Exercice 1

Cristal – Structures cristallines

1. Trouver le nombre d'atomes dans les cellules unité de :
   - Cubique faces centrées
   - Cubique centré
   - Diamant

2. Calculer le volume de la maille

   - d'1 cs
   - d'1 cc
   - d'1 cfc

3. Donner l'équation du plan coupant x en 3a, y en 2b et z en 2c

4. Déterminer la rangée[u,v,w] qui passe par les couples de noeuds cités:

   a. 432 et 120
   b. 321 et 131
   c. 001 et -101

5. Indexer (donner les indices de Miller) des plans réticulaires qui déterminent respectivement sur les axes OX OY et OZ les segments suivants

1a 2b 2c	plan	n°1
2a 1b 1c		n°2
-3a 1b 2c		n°3
∞ 2b 2c		n°4

6. Calculer la distance interreticulaire dans le cas général. Appliquer ce résultat à une structure cubique simple

7. Le paramètre de réseau du GaAs est 5.65 Å. Déterminer le nombre d'atomes de Ga et As par cm^3.

8. Un matériau, de volume 1 cm^3, est composé d'une structure CFC avec une constant de réseau de 2,5 mm. Les "atomes" dans ce matériau sont en fait des grains de café. On suppose que ces grains de café sont des sphères dures avec chaque sphère en contact avec sa plus proche

voisine. Déterminer le volume de café une fois que ces grains ont moulus (on supposera une densité d'assemblage de 100%)

9. Un cristal est composé de deux éléments A et B. le cristal est un CC avec les éléments A à chaque sommet du cube et l'élément B au centre. Le rayon effectif de l'élément A est 1,02 Å. On suppose que les éléments sont des sphères dont les surfaces des éléments A sont en contact avec les éléments A plus proches voisins. Calculer le rayon maximum de l'atome B qui s'adaptera dans cette structure et la densité volumique (#/cm^3) des atomes A et B.

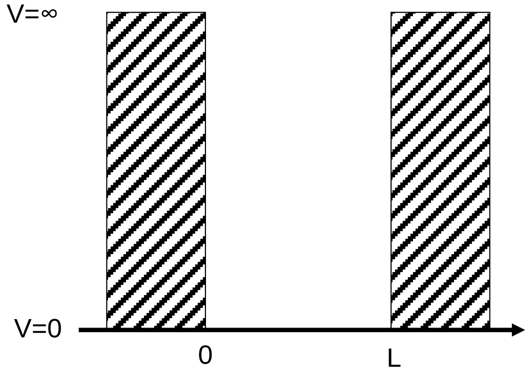
10. Soit trois plans réticulaires dans un cubique de paramètre de réseau a. dessiner les plans suivants : (100), (110) (310) and (230).

11. Calculer la densité des électrons de valence dans le silicium (structure diamant, a=5.43Å).

12. (a) des atomes de Phosphore, à une de $5x10^{16}$ cm^{-3}, sont ajoutés dans un échantillon de silicium. Supposons que les atomes de phosphores sont distribués de façon homogène à travers le silicium. Quelle est la fraction du poids de phosphore ? si des atomes de Bore à une concentration de 10^{18} cm^{-3}, sont ajoutés dans le matériau de la partie (a), déterminer la fraction du poids du Bore.

Électrons libres dans un système à une dimension: puits de potential infini

On considère un puits infini de longueur L selon lequel les électrons peuvent se mouvoir librement (V=0). En dehors du puits, le potential (l'énergie potentielle) est infini te. ($V=\infty$ pour $x \geq L$ et $x \leq 0$) , voir figure ci dessous:

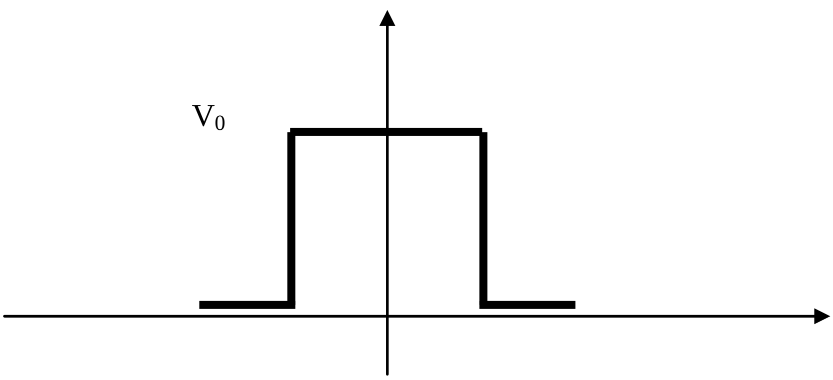


Questions

a. Donner la forme générale des solutions de l'équation de Schrödinger. Quelles sont ces solutions aux limites (0 and L).
b. À partir de (a), determiner les niveaux d'énergie (quantifies). Calculer les trois premiers niveaux d'énergie d'un electron dans le puits E_1, E_2 and E_3. On donne , pour l'atome considéré L=3Å.
c. Dasn le cas d'un metal (L=3 mm), calculer une nouvelle fois E_1, E_2 and E_3. Representer E versus k dans ce cas.

Barrière de potentiel symétrique

Soit une barrière de potentiel symétrique de largeur a . On supposera que l'énergie E de la particule est telle que $0 < E < V_0$.

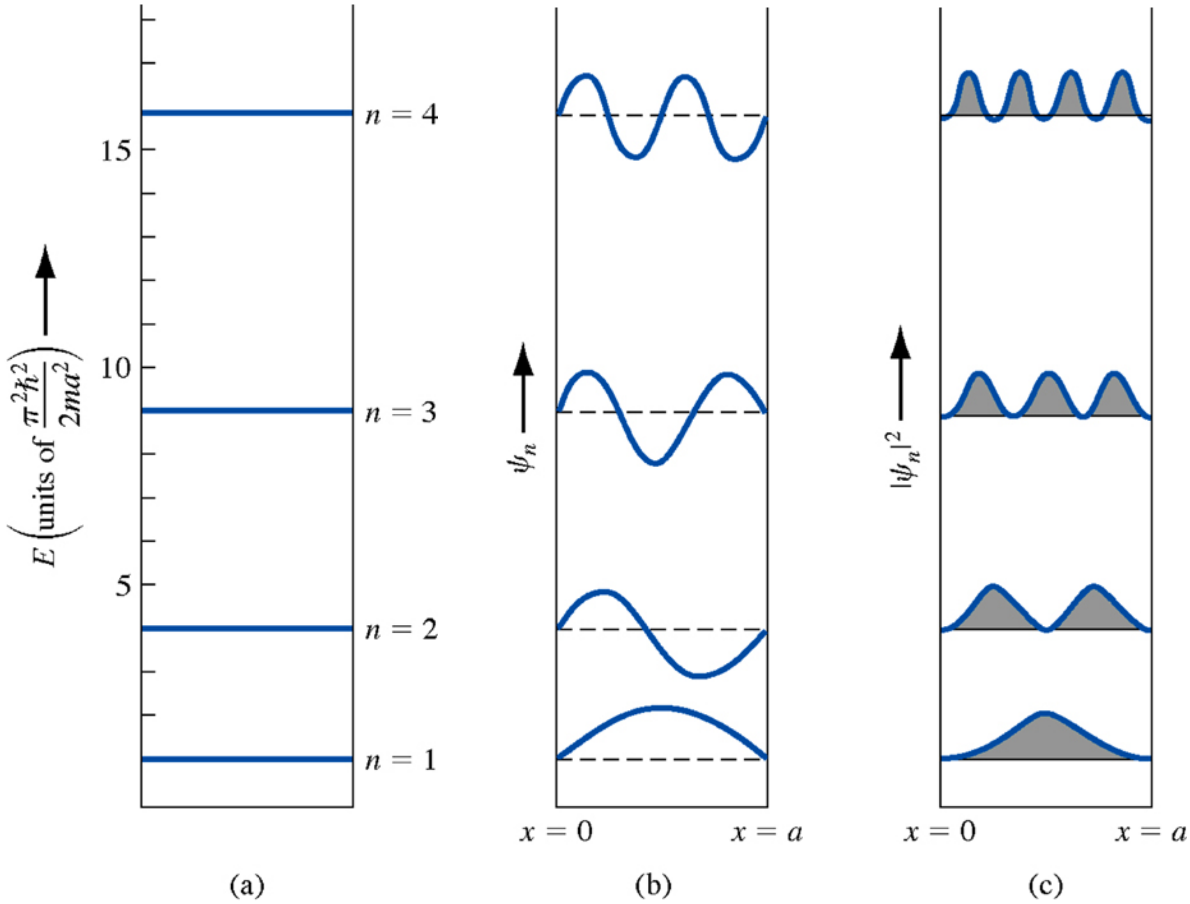


1. Ecrire l'équation de Schrödinger relative aux trois régions et la forme des solutions correspondantes. On posera :

$$\rho = \left[\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2} \right]^{1/2} \quad \text{et} \qquad k = \left[\frac{2mE}{\hbar^2} \right]^{1/2}$$

2. Supposons que la particule (1 électron par exemple) vienne de la gauche.

   - Définir et calculer le coefficient de Transmission de la barrière
   - En déduire le coefficient de réflexion
   - Pour un électron, calculer la portée de l'onde évanescente
   - Refaire le calcul pour un proton (masse = 1840 * masse électron)
   - conclusion

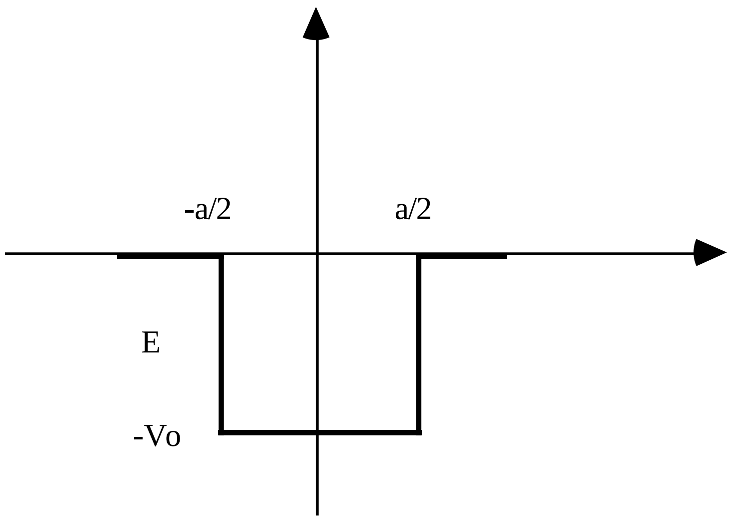


particule dans un puits de potentiel infini

Puits de potentiel

Soit un puits de potentiel symétrique de largeur *a* . On supposera que l'énergie E de la particule est:

$$-V_0 < E < 0 \qquad (1)$$



1- Ecrire l'équation de Schrödinger relative aux trois régions et les solutions des fonctions d'ondes correspondantes.

On posera:

$$\rho = \sqrt{\frac{-2mE}{\hbar^2}} \qquad (2) \qquad\qquad k = \sqrt{\frac{2m(V_0+E)}{\hbar^2}} \qquad (3)$$

2- Montrer que l'équation aux valeurs propres s'écrit:

$$\left(\frac{\rho - ik}{\rho + ik}\right)^2 = e^{2ika} \qquad (4)$$

3- Montrer que l'équation (4) implique 2 cas:

$$\left|\cos\left(\frac{ka}{2}\right)\right| = \frac{k}{k_0} \qquad\qquad \left|\sin\left(\frac{ka}{2}\right)\right| = \frac{k}{k_0}$$

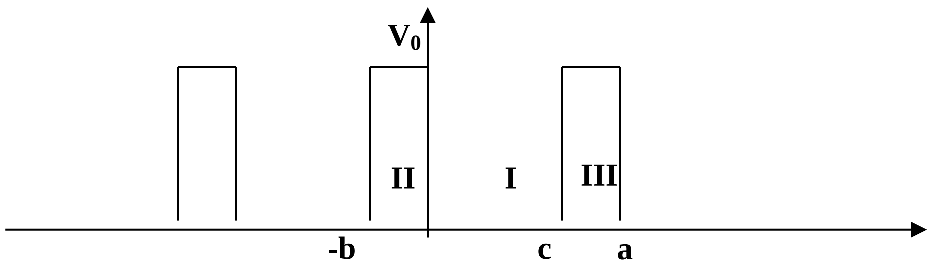
$$tg\left(\frac{ka}{2}\right) > 0 \qquad\qquad tg\left(\frac{ka}{2}\right) < 0$$

avec $k_0 = \sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2}} = \sqrt{k^2 + \rho^2}$ (5)

4- Résoudre graphiquement les équations ci dessus pour déterminer les valeurs propres du système (les énergies).

Potentiel en créneaux – modèle de Kronig et Penney

Afin d'établir l'existence de bandes d'énergie alternativement permises et interdites qui apparaissent quand les électrons sont soumis à un potentiel périodique, on se propose d'étudier le comportement d'un électron soumis à un potentiel créé par les atomes du cristal. Ces atomes sont équidistants de « ***a*** » dans un réseau unidimentionnel.



1. Donner les solutions de l'équation de Schrödinger dans la région **I**, puis dans la région **II** (on appellera les constantes d'intégration A, B, C et D).
2. Théoreme de Bloch : quand un électron est soumis à un potentiel périodique, sa fonction d'onde obéissant aux conditions cyclique de BVK $\Psi(x) = \Psi(x + Na)$, peut être mise sous la forme d'une onde de Bloch :

   $\Psi_n(x) = u_{nk}(x)e^{ikx}$ avec $u(r) = u(x+a)$ ***a*** étant la période.

   Donner en fonction de C et D l'expression de la fonction d'onde dans la région III et préciser la séquence des valeurs discrètes que peut prendre le « pseudo » vecteur d'onde *k*.
3. On détermine les constantes d'intégration en écrivant la continuité des fonctions d'ondes et de leur dérivée première en x=0 et x=c. Montrer que le système d'équations ainsi obtenu ne possède une solution non triviale que si :

$$\cos(ka) = \frac{\alpha^2 - \beta^2}{2\alpha\beta}\sin(\beta c)sh(\alpha b) + \cos(\beta c)ch(\alpha b)$$

$$\text{avec } \alpha = \left[\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}\right]^{1/2} \quad \text{et} \quad \beta = \left[\frac{2mE}{\hbar^2}\right]^{1/2}$$

4. Vérifier que lorsque l'énergie potentielle est nulle partout, on retrouve la relation E=f(k) des électrons libres.
5. On se place maintenant dans ces conditions :b ->0 et V_0>>1 et on pose $\eta = bV_0$ et $P = \frac{m\eta a}{\hbar^2}$

   Simplifier la relation donnée en 3.

Modèle de Kronig Penney- suite-

Au cours du TD Kronig –Penney, nous avons montré que les bandes d'énergie permises pouvaient être déterminées par la résolution de l'équation :

$$\cos(Ka) = \frac{\alpha^2 - \beta^2}{2\alpha\beta}\sin(\beta c)sh(\alpha b) + \cos(\beta c)ch(\alpha b)$$

avec $\alpha = \left[\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}\right]^{1/2}$ et $\beta = \left[\frac{2mE}{\hbar^2}\right]^{1/2}$

L'équation se simplifie en $\cos(Ka) = P\dfrac{\sin(\beta a)}{\beta a} + \cos(\beta c)$ avec $P = \frac{m\eta a}{\hbar^2}$

.

1. Représenter graphiquement l'évolution du deuxième membre de l'égalité en fonction de βa avec $P = \dfrac{3\pi}{2}$. En déduire l'existence de bandes d'énergie alternativement permises et interdites. Combien d'états électroniques peut contenir chacune des bandes autorisées ? Remarque.

2. En opérant par approches successives, évaluer la largeur énergétique de la première bande autorisée et de la bande qui la suit avec $P = \dfrac{3\pi}{2}$ et $a = 0.3nm$

3. Donner l'expression littérale puis la valeur numérique de la masse effective m* des particules au sommet de la première bande autorisée.

Niveau de Fermi dans un SC Intrinsèque

On considère un semiconducteur intrinsèque à température quelconque.

1) On constate que la bande de conduction n'est pas totalement vide. Quel est le type de porteurs dans cette bande et d'où proviennent-ils.

2) Montrer que dans le cas de semiconducteurs de largeur de bande interdite (Gap) de l'ordre de l'eV, on peut confondre dans certaines conditions la statistique de Fermi-Dirac par la statistique de Maxwell-Boltzmann.

3) Montrer que la densité d'électrons de conduction n_c et la densité de trous de valence p_V peuvent se mettre sous la forme:

$$n = N_c \exp\left(-\frac{Ec - Ef}{kT}\right)$$
$$p = N_v \exp\left(-\frac{Ef - Ev}{kT}\right)$$

où E_C est le bas de la bande de conduction, E_V le sommet de la bande de valence et N_C (N_V) la densité équivalente d'états de conduction (de valence). On définira l'expression de N_V et N_c.

4) Montrer que le produit n.p est donné par

$$n.p = NcNv \exp\left(-\frac{Eg}{kT}\right) = n_i^2$$

5) Déterminer la position du niveau de Fermi intrinsèque en fonction du gap, de kT et des masses effectives de conduction et de valence.

Densité d'électrons de conduction dans un S.C extrinsèque.

On a montré que dans le cas de semiconducteurs non dégénérés, les densités d'électrons et de trous peuvent se mettre sous la forme:

$$n = N_c \exp\left(-\frac{Ec - Ef}{kT}\right)$$
$$p = N_v \exp\left(-\frac{Ef - Ev}{kT}\right)$$

où N_C et N_V sont les densités équivalentes d'états de conduction et de valence respectivement. Soit E_D et E_A les niveaux énergétiques des atomes donneurs (en densité N_D) et accepteurs (N_A) introduits dans le matériau.

1) Montrer que la probabilité d'occupation du niveau E_D se met sous la forme:

$$f(Ed) = \frac{1}{2 + e^{\frac{Ed - Ef}{kT}}}$$

On montre que la probabilité de non occupation du niveau E_A s'écrit:

$$f(Ea) = \frac{1}{2 + e^{\frac{Ef - Ea}{kT}}}$$

2) Vérifier que le nombre d'électrons piégés sur le niveau donneur s'écrit:

$$n_D = \frac{1}{1 + \frac{1}{2} e^{\frac{Ed - Ef}{kT}}}$$

et que le nombre d'électrons piégés sur le niveau E_A s'écrit:

$$n_a = \frac{1}{1 + 2e^{\frac{Ea - Ef}{kT}}}$$

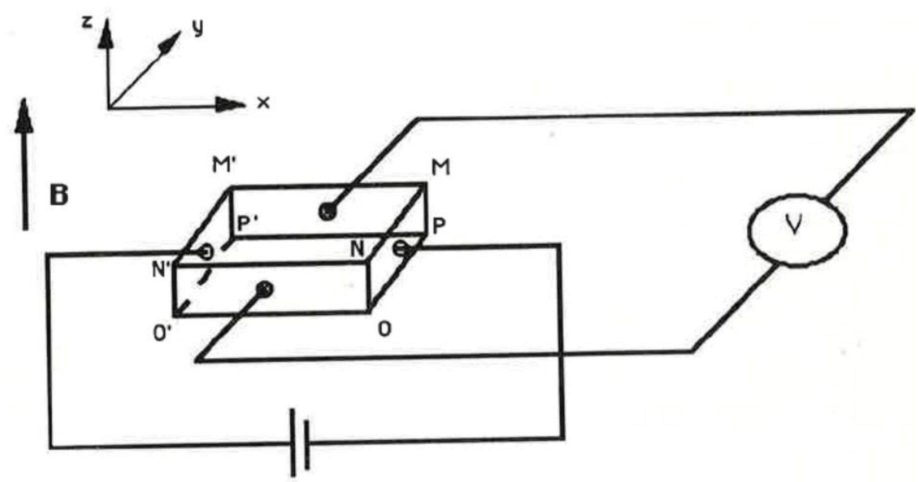
3) Si on définit par N_V le nombre d'électrons dans la bande de valence, montrer que le nombre d'électrons total (à 0 K) dans le semiconducteur s'écrit:

$N_V + N_D$

Effet Hall

Une plaquette de semiconducteur est soumise à une induction magnétique B dans la direction Oz d'après le schéma suivant. Les faces MNOP et M'N'O'P' sont métallisées et servent à polariser la plaquette. On applique une tension Vx de manière à faire passer un courant.

Un voltmetre permet de mesurer une différence de potentiel VM-VN=37.5 mV pour B=0.1 T et un courant I=75mA. L'épaisseur de l'échantillon est de 3 mm. On pose OP=l, MM'=L, ON=d.



1. Déterminer le type du semiconducteur
2. L'expression de la tension de Hall. En déduire la densité de porteurs majoritaires
3. La mobilité de ces porteurs si la résistivité du cristal est de 3.9 Ohm.cm
4. La concentration en porteurs minoritaires ($n_i=1.6 \times 10^{14}$ cm^{-3}).
5. Si on considère qu'il y a deux types de porteurs (n et p), déterminer la nouvelle expression de la tension de Hall et la nouvelle expression de R_H. calculer RH en conservant les valeurs précédentes et en considérant que $\mu p=0.2 m^2/V/s$
6. L'erreur faite dans la détermination de la concentration dans les conditions de 5.