

## PHYSIQUE DU SOLIDE

*Toutes les réponses doivent être justifiées : une réponse sans justification ne donne pas de points. Une présentation soignée des réponses est demandée.*

### Exercice 1. Questions de cours

1. Soit un solide cubique de côté  $L$ . Donner l'expression des conditions aux limites d'annulation et les conditions aux limites cycliques de Born Von Karman, sur la fonction d'onde d'un électron  $\Psi(x, y, z)$ .
2. Définir en une phrase ce qu'est la densité d'états électroniques.
3. Définir en une phrase ce qu'est un phonon.
4. Une absorption optique donne lieu à la création d'une paire électron-trou. Faire un schéma d'un diagramme d'énergie avant et après une absorption optique, sur lequel on voit l'électron et le trou.

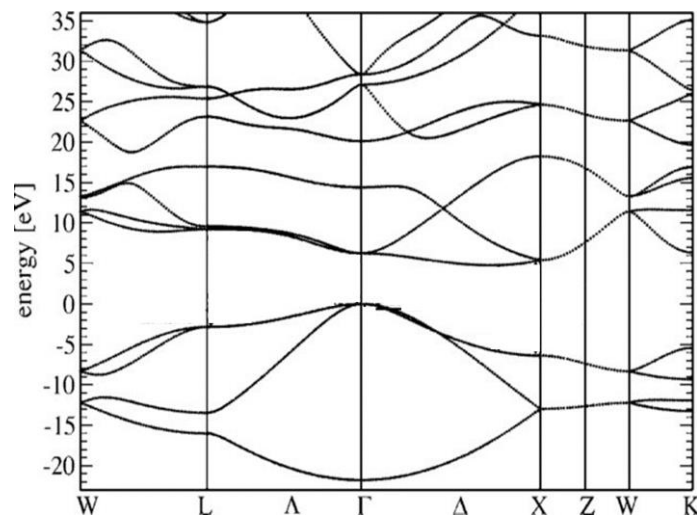
### Exercice 2. Dopage du diamant

Le diamant collectionne les records, notamment avec sa dureté extrême, sa conductivité thermique supérieure à celle de tous les autres solides et sa transparence à la lumière. De plus, la fabrication de diamants monocristallins très purs ou possédant une concentration d'impuretés contrôlée ouvre la voie à l'élaboration de diodes électroluminescentes émettant de la lumière UV, la fabrication de dispositifs micro-ondes de haute puissance et, surtout, l'exploitation du spin des électrons dans des nouvelles technologies quantiques.

Cet exercice porte sur l'étude des propriétés optiques et électriques du diamant, avec et sans dopage. Un formulaire est donné en fin de sujet.

#### Diamant pur

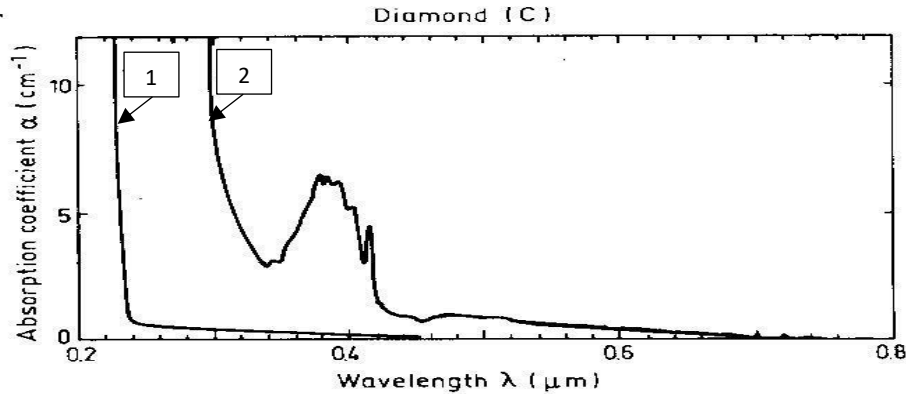
La structure de bandes calculée pour le diamant pur est reproduite ci-dessous. L'axe horizontal donne les points remarquables de la zone de Brillouin. L'énergie nulle correspond à l'énergie de Fermi.



Justifier brièvement chaque réponse.

1. Quelle est la largeur de la bande interdite ? Indiquer si le gap est direct ou indirect.
2. Le diamant est-il un bon conducteur électrique ?

La bande interdite peut aussi être déterminée expérimentalement en mesurant l'absorption optique. La courbe 1 du graphe suivant présente le coefficient d'absorption d'un diamant à très faible taux d'impuretés.



3. Déterminer la bande interdite à partir du graphe, et exprimer le résultat en électronvolts.
4. Comparer ce résultat à l'énergie des photons dans la gamme du visible, ci-dessous. Que peut-on en déduire concernant l'aspect du diamant pur ?

Color	Wavelength	Frequency	Photon energy
violet	380–450 nm	668–789 THz	2.75–3.26 eV
blue	450–495 nm	606–668 THz	2.50–2.75 eV
green	495–570 nm	526–606 THz	2.17–2.50 eV
yellow	570–590 nm	508–526 THz	2.10–2.17 eV
orange	590–620 nm	484–508 THz	2.00–2.10 eV
red	620–750 nm	400–484 THz	1.65–2.00 eV

5. Quelle est la position approximative du niveau de Fermi dans le diamant pur à température ambiante, sans calcul ? (Pas de justification nécessaire)

### Diamant dopé

Le diamant est dopé par des atomes d'azote N, donneurs d'électrons.

6. Quel est l'effet de l'introduction de donneurs sur la structure de bandes ? (Niveaux d'énergie, position). Comment évolue la position du niveau de Fermi par rapport au cas du diamant pur ? (Pas de justification nécessaire)
7. La mesure du coefficient d'absorption d'un diamant dopé N est représentée courbe 2 du graphe ci-dessus. Quelle est l'énergie du pic des dopants ?
8. En déduire la couleur principalement absorbée. Sachant que la couleur apparente est la couleur complémentaire de celle des photons absorbés, de quelle couleur sont les diamants dopés à l'azote ? Les couples de couleurs complémentaires principales sont : vert/rouge, jaune/violet, orange/bleu.

### Conductivité électrique en fonction de la température et du dopage

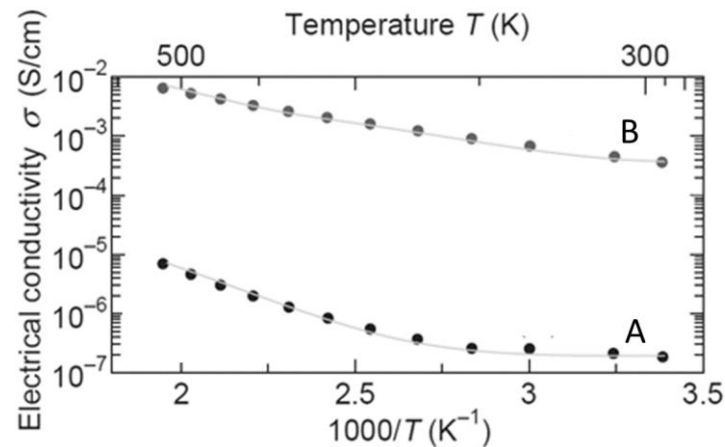
On cherche d'abord l'expression générale de la conductivité électrique d'un semi-conducteur pur en fonction de la température et de sa bande interdite. On note  $n$  la densité d'électrons libres en bande de conduction et  $p$  la densité de trous libres en bande de valence.

9. Donner l'équation d'électro neutralité.

10. En déduire une relation entre la densité intrinsèque  $n_i$  en fonction de la largeur de la bande interdite  $E_g$ ,  $N_c$ ,  $N_v$  et  $kT$ .
11. Calculer  $n_i$ . Les masses effectives des porteurs dans le diamant sont  $m_e^* = 1,9$ ,  $m_h^* = 0,8$ .
12. Déterminer l'expression de la conductivité en fonction du gap et de la température.
13. Calculer la conductivité à température ambiante. La mobilité des porteurs de charges dans le diamant (à température ambiante) est  $\mu_e = 1900 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ ,  $\mu_h = 1600 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ .

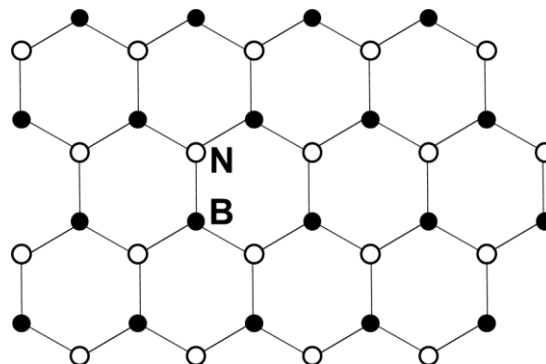
On cherche ensuite l'évolution de la conductivité électrique avec le dopage. Soit  $N_D$  la concentration de dopants donneurs.

14. Déterminer la densité d'électrons et de trous.
15. En déduire l'expression de la conductivité électrique en fonction de  $N_D$ .
16. Comment évolue la conductivité électrique avec le dopage ? Le graphe suivant présente l'évolution de la conductivité en fonction de la température de deux diamants différents. Quelle est la courbe qui correspond au diamant le plus dopé ?
17. En supposant que la mobilité à température ambiante (300 K) n'est pas modifiée par le dopage, quelle concentration d'atomes d'azote a été incorporée dans le cristal B ?



### Exercice 3. Cristallographie

On considère une feuille de nitrure de bore (BN), cristal à deux dimensions, dont la structure cristalline est représentée sur la figure ci-dessous.



1. Reproduire cette structure puis ajouter les vecteurs de base, entourer le motif et hachurer la maille élémentaire.
2. B et N apportent respectivement 3 et 5 électrons de valence. Soit N le nombre de mailles élémentaires dans la feuille de nitrure de bore considérée. Quel est le nombre d'électrons de valence total du système ?

## Formulaire et valeur des constantes usuelles

- Métaux

Densité de courant  $j = \sigma E$

Conductivité électrique  $\sigma = \frac{ne^2\tau}{m}$

Mobilité  $\mu = \frac{e\tau}{m}$

- Semiconducteurs

Concentration d'électrons  $n$  (de masse effective  $m_e^*$ ) et de trous  $p$  (de masse effective  $m_h^*$ )

$\sigma = ne\mu_e + pe\mu_h$

$n = N_c \exp\left(-\frac{E_c - E_F}{k_B T}\right)$  et  $p = N_v \exp\left(\frac{E_v - E_F}{k_B T}\right)$

$N_c = 2 \left(\frac{2\pi m_e^* k_B T}{h^2}\right)^{3/2} = \left(\frac{m_e^*}{m_0}\right)^{3/2} N_0$

$N_v = 2 \left(\frac{2\pi m_h^* k_B T}{h^2}\right)^{3/2} = \left(\frac{m_h^*}{m_0}\right)^{3/2} N_0$

$N_0 = 2 \left(\frac{2\pi m_0 k_B T}{h^2}\right)^{3/2} = 2.10^{19} / cm^3$  à température ambiante

$h = 6,626.10^{-34} \text{ J.s} = 4,136.10^{-15} \text{ eV.s}$

$\hbar = h / 2\pi$

$c = 3.10^8 \text{ m.s}^{-1}$

$e = 1,602.10^{-19} \text{ C}$

$m_0 = 9,1.10^{-31} \text{ kg}$

$k_B T = 25 \text{ meV}$  à température ambiante