

## PHYSIQUE DU SOLIDE ET NANOSCIENCES

### Etude de l'arséniure d'indium (InAs)

#### 1. Cristallographie

L'arséniure d'indium InAs cristallise dans la structure zinc blende représentée sur la figure 1 ci-dessous.

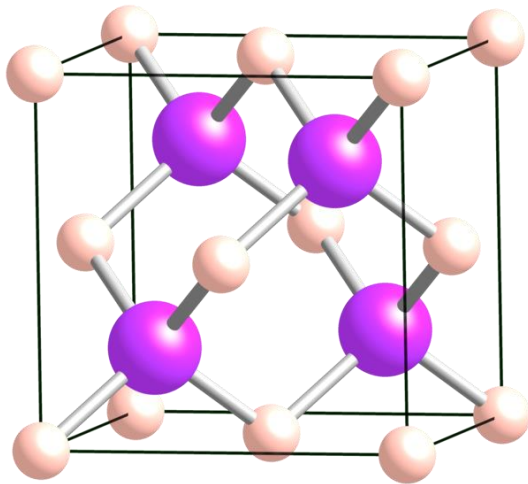


Figure 1: représentation de la structure zinc blende de l'InAs. Les grosses sphères représentent les atomes d'indium, les petites les atomes d'arsenic. L'arête du cube est  $a$ .

- 1.1. Exprimer les vecteurs de base en fonction de  $a$  dans une base orthonormée.
- 1.2. Donner le motif.
- 1.3. Donner le nombre, la nature et la distance des atomes premiers voisins des atomes In.
- 1.4. Application numérique :  $a = 0.60583$  nm. Calculer le nombre d'atomes (In et As) par unité de volume.

#### 2. InAs intrinsèque

On rappelle que dans un semi-conducteur les concentrations d'électrons dans la bande de conduction  $n$  et de trous dans la bande de valence  $p$  sont données par :

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

avec: 
$$N_c = 2 \left(\frac{2\pi m_e^* kT}{h^2}\right)^{3/2} \text{ et } N_v = 2 \left(\frac{2\pi m_h^* kT}{h^2}\right)^{3/2}$$

où  $m_e^*$  et  $m_h^*$  sont les masses effectives des électrons en bande de conduction et des trous en bande de valence, respectivement.

- 2.1. Calculer le produit  $np$ . Comment varie-t-il avec  $E_F$  ?
- 2.2. En déduire la densité  $n_i$  de porteurs dans le semi-conducteur intrinsèque.
- 2.3. Calculer la position du niveau de Fermi en fonction de  $E_c$ ,  $E_v$ ,  $m_e^*$ ,  $m_h^*$  et  $kT$ .
- 2.4. Tracer qualitativement la courbe  $\log(n_i)=f(1/T)$  pour  $T < 300\text{K}$ .
- 2.5. Pour évaluer plus précisément la variation en température, on considère maintenant une élévation de température  $\Delta T$  de 1K. Calculer la dérivée  $\frac{\Delta n_i}{\Delta T}$  où  $\Delta n_i$  est la variation de la concentration  $n_i$  (attention :  $N_c$  et  $N_v$  dépendent de  $T$ ). En déduire  $\frac{\Delta n_i}{n_i}$  en fonction de  $\frac{\Delta T}{T}$ ,  $E_g$  et  $T$ .

### 3. Absorption optique de puits quantiques d'InAs

L'absorption optique d'un cristal semi-conducteur d'InAs est gouvernée par la largeur de son gap. Si on considère maintenant des "rubans" extrêmement fins (quelques nanomètres d'épaisseur), l'énergie devient quantifiée en raison du confinement quantique et conduit à un élargissement du gap. On modélise le ruban d'InAs d'épaisseur  $d$  par un puits quantique infiniment profond à l'intérieur duquel un électron de masse effective  $m_e^* = 0.023 m_0$  (ou un trou de masse  $m_h^* = 0.40 m_0$ ) est soumis à une énergie potentielle  $E_C$  pour l'électron ( $E_V$  pour le trou). Ainsi pour l'électron,  $V = E_C$  pour  $0 < x < d$  et  $V = +\infty$  pour  $x < 0$  et  $x > d$ .

- 3.1. Ecrire l'équation de Schrödinger vérifiée par la fonction d'onde  $\varphi(x)$  d'un électron dans le puits.
- 3.2. Montrer que l'équation se met sous la forme :

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} + k^2 \varphi = 0$$

- 3.3. Quel est le lien entre  $k^2$  et  $E$  ?
- 3.4. Appliquer les conditions aux limites d'annulation de la fonction d'onde. En déduire la quantification de  $k$  et de l'énergie de l'électron.

Pour le trou, on admet que les énergies sont données par :

$$E = E_V - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_h^*} \text{ où la quantification sur } k \text{ est la même que pour l'électron.}$$

- 3.5. Représenter sur un axe vertical l'espacement en termes d'énergie des trois premiers niveaux pour les électrons et pour les trous. On précisera les positions de  $E_C$  et  $E_V$ . Est-ce que les énergies  $E_C$  et  $E_V$  correspondent à des niveaux permis ?
- 3.6. Déterminer la bande interdite des rubans  $E'_g > E_g$  en fonction de  $d$  ?
- 3.7. Application numérique : En considérant que la bande interdite de l'InAs massif est  $E_g = 0.35 \text{ eV}$ , calculer la bande interdite de nanorubans d'épaisseur 3, 6 et 9 nm.

Une telle expérience a été réalisée très récemment grâce à des rubans fins (puits quantiques) d'InAs.

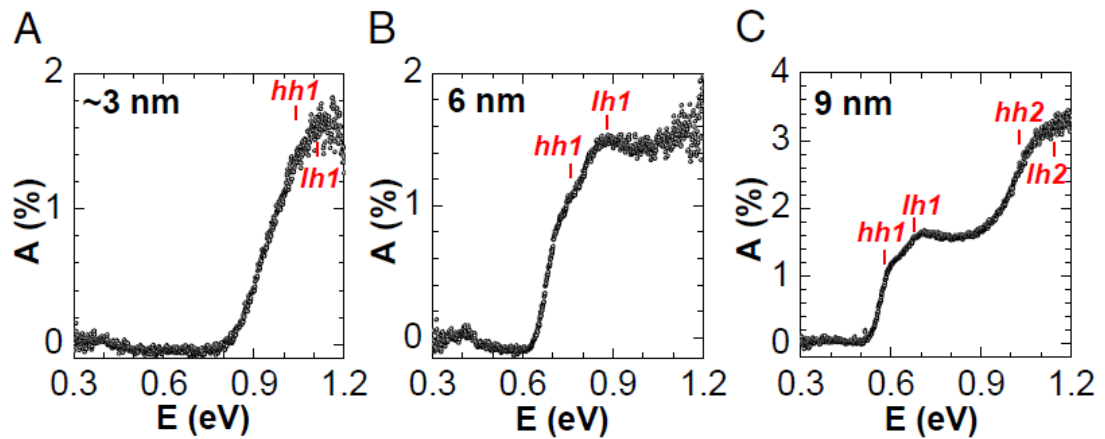


Figure 2 : Courbes d'absorption de rubans d'InAs d'épaisseurs variables.  $e = 3, 6$  et  $9$  nm. D'après Fang et al., PNAS, 110, 11688 (2013)

- 3.8. Sur la figure 1, les seuils d'absorption sont repérés par "hh1". Relever leur position en fonction de l'épaisseur. Coïncident-elles avec vos calculs ?
- 3.9. A quel domaine de longueurs d'ondes correspondent ces valeurs d'énergie ?
- 3.10. A votre avis, quelle est l'origine du second seuil d'absorption sur la figure 1C ?

On donne :

Masse de l'électron  $m_0 = 9.1 \cdot 10^{-31}$  kg

Vitesse de la lumière :  $c = 3 \cdot 10^8$  m/s

Constante de Planck :  $h = 6.62 \cdot 10^{-34}$  J.s