

Corrigé examen de physique des solides ISEM3 du 25 juin 2002

Exercice 1: Etude élémentaire d'un semi-conducteur intrinsèque

1. L'hypothèse que le niveau de FERMI E_f se trouve dans la bande interdite revient ici à dire que:

$$E_f \gg kT \text{ pour la bande de valence (} E_v=0 \text{ origine des énergies)}$$

$$E_G - E_f \gg kT \text{ pour la bande de conduction (} E_c=E_G \text{)}$$

Expression littérale de la concentration n d'électrons dans la bande de conduction:

$$n = \frac{1}{V} \int_{E_G}^{E_G+\Delta} N_S \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E-E_f}{kT}\right)} dE \approx \frac{N_S}{V} \int_{E_G}^{E_G+\Delta} \exp\left(-\frac{E-E_f}{kT}\right) dE$$

par Boltzmann, donc:

$$n = \frac{N_S kT}{V} \exp\left(-\frac{E_G - E_f}{kT}\right) \left(1 - \exp\left(-\frac{\Delta}{kT}\right)\right)$$

Expression littérale la concentration p de trous dans la bande de valence:

$$p = \frac{1}{V} \int_{-\Delta}^0 N_S \left(1 - \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E-E_f}{kT}\right)}\right) dE \approx \frac{N_S}{V} \int_{-\Delta}^0 \exp\left(+\frac{E-E_f}{kT}\right) dE$$

par Boltzmann, donc:

$$p = \frac{N_S kT}{V} \exp\left(-\frac{E_f}{kT}\right) \left(1 - \exp\left(-\frac{\Delta}{kT}\right)\right)$$

2. Comme $n=p$ dans un matériau intrinsèque, on obtient: $np=n_i^2$, avec

$$n_i = \frac{N_S kT}{V} \exp\left(-\frac{E_G}{2kT}\right) \left(1 - \exp\left(-\frac{\Delta}{kT}\right)\right)$$

La position du niveau de FERMI intrinsèque E_i s'obtient en remplaçant n_i dans l'expression de p par exemple (ou dans celle de n):

$$E_i = \frac{E_G}{2}$$

résultat typique du cas où les densités effectives d'états sont identiques dans la bande de valence et la bande de conduction.

Application numérique: $E_i=0.35\text{eV}$, $n_i=6.8 \times 10^{13} \text{cm}^{-3}$.

3. Comme $N_a \gg n_i$, on peut négliger les concentrations de porteurs issues du processus intrinsèque, et comme nous sommes à température ambiante, toutes les impuretés de type accepteur sont ionisées et ont donc libéré un trou. Donc, à l'équilibre:

$$p = N_a$$

$$n = \frac{n_i^2}{N_a}$$

$$E_f = kT \ln \left(\frac{N_s kT}{N_a V} \left(1 - \exp \left(-\frac{\Delta}{kT} \right) \right) \right)$$

Problème 2: Densité d'électrons libres dans une diode GUNN au GaAs

1. Expression littérale de la résistivité ρ du barreau: $\rho = \frac{1}{e N_d \mu_\ell}$

En tenant compte des données : $\rho = 8.3 \Omega \text{cm}$.

2. **a)** Il y a six minima équivalents à K' dans la 1^{ère} zone de BRILLOUIN (car 6 directions équivalentes [100]).

b) Expression de la densité d'états $n(E)$ (sans tenir compte de la dégénérescence de spin) d'un gaz d'électrons libres tridimensionnel enfermé dans un volume V :

$$n(E) = \frac{V}{4\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} \sqrt{E}$$

Alors, la densité n_ℓ d'électrons légers dans l'approximation de la masse effective vaut:

$$n_\ell = \frac{1}{V} \int_{E_c}^{\infty} 2N_\ell(E) f(E) dE$$

avec:

$$N_\ell(E) = \frac{V}{4\pi^2} \left(\frac{2m_\ell^*}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} \sqrt{E - E_c}$$

Le calcul aboutit à :

$$n_\ell = \frac{1}{\sqrt{2}} \underbrace{\left(\frac{m_\ell^* kT}{\pi \hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}}}_{N_c} \exp \left(-\frac{E_c - E_F}{kT} \right)$$

De même:

$$n_L = \frac{6}{V} \int_{E_c}^{\infty} 2N_L(E) f(E) dE$$

avec:

$$N_L(E) = \frac{V}{4\pi^2} \left(\frac{2m_L^*}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} \sqrt{E - E_c}$$

Le calcul aboutit à :

$$n_L = \frac{6}{\sqrt{2}} \underbrace{\left(\frac{m_L^* kT}{\pi \hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}}}_{N_c} \exp \left(-\frac{E_c - E_F}{kT} \right)$$

AN: $N_C=4.6 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$, $N_C=1.5 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$.

c) Le rapport n_L/n_ℓ à température ambiante vaut:

$$\frac{n_L}{n_\ell} = \left(\frac{m_L^*}{m_\ell^*} \right)^{\frac{3}{2}} \exp\left(-\frac{E_C - E_C}{kT} \right)$$

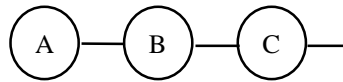
On trouve numériquement $\frac{n_L}{n_\ell} = 2.9 \times 10^{-4}$, ce qui justifie l'approximation faite au 1)

La position de E_F s'obtient en posant alors $n_\ell = N_D$ d'où $E_F = E_C - kT \ln\left(\frac{N_C}{N_D} \right) = E_C - 0.22 \text{ eV}$.

Exercice 3: Structure de bandes d'un solide unidimensionnel

1. Données cristallographiques :

- maille élémentaire = longueur « a », motif :
- réseau : $\vec{a} = a\vec{i}$



- réseau réciproque : $\vec{a}^* = \frac{2\pi}{a}\vec{i}$
- zone de Brillouin : $-\frac{\pi}{a} \leq k < \frac{\pi}{a}$

2. En ne retenant qu'une fonction "s" par atome A, une fonction "s" par atome B, et une fonction "s" par atome C, la fonction d'essai de la méthode s'écrit :

$$\Psi = c_A \sum_n e^{ikna} \phi_{sA}^n + c_B \sum_n e^{ikna} \phi_{sB}^n + c_C \sum_n e^{ikna} \phi_{sC}^n$$

En projetant alors l'équation de Schrödinger sur les fonctions de la maille 0 (origine), on obtient un système 3x3, dont les trois inconnues sont les coefficients c_A , c_B et c_C , et qui s'écrit en négligeant les recouvrements (liaisons fortes) et en limitant les interactions aux premiers voisins :

$$\begin{bmatrix} -E + E_A & \beta & \beta e^{-ika} \\ \beta & -E + E_B & \Delta \\ \beta e^{+ika} & \Delta & -E + E_C \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_A \\ c_B \\ c_C \end{bmatrix} = 0$$

Ce système n'aura de solution non triviale que si le déterminant s'annule, ce qui fournit trois relations de dispersion $E(k)$.

3. Lorsque $\Delta = 0$, le système devient :

$$\begin{bmatrix} -E + E_A & \beta & \beta e^{-ika} \\ \beta & -E + E_B & 0 \\ \beta e^{+ika} & 0 & -E + E_C \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_A \\ c_B \\ c_C \end{bmatrix} = 0$$

L'annulation du déterminant (avec $E_B = E_C$) fournit trois niveaux plats (ou bandes plates):

$$E_3 = \frac{E_A + E_B}{2} + \sqrt{\left(\frac{E_A - E_B}{2}\right)^2 + \beta^2} = -8.84 \text{ eV}$$

$$E_2 = E_B = -10 \text{ eV}$$

$$E_1 = \frac{E_A + E_B}{2} - \sqrt{\left(\frac{E_A - E_B}{2}\right)^2 + \beta^2} = -21.16 \text{ eV}$$

Ce système est alors équivalent à N molécules C-A-B indépendantes les unes des autres. Chaque niveau est 2N fois dégénéré (2N places disponibles sur chaque niveau). Nous devons placer 4N électrons. A 0°K, les niveaux E_1 et E_2 sont remplis et le niveau E_3 vide. Le niveau de FERMI est alors en $\frac{E_3 + E_2}{2} = -9.42 \text{ eV}$.

A $T \neq 0^\circ\text{K}$, on peut considérer, vu sa position, que le niveau E_1 reste toujours complètement rempli. La concentration n_3 en électrons sur le niveau E_3 (assimilable à une bande de conduction) et la concentration p_2 en trous sur le niveau E_2 (assimilable à une bande de valence) sont données par :

$$\begin{cases} n_3 = \frac{2}{a} \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E_3 - E_F}{kT}\right)} \\ p_2 = \frac{2}{a} \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E_F - E_2}{kT}\right)} \end{cases}$$

Comme $n_3 = p_2$, le niveau de FERMI reste exactement en $\frac{E_3 + E_2}{2} = -9.42 \text{ eV}$.