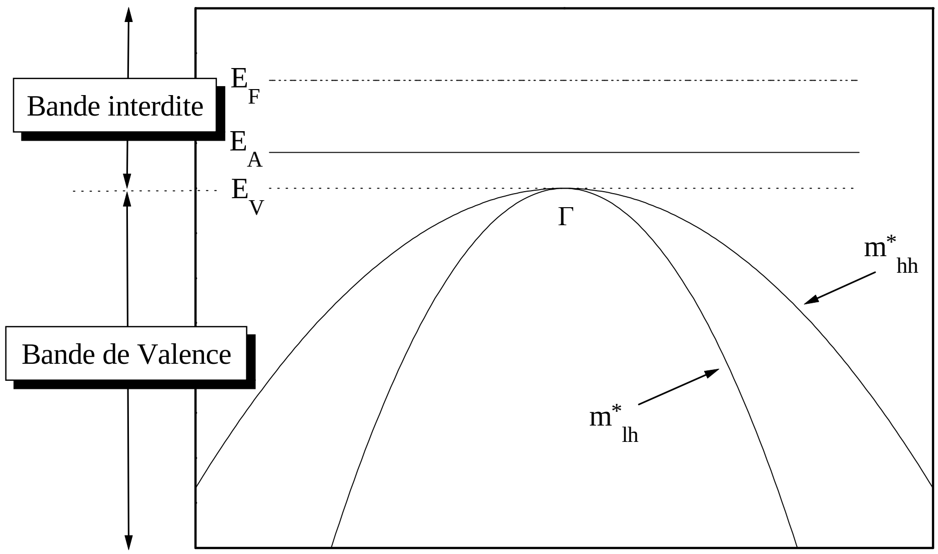
$$E = -9.721 - 0.47934(ka)^2 \ eV \quad \text{et} \quad E = -9.50 + 0.46368(ka)^2 \ eV \ .$$

Préciser alors (expression et application numérique) : la nature du cristal à 0° K avec les caractéristiques principales de la structure de bandes, les masses effectives associées, les densités effectives d'états dans les bandes de valence et de conduction, les concentrations en électrons et en trous et la position du niveau de FERMI E_F à T=300° K.

Problème 2: Etude des trous de la bande de valence d'un semi-conducteur bi-dimensionnel (≈ 10 points)

Remarque: les questions 4/ et 5/ sont indépendantes.

On considère que la bande de valence d' un semi-conducteur bi-dimensionnel est composée d' une bande dite de trous "lourds" (masse effective m^*_{hh}) et d' une bande de trous "légers" (masse effective m^*_{lh}) qui sont confondues en leur maximum (en Γ). On se placera dans tout le problème dans l'approximation de la masse effective autour de Γ.



1. Donner l'expression des relations de dispersion au voisinage de Γ dans l'approximation de la masse effective.

2. Préciser la densité d'états (sans la dégénérescence de spin) pour chaque bande ($n_{hh}(E)$ et $n_{lh}(E)$). Montrer que l'on peut remplacer ces densités d'états par une densité d'états unique $n_V(E)$ à condition d'employer une masse effective m^*_p dite "de densité d'états" dont on précisera l'expression.

3. Calculer les densités de trous lourds p_{hh}, de trous légers p_{lh} et finalement totale de trous p dans la bande de valence et montrer qu'elles se mettent sous la forme:

$$p_{hh} = N_{Vhh} \exp\left(\frac{E_V - E_F}{k_B T}\right) \quad , \quad p_{lh} = N_{Vlh} \exp\left(\frac{E_V - E_F}{k_B T}\right) \quad , \quad p = N_V \exp\left(\frac{E_V - E_F}{k_B T}\right)$$

On demande d'expliciter les approximations faites et de donner les expressions de N_{Vhh}, N_{Vlh} et N_V en fonction des masses effectives précédemment définies.

4. Ce semi-conducteur est dopé à l'aide d'atomes accepteurs en concentration N_A, induisant dans la bande interdite un niveau accepteur E_A proche de la bande de valence E_V. On se place dans un domaine de température pour lequel la production d'électrons par le processus intrinsèque est négligeable (n<<p). La concentration en atomes accepteurs ionisés N_A^- est:

$$N_A^- = \frac{N_A}{1 + 4\exp\left(\frac{E_A - E_F}{k_B T}\right)}$$

a/ Ecrire l'équation d'électroneutralité tenant compte des hypothèses.

b/ Montrer qu'elle fournit une équation du second degré en $u = \exp\left(-\frac{E_F}{k_B T}\right)$ (équation à préciser) dont la solution s'écrit pour E_F :

$$E_F = E_A - k_B T \; Ln\left[-\frac{1}{8} + \frac{1}{8}\sqrt{1 + \frac{16 N_A}{N_V}\exp\left(\frac{E_A - E_V}{k_B T}\right)}\right]$$

c/ Pour les températures les plus basses, pour lesquelles $16\frac{N_A}{N_V}\exp\left(\frac{E_A - E_V}{k_B T}\right) >> 1$, donner une expression simplifiée de $E_F(T)$ puis l'expression de la concentration en trous p. Interpréter.

d/ Pour les températures les plus élevées du domaine considéré, on a $16\frac{N_A}{N_V}\exp\left(\frac{E_A - E_V}{k_B T}\right) << 1$. A l'aide d'un développement limité, donner l'expression simple de E_F et p en précisant ce que signifie alors le résultat.

5. En utilisant un modèle semi-classique pour décrire les trous, l'expression de la vitesse des trous lourds v_{hh} et celle des trous légers v_{lh} en fonction de E_V-E est :

$$v_{hh} = \sqrt{\frac{2(E_V - E)}{m_{hh}^*}} \quad , \quad v_{\ell h} = \sqrt{\frac{2(E_V - E)}{m_{lh}^*}}$$

En déduire une expression de la vitesse thermique moyenne $\langle v_{hh} \rangle$ des trous lourds dans la bande de valence et de la vitesse thermique moyenne $\langle v_{lh} \rangle$ des trous légers dans la bande de valence. Définir alors logiquement puis calculer une "vitesse thermique moyenne des trous" $\langle v_{th} \rangle$ dans la bande de valence.

<u>Rappel</u>: Valeur moyenne sur la bande de valence d'une grandeur h(E):

$$\langle h(E) \rangle = \frac{\int_{BV} h(E)\, f(E)\, 2 n_V(E)\, dE}{\int_{BV} f(E)\, 2 n_V(E)\, dE}$$

On rappelle également que: $\int_0^\infty \sqrt{t}\, e^{-t}\, dt = \frac{\sqrt{\pi}}{2}$ *et* $\int_0^\infty \frac{e^{-t}}{\sqrt{t}}\, dt = \sqrt{\pi}$

<u>Données numériques:</u>

$e = 1.6 \times 10^{-19}$ C, $\hbar = 1.055 \times 10^{-34}$ J.s, m_0=masse de l'électron= 9.1×10^{-31} Kg, $k_B = 1.38 \times 10^{-23}$ J/K (constante de BOLTZMANN), constante diélectrique du Silicium $\varepsilon_r = 11.7$.