

## PARTIEL DE PHYSIQUE DU SOLIDE ET NANOSCIENCES

14 / 05 / 2018

*Durée : 3 heures.**Aucun document n'est autorisé. La calculatrice est permise.***Exercice 1. Etude du phosphore d'indium**

InP est un semiconducteur utilisé en microélectronique notamment pour sa forte mobilité électronique par rapport aux semiconducteurs classiques comme le silicium.

Les caractéristiques de InP sont les suivantes :

Bande interdite :  $E_g = 1.35 \text{ eV}$

Permittivité diélectrique relative :  $\epsilon_r = 13$

Densité d'états effective des électrons  $N_c = 5.7 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3}$

Densité d'états effective des trous  $N_v = 1.1 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-3}$

Mobilité des électrons :  $\mu_e = 5400 \text{ cm}^2 / \text{V.s}$

Mobilité des trous :  $\mu_h = 200 \text{ cm}^2 / \text{V.s}$

Pour les applications numériques on approximera  $kT$  à  $25 \text{ meV}$  à température ambiante ( $300\text{K}$ ).

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 :

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

On rappelle aussi que la résistivité  $\rho$  est reliée aux nombres  $n$  et  $p$  d'électrons en bande de conduction et de trous en bande de valence par unité de volume par :

$$\rho = \frac{1}{ne\mu_e + pe\mu_h}$$

où  $e = 1.602 \cdot 10^{-19} \text{ C}$  est la valeur absolue de la charge de l'électron.

On étudie d'abord le cas du semi-conducteur parfaitement pur.

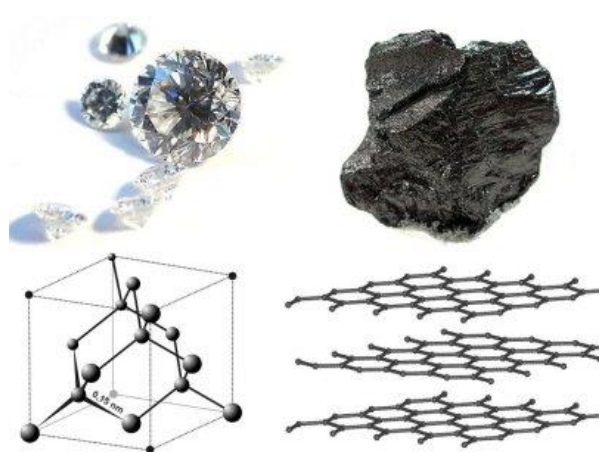
- 1) Quelle est la relation entre  $n$  et  $p$  dans un semi-conducteur intrinsèque ?
- 2) Calculer la densité de porteurs intrinsèque  $n_i$ . Faire l'application numérique.
- 3) Calculer la position du niveau de Fermi  $E_{Fi}$ . Application numérique.
- 4) Calculer la résistivité  $\rho_i$  à température ambiante. Application numérique.
- 5) On éclaire InP avec des photons infrarouge d'énergie  $1 \text{ eV}$  puis des photons orange d'énergie  $2 \text{ eV}$ . Dans chacun des cas, est-ce que la résistivité varie et comment ? Justifier (aucun calcul nécessaire).

On dope InP avec des impuretés de silicium donneuses à  $N_D = 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ . On suppose qu'à température ambiante tous les donneurs sont ionisés.

- 6) Déterminer les valeurs de  $n$  et de  $p$ . Application numérique.
- 7) Calculer la position du niveau de Fermi. Application numérique.
- 8) Calculer la résistivité à température ambiante. Application numérique.

## Exercice 2. Structure électronique du graphite et du diamant

Les atomes de carbone qui composent le graphite d'une mine de crayon ou un cristal de diamant sont les mêmes. Pourtant les deux matériaux sont très différents : aspect, conductivité électrique, rigidité... Sur le plan cristallographique on retrouve une grande différence entre les deux structures : les atomes du diamant occupent un arrangement périodique tridimensionnel alors que les atomes du graphite sont répartis en feuillets bidimensionnels superposés parallèlement les uns aux autres. Cette différence suffit-elle à expliquer la différence de propriétés optiques ou électriques entre les 2 matériaux ?



Pour répondre à cette question il faut un outil capable de relier la structure cristalline d'un matériau à ses propriétés physiques. L'approximation des liaisons fortes est un exemple de telles méthodes.

### A. Structure électronique en liaisons fortes : cas de la chaîne unidimensionnelle

**La partie A est une partie bonus.**

Le point de départ de l'approximation des liaisons fortes est la recherche d'une fonction d'onde cristalline sous forme d'une combinaison linéaire d'orbitales atomiques (on parle de LCAO).

Considérons le cas d'un cristal linéaire à un atome par maille suivant la direction  $x$ . On note  $a$  la distance interatomique. Chaque atome possède un électron de valence dans un état  $s$ . On note  $|\varphi_n\rangle = |\varphi(r - nai)\rangle$  l'orbitale atomique dans la  $n^{\text{ième}}$  maille.

1) Définir le réseau et la maille du cristal.

On cherche une solution de l'équation de Schrödinger pour ce système sous la forme d'une combinaison linéaire d'orbitales :

$$|\psi(k)\rangle = c \sum_n e^{ikna} |\varphi_n\rangle$$

où  $c$  est un coefficient.

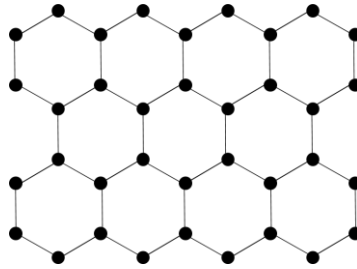
2) Projeter l'équation de Schrödinger sur l'orbitale atomique de la maille choisie comme origine. On considère que les orbitales  $|\varphi_n\rangle$  sont normées. Dans le développement des sommes, on négligera les termes de recouvrement ( $\langle \varphi_n | \varphi_m \rangle = 0$  si  $n \neq m$ ), on ne tiendra compte que des interactions aux premiers voisins notées  $\langle \varphi_n | H | \varphi_{n+1} \rangle = t$  ( $t < 0$ ) et on

notera  $\langle \varphi_n | H | \varphi_n \rangle = E_s$  où  $H$  est l'Hamiltonien. On obtient une équation dont l'inconnue est le coefficient  $c$ .

- 3) Déterminer la condition pour avoir une solution non triviale ( $|\psi(k)\rangle$  non nulle).
- 4) Déterminer les énergies permises  $E(k)$ .

## B. Structure électronique du graphite et du diamant

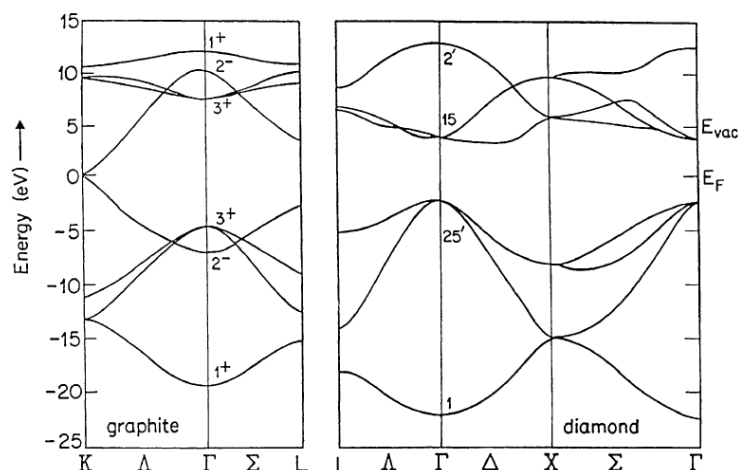
- 1) Quel est le motif, la maille élémentaire et les vecteurs de base d'un plan de graphite, reproduit ci-dessous ?



- 2) La structure cristalline du diamant peut être décrite par deux mailles d'un cristal de type CFC (cubique face centrée) enchevêtrés, décalés d'un vecteur  $(a/4 ; a/4 ; a/4)$  où  $a$  est la longueur de l'arête du cube CFC. Quel est le motif, la maille élémentaire et les vecteurs de base du diamant ?

Les structures de bande du graphite et du diamant calculées dans l'approximation des liaisons fortes sont reproduites ci-dessous.

- 3) Indiquer quel matériau est conducteur et isolant en justifiant votre réponse.
- 4) Dans le cas du diamant, indiquer l'amplitude de la bande interdite, le nombre de bandes de valence et de bandes de conduction.



- 5) La lumière visible couvre les longueurs d'onde de 400 à 800 nm. En déduire l'énergie correspondante des photons dans le visible.
- 6) Comparer cette gamme de valeur à la bande interdite du diamant. Qu'en déduit-on concernant les propriétés optiques du diamant ?

### Exercice 3. Conductivité thermique

Lire le texte ci-dessous puis répondre aux questions. La traduction de quelques mots anglais est donnée en fin de sujet.

- 1) Quelles sont les particules qui transportent la chaleur ?
- 2) Comment se déplacent ces porteurs ?
- 3) Pourquoi seuls les électrons au niveau de Fermi peuvent transporter la chaleur ?
- 4) A quelles vitesses caractéristiques se déplacent les porteurs de chaleur ?
- 5) Quels sont les processus qui limitent le transfert de la chaleur ?

[Extrait de *Matter and Methods at Low Temperatures*, F. Pobell, Springer (2007)]

#### 3.3 Thermal conductivity

Thermal conductivity is a transport property of matter similar to electrical conductivity, viscosity, diffusion, damping of sound, etc. The rate of heat flow per unit area resulting from a temperature gradient in a material of cross-section  $A$  is given by

$$\dot{q} = \frac{\dot{Q}}{A} = -\kappa \nabla T$$

Where  $\kappa$  is the thermal conductivity coefficient. Heat can be carried by conduction electrons or by lattice vibrations ; their contributions are additive. These carriers of heat usually do not fly ballistically from the heated end of the material to the colder end. They are scattered by other electrons or phonons or by defects in the material ; therefore they perform a diffusion process. To calculate thermal transport we have to apply transport theory, which in the simplest form is a kinetic gas theory. In this simplified version we consider the electrons or the phonons as a gas diffusing through the material. For the thermal conductivity coefficient this theory gives

$$\kappa = \frac{1}{3} \frac{C}{V} v \lambda$$

Where  $\lambda$  is the mean free path and  $v$  is the velocity of the particles.  $C$  is the specific heat[...].

How will the thermal conductivity coefficient look like if the heat is carried by the electron or/and by the phonon gases ? [...] The characteristic velocity of phonons is the velocity of the sound  $v_s$  ; this is the velocity with which « vibrations » or « phonons » move through the lattice. Typical values for solids, in particular metals, are  $v_s = (3 - 5) \times 10^5 \text{ cm s}^{-1}$ . The electrons involved in thermal transport can only be electrons with energy near the Fermi energy [...]. Only these can transport heat because they are the only ones which can perform transitions to higher nonoccupied energy states, which is necessary for thermal conductivity. Their velocity is the so-called Fermi velocity  $v_F$  [...]. Typical values [...] are  $10^7 - 10^8 \text{ cm s}^{-1} \gg v_s$ . Both the sound velocity and the Fermi velocity are independent of temperature at low temperatures. So we know  $C$  and  $v$ , and all the problems in calculating transport properties lie in the calculation of the mean free path  $\lambda$ , determined by the scattering processes of the heat carriers. The main scattering processes limiting the thermal conductivity are phonon-phonon (which is absent in the harmonic approximation), phonon-defect, electron-phonon, electron-impurity and sometimes electron-electron interactions.

#### Lexique Anglais/Français

Career	Porteur	Mean free path	Libre parcours moyen
Fly	Voler	Scattered	Diffusé
Heat	Chaleur	Through	A travers
Involved	Impliqué	Velocity	vitesse
Lattice	Réseau (cristallin)		