

## PHYSIQUE DU SOLIDE ET NANOSCIENCES

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

22 pts + 1 bonus

#### 1. Cristallographie 5 pts

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

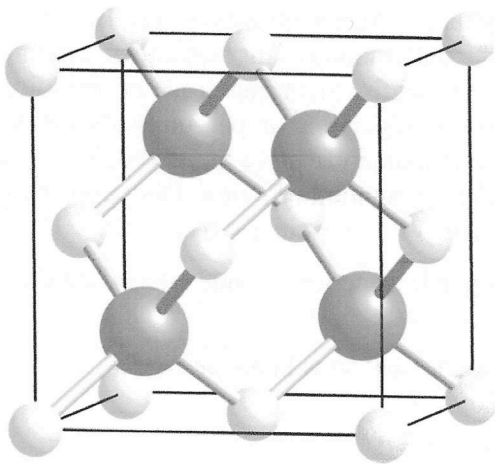


Figure 1: représentation de la structure zinc blende de l'InAs. Les grosses sphères représentent les atomes d'indium, les petites les atomes d'arsenic. L'arête du cube est  $a$ .

- 1,5 1.1. Exprimer les vecteurs de base en fonction de  $a$  dans une base orthonormée.  
 1 1.2. Donner le motif.  
 1,5 1.3. Donner le nombre, la nature et la distance des atomes premiers voisins des atomes In.  
 1 1.4. Application numérique :  $a = 0.60583$  nm. Calculer le nombre d'atomes (In et As) par unité de volume.

#### 2. InAs intrinsèque 6 pts + 1 bonus

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:  $N_c = 2 \left(\frac{2\pi m_e^* kT}{h^2}\right)^{3/2}$  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.

- 1 2.1. Calculer le produit  $np$ . Comment varie-t-il avec  $E_F$  ?
- 2 2.2. En déduire la densité  $n_i$  de porteurs dans le semi-conducteur intrinsèque.
- 2 2.3. Calculer la position du niveau de Fermi en fonction de  $E_c$ ,  $E_v$ ,  $m_e^*$ ,  $m_h^*$  et  $kT$ .
- 1 2.4. Tracer qualitativement la courbe  $\log(n_i)=f(1/T)$  pour  $T < 300K$ .
- 1 2.5. Question Bonus 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

11p6

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  $x > d$ .

- 1 3.1. Ecrire l'équation de Schrödinger vérifiée par la fonction d'onde  $\varphi(x)$  d'un électron dans le puits.
- 1 3.2. On considère  $E > E_C$ . Montrer que l'équation se met sous la forme :

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

Exprimer  $k^2$  en fonction de  $E$  et  $E_C$ .

- 1 3.3. Donner la forme générale des solutions de l'équation de Schrödinger.
- 2 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 :

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

- 1 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 ?
- 1 3.6. Déterminer la bande interdite des rubans  $E'_g > E_g$  en fonction de  $d$  ?
- 1 3.7. Application numérique : En considérant que la bande interdite de l'InAs massif est  $E_g = 0.35$  eV, calculer la bande interdite de nanorubans d'épaisseur 9 nm.

Pour mesurer la bande interdite des rubans, une expérience d'absorption optique a été réalisée très récemment sur des rubans fins (puits quantiques) d'InAs (voir figure 2).

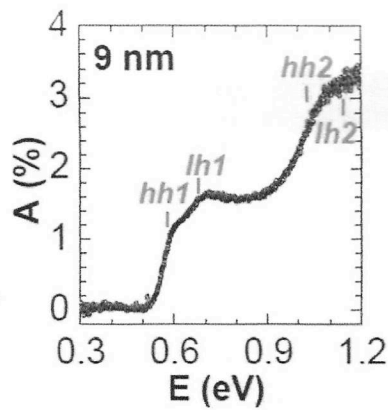


Figure 2 : Courbe d'absorption optique relevée sur des rubans d'InAs d'épaisseur  $e = 9$  nm. D'après Fang et al. , PNAS, 110, 11688 (2013)

- 3.8. Sur la figure 2, le seuil d'absorption est repéré par "hh1". Relever sa position. Coïncide-t-elle avec vos calculs ?
- 3.9. A quel domaine de longueurs d'ondes correspond cette valeur d'énergie ?
- 3.10. A votre avis, quelle est l'origine du second seuil d'absorption sur la figure 2 ?

On donne :

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

Charge de l'électron :  $e = 1.6 \times 10^{-19}$  C

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

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

Constante de Planck réduite :  $\hbar = h/2\pi = 1.054 \times 10^{-34}$  J.s

22pts + 1 bonus

Partiel de Physique CS13-U3

15 mai 2017 - Barème / corrigé

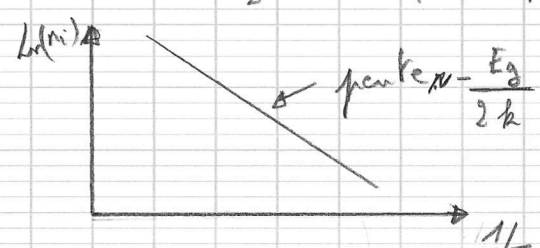
5pts

## 1. Cristallographie

- 1.5 1.1.)  $\vec{a} = \frac{a}{2}(\vec{i} + \vec{j})$   $\vec{b} = \frac{a}{2}(\vec{i} + \vec{k})$   $\vec{c} = \frac{a}{2}(\vec{j} + \vec{k})$  réseau cfc
- 1 1.2.) 1 atome In en (0,0,0) + 1 atome As en  $(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4})$
- 1.5 1.3.) Premiers voisins de In: 4 atomes As à une distance  $d = \frac{a\sqrt{3}}{4}$
- 1 1.4.) 4 atomes In et 4 atomes As par maille cubique de côté  $a$   
 $1,8 \cdot 10^{28}$  atomes In et  $1,8 \cdot 10^{28}$  atomes As /  $m^3$ .

6pts

## +1 2. InAs intrinsèque

- 1 2.1.)  $n_p = N_c N_v \exp(-\frac{E_g}{kT})$  : indépendant de  $E_F$ .
- 2 2.2.) SC intrinsèque:  $n = p = n_i$   
 $n_p = n_i^2 \rightarrow n_i = \sqrt{N_c N_v} \exp(-\frac{E_g}{2kT})$
- 2 2.3.)  $n = p$   
 $N_c \exp(-\frac{E_c - E_F}{kT}) = N_v \exp(\frac{E_v - E_F}{kT}) \rightarrow \exp(\frac{2E_F}{kT}) = \exp(\frac{E_c + E_v}{kT}) \times \frac{N_v}{N_c}$   
 $E_F = \frac{E_v + E_c}{2} + \frac{3kT}{4} \ln\left(\frac{m_h^*}{m_e^*}\right)$
- 1 2.4.) 

en négligeant la dépendance en  $T$  de  $N_c$  et  $N_v$

+1

Bonus

2.5.)  $n_i = \sqrt{N_c N_v} \exp\left(-\frac{E_g}{2kT}\right) = 2 \left(\frac{2\pi kT}{h^2}\right)^{3/4} (m_e^* m_h^*)^{3/4} \exp\left(-\frac{E_g}{2kT}\right)$

$$\frac{dn_i}{dT} = \frac{3}{2} \frac{n_i}{T} + \frac{E_g}{2kT^2} n_i \rightarrow \frac{\Delta n_i}{n_i} = \left(\frac{3}{2} + \frac{E_g}{2kT}\right) \frac{\Delta T}{T}$$

11pt

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

1 3.1.) 
$$-\frac{\hbar^2}{2m_e^*} \frac{d^2 \psi}{dx^2} + E_c \psi(x) = E \psi(x)$$

1 3.2.) 
$$\frac{d^2 \psi}{dx^2} + \frac{2m_e^*}{\hbar^2} (E - E_c) \psi = 0$$

3.3.) 
$$k^2 = \frac{2m_e^*}{\hbar^2} (E - E_c)$$

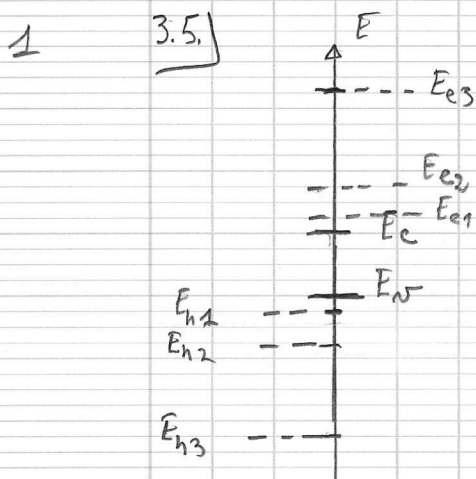
1 3.3.) 
$$\psi(x) = A e^{ikx} + B e^{-ikx} \quad \psi(x) = 0 \text{ en } x=0 \text{ et } x=d.$$

3.4.) 
$$\psi(x) = 0 \text{ en } x=0 \rightarrow B = -A$$

2 
$$\psi(x) = 0 \text{ en } x=d \rightarrow A e^{ikd} - A e^{-ikd} = 0 \rightarrow \sin(kd) = 0$$

$$k = \frac{n\pi}{d} \text{ avec } n \in \mathbb{N}^*$$

$$\text{donc } E_n = E_c + \frac{\hbar^2}{2m_e^*} k^2 = E_c + \frac{\hbar^2}{2m_e^*} \left( \frac{n\pi}{d} \right)^2 \quad n \in \mathbb{N}^*$$



$E_n$  et  $E_c$  ne sont pas des niveaux permis

1 3.6.) 
$$E_g' = E_{c1} - E_{n1} = E_c + \frac{\hbar^2}{2m_e^*} \frac{\pi^2}{d^2} - E_n + \frac{\hbar^2}{2m_h^*} \frac{\pi^2}{d^2}$$

$$E_g' = E_g + \frac{\hbar^2 \pi^2}{2d^2} \left( \frac{1}{m_e^*} + \frac{1}{m_h^*} \right) > E_g.$$

1 3.7.)

$d = 3 \text{ nm} \rightarrow E_g' = 1,923 + 0,35 = 2,273 \text{ eV}$

$d = 6 \text{ nm} \rightarrow E_g' = 0,481 + 0,35 = 0,831 \text{ eV}$

$d = 9 \text{ nm} \rightarrow E_g' = 0,214 + 0,35 = 0,564 \text{ eV}$

1

3.8)

~~$h\nu = 3 \text{ nm} \rightarrow 1,05 \text{ eV}$~~

~~$h\nu = 6 \text{ nm} \rightarrow 0,75 \text{ eV}$~~

$h\nu = 9 \text{ nm} \rightarrow 0,57 \text{ eV}$

Seul le seuil observé pour des ondes de 9 nm correspond aux calculs.

Pour 3 et 6 nm, valeurs expérimentales < valeurs calculées

1

3.9)

$$E = h\nu = \frac{hc}{\lambda} \rightarrow \lambda = \frac{hc}{E} \rightarrow 0, \lambda \approx 2,18 \text{ nm}$$

$$1 \text{ nm} < \lambda < 2,2 \text{ nm}$$

Domaine de l'ultraviolet.

1

3.10)

Absorption optique entre  $E_{h2}$  et  $E_{e1}$  (ou  $E_{h1}$  et  $E_{e2}$ ).