Faculté des Sciences
Aix*Marseille Université

MASTER 1ère année PHYSIQUE

Examen : Physique de la Matière Condensée

19 décembre 2012

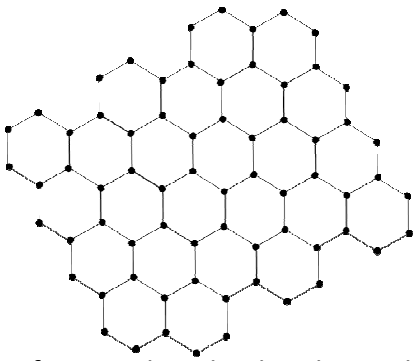
Durée : 4 heures
Calculatrices autorisées
Veuillez rédiger les exercices 1+2 et 3+4 sur des copies séparées

Données numériques :

Constante réduite de Planck, $\hbar = 1{,}05459 \times 10^{-34}$ J.s
Constante de Boltzmann, $k_B = 1{,}38 \times 10^{-23}$ J.K^{-1}
Constante des gaz parfaits, $R = N\,k_B = 8{,}314$ J. mol^{-1}
Charge d'un électron, $e = 1{,}6 \times 10^{-19}$ C
Masse d'un électron, $m = 9{,}1 \times 10^{-31}$ kg
Nombre d'Avogadro, $N = 6{,}022 \times 10^{23}$ mol^{-1}

Exercice 1 : Structure électronique du graphène dans l'approximation des électrons presque libres

Le graphène est le feuillet constitutif du graphite ou des nanotubes de carbone. Une feuille de graphène consiste en un arrangement plan de type nid d'abeille d'atomes C. Le réseau 2D associé est hexagonal (a = b = 2.46 Å, $\gamma = 120°$), la maille atomique comportant deux atomes de coordonnées (0,0) et (1/3,2/3). On considère par la suite un plan de graphène de N_1 mailles suivant le vecteur de réseau a et N_2 mailles suivant b. On rappelle la structure électronique de l'élément C: [He] $2s^2$ $2p^2$. Dans le graphène, chaque atome a trois électrons de valence engagés dans des liaisons avec les atomes voisins. On s'intéresse aux électrons de valence restant, que l'on suppose libres de se déplacer dans le plan de graphène.

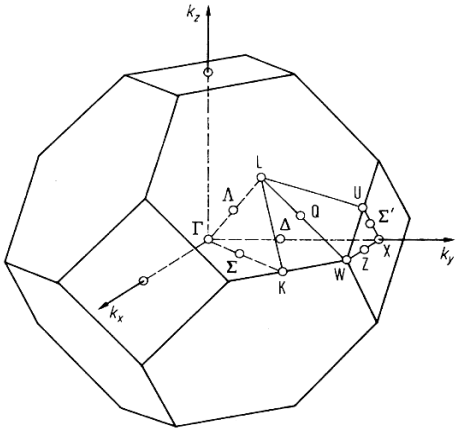


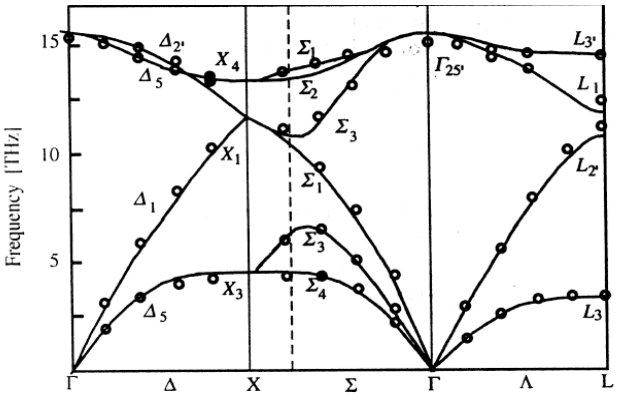
1a. Donner l'expression de la surface totale S du plan de graphène en fonction du paramètre de maille a. Donner aussi le nombre total d'électrons libres N du plan de graphène.
1b. Rappeler la définition du réseau réciproque (RR) (a*, b*, c*) associé à un réseau hexagonal (a, b, c). Faire un schéma représentant l'orientation relative des deux réseaux. Préciser la relation entre a et a* et calculer ce dernier.
1c. Rappeler la forme générale des fonctions d'onde et énergies possibles pour l'électron dans le modèle des électrons libres à deux dimensions (2D).

1d. Dans les conditions aux limites de Born - von Karman, comment s'écrit le vecteur d'onde k en fonction des vecteurs du RR (a*, b*)? Quelle est la densité d'états dans l'espace des k à 2D ?
1e. Retrouver l'expression de la densité d'états à 2D dans l'espace des énergies ε, soit g(ε), dans le modèle des électrons libres (chaque état étant caractérisé par un nombre quantique de spin).
1f. Ecrire la relation qui lie le nombre total d'électrons libres N du graphène au vecteur d'onde de Fermi k_F. Calculer les valeurs de k_F et de l'énergie de Fermi ε_F (on donnera celle-ci en eV).
1g. Représenter sur un schéma la 1ère zone de Brillouin par rapport aux noeuds du réseau réciproque. Comparer k_F à la distance qui sépare, dans la 1ère zone de Brillouin, le point origine Γ en centre de zone du point M le plus proche en bord de zone.
1h. Pensez-vous que le modèle des électrons libres soit adapté à la description du graphène? Quelles modifications attend-t-on de la courbe de dispersion ε(k) au point M et quel type de comportement électronique peut-on attendre ?

Exercice 2 : Phonons dans le diamant

La structure du diamant peut être décrite par un réseau cF avec un motif comportant deux atomes C de coordonnées (0,0,0) et (1/4,1/4,1/4). La figure ci-dessous représente les relations de dispersion des phonons le long de certaines directions particulières de la 1ere zone de Brillouin (représentée ci-dessous).

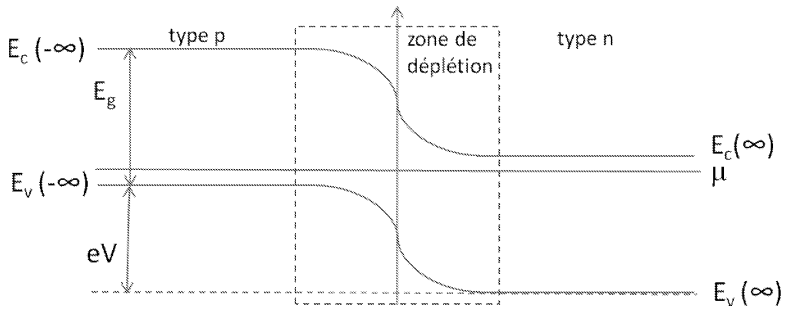




2a. Rappelez brièvement à quoi correspondent les phonons. A quoi est due ici la Présence de modes optiques. Rappelez les expressions théoriques des relations de dispersion correspondant à ces différents modes.
2b. Sur quelle gamme d'énergie s'étendent (i) les modes acoustiques, (ii) les modes optiques ?
2c. Combien de branches acoustiques observe-t-on, à quoi correspondent-t-elles ?
2d. Estimez (grossièrement) la valeur de la température de Debye à partir des courbes de dispersion, à partir de quel type de mesure peut-on déterminer cette valeur précisément ?
2e. Comment la densité de modes varie-t-elle avec ω dans le modèle de Debye ? Tracez schématiquement l'allure de cette densité de modes pour le diamant (en respectant l'échelle).

Exercice 3 – Potentiel de barrière d'une jonction p-n

On considère une jonction formée à partir d'un semi-conducteur dopé avec N_a impuretés de type accepteurs placé à gauche d'un semi-conducteur dopé avec N_d impuretés de type donneurs. On supposera la température T suffisamment élevée pour que toutes les impuretés soient ionisées.



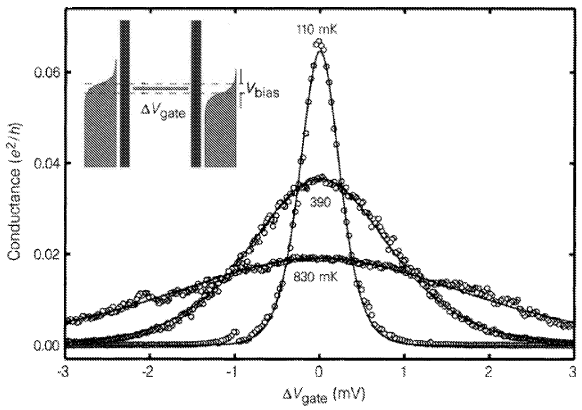
1. A gauche de la zone de déplétion (voir schéma ci-dessus), le semi-conducteur est de type p et peut être considéré comme homogène. Donner l'expression du potentiel chimique μ en fonction de $E_v(-\infty)$, k_B, T, P_v et N_a. On rappelle que la densité de trous est donnée par $p_v(-\infty) = P_v \exp(-(\mu - E_v(-\infty))/(k_B T))$, où $E_v(-\infty)$ est l'énergie du haut de la bande de valence à gauche de la zone de déplétion.
2. A droite de la zone de déplétion (voir schéma ci-dessus), le semi-conducteur est de type n et peut être considéré comme homogène. Donner l'expression du potentiel chimique μ en fonction de $E_c(\infty)$, k_B, T, N_c et N_d. On rappelle que la densité d'électrons est donnée par $n_c(\infty) = N_c \exp(-(E_c(\infty) - \mu)/(k_B T))$, où $E_c(\infty)$ est l'énergie du bas de la bande de conduction à droite de la zone de déplétion.
3. Lorsqu'aucune tension n'est appliquée, le potentiel chimique μ est le même en tout point de la jonction. En revanche, on observe une dépendance des énergies E_c et E_v en fonction de la position, comme indiqué sur le schéma. En égalisant les expressions de μ obtenues aux questions 1 et 2, en déduire l'expression de la différence d'énergie $E_c(\infty) - E_v(-\infty)$.
4. Le potentiel de barrière V est défini par $eV = E_g - E_c(\infty) + E_v(-\infty)$, où E_g est le gap du semi-conducteur. Trouver l'expression de V en fonction de e, k_B, T, N_a, N_d et $n_i^2 = n_c(\infty)p_v(\infty) = n_c(-\infty)p_v(-\infty)$.
5. Calculer la valeur numérique de V à la température $T = 300$ K pour $N_d = N_a = 10^{16}$ atomes/cm^3 et $n_i = 7,55.10^9$ atomes/cm^3.

Exercice 4 – Conductance d'un nanotube de carbone

Dans un article paru en 1997 dans la revue *Nature*, la conductance d'un nanotube de carbone a été mesurée en fonction de la tension de grille appliquée ΔV_{gate} (voir figure ci-dessous). Une bonne description des courbes obtenues est faite à l'aide de l'expression suivante :

$$G = \frac{\lambda G_q}{k_B T \mathrm{ch}^2\left(\frac{e\Delta V_{gate}}{2k_B T}\right)}$$

où $G_q = e^2/h$ est le quantum de conductance et λ un coefficient constant qui a la dimension d'une énergie.



L'objectif du problème est d'établir cette relation à partir de la formule de Landauer pour le courant électrique.

1. Donner la formule de Landauer du courant électrique I à travers un système nanoscopique à un seul canal, caractérisé par le coefficient de transmission $\mathcal{T}(\varepsilon)$, connecté à deux réservoirs repérés par les indices L (gauche) et R (droite) de potentiels chimiques $\mu_L = \varepsilon_F + eV_{bias}/2$ et $\mu_R = \varepsilon_F - eV_{bias}/2$, où V_{bias} est la tension appliquée entre les réservoirs L et R (ne pas confondre avec ΔV_{gate}) et ε_F l'énergie de Fermi. Les deux réservoirs sont à la même température T.
2. Calculer les dérivées $df_L(\varepsilon)/dV_{bias}$ et $df_R(\varepsilon)/dV_{bias}$, où f_L et f_R sont les fonctions de distributions de Fermi-Dirac associées au réservoirs L et R.
3. En déduire l'expression de la dérivée du courant dI/dV_{bias}.
4. Calculer dI/dV_{bias} en prenant comme coefficient de transmission

   $$\mathcal{T}(\varepsilon) = \pi\Gamma\delta(\varepsilon - e\Delta V_{gate})$$

   où Γ est un coefficient constant ayant la dimension d'une énergie. Le choix de ce coefficient de transmission est justifié par le fait que le nanotube de carbone utilisé dans cette expérience est de petite longueur et n'apporte qu'un seul niveau d'énergie dont la valeur est contrôlée par la tension de grille.
5. Dans la limite $\Delta V_{gate} \gg V_{bias}$, identifier l'expression de dI/dV_{bias} obtenue à la question 4 avec l'expression de G donnée ci-dessus afin de trouver le coefficient λ (vous prendrez ε_F comme origine des énergies).