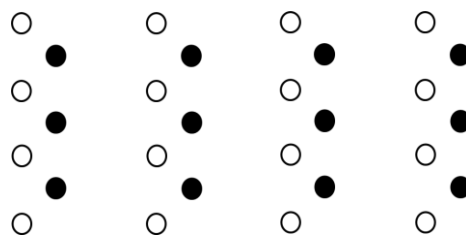


PHYSIQUE DU SOLIDE

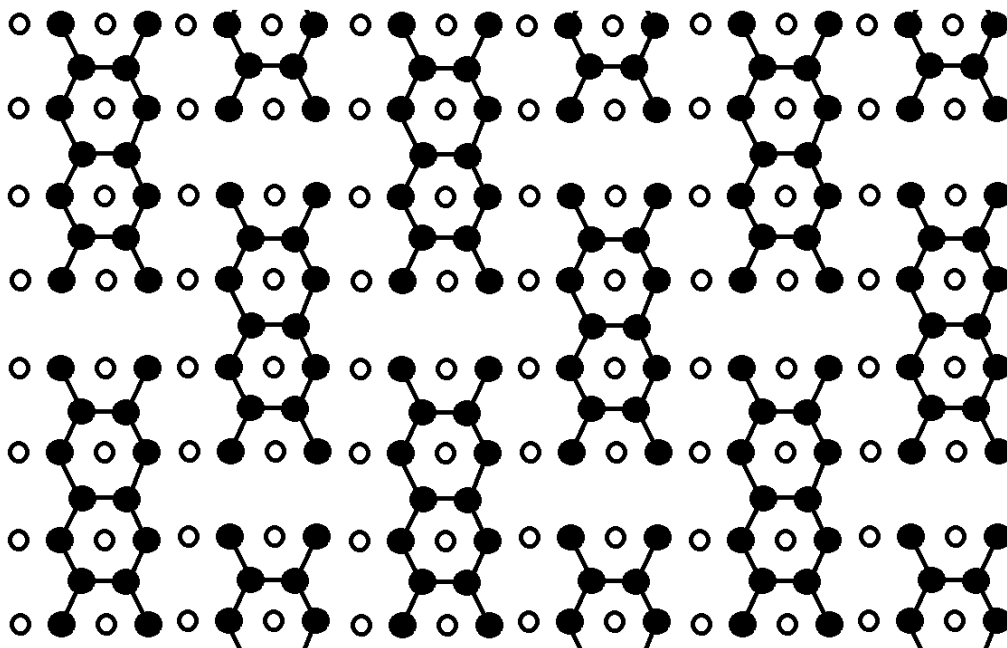
Exercice 1. Structure cristalline

Indiquer la maille élémentaire, les vecteurs de base, et le motif des deux structures cristallines bidimensionnelles suivantes. Elles correspondent aux arrangements atomiques des surfaces d'arséniure de gallium GaAs (110) et GaAs (111) respectivement. Les atomes noirs sont des As et les blancs des Ga. Une feuille de réponse, à détacher et joindre à votre copie, est disponible en fin de sujet.

1) Structure non-reconstruite de la surface (110), les liaisons chimiques entre les atomes de gallium et d'arsenic ne sont pas représentées.



2) Reconstruction c(4x4) de la surface (100), les traits noirs correspondent aux liaisons chimiques entre les atomes d'arsenic uniquement, les autres liaisons ne sont pas représentées.



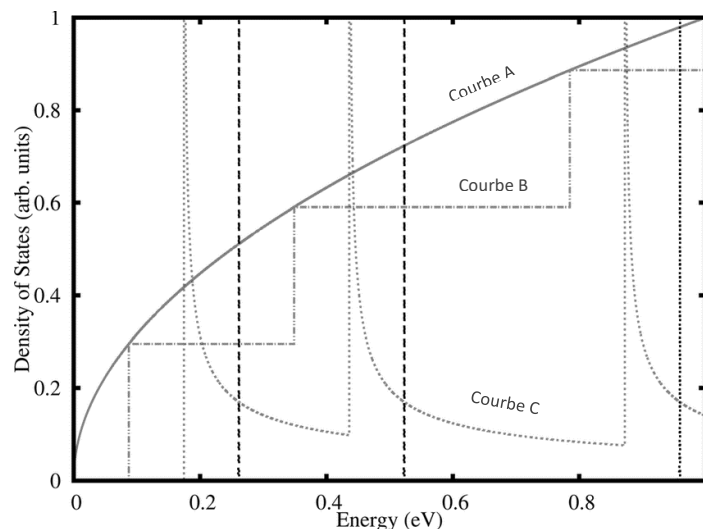
Exercice 2. Calcul de la densité d'états électronique

On considère un solide cubique métallique de côté L et de maille élémentaire de côté a , avec $L \gg a$. On veut déterminer la densité d'états électroniques $D(E)$ dans ce solide. On se place dans l'approximation des électrons libres.

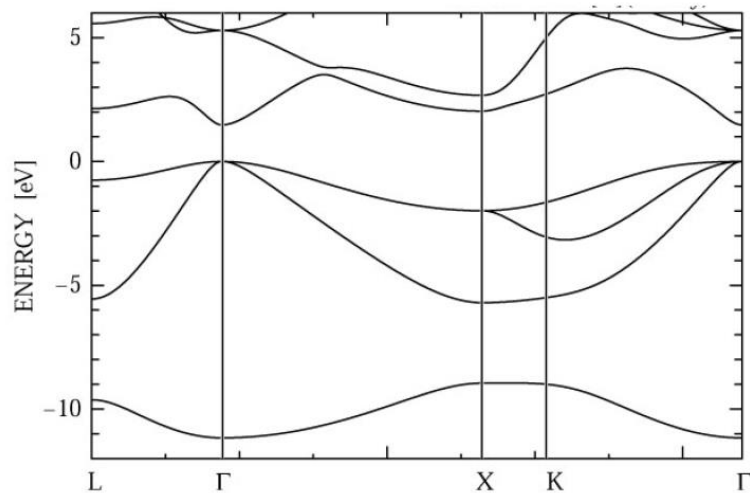
- 1) Quelles interactions sont négligées lorsqu'on se place dans cette approximation ?
- 2) Donner l'expression de l'équation de Schrödinger pour un électron de fonction d'onde $\Psi(x, y, z)$ et de masse m .
- 3) On cherche à résoudre cette équation par des solutions à variables séparées du type $\psi(x, y, z) = \varphi_x(x)\varphi_y(y)\varphi_z(z)$. On pose $E = E_x + E_y + E_z$. Développer l'équation de Schrödinger et montrer qu'elle peut s'exprimer sous la forme de trois équations différentielles indépendantes. On posera :

$$k_x^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E_x \quad k_y^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E_y \quad k_z^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E_z$$

- 4) Quelle est la forme générale des solutions de chaque équation ?
- 5) Ecrire les conditions aux limites de Born-Von Karman selon x , y et z .
- 6) En déduire que les états d'énergie accessibles sont quantifiés en déterminant l'expression de E_x , E_y et E_z en fonction d'un nombre entier n_x , n_y et n_z appartenant à \mathbb{Z}^* .
- 7) Décompte des vecteurs d'onde permis dans l'espace réciproque :
 - a) Combien y a-t-il de vecteurs d'onde permis par unité de volume dans l'espace des k ? (Sans tenir compte du spin). Pour rappel, k est le module du vecteur d'onde d'un électron, de composantes (k_x, k_y, k_z) .
 - b) Combien y a-t-il de vecteurs d'onde $N(\vec{k})$ permis dans la sphère de rayon k ? (Sans tenir compte du spin)
- 8) En déduire le nombre d'états accessibles $N(E)$ dont l'énergie est comprise entre 0 et E , en tenant compte du spin. Le résultat est de la forme $N(E) = aE^{3/2}$ avec a un terme indépendant de E .
- 9) Déduire l'expression de la densité d'états quantiques $D(E) = dN(E)/dE$
- 10) Sur le graphe suivant, quelle courbe (A, B ou C) correspond au résultat obtenu ? Justifier. Savez-vous à quoi correspondent les autres courbes ?
- 11) Expliquer brièvement la différence entre la densité électronique et la densité d'états électroniques.
- 12) Comment peut-on mesurer, expérimentalement, la densité d'états électroniques ?



Exercice 3. Structure de bandes du phosphore d'indium



Cette figure représente la structure de bandes du phosphore d'indium (InP).

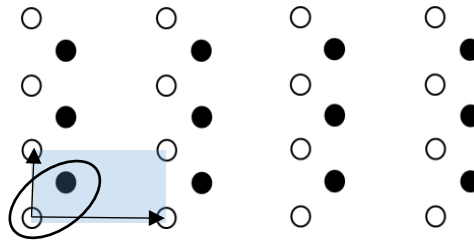
- 1) L'InP a 8 électrons de valence par maille élémentaire. Soit N le nombre de mailles, combien y a-t-il d'électrons dans le système, combien de bandes électroniques seront remplies en sachant que chaque bande possède $2N$ places disponibles ?
- 2) Sur la figure reproduite sur la feuille de réponse, indiquer quelles bandes électroniques sont pleines en surlignant les courbes correspondantes. A quoi correspond l'énergie nulle ?
- 3) 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 ?
- 4) Donner la valeur de la bande interdite. A quelle longueur d'onde correspond cette énergie ?
- 5) Qualitativement, comment varie la densité d'électrons dans la bande de conduction du semiconducteur intrinsèque en fonction de la température ?

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

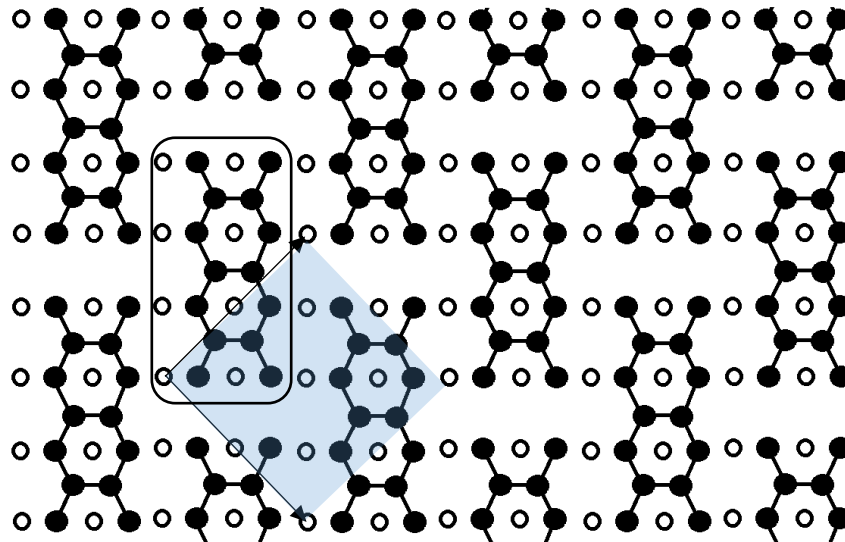
Corrigé

Exercice 1. Structure cristalline (/4pts)

- 1) Surface (110). Maille élémentaire 0.5 Vecteurs de base 0.5 Motif 1



- 2) Reconstruction c(4x4) de la surface (100). Maille élémentaire 0.5 Vecteurs de base 0.5 Motif 1



Exercice 2. Calcul de la densité d'états électronique (/11 pts)

- 1) 1 pt Quelles interactions sont négligées lorsqu'on se place dans cette approximation ?
Les interactions Coulombiennes (électrons-électrons et électrons-ions)

- 2) 1 pt Donner l'expression de l'équation de Schrödinger pour un électron de fonction d'onde $\Psi(x, y, z)$ et de masse m .

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi = E \Psi$$

- 3) On cherche à résoudre cette équation par des solutions à variables séparées du type $\psi(x, y, z) = \varphi_x(x) \varphi_y(y) \varphi_z(z)$. On pose $E = E_x + E_y + E_z$. Développer l'équation de Schrödinger et montrer qu'elle peut s'exprimer sous la forme de trois équations différentielles indépendantes.

0.5 pt
$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \varphi_x(x) \varphi_y(y) \varphi_z(z) = E \varphi_x(x) \varphi_y(y) \varphi_z(z)$$

0.5 pt
$$\frac{1}{\varphi_x(x)} \frac{\partial^2 \varphi_x(x)}{\partial x^2} + \frac{1}{\varphi_y(y)} \frac{\partial^2 \varphi_y(y)}{\partial y^2} + \frac{1}{\varphi_z(z)} \frac{\partial^2 \varphi_z(z)}{\partial z^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2}$$

$$\frac{\partial^2 \varphi_x(x)}{\partial x^2} + \frac{2mE_x}{\hbar^2} \varphi_x(x) = 0$$

0.5 pt
$$\frac{\partial^2 \varphi_y(y)}{\partial y^2} + \frac{2mE_y}{\hbar^2} \varphi_y(y) = 0$$

$$\frac{\partial^2 \varphi_z(z)}{\partial z^2} + \frac{2mE_z}{\hbar^2} \varphi_z(z) = 0$$

On peut ensuite remplacer avec :

$$k_x^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E_x \quad k_y^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E_y \quad k_z^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E_z$$

4) 0.5 pt Quelle est la forme générale des solutions de chaque équation ?

$$\varphi_x(x) = A_x e^{ik_x x} + B_x e^{-ik_x x} \text{ (Avec } B_{-i}=0, \text{ on néglige les réflexions sur les bords)}$$

5) 1 pt Ecrire les conditions aux limites de Born-Von Karman selon x, y et z.

$$\psi(x+L, y, z) = \psi(x, y, z) ; \psi(x, y+L, z) = \psi(x, y, z) ; \psi(x, y, z+L) = \psi(x, y, z)$$

$$\text{Autre expression : } \varphi_x(x+L) = \varphi_x(x), \varphi_y(y+L) = \varphi_y(y), \varphi_z(z+L) = \varphi_z(z)$$

6) 1 pt En déduire que les états d'énergie accessibles sont quantifiés en déterminant l'expression de E_x , E_y et E_z en fonction d'un nombre entier n_x , n_y et n_z appartenant à \mathbb{Z} .

$$A_x e^{ik_x(x+L)} = A_x e^{ik_x x} \rightarrow e^{ik_x L} = 1 \rightarrow k_x L = 2\pi n_x \rightarrow E_x = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{2\pi n_x}{L} \right)^2 \text{ idem selon } y \text{ et } z$$

7) Décompte des vecteurs d'onde permis dans l'espace réciproque :

a) 0.5 pt Combien y a-t-il de vecteurs d'onde permis par unité de volume dans l'espace des k ? (Sans tenir compte du spin). Pour rappel, k est le module du vecteur d'onde d'un électron, de composantes (k_x, k_y, k_z) .

$$1 \text{ état } k \text{ par cube de } 2\pi/L \text{ de côté : } \frac{1}{\left(\frac{2\pi}{L}\right)^3} = \frac{V}{(2\pi)^3}$$

b) 0.5 pt Combien y a-t-il de vecteurs d'onde $N(\vec{k})$ permis dans la sphère de rayon k ? (Sans tenir compte du spin)

$$\text{On multiplie le résultat précédent par le volume de la sphère de rayon } k : N(\vec{k}) = \frac{V}{(2\pi)^3} \times \frac{4}{3} \pi k^3$$

8) 0.5 pt En déduire le nombre d'états accessibles $N(E)$ dont l'énergie est comprise entre 0 et E , en tenant compte du spin. Le résultat est de la forme $N(E) = aE^{3/2}$ avec a un terme indépendant de E .

$$N(E) = \frac{V}{(2\pi)^3} \times \frac{4}{3} \pi \left(\frac{2mE}{\hbar^2} \right)^{3/2} \times 2$$

9) 1 pt Déduire l'expression de la densité d'états quantiques $D(E) = dN(E)/dE$

$$D(E) = \frac{V}{2\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} \sqrt{E}$$

10) 1 pt Sur le graphe suivant, quelle courbe (A, B ou C) correspond au résultat obtenu ?

Justifier. Savez-vous à quoi correspondent les autres courbes ?

C'est la courbe A avec une dépendance en énergie en racine de E . Les autres courbes correspondent au gaz d'électrons libres à 2 dimensions (B) et 1 dimension (A)

- 11) 1 pt Expliquer brièvement la différence entre la densité électronique et la densité d'états électroniques.

Densité électronique = nombre d'électron par unité de volume (et d'énergie, si on considère $n(E)$) ; densité d'états = nombre d'états quantiques disponibles par unité de volume et d'énergie

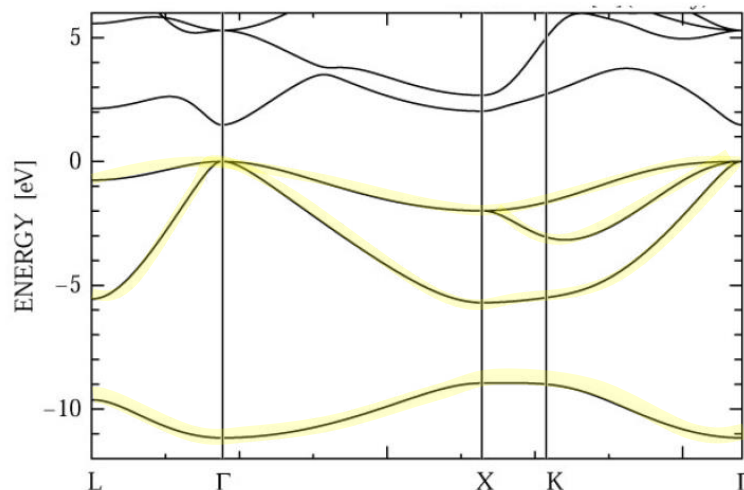
- 12) 0.5 pt Comment peut-on mesurer, expérimentalement, la densité d'états électroniques ?
Mesures de spectroscopie tunnel (comme dans le TD4)

Exercice 3. Structure de bandes du phosphore d'indium (/5 pt)

- 1) 1 pt L'InP a 8 électrons de valence par maille élémentaire. Soit N le nombre de mailles, combien y a-t-il d'électrons dans le système, combien de bandes électroniques seront remplies en sachant que chaque bande possède $2N$ places disponibles ?

Il y a $8N$ électrons dans le système, donc 4 bandes remplies

- 2) 1 pt Sur la figure reproduite sur la feuille de réponse, indiquer quelles bandes électroniques sont pleines en surlignant les courbes correspondantes. A quoi correspond l'énergie nulle ?



L'énergie nulle correspond à l'énergie de Fermi

- 3) 1 pt 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 ?

Le haut de la BV et le bas de la BC sont en Gamma. Ils sont au même point k donc c'est une bande interdite directe

- 4) 1.5 pt Donner la valeur de la bande interdite. A quelle longueur d'onde correspond cette énergie ?

1.5 eV environ donc $\lambda = hc/E = 827 \text{ nm}$

- 5) 0.5 pt Qualitativement, comment varie la densité d'électrons dans la bande de conduction du semiconducteur intrinsèque en fonction de la température ?

Lorsque la température augmente, les électrons acquièrent plus d'énergie et accèdent à des états plus élevés, la densité électronique dans la bande de conduction augmente. Explication alternative : la distribution de Fermi s'étend vers les énergies plus élevées.