Partiel CSI3-CIR3 14 mai 2020
Durée : 3 heures, <u>envoi de la copie inclus</u>
Documents et calculatrice *permis*

PHYSIQUE DU SOLIDE ET NANOSCIENCES

Questions de cours

1) On considère du silicium, de densité électronique intrinsèque n_i, dopé p avec une concentration N_A de dopants. On suppose que les dopants sont tous ionisés à température ambiante.
   a. Que valent les concentrations n en électrons et p en trous à température ambiante ?
   b. Quelle est la conductivité à température nulle ?
2) Expliquer pourquoi la largeur de la bande interdite d'un semi-conducteur impacte l'absorption optique du matériau. Si on réduit le gap, l'absorption optique augmente-t-elle ou diminue-t-elle ?
3) Voici la structure de bandes de phonons du silicium.
   a. A quoi correspond l'axe des abscisses, quelle est l'unité ?
   b. Combien y a-t-il de bandes acoustiques ? optiques ?

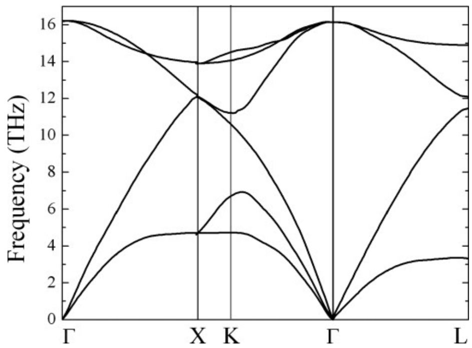


Figure 1. Structure de bandes de phonon du silicium

Exercice 1. Structure de bandes du graphène

Le graphène est le nom donné à un plan cristallin d'atomes de carbone arrangés en un réseau hexagonal.

1) La structure cristalline du graphène est représentée ci-dessous. Donner la maille élémentaire, les vecteurs de base et le motif.

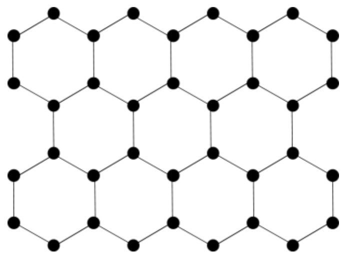


Figure 2. Schéma de la structure cristalline du graphène

2) Quelle est la configuration électronique de l'atome de carbone (Z=6) ? Combien y a-t-il d'électrons de valence ?

3) En spécifiant votre raisonnement, déduire des questions précédentes le nombre d'électrons de valence par maille élémentaire.

La structure de bandes électronique du graphène est la suivante :

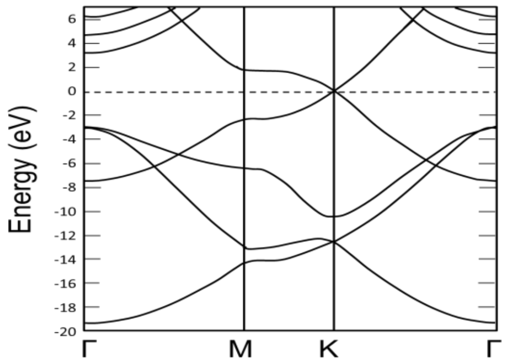


Figure 3. Structure de bandes électroniques du graphène

4) Le plan de graphène est constitué de N mailles. Rappeler le nombre d'états électroniques par bandes. Sachant le nombre d'électrons de valence par maille (question 3), en déduire le nombre de bandes pleines. A quelle énergie se trouve le niveau de Fermi?
5) Le graphène est-il métallique, semi-conducteur ou isolant ? Justifier.

Exercice 2. Conductivité du graphène et de nanotubes de carbone

Comme on l'a vu, le graphène est un plan cristallin d'atomes de carbone arrangés en un réseau hexagonal. Un nanotube de carbone peut être considéré, au niveau conceptuel, comme une couche de graphène enroulée sur elle-même (voir figure 4).

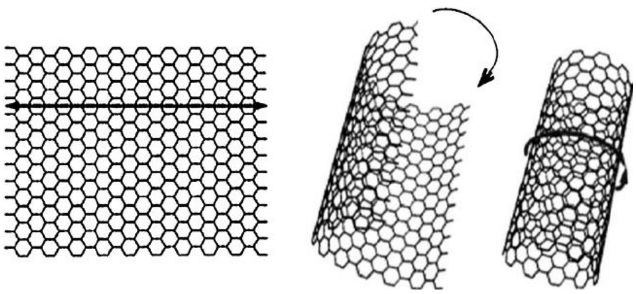


Figure 4. Graphène et nanotube de carbone

La relation de dispersion $E(\vec{k})$ du graphène autour du niveau de Fermi est linéaire. On peut donc écrire approximativement[1]

$$E(\vec{k}) = \pm\hbar v_0 k \qquad (1)$$

où v_0 est une constante homogène à une vitesse et $k = |\vec{k}| = \sqrt{k_x^2 + k_y^2}$ pour le graphène dont les atomes sont dans le plan xOy. Le signe + donne la bande de conduction et le signe – la bande de valence. La même formule (avec la même valeur de v_0) est applicable pour les nanotubes, avec $k = |k_x|$ pour un nanotube dont l'axe principal est suivant l'axe Ox.

Le but de cet exercice est de démontrer l'effet de la dimensionnalité du système sur la conductivité. Tandis que le graphène (système bidimensionnel) est un très mauvais conducteur (sauf si on déplace le

---

[1] *L'équation plus rigoureuse serait $E(\vec{k}) = \pm\hbar v_0(k - k_F)$ car le vecteur d'onde de Fermi n'est pas nul ici.*

niveau de Fermi par l'application d'un champ électrique), les nanotubes de carbone (systèmes quasiment unidimensionnels) conduisent très bien le courant.

A) Densité d'états et conductivité d'un feuillet de graphène

On commence par le calcul de la densité d'états pour le graphène, donc un système bidimensionnel où la dispersion est donnée par l'équation (1). On supposera que les fonctions d'ondes sont données par $\Psi(x, y) = A\, exp\big(ik_x x + ik_y y\big)$. On prendra les conditions aux limites de Born-Von-Karman en considérant un feuillet de dimensions L_x et L_y.

1) Calculer les valeurs permises pour les composantes k_x et k_y du vecteur d'onde.
2) Quelle est, dans l'espace réciproque, la surface occupée par chaque état $\vec{k}$ en fonction de L_x et L_y ?
3) Calculer le nombre d'états *N(k)* contenus dans un disque de rayon k.
4) Utiliser la relation de dispersion donnée par l'équation (1) pour en déduire *N(E)*, le nombre d'états dans l'intervalle [0, *E*].
5) La densité d'états (nombre d'états par unité d'énergie par unité de surface) est donnée par $n(E) = \frac{2}{L_x L_y}\frac{dN(E)}{dE}$. Montrer que $n(E) = \alpha|E|$ et préciser la valeur de α. Tracer $n(E)$ autour de $E = 0$.
6) Quelle est la valeur $n(0)$? Conclure sur la mauvaise conductivité du graphène.

B) Densité d'états et conductivité des nanotubes métalliques

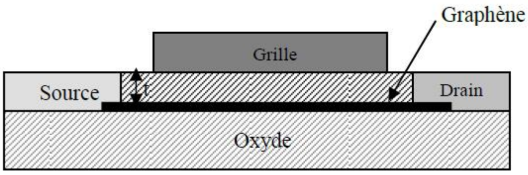
7) Calculer la densité d'états *n*(*E*) par unité d'énergie et par unité de longueur des nanotubes métalliques. Pour ce faire, suivez les étapes A1) jusqu'à A5) en utilisant les conditions aux limites de Born-von-Karman en considérant un nanotube de longueur L_x et en supposant que les fonctions d'ondes sont données par $\Psi(x) = A\, exp(ik_x x)$.

8) Quelle est la valeur *n*(0) ? Conclure sur la conductivité des nanotubes métalliques.

Exercice 3. Transistor à effet de champ avec du graphène.

Dans un transistor à effet de champ, le courant est modifié par une tension électrique V_g appliquée transversalement au sens de déplacement des porteurs. L'objectif de cet exercice est d'étudier un transistor à base de graphène et de donner une modélisation simple de la résistivité en fonction de V_g.

Pour cela on assimile ce système à un condensateur plan dans lequel l'une des électrodes est formée par la grille et l'autre par le feuillet de graphène. Les deux plans sont séparés d'une distance $t = 300\, nm$. On rappelle que la capacité $C = Q/U$ d'un condensateur est le rapport de la charge électrique Q des plaques sur leur différence de potentiel U et qu'elle vaut $C = \varepsilon S/t$ dans le cas d'un condensateur plan avec $\varepsilon = \varepsilon_0 \varepsilon_r$ la permittivité diélectrique du milieu entre les plaques et S la surface des plaques. Soit e la charge élémentaire. On donne : $\varepsilon_0 = 8.85\ 10^{-12} F/m$ et $\varepsilon_r = 3.9$.



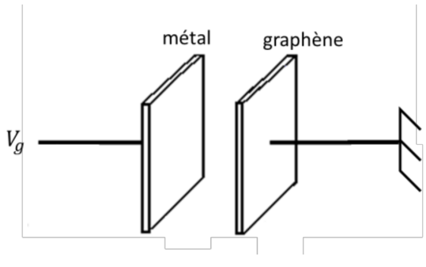


Figure 5. A gauche, schéma de profil du transistor, à droite, modélisation par un condensateur plan.

1) A partir de l'expression de la capacité d'un condensateur plan, déterminer la densité de charges par unité de surface n_S dans le morceau de graphène situé sous la grille en fonction de la tension V_g.
2) En règle générale, quelle est la relation qui relie la conductivité σ d'un conducteur à sa concentration de porteurs de charges n ayant une mobilité μ?
3) Dans le cas du graphène, on suppose qu'on peut utiliser la même expression de la conductivité σ en remplaçant la densité de charges volumique n par la densité de charges par unité de surface n_S. Quelle est la dimension de σ dans ce cas ? Montrer que σ est de la forme $\sigma = A\mu V_g$ et déterminer la constante A.
4) La figure 6 représente les variations de la résistivité ρ du feuillet de graphène en fonction de V_g. A l'aide des questions précédentes, expliquer le comportement au voisinage de $V_g = 0$.
5) On relève par exemple une résistivité de 2 kΩ pour une tension de 7.5 volts. Déterminer la mobilité des porteurs dans le feuillet. On prendra $A = 1.15\ 10^{-8}\ s.\Omega^{-1}\mathrm{cm}^{-2}$. Bien indiquer les unités du résultat obtenu.

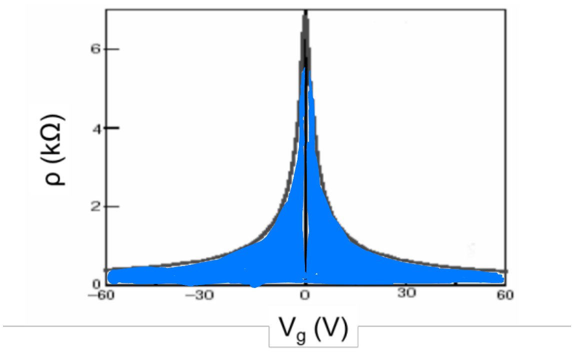


Figure 5. Résistivité du graphène en fonction de la tension de grille

Le transistor à effet de champ comporte généralement 3 électrodes : une électrode qui injecte les porteurs dans la structure, la source S ; une électrode qui recueille les porteurs, le drain D ; une dernière électrode où est appliquée la tension de commande, la grille G. La partie du matériau qui sert à conduire les électrons, située sous la grille, est appelée le canal. Les premiers transistors à effet de champ avec un canal constitué de graphène datent de 2007. L'image, obtenue par microscopie électronique, de l'un d'entre eux est représentée ci-dessous[2]. Pour former le transistor, le graphène est déposé sur une couche isolante d'oxyde de silicium, puis après dépôt du drain et de la source, une couche d'oxyde de silicium est à nouveau évaporée, et recouverte ensuite par un métal formant la grille.

6) Sur la figure 6, identifier à quoi correspond la bande claire irrégulière (a) et le fond sombre (b).

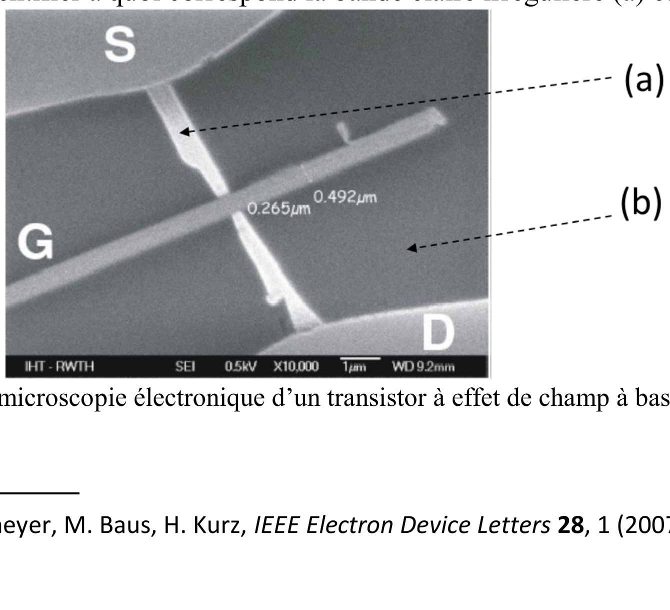


Figure 6. Image par microscopie électronique d'un transistor à effet de champ à base de graphène

[2] M. C. Lemme, T. J. Echtermeyer, M. Baus, H. Kurz, *IEEE Electron Device Letters* **28**, 1 (2007).