

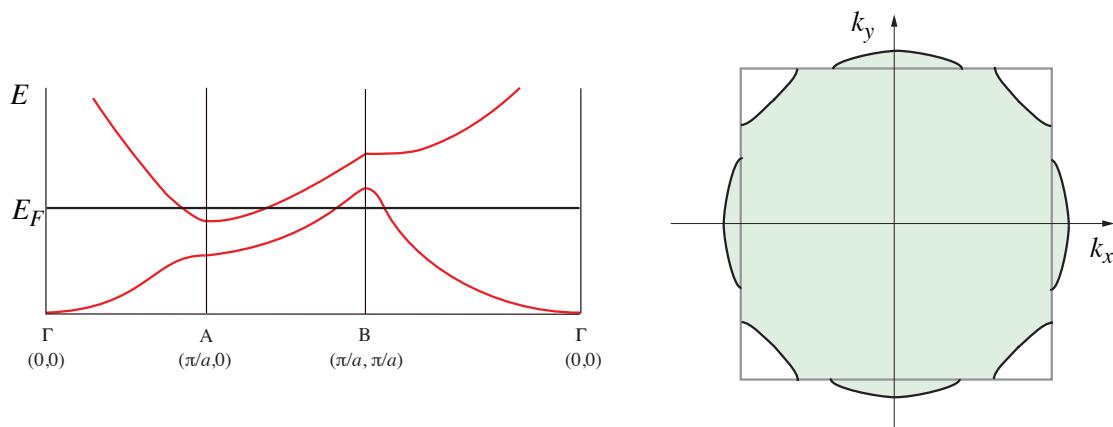
Série No. 12

13 Mai 2025

But de cette série :

1. Surface de Fermi - Electrons et trous

Considérer le système de l'exercice 1 de la série 11 (réseau carré de côté a , N mailles, 1 atome par maille et 2 électrons par atome), en présence d'un potentiel qui lève la dégénérescence des états au bord de la ZB. On considère les deux bandes à plus basse énergie. La figure montre la structure de bande à gauche et la surface de Fermi à droite, dans le schéma de zone étendue. En vert les états occupés.



- Esquisser la surface de Fermi dans le schéma de zone réduite. Si nécessaire, utiliser le schéma de zone répétée de façon à représenter explicitement des surfaces fermées.
- A l'aide de la structure de bande et/ou de la surface de Fermi, identifier la nature des porteurs de charge à proximité de E_F . Si on applique un champ magnétique \mathbf{B} sortant de la feuille, quel est le sens de parcours des orbites à la surface de Fermi ? Où aura-t-on un comportement de type "électron" ? Et un comportement de type "trou" ? Justifier.

2. Coefficient de Hall à haut champ

Pour les systèmes avec des porteurs de charge de type électron (densité $n_{électron}$) coexistant avec des porteurs de type trou (densité n_{trou}), on peut écrire le coefficient de Hall à haut champ comme

$$R_H = -\frac{1}{en_{effectif}} = -\frac{1}{e(n_{électron} - n_{trou})}$$

Nous allons calculer ce coefficient dans le cas de l'aluminium.

L'aluminium (Al, structure fcc) possède 3 électrons de valence par atome. La surface de Fermi englobe entièrement la première zone de Brillouin, et coupe la deuxième et la troisième. Dans la deuxième zone les porteurs de charge sont des trous, alors que dans la troisième zone ce sont des électrons (voir la figure à la page suivante).

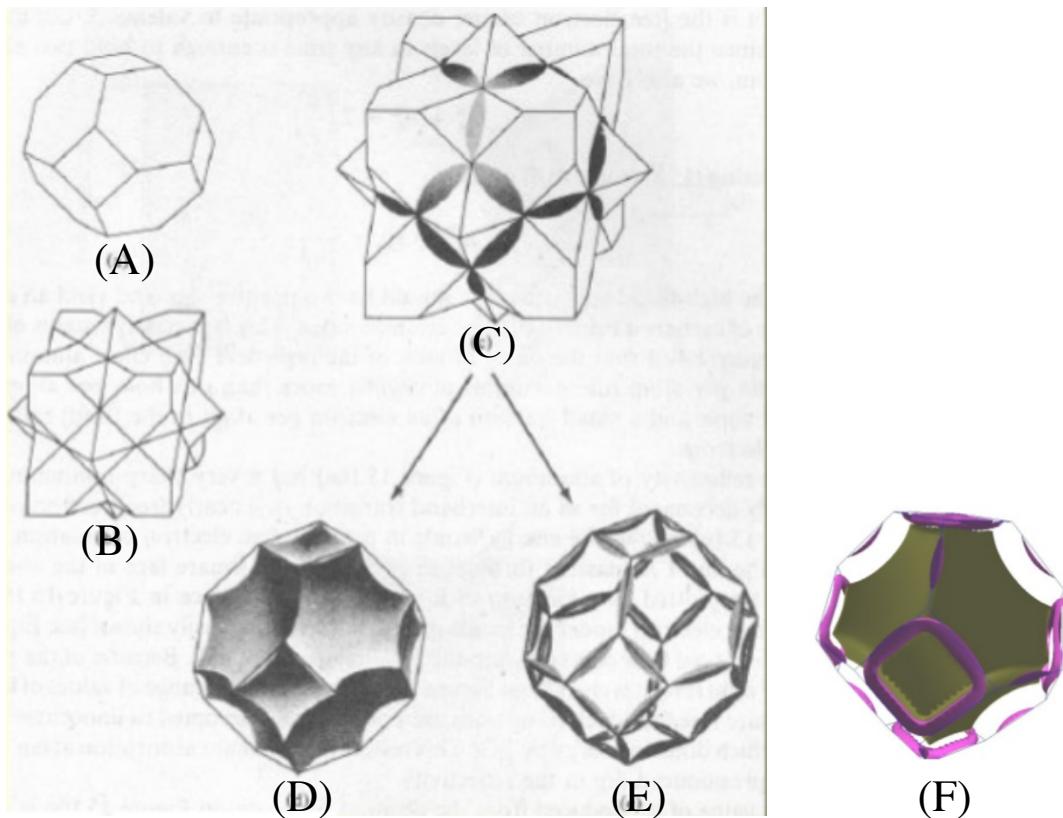
- A l'aide des informations données ci-dessus et de la figure à la page suivante, établir quels sont les électrons et les trous qu'il faut considérer dans le calcul de $n_{effectif}$. A quelle zone de Brillouin appartiennent-ils respectivement ? Récrire l'expression de R_H pour le cas de l'aluminium.

(b) Quel est le nombre total d'électrons si le cristal est composé de N mailles primitives ? Exprimer n , la densité électronique totale de l'Al, en fonction du nombre de mailles N et du volume du cristal V . Combien d'états y a-t-il dans une zone de Brillouin quelconque ?

(c) Considérer par exemple la deuxième zone de Brillouin. Exprimer la somme du nombre d'électrons et du nombre de trous en fonction de N . Ensuite, exprimer la relation pour la somme des densités correspondantes, $n_{électron}^{II} + n_{trou}^{II}$, en termes de n (II identifie la deuxième zone de Brillouin).

(d) En sachant que la première zone de Brillouin est entièrement remplie, donner le nombre d'électrons qui sont dans la deuxième et troisième zone en termes de N . Ensuite, exprimer les densités correspondantes, $n_{électron}^{II}$ et $n_{électron}^{III}$, en fonction de n (II identifie la deuxième zone de Brillouin, III la troisième).

(e) En utilisant les résultats trouvés aux points précédents et à l'aide de l'expression trouvée en (a), exprimer le coefficient de Hall de l'aluminium en fonction de n .



(A) : première zone de Brillouin et (B) deuxième zone de Brillouin d'un cristal fcc, schéma de zone étendue. (C) Surface de Fermi de Al dans l'approximation du réseau vide (électrons libres) dans le schéma de zone étendue. (D) Surface de Fermi dans la deuxième et (E) dans la troisième zone de Brillouin (schéma de zone réduite). (F) Surface de Fermi en présence du potentiel périodique (jaune : deuxième zone, violet : troisième zone).

3. Potentiel chimique dans un semiconducteur intrinsèque

A l'aide d'un schéma, expliquer pourquoi en général la position du potentiel chimique intrinsèque μ_i à température $T > 0$ dépend du rapport entre les masses effectives de la bande de conduction m_c et de valence m_v .

4. Densité maximale de porteurs de charge

Dans cet exercice nous allons dériver explicitement l'expression pour la concentration maximum de porteurs de charge dans un semiconducteur non dégénéré dans l'approximation de bandes ayant une forme quadratique en \mathbf{k} (voir 7.4.1, Eq. 7.17). Les parties (a), (b), et (c) correspondent aux calculs du polycopié.

Considérer un semiconducteur. En analogie avec le modèle des électrons libres, on considère des relations quadratiques entre E et k pour les bandes de valence et de conduction. Par conséquent, la densité d'états dans la bande de valence est donnée par l'expression

$$g_v(E) = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m_v}{\hbar^2} \right)^{3/2} (E_v - E)^{1/2}$$

où m_v est la masse effective des trous et E_v le maximum de la bande de valence. Une expression analogue est valable pour la densité d'états dans la bande de conduction. Dans la suite de l'exercice, nous nous limitons à l'analyse de la bande de valence.

- (a) Ecrire l'expression de la probabilité d'occupation pour les trous dans la bande de valence en fonction de E et de T .
- (b) Donner l'expression approximée de cette distribution dans le cas où $\mu - E_v \gg k_B T$.
- (c) Montrer que, dans cette approximation, on peut exprimer la densité de trous $p(T)$ dans la bande de valence comme suit, avec $P(T)$ la densité maximale à la température T :

$$p(T) = P(T) e^{(E_v - \mu)/k_B T}$$

- (d) Etablir l'expression de la densité maximale $P(T)$.

Indication : $\int_0^\infty x^{1/2} e^{-x} dx = \frac{\sqrt{\pi}}{2}$

1. Surface de Fermi - Electrons et trous

(a) La figure à la page suivante montre la surface de Fermi dans la 1ère et dans la 2ème zone de Brillouin, d'abord dans un schéma de zone réduite, et ensuite dans un schéma de zone répétée, où on voit explicitement comment la surface de Fermi se ferme en considérant la périodicité. Pour la 2ème zone, on obtient la représentation en zone réduite en partant de la représentation en zone étendue et en décalant les parties qui apparaissent dans la 2ème zone d'au vecteur du réseau réciproque \mathbf{G} .

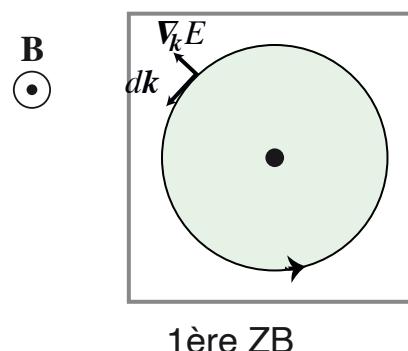
(b) En regardant la structure de bande, on voit que la première bande est presque entièrement remplie. Seulement les états proches des points de type B ne sont pas occupés. Le sommet de cette bande correspond à une fonction concave $\frac{d^2E}{dk_x dk_y} < 0$, ce qui correspondrait à une masse m^* électronique négative. On décrit cette situation en introduisant les trous (charge positive, masse m^* positive). Les bas de la deuxième bande est convexe $\frac{d^2E}{dk_x dk_y} > 0$, donc $m^* > 0$, on décrit la conductivité en terme d'électrons.

Concernant le sens de parcours des orbites en présence d'un champ magnétique : $\hbar \dot{\mathbf{k}} = -e \mathbf{v} \times \mathbf{B} = -e \frac{1}{\hbar} \nabla_{\mathbf{k}} E \times \mathbf{B}$.

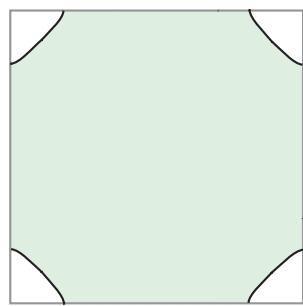
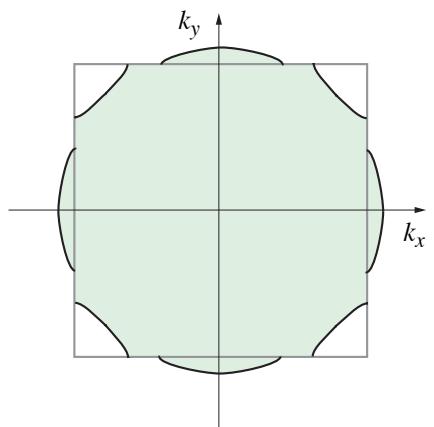
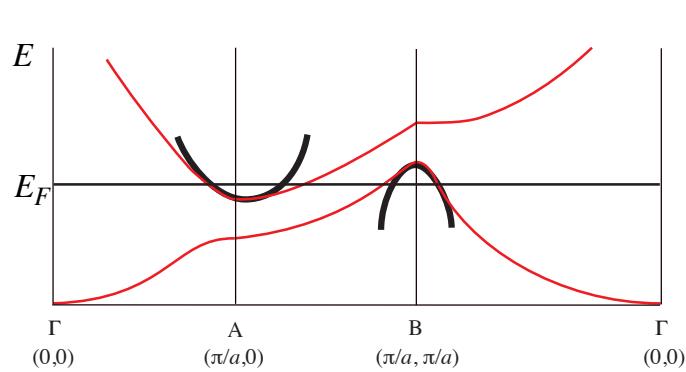
Le gradient de l'énergie est donnée par la direction dans laquelle l'énergie augmente : si on rajoute des électrons au système, la sphère de Fermi va devenir plus grande, donc $\nabla_{\mathbf{k}} E$ pointe vers l'extérieur de la surface de Fermi. Donc, le gradient de l'énergie pointe des états occupés vers les états vides.

Le gradient de l'énergie ($\nabla_{\mathbf{k}} E$) est indiqué pour chaque surface. Pour le champ \mathbf{B} comme indiqué sur la figure et avec $\hbar \dot{\mathbf{k}} = -e \frac{1}{\hbar} \nabla_{\mathbf{k}} E \times \mathbf{B}$, on trouve que $\hbar \dot{\mathbf{k}}$ (indiqué par $d\mathbf{k}$) est orienté dans le sens horaire sur l'orbite relative à la 1ère zone, alors que $\hbar \dot{\mathbf{k}}$ est orienté dans le sens anti-horaire dans la 2ème. Pour ce derniers cas, le sens dans lequel l'orbite est parcourue est celui d'un électron. Par contre, dans la 1ère zone le sens est inversé : on est en présence d'une orbite de trou.

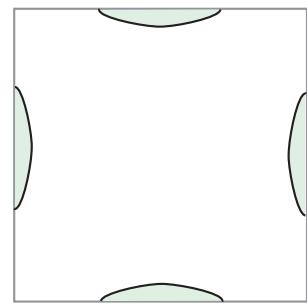
La figure ci-dessous montre ce qui se passe pour le système avec un seul électron par atome, qui peut aider à identifier le sens de parcours dans le cas des électrons.



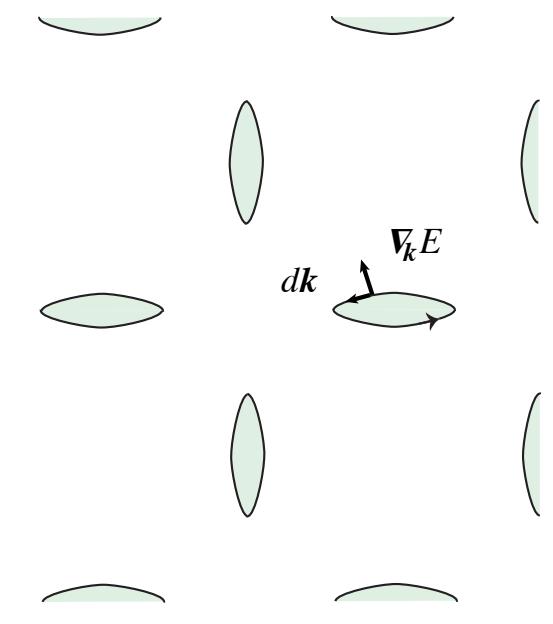
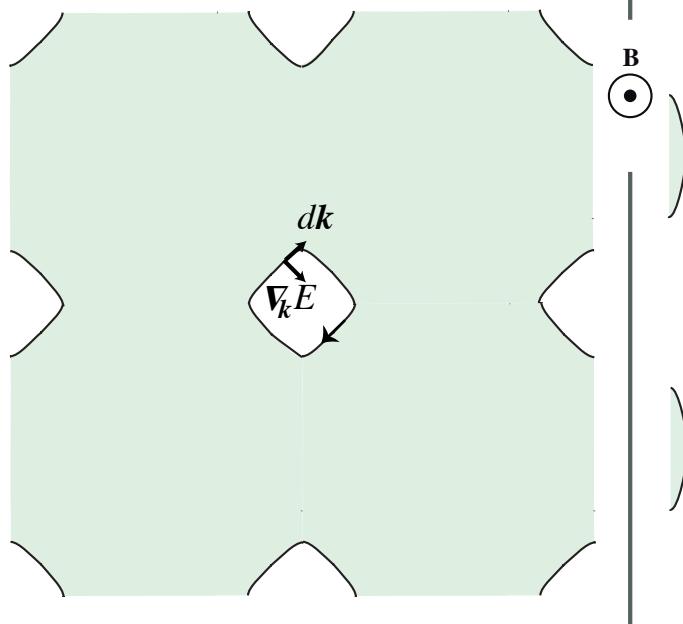
1ère ZB



1ère ZB



2ème ZB



2. Coefficient de Hall à haut champ

(a) La surface de Fermi de l'aluminium enferme totalement la première zone de Brillouin et croise la deuxième et la troisième. Ainsi, deux électrons de valence sur trois vont se placer dans la première zone et ne donnent pas de contribution au coefficient de Hall, qui sera déterminé par les contributions à la conduction de l'électron qui est reparti dans les autres deux zones.

De plus, on sait que la deuxième zone présente une conduction de type "trous" et la troisième de type "électrons". On rappelle que pour chaque zone on doit choisir le type de description qu'on veut utiliser : soit on considère les électrons, soit on considère les trous.

Donc, on trouve que $n_{\text{effectif}} = (n_{\text{électron}}^{III} - n_{\text{trou}}^{II})$, et $R_H = -\frac{1}{e(n_{\text{électron}}^{III} - n_{\text{trou}}^{II})}$.

(b) Nombre total d'électrons = $3N$; $n = \frac{3N}{V}$

Nombre d'états dans une zone de Brillouin en tenant compte du spin = $2N$.

Nombre d'états dans une zone de Brillouin par unité de volume en tenant compte du spin = $\frac{2N}{V}$.

(c) Dans chaque zone de Brillouin, la somme du nombre d'électrons et du nombre de trous (= états vides) est égale au nombre d'états disponibles ($2N$).

En termes des densités, et appliqué à la deuxième zone comme suggéré dans l'énoncé, on a :

$$n_{\text{électron}}^{II} + n_{\text{trou}}^{II} = \frac{2N}{V} = \frac{2N}{3N} \frac{3N}{V} = \frac{2n}{3}$$

(d) Nombre d'électrons dans la première zone de Brillouin = $2N$.

Nombre d'électrons dans la deuxième zone + troisième zone = nombre total d'électrons – nombre d'électrons dans la première zone = $3N - 2N = N$

En termes de densités :

$$n_{\text{électron}}^{II} + n_{\text{électron}}^{III} = \frac{N}{V} = \frac{3N}{V} \frac{N}{3N} = \frac{n}{3}$$

(e) En utilisant les résultats du point (c) et du point (d), on obtient :

$$n_{\text{électron}}^{III} - n_{\text{trou}}^{II} = \frac{n}{3} - \frac{2n}{3} = -\frac{n}{3}$$

d'où :

$$R_H = -\frac{1}{e(n_{\text{électron}}^{III} - n_{\text{trou}}^{II})} = \frac{1}{e\frac{n}{3}}$$

Ce calcul prédit un coefficient de Hall à haut champ positif et correspondant à une densité effective de porteurs de charge d'un tiers de n (où n est la densité des électrons de valence). Ceci correspond bien à la valeur expérimentale.

Du point de vue de l'effet Hall à haut champ, l'aluminium possède un trou par atome (qui résulte d'un petit peu plus qu'un trou par atome dans la deuxième zone, et d'une petite fraction d'électron dans la troisième zone), plutôt que trois électrons.

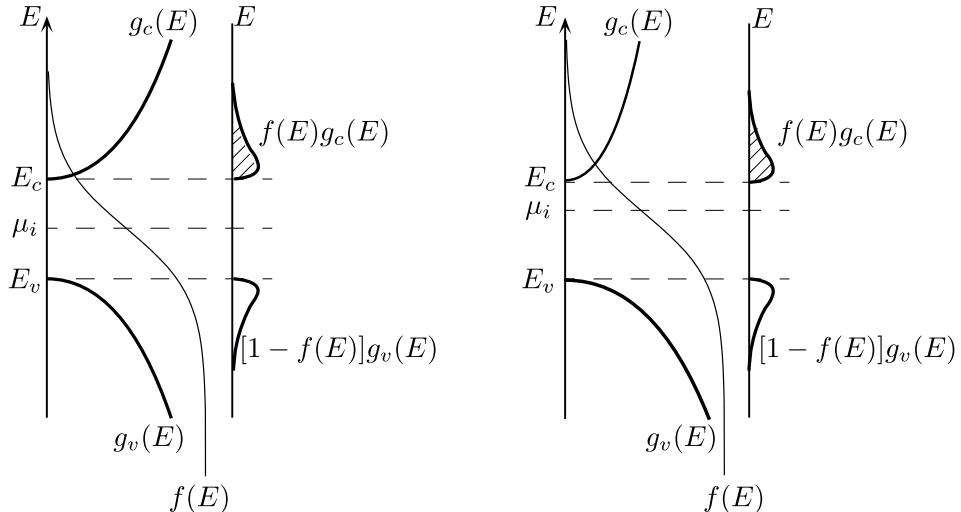
3. Potentiel chimique dans un semiconducteur intrinsèque

Le potentiel chimique est donné par $\mu_i = E_v + \frac{1}{2}E_g + \frac{3}{4}k_B T \ln(\frac{m_v}{m_c})$.

Pourquoi les masses effectives m_v et m_c apparaissent dans cette équation ? La valeur de la masse effective détermine la densité d'états $g(E)$, puisque dans le cas de l'approximation quadratique $g(E) = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2} E^{1/2}$.

Figure à gauche : si $m_v = m_c$, $g_v(E)$ et $g_c(E)$ sont pareilles (décalées et avec courbure opposée) et le potentiel chimique (point d'infexion de la distribution de Fermi-Dirac) reste au milieu de la bande interdite. Les surfaces délimitées par les fonctions $f(E)g_c(E)$ (états occupés dans la bande de conduction) et $[1 - f(E)]g_v(E)$ (états vides dans la bande de valence) sont égales, pour conserver le nombre d'électrons dans le système.

Figure à droite : si $m_v > m_c$, $g_v(E) > g_c(E)$, donc le potentiel chimique doit se décaler vers le haut pour compenser cette différence en densité d'états. Autrement on "enlèverait" des électrons de la bande de valence, mais sans pouvoir occuper suffisamment d'états dans la bande de conduction, donc le nombre d'électrons ne serait pas conservé.



4. Densité de porteurs de charge dans les semiconducteurs

(a) La probabilité d'occupation f_n pour les électrons est la fonction de Fermi, celle des trous est :

$$f_p(E) = 1 - f_n(E) = \frac{1}{1 + e^{-(E-\mu)/k_B T}}$$

(b) Si $\mu - E_v \gg k_B T$, $\mu - E \gg k_B T \ \forall E$ dans la bande de valence, et on peut alors négliger le terme '1' devant l'exponentielle dans l'équation en (a). On trouve alors alors : $f_p(E) = e^{(E-\mu)/k_B T}$.

(c) Compte tenu de la probabilité d'occupation pour les trous, on peut supposer la bande de valence de largeur infinie. La densité de trous s'écrit alors :

$$p(T) = \int_{-\infty}^{E_v} g_v(E) e^{(E-\mu)/k_B T} dE = \left[\int_{-\infty}^{E_v} g_v(E) e^{(E-E_v)/k_B T} dE \right] e^{(E_v-\mu)/k_B T}$$

c'est-à-dire $p(T) = P(T) e^{(E_v-\mu)/k_B T}$ où $P(T)$ est la densité maximale de trous dans la bande de valence.

(d) En explicitant $g_v(E) = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m_v}{\hbar^2}\right)^{3/2} (E_v - E)^{1/2}$:

$$P(T) = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m_v}{\hbar^2}\right)^{3/2} \int_{-\infty}^{E_v} (E_v - E)^{1/2} e^{(E-E_v)/k_B T} dE \quad \left[x = \frac{E_v - E}{k_B T} \rightarrow dE = -k_B T dx \right]$$

$$= \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m_v}{\hbar^2}\right)^{3/2} \int_0^{+\infty} x^{1/2} (k_B T)^{1/2} e^{-x} k_B T dx = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m_v}{\hbar^2}\right)^{3/2} (k_B T)^{3/2} \frac{\sqrt{\pi}}{2}$$

Au final on trouve : $P(T) = \frac{1}{4} \left(\frac{2m_v k_B T}{\pi \hbar^2}\right)^{3/2}$.

Donc $P(T)$ varie lentement avec la température par rapport au facteur exponentiel dans $p(T)$. Cette relation donne la concentration maximale de trous dans un semiconducteur non-dégénéré (c'est-à-dire pour lequel $\mu - E_v \gg k_B T$ et $E_c - \mu \gg k_B T$).