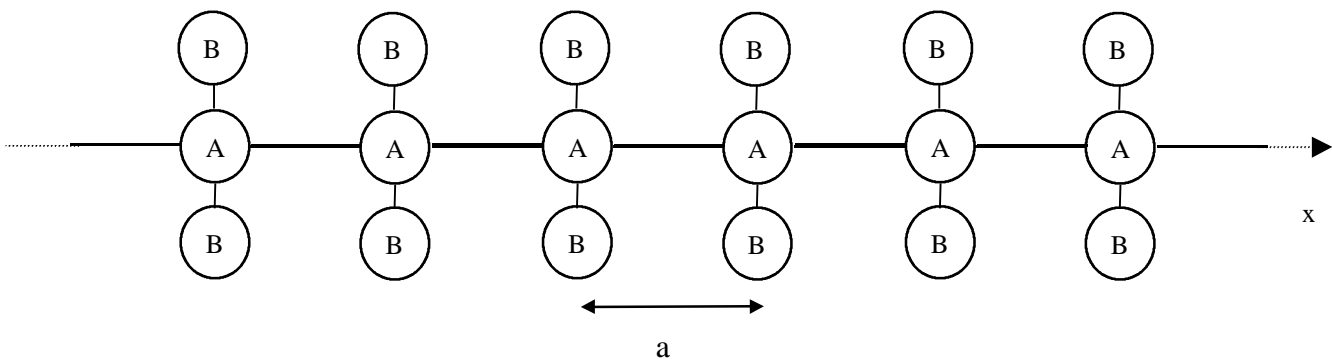


PHYSIQUE DU SOLIDE

Le problème proposé comporte plusieurs questions qui peuvent en grande partie être traitées indépendamment. Le barème est détaillé au fil de l'énoncé. Les réponses et explications devront être rédigées pour être prises en compte, les résultats principaux mis en valeur (encadrés...) et les applications numériques munies d'unités.

Problème : Etude d'un cristal unidimensionnel AB₂

On considère le cristal unidimensionnel ci-dessous de longueur $L=1\text{cm}$ suivant l'axe Ox, où A et B sont des atomes de natures différentes, chaque atome A possédant 2 électrons sur sa couche de valence et chaque atome B possédant 1 électron sur sa couche de valence :



$$a = 3 \text{ \AA}.$$

1. Préciser les données cristallographiques utiles à l'étude de la structure de bandes : réseau, vecteur de base, motif, réseau réciproque, zone de Brillouin. (~ 1 point)
2. Expliquer comment on peut déterminer la structure de bandes de ce matériau par la méthode des liaisons fortes en prenant une fonction "s" par atome A et une fonction "s" par atome B, et en retenant les interactions d'un atome A avec les deux atomes B l'entourant et d'un atome A avec les deux atomes A adjacents (qui seront tous considérés comme « premiers voisins » d'un atome A donné, même si cela est un léger abus de langage). Les autres interactions seront négligées. Préciser le système obtenu. (~ 3 points)

On introduira donc les énergies et interactions suivantes:

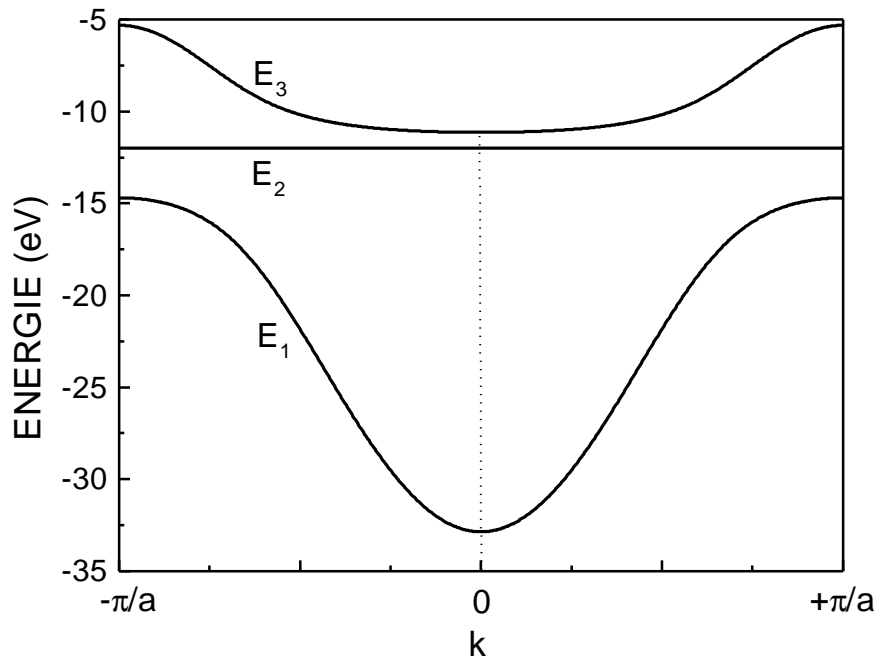
$$E_A = \langle j_{sA} | \hat{H} | j_{sA} \rangle = -20 \text{ eV}$$

$$E_B = \langle j_{sB} | \hat{H} | j_{sB} \rangle = -12 \text{ eV}$$

$b = \langle j_{sA} | \hat{H} | j_{sA} \rangle = -6 \text{ eV}$ entre deux orbitales « s » portées par des atomes A « premiers voisins ».

$\Delta = \langle j_{sA} | \hat{H} | j_{sB} \rangle = -3 \text{ eV}$ si A et B sont « premiers voisins »

3. La résolution de ce système fournit la structure de bandes représentée ci-dessous. On demande de préciser l'expression des trois relations de dispersion obtenues $E_1(k)$, $E_2(k)$ et $E_3(k)$ à l'aide du système précédent. (~ 2 points)



4. Discuter le remplissage et justifiez la nature isolante du cristal à 0°K. Préciser en particulier la largeur de la bande interdite, le nombre de minima équivalents dans la bande de conduction et la nature de la bande de valence. (~ 2 points)

5. Autour du point $k=0$ la relation de dispersion $E_3(k)$ peut être approximée par :

$$E(k) \approx -11.147 \text{ eV} + a \cdot (ka)^2$$

où $a = 0.238 \text{ eV}$. En déduire la valeur de la masse effective m_n^* autour de $k=0$ dans la bande de conduction (donner l'expression et la valeur de m_n^*/m_0 en fonction de a), où m_0 est la masse de l'électron dans le vide. (~ 2 points)

Retrouver l'expression théorique de m_n^* en fonction des paramètres E_A , E_B , b et Δ à partir de l'expression de $E_3(k)$. (~ question difficile 1.5 points)

6. Rappeler l'expression de la densité d'états $n(E)$ d'un gaz d'électrons libres en dimension 1 (ne pas inclure la dégénérescence de spin dans $n(E)$). En déduire une expression approchée de la densité d'états $n_{BC}(E)$ valable dans le bas de la bande de conduction du semi-conducteur étudié ici, en justifiant les modifications apportées. (~ 2 points)
7. Calculer en fonction du niveau de Fermi E_F l'expression de la densité n d'électrons présents à $T \neq 0^\circ\text{K}$ dans la bande de conduction en supposant que le semi-conducteur est non dégénéré. Préciser les approximations faites et mettre le résultat sous la forme usuelle, faisant apparaître une densité effective d'états N_C dans la bande de conduction dont on donnera l'expression et dont on calculera la valeur à 300°K . (~ 2 points)

On utilisera le fait que :
$$\int_0^\infty \frac{\exp(-u)}{\sqrt{u}} du = \sqrt{\pi} .$$

8. Etablir une relation similaire pour concentration p de trous dans la bande de valence (assimilable à la relation de dispersion E_2). (~ 1 point)
9. En déduire la valeur de n et p et la position de E_F à 300°K (expressions et valeurs). (~ 2 points)
10. On remplace maintenant une certaine proportion des atomes A par des atomes possédant 3 électrons sur leur couche de valence (en concentration N_I). De quel type de dopage cela se rapproche-t-il? En supposant que la structure de bandes reste pratiquement inchangée, à l'exception d'un niveau dopant E_I ayant une énergie d'ionisation $e_I = 30\text{meV}$, écrire en fonction de E_F la concentration N_I^+ en sites dopants ionisés. (~ 1 point)

Cette équation forme avec les expressions intégrales (ou non) de n et p un système d'équations en E_F . Nous allons le résoudre en supposant que le niveau de FERMI E_F se situe nettement dans la bande de conduction (cas fortement dégénéré). Dans ce cas nous pouvons utiliser le résultat numérique suivant:

$$\int_0^\infty \frac{x^{-\frac{1}{2}}}{1 + e^{x-u}} dx \approx 2\sqrt{u} \quad \text{valable si } 5 \leq u < +\infty \quad (1)$$

On supposera de plus que le nombre d'électrons provenant du processus intrinsèque est alors négligeable pour la gamme de température considérée.

Précisez l'expression de n en fonction de E_F dans le cas fortement dégénéré (mais en conservant l'approximation de la masse effective). (~ 1 point)

Montrez qu'on trouve un résultat "similaire" à celui d'un gaz d'électrons libres 1D à 0°K (résultat à ré-établir pour le gaz d'électrons libres). (~ 1 point)

Que devient l'équation d'électro-neutralité dans notre hypothèse? En supposant que tous les dopants soient ionisés, calculer la position de E_F en fonction de N_I et déterminer à partir de quelle valeur N_{I-lim} de N_I l'approximation (1) est valable à 300°K. Comparer cette expression à la concentration en atomes A. (~ 1.5 points)

Sachant que le rayon de la première orbite de Bohr d'un électron sur le niveau dopant hydrogénoïde E_I est de l'ordre de 30 \AA , utilisez un critère simple (à justifier) pour établir et calculer une concentration limite N_{I-lim2} au-delà de laquelle le comportement du matériau deviendra conducteur (transition isolant-métal). (~ 1 point).

Liste de valeurs numériques utiles:

Constante de Planck réduite: $\hbar = 1.054 \times 10^{-34} \text{ J.s}$
Constante de Planck : $h = 6.62 \times 10^{-34} \text{ J.s}$
Masse de l'électron: $m_0 = 9.1 \times 10^{-31} \text{ Kg}$
Electron-Volt: $1 \text{ eV} = 1.6 \times 10^{-19} \text{ J}$
Constante de Boltzmann : $k_B = 1.38 \times 10^{-23} \text{ J/K}$
Charge de l'électron : $e = 1.6 \times 10^{-19} \text{ C}$