

## Sujet 1

### Questions de compréhension

(tot 17 pts)

- (a) Electrons libres et potentiel chimique (2 pts)  
Dans un gaz tridimensionnel d'électrons libres, la densité d'états  $g(E) \propto \sqrt{E}$ . Expliquer pourquoi le potentiel chimique  $\mu$  doit varier en passant de  $T = 0$  à  $T > 0$ . Décrire qualitativement  $\mu(T)$  et en donner l'expression générale.
- (b) Résistivité des métaux (1 pt)  
Tracer la résistivité  $\rho$  d'un métal en fonction de la température, discuter les différents régimes et les processus de diffusion que subissent les électrons.
- (c) Hamiltonien dans l'approximation des liaisons fortes (2 pts)  
On décrit l'Hamiltonien dans le modèle de liaisons fortes par la somme de l'Hamiltonien de l'atome et un potentiel  $\Delta U$ , qui est la différence entre le potentiel de l'atome et celui ressenti par les électrons dans le solide. Tracer  $\Delta U(r)$  le long d'une ligne droite passant par les sites atomiques et discuter cette courbe.
- (d) Intégrales dans l'approximation des liaisons fortes (2 pts)  
Expliquer la signification des trois intégrales  $\alpha$ ,  $\beta$  et  $\gamma$ , et expliquer pourquoi en général on peut négliger  $\alpha$  et  $\beta$ .
- (e) Masse effective (1 pt)  
Donner l'expression de la masse effective. Expliquer sa signification et son utilité.
- (f) Potentiel chimique d'un semiconducteur intrinsèque (2 pts)  
A l'aide d'un schéma, expliquer la dépendance du potentiel chimique  $\mu$  en fonction de la température pour un semiconducteur intrinsèque.
- (g) Densité de porteurs et conductivité d'un semiconducteur dopé (3 pts)  
Tracer dans un plot Arrhenius ( $\ln$  vs  $1/T$ ) la densité de porteurs de charge  $n$  dans la bande de conduction en fonction de la température. Indiquer les régimes intrinsèque et extrinsèque.  
Tracer la conductibilité électrique du même semiconducteur dans un plot Arrhenius et indiquer les deux régimes dominés par la densité de porteurs  $n$  et le régime où les interactions électron-phonon limitent la conduction. Justifier les réponses.
- (h) Supraconductivité et chaleur spécifique (2 pts)  
Tracer la chaleur spécifique d'un supraconducteur en fonction de la température dans un diagramme  $c_v/T$  vs  $T^2$ , pour le matériau dans l'état supra et dans l'état normal. Comment peut-on conclure d'un tel diagramme qu'un supra forme un état électronique avec une bande d'énergie interdite (gap)?
- (i) Supraconductivité et phonons (1 pt)  
Quelle expérience prouve que les vibrations du réseau sont impliquées dans la supraconductivité? Expliquer brièvement pourquoi.
- (j) Paires de Cooper (1 pt)  
Dans un métal dans l'état supraconducteur, quels sont les électrons qui forment des paires de Cooper?

## Sujet 2

**Problème :** Susceptibilité paramagnétique de Pauli

(7 pts)

Considérer un gaz bidimensionnel d'électrons libres dans le plan  $xy$ , à température  $T = 0$  K. La densité du gaz est  $n$  et la densité d'états est  $g(E)$ .

- Représenter graphiquement la densité d'états des électrons de spin-up  $g_+(E)$  et la densité d'états des électrons de spin-down  $g_-(E)$  en présence d'un champ magnétique  $\mathbf{B} = (0, 0, B)$  avec  $B > 0$ .
- Exprimer  $n_+$  et  $n_-$ , c'est-à-dire la densité d'électrons de spin-up et d'électrons spin-down, en présence de  $\mathbf{B}$ , ainsi que la différence  $(n_+ - n_-)$ .
- La susceptibilité paramagnétique de Pauli est donnée par  $\chi_{\text{Pauli}} \approx \mu_0 \frac{M_z}{B}$ , où  $M_z$  est l'aimantation du gaz électronique en présence de  $\mathbf{B}$ .  
Trouver l'expression de  $\chi_{\text{Pauli}}$  pour le gaz bidimensionnel d'électrons en fonction de  $n$  et de la température de Fermi  $T_F$ .
- Commenter le résultat obtenu pour  $\chi_{\text{Pauli}}$ . En quoi diffère-t-il du cas d'un gaz tridimensionnel ?

## Sujet 3

**Problème :** Electrons dans un potentiel périodique faible

Ce problème est séparé en 3 parties (presque) indépendantes

On considère un gaz d'électrons libres dans un réseau bidimensionnel rectangulaire décrit par des vecteurs primitifs  $\mathbf{a}_1 = a(1, 0)$  et  $\mathbf{a}_2 = 2a(0, 1)$ .

Partie 1 : Electrons libres, approximation du réseau vide

(8 pts)

- Déterminer les vecteurs primitifs du réseau réciproque  $\mathbf{b}_1$  et  $\mathbf{b}_2$ .  
Dessiner la première zone de Brillouin (1ZB). Identifier les points de haute symétrie suivants :  $\Gamma = (0, 0)$ ,  $A = (0, \frac{\pi}{2a})$ ,  $B = (\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{2a})$ ,  $C = (\frac{\pi}{a}, 0)$ .
- Dessiner les plans de Bragg pertinents pour déterminer la dégénérescence des niveaux d'énergie pour les électrons libres aux points A, B et C, et donner la dégénérescence.
- Les valeurs de l'énergie  $E_{\mathbf{k}-\mathbf{G}_i}^0$ , avec  $\mathbf{k} = (k_x, k_y) \in 1\text{ZB}$ , dans les points  $\Gamma$ , A, B et C, sont données dans le tableau ci-dessous, pour les vecteurs  $\mathbf{G}_0 = (0, 0)$  et  $\mathbf{G}_3 = (\frac{2\pi}{a}, \frac{\pi}{a})$ . Les énergies sont données en unités de  $\frac{\hbar^2}{2m}(\frac{\pi}{a})^2$ .

	$\Gamma$	A	B	C
$\mathbf{G}_0$	0	0.25	1.25	1
$\mathbf{G}_3$	5	4.25	1.25	2

Calculer les valeurs  $E_{\mathbf{k}-\mathbf{G}_i}^0$  dans les points  $\Gamma$ , A, B et C pour les vecteurs  $\mathbf{G}_1 = (0, \frac{\pi}{a})$  et  $\mathbf{G}_2 = (\frac{2\pi}{a}, 0)$ .

- Représenter toutes les valeurs  $E_{\mathbf{k}-\mathbf{G}_i}^0$  en unités de  $\frac{\hbar^2}{2m}(\frac{\pi}{a})^2$ , et dessiner la structure de bande le long du chemin  $\Gamma\text{ABCT}$  (distances entre les points de la 1ZB en unités de  $\frac{\pi}{a}$ ).

- (e) On considère le même gaz d'électrons en présence d'un potentiel périodique faible :

$$U(y) = -2V_0 \cos\left(\frac{\pi}{a}y\right)$$

Déterminer les vecteurs du réseau réciproque  $\mathbf{G}$  pour lesquels les coefficients de Fourier  $U_{\mathbf{G}}$  sont non-nuls.

- (f) Démontrer que la dégénérescence des niveaux électroniques de plus basse énergie est levée au point A, et que la largeur du gap est  $2V_0$ .
- (g) Au total, la structure de bande  $E(\mathbf{k})$  est modifiée par la présence du potentiel  $U(y)$  de la façon suivante :
- en A, ouverture d'un gap de largeur  $2V_0$  ;
  - en B, ouverture d'un gap de largeur  $2V_0$ , avec bandes dégénérées à deux à deux ;
  - en C, pas d'ouverture de gap.

Représenter qualitativement la structure de bande pour les électrons quasi-libres. Considérer uniquement les parties des bandes ayant une énergie  $E(\mathbf{k}) < 2 \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\pi}{a}\right)^2$ .

### Partie 3 : Surfaces de Fermi

(8 pts)

- (h) On considère le cas où il y a deux électrons par maille. Calculer le vecteur d'onde de Fermi  $k_F$  et l'énergie de Fermi  $E_F$  dans le cas des électrons libres. Reporter  $E_F$  dans la structure de bande du point (c).

*Valeurs numériques utiles pour répondre à cette question et aux deux questions suivantes :*  
 $2/\pi \approx 0.65$ ,  $\sqrt{2/\pi} \approx 0.8$ .

- (i) Reporter  $E_F$  aussi dans la structure de bande en présence du potentiel, trouvée au point (f). Est-ce qu'en augmentant suffisamment  $V_0$  le système pourrait devenir isolant ?
- (j) Représenter la surface de Fermi dans le cas des électrons libres et, qualitativement, dans le cas des électrons quasi-libres.
- (k) On considère le cas des électrons quasi-libres. On applique un champ magnétique  $\mathbf{B}$  perpendiculaire au plan  $xy$  (sortant de la feuille). Identifier les types d'orbites et indiquer le sens de parcours. Si besoin, utiliser un schéma de zones répétées.  
 Si l'on effectue une expérience de type de Haas - van Alphen, combien de périodicités différentes va-t-on observer dans le signal en fonction de  $1/B$  ?

## Sujet 4

**Problème :** Jonction  $p - n$

**(14 pts)**

Considérer un semiconducteur non dégénéré, c'est-à-dire tel que  $E_c - \mu \gg k_B T$  et que  $\mu - E_v \gg k_B T$ . Dans ces conditions, les relations suivantes sont valables, avec  $\beta = (k_B T)^{-1}$  :

- densité d'électrons dans la bande de conduction  $n = N(T) \exp[-\beta(E_c - \mu)]$
- densité de trous dans la bande de valence  $p = P(T) \exp[-\beta(\mu - E_v)]$
- loi d'action de masse :  $np = N(T)P(T) \exp[-\beta(E_c - E_v)] = n_i^2$

$N(T)$  et  $P(T)$  sont les densités maximales de porteurs (électrons et trous, respectivement) en fonction de  $T$ , et  $n_i$  est la densité de porteurs intrinsèques.

- (a) On considère deux pièces séparées de ce matériau semiconducteur. L'une est dopée  $p$ , avec  $N_a$  accepteurs uniquement, l'autre est dopée  $n$ , avec  $N_d$  donneurs uniquement. On suppose que toutes les impuretés sont ionisées.

Exprimer la densité d'électrons  $n_p$  et de trous  $p_p$  dans le semiconducteur dopé  $p$  en fonction de  $N_a$  et de  $n_i$ , ainsi que la densité d'électrons  $n_n$  et de trous  $p_n$  dans le semiconducteur dopé  $n$  en fonction de  $N_d$  et de  $n_i$ .

- (b) Faire un schéma représentant les énergies de la bande de conduction ( $E_{c,p}$ ) et de valence ( $E_{v,p}$ ) ainsi que le potentiel chimique  $\mu$  dans le semiconducteur dopé  $p$ .

Faire un schéma représentant les énergies de la bande de conduction ( $E_{c,n}$ ) et de valence ( $E_{v,n}$ ) ainsi que le potentiel chimique  $\mu$  dans le semiconducteur dopé  $n$ .

Il n'est pas nécessaire de représenter les niveaux d'impuretés  $E_d$  et  $E_a$ .

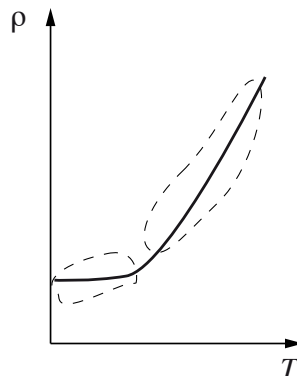
- (c) Les pièces  $p$  et  $n$  sont mises en contact. Un potentiel électrostatique de contact  $\Delta\phi$  entre les deux côtés du système apparaît. Esquisser le schéma d'énergie à l'équilibre. Quelle est la condition sur le potentiel chimique  $\mu$  ? Quelle est l'expression de  $e\Delta\phi$  en termes de  $E_{c,p}$  et  $E_{c,n}$  ?

- (d) Trouver les expressions pour la densité d'électrons  $n_n$  (porteurs majoritaires du côté  $n$ ) et  $n_p$  (porteurs minoritaires du côté  $p$ ) en fonction de la température  $T$ .

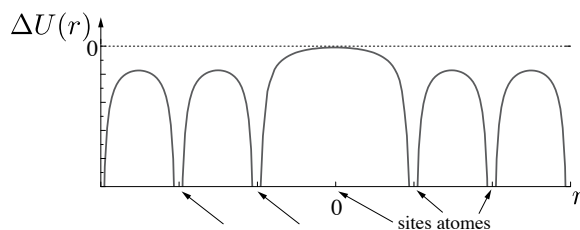
A partir des deux expressions, expliciter  $\mu$ , et en déduire l'expression pour  $e\Delta\phi$  en termes de  $N_a$ ,  $N_d$ ,  $n_i$ .

- (a) (2 pts)  $n$ , la densité d'électrons par unité de volume, doit rester constante (car on suppose que le solide ne se dilate pas).  $n$  est donné par l'aire sous la courbe  $g(E)f(E, T)$ , avec  $f(E, T)$  la fonction de Fermi-Dirac. Comme  $g(E)$  est une fonction croissante, et la fonction de FD est symétrique autour de  $\mu$ ,  $\mu$  diminue en augmentant  $T$  pour garantir qu'il y a autant d'états qui se vident par excitation thermique que d'états qui se remplissent par cette excitation. Avec le développement de Sommerfeld on trouve  $\mu = E_F - \text{const } T^2 \frac{dg}{dE}$ .

- (b) (1 pt)  $\rho$  est constante à très basse  $T$  et monte ensuite linéairement avec  $T$ . La partie constante vient des collisions électrons - impuretés. La partie linéaire en  $T$  vient des collisions électrons - phonons car le nombre de phonons d'une énergie donnée est proportionnelle à  $T$  pour cette gamme de température (typiquement RT).



- (c) (2 pts) En  $\mathbf{R} = 0$ ,  $\Delta U(\mathbf{r})$  est nul puisque le potentiel atomique  $U_{at}(\mathbf{r})$  décrit bien le potentiel ressenti par les électrons au voisinage de ce site. Ailleurs, le potentiel est négatif parce que attractif partout. Aux positions des atomes, le potentiel est fortement attractif ( $= U_{at}$ ). Entre les sites atomiques  $\Delta U$  prend la valeur maximale de  $U$  ( $U_{at} = 0$ ) (potentiel atomique qui décroît très rapidement parce que ecranté).



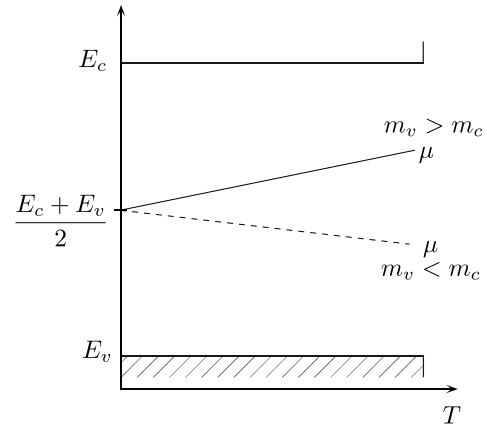
- (d) (2 pts)  $\alpha(\mathbf{R})$  intégrale de recouvrement ; dépend de l'extension des orbitales atomiques. Apparaît au dénominateur de l'expression pour  $E(\mathbf{k})$  comme facteur de normalisation. Ne modifie pas qualitativement le résultat pour  $E(\mathbf{k})$ , donc en général négligeable.

$\beta$  intégrale de champ cristallin, décrit l'effet du potentiel des autres atomes au site de l'atome considéré. Donne un petit décalage (offset) en énergie de toute la bande par rapport à l'énergie atomique  $E_0$  ; par conséquent on peut la négliger dans la détermination de  $E(\mathbf{k})$ .

$\gamma(\mathbf{R})$  intégrale de transfert, en principe pour chaque  $\mathbf{R}$ , en pratique on se limite aux premiers voire aux deuxièmes voisins. C'est l'intégrale qui décrit le passage (transfert, hopping) d'un électron d'un site à un autre. C'est le terme qui donne la dépendance en  $\mathbf{k}$  et qui décrit la création de la bande. La largeur de la bande est proportionnelle à  $\gamma$ .

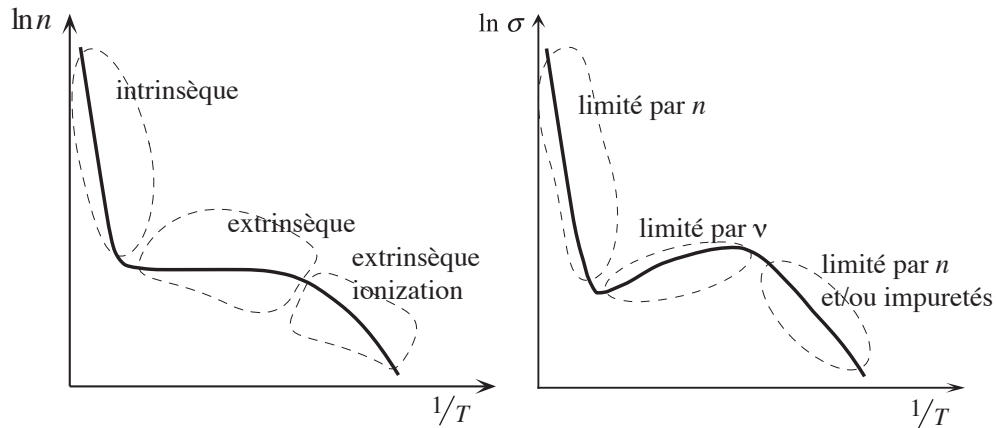
- (e) (1 pt) Dans un cas isotrope, ou cas 1D,  $1/m^* = \frac{\partial^2 E(k)}{\partial k^2} / \hbar^2$ . Inversement liée à la courbure de bande. La masse effective tient compte de l'effet du potentiel périodique sur le mouvement des électrons. Ainsi, on peut utiliser des équations du mouvement qui ont la même forme que celles pour les électrons libres. Description de la dynamique pour les états proches des minima ou maxima des bandes ; description des bandes presque remplies par le concept de trou : on aurait des électrons avec masse effective négative, on les décrit comme des particules chargées positivement avec masse effective positive.

- (f) (2 pts) Le potentiel chimique est donné par  $\mu_i = E_v + \frac{1}{2}E_g + \frac{3}{4}k_B T \ln(\frac{m_v}{m_c})$ . A température nulle le potentiel chimique est au milieu du gap pour garantir qu'il y a autant d'états qui se vident par excitation thermique que d'états qui se remplissent par cette excitation dès que la température s'écarte de zéro (conservation  $n$ ). Ensuite, selon le rapport entre  $m_v$  et  $m_c$  (et donc selon le rapport entre  $g_v(E)$  et  $g_c(E)$ ),  $\mu$  va augmenter ou diminuer. En général, le rapport des masses est tel que  $\mu$  augmente.

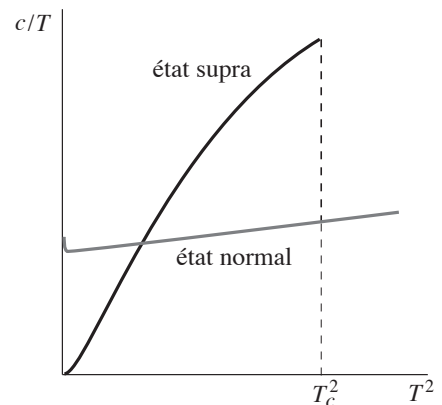


- (g) (3 pts) A gauche, figure pour  $n$  : on voit la droite qui correspond au régime dominé par le comportement intrinsèque (haute  $T$ , intrinsèque), ensuite on voit un régime où  $n = \text{const}$ , donc tous les dopants sont ionisés ( $T$  intermédiaire, extrinsèque), ensuite seulement une partie est ionisée (plus basse  $T$ , extrinsèque ionisation).

A droite : pour  $\sigma$  la courbe suit celle de  $n$  à basses  $T$  et à hautes  $T$ , donc la conductivité est dominée par la densité de porteurs  $n$ . A  $T$  intermédiaire, là où  $n$  est constante, la conductivité est limitée par la mobilité  $\nu$  qui à son tour est affectée par  $\tau$  et donc par l'interaction entre électrons et phonons. En augmentant la température dans ce régime la conductivité diminue, il n'y a pas de régime constant pour  $\sigma$ .



- (h) (2 pts) On trace  $c_v/T$  vs  $T^2$ . Pour le métal dans l'état normal on trouve une droite, son extrapolation à  $T = 0$  donne le coefficient de la contribution électronique à la chaleur spécifique. Dans un métal normal on peut faire des excitation d'énergie arbitrairement petite juste en dessus de  $E_F$ . Dans le supra,  $c_v$  diminue (exponentiellement) et tombe à zéro, ce qui indique la présence d'un gap qui empêche les excitations d'énergie arbitrairement petites à très basse température.  $c_v \propto (-\Delta/k_B T)$ .



- (i) (1 pt) Il s'agit de l'effet isotopique sur la température critique  $T_c$ . En changeant la masse des atomes, la fréquence propre des vibrations du réseau change et donc aussi l'énergie des phonons. En effet, on trouve que  $T_c \propto M^{-1/2}$ .
- (j) (1 pt) Seulement les électrons de conduction proches de  $E_F$  (à des énergies de l'ordre de  $k_B T_c$ , donc une petite fraction de  $n$ ).

## Sujet 2 - corrigé

(tot 7 pts)

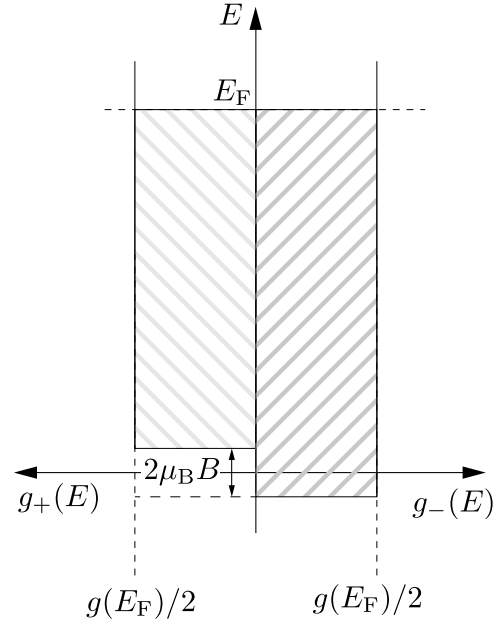
- (a) (2 pts) En l'absence de champ magnétique :

$$g_+(E) = g_-(E) = \frac{1}{2}g(E)$$

Comme la densité d'états est constante,  $g(E) = g(E_F)$ .

L'interaction du moment magnétique de spin avec le champ  $\mathbf{B}$  résulte en une différence d'énergie entre électrons spin-up et spin-down. Comme le moment magnétique est par définition opposé au spin, ces sont les électrons avec spin-down qui vont gagner de l'énergie dans l'interaction avec le champ magnétique.

(Dans la figure, la position du zéro de l'énergie n'est pas importante.)



- (b) (2 pts) Grâce à la forme simple de  $g(E)$  et puisque on est à  $T = 0$ , on peut calculer les intégrales pour obtenir  $n_+$  et  $n_-$  comme aires des rectangles. Calcul de  $n_+$  et  $n_-$  :

$$n_+ = \frac{1}{2}g(E_F)(E_F - \mu_B B)$$

$$n_- = \frac{1}{2}g(E_F)(E_F + \mu_B B)$$

Pour la différence on a :

$$n_+ - n_- = -g(E_F)\mu_B B$$

- (c) (2 pts) Pour  $\mathbf{B} = (0, 0, B)$ , l'aimantation  $M_z$  est donnée par  $M_z = -\mu_B(n_+ - n_-)$ .

Calcul de la susceptibilité :

$$\chi_{\text{Pauli}} = \mu_0 \frac{M_z}{B} = -\mu_0 \mu_B \frac{n_+ - n_-}{B} = \mu_0 \mu_B^2 g(E_F) = \mu_0 \mu_B^2 \frac{n}{E_F} = \mu_0 n \frac{\mu_B^2}{k_B T_F}$$

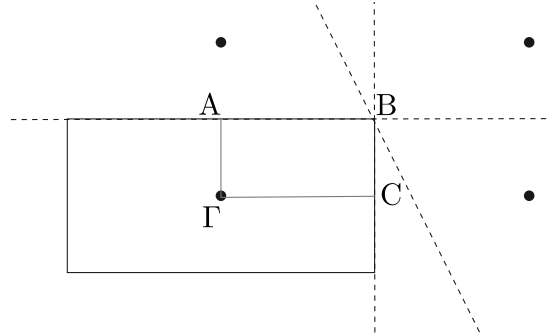
où on a utilisé le fait que  $g(E_F)E_F = n$ .

- (d) (1 pt) Comme dans le cas 3D, la susceptibilité ne dépend pas de  $T$ . On trouve une même dépendance en  $n$  et en  $1/T_F$ . Seulement la constante numérique multiplicative est différente, avec la susceptibilité du gaz 2D inférieure à celle du gaz 3D.

### Sujet 3 - corrigé

(tot 22 pts)

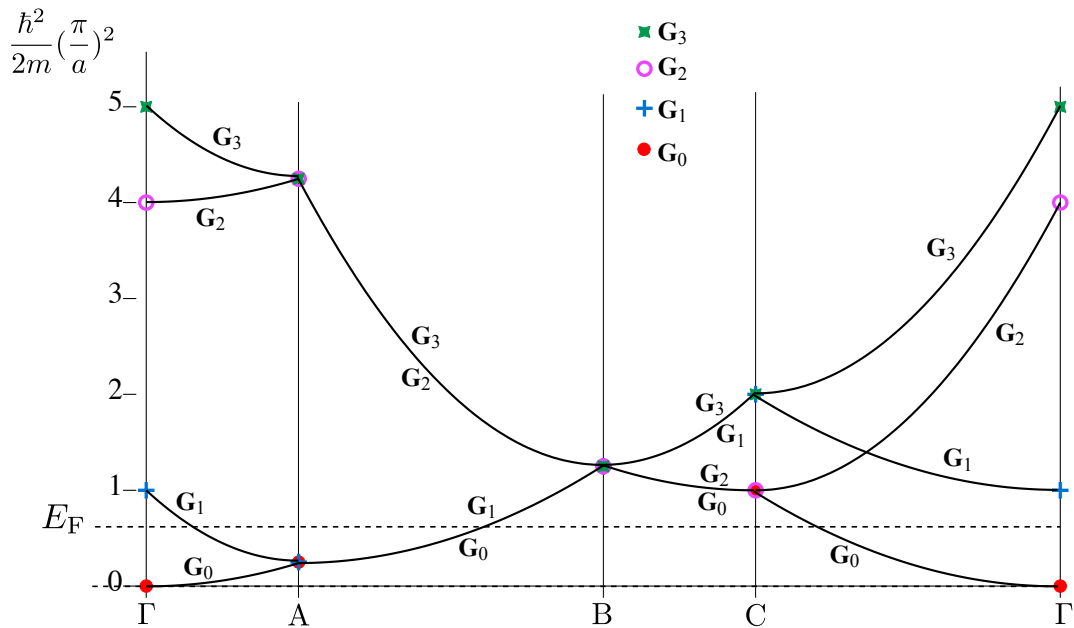
- (a) (2 pts) Les vecteurs primitifs du réseau réciproque sont donnés par  $\mathbf{a}_i \cdot \mathbf{b}_j = 2\pi\delta_{ij}$ .  
On obtient  $\mathbf{b}_1 = \frac{2\pi}{a}(1, 0)$  et  $\mathbf{b}_2 = \frac{\pi}{a}(0, 1)$ .
- (b) (2 pts) Les points A et C sont traversés par un plan de Bragg chacun, donc il y a deux états dégénérés dans chaque point.  
Le point B est traversé par trois plans de Bragg, donc il y a quatre états dégénérés.



- (c) (2 pts) Tableau des valeurs de  $E_{\mathbf{k}-\mathbf{G}_i}^0$  en unités de  $\frac{\hbar^2}{2m}(\frac{\pi}{a})^2$  :

	$\Gamma = (0, 0)$	$A = (0, \frac{\pi}{2a})$	$B = (\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{2a})$	$C = (\frac{\pi}{a}, 0)$
$\mathbf{G}_0 : k_x^2 + k_y^2$	$0 + 0 = 0$	$0 + 1/4 = 0.25$	$1 + 1/4 = 1.25$	$1 + 0 = 1$
$\mathbf{G}_1 : k_x^2 + (k_y - \frac{\pi}{a})^2$	$0 + 1 = 1$	$0 + 1/4 = 0.25$	$1 + 1/4 = 1.25$	$1 + 1 = 2$
$\mathbf{G}_2 : (k_x - \frac{2\pi}{a})^2 + k_y^2$	$4 + 0 = 4$	$4 + 1/4 = 4.25$	$1 + 1/4 = 1.25$	$1 + 0 = 1$
$\mathbf{G}_3 : (k_x - \frac{2\pi}{a})^2 + (k_y - \frac{\pi}{a})^2$	$4 + 1 = 5$	$4 + 1/4 = 4.25$	$1 + 1/4 = 1.25$	$1 + 1 = 2$

- (d) (2 pts) Figure





- (e) (2 pts) Par la forme du potentiel : le potentiel est un cosinus selon  $y$ . Les composantes non-nulles sont les  $U_{\mathbf{G}}$  avec  $\mathbf{G} = (0, \pm \frac{\pi}{a})$ .

Par identification. Le développement du potentiel en série de Fourier, avec  $\mathbf{G} = (G_x, G_y)$  :

$$U(x, y) = \sum_{\mathbf{G}} U_{\mathbf{G}} \exp(i(G_x x + G_y y)) = \sum_{\mathbf{G}} U_{\mathbf{G}} \exp(iG_x x) \exp(iG_y y)$$

$$\begin{aligned} U(y) &= -2V_0 \cos\left(\frac{\pi}{a}y\right) \\ &= -V_0(\exp(i\frac{\pi}{a}y) + \exp(-i\frac{\pi}{a}y)) = -V_0(\exp(i0x) \exp(i\frac{\pi}{a}y) + \exp(i0x) \exp(-i\frac{\pi}{a}y)) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} U_{\mathbf{G}} &= -V_0 \text{ pour } \mathbf{G} = (0, \pm \frac{\pi}{a}) \\ U_{\mathbf{G}} &= 0 \text{ pour les autres } \mathbf{G} \end{aligned}$$

- (f) (2 pts) Au point A, avec  $\mathbf{G}_0 = (0, 0)$ ,  $\mathbf{G}_1 = (0, \frac{\pi}{a})$  :

Le système d'équations linéaires pour les deux coefficients  $a_{\mathbf{k}-\mathbf{G}_0} = a_{\mathbf{k}}$  et  $a_{\mathbf{k}-\mathbf{G}_1}$  est :

$$\begin{aligned} (E_{\mathbf{k}}^0 - E)a_{\mathbf{k}} + U_{\mathbf{G}_1}a_{\mathbf{k}-\mathbf{G}_1} &= 0 \\ (E_{\mathbf{k}-\mathbf{G}_1}^0 - E)a_{\mathbf{k}-\mathbf{G}_1} + U_{-\mathbf{G}_1}a_{\mathbf{k}} &= 0 \end{aligned}$$

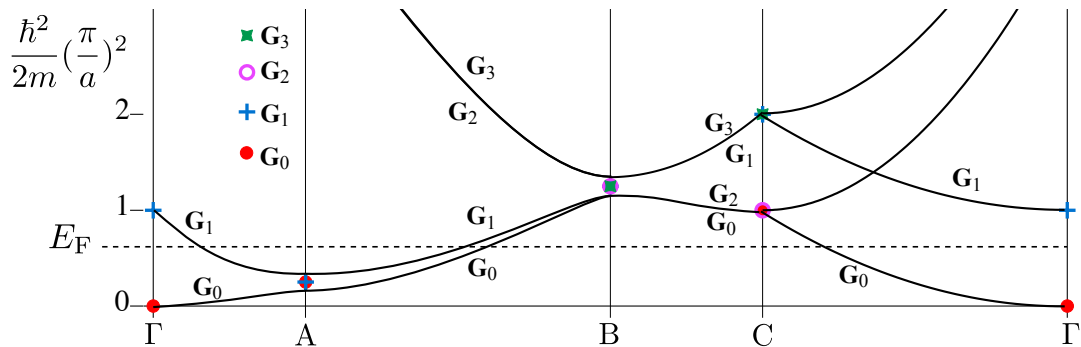
On vérifie que  $U_{\mathbf{G}_1} = U_{-\mathbf{G}_1} = -V_0$ . Le potentiel a un effet au point A, la dégénérescence sera levée.

Pour calculer le gap on impose que le déterminant du système d'équations s'annule :

$$\begin{aligned} (E_{\mathbf{k}}^0 - E)^2 - V_0^2 &= 0 \\ E^{\pm}(\mathbf{k}) &= E_{\mathbf{k}}^0 \pm V_0 = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \pm V_0 \end{aligned}$$

Le gap vaut  $2V_0$ .

- (g) (2 pts) Figure



- (h) (2 pts) La définition de  $k_F$ , adaptée au cas bidimensionnel

$$\pi k_F^2 \frac{A}{4\pi^2} = \frac{N}{2} \cdot Z$$

où  $A$  est l'aire (volume en 2D) du système,  $N$  est le nombre d'atomes (et de mailles puisque on a considéré un atome par maille) et  $Z$  est la valence.

Ici :  $A = 2a^2 \cdot N$ , et on a deux électrons par maille ( $Z = 2$ ) :

$$k_F^2 = \frac{1}{\pi} \frac{4\pi^2}{A} \frac{2N}{2} = 4\pi^2 \frac{1}{2a^2} = \frac{2\pi}{a^2} \rightarrow k_F = \frac{\sqrt{2\pi}}{a}$$

On peut aussi faire le raisonnement suivant : chaque ZB peut contenir  $2N$  électrons, donc si l'on a 2 électrons par maille le volume (aire) de la sphère de Fermi doit être égale au volume (aire) d'une ZB :

$$\pi k_F^2 = \frac{2\pi}{a} \frac{\pi}{a} \rightarrow k_F = \frac{\sqrt{2\pi}}{a} = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{\pi}{a}$$

Pour l'énergie de Fermi on trouve

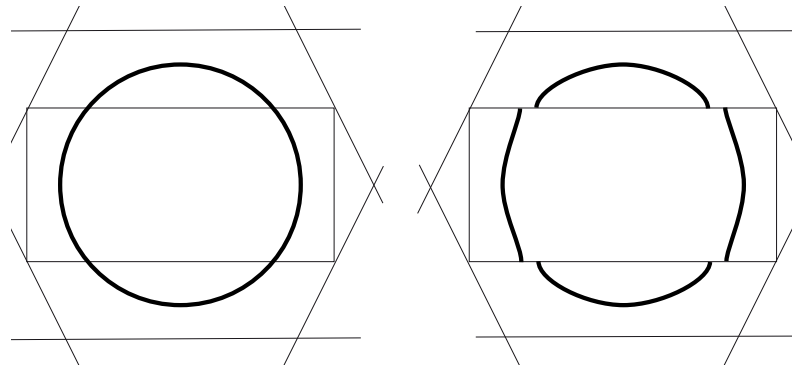
$$E_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{2\pi}{a^2} = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\pi}{a}\right)^2 \frac{2}{\pi}$$

Reporter  $E_F$  dans structure de bande des électrons libres.

- (i) (2 pts) Reporter  $E_F$  dans structure de bande en présence du potentiel (électrons quasi-libres).

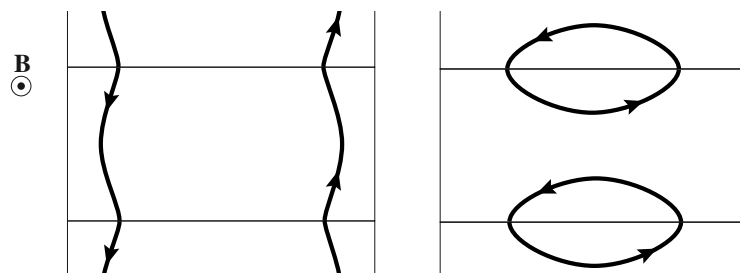
Puisque il n'y a pas d'ouverture de gap au point C, le système restera toujours conducteur, même si  $V_0$  augmente.

- (j) (2 pts) Figures surfaces de Fermi, schéma de zones étendues. Les surfaces de Fermi sont la circonférence pour le cas des électrons libres et les courbes modifiées en bord de zone pour les cas des électrons quasi-libres (surface perpendiculaire au bord de la zone). (Pas nécessaire de dessiner les deuxièmes zones.)



- (k) (2 pts) Il y a une orbite ouverte et une orbite de type électron. Le sens de parcours est indiqué sur la figure (le gradient de l'énergie pointe des états occupés vers les états vides, le sens de parcours donné par  $\hbar \dot{\mathbf{k}} = -e \mathbf{v} \times \mathbf{B} = -e \frac{1}{\hbar} \nabla_{\mathbf{k}} E \times \mathbf{B}$ ). Des dessins équivalents sont acceptés.

Dans ce système 2D, l'orbite à la surface de Fermi correspond automatiquement à une orbite extrême. Il y a une seule orbite fermée, donc dans le signal il y aura une seule périodicité (une seule fréquence).



## Sujet 4 - corrigé

(tot 14 pts)

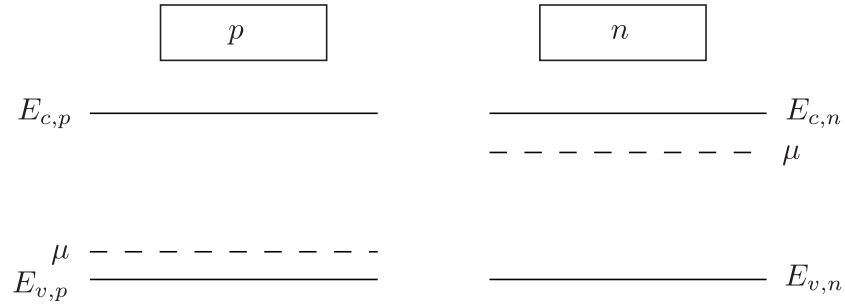
- (a) (4 pts) Dans la région  $p$ , toutes les impuretés accepteur sont ionisées et  $N_d = 0$ . Donc :

$$p_p = N_a \quad \text{et} \quad n_p = \frac{n_i^2}{N_a} \quad \text{car} \quad n_p p_p = n_i^2$$

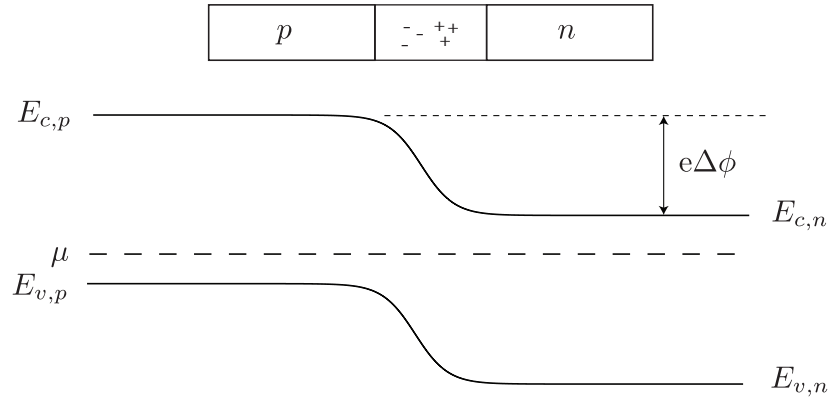
Dans la région  $n$ , toutes les impuretés donneur sont ionisées et  $N_a = 0$ . On trouve :

$$n_n = N_d \quad \text{et} \quad p_n = \frac{n_i^2}{N_d} \quad \text{car} \quad n_n p_n = n_i^2$$

- (b) (2 pts) Diagramme des bandes d'énergie pour les semiconducteurs  $p$  et  $n$  :



- (c) (3 pts) Le potentiel chimique doit s'aligner.  $e\Delta\phi = E_{c,p} - E_{c,n}$



- (d) (5 pts) A l'aide des équations données dans l'énoncé, on écrit d'abord la densité d'électrons dans la région  $p$  :

$$n_p = \frac{n_i^2}{N_a} = N(T) \exp[-\beta(E_{c,p} - \mu)]$$

On en déduit le potentiel chimique :

$$-\beta(E_{c,p} - \mu) = \ln \frac{n_i^2}{N_a N(T)} \rightarrow \mu = E_{c,p} + k_B T \ln \frac{n_i^2}{N_a N(T)}$$

De façon équivalente, dans la région  $n$ , la densité d'électrons vaut :

$$n_n = N_d = N(T) \exp[-\beta(E_{c,n} - \mu)]$$

d'où :

$$-\beta(E_{c,n} - \mu) = \ln \frac{N_d}{N(T)} \rightarrow \mu = E_{c,n} + k_B T \ln \frac{N_d}{N(T)}$$

En combinant les deux équations pour  $\mu$ , on trouve :

$$E_{c,p} - E_{c,n} = k_B T \left( \ln \frac{N_d}{N(T)} - \ln \frac{n_i^2}{N_a N(T)} \right) = k_B T \ln \frac{N_a N_d}{n_i^2} = e\Delta\phi$$