

Table des matières

Avant-propos

Introduction 1

I Structure électronique 9

1 Symétrie et fonctions d'onde 11

1.1 Les atomes des semi-conducteurs 12

1.2 Fonctions de cristal périodique 13

1.2.1 Fonctions de Bloch 13

1.2.2 Largeur de la zone de Brillouin 14

1.2.3 Normalisation des fonctions de Bloch 14

1.2.4 Développement de $U_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ en fonction des $U_{n\mathbf{0}}(\mathbf{r})$. . . 16

1.2.5 Fonctions de Luttinger-Kohn 17

1.3 Bande interdite et masse effective 18

1.4 Une description simpliste ou pourquoi le silicium est un semi-conducteur 22

1.5 Structure cristalline et zone de Brillouin 26

1.6 Combinaison linéaire d'orbitales atomiques 31

1.6.1 Idée directrice 31

1.6.2 Les liaisons fortes 31

1.6.3 Équation séculaire 33

1.6.4 Structure de bande 37

1.6.5 Caractère s et p des fonctions d'onde 38

1.7 Symétrie des fonctions d'onde et éléments de matrice 43

1.7.1 Fonctions d'onde orbitales 43

1.7.2 Fonctions d'onde mélangées de spin 51

1.8 Fonctions d'onde du centre de zone 52

1.8.1 Les fonctions "sphériques" 52

1.8.2 Les fonctions "cubiques" 53

1.8.3 Utilité des notations de Luttinger-Kohn et Kane 55

1.8.4	Fonction d'onde de trou	56
1.9	Lexique de théorie des groupes	57
1.9.1	Groupe simple (sans spin)	57
1.9.2	Groupe double (avec spin)	58
1.10	Semi-conducteur	60
1.10.1	Définition	60
1.10.2	Semi-conducteur à bande interdite "directe"	61
1.10.3	Semi-conducteur à bande interdite "indirecte"	61
1.10.4	Semi-conducteur à bande interdite nulle	62
1.10.5	Présentation générale des semi-conducteurs	64
1.11	Semi-métal	71
1.11.1	Semi-métal strictement compensé	71
1.11.2	Semi-métal usuel	72
1.A	Appendice : Fonctions et théorème de Bloch	73
1.A.1	Propriétés	73
1.A.2	Zone de Brillouin	75
1.A.3	Doublement de maille	76
1.B	Appendice : Renversement du temps et "Parité" de $E_n(\mathbf{k})$	78
1.B.1	Conjugaison de Kramers	78
1.B.2	Dégénérescence de spin et dégénérescence de Kramers	79
1.B.3	Pente de $E_n(\mathbf{k})$	81
1.C	Appendice : Couplage spin-orbite dans les solides	81
1.C.1	Idée générale	81
1.C.2	Description précise	82
2	Principe de la théorie $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$	85
2.1	Théorie des perturbations	86
2.1.1	Hamiltonien de départ	87
2.1.2	Cas d'un niveau non dégénéré	87
2.1.3	Cas d'un niveau dégénéré : renormalisation de Löwdin	88
2.1.4	Cas de niveaux quasi-dégénérés : renormalisation de Luttinger-Kohn	89
2.2	L'hamiltonien $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$	92
2.2.1	Point de départ	92
2.2.2	Principe	92
2.2.3	Premier cas : un seul état est important	94
2.2.4	Deuxième cas : deux états sont importants	95
2.A	Appendice : Théorie des perturbations de Luttinger-Kohn	106
2.A.1	Rappel de la théorie usuelle des perturbations	106
2.A.2	Objet de l'étude	107
2.A.3	Démonstration	107

3	Structure de bande : I	125
3.1	Schémas de principe	127
3.2	Hamiltonien sans couplage spin-orbite	128
3.2.1	Ce qui est supposé connu	128
3.2.2	Hamiltonien à l'intérieur de $\{\Gamma_1; \Gamma_5\}$	132
3.2.3	Hamiltonien à l'intérieur de $\{\Gamma_{5C}; \Gamma_5\}$	136
3.2.4	Hamiltonien à l'intérieur de $\{\Gamma_{5C}; \Gamma_1; \Gamma_5\}$	137
3.2.5	Hamiltonien projeté sur Γ_5 : l'hamiltonien de Dresselhaus-Kip-Kittel	143
3.3	Hamiltonien avec couplage spin-orbite	148
3.3.1	Ce qui est supposé connu	148
3.3.2	L'hamiltonien à l'intérieur de $\{\Gamma_6; \Gamma_8; \Gamma_7\}$ ou hamiltonien de Kane	151
3.3.3	Hamiltonien à l'intérieur de $\{\Gamma_{8C}; \Gamma_{7C}; \Gamma_6; \Gamma_8; \Gamma_7\}$	154
3.3.4	L'hamiltonien projeté sur $\{\Gamma_6; \Gamma_8; \Gamma_7\}$: l'hamiltonien H_8 de Pidgeon-Brown	162
3.3.5	L'hamiltonien projeté sur Γ_8 : l'hamiltonien H_4 de Luttinger-Kohn	174
3.3.6	L'hamiltonien projeté sur $\{\Gamma_8; \Gamma_7\}$: l'hamiltonien 6×6 de Luttinger-Kohn ou hamiltonien H_6	178
3.A	Appendice : Les coefficients F, G, H_1, H_2 de Dresselhaus-Kip-Kittel	183
3.B	Appendice : Relations entre les paramètres de Luttinger et de Dresselhaus-Kip-Kittel	188
3.C	Appendice : Relations entre les paramètres de Luttinger et les paramètres de Pidgeon-Brown	190
3.D	Appendice : Couplage spin-orbite dans les semi-conducteurs	190
3.D.1	En théorie des groupes	190
3.D.2	Calcul des éléments de matrice	191
3.E	Appendice : L'hamiltonien de Kane à grand $ \mathbf{k} $	193
3.F	Appendice : Passage d'une matrice sans spin à une matrice avec spin	193
4	Structure de bande : II	197
4.1	Bande de valence et effet Zeeman (l'article de Luttinger)	198
4.1.1	Hamiltonien relatif au niveau Γ_5 dit " L " = 1	198
4.1.2	Hamiltonien relatif au niveau Γ_8 dit " J " = 3/2	199
4.2	Décomposition de l'hamiltonien de Luttinger	203
4.2.1	Idée générale	203
4.2.2	Matrices utiles	206
4.2.3	Liens entre les paramètres de Luttinger et les paramètres de Dresselhaus-Kip-Kittel : l'approximation sphérique	207
4.3	Fonctions d'onde de l'hamiltonien de Luttinger-Kohn	207
4.4	Influence de l'absence de centre d'inversion	211

4.4.1	L'hamiltonien de Kane	211
4.4.2	Perturbations venant des autres bandes	214
4.5	Les semi-conducteurs à bande interdite nulle	220
4.6	Hamiltonien de contrainte	222
4.6.1	Nomenclature	222
4.6.2	Généralités	222
4.6.3	Notations	224
4.6.4	L'hamiltonien de Bir-Pikus	227
4.6.5	L'hamiltonien de Bir-Pikus-Pidgeon-Brown	229
4.6.6	Cas des ellipsoïdes	232
4.6.7	Influence d'une contrainte uniaxiale sur les dispersions en énergie en Γ_8	232
4.6.8	Cas où $\mathbf{k} = (0, 0, k_z)$	234
4.6.9	Influence d'une contrainte biaxiale sur les dispersions en énergie en Γ_8	235
4.7	Description en masse effective d'un donneur	237
4.7.1	Bande interdite directe	237
4.7.2	Bande interdite indirecte	243
4.8	Description en masse effective d'un accepteur	244
4.9	Hamiltonien effectif	245
4.10	La wurtzite (GaN, CdS, CdSe)	251
4.10.1	Description quasi-cubique	251
4.10.2	La wurtzite (Groupe C_{6v})	254
4.11	Onde évanescence	259
4.11.1	"Hamiltonien" $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ non hermitique	259
4.11.2	Une description simple	260
4.11.3	Utilisation de la matrice Pidgeon-Brown	261
4.A	Appendice : Termes impairs en k	263
4.A.1	Notations liées au couplage spin-orbite	263
4.A.2	Termes linéaires en k dans la bande de valence Γ_8	264
4.A.3	Absence de termes linéaires en k dans la bande de conduction Γ_6 de la blende de zinc	265
4.A.4	Termes en k^3	266
4.B	Appendice : La matrice 14×14 ou hamiltonien H_{14}	269
4.C	Appendice : Remarque sur la fonction enveloppe	276
4.D	Appendice : Théorie $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ au point L du germanium	276
4.E	Appendice : Transformation de Broido-Sham	279
5	Landé et Landau	283
5.1	Effet Zeeman et facteur de Landé	284
5.1.1	Hamiltonien de conduction en présence d'un champ magnétique	284
5.1.2	Facteur de Landé des électrons de conduction	286
5.1.3	Effet Zeeman de la bande de valence : un aperçu	287

5.2	Niveaux de Landau	288
5.2.1	Niveaux de Landau d'une particule de charge $\pm e$ et de masse m	289
5.2.2	Bande de conduction	290
5.2.3	Bande de valence	291
6	Hétérostructures	299
6.1	La problématique Harrison-BenDaniel-Duke	301
6.1.1	L'article de Harrison	301
6.1.2	L'article BenDaniel-Duke	302
6.2	Puits carré	303
6.2.1	Définition	303
6.2.2	Puits fini à masse constante	303
6.3	L'approximation clef	305
6.4	Bande de conduction	305
6.4.1	Cas du puits infini	305
6.4.2	Cas du puits fini	307
6.4.3	Cas où la masse est anisotrope	309
6.5	Bande de valence	310
6.5.1	Cas du puits infini	310
6.5.2	Cas du puits fini	316
6.6	Densité d'états	318
6.A	Appendice : L'hamiltonien de Burt-Foreman	320
6.A.1	Rappel	320
6.A.2	Point de départ	321
6.A.3	Hamiltonien sans couplage spin-orbite	323
6.A.4	Hamiltonien tenant compte du couplage spin-orbite	327
6.B	Appendice : Bande de valence dans un puits infini	332
6.B.1	Calculs préliminaires	332
6.B.2	Calcul des masses planaires	334
6.C	Appendice : Au delà de la masse effective et du puits infini	335
6.C.1	Un puits fini peut-il être considéré comme infini?	335
6.C.2	Variation de l'énergie en fonction de la largeur du puits	336
6.C.3	Remarque sur la fonction d'onde dans un puits infini	336
II	Optique et excitons	337
7	Quelques propriétés optiques des solides	339
7.1	Système d'unités	340
7.2	Origine de l'indice optique	340
7.2.1	Cas d'une fréquence de couplage	342
7.2.2	Cas de plusieurs fréquences de couplage	349
7.2.3	Influence du champ local	353

7.2.4	Courbe de dispersion des phonons	356
7.2.5	Loi de Snell-Descartes	359
7.3	Constante diélectrique et indice complexes	359
7.4	Absorption, dispersion et réflectivité	363
7.A	Appendice : Relations de Kramers-Kronig	370
8	Molécule d'hydrogène & énergie d'échange électron-électron	373
8.1	L'atome d'hydrogène	374
8.2	Autres atomes	378
8.2.1	Les fonctions d'onde	378
8.2.2	Transitions optiques	381
8.3	La molécule d'hydrogène ionisée H_2^+	387
8.3.1	Hamiltonien	387
8.3.2	Approximation des combinaisons linéaires d'orbitales atomiques ou approximation CLOA	388
8.3.3	Approximation des liaisons fortes	389
8.3.4	L'énergie	389
8.3.5	Fonction d'onde et probabilité de présence	392
8.4	La molécule d'hydrogène H_2	394
8.4.1	L'approximation des combinaisons linéaires d'orbitales atomiques	394
8.4.2	Orbitales atomiques et moléculaires dans l'approximation de Hartree	396
8.4.3	Notations	397
8.4.4	Énergie directe et énergie d'échange	398
8.4.5	Approximation de Heitler-London : orbitales atomiques avec échange	399
8.4.6	Approximation de Hund-Milliken : orbitales moléculaires avec échange	402
8.4.7	Critiques et améliorations	402
8.5	Extension aux autres molécules	403
8.A	Appendice : Hamiltonien d'Heisenberg	405
9	Exciton	407
9.1	Correspondance trou-électron	408
9.1.1	Définition	408
9.1.2	Énergie du trou	409
9.1.3	Vecteur d'onde du trou	410
9.2	L'exciton dans un modèle simple	412
9.2.1	États liés	414
9.2.2	États non liés	419
9.3	L'exciton dans les semi-conducteurs réels	419
9.4	Exciton à deux dimensions	421
9.A	Appendice : Exciton piégé	422

10 Absorption	425
10.1 Généralités	425
10.1.1 Optique	425
10.1.2 Hamiltonien	426
10.1.3 Probabilité de transition	427
10.1.4 Définition du coefficient d'absorption	428
10.2 Semi-conducteur massif : absorption bande à bande	429
10.2.1 Élément de matrice	429
10.2.2 Coefficient d'absorption	430
10.2.3 Transition directe interdite	438
10.2.4 Transition indirecte	439
10.2.5 Transition pseudo-directe	442
10.3 Semi-conducteur massif : absorption des excitons	442
10.3.1 Description des excitons	442
10.3.2 Élément de matrice	443
10.3.3 Cas des excitons libres	445
10.3.4 Cas des excitons piégés	448
10.4 Semi-conducteur à deux dimensions (plan quantique)	449
10.4.1 Description du plan quantique	449
10.4.2 Absorption	450
10.5 Forces d'oscillateur	451
11 Énergie d'échange électron-trou et polariton excitonique	455
11.1 L'origine de l'interaction d'échange électron-trou	457
11.2 Énergie d'échange dans les excitons de Wannier	461
11.2.1 Énergie d'échange d'exciton et énergie d'échange atomique	461
11.2.2 Cas où il n'y a pas de couplage spin-orbite	463
11.2.3 Cas où le couplage spin-orbite joue un rôle	463
11.3 Complément sur les fonctions d'onde des excitons libres	467
11.4 La séparation longitudinal-transverse des excitons	468
11.4.1 Sommes dipolaires	468
11.4.2 Aperçu sur la théorie d'Hopfield	471
11.5 Forces d'oscillateur	472
11.5.1 Exemples	472
11.5.2 Semi-conducteur sous contrainte	473
11.5.3 Polariton avec une seule masse de trou	476
11.5.4 Polaritons lourds et légers	481
III Transport	485
12 La "Loi de Newton" des solides cristallins	487
12.1 Ondes planes et fonctions de Bloch	487
12.2 Moment cristallin	488

12.3	Vitesse	488
12.4	Accélération : “loi de Newton”	489
12.5	Bande pleine et trou	491
12.6	Masses effectives	493
12.6.1	Masse effective de densité d’états	493
12.6.2	Masse effective de mobilité	496
13	Influence d’un champ magnétique	503
13.1	Effet Hall	504
13.1.1	Principe de l’effet Hall	504
13.1.2	Effet Hall à deux types de porteurs	507
13.1.3	Rôle du temps de relaxation de la quantité de mouvement et magnéto-résistance	509
13.1.4	Tenseur de conductivité	512
13.2	Résonance cyclotron	513
13.2.1	Principe	513
13.2.2	Cas d’une masse anisotrope	513
13.2.3	Rôle du temps de collision	519
13.A	Appendice : Masse cyclotron de la bande de valence	522
14	Équation de Boltzmann	525
14.1	Préliminaire : section efficace, temps de relaxation, libre parcours moyen	525
14.2	Équation de Boltzmann monobande	528
14.2.1	Présentation générale	528
14.2.2	Calcul du temps de relaxation dans le cas élastique	536
14.2.3	Exemple : ensemble de potentiels décorrélés d’impuretés ionisées	537
14.3	Équation de Boltzmann multibande (Théorie de Siggia-Kwok)	540
14.3.1	Exemple : cas de 2 bandes	544
14.3.2	Mobilité des électrons de conduction	544
14.3.3	Mobilité des trous de la bande de valence Γ_8	545
14.A	Appendice : Résultats utiles	547
14.A.1	Quelques résultats mathématiques	547
14.A.2	Quelques valeurs numériques	548
15	Interaction électron-phonon	549
15.1	Préliminaires	549
15.1.1	L’oscillateur harmonique	549
15.1.2	Sommes	550
15.2	Hamiltonien des phonons acoustiques	551
15.3	Potentiel de déformation	557
15.4	Temps de relaxation	559
15.4.1	Semi-conducteur massif (à trois dimensions)	559

15.4.2	Semi-conducteur à deux dimensions	560
15.5	Semi-conducteur polaire	562
16	Transport dans les semi-conducteurs à deux dimensions	565
16.1	Préliminaire	565
16.1.1	Notations	565
16.1.2	Transfourées à deux dimensions	565
16.1.3	Une autre écriture de la fonction de Fermi-Dirac	566
16.1.4	Densité d'électrons en fonction de la température	567
16.1.5	Coefficients de transmission	568
16.2	Écrantage et constante diélectrique	571
16.2.1	Semi-conducteur à trois dimensions	571
16.2.2	Semi-conducteur à deux dimensions	572
16.2.3	Constante diélectrique à température finie	575
16.3	Transport "horizontal" : diffusion par des impuretés ionisées	576
16.4	Transport "vertical" : courant tunnel	578
16.4.1	Courant à travers une barrière	578
16.4.2	Courant "à trois dimensions"	582
16.4.3	Transport à travers une double barrière	583
IV	Annexes	587
A	Notations et relations utiles	589
A.1	Notations générales	589
A.2	Atome d'hydrogène	591
A.3	Hamiltoniens dans les semi-conducteurs	591
A.4	Représentations irréductibles	592
A.5	Fonctions de base	592
A.6	Éléments de matrice	593
A.7	Hamiltonien sans spin	593
A.8	Hamiltonien avec spin	594
A.9	Relations entre les paramètres de Luttinger et les paramètres de Pidgeon-Brown	595
A.10	Liens entre les paramètres de Luttinger et les paramètres de Dresselhaus-Kip-Kittel	596
A.11	Relations liées au spin	598
A.12	L'interaction d'échange électron-trou	599
A.13	Conjuguée de Kramers	600
A.14	Optique	601

B	Seconde quantification	603
B.1	Notations	604
B.2	Cas des fermions	606
B.2.1	Définitions	606
B.2.2	Opérateur à une particule	607
B.2.3	Opérateurs de destruction et de création	608
B.2.4	Opérateurs à deux particules	611
B.2.5	Hamiltonien en seconde quantification	612
B.2.6	Opérateurs de champ	612
B.3	Cas des bosons	614
B.3.1	Définitions	614
B.3.2	Opérateurs de destruction et de création	615
B.3.3	Opérateurs de champ	616
B.4	En bref	616
B.5	Exemples	617
B.5.1	Opérateur nombre de particules	617
B.5.2	Opérateur densité de particules	617
B.5.3	Potentiel de Coulomb	617
B.5.4	Opérateur courant	618
B.5.5	Évolution du nombre d’occupation et du moment total	620
C	Transformée de Fourier en physique du solide	625
C.1	Nomenclature	625
C.2	Cas général	625
C.3	En physique du solide	626
C.4	Cas particuliers	628
C.5	Transformée temporelle	628
D	Constante diélectrique de Thomas-Fermi et Debye-Hückel	629
E	Relaxation de spin	633
E.1	Généralités sur la relaxation de spin	634
E.1.1	Les deux types de collision	634
E.1.2	Les différents types d’interaction	635
E.2	Processus de relaxation	636
E.2.1	Relaxation due à la collision	636
E.2.2	Relaxation entre les collisions	639
E.2.3	Relaxation dans la bande de valence	640
F	Résistance tunnel	641
F.1	Définition de la résistance tunnel	641
F.2	Temps tunnel	643
F.2.1	Introduction	643
F.2.2	Fonction d’onde d’un puits quantique	644

F.2.3	Calcul de δE	646
F.2.4	Temps tunnel	647
F.3	Résistance tunnel	648
F.3.1	Densité d'états à une dimension	648
F.3.2	Lien entre le temps tunnel et la différence de potentiel	648
F.3.3	Transmission quantique	650
F.3.4	Explicitation du temps tunnel	650
F.3.5	Calcul de la résistance tunnel	651
G	Fonction d'autocorrélation et approximation de Born	653
G.1	Défauts de surface	654
G.2	Fonction d'autocorrélation et approximation de Born	654
G.2.1	Fonction d'autocorrélation	654
G.2.2	Relation avec l'approximation de Born	655
G.3	Surface rugueuse	656
G.3.1	Description de la surface	656
G.3.2	Temps de relaxation de la quantité de mouvement	657
H	Courant de probabilité et masse effective	661
H.1	Fonction de conduction sans spin	662
H.1.1	Masse effective et fonction d'onde	662
H.1.2	Courant de probabilité	662
H.2	Fonction de conduction avec spin	663
H.2.1	Masse effective et fonction d'onde	663
H.2.2	Courant de probabilité	664
H.3	Conclusion	665
I	La matrice 30×30	667
I.1	Fonctions de base	667
I.2	Éléments de matrice et notations	668
I.3	La matrice 30×30	668
J	Quelques coefficients de Clebsch-Gordan	681
J.1	Table de compatibilité	682
J.2	Table de multiplication	684
J.3	Mode d'emploi	685
J.4	Tables de coefficients de Clebsch-Gordan	686
K	Constantes	693
K.1	Origine	693
K.2	Constantes de base	693
K.3	Constantes utiles dans les semi-conducteurs	694
K.4	Equations aux dimensions	695
	Bibliographie	697

Index

709