

## EXAMEN ECRIT 4 FEVRIER 2008

## Informations utiles

$$\int_0^\infty x^n e^{-x} dx = \Gamma(n+1), \text{ avec } \Gamma(n+1) = n\Gamma(n) \text{ et } \Gamma(1/2) = \sqrt{\pi}.$$

$$k_B = 8.617 \times 10^{-5} \text{ eV.K}^{-1} = 1.381 \times 10^{-23} \text{ J.K}^{-1}, \quad \hbar = 1.055 \times 10^{-34} \text{ J.s},$$

$$m_e = 9.110 \times 10^{-31} \text{ kg}, \quad q_e = -1.602 \times 10^{-19} \text{ C}, \quad \epsilon_0 = 8.854 \times 10^{-12} \text{ CV}^{-1}\text{m}^{-1}.$$

$$\hbar^2/(2m_e a_0^2) = 13.61 \text{ eV}, \quad a_0 = 0.5292 \times 10^{-10} \text{ m}.$$

## Semi-conducteurs bidimensionnels (2-D)

On considère une structure semi-conductrice *bidimensionnelle* présentant un gap direct.

1) La bande de conduction (BC) présente un minimum en  $\vec{k} = \vec{0}$ . Près de ce point, dans l'approximation parabolique, la relation de dispersion s'écrit :

$$E = E_c + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_c} \quad . \quad (1)$$

Montrer que l'expression de la densité d'états *par unité de surface*, notée  $g_c(E) = D_c(E)/A$ , associée à la BC est donnée par :

$$g_c(E) = \frac{m_c}{\pi \hbar^2} \quad . \quad (2)$$

2) La bande de valence (BV) est composée de 2 branches, dites de trous lourds et de trous légers, dégénérées en leur maximum situé en  $\vec{k} = \vec{0}$ . Dans l'approximation parabolique, les relations de dispersion associées à ces deux branches sont :

$$E^\pm = E_v - \frac{\hbar^2 k^2}{2m^\pm} \quad . \quad (3)$$

Établir l'expression de la densité d'états *totale* de trous par unité de surface, notée  $g_v$ , associée à la bande de valence.

En déduire que la masse effective de densité d'états  $m_v$  de la bande de valence a pour expression :

$$m_v = m^+ + m^- \quad .$$

3) On suppose le semi-conducteur non-dégénéré.

a) Rappeler les conditions de non-dégénérescence.

b) Montrer que les concentrations d'électrons  $n$  et de trous  $p$  (par unité de *surface*) ont pour expressions :

$$n = N_c \exp [-(E_c - \mu)/k_B T] \quad , \quad p = N_v \exp [-(\mu - E_v)/k_B T], \quad (4)$$

où  $\mu$  est le potentiel chimique et  $N_{c,v} = \frac{m_{c,v} k_B T}{\pi \hbar^2}$  la densité effective d'états.

c) Évaluer numériquement  $N_{c,v}$  en fonction de  $m_{c,v}/m_e$  (où  $m_e$  est la masse de l'électron) et de  $T/(300\text{K})$ . *Application numérique* :  $m_c = 0.07 m_e$ ,  $m^+ = 0.6 m_e$ ,  $m^- = 0.07 m_e$ .

4) Si le semi-conducteur est intrinsèque, expliciter et évaluer numériquement  $n$ ,  $p$  et  $(E_c - \mu)$  à  $T = 300\text{K}$ . *Application numérique* :  $E_c - E_v = 1 \text{ eV}$ .

### Cohésion des halogénures alcalins

On suppose que l'énergie de cohésion par paire d'ions d'un cristal d'halogénure alcalin peut s'écrire :

$$u(r) = z \frac{A}{r^\beta} - \frac{\alpha q^2}{4\pi\epsilon_0 r}, \quad (1)$$

où  $z$  est le nombre de plus proches voisins d'un ion quelconque (situés à une distance  $r$  de celui-ci) et  $\alpha$  la constante de Madelung.  $\frac{A}{r^\beta}$  est un potentiel répulsif central phénoménologique.

a) Préciser le nombre de coordination  $z$  pour chacune des structures suivantes :

- i) structure du réseau cubique à faces centrées (cfc) du NaCl,
- ii) structure du réseau cubique simple (cs) du CsCl.

b) On note  $r_0$  la valeur de la distance interionique à l'équilibre. Montrer que le module de compression  $B = 1/\chi_0$  à  $T = 0 \text{ K}$  peut s'écrire :

$$\frac{1}{\chi_0} = \frac{1}{9\gamma r_0} \left( \frac{d^2 u}{dr^2} \right)_{r=r_0}, \quad (2)$$

où  $\gamma = 2$  pour la structure cfc et  $\gamma = (4/3)^{3/2}$  pour la structure cs. En déduire l'expression de  $\beta$  :

$$\beta = 1 + \frac{9\gamma r_0^3}{\chi_0} \left( \frac{\alpha q^2}{4\pi\epsilon_0 r_0} \right)^{-1}, \quad (3)$$

c) Déterminer les valeurs numériques de  $\beta$  à partir des valeurs mesurées de  $r_0$  et de  $1/\chi_0$  :

- i) NaCl :  $r_0 = 2.82 \text{ \AA}$ ,  $1/\chi_0 = 0.24 \times 10^{11} \text{ N.m}^{-2}$  ( $\alpha_{cfc} = 1.7476$ ),
- ii) CsCl :  $r_0 = 3.56 \text{ \AA}$ ,  $1/\chi_0 = 0.29 \times 10^{11} \text{ N.m}^{-2}$  ( $\alpha_{cs} = 1.7627$ ).

d) En déduire les valeurs numériques de l'énergie de cohésion par molécule (en eV) pour chacun de ces cristaux.

## GaAs semi-insolant

Dans le semiconducteur GaAs la densité intrinsèque  $n_i$  à température ambiante  $T = 300\text{K}$  est extrêmement petite,  $n_i = 1,8 \times 10^6 \text{cm}^{-3}$  (voir tableau attaché). Si l'on pouvait préparer le matériau semiconducteur avec une telle pureté, cette densité mènerait à une conductivité très faible, et le matériau serait pratiquement isolant. Dans la suite on garde partout la température  $T = 300\text{K}$ .

- 1) Si l'on considère que la mobilité des électrons est  $\mu_n = 9000 \text{cm}^2/\text{Vs}$  et celle des trous est  $\mu_p = 800 \text{cm}^2/\text{Vs}$  déterminez la conductivité et la résistivité intrinsèque de GaAs. On demande en particulier l'application numérique.

Technologiquement il est impossible de fabriquer le matériau intrinsèque. Une autre solution afin d'obtenir un semiconducteur presque isolant consiste à doper le matériau avec deux éléments d'impureté différents, dont un atome est un donneur et l'autre un accepteur dans GaAs.

Considérons d'abord l'atome d'oxygène qui dans GaAs se substitue à un atome d'As formant ainsi un donneur. Le niveau de ce donneur se trouve près du milieu du gap :  $E_D = E_c - 0,7\text{eV}$ , où  $E_c$  représente le bas de la bande de conduction de GaAs.

- 2) Etant donné que le niveau donneur est doublement dégénéré, écrivez la probabilité pour que le niveau soit occupé par un électron pour un potentiel chimique  $\mu$  donné. Déterminez ainsi la densité de sites occupés par des électrons et la densité de sites ionisés si la densité de donneurs est  $N_D$ .
- 3) Indiquez la densité des électrons dans la bande de conduction et la densité des trous dans la bande de valence pour un potentiel chimique donné, et donnez la condition de neutralité à utiliser pour déterminer  $\mu$ .
- 4) *Négligeant la densité des trous* par rapport à la densité des donneurs ionisés, déterminez pour une densité de donneurs  $N_D = 10^{16} \text{cm}^{-3}$  la densité des électrons dans la bande de conduction par la condition de neutralité. Il est commode d'introduire la variable intermédiaire  $x = \exp(-\beta(E_c - \mu))$  et le paramètre  $y = \exp(\beta(E_c - E_D))$  avec  $\beta = (k_B T)^{-1}$ . Déterminez aussi la position du potentiel chimique. Quelle est la résistivité du semiconducteur dopé O ? Évaluez numériquement, en utilisant des valeurs des propriétés de GaAs indiquées dans le tableau attaché, la position du potentiel chimique par rapport à  $E_c$ , la densité électronique et la résistivité.

L'atome de Cr forme dans GaAs un accepteur, avec un niveau  $E_A$  qui se situe lui aussi près du milieu du gap :  $E_A = E_c - 0,84\text{eV}$ . Supposons que ce niveau est doublement dégénéré (c'est à dire qu'un trou lié à l'accepteur peut avoir un spin parmi deux possibilités). La probabilité qu'un site accepteur soit neutre (c'est à dire occupé par un trou) est alors

$$f_A = \frac{1}{1 + (1/2)\exp(-\beta(E_A - \mu))}$$

- 5) Ecrivez la probabilité pour que le niveau soit occupé par un électron pour un potentiel chimique  $\mu$  donné. Déterminez ainsi la densité de sites occupés par des trous et la densité de sites ionisés si la densité d'accepteurs est  $N_A$ .

On introduit maintenant les deux espèces d'impuretés avec des densités  $N_D$  et  $N_A$  à peu près égales. Une partie des électrons issus d'une ionisation des donneurs peut alors se mettre sur les sites des accepteurs qui seront alors ionisés. On dit que le semiconducteur est *compensé*.

- 6) Ecrivez la condition de neutralité pour le semiconducteur compensé.
- 7) *Négligeant les densités d'électrons et de trous libres*, utilisez la condition de neutralité pour déterminer le potentiel chimique. Il est commode d'introduire la variable intermédiaire  $x_1 = \exp(-\beta(E_D - \mu))$  et le paramètre  $y_1 = \exp(-\beta(E_D - E_A))$ .
- 8) Prenant  $N_D = 10^{16}\text{cm}^{-3}$  et  $N_A = 5 \times 10^{16}\text{cm}^{-3}$  calculez numériquement la densité de donneurs ionisés avec le potentiel chimique trouvé et calculez la densité d'électrons et de trous pour ce même potentiel, justifiant ainsi leur omission dans la condition de neutralité en 7).
- 9) Même question pour  $N_A = N_D = 10^{16}\text{cm}^{-3}$ .
- 10) Calculez numériquement la résistivité dans les deux cas 8) et 9).
- 11) Quelles sont vos conclusions de la comparaison des résultats de 1), 4), 8), 9) et 10) ?

# Physical Constants

Quantity	Symbol	Value
Angstrom unit	Å	$1 \text{ Å} = 10^{-10} \text{ m} = 10^{-8} \text{ cm}$
Avogadro constant	$N_{\text{AVO}}$	$6.02204 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}$
Bohr radius	$a_B$	0.52917 Å
Boltzmann constant	$k$	$1.38066 \times 10^{-23} \text{ J/K}$ ( $R/N_{\text{AVO}}$ )
Elementary charge	$q$	$1.60218 \times 10^{-19} \text{ C}$
Electron rest mass	$m_0$	$0.91095 \times 10^{-30} \text{ kg}$
Electron volt	eV	$1 \text{ eV} = 1.60218 \times 10^{-19} \text{ J}$ $= 23.053 \text{ kcal/mol}$
Gas constant	$R$	1.98719 cal mol <sup>-1</sup> K <sup>-1</sup>
Permeability in vacuum	$\mu_0$	$1.25663 \times 10^{-6} \text{ H/cm}$ ( $4\pi \times 10^{-7}$ )
Permittivity in vacuum	$\epsilon_0$	$8.85418 \times 10^{-14} \text{ F/cm}$ ( $1/\mu_0 c^2$ )
Planck constant	$h$	$6.62617 \times 10^{-34} \text{ J-s}$
Reduced Planck constant	$\hbar$	$1.05458 \times 10^{-34} \text{ J-s}$ ( $h/2\pi$ )
Proton rest mass	$M_p$	$1.67264 \times 10^{-27} \text{ kg}$
Speed of light in vacuum	$c$	$2.99792 \times 10^{10} \text{ cm/s}$
Standard atmosphere		$1.01325 \times 10^5 \text{ N/m}^2$
Thermal voltage at 300 K	$kT/q$	0.0259 V
Wavelength of 1-eV quantum	$\lambda$	1.23977 μm

## Appendix H Properties of Ge, Si, and GaAs at 300 K

Properties	Ge	Si	GaAs
Atoms/cm <sup>3</sup>	$4.42 \times 10^{22}$	$5.0 \times 10^{22}$	$4.42 \times 10^{22}$
Atomic weight	72.60	28.09	144.63
Breakdown field (V/cm)	$\sim 10^5$	$\sim 3 \times 10^5$	$\sim 4 \times 10^5$
Crystal structure	Diamond	Diamond	Zincblende
Density (g/cm <sup>3</sup> )	5.3267	2.328	5.32
Dielectric constant	16.0	11.9	13.1
Effective density of states in conduction band, $N_C$ (cm <sup>-3</sup> )	$1.04 \times 10^{19}$	$2.8 \times 10^{19}$	$4.7 \times 10^{17}$
Effective density of states in valence band, $N_V$ (cm <sup>-3</sup> )	$6.0 \times 10^{18}$	$1.04 \times 10^{19}$	$7.0 \times 10^{18}$
Effective Mass, $m^*/m_0$			
Electrons	$m_e^* = 1.64$	$m_e^* = 0.98$	0.067
Holes	$m_h^* = 0.082$	$m_h^* = 0.19$	$m_h^* = 0.082$
	$m_{eh}^* = 0.044$	$m_{eh}^* = 0.16$	$m_{eh}^* = 0.45$
	$m_{hh}^* = 0.28$	$m_{hh}^* = 0.49$	
Electron affinity, $\chi$ (V)	4.0	4.05	4.07
Energy gap (eV) at 300 K	0.66	1.12	1.424
Intrinsic carrier concentration (cm <sup>-3</sup> )	$2.4 \times 10^{13}$	$1.45 \times 10^{10}$	$1.79 \times 10^6$
Intrinsic Debye length (μm)	0.68	24	2250
Intrinsic resistivity (Ω-cm)	47	$2.3 \times 10^5$	$10^8$
Lattice constant (Å)	5.64613	5.43095	5.6533