EXAMEN ECRIT 31 JANVIER 2007

Informations utiles

$k_B = 8.617 \times 10^{-5}$ eV.K^{-1} $= 1.381 \times 10^{-23}$ J.K^{-1}, $\hbar = 1.055 \times 10^{-34}$ J.s,
$m_e = 9.110 \times 10^{-31}$ kg, $q_e = -1.602 \times 10^{-19}$ C, $\epsilon_0 = 8.854 \times 10^{-12}$CV^{-1}m^{-1}
$\hbar^2/(2m_e a_0^2) = q_e^2/(8\pi\epsilon_0 a_0) = 13.61$ eV, $a_0 = 0.5292 \times 10^{-10}$ m.

Cohésion du chlorure de sodium et dissolution

On suppose que l'énergie totale de cohésion d'un cristal de chlorure de sodium comprenant N molécules de NaCl peut s'écrire :

$$U(r) = N\left(z\frac{A}{r^\beta} - \frac{\alpha q_e^2}{4\pi\epsilon_0 r}\right), \tag{1}$$

où z est le nombre de plus proches voisins d'un ion quelconque (situés à une distance r de celui-ci) et α, la constante de Madelung ($\alpha = 1.748...$).
1) Rappeler brièvement l'origine des deux termes dans l'expression de l'énergie totale de cohésion $U(r)$.
2) Exprimer l'énergie de cohésion par ion en fonction de r_0, la distance à l'équilibre entre ions Na^+ et Cl^- voisins. On donne $r_0 = 2.82$Å et $u(r_0) = U(r_0)/(2N) = -3.96$eV/ion. En déduire la valeur numérique de l'exposant β.
3) On suppose maintenant que l'espace entre les ions du cristal est rempli d'un fluide homogène de constante diélectrique relative $\epsilon_r = 81$ et l'on admet que la partie répulsive de l'énergie n'est pas modifiée. Donner l'expression de la nouvelle distance à l'équilibre r_{0f} en fonction de r_0. Donner l'expression de la nouvelle énergie de cohésion par ion $u_f(r_{0f})$ en fonction de $u(r_0)$. Comparer cette énergie de cohésion par ion à l'énergie thermique k_BT qui est de l'ordre de 1/40eV à température ambiante. Commenter.

Conductivité intrinsèque et conductivité minimale d'un semi-conducteur

On considère un semi-conducteur en régime classique (non dégénéré) pour lequel la concentration d'électrons de conduction n (resp. de trous p) est donnée par :
$n = N_c exp[-\beta(E_c - \mu)]$ (resp. $p = N_v exp[\beta(E_v - \mu)]$) où E_c (resp. E_v) est l'énergie du bord de la bande de conduction (resp. de la bande de valence) et N_c (resp. N_v) est la densité effective d'états des électrons de conduction (resp. des trous).

1) Rappeler la loi d'action de masse qui définit la concentration intrinsèque n_i et exprimer les concentrations n et p en fonction de N_c, N_v et du gap $E_g = E_c - E_v$ pour un semi-conducteur intrinsèque.

2) La conductivité électrique est donnée par $\sigma = e(n\tilde{\mu}_e + p\tilde{\mu}_h)$, où $\tilde{\mu}_e$ et $\tilde{\mu}_h$ sont les mobilités des électrons et des trous. Pour la plupart des semi-conducteurs, $\tilde{\mu}_e > \tilde{\mu}_h$.

a) Montrer que la concentration nette en impuretés ionisées Δn, pour laquelle la conductivité est minimale, s'écrit

$$\Delta n = -\frac{\tilde{\mu}_e - \tilde{\mu}_h}{\sqrt{\tilde{\mu}_e \tilde{\mu}_h}} n_i \quad .$$

Donner une expression de cette conductivité minimale en fonction de n_i, de la charge e et des mobilités $\tilde{\mu}_e$ et $\tilde{\mu}_h$.

b) Exprimer le rapport de cette conductivité minimale à la conductivité intrinsèque du semi-conducteur.

3) Evaluer numériquement les conductivités minimale et intrinséque à 300 K ($k_B T = 0.0259$ eV) pour chacun des semi-conducteurs suivants :

a) Le silicium (Si) pour lequel $E_g = 1.14$ eV, $N_c = 2.7 \times 10^{19}$ cm^{-3}, $N_v = 1.1 \times 10^{19}$ cm^{-3}, $\tilde{\mu}_e = 1350$ cm^2 V^{-1} s^{-1} et $\tilde{\mu}_h = 480$ cm^2 V^{-1} s^{-1} (à 300K) ;

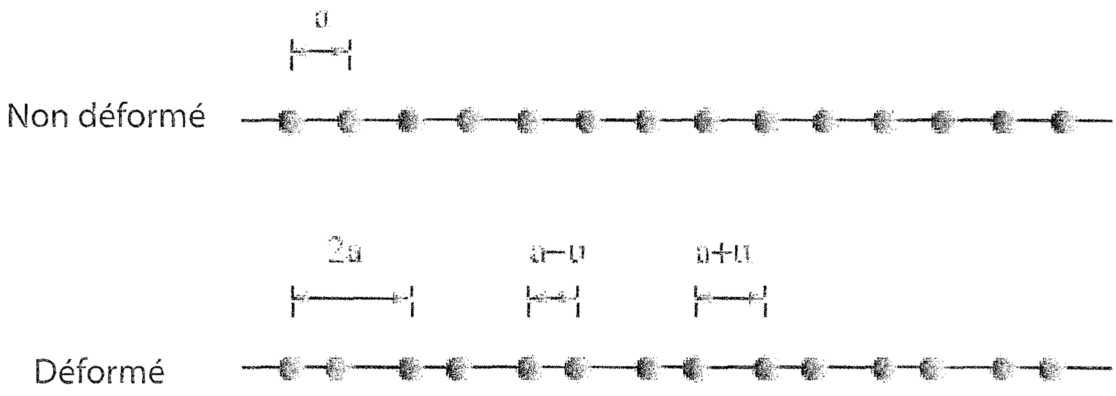
b) L'antimoniure d'indium (InSb) pour lequel $E_g = 0.18$ eV, $N_c = 4.6 \times 10^{19}$ cm^{-3}, $N_v = 6.2 \times 10^{18}$ cm^{-3}, $\tilde{\mu}_e = 77000$ cm^2 V^{-1} s^{-1} et $\tilde{\mu}_h = 750$ cm^2 V^{-1} s^{-1} (à 300K).

Bande demi pleine unidimensionnelle

On considère un matériau solide unidimensionnel et monatomique avec une constante de maille a. On suppose que chaque ion contribue un électron de valence au gaz électronique.

1) Calculez le vecteur d'onde de Fermi k_F. Est-ce que le matériau est un métal ou un isolant à température nulle (réponse argumentée) ?

Supposons que le réseau se déforme de la façon montrée sur la figure.



2) Comment la périodicité du réseau a-t-elle changé ?

3) Quels sont les vecteurs du réseau réciproque avant et après la déformation ?

4) Esquissez les 4 premières bandes dans la première zone de Brillouin avant la déformation dans *l'approximation d'électrons libres et indépendants* avec indication des états occupés d'électrons à basse température. Sur un autre dessin, esquissez dans la même approximation les bandes correspondantes dans la première zone de Brillouin du matériau déformé.

Les atomes introduisent un potentiel périodique que l'on traite dans *l'approximation d'un potentiel faible.*

5) Esquissez les 4 premières bandes dans la première zone de Brillouin du *matériau non déformé* dans cette approximation. Sur un quatrième dessin, esquissez dans la même approximation les bandes correspondantes dans la première zone de Brillouin du *matériau déformé.*

6) Est-ce que le matériau déformé est un métal ou un isolant à température nulle (réponse argumentée) ?

7) Utilisez vos dessins du point 5 pour déduire qualitativement que l'énergie totale des électrons diminue quand le matériau est déformé (dans la limite $u \ll a$).

Afin d'estimer cette réduction on donne la forme de la bande la plus basse dans l'approximation de potentiel faible :

$$E(k) = \frac{1}{2}\left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \frac{\hbar^2 (k-K)^2}{2m}\right) - \sqrt{\left[\frac{\hbar^2 k^2}{4m} - \frac{\hbar^2 (k-K)^2}{4m}\right]^2 + |V_K|^2}$$

avec $K = \pi/a$ et V_K la composante de Fourier du potentiel pour $K = \pi/a$.

8) Pourquoi $V_K = 0$ quand $u = 0$? Pour u petit on peut développer en u : $V_K = cu$ avec c constant.

9) Montrez que l'energie gagnée par les électrons due au potentiel, c'est à dire la différence entre l'énergie totale des électrons avec le potentiel et celle des électrons sans le potentiel, s'écrit :

$$\Delta E_{el} = \frac{\hbar^2}{2m}\frac{KL}{\pi}\left[\frac{K^2}{2} - \frac{K^2}{2}\sqrt{1+\frac{P^2}{K^2}} - \frac{P^2}{2}\ln\left(\frac{K}{P}{}_{2}\left(\sqrt{1+\frac{P^2}{K^2}}+1\right)\right)\right]$$

où L est la longueur de normalisation de la chaîne, et $P^2 = \left(\frac{2m}{\hbar^2 K}\right)^2 |V_K|^2 = \frac{4m^2 a^2}{\hbar^4 \pi^2}|V_K|^2$.
Aide : Il est commode de définir une nouvelle variable d'intégration $k' = \frac{K}{2} - k$ et on rappelle l'intégrale

$$\int \sqrt{q^2+x^2}\,\mathrm{d}x = (1/2)x\sqrt{q^2+x^2} + (1/2)q^2 \ln\left(\sqrt{q^2+x^2}+x\right)$$

La déformation entraîne une énergie positive due à la répulsion des atomes. Cette énergie aura la forme $\Delta E_{ion} = Bu^2$ si u est petit.

10) Montrez que la variation de l'énergie totale du système $\Delta E = \Delta E_{ion} + \Delta E_{el}$ pour $u/a \ll 1$ c'est à dire $P/K \ll 1$ a la forme

$$\Delta E = Bu^2 - Cu^2 + Du^2 \ln(c'u)$$

en fonction de u, avec B, C, D, c' constantes > 0. On ne demande pas le calcul de ces constantes.

11) Montrez que le minimum d'énergie totale est toujours obtenu pour une valeur de u différente de 0. La chaîne unidimensionnelle a donc toujours une tendance à se déformer, un phénomène nommé transition de Peierls.