

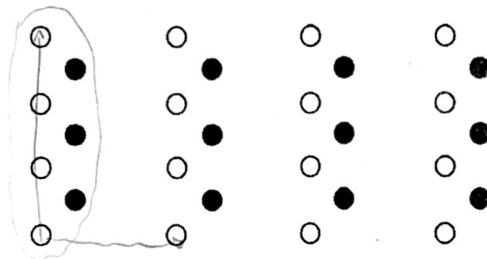
PHYSIQUE DU SOLIDE ET NANOSCIENCES

Ce sujet comporte trois exercices à résoudre, une annexe, une feuille de réponse.

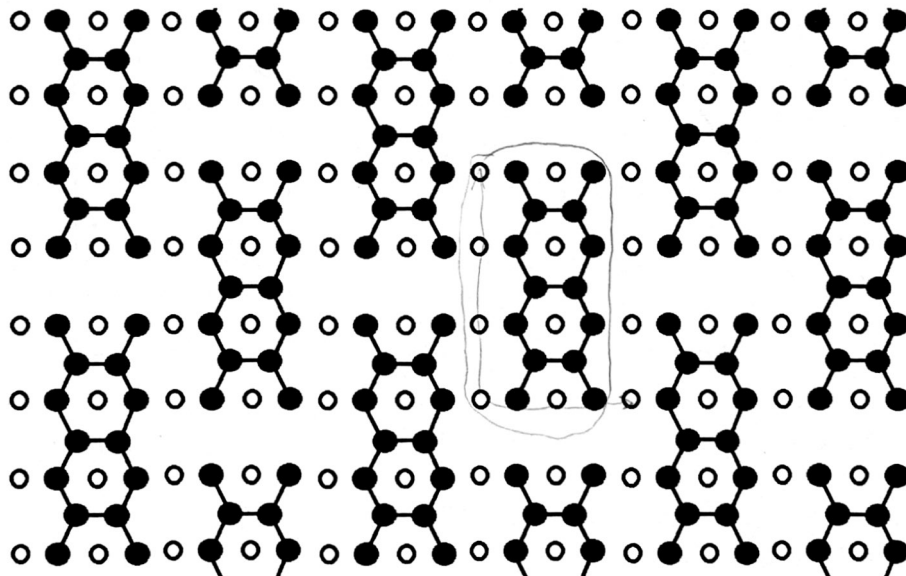
Exercice 1. Structure cristalline

Indiquer sur la feuille de réponse (à joindre à votre copie) les vecteurs de base et le motif des deux structures cristallines bidimensionnelles suivantes. Ce sont deux types d'arrangement de la surface du GaAs ; les atomes noirs sont des As et les blancs des Ga.

1) Surface (110).



2) Reconstruction $c(4 \times 4)$ de la surface (100).



Exercice 2. Calcul de la structure de bande d'un cristal bidimensionnel

Cet exercice porte sur la compréhension du texte joint en annexe. Lire l'annexe, puis répondre aux questions suivantes.

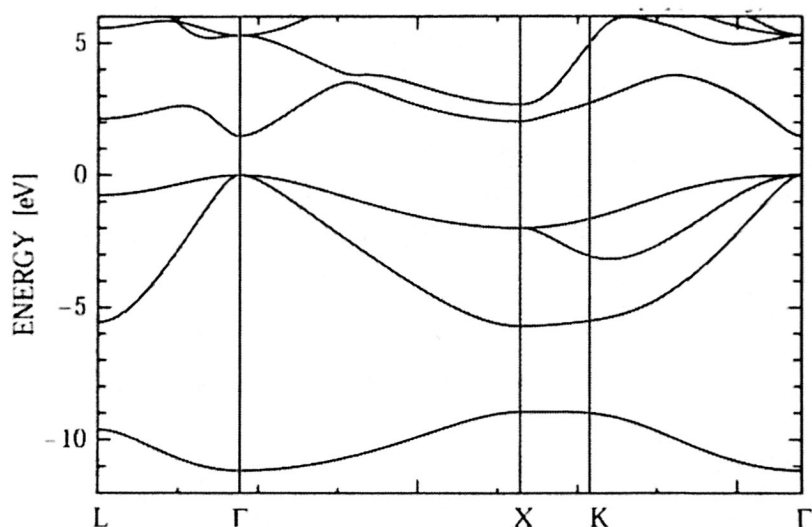
Questions de cours.

- 1) Comment s'appelle le vecteur k ? Quelle est sa dimension ?
- 2) Donner l'expression du théorème de Bloch et préciser pour quel type de potentiel il est utilisé.
- 3) Quelles sont les hypothèses de l'approximation des liaisons fortes ?

Compléter le texte, en écrivant les éléments manquants sur votre copie.

- 4) Complétez la partie 1 (cristallographie) en indiquant les vecteurs de base et le motif du cristal.
- 5) Compléter le paragraphe partie 2 sur le décompte des états disponibles, en remplissant les espaces a,b,c,d,e manquants.
- 6) Sur le graphe partie 3, en vous basant sur le vecteur k correspondant à X, déterminer quelles sont les courbes (A,B,C,D) correspondant à E1,E2,E3,E4.
- 7) Partie 3, compléter le dernier mot du texte sur les propriétés de conduction du système.

Exercice 3. Structure de bandes d'InP



Cette figure représente la structure de bandes d'InP. Le zéro d'énergie correspond à l'énergie de Fermi à $T=0K$.

- 1) En quels points k se trouvent le haut de la bande de valence et le bas de la bande de conduction ? La bande interdite est-elle directe ou indirecte ?
- 2) Donner la valeur de la bande interdite. A quelle longueur d'onde correspond cette énergie ?
- 3) Qualitativement, comment varie la densité d'électrons dans la bande de conduction du semiconducteur intrinsèque en fonction de la température ?

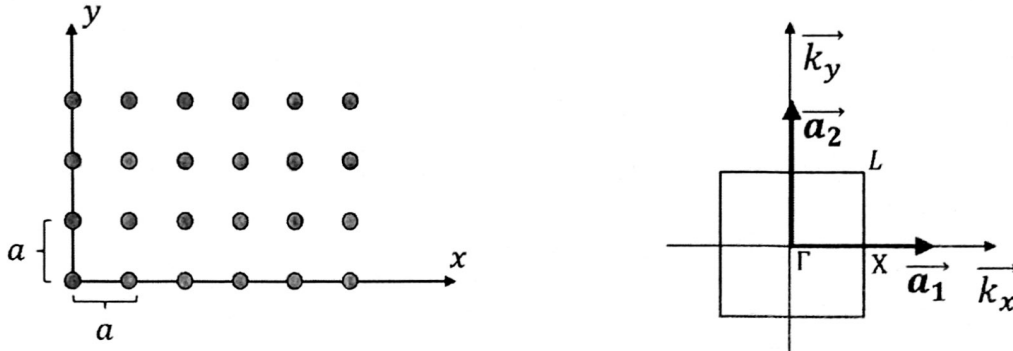
Rappels : $e = 1.6 \times 10^{-19} \text{ C}$, $h = 6.62 \times 10^{-34} \text{ J.s}$, $c = 3.0 \times 10^8 \text{ m/s}$, $\epsilon_0 = 8.85 \times 10^{-12} \text{ F/m}$

ANNEXE

Structure de bandes d'un cristal bidimensionnel carré en bandes s et en bandes p

On veut déterminer la structure de bandes d'un cristal bidimensionnel carré de côté a constitué d'atomes identiques, par la méthode des liaisons fortes limitée aux premiers voisins. On écrira $\vec{k} = k_x \vec{x} + k_y \vec{y}$.

1. Cristallographie



A gauche : schéma du cristal dans l'espace réel. A droite : Schéma de la première zone de Brillouin
Coordonnées des points : $\Gamma(0,0)$, $X(\frac{\pi}{a}, 0)$, $L(\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a})$

Maille élémentaire. Les vecteurs de base sont $\vec{a}_1 = a \vec{x}$ et $\vec{a}_2 = a \vec{y}$.
Le motif est constitué d'un atome.

Réseau réciproque. Le réseau réciproque est un réseau carré simple bâti sur les vecteurs $\vec{a}_1 = \frac{2\pi}{a} \vec{x}$ et $\vec{a}_2 = \frac{2\pi}{a} \vec{y}$. La zone de Brillouin schématisée ci-dessus est un carré de côté $\frac{2\pi}{a}$ centré sur l'origine Γ .

2. Structure en bande s

Pour faire le calcul de structure de bandes, on décide de ne retenir dans un premier temps sur chaque atome qu'une fonction atomique s, $\varphi_{s,n}(\vec{r})$, pour les électrons de la couche de valence, où l'indice n repère la maille à laquelle appartient l'atome concerné. Pour rappel, les fonctions s ont une dégénérescence égale à 2 et possèdent une symétrie sphérique.

Soit Ψ la fonction d'essai utilisée pour faire le calcul sous forme d'une combinaison linéaire. On peut la simplifier pour tenir compte de la symétrie cristalline (théorème de Bloch) :

$$\Psi = \sum_n c_n \varphi_{s,n} = c_0 \sum_n e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}_n} \varphi_{s,n}$$

On calcule ensuite, dans l'approximation des liaisons fortes, l'expression $E(\vec{k})$ des niveaux d'énergie accessibles aux électrons en fonction du vecteur \vec{k} .

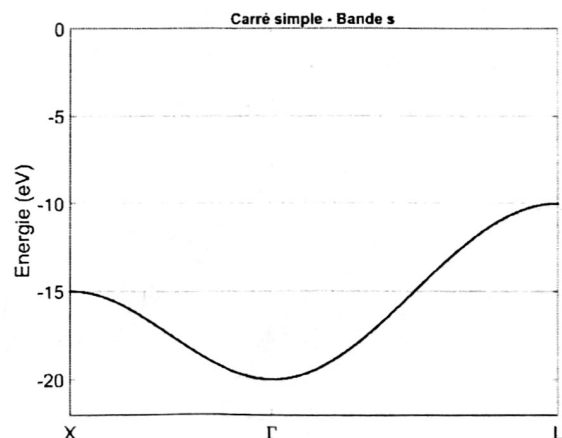
On pose :

$$E_s = \langle \varphi_{s,n} | \hat{H} | \varphi_{s,n} \rangle \text{ et } \beta_{ss} = \langle \varphi_{s,n} | \hat{H} | \varphi_{s,n'} \rangle \text{ si } n \text{ et } n' \text{ sont premiers voisins.}$$

De $\langle \varphi_{s,0} | \hat{H} - E | \Psi \rangle = 0$, on déduit :

$$E_1(\vec{k}) = E_s + 2\beta_{ss} (\cos(k_x a) + \cos(k_y a))$$

La représentation de l'ensemble des niveaux accessibles, suivant les chemins $X \rightarrow \Gamma$ et $\Gamma \rightarrow L$ de la première zone de Brillouin est représenté ci-contre.



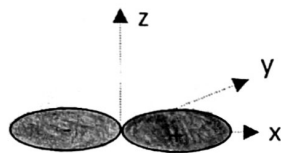
Déterminons maintenant le nombre d'états électroniques disponibles. Soit N le nombre de mailles avec $N = N_x \times N_y$ où N_x (N_y) est le nombre de mailles dans la direction x (y). Les conditions aux limites de Born Von Karman imposent $k_x = \dots\dots(a) \frac{2\pi}{a} \dots\dots$ et $k_y = \dots\dots(b) \dots\dots$ où n_x et n_y sont deux entiers, soit une densité d'états k égales à $n(\vec{k}) = \frac{N_x N_y a^2}{4\pi^2}$. La surface de la 1^{ère} zone de Brillouin étant $S^* = \frac{4\pi^2}{a^2}$ le nombre d'états k autorisés dans la 1^{ère} zone de Brillouin est donné par $n(\vec{k}) \cdot S^* = \dots\dots(c) \dots\dots$. Chaque état k amène 2 états électroniques possibles car $\dots\dots(d) \dots\dots$. Le nombre total d'états électroniques disponibles est donc $\dots\dots(e) \dots\dots$ au total.

pour conduct haut valence

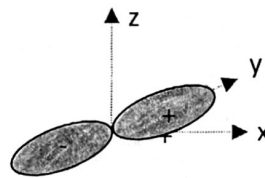
3. Structure en bandes p

Chaque atome possède en fait 3 électrons sur sa couche de valence. Dans ce cas le calcul précédent est insuffisant car on ne peut pas mettre tous les électrons ($3N$) dans la bande trouvée ($2N$ états disponibles). De plus l'état atomique individuel fait intervenir les états p donc on doit les prendre en compte pour déterminer la structure de bandes.

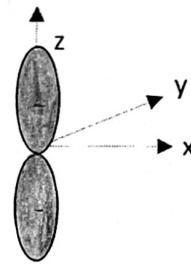
On considère désormais sur chaque atome les 3 orbitales atomiques p ($\varphi_{px,n}$, $\varphi_{py,n}$ et $\varphi_{pz,n}$) de la couche de valence, représentées ci-dessous. Les fonctions $\varphi_{px,n}$ et $\varphi_{py,n}$ sont orientées dans le plan du cristal tandis que la direction z est perpendiculaire au cristal. On supposera par ailleurs que les fonctions « p » ne se couplent pas aux fonctions « s », ce qui permet de calculer indépendamment les bandes issues des fonctions « s » et celles issues des fonctions « p ».



$\varphi_{px,n}$



$\varphi_{py,n}$



$\varphi_{pz,n}$

Comme pour la bande s , on calcule l'expression des niveaux d'énergies accessibles déterminés dans l'approximation des liaisons fortes, pour les trois bandes issues des orbitales p . On trouve :

$$E_2(\vec{k}) = E_p + 2\beta_{pp\pi} (\cos(k_x a) + \cos(k_y a))$$

$$E_3(\vec{k}) = E_p + 2\beta_{pp\pi} \cos(k_x a) + 2\beta_{pp\sigma} \cos(k_y a)$$

$$E_4(\vec{k}) = E_p + 2\beta_{pp\sigma} \cos(k_x a) + 2\beta_{pp\pi} \cos(k_y a)$$

$$\text{Avec } E_p = \langle \varphi_{pz,n} | \hat{H} | \varphi_{pz,n} \rangle,$$

$$\beta_{pp\pi} = \langle \varphi_{pz,n} | \hat{H} | \varphi_{pz,n'} \rangle,$$

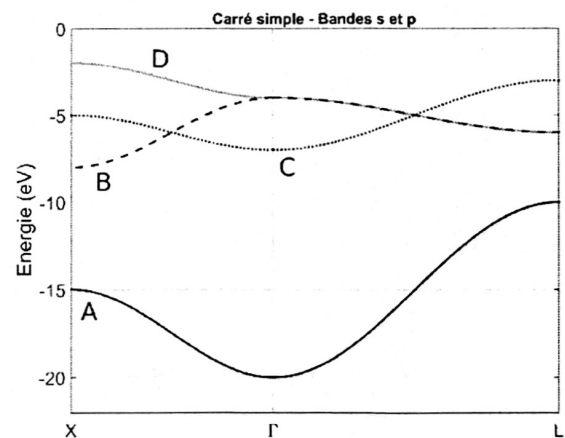
$$\beta_{pp\sigma} = \langle \varphi_{pxy,n} | \hat{H} | \varphi_{pxy,n'} \rangle$$

n et n' premiers voisins.

L'ensemble des courbes s et p obtenues sont représentées ci-contre, en utilisant les valeurs suivantes:

$$E_s = -15\text{eV}, E_p = -5\text{eV},$$

$$\beta_{ss} = -1.25\text{eV}, \beta_{pp\pi} = -0.5\text{eV}, \beta_{pp\sigma} = +1\text{eV}$$



Pour déterminer les propriétés de conduction électriques, on doit déterminer le remplissage de ces bandes à 0° Kelvin. On dispose de $3N$ électrons. La bande E_1 est complètement remplie avec $2N$ électrons. Les bandes E_2, E_3 et E_4 fournissent $6N$ places disponibles entre $E_p - 2\beta_{pp\sigma} + 2\beta_{pp\pi}$ et $E_p + 2\beta_{pp\sigma} - 2\beta_{pp\pi}$ et accueillent N électrons. La dernière bande occupée n'étant que partiellement remplie, le système est $\dots\dots\dots$