

Table des matières

I. Les grandes théories du XX^e siècle

1. Introduction.....	1
2. La mécanique classique et les interactions naturelles.....	1
2.1. Les principes de la mécanique classique.....	1
2.2. Les forces naturelles.....	2
3. L'électromagnétisme.....	5
3.1. Le champ magnétique.....	5
3.2. L'induction magnétique et les équations de Maxwell.....	8
4. Le formalisme de la mécanique analytique.....	10
4.1. Introduction.....	10
4.2. Les coordonnées généralisées.....	10
4.3. Le principe de moindre action.....	11
4.4. Détermination des lagrangiens.....	12
<i>Cas des forces conservatives dans un repère galiléen. Repères non galiléens. La force de Lorentz. Forces dissipatives, fonction de Rayleigh</i>	
4.5. Les lois de conservation.....	17
<i>L'énergie, L'impulsion . Le moment cinétique</i>	
4.6. Le formalisme d'Hamilton.....	19
<i>Les équations d'évolution. Particule chargée dans un champ électromagnétique</i>	
5. La mécanique relativiste.....	21
5.1. L'expérience de Michelson et Morley.....	21
5.2. La transformation de Lorentz.....	23
<i>La contraction de l'espace. La dilatation du temps. Les lois de composition des vitesses. Transformation des accélérations</i>	
5.3. La transformation du champ électromagnétique.....	26
<i>Transformation des forces. La force de Lorentz</i>	
5.4. La dynamique relativiste.....	29
<i>L'équation fondamentale de la dynamique relativiste. Energie cinétique, équivalence masse énergie</i>	
6. La mécanique quantique.....	31
6.1. Introduction.....	31
<i>Le rayonnement du corps noir. L'atome de Bohr. L'effet photoélectrique. L'effet Compton. Nature ondulatoire des électrons</i>	
6.2. Les points faibles de la mécanique classique.....	35
6.3. La mécanique ondulatoire.....	36

<i>Inégalités d'Heisenberg et fonctions d'onde. Opérateurs et équation de Schrödinger.</i>	
6.4. Le formalisme de la mécanique quantique.....	40
6.5. La représentation d'Heisenberg.....	42
6.6. La représentation de Schrödinger.....	44
6.7. Les projecteurs.....	45
6.8. L'équation de Schrödinger d'une particule.....	47
6.9. Cas particulier des états stationnaires.....	48
6.10. Observables compatibles et moment cinétique orbital.....	50
6.11. L'atome d'hydrogène.....	52
7. Perturbations.....	54
7.1. Les méthodes approchées de résolution de l'équation de Schrödinger indépendante du temps.....	54
7.2. Les probabilités de transition.....	56
8. La mécanique quantique relativiste.....	61
8.1. Spineurs et équation de Dirac.....	61
8.2. La limite classique de l'équation de Dirac.....	64
8.3. Le spin des particules	
9. Systèmes à plusieurs particules.....	67
9.1. Fermions et bosons.....	67
9.2. Les bases de la seconde quantification.....	69
<i>Les bosons. Les fermions</i>	
9.3. Les opérateurs champs.....	73
10. Thermodynamique et statistiques.....	74
10.1. Les bases de la statistique.....	74
10.2. Statistiques quantiques.....	78
<i>Statistique d'occupation des Fermions. Statistique des Bosons</i>	

II. Les fondements du calcul ab initio

1. L'approximation adiabatique (Born-Oppenheimer-1927).....	81
2. Le mouvement des noyaux.....	84
3. Calcul de l'énergie électronique.....	86
3.1. L'approximation d'Hartree.....	87
3.2. Le gaz d'électrons libres dans l'approximation d'Hartree	
<i>Conditions cycliques et fonctions d'onde. Notion de densité d'états. Quantification des états k. Densité d'états $n(k)$ dans l'espace réciproque. Transformation de sommes en intégrales. Densité d'états $n(E)$ dans l'espace de l'énergie. Densité d'états d'un gaz d'électrons libres de dimension quelconque. L'énergie totale du gaz d'électrons libres.</i>	
3.3. L'approximation de Hartree-Fock.....	97
<i>Fonction d'onde et énergie d'échange. Les équations d'Hartree-Fock. L'énergie d'échange du gaz d'électrons libres. Le point faible de l'approximation de Hartree-Fock</i>	

3.4. L'énergie d'un système de fermions en interaction calculée à l'aide du formalisme de la seconde quantification.....	104
4. L'énergie en tant que fonctionnelle de la densité.....	107
5. La méthode de Kohn et Sham.....	109
5.1. L'énergie d'échange et de corrélation de Kohn et Sham.....	109
5.2. Les équations de Kohn et Sham.....	111
5.3. L'énergie d'échange et de corrélation.....	112
6. Calculs ab-initio.....	114
7. Signification de l'équation monoélectronique pour les solides et conclusions.....	114

III. Symétries, fonctions d'onde, états d'énergie électronique

1. Les opérations de symétrie d'un cristal.....	117
1.1. Invariance de l'hamiltonien sous l'effet des symétries du groupe d'espace.....	117
1.2. Le réseau réciproque.....	118
1.3. Les zones de Brillouin.....	120
1.4. La théorie des électrons presque libres.....	121
1.5. Conducteurs et isolants.....	126
2. Les ondes de Bloch.....	127
3. Conséquence des symétries du groupe ponctuel.....	128
3.1. L'étoile des k	128
3.2. Symétrie associée au renversement de l'écoulement du temps.....	129
3.3. Résumé des propriétés générales des états électroniques.....	130
4. Méthode de résolution des équations monoélectroniques : calcul des structures de bandes dans une base d'ondes planes.....	131
5. Où l'on retrouve les théories des électrons libres et presque libres.....	133
6. Les éléments de matrice associés au potentiel.....	136
6.1. Le potentiel associé aux noyaux.....	136
6.2. Le potentiel électronique de Hartree.....	137
6.3. Le potentiel d'échange et de corrélation.....	138
6.4. Détermination de la densité électronique.....	138
<i>Utilisation des points spéciaux (Monkhorst)</i>	
7. L'énergie totale du solide.....	141
7.1. Les différentes expressions de l'énergie totale.....	141

7.2. L'énergie E_{SB} associée à la structure de bandes.....	141
7.3. L'énergie d'Hartree E_H	142
7.4. L'énergie d'interaction électron-noyau E_{e-N}	142
7.5. L'énergie d'échange et de corrélation E_{XC}	143
7.6. L'énergie d'interaction des noyaux.....	144
8. Pseudo potentiels.....	148
8.1. Introduction.....	148
8.2. Les pseudo-potentiels locaux.....	150
8.3. Les pseudo-potentiels à norme conservative.....	151
8.4 Eléments de matrice des pseudo-potentiels.....	152
<i>Pseudo-potentiels locaux, Pseudo-potentiels non locaux</i>	
9. Quelques structures de bandes.....	154
9.1. L'aluminium : un métal.....	154
9.2. Semi-conducteurs covalents (C, Si, Ge) : « gaps » indirects.....	155
9.3 L'arséniure de gallium GaAs : un semi-conducteur à « gap » direct.....	156
9.4. Un semi-conducteur « grand gap » ZnSe : composé II-VI.....	157
10. Propriétés dynamiques des électrons dans les solides.....	158
10.1. L'approximation de la masse effective.....	158
10.2. Comportement dynamique au voisinage d'un extremum.....	160
10.3. Symétrie et masses effectives.....	161
10.4 Réaction des électrons de valence aux forces appliquées. Concept de trou.....	163
11. Quelques propriétés d'un gaz d'électrons libres.....	163
11.1. Position du niveau de Fermi d'un gaz d'électrons libres.....	163
11.2. Capacité calorifique d'un gaz d'électrons libres.....	165
12. Statistique d'occupation des bandes d'un semi-conducteur parfait.....	166
13. Action d'un champ magnétique sur un gaz d'électrons libres.....	169
13.1. Champ magnétique faible : le paramagnétisme de spin.....	169
13.2. Les niveaux de Landau.....	170
14. Conclusions.....	173

IV. Le mouvement des ions : les phonons

1. Les ondes acoustiques dans les solides.....	175
2. L'équation fondamentale du spectre de vibrations.....	177
3. Modèles unidimensionnels.....	180
3.1. Chaîne linéaire ne contenant qu'un atome par maille.....	180

3.2. Cas d'une maille contenant deux atomes.....	182
4. Calcul ab initio du spectre de dispersion $\Omega(\mathbf{q})$ dans le cas général.....	185
4.1. Le théorème de Hellmann Feynman.....	185
4.2. L'interaction électron ion.....	187
4.3. L'interaction ion- ion.....	192
5. Exemples de spectres de dispersion.....	193
5.1. Le silicium.....	193
5.2. L'arséniure de gallium GaAs.....	194
6. Quantification du mouvement des noyaux : les phonons.....	194
7. Capacité calorifique des solides associée aux vibrations de réseau.....	195
8. Conclusion	

V. La méthode des liaisons fortes

1. Introduction.....	199
2. La fonction d'onde monoélectronique en liaisons fortes.....	200
3. La structure de bandes.....	202
5. Application de la méthode au cas de chaînes linéaires.....	205
5.1. La chaîne métallique.....	205
5.2. La chaîne semi-conductrice.....	206
5.3. Les orbitales dirigées.....	208
Termes intra-atomiques, intégrales de résonance	
6. Structures cristallographiques associées aux différents types d'orbitales dirigées.....	213
<i>Les orbitales hybrides « sp_1 », « sp_2 » (graphène) et « sp_3 », la structure diamant et les semi-conducteurs covalents, la structure sphalérite et les semi-conducteurs composés, composés ternaires et quaternaires.</i>	
7. La structure de bandes des semi-conducteurs covalents (C, Si, Ge).....	218
7.1. Orbitales dirigées et premiers voisins.....	218
<i>Action de l'hamiltonien atomique sur les orbitales sp_3. Les ondes de Bloch. Eléments de matrice dans la base des ondes de Bloch. Recherche des valeurs propres de l'hamiltonien</i>	
7.2. Influence des seconds voisins.....	225
8. Le couplage spin orbite.....	231
8.1. Généralités.....	231
8.2. Les éléments de matrice associés au couplage spin-orbite.....	233
8.3. Les composés ternaires et quaternaires.....	236

8.4. L'orbitale s^*	237
9. L'ionicité des semi-conducteurs composés.....	237
9.1. L'approximation du cristal moléculaire.....	238
9.2. Détermination auto-cohérente du paramètre λ	241
<i>Les termes de Madelung, Auto-cohérence</i>	
10. Conclusions.....	243

VI. La réponse diélectrique des solides

1. Introduction.....	245
2. Généralités sur les réponses linéaires.....	246
3. Les relations de Kramers-Kronig.....	248
4. L'opérateur densité.....	249
5. La fonction diélectrique électronique de Lindhard.....	252
5.1. Systèmes électroniques tri-dimensionnels.....	252
5.2. Systèmes électroniques bi-dimensionnels.....	255
6. La réponse diélectrique statique.....	257
6.1. Isolants.....	257
6.2. Métaux.....	259
6.3. Semi-conducteurs.....	260
7. La réponse diélectrique dynamique.....	262
7.1. Partie réelle et partie imaginaire de la fonction diélectrique.....	262
7.2. La partie réelle de la fonction diélectrique dynamique : les plasmons.....	263
<i>Systèmes 3D, Les systèmes 2D</i>	
7.3. Partie imaginaire de la fonction diélectrique.....	264
<i>Cas des semi-conducteurs, Cas des métaux</i>	
8. La réponse diélectrique du réseau.....	267
8.1. L'approche de Born et Huang.....	267
8.2. Couplage phonon/plasmon.....	270
<i>Cas des systèmes 3D. Cas des systèmes 2D</i>	
9. Conclusions.....	271
Annexe : La fonction diélectrique des métaux à $T = 0$	

VII. Etats d'énergie et propriétés extrinsèques dans les semi-conducteurs

1. Introduction.....	275
2. Caractéristiques des défauts les plus usuels des matériaux.....	276
2.1. Les surfaces.....	276
2.2. Lacunes et interstitiels.....	277
2.3. Antisites.....	279
2.4. Impuretés.....	280
2.5. Les dislocations.....	280
3. La technique de la fonction enveloppe pour la détermination des états « légers ».....	283
4. Niveaux légers.....	285
4.1. Le modèle hydrogénoïde pour les impuretés.....	285
4.2. Niveaux légers liés au champ de contrainte des dislocations coins.....	287
4.3. Donneurs et accepteurs.....	289
4.4. Métaux de transition et niveaux profonds.....	291
4.5. Niveaux profonds associés aux dislocations.....	292
5. Statistique d'occupation des niveaux extrinsèques.....	293
5.1. Les impuretés chargées.....	293
5.2. Les dislocations.....	294
5.3. L'équation de neutralité et le niveau de Fermi.....	297
5.4. Comportement du niveau de Fermi en fonction du dopage et de la température.....	298
5.5. Semi-conducteurs compensés.....	299
5.6. Réalisation de matériaux semi-isolants.....	300
6. Jonctions de matériaux et principales fonctions de l'électronique.....	301
6.1. La diode Schottky.....	301
6.2. Jonctions n/p et p/n/p et fonctions électroniques de base.....	303
6.3. Hétérostructures de semi-conducteurs.....	304
<i>Puits quantiques carrés. Le puits quantique AlGaAs/GaAs. Puits quantique à l'interface AlGaN/GaN</i>	
6.4. Solution numérique de la fonction enveloppe : utilisation des différences finies.....	308
6.6. Transistors à effet de champ.....	311
7. Conclusions.....	311

VIII. Les phénomènes de transport électrique

1. Introduction.....	313
2. Concepts de base.....	313
2.1. L'approche classique.....	313
2.2. L'effet Joule.....	316
3. L'approche semi-classique : Solution de l'équation cinétique de Boltzmann.....	317
3.1. La statistique d'occupation en présence de champs extérieurs.....	318
3.2. Le temps de relaxation.....	320
3.3. L'équation intégrale vérifiée par le temps de relaxation.....	323
3.4. Mécanismes de diffusion élastique.....	323
3.5. Mécanismes de diffusion inélastique.....	324
3.6. La loi de Matthiessen dans le cas de potentiels diffuseurs élastiques.....	328
3.7. Les expressions de transport.....	330
3.8. Conductivité électrique et effet Hall.....	331
4. La méthode de l'énergie perdue.....	333
5. Formulation quantique du transport (Kubo- Greenwood).....	336
<i>La contribution symétrique. La contribution antisymétrique ou l'effet Hall</i>	
6. La théorie de Wigner.....	340
7. Conclusion.....	348

IX. Mécanismes de diffusion

1. Introduction.....	349
2. Les mécanismes de diffusion extrinsèques.....	349
2.1. Les impuretés neutres.....	349
2.2. Impuretés ou défauts ponctuels chargés.....	350
2.3. Les dislocations.....	352
<i>L'effet de cœur ; Mécanismes de diffusion associés au champ de contrainte (potentiel de déformation, potentiel piézoélectrique)</i>	
3. Mécanismes de diffusion associés aux phonons.....	355
3.1. Généralités.....	355
3.2. Les phonons acoustiques.....	356
<i>Le potentiel de déformation. Le potentiel piézoélectrique</i>	
3.3. Les phonons optiques.....	359
<i>Le potentiel de déformation optique. Les phonons optiques polaires</i>	

3.4. Résultats numériques.....	362
4. Une approche des mécanismes inélastiques fondée sur la réponse diélectrique.....	363
4.1. Formulation générale.....	363
4.2. Un exemple d'application : Diffusion par les phonons optiques polaires.....	366
4.3. L'interaction électron-électron.....	367
4.4. Diffusion par les particules hybrides phonon/plasmon.....	369
5. Conclusion.....	370

X. Transport dans les systèmes mésoscopiques

1. Introduction.....	373
2. Fonctions de Green et mécanique quantique.....	375
2.1. La densité d'états locale.....	375
2.2. Opérateurs avancés et retardés.....	377
2.3. Définition et signification physique des fonctions de corrélation... ..	378
3. Systèmes en interaction.....	381
3.1. Concept de self-energy.....	381
3.2. Opérateur spectral et self energies.....	383
3.3. Conséquences et signification de la partie imaginaire des self energies.....	384
4. Les Self-energies associées aux contacts.....	385
5. Les self-energies associées aux centres diffuseurs.....	388
6. Les fonctions $D(\mathbf{r},\mathbf{r}',\eta)$ associés aux centres diffuseurs intrinsèques.....	390
6.1. La formule générale.....	390
6.2. Couplage des phonons acoustiques par le potentiel de déformation.....	391
6.3. Couplage des phonons acoustiques par le potentiel Piézoélectrique.....	391
6.4. Diffusion par les phonons optiques polaires.....	392
7. Le transport balistique.....	393
7.1. Généralités.....	393
7.2. L'opérateur courant.....	394
7.3. Un exemple la diode à effet tunnel.....	397
7.4. Interprétation des résultats.....	401
8. Rôle des centres diffuseurs.....	402
8.1. Les équations d'évolution.....	402

8.2. Solutions à l'équilibre thermodynamique.....	403
8.3. Systèmes hors équilibre : la méthode itérative.....	404
9. L'effet Hall quantique.....	405
9.1. Les faits expérimentaux.....	405
9.2. Densité d'états d'un gaz bidimensionnel en présence d'un champ magnétique.....	407
9.3. Champ magnétique élevé.....	409
9.4. Champ magnétique faible.....	409
9.5. La résistivité longitudinale.....	411
9.6. L'effet Hall quantique.....	412
10. Conclusions.....	413

XI. Propriétés optiques

1. Introduction.....	415
1.1. Les ondes électromagnétiques.....	416
<i>Les isolants (ou diélectriques parfaits). Les métaux. Les diélectriques imparfaits et les semi-conducteurs</i>	
1.2. Le modèle classique de conductivité de Drude.....	419
1.3. Quantification du champ électromagnétique.....	420
2. Aspect quantique du calcul de la conductivité.....	421
2.1. L'interaction lumière-électron.....	421
2.2. L'opérateur densité de courant.....	422
2.3. Le tenseur de conductivité.....	423
2.4. Utilisation de la théorie des perturbations dépendantes du temps...	426
2.5. Emission stimulée ou spontanée.....	428
3 Les mécanismes d'absorption optique inter bandes.....	430
3.1. L'absorption interbande dans les semi-conducteurs à gap direct....	430
<i>Les transitions inter-bandes sont verticales dans l'espace réciproque. . Transitions permises et interdites. Densité d'états joints et points critiques. Transitions interbandes permises. Transitions interbandes interdites</i>	
3.2. Absorption interbande dans les matériaux à gaps indirects.....	435
3.3. L'absorption intra-bande.....	439
4. Les phénomènes d'absorption extrinsèques.....	440
4.1. Formulation générale.....	440
4.2. Etats liés de type hydrogénoïde.....	442
4.3. Un exemple transition entre la bande de valence et donneurs ionisés.....	444
5. Les excitons.....	447
6. Mécanismes de recombinaison radiative. Luminescence.....	453

6.1. Recombinaison interbande.....	454
6.2. Recombinaison « bande - impureté ».....	456
6.3. Recombinaisons excitoniques.....	457
6.4. Recombinaison donneur - accepteur.....	459
6.5. Les répliques phonons.....	459
7. Recombinaisons non radiatives ou « partiellement » radiatives.....	460
7.1. La recombinaison Auger.....	460
7.2. Interactions électrons phonons.....	460
7.3. Recombinaison partiellement radiative d'un électron libre vers un centre profond.....	464
8. Modèle de recombinaison de Hall-Shockley-Read.....	465
<i>Recombinaison inter-bande. Relation entre coefficients d'émission et coefficients de recombinaison. Recombinaison de Hall-Shockley-Read</i>	
9. Méthodes locales d'investigation des défauts.....	468
10. Conclusion.....	470
<i>Cellules photoélectriques. Electroluminescence</i>	

Annexes

A. La transformation de Fourier.....	473
1. La fonction de distribution de Dirac.....	473
2. La transformation de Fourier.....	475
3. Quelques propriétés des transformées de Fourier.....	476
4. Produits de convolution, de corrélation.....	477
5. Les pseudo transformées de Fourier de la physique des solides.....	478
B. Les fonctions de Green.....	479
1. Définition.....	479
2. Fonctions de Green indépendantes du temps.....	480
3. Les fonctions de Green dépendantes du temps.....	483
4. Fonctions de Green associées à l'opérateur $L(r) = -\Delta$	484
4.1. Espace à 3 dimensions.....	484
4.2. Espace à deux dimensions.....	485
4.3. L'espace à une dimension.....	487
4.4. Fonctions de Green dépendantes du temps associées à l'opérateur $-\Delta$	488

C. Matrices non hermitiques.....	489
1. Éléments propres d'un opérateur non hermitique.....	489
2. Représentation d'un opérateur non hermitique.....	491
D. La transformation de Hilbert et les relations de Kramers Kronig.....	492