SECONDE SESSION DE PHYSIQUE DU SOLIDE ET NANOSCIENCES

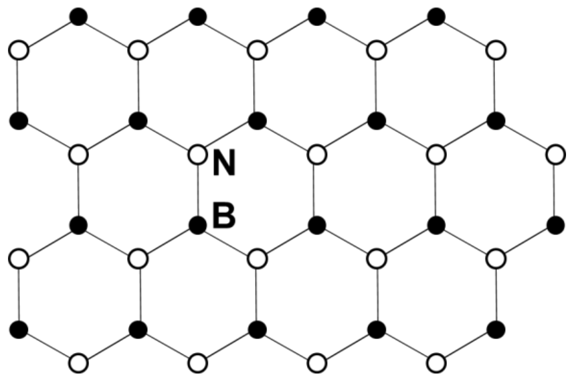
16 / 06 / 2018

Durée : 3 heures.

Aucun document n'est autorisé. La calculatrice est permise.

Exercice 1. Feuille de nitrure de bore

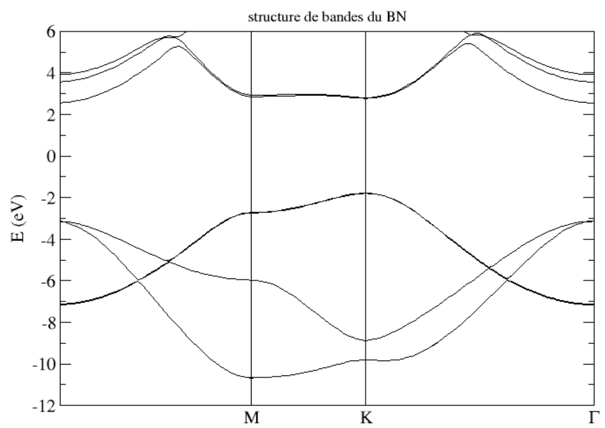
On considère une feuille de nitrure de bore (BN), cristal à deux dimensions, dont la structure cristallographique est représentée sur la figure ci-dessous.



1) Indiquer les vecteurs de base du réseau, la maille élémentaire et le motif de ce cristal. Comparer avec la structure cristalline d'une monocouche de graphite.

2) Les numéros atomiques des atomes B et N sont respectivement $Z_B=5$ et $Z_N=7$. Donner la configuration électronique de chacun de ces atomes. Quels sont les électrons de valence ?

La structure de bandes d'une feuille de BN est représentée ci-dessous. Le niveau de Fermi est égal à 0 eV.



3) En quel point k se trouve le haut de la bande de valence. Quelle est la largeur de la bande de valence ?

Exercice 2. Gaz d'électrons libres à deux dimensions

On considère N électrons de masse m, sans interaction, enfermés dans une surface carrée de côté L. Le potentiel constant à l'intérieur de la surface sera choisi comme origine des énergies.

1) Ecrire l'équation de Schrödinger pour un électron.

2) En utilisant les conditions aux limites de Born-von-Karman, donner les fonctions d'onde et énergies permises pour un électron.

3) Représenter dans l'espace des $\vec{k}$ les états permis. Quelle est la surface moyenne occupée par un état $\vec{k}$?

4) Quel contour géométrique définissent les vecteurs $\vec{k}$ de même énergie ? A l'intérieur de ce contour géométrique, quel est le nombre total de vecteurs $\vec{k}$? On appellera $N(k)$ ce nombre.

5) A chaque vecteur $\vec{k}$ correspondent deux états électroniques d'énergie E, l'un pouvant accueillir un électron de spin up et l'autre un électron de spin down (principe de Pauli). Déterminer l'expression du nombre $N(E)$ d'états électroniques à partir de $N(k)$?

6) La densité $D(E)$ d'états électroniques est égale à $\frac{dN(E)}{dE}$. Montrer que $D(E)$ est égale à Cm où C est une constante que l'on calculera.

Exercice 3. Semiconducteur à deux dimensions

On considère un semiconducteur à deux dimensions. On suppose que la structure électronique est caractérisée par deux bandes paraboliques :

$$E(\vec{k}) = E_C + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e^*} \qquad \text{pour la bande de conduction}$$

$$\text{et} \qquad E(\vec{k}) = E_V - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_h^*} \qquad \text{pour la bande de valence}$$

avec m_e^* et m_h^* les masses effectives respectivement des électrons en bas de la bande de conduction et des trous en haut de la bande de valence. Le calcul de la densité d'états est alors le même que pour un gaz d'électrons (trous) libres à deux dimensions (exercice 2) en remplaçant m par m^*.

1) Donner l'expression des densités d'états en bande de conduction $D_C(E)$ et en bande de valence $D_V(E)$ en adaptant simplement l'expression de la question 6 de l'exercice 2. Préciser la limite de validité en énergie de chaque expression.

2) Ecrire les équations donnant la densité surfacique d'électrons libres en bande de conduction (n) et de trous libres en bande de valence (p) en tenant compte que la probabilité d'occupation des états est donnée par la statistique de Fermi $f(E)$.

3) Dans le cas où le niveau de Fermi E_F est distant de plusieurs kT de E_C et E_V (semi-conducteur non dégénéré), pour calculer n et p, on pourra approximer $f(E)$ par :

$$f(E) \approx \exp(\frac{E_F - E}{kT})$$

Déterminer l'expression de n. En déduire l'expression de p par symétrie.

4) Dans le cas d'un semiconducteur intrinsèque, écrire l'équation d'électro-neutralité. En déduire la position du niveau de Fermi. Comment évolue-t-il en fonction du rapport des masses effectives ? On pourra prendre $n = A\ exp\left(\frac{E_F - E_C}{kT}\right)$ et $p = B\ exp\left(-\frac{E_F - E_V}{kT}\right)$ si les expressions de n et p n'ont pas été déterminées auparavant.

5) Calculer le produit np. En déduire la concentration n_i de porteurs intrinsèques ?

6) Tracer qualitativement la courbe $log(n_i) = f(1/T)$ pour T<300K.