ÉCOLE NORMALE SUPÉRIEURE
DÉPARTEMENT DE PHYSIQUE

THÈSE DE DOCTORAT DE L'UNIVERSITÉ PARIS VI

Spécialité : Physique des solides

présentée par

Duc Phuong NGUYÊN

pour obtenir le grade de DOCTEUR de l'UNIVERSITÉ PARIS VI

Sujet de la thèse

Confinements non-usuels dans les boîtes quantiques semiconductrices

Soutenue le 8 novembre 2005 devant le jury composé de :

M. Gérald Bastard .... Directeur de thèse
M. Roland Combescot .... Examinateur
M. Robson Ferreira .... Co-directeur de thèse
M. Pierre Lefèbvre .... Rapporteur
M. Jean-Yves Marzin .... Rapporteur
M. Gottfried Strasser .... Examinateur

Remerciements

Je remercie Claude Delalande de m'avoir accueilli au Laboratoire Pierre Aigrain et de m'avoir permis d'effectuer cette thèse dans de bonnes conditions.

Roland Combescot, Pierre Lefèbvre, Jean-Yves Marzin, Gottfried Strasser m'ont fait l'honneur de participer à ce jury de thèse. Je tiens beaucoup à les remercier.

Je voudrais remercier mes deux directeurs de thèse, Gérald Bastard et Robson Ferreira de m'avoir encadré et d'être disponibles pendant mes trois ans de thèse. Ils m'ont beaucoup appris au niveau de la physique par leur expertise dans la compréhension des phénomènes physiques. Un très grand merci à Nicolas Regnault, avec qui j'ai eu le plaisir de collaborer (et d'apprendre sur plusieurs points) sur un projet de calculs numériques depuis le début de ma thèse. Merci pour son effort d'avoir corrigé les nombreuses fautes d'orthographe ou de grammaire dans ce manuscrit.

Je remercie également le CNRS pour son soutien financier qui m'a permis de réaliser cette thèse. Je tiens à remercier l'ensemble du personnel de la délégation Paris B pour leurs aides administratives et leurs programmes de formation d'anglais. Un grand merci aussi à Anne Matignon pour son aide au niveau administratif au laboratoire. Je remercie tous les organisateurs des séminaires généraux du département de physique. Ces séminaires, qui sont de hautes qualités, m'ont permis d'avoir une vision dans de nombreux domaines de la physique ou en dehors de la physique.

Comme le dit Olivier Verzelen, je tiens à remercier tous les acteurs du logiciel libre pour le travail inestimable qu'ils fournissent et pour montrer que l'informatique ne se résume pas à Microsoft.

Je remercie tout le personnel et les thésards qui m'ont accompagné tout au long de cette thèse : bác Hâu, Olivier Andrieu, Sébastien Berger, Ivan Favero, Yves Guldner, Arnaud Labourt-Ibarre, Aleksandar Jankovic, Jean-Paul Maneval, Pascal Morfin, Philippe Pace, Michael Rosticher, Arnaud Verger, Angela Vasanelli, Olivier Verzelen.

Ce travail n'aurait pu être effectué sans les soutiens moraux de nombreuses personnes. Je remercie particulièrement ma future femme Linh, mon frère et mes parents qui m'ont toujours soutenu de loin ou de près pendant les moments difficiles !

Table des matières

Introduction

Grâce aux travaux amorçés dans les années 1970 par Tsu et Esaki, les physiciens des semi-conducteurs explorent les systèmes de basses dimensionnalités depuis une trentaine d'années. Après avoir bien maîtrisé les systèmes bi-dimensionnels, l'attention des chercheurs dans le monde de la physique des semi-conducteurs se tourne vers l'étude des systèmes avec plus de directions de confinement comme les boîtes quantiques (confinement tridimensionnel ou système 0D). En modifiant les différents paramètres de croissance comme les matériaux semi-conducteurs, la concentration de dopage ou la périodicité du super-réseau, ... on peut obtenir des systèmes de boîtes quantiques très variables. Cette variété rend les boîtes quantiques très intéressantes pour les applications en micro-électronique (électronique de spin, transistor à un électron, ...) et en opto-électronique (lasers, photo-détecteurs, ordinateur quantique, ...).

Cette thèse porte sur les boîtes quantiques avec les confinements non-usuels tels que les grands offset de bande dans les semi-conducteurs à base de nitrure ou les super-réseaux de boîtes quantiques InAs/GaAs. Pour traiter ces systèmes très variés, j'ai développé plusieurs programmes en C++ pour calculer d'abord les états propres du système étudié, puis les propriétés électroniques et optiques. Tous les résultats obtenus au long de ce travail ont été basés sur ces programmes qui sont incorporés dans la bibliothèque DiagHam, initialement développée par Nicolas Regnault.

Dans le premier chapitre, nous présenterons brièvement l'évolution des hétérostructures semi-conductrices du massif aux basses dimensionnalités. Nous résumerons le mode de croissance Stranski-Krastanov par lequel la plupart des boîtes quantiques faisant l'objet de notre étude ont été obtenues. Ensuite, les méthodes de calculs utilisées dans cette thèse seront présentées et comparées. Elles ont été développées dans le cadre de la bibliothèque numérique DiagHam. Ces méthodes de calcul, réalisées sous la forme des classes et des programmes, ont été utilisées tout au long de cette thèse pour traiter les différents systèmes qui contiennent des confinements non-usuels que nous verrons.

Dans le deuxième chapitre, nous étudierons le continuum électronique des boîtes quantique InAs/GaAs insérées dans un super-réseau sous un champ magnétique vertical. Par le biais du modèle séparable, nous montrerons que pour les excitations de polarisation z, l'état fondamental électronique ne couple que avec les états du continuum qui ont un peu près la même extension dans le plan. Nous montrerons ensuite qu'en réduisant la taille latérale des boîtes quantiques, nous pourrons avoir une forte dépendance de la photo-absorption dans la polarisation dans le plan.

Dans le chapitre suivant, nous appliquerons les résultats trouvés dans le chapitre précédent pour expliquer les expériences sur le photo-courant effectuées dans le groupe de Unterrainer à Vienne. Nous montrerons que les résultats théoriques et expérimentaux sont en très bon accord.

Dans le chapitre 4, nous nous intéresserons à des hétéro-structures à base de nitrure. Nous commencerons ce chapitre en présentant les propriétés originales des semi-conducteurs à base de nitrure (grand champ piézo-électrique, grandes masses effectives, grands offsets de bande, ...). Nous verrons que ce sont ces grandes valeurs physiques qui rendent l'Approximation du Cristal Virtuel non valable. Au contraire, elle marche toujours très bien pour les systèmes à base d'arséniure, comme le montreront nos calculs.

Dans le dernier chapitre, nous présenterons un travail effectué en collaboration avec l'équipe expérimentale dirigée par J. Wang à Hong Kong. Nous nous intéresserons à l'étude expérimentale et théorique des structures de boîtes en forme de sphère ou de tétrapode de CdSe. Nos calculs montreront que l'état fondamental et les trois premiers états excités sont principalement confinés dans le corps tandis que les états au-dessus commencent à pénétrer dans les bras. Ces résultats sont cohérents avec les résultats expérimentaux dans lesquels les expériences d'absorption et de photolumninescence montrent aucune différence qualitative entre les échantillons de boîte et de tétrapode.

Finalement, les détails sur les bases d'états utilisées au cours de cette thèse (qui sont incorporées dans la bibliothèque numérique DiagHam) ainsi que les méthodes numériques seront rassemblés dans les annexes de ce manuscrit. Ces annexes constituent une part importante de ce travail et servent de référence pour ceux qui veulent développer des programmes basés sur le code de DiagHam. J'ai fait le choix de regrouper le contenu de ces annexes en fin de manuscrit, qui contiennent de nombreuses formules mathématiques, afin de faciliter la lecture et de concentrer mieux les idées physiques dans chaque chapitre précédent.

Chapitre 1

Généralités sur les boîtes quantiques

1.1 Du massif à la boîte quantique

1.1.1 Premières hététo-structures semi-conductrices

Aujourd'hui les ordinateurs et leurs processeurs sont présents partout dans le monde. La clé de cette révolution technologique est les semi-conducteurs qui sont des matériaux avec la capacité de conduction quelque part entre de bons conducteurs (métaux) et des isolants. Les semi-conducteurs sont primordiaux en électronique parce qu'ils offrent la possibilité de contrôler, par divers moyens, à la fois la quantité de courant électrique susceptible de les traverser et la direction que peut prendre ce courant. Un exemple connu est le transistor qui est au coeur des ordinateurs. Ces transistors sont contrôlables grâce à l'effet de champ et sont un exemple typique des applications des semi-conducteurs.

Dans les premières années 1970, les premières hétéro-structures à basses dimensionalités, connues comme puits quantiques, ont été développées [1]. Elles consistent en la fabrication de sandwichs de différentes couches semi-conductrices de gaps différents. La largeur de la couche semi-conductrice servant comme puits peut varier de quelques nm (cas typique des puits quantiques à base de nitrures) jusqu'à quelques dizaines de nm (cas typique des puits quantiques à base d'aséniure). De telles structures ont été souvent considérées comme bidimensionnelles (2D) parce que les porteurs (électrons et trous) issus d'un dopage sélectif dans les couches barrières ou d'une excitation optique inter-bande sont confinés dans la direction de croissance tout en restant libres dans le plan des couches. Plusieurs techniques de croissance ont été utilisées pour réaliser ces systèmes bi-dimensionnels. Parmi ces techniques, on peut citer l'épitaxie par jets moléculaires (MBE en anglais) ou dépôt de vapeur chimique métal-organique (MOVCD en anglais) qui ont révolutionné la physique des semi-conducteurs. Ces hétéro-structures forment la base de la plupart des composants opto-électroniques actuellement sur le marché et leur importance a été reconnue par l'attribution du prix Nobel 2000 de physique à Zhores Alferov et Herbert Kroemer.

Les avantages de ces structures sont nombreux. Premièrement, les propriétés optiques des puits quantiques peuvent être accordées en changeant leurs paramètres structuraux, typiquement largeur et composition (appelé band-gap engineering en anglais). Deuxièmement, la dimensionalité réduite conduit à améliorer des performances optiques, notamment grâce à l'augmentation de la probabilité de recombinaison électron-trou. Troisièmement, grâce à leur structure de bande transformée en mini-bandes, les porteurs excités du système sont mieux protégés contre les relaxations par les phonons optiques.

A la fin des années 80, les principales propriétés des systèmes 2D étant dans l'ensemble assez bien comprises, l'intérêt du monde de la recherche s'est tourné vers des structures de plus basses dimensionalités. Avec l'avance des techniques de croissance comme la MBE, on peut faire croître des structure 1D (fils quantiques) et 0D (boîtes quantiques). L'évolution de l'énergie d'un porteur et sa densité d'état en fonction de la dimensionalité des systèmes est montrée schématiquement dans la figure 1.1. Dans le cas 0D, la densité d'état devient discrète et pour cette raison, les boîtes quantiques sont souvent appelées atomes artificiels. Cette propriété les rend intéressantes pour les études fondamentales et les boîtes quantiques sont un bon candidat pour la réalisation des portes quantiques pour les expériences d'ordinateur quantique. Néanmoins, il a fallu attendre une décennie pour développer des techniques de croissance fiables permettant fabriquer des boîtes quantiques d'une qualité convenable pour les applications commerciales.

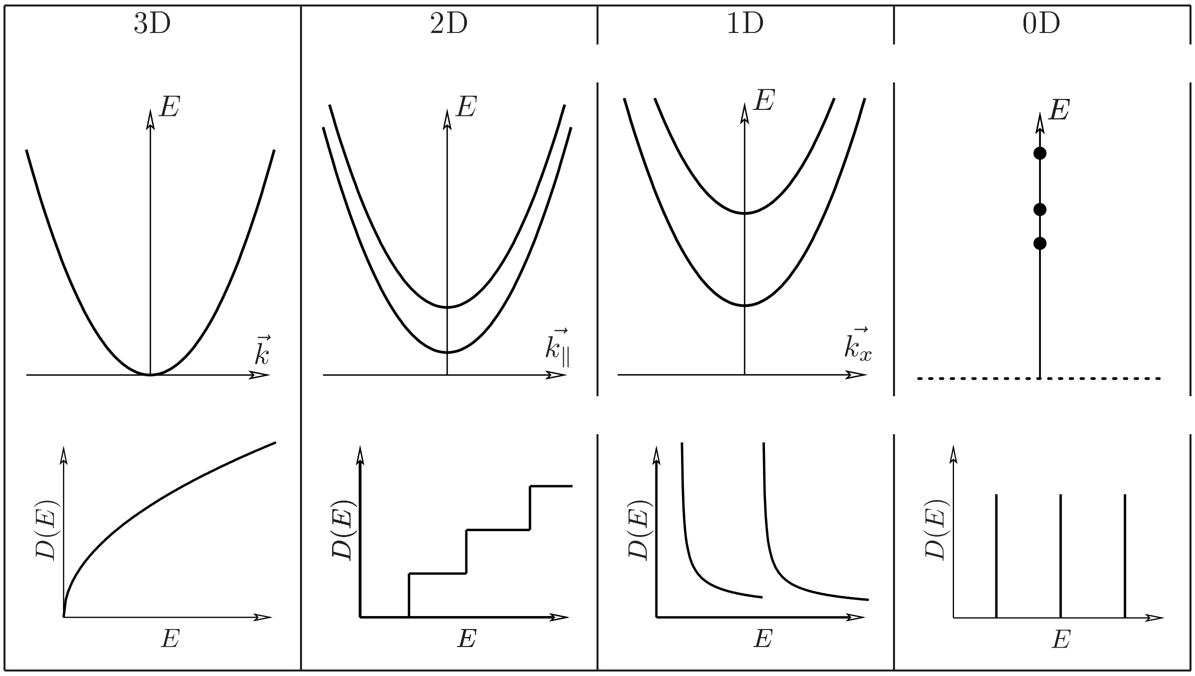


FIG. 1.1 – Évolution de l'énergie d'un porteur et la densité d'état en fonction de la dimensionalité du système. $\vec{k} = (k_x, k_y, k_z)$, $\vec{k_\parallel} = (k_x, k_y)$.

Parmi les techniques de croissance des boîtes quantiques, la croissance auto-organisée permet d'avoir des boîtes de petite taille, permettant aussi des études de différents régimes de quantification. La plupart des boîtes quantiques étudiées dans cette thèse sont fabriquées par cette technique, qui va être résumée dans la section suivante.

1.1.2 Croissance auto-organisée de boîte quantique

La façon la plus pratiquée pour faire croître des boîtes quantiques est d'utiliser le mode de croissance Stranski-Krastanov (SK). La possibilité de former des îlots sur une surface hétéro-épitaxiale a été proposée par Stranski et Krastanov [2] et le terme "mode Stranski-Krastanov" est devenu populaire dans la communauté de boîte quantique. Il consiste à déposer un matériau avec un grand désaccord de maille avec le substrat. Pour confiner les porteurs, ce matériau possède aussi un gap plus petit que le substrat. Ce désaccord de maille (environ 7% entre InAs et GaAs, 12% entre InN et GaN) va introduire des contraintes. Pendant la croissance de SK, les premières monocouches, de 1,6 à 2 monocouche d'InAs [3–5] ou de 4 à 5 monocouches de $In_{0.17}Ga_{0.83}N$ [6], forment une couche bidimensionnelle pseudomorphique appelée la couche de mouillage ("wetting layer" en anglais). Au delà de cette largeur critique, la croissance bidimensionnelle n'est plus favorable énergétiquement et le matériau subséquent s'organise en îlots, ce qui conduit à la croissance 3D. De tels îlots sont fréquemment appelés des boîtes quantiques auto-organisées. La taille et la densité d'îlots dépendent fortement des paramètres de croissance et sont le résultat des effets thermodynamiques et cinétiques. Pour compléter la croissance, les îlots doivent être couverts par un matériau barrière. L'importance de cette étape a été soulignée récemment et on a montré que les propriétés structurales des boîtes pouvaient être modifiées pendant cette étape à cause de l'interdiffusion et la redistribution de matériau. Un schéma décrit ces différentes étapes de la croissance (figure 1.2).

Quelques images d'AFM avant couverture sur les boîtes quantiques de différents matériaux fabriquées par le mode de croissance SK sont présentées dans les figures 1.3 , 1.4 et 1.5.

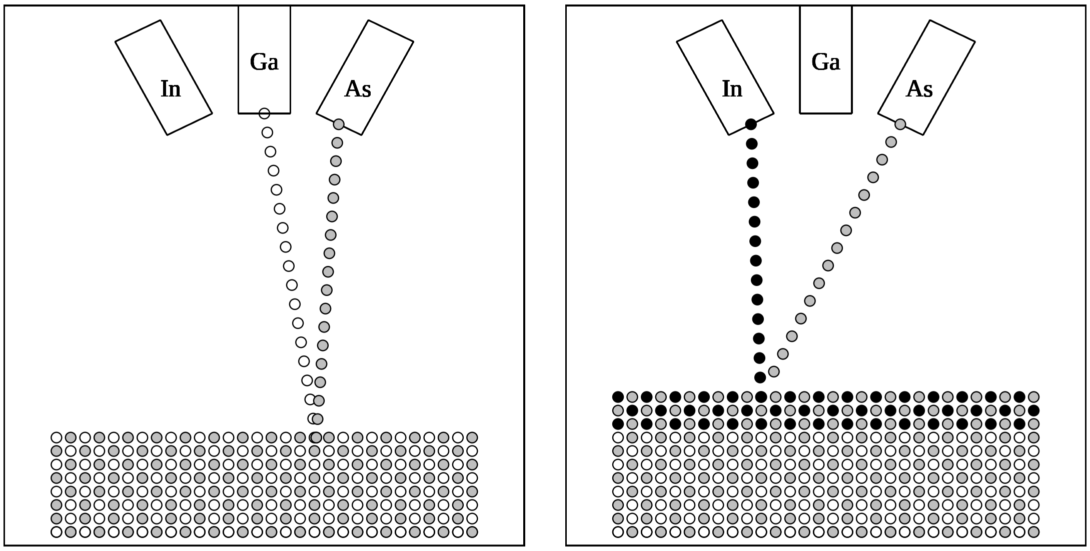
1.2 Revue de méthodes de calcul

La structure électronique des boîtes quantiques a été calculée par plusieurs formalismes : fonction enveloppe à plusieurs bandes par Stier et al [10, 11], approche atomistique (pseudo-potentiel) par Williamson et Zunger [12, 13], tight-binding par Lee et al [14]. Ces méthodes sont sophistiquées et ont pour but de calculer les états liés des boîtes quantiques. Dans cette thèse, nous nous contenterons d'utiliser un formalisme plus simple, fonction enveloppe à une bande, pour calculer les états plus étendus des boîtes quantiques. Notons que ce formalisme a permis une description quantitative des transitions lié-lié magnéto-optiques associées avec des polarons dans des boîtes InAs/GaAs [15, 16].

1.2.1 Méthode matricielle

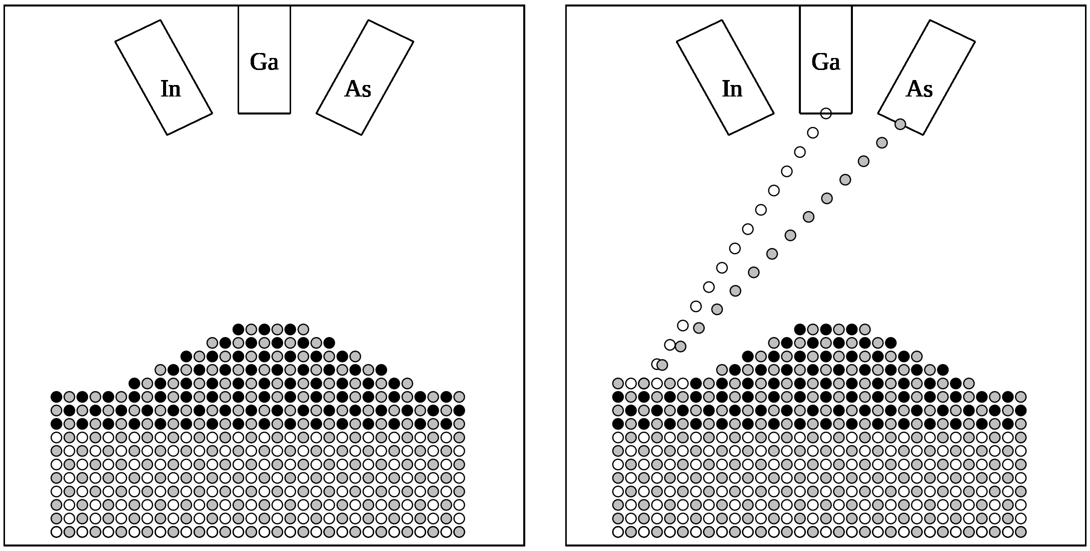
D'après le formalisme de masse effective [17], le Hamiltonien agissant sur la partie fonction enveloppe peut s'écrire :

$$H = \underbrace{\frac{\hat{p_x}^2}{2m_x} + \frac{\hat{p_y}^2}{2m_y} + \frac{\hat{p_z}^2}{2m_z}}_{H_c} + V_c + V_{em} \tag{1.1}$$



1. Substrat de GaAs

2. Couche de mouillage d'InAs



3. Formation des îlots

4. Couverture du GaAs

FIG. 1.2 – Schéma des étapes de la croissance 3D par le mode de Stranski-Krastanov en utilisant la technique d'épitaxie par jets moléculaires (MBE)

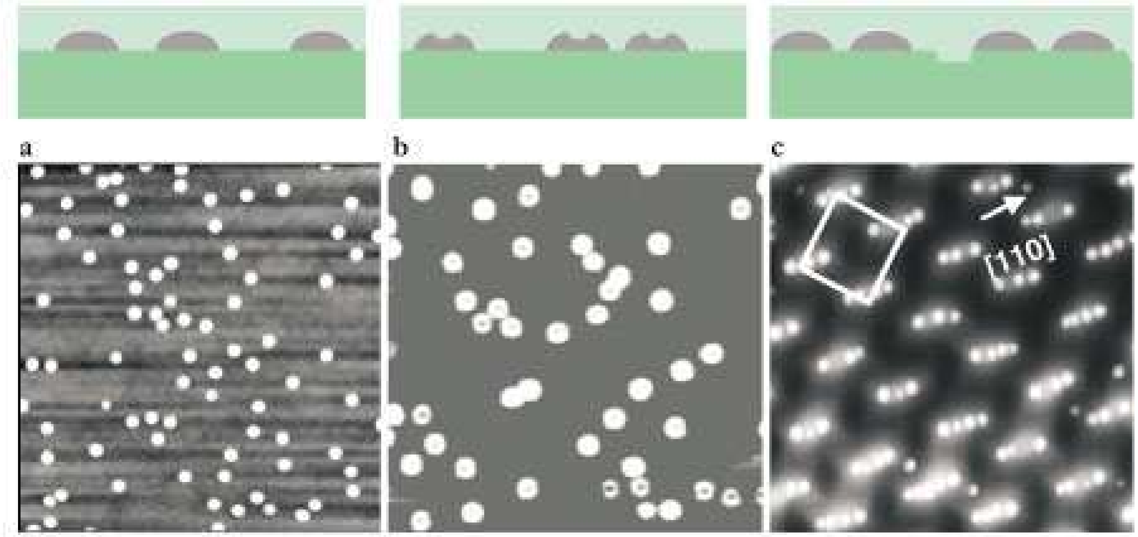


FIG. 1.3 – Image d'AFM des boîtes quantiques InAs/GaAs. D'après la référence [7].

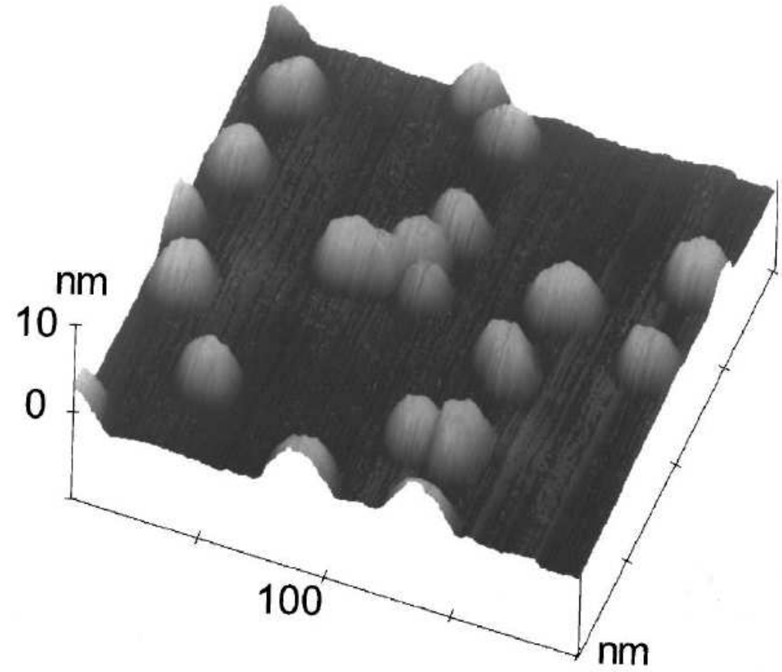


FIG. 1.4 – Image d'AFM des boîtes quantiques GaN/AlN. D'après la référence [8].

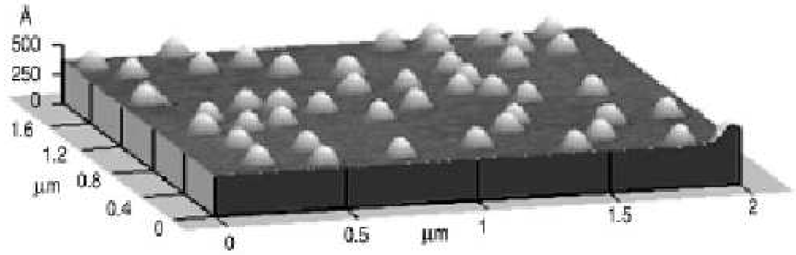


FIG. 1.5 – Image d'AFM des boîtes quantiques Ge/Si(001). D'après la référence [9].

où m_x, m_y, m_z sont les masses effectives dans chaque direction, H_c est le terme cinétique. Le potentiel du cristal est représenté par V_c, V_{em} est le potentiel dû au champ électromagnétique s'il y en a. En fait, dans le cas un champ magnétique est présent, l'opérateur impulsion $\hat{p}$ est remplacée par $\hat{p} - q\hat{A}$. Dans le plan des couches, les boîtes quantiques sont souvent bien séparées (les distances planaires entre les boîtes sont bien plus grandes que leur rayon), ce qui permet d'appliquer l'approximation de boîte isolé dans le plan (x, y).

La méthode matricielle consiste à choisir une grande boîte de quantification contenant le système physique étudié. Le choix des conditions aux limites associées à cette grande boîte se décide en fonction de la nature physique du système. Enfin, une base d'états est utilisée pour décrire le cinématique du système. Il faut noter ici que le nombre d'états pris en compte est fini car on utilise une méthode numérique. Cependant, ce nombre est suffisamment grand pour que les propriétés physiques du système soient bien décrites. Une comparaison entre les résultats obtenus par cette méthode et d'autres méthodes (méthode variationnelle, modèle séparable) dans la section 1.2.3 montre que la méthode matricielle donne plus de précision que les deux autres méthodes.

On va ensuite projeter l'opérateur Hamiltonien (1.1) dans la base choisie. On obtient donc une matrice hamiltonienne qui est hermitique ou symétrique. Il faudra diagonaliser cette matrice pour obtenir les états propres du système. Comme seuls les niveaux les plus bas nous intéressent, nous retenons la méthode itérative de diagonalisation de Lánczos pour trouver ces états ainsi que leurs énergies correspondantes. Cette méthode de diagonalisation est exacte et présente une très bonne performance en termes de temps d'exécution et de précision des vecteurs propres.

Choix de la grand boîte de quantification

Le choix de la grande boîte de quantification se fait premièrement sur le fait que le système étudié est isolé ou pas. Si le système étudié est isolé, par exemple dans une étude de boîte unique ou dans un échantillon où les boîtes sont bien distantes les unes des autres, il faut prendre une grande boîte assez grande par rapport au système étudié, c'est-à-dire les boîtes quantiques dans la plupart des cas. Les effets de bord sont négligeables dans ce cas car le système est loin des bords. A titre d'information, nos grandes boîtes ont une longueur de l'ordre de 1000 Å dans le plan pour un système d'une boîte unique dont le rayon fait 100 Å.

Si le système est périodique, par exemple comme dans un super-réseau de boîtes quantiques, il vaut mieux alors prendre une grande boîte dont la dimension dans la direction de périodicité est égale à la périodicité du système.

Deuxièmement, cette grande boîte devrait avoir toutes les symétries possibles du système afin d'en profiter le mieux du point de vue numérique. Si le Hamiltonien est invariant par rotation dans le plan, la grande boîte doit être un cylindre. Si le Hamiltonien n'a pas de symétrie particulière, le choix le plus simple consiste à prendre une grande boîte parallélipipédique rectangle.

Choix des conditions aux limites

En fait, le choix des conditions aux limites est aussi étroitement lié à la nature du problème considéré. Si le système est isolé, on utilise les conditions d'annulation aux limites. Si le système est périodique, on utilise les conditions périodiques aux limites de type Born-Von Kármán.

Choix de la base d'états

Le choix de la base d'états est fait en fonction de la grande boîte et des conditions aux limites. Elle est constituée des fonctions d'onde orthonormées dans la grande boîte avec les conditions aux limites imposées. Dans la pratique, on choisira une base qui respecte au mieux les symétries du Hamiltonien.

Discrétisation du potentiel

Dans tous nos calculs, le potentiel de confinement est discrétisé, c'est-à-dire il est approximé par une somme de potentiels constants dans des cellules. Les cellules potentielles doivent garder la même symétrie que le Hamiltonien et la base d'états. Par exemple, dans le cas de symétrie circulaire, les cellules potentielles sont les disques qui conservent donc la symétrie circulaire du Hamiltonien.

Pour mieux comprendre cela, examinons un cas concret : un super-réseau de boîtes quantiques rondes.

1.2.2 Étude de cas : super-réseau de boîtes quantiques rondes

Nous nous intéressons au calcul des premiers états électroniques pour un super-réseau de boîtes quantiques rondes. La période du super-réseau est L. Pour simplifier le problème, nous ne tenons pas compte d'interdiffusion et de contraintes. Le potentiel de confinement est invariant par la rotation dans le plan et le Hamiltonien effectif que nous explorons est :

$$H = \frac{p^2}{2m^*} + V(\rho, z) \tag{1.2}$$

où m^* est la masse effective d'électron, supposée isotrope, $V(\rho, z)$ représente le potentiel de confinement qui est périodique dans la direction de croissance (z) $V(\rho, z) = V(\rho, z + L)$. Si nous ne tenons pas compte des contraintes et de l'interdiffusion, le potentiel est égal au bas de la bande de conduction du GaAs en dehors de la boîte et est égal au bas de la bande de conduction d'InAs dans la boîte (fig. 1.6). Nous choisissons la référence du potentiel comme le potentiel en dehors de la boîte (V_{GaAs}). Par rapport à cette référence du potentiel, le potentiel dans la boîte est égal à l'offset de bande de conduction entre deux semi-conducteurs : $V_{\text{dot}} = V_{\text{InAs}} - V_{\text{GaAs}} < 0$

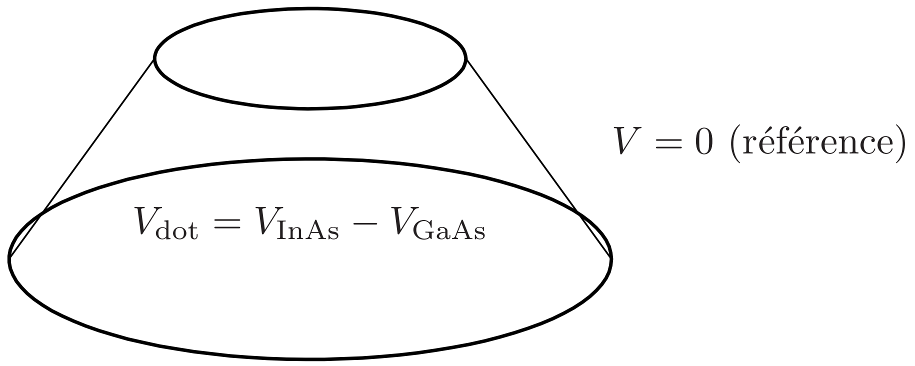


FIG. 1.6 – La forme et le potentiel d'une boîte quantique

Nous prenons une grande boîte de quantification qui a la même symétrie géométrique que le Hamiltonien. Il s'agit donc d'un cylindre dont le rayon est très grand par rapport au rayon de la boîte (par exemple 10 fois plus grand) pour éviter les effets de bords dans le plan (x, y). Comme le Hamiltonien est invariant par l'opérateur de translation d'une distance L dans la direction de croissance z, on peut appliquer le théorème de Bloch et ne s'intéresser qu'à une période de la structure. Par conséquent, la grande boîte est donc un cylindre de hauteur L et de rayon R.

Le vecteur d'onde k_z est un bon nombre quantique et les états propres sont écrits sous la forme $\psi_{k_z}(\vec{\rho}, z) = \exp(ik_z z)u_{k_z}(\vec{\rho}, z)$ où $u_{k_z}(\vec{\rho}, z)$ est une fonction périodique en z de périodicité L. Le Hamiltonien qui agit sur la fonction d'onde $u_{k_z}(\vec{\rho}, z)$ est obtenu si l'on remplace $\psi_{k_z}(\vec{\rho}, z)$ par $\exp(ik_z z)u_{k_z}(\vec{\rho}, z)$ dans l'équation 1.2 :

$$H(k_z) = \frac{p^2}{2m^*} + V(\rho, z) + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m^*} + \frac{\hbar k_z p_z}{m^*} \tag{1.3}$$

Nous allons chercher les premières solutions u_{k_z} en diagonalisant la matrice hamiltonienne obtenue par la projection de $H(k_z)$ sur une base d'états. Les conditions aux limites sont relativement faciles à définir dans ce cas. Elles sont périodiques en z car u_{k_z} l'est. Comme les boîtes sont isolées dans le plan, on prend une condition d'annulation sur la surface latérale de la grande boîte.

Le choix de la base d'états est basé sur les choix précédents. Les ondes planes de périodicité L sont choisies pour décrire la cinématique le long de l'axe de croissance : $\exp\left(-\frac{i2\pi qz}{L}\right)$ (q est un nombre entier). Quant au mouvement planaire, on profite de la symétrie circulaire du Hamiltonien en choisissant une base qui la respecte. Un choix simple est de prendre les fonctions de Bessel qui sont les solutions du Hamiltonien d'une particule libre sur un disque (voir l'annexe A pour une discussion sur les fonctions de Bessel) et qui permettent d'évaluer facilement les éléments de la matrice hamiltonienne comme nous verrons dans le prochain paragraphe. Un état d'indice (q, m, n) dans la base d'états Fourier-Bessel a donc la forme :

$$C \exp\big(-\frac{i2\pi qz}{L}\big) \exp(im\theta) J_m(\lambda_n \frac{\rho}{R}) \tag{1.4}$$

où C est une constante de normalisation, $2\pi q/L$ l'impulsion en z (à une constante près), $m\hbar$ le moment cinétique, λ_n le n-ème zéro de la fonction Bessel J_m.

Pour respecter au mieux les symétries dans notre système, le potentiel est discrétisé de la façon suivante. Il se compose de disques qui approximent la forme géométrique de la boîte (voir fig. 1.7). Le potentiel vaut $V_{\text{dot}} (= V_{\text{InAs}} - V_{\text{GaAs}})$ dans chaque disque et 0 en dehors de ces disques.

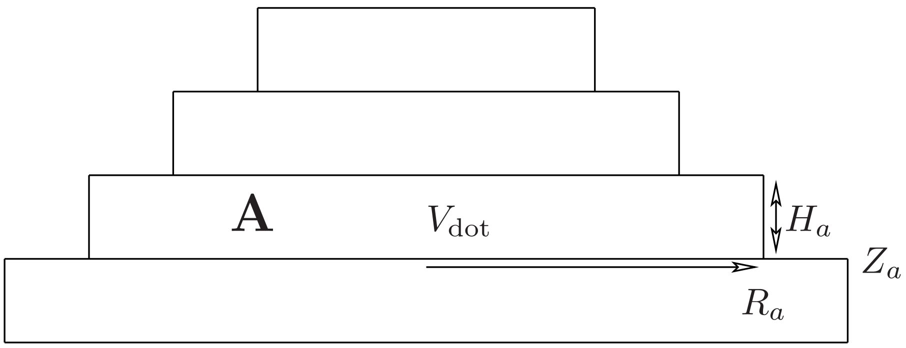


FIG. 1.7 – La discrétisation du potentiel d'une boîte quantique.

Nous terminons cette section par le calcul des éléments $\langle q_1, m_1, n_1 | H(k_z) | q_2, m_2, n_2 \rangle$ de la matrice hamiltonienne. Comme nous le montrons dans l'annexe A, le Hamiltonien couple seulement les états ayant la même symétrie circulaire : $m_1 = m_2$. L'élément hamiltonien entre deux états Fourier-Bessel d'indice (q_1, m, n_1) et (q_2, m, n_2) est :

$$\langle q_1, m, n_1 | H(k_z) | q_2, m, n_2 \rangle = \langle q_1, m, n_1 | \frac{p^2}{2m^*} + V(\rho, z) + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m^*} + \frac{\hbar k_z p_z}{m^*} | q_2, m, n_2 \rangle \tag{1.5}$$

Nous nous intéressons au calcul de couplage par le terme potentiel car les autres termes sont relativement faciles à calculer. Comme le potentiel est composé des cellules de potentiel constant, nous allons calculer le couplage induit par une cellule **A** (voir la figure 1.7).

$$\begin{aligned}
& \langle q_1, m, n_1 | V_a | q_2, m, n_2 \rangle \qquad (1.6) \\
= \; & C_1^* \, C_2 \, V_{\text{dot}} \int_{v_a} \exp\big(-\frac{i2\pi q_1 z}{L_z}\big) \; J_m(\lambda_{n_1} \frac{\rho}{R}) \; \exp\big(\frac{i2\pi q_2 z}{L_z}\big) \; J_m(\lambda_{n_1} \frac{\rho}{R}) \; d\vec{\rho} \; dz \\
= \; & C_1^* \, C_2 \, V_{\text{dot}} \, \Big(\int_{Z_a}^{Z_a + H_a} \exp(-\frac{i2\pi q_1 z}{L_z}) \; \exp(\frac{i2\pi q_2 z}{L_z}) \; dz \Big) \\
& \qquad \times \Big(2\pi \int_0^{R_a} J_m(\lambda_{n_1} \frac{\rho}{R}) \; J_m(\lambda_{n_2} \frac{\rho}{R}) \; \rho \; d\rho \Big)
\end{aligned}$$

où C_1, C_2 sont les constantes de normalisation. Les deux intégrales dans les parenthèses sont facilement calculées à l'aide des formules d'intégrales élémentaires des bases d'états données dans l'annexe A

Nous voyons que la discrétisation du potentiel, la base d'état et la grande boîte sont choisies de telle sorte que le terme potentiel puisse toujours être décomposé en des intégrales élémentaires dans chaque direction. De cette façon, nous pouvons toujours calculer les éléments hamiltoniens analytiquement. Toutes les intégrales élémentaires utilisées dans les bases d'états au cours de cette thèse sont données dans l'annexe A.

1.2.3 Modèle séparable

Un modèle simple qui prend en compte l'aspect plat des boîtes quantiques est le modèle séparable [18–20]. Il s'applique aussi bien à une boîte isolée qu'à un ensemble de boîtes. Il s'avère en particulier très utile pour interpréter les résultats obtenus par la diagonalisation numérique dans la section précédente. Dans le modèle séparable, si l'on se restreint au cas de la symétrie cylindrique, les fonctions d'onde sont écrites sous la forme suivante :

$$\Psi(\vec{\rho}, z) = e^{im\theta}\ \psi(\rho, z) \tag{1.7}$$

et le Hamiltonien correspondant est :

$$H = -\frac{\hbar^2}{2}\Big(\frac{1}{m_z}\frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{1}{m_\perp}\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial \rho}\rho\frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{1}{m_\perp}\frac{1}{\rho^2}\frac{\partial^2}{\partial \theta^2}\Big) + V(\rho, z) \tag{1.8}$$

où $m = 0$ pour les états de type S, $m = \pm 1$ pour les états de type $P, \ldots$. $m_z, m_\perp$ sont les masses effectives dans la direction de croissance et dans le plan. On suppose ensuite que les solutions en ρ et en z sont séparables :

$$\psi(\rho, z) = N\ y_m(z)\ f_m(\rho) \tag{1.9}$$

où N est un coefficient de normalisation, $f_m(\rho)$ une fonction prescrite de ρ qui dépend de quelques paramètres variationnels $(\lambda_1, \lambda_2, \ldots)$ et $y_m(z)$ une fonction qui décrit la cinématique du porteur suivant la direction de croissance. En intégrant sur les variables radiales, on arrive à un problème à une dimension de la forme suivante :

$$\Big(-\frac{\hbar^2}{2m_z}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}z^2} + \langle T_\perp\rangle_m + V_m(z)\Big)y_m(z) = E_m\ y_m(z) \tag{1.10}$$

où les termes cinétique et potentiel sont donnés par :

$$\langle T_\perp\rangle_m = -\frac{\hbar^2}{2m_\perp}\int_0^{+\infty} 2\pi\ \mathrm{d}\rho\ \rho\ f_m(\rho)\Big(\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\rho^2} + \frac{1}{\rho}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho} - \frac{m^2}{\rho^2}\Big)f_m(\rho) \tag{1.11}$$

$$V_m(z) = \int_0^{+\infty} 2\pi\ \mathrm{d}\rho\ \rho\ V(\rho, z)|f_m(\rho)|^2 \tag{1.12}$$

L'équation de Schrödinger à une dimension (1.10) pour le mouvement en z est résolue numériquement. Par conséquent, les valeurs propres du problème découplé dépendent de $\lambda_1, \lambda_2, \ldots$. Le minimum représente la meilleure solution séparable.

Pour illustrer ce qui est écrit ci-dessus, nous discutons le cas des états $S : m = 0$. Un choix simple consiste à prendre une gaussienne pour f_0 qui est un oscillateur harmonique à deux dimensions :

$$f_0(\rho) = \exp\Big(-\frac{\rho^2}{2\lambda^2}\Big) \tag{1.13}$$

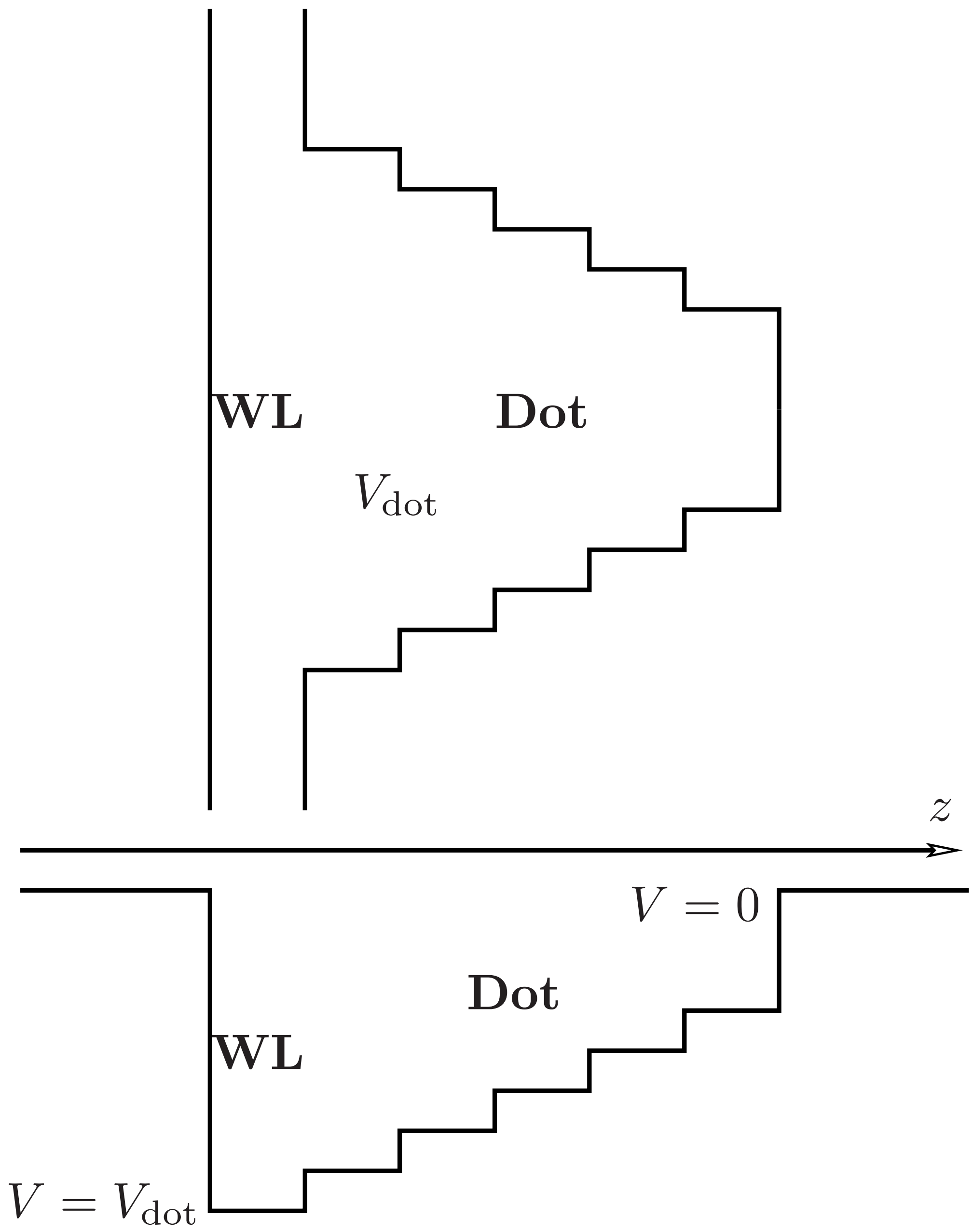


FIG. 1.8 – En haut : la potentiel discrétisé d'une boîte quantique le long de l'axe de croissance. En bas : le potentiel effectif V_m pour le mouvement en z déduit des équation 1.13 et 1.12.

La figure 1.8 illustre le potentiel effectif pour le mouvement en z. Ce potentiel est une fonction de la largeur de gaussienne λ. On note que le potentiel effectif dans la couche de mouillage vaut toujours V_{dot}, ce qui caractérise la dimension infinie (ou très grande si aucune autre boîte ne se trouve dans son approximité) dans le plan de la couche de mouillage.

La plus petite valeur propre (correspondant à λ_{min}) correspond à l'état fondamental lié de symétrie S. Cependant, l'équation de Schrödinger pour le mouvement en z avec $V_{m=0}(z, \lambda_{min})$ admet des solutions excitées qui peuvent être liées à la boîte quantique ou appartenir au continuum. Dans le dernier cas, la procédure de découplage revient à produire une série particulière d'états du continuum, ceux qui sont liés et n'ont pas de noeud dans la direction radiale mais sont étendus le long de l'axe de croissance. Ces solutions supplémentaires sont à considérer prudemment car elles ne sont pas les solutions fondamentales du problème. Néanmoins, si le problème était vraiment séparable (c'est-à-dire si $V(\rho, z) = V_1(\rho) + V_2(z)$), le paramètre d'essai λ n'apparaîtrait pas dans l'équation (1.10) pour le mouvement en z (excepté via une constante égale à l'énergie cinétique du mouvement radial). Le mouvement calculé par le modèle séparable serait exact et pour le même mouvement radial, on aurait une infinité de solution en z. Par conséquent, dans le cas des objets plats comme les boîtes quantiques où le Hamiltonien est considéré quasi-séparable, les états excités du problème effectif pour le mouvement en z (1.10) pourront être proches des états quantiques actuels du problème. Comme on le verra dans le chapitre 2, ils sont très utiles pour interpréter les résultats numériques.

Les fonctions d'essai gaussiennes décrites ci-dessus représentent les états $1S$ comme dans la convention de physique atomique pour des atomes "plats" à deux dimensions. Pour obtenir les états excités qui ont des noeuds dans le plan, on multiplie la gaussienne par un polynôme :

$$f_{nm}(\rho) = N_{nm}\ \rho^{|m|}\ P_{nm}(\rho^2) \exp\Big(-\frac{\rho^2}{2\lambda_{nm}^2}\Big) \tag{1.14}$$

$$P_{nm}(\rho^2) = \sum_{p=0}^{n-1} a_{p,nm}\rho^{2p} \tag{1.15}$$

Les quantités N_{nm} sont des constantes de normalisation. En ce qui concerne les coefficients du polynôme, le premier, $a_{p,nm}$, vaut 1 et les autres sont déterminés en imposant la condition d'orthogonalité sur les fonctions d'onde qui ont la même symétrie, mais une valeur différente pour le nombre quantique n :

$$\langle f_{nm}(\rho) | f_{n',m}(\rho)\rangle = 0 \qquad\qquad n' < n \tag{1.16}$$

De cette façon, les coefficients $a_{p,nm}$ sont déterminés en fonction des largeurs des gaussiennes n. En effet, la fonction radiale $f_{nm}(\rho)$ dépend d'un seul paramètre variationnel λ_{nm} parce que les autres sont déjà connus. En commençant par la procédure de minimisation pour l'état $1m$, il est possible de générer consécutivement toute la série des états liés nm. Pour chaque paire d'indices (n, m), on introduit un indice supplémentaire pour les états propres du problème à une dimension (1.10) :

$$\Psi_{nmj}(\rho, z, \theta) = e^{im\theta}\ f_{nm}(\rho)\ y_{nmj}(z) \tag{1.17}$$

Largeur de la couche de mouillage (Å)	10
Rayon de base R_b (Å)	100
Rayon de sommet R_t (Å)	80
Hauteur de la boîte (Å)	30
Potentiel de confinement (meV)	413
Masse effective (m_e)	0,067

TAB. 1.1 – Paramètres pour un exemple de boîte considéré.

Les états Ψ_{nmj} sont caractérisés par trois nombres quantiques. $n-1$ est le nombre de zéros dans le plan, m indique la symétrie circulaire de l'état $(S, P, D, \dots)$ et $j-1$ est le nombre des zéros dans la direction z.

1.3 Bibliothèque numérique DiagHam

La bibliothèque DiagHam est un ensemble des classes en C++ qui peuvent être utilisées pour la diagonalisation exacte des systèmes quantiques variés. Elle fournit aussi de nombreux programmes pour différents systèmes comme effet Hall quantique fractionnaire, boîte quantique, système de spin quantique. Initialement écrite par N. Regnault au LPA-ENS, elle contenait des classes d'objets mathématiques comme matrice, vecteur, ... ainsi que des programmes sur l'effet Hall quantique fractionnaire et des systèmes de spin quantique. Au cours de cette thèse, j'ai développé les activités boîte quantique pour cette bibliothèque.

Tous les calculs effectués au cours de cette thèse ont été basés sur cette bibliothèque. Toutes les informations sur cette bibliothèque peut être trouvée jusqu'à ce jour à l'adresse : *http ://www.lpa.ens.fr/∼regnault/diagham*.

Le schéma 1.9 montre l'organisation et le fonctionnement des différentes classes dans la partie boîte quantique de cette bibliothèque. Possédant les propriétés puissantes de C++, ces classes ont une flexibilité remarquable et sont facilement recyclables. Une documentation d'utilisation en anglais est également disponible. La bibliothèque est diffusée sous la licence "General Public License" de GNU.

1.4 Comparaisons des différentes méthodes

Nous terminons ce chapitre par une comparaison des différentes méthodes sur un calcul de l'état fondamental électronique pour un exemple de boîte InAs/GaAs de la forme d'un cône tronqué dont les paramètres sont donnés dans le tableau 1.1.

Nous avons calculé l'énergie de l'état fondamental électronique de cette boîte par trois méthodes. La première est la méthode matricielle dans laquelle une base de 12000 fonctions de Fourier-Bessel a été utilisée. Le deuxième calcul a été fait dans le cadre du modèle séparable. La méthode variationnelle avec une fonction d'essai gaussienne dans les trois directions donne la troisième valeur d'énergie. Le tableau 1.2 montre les résultats obtenus par ces trois méthodes.

Nous voyons que la méthode matricielle donne le meilleur résultat tandis que les méthodes moins sophistiquées comme le modèle séparable ou l'approche variation-

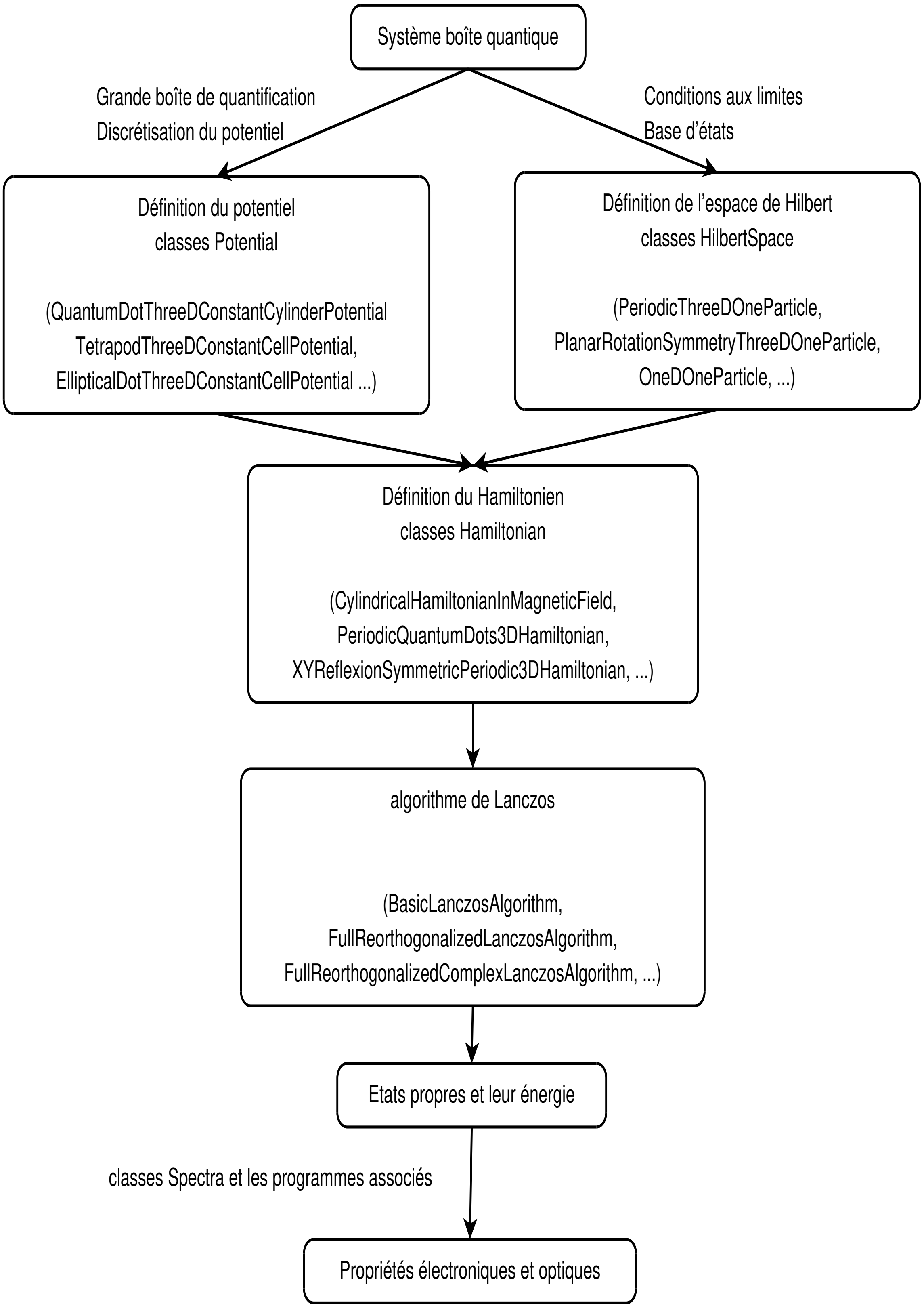


FIG. 1.9 – L'organisation et le fonctionnement de la bibliothèque DiagHam.

Méthode	Energie de l'état fondamental (meV)
Matricielle	-250
Modèle séparable	-247
Variationnnelle	-245

TAB. 1.2 – Énergie de l'état fondamental électronique calculée par trois méthodes différentes. L'origine de l'énergie est prise au bas de conduction du GaAs.

nelle donnent des résultats satisfaisants. La première a l'avantage de nous donner un spectre complet du problème mais ses résultats sont plus complexes à analyser. Les deux autres extraient les informations pré-sélectionnées. La méthode du modèle séparable a été notamment utilisée pour interpréter un nombre significatif de résultats dans le chapitre 2 de cette thèse.

1.5 Conclusions

Dans ce chapitre, nous avons décrit brièvement l'évolution des propriétés électroniques avec les degrés de confinement : du massif au confinement tridimensionnel des boîtes quantiques. Les méthodes de calcul pour la structure électronique des boîtes quantiques en utilisant le formalisme de masse effective à une bande ont également été présentées. Une comparaison entre ces méthodes montre que la méthode matricielle donne le meilleur résultat mais le modèle séparable permettra d'extraire des informations utiles pour interpréter les résultats numériques. Les calculs au cours de cette thèse ont été effectués intégralement par la bibliothèque DiagHam, un ensemble de classes et programmes écrits entièrement en C++. On verra dans les prochains chapitres les applications de cette bibliothèque à l'étude de différents confinements non-usuels.

Bibliographie

[1] L. Esaki et R. Tsu, IBM J. Res. Dev. **14**, 61 (1970).

[2] I. Stranski et L. Krastanov, Sitzungsber Akad. Wiss. Wien **146**, 797 (1938).

[3] D. Leonard, M. Krishnamurthy, C. M. Reaves, S. P. Denbaars, et P. M. Petroff, Appl. Phys. Lett. **63**, 3203 (1993).

[4] J. M. Moison, F. Houzay, F. Barthe, L. Leprince, E. André, et O. Vatel, Appl. Phys. Lett. **64**, 196 (1994).

[5] J. Y. Marzin, J. M. Gérard, A. Izraël, D. Barrier, et G. Bastard, Phys. Rev. Lett. **73**, 716 (1994).

[6] N. Grandjean et J. Massies, Appl. Phys. Lett. **72**, 1078 (1998).

[7] P. Petroff, A. Lorke, et A.Imamoglu, Physics Today **46**, 54 (2001).

[8] B. Daudin, F. Widmann, G. Feuillet, Y. Samson, M. Arlery, et J.-L. Rouvière, Phys. Rev. B **56**, R7069 (1997).

[9] V. Le-Thanh, P. Boucaud, D. Débarre, D. Bouchier, et J.-M. Lourtioz, Phys. Rev. B **58**, 13115 (1998).

[10] O. Stier, *Electronic and optical properties of quantum dots and wires* (Berlin Studies in Solid State Physics. Wissenshaft & Teknik. Verlag., Berlin, 2001).

[11] O. Stier, M. Grundmann, et D. Bimberg, Phys. Rev. B **59**, 5688 (1999).

[12] A. J. Williamson et A. Zunger, Phys. Rev. B **59**, 15819 (1999).

[13] A. J. Williamson et A. Zunger, Phys. Rev. B **61**, 1978 (2000).

[14] S. Lee, L. Jönsson, J. W. Wilkins, G. W. Bryant, et G. Klimeck, Phys. Rev. B **63**, 195318 (2001).

[15] S. Hameau, Y. Guldner, O. Verzelen, R. Ferreira, G. Bastard, J. Zeman, A. Lemaître, et J. M. Gérard, Phys. Rev. Lett. **83**, 4152 (1999).

[16] S. Hameau, J. N. Isaia, Y. Guldner, E. Deleporte, O. Verzelen, R. Ferreira, G. Bastard, J. Zeman, et J. M. Gérard, Phys. Rev. B **65**, 85316 (2002).

[17] G. Bastard, *Wave mechanics applied to semiconductor heterostructures* (Les éditions de physique, Les Ulis, 1996).

[18] A. Vasanelli, Thèse de doctorat, Université de Paris VI (2002).

[19] A. Vasanelli, R. Ferreira, H. Sakaki, et G. Bastard, Sol. Stat. Com. **118**, 459 (2001).

[20] R. Ferreira et G. Bastard, Appl. Phys. Lett. **74**, 2818 (1999).

Chapitre 2

Continuum électronique des boîtes quantiques

Dans ce chapitre, nous nous intéressons à la structure des états électronique du continuum des boîtes quantiques InAs/GaAs. Nous allons montrer que la forme plate des boîtes quantiques réorganise très fortement les états du continuum. En fait, c'est la caractéristique dominante qui influence la réponse infrarouge lointain [1–8]. Cette réponse est associée à l'absorption de photon de l'état fondamental vers les états du continuum. Nous montrerons en particulier qu'un fort champ magnétique appliqué parallèlement à l'axe de croissance mène à la formation des états quasi-Landau, comme attendu. Cependant, cette quantification est presque invisible dans la réponse infrarouge lointaine lorsque la lumière est polarisée suivant l'axe de croissance. Ensuite, nous examinons les spectres d'absorption avec la polarisation dans le plan. Nous montrons que la force d'oscillateur n'est pas répartie uniformément sur les deux transitions lié-lié. Finalement, nous montrerons que l'on peut concevoir des photo-détecteurs d'InAs/GaAs qui présentent une très forte dépendance de leur photo-absorption intra-bande par rapport à la polarisation dans le plan.

2.1 Modèle

Dans ce chapitre, nous étudions l'effet d'un champ magnétique vertical sur les boîtes quantiques InAs/GaAs. Si l'on ne tient pas compte de contraintes et d'interdiffusion, le Hamiltonien effectif est :

$$H(B) = \frac{p^2}{2m^*} + V(\rho, z) + \frac{1}{2}\omega_c L_z + \frac{1}{8}m^*\omega_c^2\rho^2 \tag{2.1}$$

où m^* est la masse effective de l'électron (prise comme constante), $V(\rho, z)$ le potentiel de confinement et $\omega_c = eB/m^*$ la fréquence de cyclotron. Dans cette formule, nous supposons implicitement que la forme de la boîte est à symétrie de révolution autour de $0z$, d'où vient la dépendance uniquement en ρ et z du potentiel. B est l'amplitude du champ magnétique appliqué parallèlement à la direction de croissance z. Les états propres de H peuvent être choisis comme des états propres de L_z avec la valeur propre $m\hbar$: ils sont désignés $S, P_+, P_-, D_+, D_-, \ldots$. Un seul plan de boîtes quantiques absorbe peu de lumière. Par conséquent, afin d'augmenter l'absorption, on utilise très souvent un échantillon contenant un ensemble de plans de boîtes quantiques. Quand une petite périodicité (disons $d \sim 10$ nm) est utilisée [7], un alignement vertical des boîtes quantiques appartenant à des plans différents est obtenu dû à leur distribution de contrainte [9]. Avec cet alignement, on structure effectivement le continuum des boîtes quantiques. Pour ces petites périodicités le long de z, nous devons chercher des solutions de Bloch de $H(B)$:

$$\psi_{k_z}(x, y, z + d) = e^{ik_z d} \cdot \psi_{k_z}(x, y, z) \tag{2.2}$$

Les énergies propres deviennent à leur tour des fonctions périodiques de k_z. La première zone de Brillouin sera l'intervalle $[-\pi/d, +\pi/d]$. L'action bénéfique de telle périodicité sur la photo-réponse de ces hétéro-structures périodiques a été étudiée récemment par Rebohle et al [7]. Un usage possible des plans de boîtes quantiques est la détection de la lumière infrarouge. Dans ce cas, les boîtes sont à modulation de dopage et la concentration de dopage est ajustée de telle manière que chaque boîte quantique contienne un électron. L'électron est initialement dans son état fondamental, de symétrie S. La lumière infrarouge lointain est absorbée par les boîtes quantiques, soit par des transitions lié-lié soit par des transitions lié-continuum.

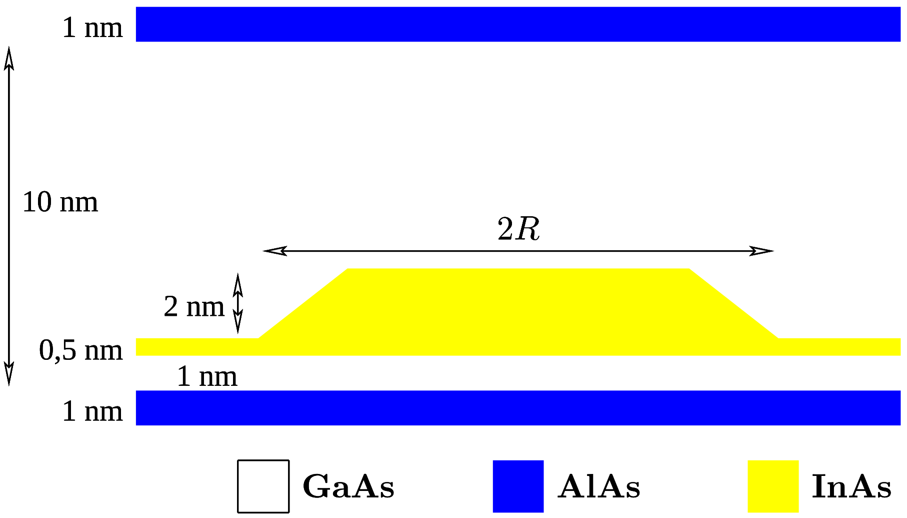


Fig. 2.1 – Représentation schématique d'une super-cellule contenant la boîte quantique et sa couche de mouillage. La périodicité est $d = 11$ nm. Le rayon de base est pris $R = 10,2$ nm sauf indication contraire.

Dans ce qui suit, on modélise les boîtes quantiques comme des cônes tronqués avec un rayon de base R, une hauteur $h = 2$ nm, un angle à la base 30° (voir fig. 2.1). La valeur de R est prise égale à 10,2 nm sauf indication contraire. Les cônes flottent sur une couche de mouillage de 2 mono-couches (0,5 nm).

Les états propres de Bloch et les valeurs propres pour une valeur de m donnée sont déterminés en projetant le Hamiltonien sur une grande base (voir section 1.2.1 pour plus d'information sur cette méthode matricielle). A champ nul, c'est une base de fonctions de Bessel pour le mouvement radial (voir l'annexe A.4). Ceci correspond à placer la boîte quantique dans une grande boîte cylindrique (de rayon 100 nm) et à imposer à la fonction d'onde de s'annuler à la surface latérale de la grande boîte. Des fonctions d'ondes planes de périodicité $d = 11$ nm sont utilisées pour décrire le mouvement vertical. A hauts champs magnétiques ($B \geq 10$ T), la base des fonctions de Bessel est remplacée par un ensemble de fonctions d'oscillateurs harmoniques bi-dimensionnels (états de Landau, voir l'annexe A.3). Globalement, nous avons utilisé 10.000 fonctions de base pour la base de Fourier-Bessel (21 fonctions d'ondes planes et 500 fonctions de Bessel) et 2.800 fonction de base pour la base Fourier-Landau (41 fonctions d'ondes planes et 70 fonctions d'oscillateurs harmoniques bi-dimensionnels). L'algorithme de Lánczos (voir l'annexe B) a été utilisé pour extraire les 30 premiers états propres. Tous les calculs utilisent un offset de bande de 0,4 eV entre GaAs et InAs [10] et 1,08 eV entre AlAs et GaAs [11]. La masse effective de la bande de conduction est prise égale à $0,07\ m_0$ (c'est-à-dire $\hbar\omega_c = 49,3$ meV si $B =$ 30 T) comme l'ont montrée des expériences de magnéto-absorption dans l'IR lointain effectuées sur des boîtes quantiques de dimensions comparables à celles étudiées ici [5]. L'origine des énergies est prise au bas de la bande de conduction de GaAs. Nous supposons que chaque boîte contient un électron venant des couches dopées. Nous supposons aussi que la température est suffisamment basse pour assurer que tous les électrons sont dans les états fondamentaux des boîtes (comme nous le verrons, la mini-bande fondamentale est sans dispersion en k_z dû à la forte localisation de l'état fondamental des boîtes quantiques individuelles). Par conséquent, tous les processus d'absorption sont dûs à l'excitation de ces électrons.

Deux polarisations sont possibles : soit le vecteur électrique $\vec{\mathcal{E}}$ de l'onde électro-magnétique est parallèle à l'axe z soit il est dans le plan. Dans le premier cas, seuls les états du continuum de symétrie S sont impliqués dans le processus d'absorption. Dans le deuxième cas, seuls les états de symétrie $P_\pm$ participeront à la perturbation électro-magnétique (symétrie cylindrique), ou plus généralement, les combinaisons linéaires de P_+ et P_- qui diagonalisent $H(B)$. Dans les prochaines sections, nous allons présenter le coefficient d'absorption en fonction de l'énergie de photon $\hbar\omega$ pour différentes polarisations :

$$\mathcal{P}(\hbar\omega) \propto \sum_\nu \frac{2m^*\omega^2}{\hbar\omega} |\langle S|\vec{\mathcal{E}}\cdot\vec{r}|\nu\rangle|^2 \delta(\epsilon_\nu - \epsilon_S - \hbar\omega) \tag{2.3}$$

où ν repère les états du continuum. Dans la pratique, on élargit la fonction de Dirac en la remplaçant par une fonction lorentzienne avec une largeur à mi-hauteur de 8 meV. La dispersion en taille des boîtes quantiques est connue pour élargir des pics d'absorption. Une moyenne de $\mathcal{P}$ sur la distribution de taille de boîtes quantiques (R, h) devrait être effectuée pour permettre une comparaison avec des expériences. Cependant, l'effet d'élargissement reste modeste pour des transitions de intra-bandes de conduction (quelques meV) et peut être facilement pris en compte [6] si nécessaire. Notons que, qualitativement, l'élargissement lorentzien de la delta de conservation de l'énergie conduit à des résultats analogues à ceux produits par les fluctuations de taille.

Afin de comprendre et interpréter les résultats numériques par la méthode matricielle, on utilisera également le modèle séparable (voir section 1.2.3) pour calculer les états $1S$ dont le mouvement radial est représenté par une fonction gaussienne $\exp(-\frac{\rho^2}{\lambda^2})$.

2.2 Niveaux d'énergie

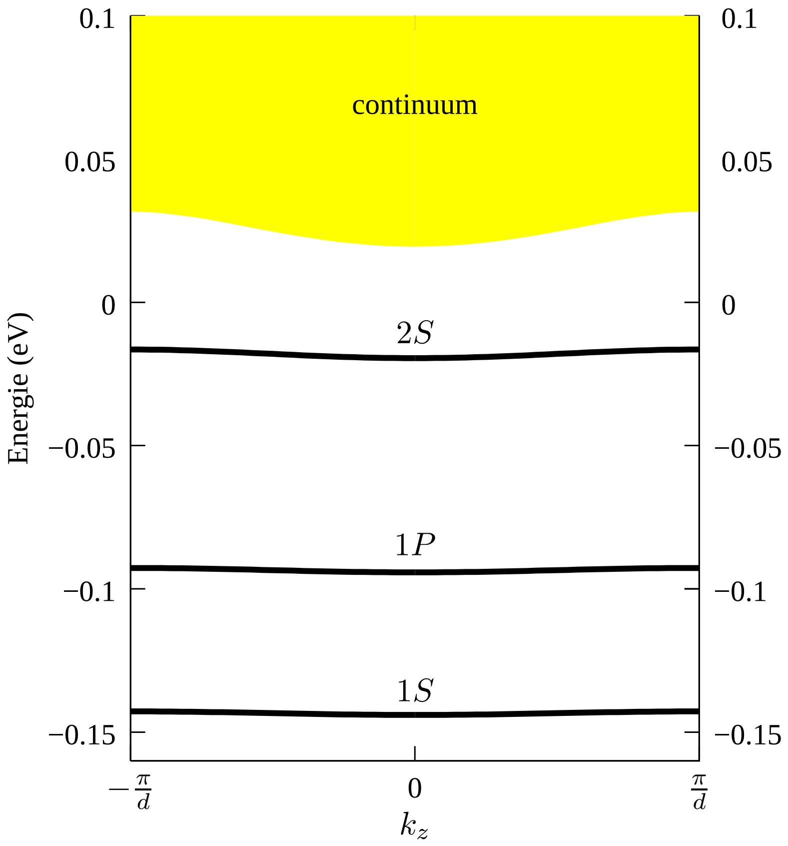


FIG. 2.2 – Diagramme des niveaux d'énergie de symétrie S et P pour notre échantillon à $B = 0$ obtenus par la méthode matricielle. Les états $1S$ et $1P$ sont sans noeud dans le plan pour le mouvement radial ($\rho \neq 0$). Les états $2S$ ont un noeud dans le plan pour le mouvement radial.

La figure 2.2 montre les niveaux d'énergie des états liés S, P ainsi que le continuum en fonction de k_z dans la première zone de Brillouin. Pour les symétries S et P, il existe quatre états liés : $1S$, $2S$ et deux états $1P$. La dispersion de ces états est très petite, ce qui montre qu'ils sont bien localisés dans la boîte le long de l'axe de croissance. En fait, ces états sont très semblables le long de l'axe z (ils seraient identiques dans un problème séparable) et ne diffèrent que dans le plan des couches. Notons que l'état $2S$ se trouve à 120 meV de l'état $1S$. Cependant, nous verrons dans la suite que ces états $2S$ ne sont pas visibles dans le spectre d'absorption pour la polarisation en z ($\vec{\mathcal{E}}$ parallèle à $\vec{z}$).

2.3 États de symétrie S et excitation polarisée en z

La figure 2.3 montre les niveaux calculés à $k_z = 0$ et $k_z = \pi/d$ pour des états de symétrie S à haut champ (ligne pleine). On voit deux états isolés à basses énergies suivis par une série de niveaux organisés en "fan charts" avec extrapolations à champ nul aux cercles pleins à $B = 0$. Le tableau 2.1 compare ces énergies avec les énergies issues de la même hétéro-structure mais sans boîtes quantiques. Plus précisément, l'InAs de la zone boîte est remplacé par du GaAs (mais pas dans la couche de mouillage) laissant inchangée la période du super-réseau. On peut noter que les énergies des deux hétéro-structures sont grosso modo les mêmes. Les lignes tiretées dans la figure 2.3 correspondent aux résultats du modèle séparable décrit précédemment. L'énergie fondamentale coïncide presque avec l'évaluation numérique matricielle, comme espéré. Nous avons aussi vérifié que le deuxième état isolé est en fait un état $2S$ dans le modèle séparable (non montré dans la figure 2.3).

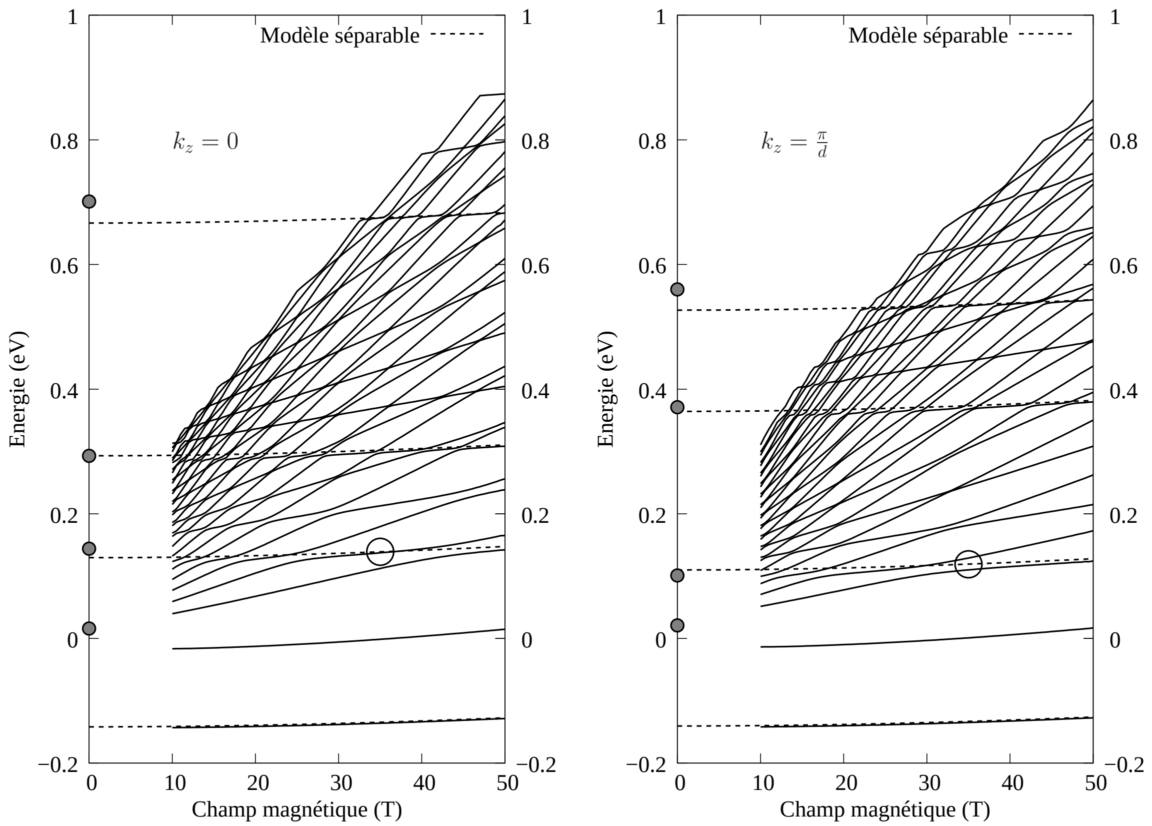


FIG. 2.3 – Les niveaux d'énergies calculés des états de symétrie S en fonction du champ magnétique. Les lignes tiretées sont les résultats du modèle séparable avec une fonction radiale gaussienne. A gauche : au centre de la première zone de Brillouin, à droite : à une extrémité de cette zone.

Il est très remarquable que quelques extrapolations du "fan chart" à $B = 0$ correspondent aux énergies des états séparables excités sans noeud dans la plan. Comparons l'approximation séparable du super-réseau considéré dans la figure 2.1 avec le super-réseau GaAs/AlAs/InAs (avec la couche de mouillage mais sans les boîtes quantiques). Ils diffèrent par la présence de deux termes dans le modèle séparable : un terme d'énergie cinétique $\hbar^2/(2m^*\sigma^2)$ (≈ 40 meV car σ est calculé à environ 45 Å) associée à la localisation latérale de l'électron dans la boîte et un terme d'énergie potentielle $\Delta V(z)$ qui s'étend de $-0,4$ eV à 0 eV (voir [12] ou la section 1.2.3).

Hétéro-structure	Energies (meV) à $k_z = 0$		
Structure usuelle (avec boîte)	16	144	293
Super-réseau (GaAs/AlAs/InAs)	19	151	293

Hétéro-structure	Energies (meV) à $k_z = \pi/d$		
Structure usuelle (avec boîte)	21	101	371
Super-réseau (GaAs/AlAs/InAs)	31	110	374

TAB. 2.1 – Comparaison des trois premières énergies de deux hétéro-structures : la structure avec boîte dont les énergies sont extrapolées à champ nul et le super-réseau GaAs/AlAs/InAs sans boîte. En haut : $k_z = 0$, en bas : $k_z = \pi/d$. $B = 0$T

Dans une approche perturbative, on devrait moyenner $\Delta V(z)$ sur les densités de probabilité associées avec des fonctions d'onde $c_{k_z=0}(z)$ ou $c_{k_z=\pi/d}(z)$ du super-réseau GaAs/AlAs/InAs (voir les lignes tiretées de la figure 2.4 pour $k_z = 0$). Pour l'état fondamental qui n'a pas de noeud, la contribution attractive $\langle c_{k_z=0}|\Delta V|c_{k_z=0}\rangle$ est beaucoup plus grande que l'énergie cinétique latérale. Par conséquent, le premier état du super-réseau GaAs/AlAs/InAs plonge de +19 meV à −142 meV. Évidemment, le premier ordre n'est pas suffisant pour prendre en compte quantitativement un tel effet de ΔV aussi important. En effet, nous notons dans la figure 2.4 que la fonction d'onde du modèle séparable est considérablement plus concentrée dans la boîte que l'état fondamental du super-réseau GaAs/AlAs/InAs. Quand on monte plus haut en énergie, le deuxième état du super-réseau GaAs/AlAs/InAs (+151 meV) a une fonction non-perturbée $c_{k_z=0}(z)$ qui a un noeud près du centre de la périodicité (fig. 2.5, panneau au milieu, ligne tiretée). L'effet de l'attraction ΔV est donc plus petit que pour l'état fondamental, ce qui résulte en un décalage beaucoup plus petit entre les deux modèles. Une explication similaire tient pour le troisième état. Concomitamment, nous voyons dans la figure 2.4 que les fonctions d'onde du modèle séparable deviennent de plus en plus proches de celles du super-réseau GaAs/AlAs/InAs.

L'apparition des états à basses énergies et des résonances à hautes énergies (lignes tiretées dans la figure 2.3) sont des exemples de la perturbation fortement attractive que les boîtes quantiques apportent au spectre d'énergie du super-réseau GaAs/AlAs/InAs. Inversement, le continuum de la boîte quantique d'InAs est restructuré par l'effet du super-réseau. La périodicité suivant z donne lieu à un spectre d'énergie qui est une fonction périodique de k_z et à des fonctions d'onde qui vérifient le théorème de Bloch (eq. 2.2). De plus, le bord des états du continuum passe de −15 meV pour une boîte quantique isolée (démarrage des états de la couche de mouillage) à vers +16 meV dans l'hétéro-structure périodique. Les états du continuum des boîtes quantiques et leurs couches de mouillage insérées dans une super-réseau de GaAs/AlAs sont donc uniques et ne peuvent être considérés simplement comme le résultat d'une perturbation d'un facteur (disons le super-réseau) par l'autre (la boîte quantique et sa couche de mouillage).

Nous montrons aussi dans la figure 2.4 les variations en z des densités de probabilité (lignes pleines) pour les trois premières solutions séparables à $B = 0$ et

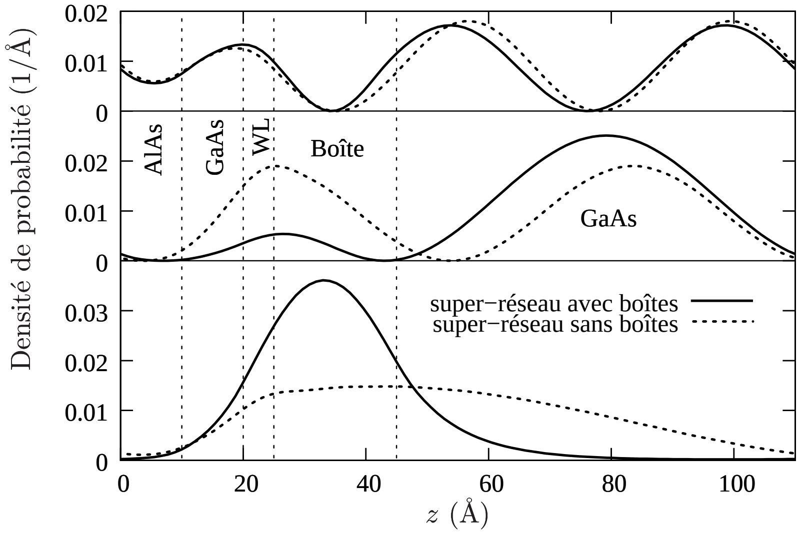


FIG. 2.4 – Densités de probabilité de trouver l'électron à z dans une cellule élémentaire pour les trois premières solutions séparables avec une fonction radiale gaussienne (lignes pleines) et les trois premiers états du super-réseau GaAs/AlAs/InAs (lignes tiretées) à $B = 0$ et $k_z = 0$. De bas en haut : de l'état fondamental au deuxième état excité. Les lignes verticales délimitent les différentes couches de l'hétéro-structure dans la figure 2.1.

$k_z = 0$:

$$P^{(n)}_{m=0}(z) = |y^{(n)}_{m=0}(z)|^2, \qquad n = 1, 2, 3, \dots \tag{2.4}$$

Ces densités de probabilité sont extrêmement proches des solutions numériques actuelles mais ont l'avantage de montrer des noeuds non-ambigus tandis que ces noeuds sont légèrement brouillés dans les solutions exactes à cause d'une non-séparabilité infime. En effet, quand $|\psi_{k_z}|^2$ est intégrée sur ρ et φ pour donner $P^{(n)}_{m=0}(z)$, l'intégration sur les variables planaires change une ligne de noeud en un minimum suivant l'axe z. Plus ces minima sont proches de zéro, plus le problème est séparable. $P^{(1)}_{m=0}$ n'a pas de noeud, $P^{(2)}_{m=0}$ a un noeud, $P^{(3)}_{m=0}$ a deux noeuds. On remarque que l'état fondamental est lié profondément à la boîte quantique mais une partie considérable des deux solutions excitées se trouve en dehors de la boîte quantique.

Si le modèle séparable était exact, les niveaux de Landau associés aux différents états en z se croiseraient entre eux aux champs qui vérifient :

$$n\hbar\omega_c + E_l = n'\hbar\omega_c + E_{l'} \tag{2.5}$$

où E_l sont les énergies propres du mouvement en z pour la même valeur de k_z.

On voit dans la figure 2.3 que ces croisements sont en fait remplacés par des anti-croisements. Leur amplitude donne une mesure de l'inexactitude du modèle séparable. Comme les boîtes quantiques sont plates, beaucoup d'états du continuum peuvent être analysés en termes d'états séparables. Les états prédits par le modèle séparable jouent un rôle important dans l'absorption optique comme nous le montrons dans la figure 2.5. Pour obtenir ces résultats, une sommation sur 60 valeurs

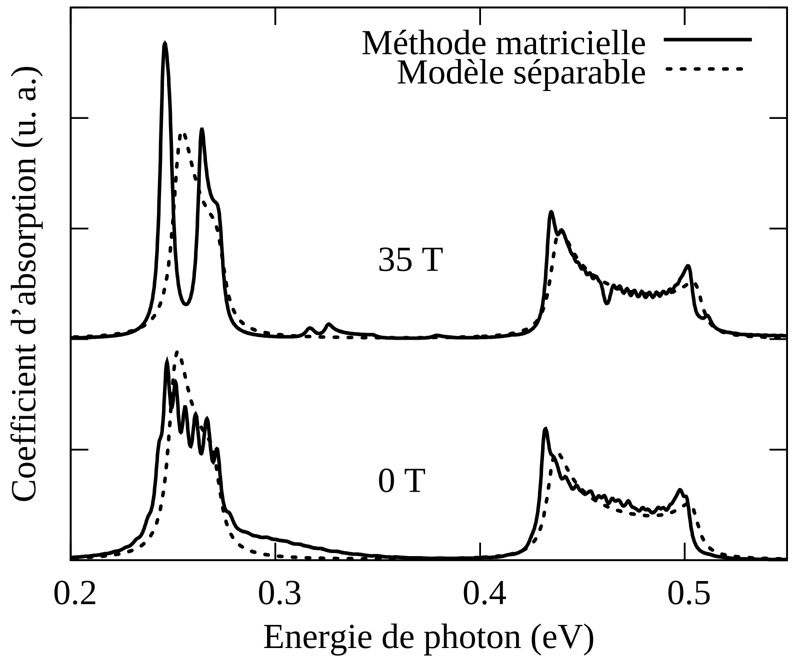


FIG. 2.5 – Coefficients d'absorption en fonction de l'énergie de photon à $B = 0$ et $B = 35$ T calculés par deux méthodes pour $\vec{\mathcal{E}}$ parallèle à $\vec{z}$.

de k_z des transitions conservant k_z entre les états initiaux et finaux a été effectuée. Dans le modèle séparable, pour une symétrie de rotation donnée ($1S$ dans ce travail) les états ont les mêmes extensions dans le plan. La coïncidence des deux coefficients d'absorption calculés pour la polarisation en z en utilisant un calcul 3D ou le modèle séparable à $B = 0$ ou $B = 35$ T prouve que l'état fondamental se couple préférentiellement avec les états du continuum qui ont la même extension dans le plan que lui. Par conséquent, le reste des états du continuum (qui présentent des variations quasi-linéaires avec B dans la figure 2.3) contribue très peu à l'absorption optique. On note que l'existence de deux pics dans le calcul 3D et un seul pic dans le modèle séparable pour l'intervalle d'absorption [0,2 eV−0,3 eV] à $B = 35$T est due à la non-séparabilité de la fonction d'onde totale, en correspondance avec les anti-croisements illustrés par les grands cercles dans la figure 2.3. On note ensuite que les spectres d'absorption reflètent la présence des mini-bandes. Leurs largeurs sont égales à $E_2(k_z = 0) - E_2(k_z = \pi/d) \approx 40$ meV et $E_3(k_z = \pi/d) - E_3(k_z = 0) \approx 80$ meV pour la première et la deuxième mini-bande du continuum respectivement (la largeur de la mini-bande fondamentale est négligeable). Le profil à deux pics reflète la singularité de la densité d'états aux extrémités d'une mini-bande. Notons que dans la figure 2.5 le modèle séparable décrit très bien le deuxième profil vers 0,45 eV tandis que les oscillations marquées dans les premiers profils sont dues à des effets de non-séparabilité.

Nous présentons sur la figure 2.6 les coefficients d'absorption calculés de $B = 0$ à $B = 35$ T pour une lumière polarisée suivant l'axe z. Le spectre à $B = 10$ T est coupé à 0,35 eV à cause des limites de calcul (annexe A.3). Nous voyons immédiatement

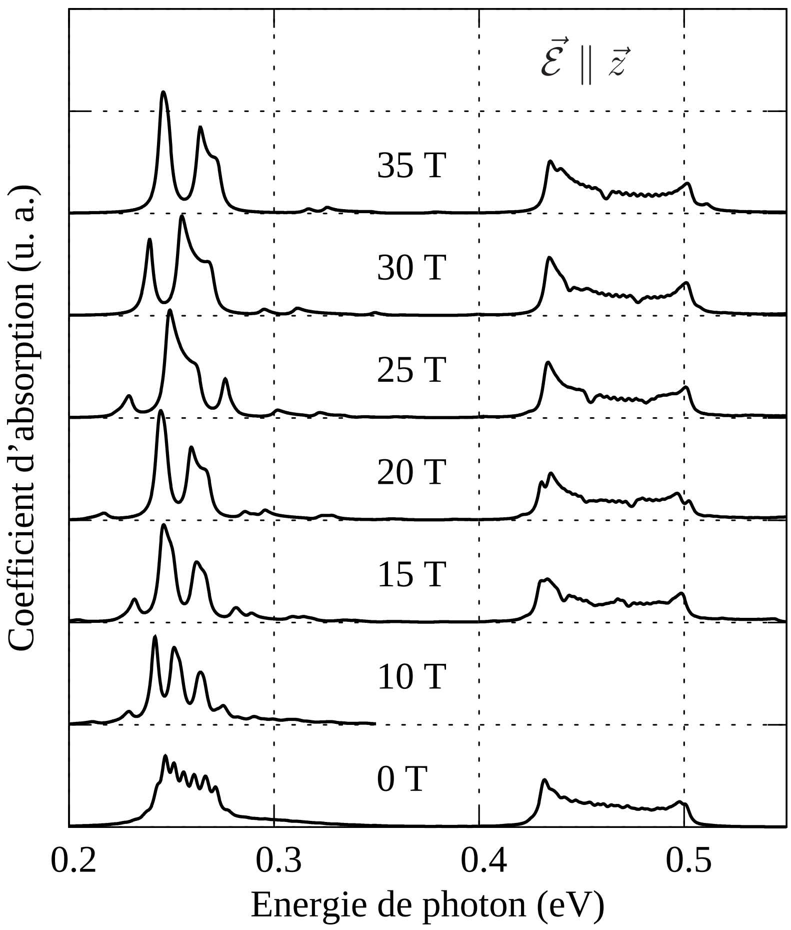


FIG. 2.6 – Coefficients d'absorption en fonction de l' énergie de photon de $B = 0$ à $B = 35$ T pour $\vec{\mathcal{E}}$ parallèle à $\vec{z}$. Le spectre à 10 T est coupé à 0,35 eV à cause des limites de calcul.

que le spectre est presque indépendant du champ magnétique en dépit d'un aspect de quasi-"fan chart" des niveaux du continuum (figure 2.3). L'absorption a lieu entre l'état initial fortement localisé et les états du continuum qui ressemblent à l'état fondamental dans le plan des couches, c'est-à-dire les états séparables excités. Ces états forment un continuum 1D avec un mouvement gelé dans le plan et un mouvement périodique en z. Les transitions vers les autres états du "fan chart" dans la figure 2.3 sont très faibles à cause de l'orthogonalité entre les états initiaux et finaux. L'insensibilité de l'absorption à un champ magnétique vertical externe est une conséquence directe de la quasi-séparabilité des mouvements planaire et vertical. A cet égard, les boîtes quantiques se comportent comme les puits unidimensionnels étroits. Dans ce système, il est connu que pour $\vec{\mathcal{E}}$ et $\vec{B} \parallel \vec{z}$, l'absorption intersousbande est en première approximation indépendante de B. S'il n'y avait pas de la non-parabolicité de bande et/ou le désaccord de masse effective, il y aurait un découplage exact entre les mouvement vertical et planaire et donc un parallélisme exact entre le n-ème niveau de Landau de toutes les sous-bandes du puits quantique.

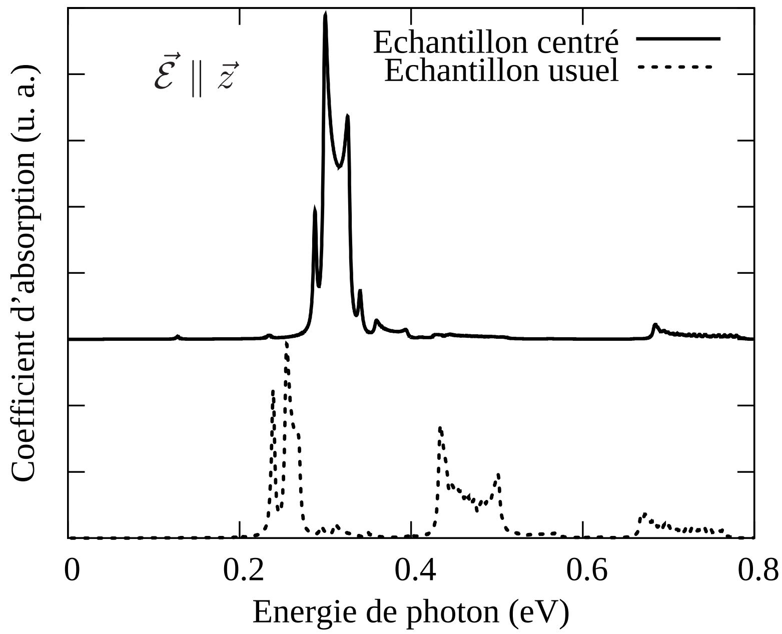


FIG. 2.7 – Coefficients d'absorption en fonction de l'énergie de photon à $B = 30$ T pour $\vec{\mathcal{E}}$ parallèle à $\vec{z}$ pour l'échantillon usuel et un échantillon centré (voir le texte). La ligne pleine a été déplacée en haut pour la clarté.

La figure 2.7 compare les coefficients d'absorption calculés pour deux échantillons : l'échantillon usuel que nous avons étudié jusqu'à maintenant et un échantillon centré dans lequel la boîte quantique a été placée au centre de la période. En comparant les deux spectres, on constate que le deuxième profil d'absorption a disparu tandis que le premier a été renforcé. En plaçant la boîte quantique, un objet plat, au centre de la cellule élémentaire, nous espérions restaurer la symétrie quasi-miroir par rapport au centre de la période, donc rendre les transitions de l'état fondamental (qui est pair en z) vers les états excités pairs presque interdites dans la polarisation z. C'est bien ce qui est réalisé.

Hautes boîtes quantiques

En pratique, les boîtes quantiques d'InAs/GaAs ont une hauteur qui va de 2 nm à 5 nm [13]. La figure 2.8 montre les coefficients d'absorption en polarisation z pour un échantillon de super-réseau de boîtes quantiques dont la hauteur $h = 5$ nm. L'absorption par les transitions lié−continuum est très bien décrite par le modèle séparable (les pics au-dessus de 0,2 eV). Il apparaît en plus un pic d'absorption vers 0,15 eV. Ce pic résulte des transitions $1S-2S$ qui sont normalement interdites dans le modèle séparable car les parties planaires des fonctions d'onde $1S$ et $2S$ sont orthogonales entre elles dans ce modèle. Cependant, quand on augmente la hauteur de la boîte, le potentiel de confinement devient moins séparable (l'angle de base de la boîte est maintenu constant et égal à 30°). Il en résulte la possibilité d'observer des transitions interdites dans les boîtes plus hautes.

Pour conclure cette section, nous soulignons que les pics d'absorption calculés ci-dessus sont forts et observables dans des expériences. A un champ magnétique B donné, la somme des forces d'oscillateur des transitions de l'état fondamental aux états du continuum calculés s'élève à $0,8$. Cette valeur est proche de la valeur de saturation ($=1$) annoncée par la règle de somme de Thomas-Kuhn-Reich (cette règle est démontrée dans l'annexe D). Avec une structure qui a 20 couches et une densité de boîte quantique latérale de $5 \times 10^{10}\text{cm}^{-2}$, ces pics ont été observés dans des expériences de photo-courant [7] ou d'absorption [4].

2.4 États de symétrie P et excitation polarisée dans le plan

Dans cette section, nous étudions l'absorption par les excitations polarisées dans le plan. Cette polarisation couple l'état fondamental de symétrie S avec les états de symétrie P. Nous commençons d'abord par une étude des transitions lié−lié en présence d'un champ magnétique vertical. Nous montrerons ensuite l'évolution du spectre d'absorption lié−continuum dans le cas où l'on diminue la taille latérale des boîtes quantiques.

2.4.1 Transitions lié-lié en présence d'un champ magnétique vertical

On considère toujours une boîte ronde sans effets de contraintes ni inter-diffusion, on a donc toujours le même Hamiltonien 2.1 :

$$H(B) = \frac{p^2}{2m^*} + V(\rho, z) + \frac{1}{2}\omega_c L_z + \frac{1}{8} m^* \omega_c^2 \rho^2$$

La dégénérescence des états P est brisée par ce champ : ils se transforment en états P_+ et P_-. Leur fonction d'onde est donnée par $\exp(i\theta)\ \psi_{P_+}(\rho, z)$ et $\exp(-i\theta)\ \psi_{P_-}(\rho, z)$

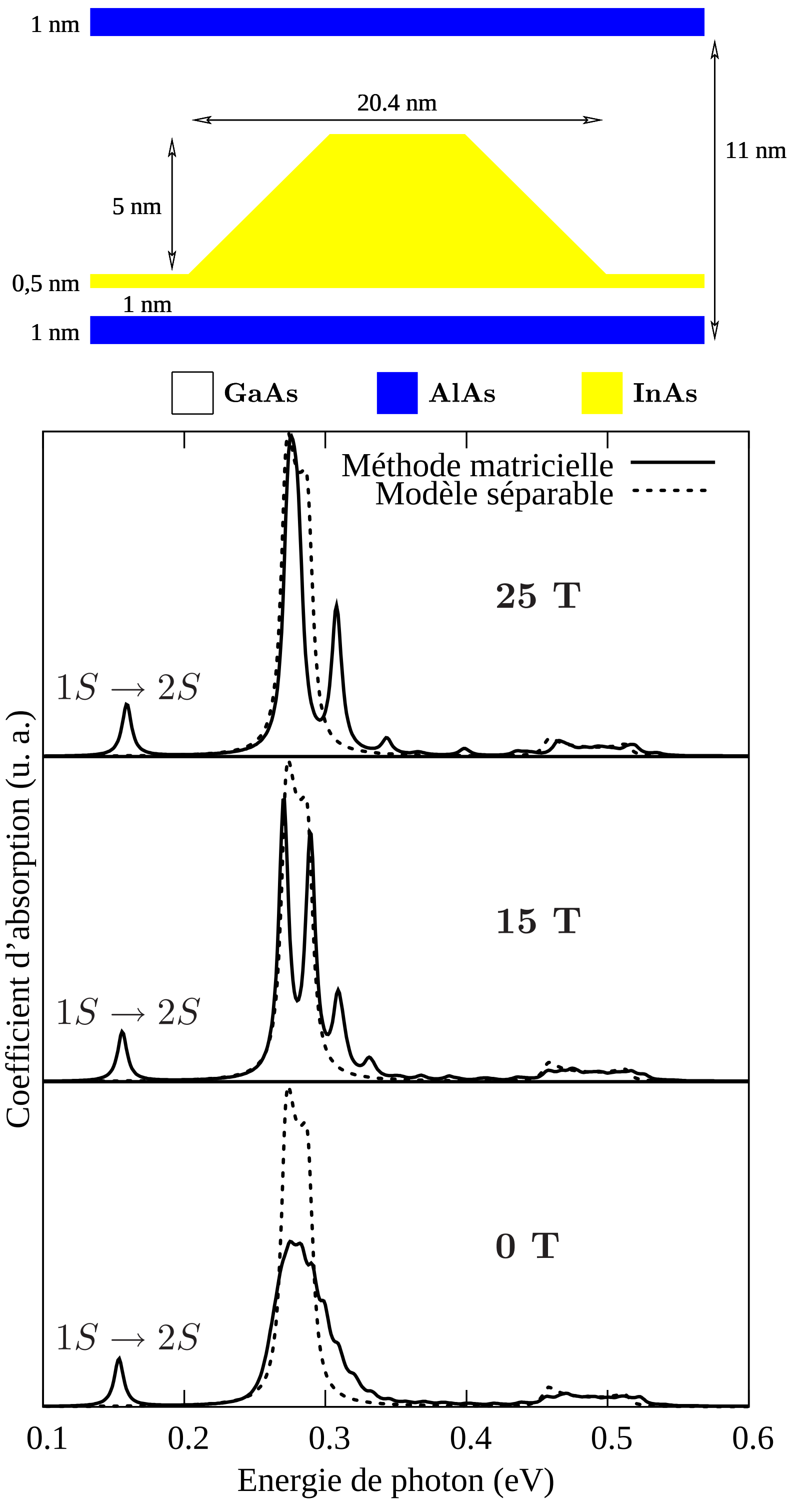


FIG. 2.8 – Coefficients d'absorption en polarisation z (figure en bas) pour un échantillon ressemblant à celui de la figure 2.1 mais avec des boîtes quantiques de hauteur $h = 5$ nm (figure en haut) à champ nul, $B = 15$ T et $B = 25$ T.

respectivement. Les énergies propres de ces états sont obtenues par la résolution de l'équation aux valeurs propres suivante :

$$\Big(\frac{p^2}{2m^*} + V(\rho,z) + \frac{1}{8}m^*\omega_c^2\rho^2\Big)\ \psi_{P_\pm}(\rho,z) = (E_{P_\pm} \mp \frac{1}{2}\hbar\omega_c)\ \psi_{P_\pm}(\rho,z)$$

Deux résultats découlent de l'équation ci-dessus. Premièrement, pour un état P_+ donné, on peut toujours trouver un état P_- dont la fonction d'onde ne diffère de la fonction d'onde de l'état P_+ que par la partie angulaire ($\exp(+i\theta)$ et $\exp(-i\theta)$) et vice versa. Cette correspondance est une conséquence directe de la symétrie cylindrique du Hamiltonien. Les états P_+ et P_- sont classés en paires : $\exp(\pm i\theta)\psi_P(\rho,z)$. Deuxièmement, l'écart en énergie entre un état P_+ et un état P_- dans chaque paire est égal à $\hbar\omega_c(=\hbar eB/m^*)$ (on suppose que le champ magnétique est orienté de manière que $E_{P_+} > E_{P_-}$).

Quand on calcule la force d'oscillateur d'une transition $S-P$ pour la polarisation dans le plan, on doit prendre certaines précautions : soit on utilise la formule avec l'opérateur $\hat{r}$ (eq. D.4) soit on utilise la formule avec l'opérateur $\hat{p}$ (eq. D.1) mais dans ce cas $\hat{p}$ est remplacé par $\hat{p}-q\hat{A}$ (voir l'annexe D). La formule avec l'opérateur $\hat{r}$ est plus simple :

$$OS_{0\to f} = \frac{2m(\omega_f-\omega_0)}{\hbar}|\langle 0|\vec{\epsilon}.\hat{r}|f\rangle|^2 \tag{2.6}$$

Pour une paire d'états $P_\pm$, le facteur $|\langle 0|\vec{\epsilon}.\hat{r}|f\rangle|^2$ est le même. La force d'oscillateur est donc proportionnelle à la différence d'énergie $(E_{P_\pm}-E_S)$. Comme l'énergie de l'état P_+ est supérieure que celle de l'état P_-, la force d'oscillateur de la transition vers l'état P_+ est plus grande que celle vers l'état P_-. La figure 2.9 montre le coefficient d'absorption pour la polarisation dans le plan. L'amplitude des deux pics d'absorption sont dans le rapport des énergies de transition : 75meV/25meV $\approx$ 3.

Il est important de souligner que les transitions lié-lié ci-dessus occupent encore presque toute la force d'oscillateur. Pour un k_z donné à $B = 30$ T, la somme des forces d'oscillateur de l'état fondamental vers les deux états $P_\pm$ est égale à $\sim 0,985$, proche de la valeur de saturation $(=1)$.

Comparaison avec les expériences

La figure 2.10 montre les spectres de transmission obtenus par V. Preisler au LPA-ENS pour des plans de boîtes quantiques InAs/GaAs sous un champ magnétique vertical pour deux polarisations dans le plan. On voit que les spectres ne sont pas identiques, ce qui veux dire que la boîte n'est pas circulaire. Il est bien connu que les directions $\vec{x} \parallel [110]$ et $\vec{y} \parallel [1\bar{1}0]$ des boîtes quantiques InAs/GaAs ne sont pas identiques [5, 6]. Certains groupes essaient de modéliser cette dissymétrie par une anisotropie de forme (elliptique) [5] ou par l'effet de contrainte et piézo-électricité [10, 14]. Dans les deux cas, les deux états P se divisent en un état P_x et un état P_y (à champ nul) qui ont un noeud dans une direction (x ou y). A champ nul, seul un des deux états est optiquement actif pour une polarisation x ou y. Ceci est vérifié par les résultats expérimentaux de la figure 2.10 : la transition $S-P_x$ (respectivement $S-P_y$) correspond au pic d'absorption pour $\vec{\mathcal{E}} \parallel \vec{x}$ (respectivement $\vec{\mathcal{E}} \parallel \vec{y}$) à $B=0$. Quand on ajoute le champ magnétique, les effets du champ et de la

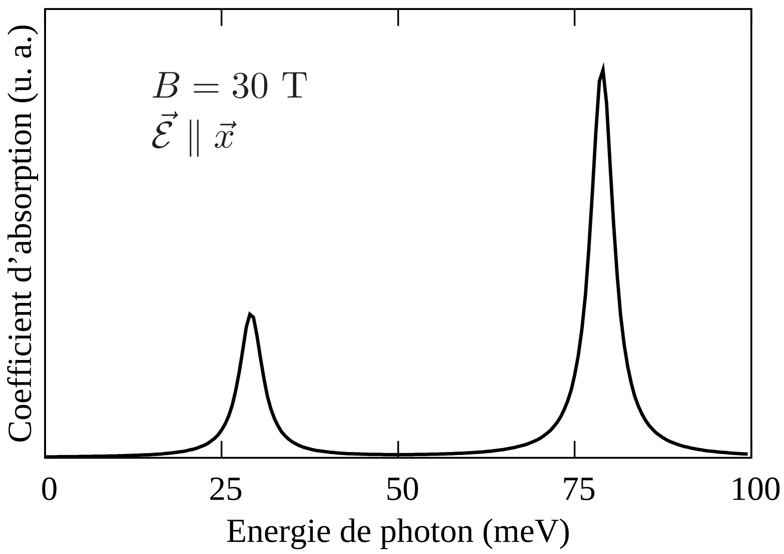


Fig. 2.9 – Coefficient d'absorption des transitions lié-lié pour la polarisation dans le plan et le champ magnétique $B = 30$ T.

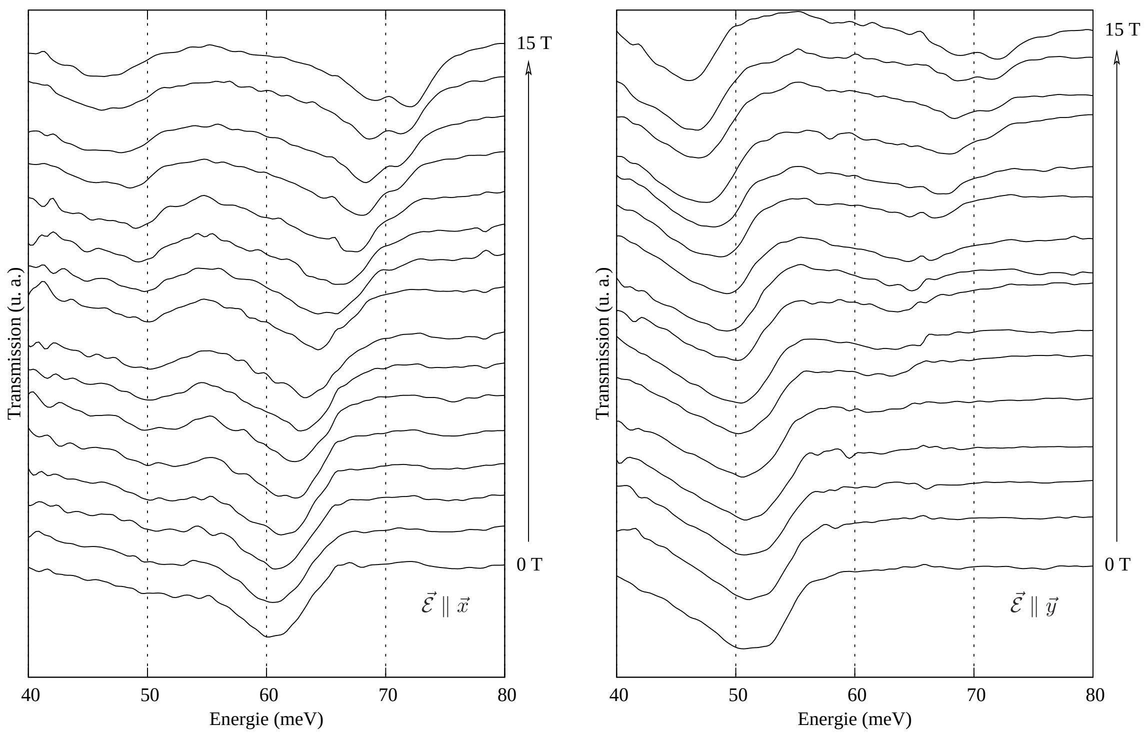


Fig. 2.10 – Spectres de transmission sous champ magnétique vertical pour deux polarisations dans le plan. A gauche, la lumière est polarisée suivant l'axe x, à droite l'axe y. Les boîtes quantiques InAs/GaAs sont dopées n. D'après V. Preisler et al (LPA-ENS).

forme sont mélangés. Le champ a pour effet de renforcer le pic d'absorption à haute énergie et d'écarter les deux pics d'absorption (clivage de Zeeman). Le deuxième effet se voit facilement tandis que le premier effet commence à apparaître à fort champ magnétique (vers 15 T et au-dessus). Dans la figure de gauche, le deuxième pic correspond à une absorption toujours plus forte que le premier. Dans la figure de droite, il commence à grandir rapidement tandis que le premier pic commence à diminuer légèrement. Ces dépendances en champ confirment les résultats prédits dans le paragraphe précédent sur la répartition de la force d'oscillateur sur les deux transitions lié-lié en champ magnétique. Le fait qu'à $B = 15$ T, le deuxième pic ne domine pas encore le premier pic pour $\vec{\mathcal{E}} \parallel \vec{y}$ montre que l'effet d'anisotropie est très fort dans ces boîtes et influence l'absorption avec la polarisation dans le plan.

Il est important de souligner que les effets d'anisotropie latérale ci-dessus n'influencent pas les propriétés optiques lorsque la polarisation de la lumière est parallèle à l'axe de croissance. L'insensibilité au champ de l'absorption est une conséquence directe de la forme plate des boîtes quantiques et au fait que dans ce cas on sonde les états finaux de la symétrie S. Les effets latéraux sont secondaires et donnent des corrections au niveau d'énergie. Dans le modèle séparable, pour les états quasi$-1S$ on peut prendre en compte les effets d'anisotropie en utilisant un produit de deux gaussiennes pour le mouvement planaire. Chaque largeur gaussienne représente l'extension de la fonction d'onde dans une direction (x ou y).

2.4.2 États liés virtuels

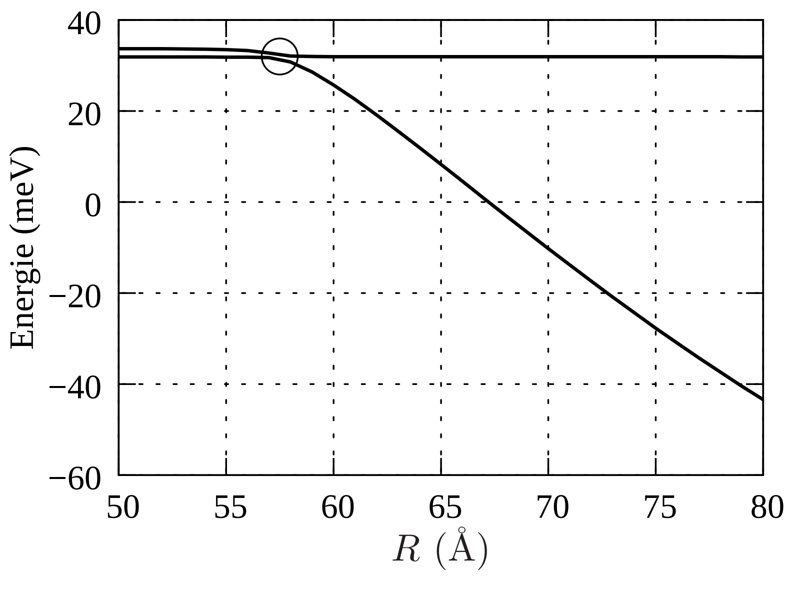


FIG. 2.11 – Energie des deux premiers états P en fonction du rayon de base R de la boîte quantique à $B = 0$ et $k_z = 0$. Le cercle indique l'entrée du premier état P dans le continuum.

Quand les boîtes quantiques admettent des états liés de symétrie $P_{\pm}$, les transitions lié-lié $S \rightarrow P\pm$ sont très fortes pour $\vec{\mathcal{E}} \perp \vec{z}$ (voir la discussion dans la section

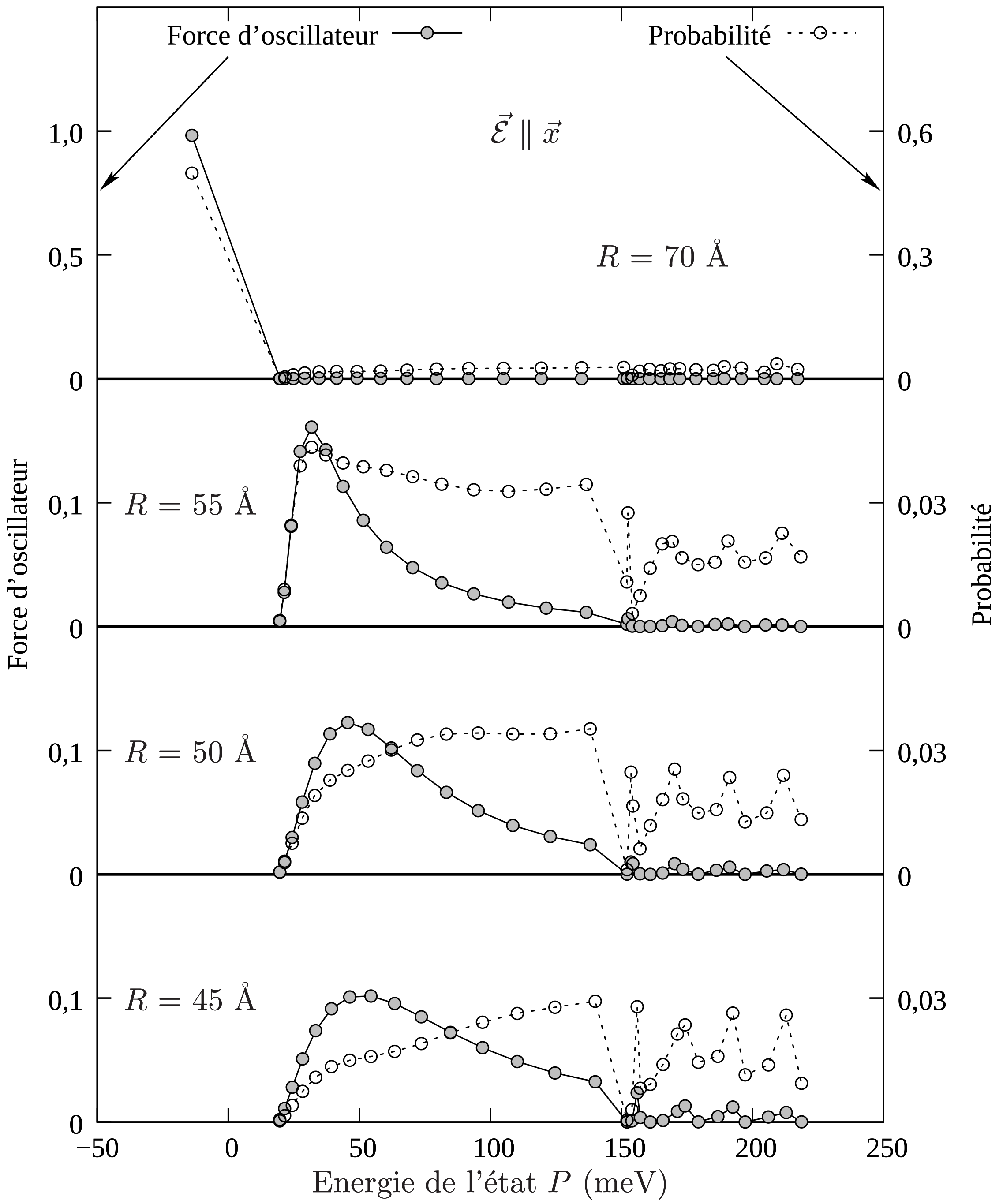


Fig. 2.12 – Force d'oscillateur (cercles gris) des transitions de l'état fondamental (de symétrie S) au 30 premiers états P (échelle de gauche) et la probabilité (cercles blancs) de trouver l'électron dans la boîte (échelle de droite) en fonction de l'énergie des états P à $B = 0$ et $k_z = 0$ pour quelques valeurs du rayon de base R et $\vec{\mathcal{E}} \parallel \vec{x}$. Dans le cas $R = 70$ Å, l'échelle verticale est plus grande que pour les autres rayons. Les énergies fondamentales pour chaque valeur de R sont : $E_S(R = 70$ Å$) = -105$ meV, $E_S(R = 55$ Å$) = -64$ meV, $E_S(R = 50$ Å$) = -45$ meV, $E_S(R = 45$ Å$) = -25$ meV.

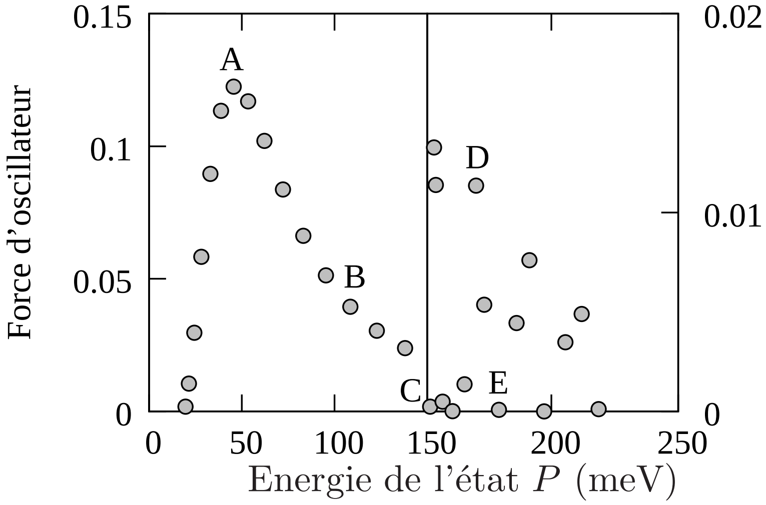


FIG. 2.13 – Force d'oscillateur des transitions de l'état fondamental (de symétrie S) au 30 premiers états P en fonction de l'énergie des états P à $B = 0$ et $k_z = 0$ pour $R = 50$ et $\vec{\mathcal{E}} \parallel \vec{x}$. Deux échelles verticales sont utilisées pour les énergies inférieures et supérieures à 150 meV. La dispersion apparente des donnés numériques au-dessus de 150 meV est due à la contribution de deux canaux optiques différents (voir le texte).

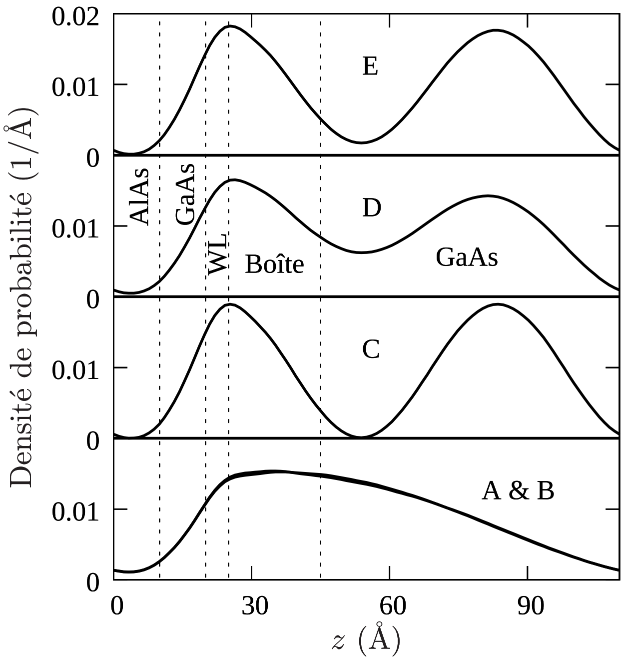


FIG. 2.14 – Densités de probabilité de trouver l'électron à z dans la cellule élémentaire pour quelques états sélectionnés et marqués (de A à E) dans la figure 2.13.

précédente). Les deux transitions emportent presque toute la force d'oscillateur et saturent la règle de somme de Thomas-Kuhn-Reich. Seule la polarisation z donne lieu à des transitions lié-continuum fortes. Un moyen possible de surmonter la faiblesse de l'absorption vers le continuum avec la polarisation de lumière dans le plan est de pousser les états P dans le continuum où ils peuvent former des états résonnants. A cette condition, l'absorption $S-$continuum sera forte dans la polarisation planaire. Ceci peut être obtenu en diminuant la dimension planaire de la boîte quantique jusqu'à ce que le plus bas état P se situe dans continuum. Nous avons tracé la dépendance de l'énergie des deux premiers états P en fonction du rayon R dans la figure 2.11. Pour les rayons supérieurs à 6 nm, le deuxième état P dans cette figure représente le démarrage du continuum comme l'atteste son comportement indépendant du rayon de la boîte. L'entrée du premier état P dans le continuum se trouve à 5,8 nm, illustrée par un cercle. Comme la boîte quantique a un saut de potentiel abrupte, il est vraisemblable que l'état lié survivra sous la forme d'un état lié virtuel [15, 16]. Cette particularité serait profitable aux propriétés photo-conductives des composants car idéalement un état lié virtuel aurait une grande force d'oscillateur distribuée sur un intervalle d'énergie plus large qu'un vrai état lié et serait dans le même temps capable de participer à la conduction électrique. Pour tracer l'évolution des états P les plus bas, nous avons calculé pour quelques valeurs de R la probabilité de trouver l'électron dans la boîte quantique et la force d'oscillateur des transitions $S - P$ quand la lumière est polarisée suivant l'axe x :

$$OS_{S\to P} = \frac{2m^*}{\hbar^2}(\epsilon_P - \epsilon_S)|\langle P|x|S\rangle|^2 \tag{2.7}$$

La figure 2.12 montre la force d'oscillateur en fonction de l'énergie des 30 états P pour quelques valeurs du rayon de la boîte à $B = 0$ et $k_z = 0$. Pour $R = 70$ Å, un état P est lié. Par conséquent, il y a un grand pic à -14 meV. Il est suivi par une absorption de continuum lisse et faible ($OS < 1.5$ %) dans la région d'énergie de l'état P final positive. Pour des boîtes plus petites, il n'y a pas d'état P lié. En conséquence, la force d'oscillateur devient très forte pour les états finaux dans le spectre du continuum. Un pic se développe à une énergie croissante quand R décroît. Sa largeur augmente quand le rayon de la boîte diminue. On note que la somme de la force d'oscillateur dans chaque pic large s'élève à $\sim$ 0,9. Ceci suggère que la force d'oscillateur a été redistribuée sur ce large pic. A une énergie de l'état P vers 150 meV, indépendamment de R, on note l'existence de deux types d'états. Le premier type apparaît comme une continuation du pic d'absorption tandis que l'autre est presque inactif optiquement (voir la figure 2.13 pour $R = 50$ Å). On montre dans la figure 2.14 l'évolution de la dépendance en z de la densité de probabilité :

$$P_r(z) = \int_0^\infty 2\pi\rho \mathrm{d}\rho |\psi_P(\rho, z)|^2 \tag{2.8}$$

avec des états croissants n pour $R = 50$ Å. Tandis que les états qui appartiennent au pic d'absorption n'ont pas de noeud suivant z, les états avec une force d'oscillateur (presque) nulle possèdent un noeud suivant z. La coupure apparente à 150 meV correspond donc au début d'un nouveau (mais très petit) canal d'absorption, cette fois-ci associée à un changement de nombre quantique pour le mouvement en z.

Nous notons que les deux premières énergies propres d'un super-réseau avec GaAs, AlAs, la couche de mouillage d'InAs mais sans la boîte sont 19 meV et 151 meV à $B = 0$ et $k_z = 0$ (voir la section des états S), c'est-à-dire les deux énergies des débuts d'absorption présentés dans la figure 2.12. Ceci montre encore une fois que l'aspect plat des boîtes quantiques mène à une quasi-séparabilité des mouvement du porteur suivant et perpendiculaire à l'axe de croissance.

2.5 Conclusions

Dans ce chapitre, nous avons calculé des états du continuum électronique des boîtes quantiques InAs/GaAs insérées dans un super-réseau GaAs/AlAs en présence d'un champ magnétique appliqué parallèle à l'axe de croissance. Nous trouvons que l'absorption dans l'infrarouge lointain est essentiellement indépendante du champ magnétique vertical en dépit de la présence de nombreux états quasi-Landau. Nous avons prouvé que la forme plate des boîtes quantiques et le grand offset attractif jouent un rôle majeur dans la restructuration de leur continuum d'états. De plus, nous avons montré que de petites boîtes (avec un seul état lié de symétrie S) pourront avoir une absorption forte dans le plan quand un état lié virtuel de symétrie P n'est pas très loin du démarrage du continuum. Finalement, nous avons montré que la plupart des propriétés optiques des boîtes quantiques insérées dans un super-réseau peuvent être analysées dans un modèle séparable. Cette simplification vient de la forme plate des boîtes quantiques et du fait que les éléments de la matrice de dipôle sont sensibles seulement aux caractéristiques locales (c'est-à-dire dans la région de la boîte quantique) des fonctions d'onde de l'état final à cause de la forte localisation de l'état initial.

Bibliographie

[1] M. Fricke, A. Lorke, J. P. Kotthaus, G. Madeiros-Ribeiro, et P. M. Petroff, Europhys. Lett. **36**, 197 (1996).

[2] S. Maimon, E. Finkmann, G. Bahir, S. E. Schacham, J. M. Garcia, et P. M. Petroff, Appl. Phys. Lett. **73**, 2003 (1998).

[3] S. W. Lee, K. Hirakawa, et H. Shimada, Appl. Phys. Lett. **75**, 1428 (1999).

[4] S. Sauvage, P. Boucaud, F. H. Julien, et J. M. Gérard, J. Appl. Phys. **82**, 3396 (1997).

[5] S. Hameau, Y. Guldner, O. Verzelen, R. Ferreira, G. Bastard, J. Zeman, A. Lemaître, et J. M. Gérard, Phys. Rev. Lett. **83**, 4152 (1999).

[6] S. Hameau, J. N. Isaia, Y. Guldner, E. Deleporte, O. Verzelen, R. Ferreira, G. Bastard, J. Zeman, et J. M. Gérard, Phys. Rev. B **65**, 85316 (2002).

[7] L. Rebohle, F. Schrey, S. Hofer, G. Strasser, et K. Unterrainer, Appl. Phys. Lett. **81**, 2079 (2002).

[8] D. P. Nguyen, N. Regnault, R. Ferreira, et G. Bastard, Phys. Rev. B **71**, 245329 (2005).

[9] S. Hofer, H. Hirner, R. Bratschitsch, G. Strasser, et K. Unterrainer, Physica E **13**, 190 (2002).

[10] O. Stier, *Electronic and optical properties of quantum dots and wires* (Berlin Studies in Solid State Physics. Wissenshaft & Teknik. Verlag., Berlin, 2001).

[11] G. Danan, B. Etienne, F. Mollot, R. Planel, A. M. Jean-Louis, F. Alexandre, B. Jusserand, G. L. Roux, J. Y. Marzin, H. Savary, et al., Phys. Rev. B **35**, 6207 (1987).

[12] A. Vasanelli, Thèse de doctorat, Université de Paris VI (2002).

[13] J. M. Moison, F. Houzay, F. Barthe, L. Leprince, E. André, et O. Vatel, Appl. Phys. Lett. **64**, 196 (1994).

[14] O. Stier, M. Grundmann, et D. Bimberg, Phys. Rev. B **59**, 5688 (1999).

[15] P. Lelong, S.-W. Lee, K. Hirakawa, et H. Sakaki, Physica E **7**, 174 (2000).

[16] G. Bastard, J. A. Brum, et R. Ferreira, Solid State Physics **44**, 229 (1991).

Chapitre 3

Photo-détecteur de boîtes quantiques

Ce chapitre présente un travail effectué en collaboration avec le groupe expérimental dirigé par K. Unterrainer et G. Strasser à l'Université Technique de Vienne. Il présente aussi l'application des résultats théoriques obtenus dans le chapitre précédent. Dans ce travail, nous nous intéressons aux propriétés optiques (absorption) des super-réseaux de boîtes quantiques InAs/GaAs. Ces super-réseaux, encastrés ou non dans des structures de puits quantiques de AlAs, sont au centre d'un nombre considérable d'activités de recherche ces dernières années [1–14]. L'intérêt porté aux boîtes quantiques est essentiellement basé sur l'espacement énergétique favorable des états électroniques liés et sur la capacité d'ajuster ces propriétés. Pour l'usage dans des composants infrarouge, la structure de niveau électronique couvre une région spectrale importante entre 40 meV et 400 meV. Bien que des structures de puits quantiques soient utilisées avec succès pour détecter la lumière infrarouge [15], ces structures manquent de sensibilité à l'incidence normale de la lumière. Au contraire, les boîtes quantiques sont capables d'absorber de la lumière infrarouge sous l'incidence normale [16–18], ce qui simplifie la mise en oeuvre des applications potentielles de senseurs et de photo-détecteurs. En plus, il a été prédit que ces structures de boîtes quantiques offrent des photo-courants plus grands et des courants noirs plus petits que ceux des structures à puits quantiques grâce à un temps de vie plus long des états excités [19, 20].

3.1 Croissance des échantillons et dispositif expérimental

Tous les échantillons dans les expériences suivantes ont été fabriqués par épitaxie par jet moléculaire (MBE) sur des substrat semi-isolants lisses de GaAs [001]. Après avoir déposé une couche de GaAs dopée silicium de largeur 650 nm, une structure de super-réseau est formée. Les boîtes quantiques InAs sont obtenues par le mécanisme de Stranski-Krastanov par un dépôt de 2 mono-couches d'InAs (voir la section 1.1.2). Une couche de GaAs dopée silicium recouvre le composant. Pour éviter un mélange d'Al, Ga et In venant des couches d'AlAs, de GaAs et d'InAs, la couche de contact en bas a été déposée à 600° C, toutes les couches suivantes ont été déposées à 485° C. La densité planaire des boîtes quantiques est environ 5×10^{10} boîtes/cm^2. Les

Echantillon	MD-A	MD-C	MD-B	DD	SD
Périodicité	10 nm	14 nm	11 nm	11 nm	11 nm
Nombre de couches de BQs	30	20	20	20	20
Nombre de barrières d'AlAs	-	20	20	40	60

TAB. 3.1 – Description des échantillons

échantillons se différencient par leur nombre des couches de boîtes quantiques et la périodicité du super-réseau de GaAs/AlAs. Le tableau 3.1 montre les paramètres des échantillons tandis que le design des composants est esquissé dans la figure 3.1.

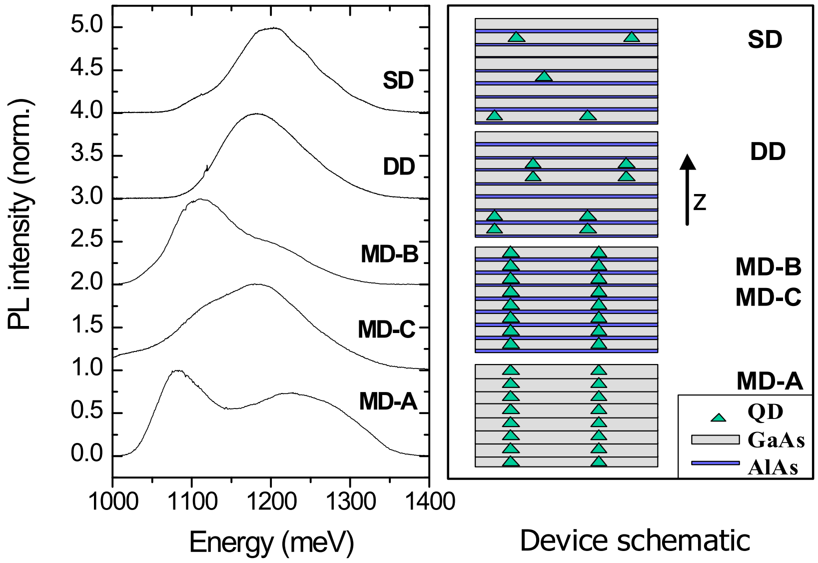


FIG. 3.1 – A gauche : Spectres de photo-luminescence d'interbande des échantillons étudiés. A droite : Esquisse des échantillons. La flèche, dénotée z, indique la direction de croissance.

Dans la première série d'échantillons, trois structures de boîtes multiples (multiple dots : MD), notées MD-A, MD-B et MD-C, ont été conçues, fabriquées et caractérisées. Le composant MD-A consiste en 30 couches de boîtes quantiques d'InAs périodiques, qui sont séparées par une matrice de GaAs de 10 nm. La petite séparation verticale des boîtes quantiques conduit à leur alignement vertical dû à leur distribution de contrainte [5]. Par rapport au composant MD-A, on ajoute dans MD-B des barrières d'AlAs de largeur 1 nm à une distance de 1 nm de la couche de mouillage, ce qui rend la période égale à 11 nm. A cause de ces barrières d'AlAs périodiques, l'énergie d'absorption d'inter-sousbande va augmenter par rapport à MD-A. MD-C a la même structure que MD-B sauf que la périodicité a été augmentée à 14 nm. Le pic d'absorption principal de cette structure est supposé se trouver à la même énergie que l'échantillon MD-A.

Dans la deuxième série d'échantillons, deux composants à base de boîtes simples (SD) et de boîtes doubles (DD) ont été fabriqués et se composent d'une (SD) ou deux (DD) périodes de super-réseau sous les mêmes conditions que le composant MD-B. Ces couches sont suivies par deux périodes de super-réseau sans boîtes quantiques pour empêcher l'alignement vertical des boîtes quantiques. Cette séquence est répétée plusieurs fois pour que le nombre total de couches de boîtes quantiques soit égal à 20 ou 30 (seulement MD-A) (voir le tableau 3.1).

Pour étudier le schéma des niveaux d'énergie et le comportement du courant noir des nano-structures, des mesures de photo-luminescence (PL), photo-courant (PC) et courant-tension (IV) ont été effectuées à l'Université Technique de Vienne en montant les composants sur le doigt froid d'un cryostat à hélium. Les études de PL ont été faites par excitation à l'aide d'un laser He-Ne à 632,8 nm, une détection synchrone et une photo-diode d'InGaAs. Pour des mesures de PC, les composants sont traités par photo-lithographie et par attaque chimique par voie humide sur des mésas. Les bords clivés de l'échantillon ont été polis afin d'obtenir une structure de guide d'onde sous le mésa. Finalement, les composants ont été munis de contacts arrière ou avant qui sont faits d'une couche d'alliage Ni/Ge/Au. La dépendance spectrale de la photo-réponse des composants est mesurée par un spectromètre avec une source infrarouge thermique et un polariseur mi-infrarouge.

3.2 Modélisation des systèmes étudiés

Nous utilisons le formalisme de fonction enveloppe à une bande où la masse effective de la bande de conduction est de $m^* = 0,07\ m_0$. Ce schéma a permis l'interprétation des spectres magnéto-optiques intriqués associés aux transitions lié-lié dans les boîtes quantiques libres d'InAs [21]. La discontinuité de la bande de conduction entre AlAs et GaAs a été prise égale à 1,08 eV [22] et celle entre GaAs et InAs à 0,4 eV [23]. La forme de la boîte a été approximée par un cône tronqué faisant un angle de 30° avec la base de la boîte (voir la figure 3.2). Le rayon de base du cône est 10,2 nm tandis que celui de sommet est 6,7 nm. La hauteur de la boîte a été prise égale à 2 nm. La boîte flotte sur une couche de mouillage d'épaisseur 0,5 nm. Avec ces paramètres, l'écart d'énergie entre les deux états les plus bas (S et $P_{\pm}$) est environ 50 meV et l'écart d'énergie entre l'état fondamental lié et le démarrage du continuum est environ 160 meV. Notons que la deuxième valeur (160 meV) est principalement déterminée par la dimension verticale de la boîte tandis que le splitting $S - P$ (50 meV) est gouverné par ses dimensions latérales.

Comme la symétrie par translation dans la direction de croissance existe dans ces structures, on peut appliquer le théorème de Bloch : les états propres sont de la forme $\exp(ik_z z)\psi_{k_z}(x,y,z)$ où k_z est le vecteur d'onde et $\psi_{k_z}(x,y,z)$ est une fonction périodique en z de périodicité d ($= 10, 11, 14$ nm pour MD-A, MD-B, MD-C respectivement). Les énergies propres deviennent à leur tour des fonctions périodiques de k_z. La première zone de Brillouin sera l'intervalle $[-\pi/d,\ +\pi/d]$. Dans les calculs de densité d'états ou d'absorption, on additionne la contribution de toute la première zone de Brillouin $k_z \in \left]-\frac{\pi}{L}, \frac{\pi}{L}\right]$. Le Hamiltonien agissant sur $\psi_{k_z}(x,y,z)$ s'écrit :

$$H(k_z) = \frac{p^2}{2m^*} + V(\rho, z) + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m^*} + \frac{\hbar k_z p_z}{m^*} \tag{3.1}$$

Pour chercher des solutions $\psi_{k_z}(x,y,z)$, nous utilisons une base Fourier-Bessel

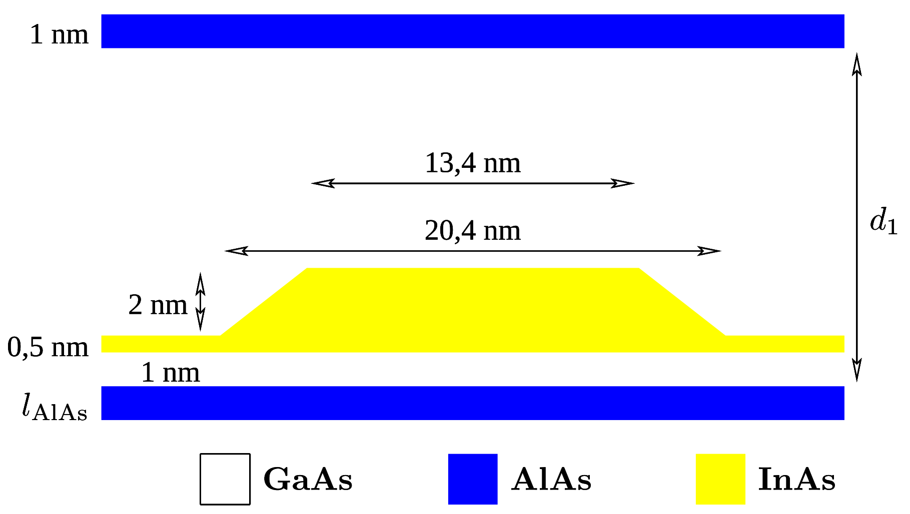


FIG. 3.2 – Représentation schématique de la grand boîte avec la boîte et sa couche de mouillage. d =10 nm (MD-A, MD-B) ou 13 nm (MD-C) et $l_{\mathrm{AlAs}} = 0$ (MD-A) ou 1 nm (MD-B, MD-C). La périodicité des structures sont $d = d_1 + l_{\mathrm{AlAs}} = 10\ \mathrm{nm}, 11\ \mathrm{nm}, 14\ \mathrm{nm}$ pour MD-A, MD-B et MD-C respectivement.

(voir l'étude de cas 1.2.2 et les bases d'états dans l'annexe A) :

$$\psi_{lnq}(\overrightarrow{r}) = C_{lnq} \cdot \exp(il\theta) \cdot J_l(\lambda_n^l \frac{r}{R}) \cdot \exp\left(i\frac{2\pi qz}{d}\right) \tag{3.2}$$

où C_{lnq} est une constante de normalisation, l est le nombre quantique angulaire, λ_n^l est le n-ème zéro de la fonction de Bessel du premier type correspondant J_l et q un entier (voir l'annexe pour une discussion plus détaillée sur les fonctions des Bessel du premier type). La hauteur et le rayon de la grande boîte de quantification sont $d = d_1 + l_{\mathrm{AlAs}}$ et R = 200 nm respectivement. Dans cette base, les états propres sont classifiés par les projection sur z du moment cinétique : S ($l = 0$), P ($l = \pm 1$), D ($l = \pm 2$), ...

Nous obtenons une matrice hamiltonienne en projetant le hamiltonien $H(k_z)$ dans cette base. La méthode numérique consiste à diagonaliser exactement la matrice hamiltonienne dans une base de 10000 états (21 états en z et 500 états de Bessel dans le plan). Le potentiel de la boîte est approximé par des disques de potentiel (voir l'étude de cas 1.2.2). Le potentiel est constant dans chaque disque. Les deux cents premiers états propres sont évalués par une diagonalisation exacte qui utilise l'algorithme de Lánczos (voir l'annexe B).

Une fois les premières énergies et états propres obtenus, le coefficient d'absorption $\alpha(\omega)$ est évalué par la formule suivante :

$$\alpha(\omega) \propto \sum_{\nu} \left| \langle s | \overrightarrow{\mathcal{E}} . \overrightarrow{r} | \nu \rangle \right|^2 \delta(\epsilon_\nu - \epsilon_s - \omega)\, \hbar\omega \tag{3.3}$$

où ν étiquette les états discrétisés du continuum, ϵ_ν l'énergie propre correspondant et $\overrightarrow{\mathcal{E}}$ la polarisation de la lumière. Les règles de sélection optique [24] affirme que les transitions de l'état fondamental, qui est de la symétrie S, vers les états de symétrie S contribuent à l'absorption de photon dont la polarisation linéaire est verticale. Les transitions vers les états P donne lieu à l'absorption avec les polarisations dans le plan.

3.3 Résultats numériques

Dans cette section, nous présentons les résultats numériques obtenus à partir du modèle expliqué dans la section précédente. D'abord, nous présentons un diagramme des niveaux d'énergie pour les trois échantillons MD. Nous montrons ensuite l'absorption avec les polarisations dans le plan où les propriétés sont bien comprises (voir [25] par exemple). Finalement, nous illustrons les résultats de la polarisation en z. Dans cette partie, nous essayons de tirer les grandes lignes des propriétés optiques sans entrer dans le détail. Dans le chapitre 2, nous avons expliqué en détail les origines physiques de cette absorption à l'aide d'un modèle plus simple, le modèle séparable.

3.3.1 Niveaux d'énergie

La figure 3.3 montre un diagramme des niveaux d'énergie de symétrie S et P en fonction du vecteur d'onde k_z pour les trois échantillons MD. On observe que ces structures ont deux états liés de symétrie S. Le premier état est l'état fondamental qui n'a pas de noeud dans le plan pour le mouvement radial. Cet état est donc désigné $1S$ comme dans la convention de la physique atomique. Le deuxième état de symétrie S est un état $2S$, qui possède un noeud pour le mouvement radial. En ce qui concerne les états P, seul un état P (ou deux si l'on compte la dégénérescence 2 des états P) est lié. Comme l'état $1S$, cet état n'a pas de noeud dans le plan pour le mouvement radial $\rho \neq 0$.

Notons que la dispersion des états diminue dans l'ordre MD-A, MD-B et MD-C. Cette diminution est liée au fait que MD-B a une barrière d'AlAs en plus par rapport au MD-A et la périodicité de MD-C est plus grande que celle de MD-B. Le couplage entre les cellules élémentaires diminue donc dans l'ordre MD-A, MD-B et MD-C, ce qui entraîne la diminution de la dispersion.

3.3.2 Polarisations dans le plan

Quand l'onde électromagnétique est polarisée suivant la direction x (ou y), il existe une très forte absorption par les transitions lié-lié (figure 3.4), l'équivalent de l'absorption atomique $S - P$. En conséquence, l'absorption lié-continuum est très faible, ce qui est une conséquence de la concentration de la force d'oscillateur dans les transitions lié-lié. Cette absorption lié-continuum est très faible au seuil d'absorption comme un résultat de la répulsion de l'état fondamental vis à vis des autres états. En fait, les boîtes sont des objets plats, dont les seuls états liés sont sans noeud le long de l'axe de croissance. Pour les autres états, l'orthogonalité entre les états propres impose trois cas possibles :

– ils sont poussés en dehors de la boîte.

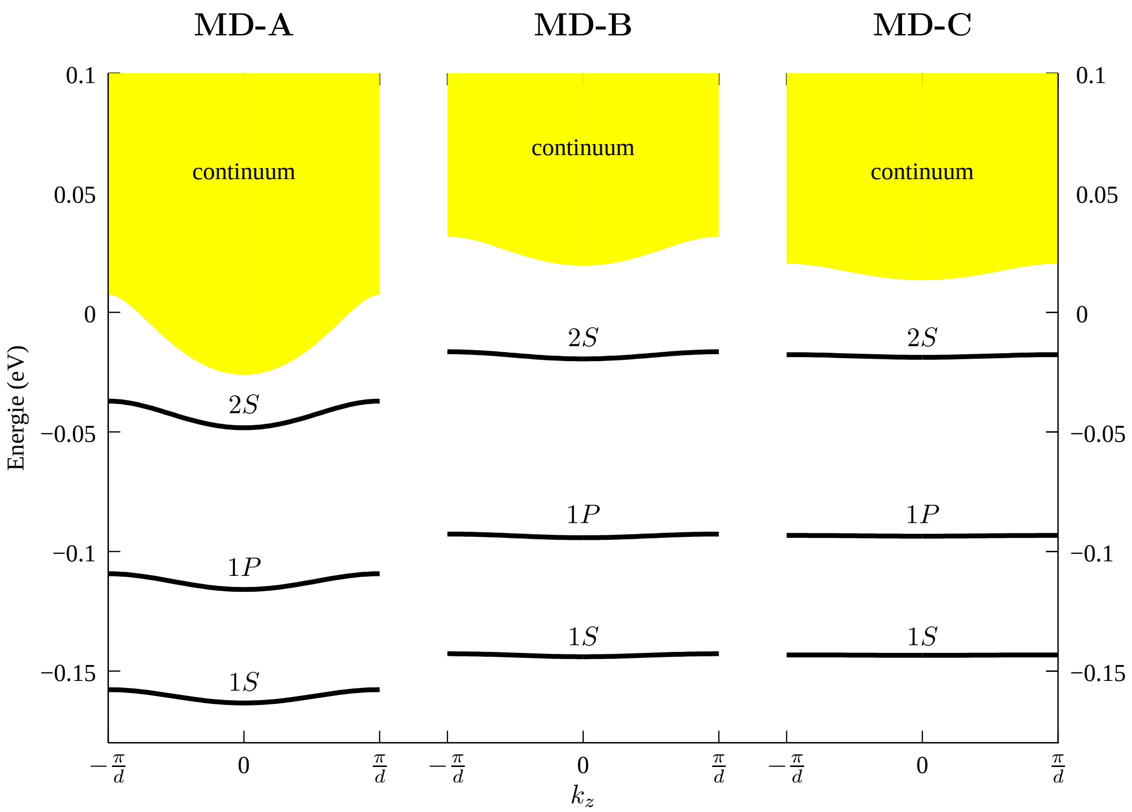


Fig. 3.3 – Diagramme des niveaux d'énergie de symétrie S et P pour les trois échantillons MD. Les états $1S$ et $1P$ sont sans noeud dans le plan $\rho \neq 0$ pour le mouvement radial ($\rho \neq 0$). Les états $2S$ ont un noeud dans le plan $\rho \neq 0$ pour le mouvement radial.

– ils oscillent très vite dans la région de la boîte.
– ils sont un mélange des deux cas précédents.

Le premier cas correspond aux états au démarrage du continuum dont l'énergie cinétique est relativement petite. Le deuxième cas correspond aux états de haute énergie dont l'énergie cinétique est très grande. Les états intermédiaires correspondent au dernier cas. Pour les polarisations dans le plan, le coefficient d'absorption est proportionnel à l'élément de la matrice du dipôle $|\langle s|\vec{\rho}|\nu\rangle|^2$, donc proportionnel au recouvrement des deux fonctions d'onde le long de l'axe de croissance. Comme les états au démarrage du continuum (qui sont essentiellement localisés à l'extérieur de la boîte le long de l'axe de croissance) ont un faible recouvrement avec l'état fondamental (qui se concentre dans la boîte), l'absorption juste au delà du seuil est faible. Pour les états à hautes énergies (le deuxième cas), l'interférence destructive dans l'élément de la matrice du dipôle entre l'état initial et l'état final rend l'absorption très faible aux hautes énergies. Qualitativement parlant, considérons les états finaux comme des ondes planes, nous voyons que l'absorption vaudra zéro aux hautes énergies étant donné que le vecteur d'onde de l'état final k_f est très grand. En effet, l'élément de matrice du dipôle n'est autre que la composante de Fourier de $\overrightarrow{r}\Psi_s(\overrightarrow{r})$ à $\overrightarrow{k}_f$. Par conséquent, cette composante tend rapidement vers zéro si $\overrightarrow{k}_f l_{dot} \gg 1$, où l_{dot} est une dimension typique de $\overrightarrow{r}\Psi_s(\overrightarrow{r})$, en pratique la dimension de la boîte [26]. Ceci explique la faible absorption observée aux hautes énergies dans ces polarisations.

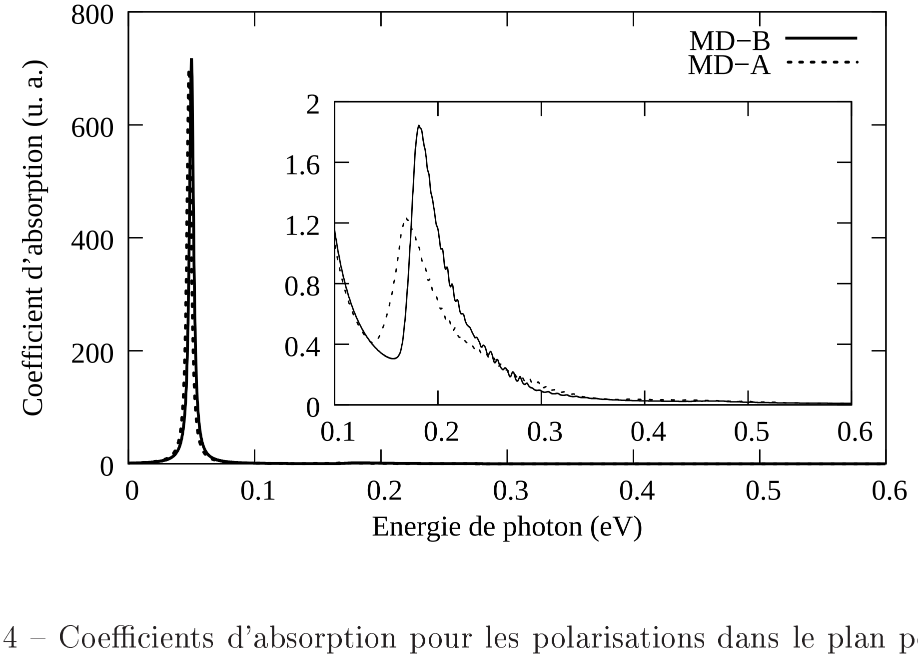


Fig. 3.4 – Coefficients d'absorption pour les polarisations dans le plan pour deux structures : MD-A et MD-B. La petite figure montre un zoom de l'absorption lié−continuum.

On peut déduire de cette discussion qualitative que le coefficient d'absorption lié−continuum devrait présenter un pic. Cependant, ce pic est de très faible amplitude puisque les transitions lié−lié sature presque la règle de somme.

En pratique, les boîtes ne sont pas rondes. On observe par exemple une dissymétrie de l'absorption intrabande dans deux polarisations x et y [27]. On peut reproduire une structure à deux pics d'absorption lié-lié en introduisant une asymétrie géométrique de la boîte (figure 3.5, voir aussi la section 3.4 pour une comparaison avec les résultats expérimentaux).

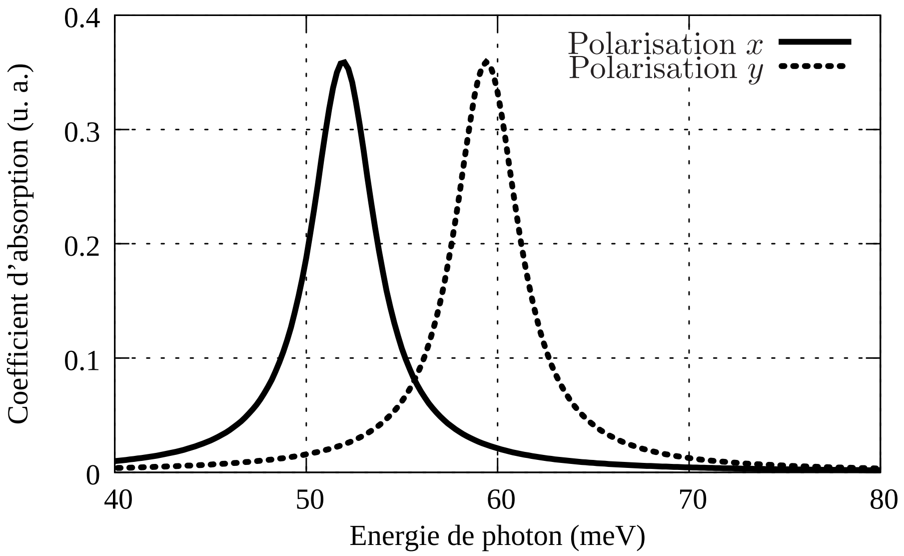


FIG. 3.5 – Coefficients d'absorption pour les polarisations le long des axes x et y pour l'échantillon MD-B. La boîte est légèrement elliptique ($R_y/R_x = 0.9$).

3.3.3 Polarisation suivant l'axe de croissance

Le spectre d'absorption optique dans la polarisation z pour les trois structures MD est montré dans la figure 3.6. La forme de petites oscillations des pics vient de la sommation sur un échantillon régulier de la première zone de Brillouin ($\simeq 50$ valeurs de k_z). Cette absorption est très différente de celle dont la polarisation est dans le plan. Premièrement, il n'y a pas de transitions lié-lié pour les paramètres des boîtes examinées. Ceci est dû au fait que ces boîtes quantiques sont des objets plats, qui supportent seulement les états liés sans noeud suivant la direction de croissance pour minimiser l'énergie cinétique.

Nous rappelons que pour les transitions intrabandes, le coefficient d'absorption dépend de la quantité $\left|\langle s|\overrightarrow{\mathcal{E}}.\overrightarrow{r}|\nu\rangle\right|^2$ ([24]). Comme on l'a vu dans le chapitre 2, il existe une famille spéciale d'états qui ont un peu près la même extension dans le plan que l'état fondamental. Ces états, mis en évidence par le modèle séparable, vont coupler optiquement avec l'état fondamental pour donner les pics d'absorption dans la polarisation z. La section suivante va comparer ces spectres d'absorption avec les résultats expérimentaux obtenus à Vienne.

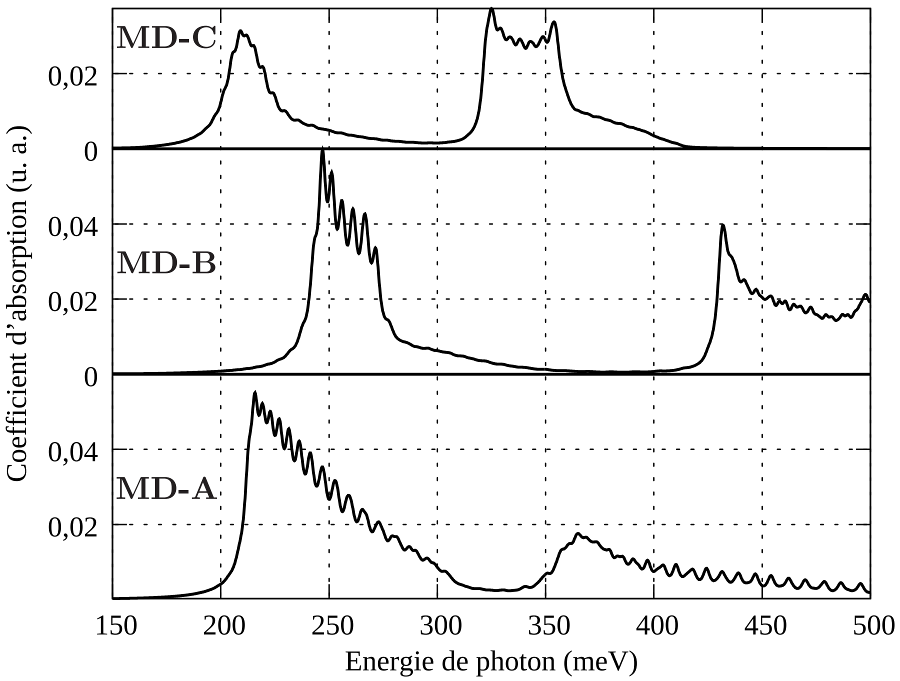


FIG. 3.6 – Coefficients d'absorption pour la polarisation en z. Ligne pleine L =10 nm (MD-A). Ligne tiretée d =11 nm (MD-B). Ligne pointillée d =14 nm (MD-C). La même échelle pour l'ordonné est utilisée pour les trois échantillons.

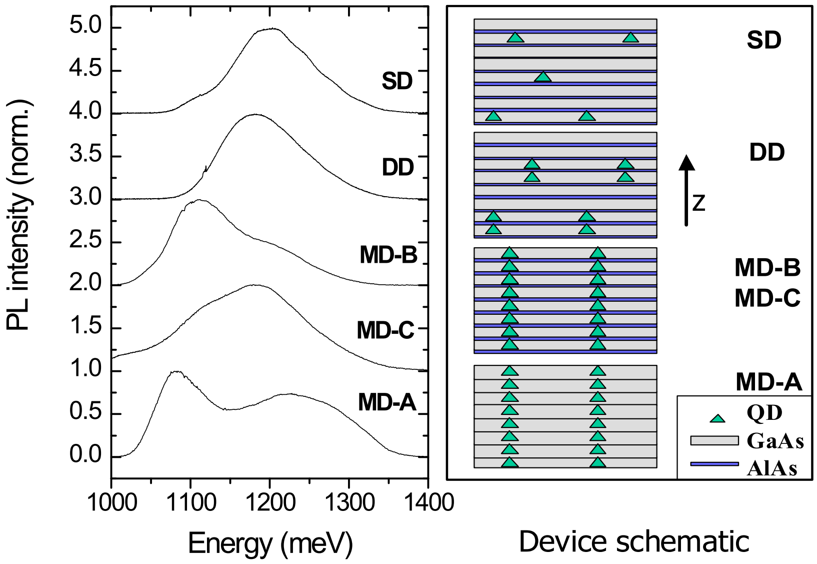


FIG. 3.7 – A gauche : Spectres de photo-luminescence d'interbande des échantillons étudiés. A droite : Esquisse des échantillons. La flèche indique z la direction de croissance z.

3.4 Expériences et comparaisons avec la théorie

3.4.1 Photo-luminescence

Les spectres de photo-luminescence des composants MD, DD et SD à 5 K, montrés dans la figure 3.7, illustrent des émissions principales entre 1,1 eV et 1,2 eV. Le pic d'émission de SD se trouve un peu plus haut que celui de DD car le couplage vertical entre deux boîtes dans le cas DD diminue l'énergie des états fondamentaux des électrons et des trous. Ce couplage vertical augmente encore plus dans le cas des boîtes multiples, ce qui entraîne une tendance vers les basses énergies du pic d'émission en ordre de SD, DD et les composants MD. Pour les composants MD, le couplage entre les boîtes pour MD-A est le plus fort. Il est suivi par celui de MD-B à cause de la présence des barrières d'AlAs. Le couplage vertical est plus faible dans le composant MD-C à cause de la grande périodicité. L'énergie du pic d'émission augmente donc dans l'ordre MD-A, MD-B et MD-C

3.4.2 Caractéristique I-V

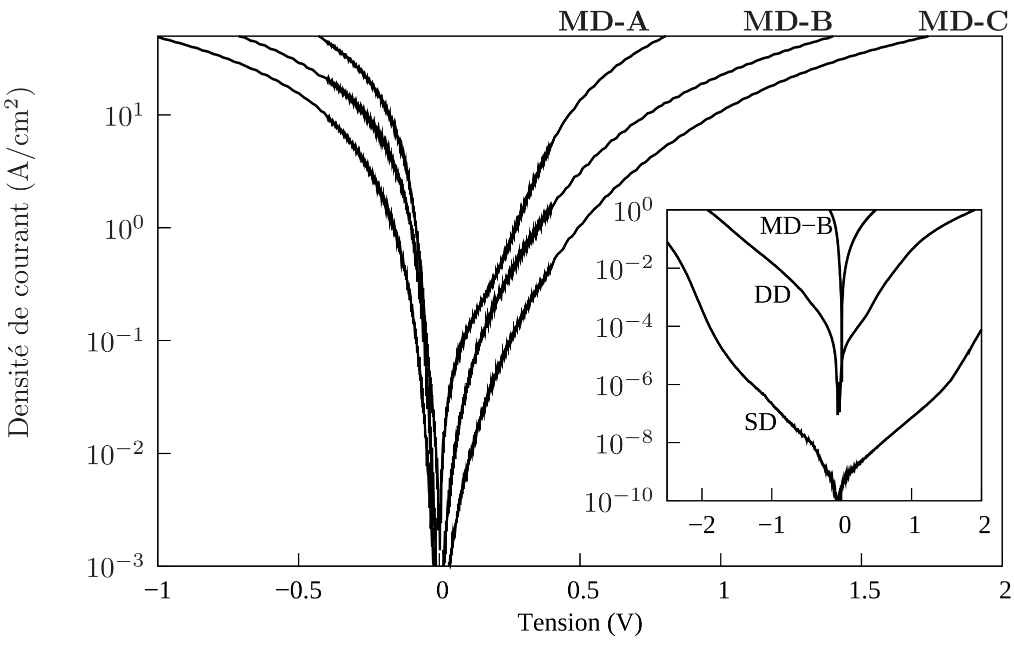


FIG. 3.8 – Caractéristiques courant-tension des composants MD-A, MD-B et MD-C (dans la petite figure : MD-B, DD et SD) sans pompage optique.

La figure 3.8 montre la caractéristique I-V des composants à 4 K sur une échelle semi-logarithmique. Le courant collecté dans ces expériences est le courant noir, c'est-à-dire sans excitation de laser et il est orienté le long de l'axe de croissance. Les courbes des trois MD sont asymétriques comme le comportement d'une diode car les structures correspondantes ne sont pas symétriques, les couches de mouillage et les boîtes ne se trouvent pas au milieu du puits GaAs/AlAs pour MD-B et MD-C.

Quant à MD-A, le fait que les boîtes quantiques aient une taille latérale finie rend aussi la structure asymétrique.

On observe que le courant noir pour les composants MD diminue par un ordre de grandeur en ordre décroissant de MD-A, MD-B et MD-C. Soulignons que les mini-bandes formées des états liés ne participent pas ou très peu au courant car les électrons sont liés à des boîtes. Le courant noir est donc dû principalement à la participation des mini-bandes du continuum. Par rapport à MD-A, les électrons dans MD-B dans la première mini-bande du continuum doivent faire un tunneling à travers des barrières d'AlAs donc le courant est plus faible. Pour la structure MD-C, la position énergétique de la mini-bande correspondante est plus basse par rapport à celle de MD-B car la périodicité est plus grande. C'est pour cette raison que les électrons dans MD-C doivent faire un tunneling à travers d'une barrière d'AlAs plus haute. Par conséquent, le courant noir diminue en ordre de MD-A, MD-B et MD-C. Cette description qualitative est renforcée par la largeur à mi-hauteur décroissante calculée de la première sous-bande électronique (figure 3.6) : $\Delta = 100\,\text{meV}$ pour MD-A, $\Delta = 30\,\text{meV}$ pour MD-B et $\Delta = 5\,\text{meV}$ pour MD-C.

Nous attribuons la forte diminution du courant noir pour les composants DD et SD à la non-périodicité de ces structures et la grande distance entre les boîtes. La périodicité dans les structures MD résulte en mini-bandes de conduction. Chaque état propre dans ces mini-bande de conduction s'étend sur l'ensemble de l'échantillon, une conséquence du théorème de Bloch. Dans les structures SD et DD, la périodicité en z est brisée et la distance entre les boîtes est très grande. Le système peut être considéré comme les boîtes isolés. Le potentiel attractif est assimilé à un atome d'hydrogène et les états propres sont les états localisés à ces boîtes. Par conséquent, le transport des électrons sous une tension électrique est plus difficile dans ces structures à cause de la localisation des états propres.

3.4.3 Photo-courant

La figure 3.9 montre les spectres de photo-courant (lignes continues) des composants MD à 4 K qui sont caractérisés par un pic principal vers 225 meV (MDA et MD-C) et vers 247 meV (MD-B). Les électrons sont excités par un laser, passent de leur état fondamental à des états de mini-bande du continuum. A une énergie d'excitation donnée, le nombre d'électrons présents dans le continuum est proportionnel au coefficient d'absorption calculé dans la section précédente. Ces électrons sont ensuite collectés par le biais d'une tension électrique. En premières approximations, on peut considérer que le photo-courant est proportionnel au coefficient d'absorption optique.

On note que la largeur des pics du photo-courant (lignes continues) est très proche de la largeur des pics d'absorption calculés. Elle décroît en ordre de MD-A, MD-B et MD-C à cause de la décroissance de la largeur de la première mini-bande correspondante ($\Delta = 100\,\text{meV}$ pour MD-A, $\Delta = 30\,\text{meV}$ pour MD-B et $\Delta = 5\,\text{meV}$ pour MD-C). Sans le couplage vertical des boîtes quantiques, la situation devient plus complexe et quelques pics de photo-courant dans l'intervalle d'énergie entre 170 meV et 320 meV sont observés (figure 3.9, à gauche, panneaux de SD et DD). La nature de ces pics (SD et DD) étant complexe, nos calculs ne permettent pas de

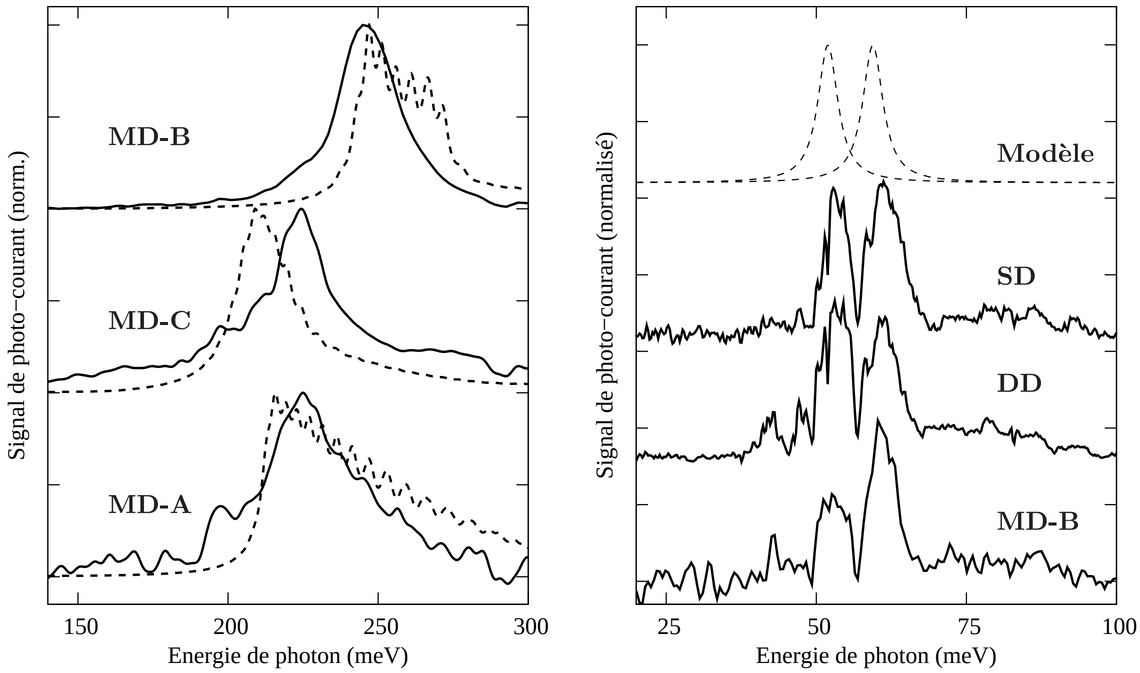


FIG. 3.9 – A gauche : spectres de photo-courant dans la gamme de mi-infrarouge avec la polarisation de la lumière parallèle à l'axe z. Les lignes tiretées montrent les coefficients d'absorption calculés dans la section précédente. A droite : spectres de photo-courant dans la gamme d'infrarouge lointain avec la polarisation dans le plan des couches. La partie en haut montre le coefficient d'absorption pour une boîte elliptique ($R_y/R_x = 0,9$).

les prédire à moins que l'on connaisse les positions exactes des boîtes quantiques.

La figure de droite 3.9 (lignes continues) montre le photo-courant en cas d'illumination sous incidence normale dans l'infrarouge lointain. Nous espérons une absorption dans cette région énergétique associée à une transition lié-lié (voir la section 3.3.2). La structure à deux pics est expliquée par une anisotropie de la forme de la boîte quantique (lignes tiretées). La mesure de photo-courant indique toujours une structure à deux pics avec une séparation d'énergie de 7 meV dans les trois composants (figure de droite 3.9). Cette propriété est un résultat de la dépendance en la géométrie latérale de la transition $S - P$. Les conditions de croissance pour les différents composants ne changent pas les dimensions latérales des boîtes quantiques. Finalement, il est important de constater que le signal de photo-courant est très faible dans cette mesure puisque les photo-électrons peuvent seulement contribuer au signal s'ils peuvent échapper de l'état excité lié (P) par l'activation thermique mais ces états sont assez loins du démarrage du continuum (figure 3.3).

La figure 3.10 montre une étude expérimentale de la dépendance du photo-courant par rapport à la polarisation du laser pour les composants MD-B et MD-C. L'énergie d'excitation du laser a été fixée à 250 meV et on fait varier l'angle de polarisation entre la configuration TM (transverse-magnetic, i.e. polarisation suivant z) et la configuration TE (transverse-electric, i.e. polarisation dans le plan). La

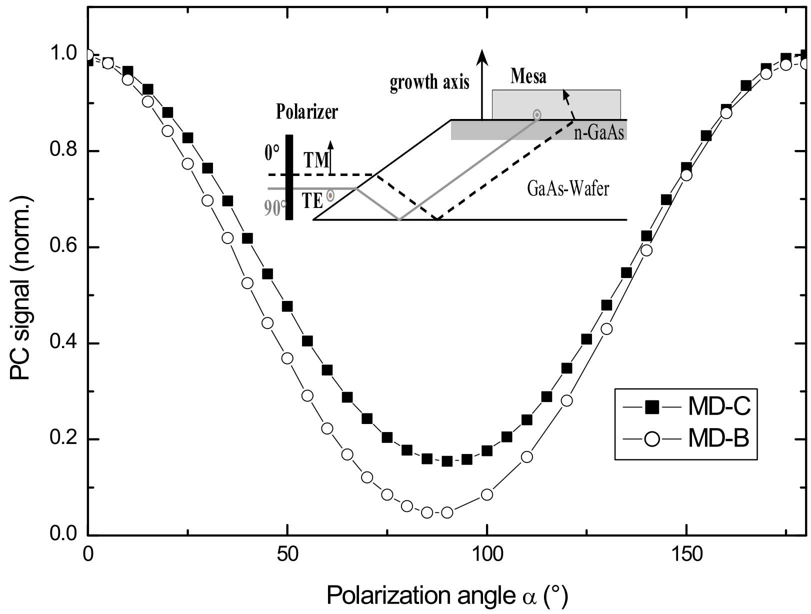


FIG. 3.10 – Dépendance du maximum du pic de photo-courant (voir figure 3.9) en fonction de l'angle de polarisation. La petite figure montre la structure guide d'onde du composant avec les axes de polarisation correspondant.

figure 3.10 illustre une préférence claire de l'absorption pour la configuration TM prédite par nos calculs. Comme il reste une petite proportion de la force d'oscillateur pour la configuration TE (voir figure 3.4), le signal ne chute pas à zéro quand $\alpha = 90°$. L'illumination de TE porte une petite part de la configuration TM due à la géométrie de guide d'onde choisie. Ce mélange TE-TM à $\alpha = 90°$ et les bruits du dispositif expérimental expliquent pourquoi le photo-courant mesuré à $\alpha = 90°$ n'est pas négligeable par rapport au signal mesuré à $\alpha = 0°$.

Pour terminer cette section, nous discutons la compatibilité des architectures de composant variées pour l'usage de photo-détecteurs infrarouges. Bien que tous les composants soient capables de détecter la lumière infrarouge dans la géométrie d'incidence normale, la géométrie TM domine clairement en ce qui concerne le signal de photo-courant. Malgré un courant noir extrêmement petit, les composants SD et DD ont un spectre de photo-courant plus complexe et difficile à prédire et d'intensité relativement faible. D'ailleurs, les spectres de photo-courant des composants MD sont caractérisés par un seul pic intense dont la position peut être facilement ajustée en changeant les paramètres du super-réseau. Les composants MD sont donc préférés aux composants SD et DD pour une application en tant que photo-détecteurs.

3.5 Conclusions

En conclusions, la réponse spectrale de nouveaux composants qui comprennent des boîtes quantiques insérées dans des super-réseaux a été prédite correctement par nos calculs. Nous avons montré qu'il est possible d'améliorer les photo-détecteurs à base de boîtes quantiques en ajustant l'énergie du maximum du pic de photo-courant via l'insertion des boîtes dans des super-réseaux. Il nous semble important de souligner qu'une telle structure est un tout que l'on ne peut analyser ni en termes de super-réseaux perturbés par des boîtes, ni en termes de boîtes faiblement perturbées par le super-réseau.

Bibliographie

[1] L. Chu, A. Zrenner, G. Böhm, et G. Abstreiter, Appl. Phys. Lett. **75**, 3599 (1999).

[2] N. Horiguchi, T. Futatsugi, Y. Nakata, N. Yokoyama, T. Mankad, , et P. Petroff, Jpn. J. Appl. Phys. **38**, 2559 (1999).

[3] H. Liu, M. Gao, J. McCaffrey, Z. Wasilewski, et S. Fafard, Appl. Phys. Lett. **78**, 79 (2001).

[4] S. Tang, S. Lin, et S. Lee, Appl. Phys. Lett. **78**, 2428 (2001).

[5] S. Hofer, H. Hirner, R. Bratschitsch, G. Strasser, et K. Unterrainer, Physica E **13**, 190 (2002).

[6] L. Rebohle, F. Schrey, S. Hofer, G. Strasser, et K. Unterrainer, Appl. Phys. Lett. **81**, 2079 (2002).

[7] S. Maimon, E. Finkmann, G. Bahir, S. E. Schacham, J. M. Garcia, et P. M. Petroff, Appl. Phys. Lett. **73**, 2003 (1998).

[8] S. Sauvage, P. Boucaud, T. Brunhes, V. Immer, E. Finkman, et J. Gerard, Appl. Phys. Lett. **78**, 2327 (2001).

[9] Z. Ye, J. Campbell, Z. Chen, E. Kim, et A. Madhukar, J. Appl. Phys. **92**, 7462 (2002).

[10] L. Chu, M. Arzberger, G. Böhm, et G. Abstreiter, J. Appl. Phys. **85**, 2355 (1999).

[11] J. Kim, P. Yu, J. Leem, M. Jeon, S. Noh, J. Lee, G. Kim, S. Kang, J. Kim, et S. Kim, J. Appl. Phys. **91**, 5055 (2002).

[12] K. Berryman, S. Lyon, et M. Segev, Appl. Phys. Lett. **70**, 1861 (1997).

[13] Z. Chen, E. Kim, et A. Madhukar, Appl. Phys. Lett. **80**, 2490 (2002).

[14] M. Maximov, A. Tsatsul'nikov, B. Volovik, D. Bedarev, A. Egorova, A. Zhukov, A. Kovsha, N. Bert, V. Ustinov, P. Kop'ev, et al., Appl. Phys. Lett. **75**, 2347 (1999).

[15] B. Levine, J. Appl. Phys. **74**, R1 (1993).

[16] E. Finkman, S. Maimon, V. Immer, G. Bahir, S. Schacham, F. Fossard, F. Julien, J. Brault, et M. Gendry, Phys. Rev. B **63**, 045323 (2001).

[17] E. Kim, A. Madhukar, Z. Ye, et J. Campbell, Appl. Phys. Lett. **84**, 3277 (2004).

[18] S. W. Lee, K. Hirakawa, et Y. Shimada, Appl. Phys. Lett. **75**, 1428 (1999).

[19] U. Bockelmann et G. Bastard, Phys. Rev. B **42**, 8947 (1990).

[20] J. Urayama, T. Norris, J. Singh, et P. Bhattacharaya, Phys. Rev. Lett. **86**, 4930 (2001).

[21] S. Hameau, J. N. Isaia, Y. Guldner, E. Deleporte, O. Verzelen, R. Ferreira, G. Bastard, J. Zeman, et J. M. Gérard, Phys. Rev. B **65**, 85316 (2002).

[22] G. Bastard, J. A. Brum, et R. Ferreira, Solid State Physics **44**, 229 (1991).

[23] O. Stier, *Electronic and optical properties of quantum dots and wires* (Berlin Studies in Solid State Physics. Wissenshaft & Teknik. Verlag., Berlin, 2001).

[24] G. Bastard, *Wave mechanics applied to semiconductor heterostructures* (Les éditions de physique, Les Ulis, 1996).

[25] A. Vasanelli, Thèse de doctorat, Université de Paris VI (2002).

[26] A. Vasanelli, R. Ferreira, H. Sakaki, et G. Bastard, Sol. Stat. Com. **118**, 459 (2001).

[27] S. Hameau, Y. Guldner, O. Verzelen, R. Ferreira, G. Bastard, J. Zeman, A. Lemaître, et J. M. Gérard, Phys. Rev. Lett. **83**, 4152 (1999).

Chapitre 4

Hétéro-structures à base de nitrure

Les matériaux à base de nitrures et éléments III tels que le GaN et ses alliages à base d'InN ou d'AlN présentent des propriétés électroniques et optiques intéressantes. A l'heure actuelle, ces semi-conducteurs font l'objet de recherches de la part de plusieurs groupes en France et à l'étranger. Malgré l'existence de dislocations très importantes, ils révèlent un rendement optique remarquable par rapport aux semi-conducteurs à base d'arséniure, même à température ambiante. Des lasers basés sur InGaN sont déjà commercialisés par la firme japonaise Nichia. Pourtant, ces semi-conducteurs ne sont pas encore bien compris du point de vue théorique.

Nous commençons par présenter ces matériaux et leurs propriétés peu communes. Ensuite, nous étudions des puits et des boîtes quantiques InGaN/GaN qui ont été développés au cours de ces dernières années pour les applications opto-électroniques (laser bleu, LED, ...). Nous montrons que l'Approximation du Cristal Virtuel (VCA), qui est très utilisée dans des alliages d'arséniure, échoue dans ces alliages de nitrure. Cet échec vient du fait que les paramètres physiques (masses effectives, offsets de bande, ...) dans ces semi-conducteurs sont beaucoup plus grands que ceux dans les semi-conducteurs conventionnels.

4.1 Propriétés remarquables

4.1.1 Structure cristallographique

Les matériaux de nitrures et éléments III peuvent cristalliser sous deux phases : l'une hexagonale (wurzite), l'autre cubique (zinc-blende). Dans les conditions ambiantes, les couches massives thermodynamiquement stables sont de type wurzite [1–3]. Dans ce cas, la structure cristalline est formée par un empilement successif de deux sous-réseaux hexagonaux compacts. L'un des deux sous-réseaux est composé des cations (élément V : N) ; l'autre des anions (élément III : Ga, Al ou In). La maille hexagonale d'une telle structure wurzite est représentée dans la figure 4.1, où les paramètres a et c permettent de la caractériser. Par convention, la direction [0001] est la direction de Ga et correspond à une liaison verticale allant de l'élément III vers l'azote. Les deux sous-réseaux hexagonaux sont décalés dans un cas idéal de

$\frac{5}{8}c$ suivant la direction [0001]. Le tableau 4.1.1 donne les paramètres de maille du GaN, du AlN et du InN.

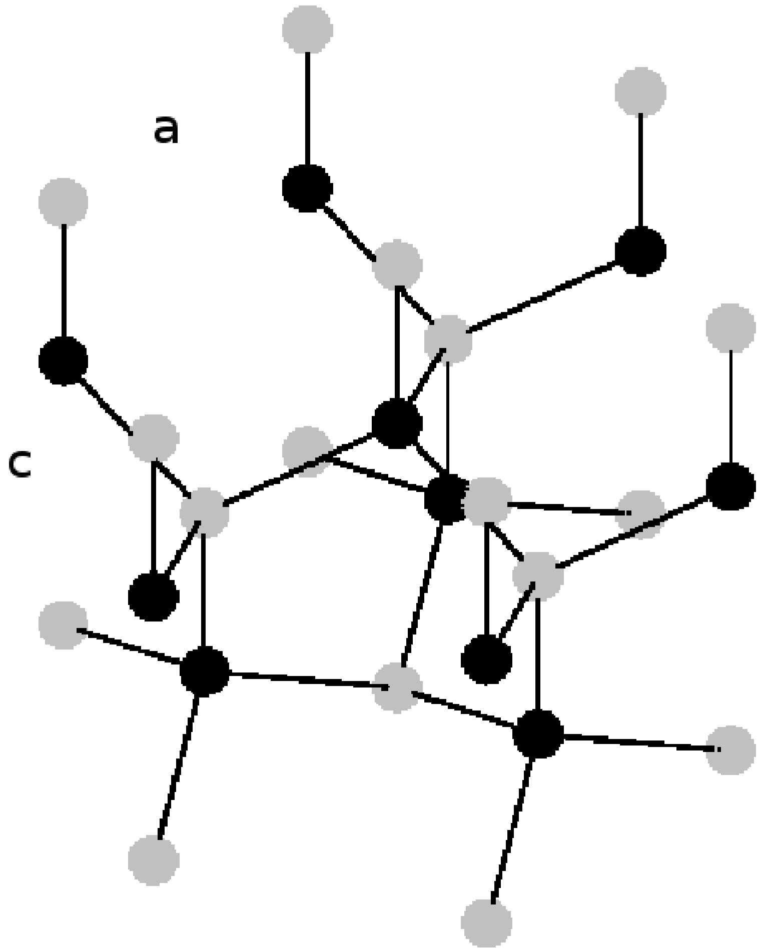


FIG. 4.1 – Représentation schématique d'une maille d'une structure wurzite, les sphères gris désignent l'élément V : N et les sphères pleines désignent un élément III : Ga, Al ou In.

Pour une structure wurzite idéale, le rapport $\frac{c}{a}$ vaut $\sqrt{\frac{8}{3}} \approx 1,633$. Dans les cas réels, ce rapport est corrélé à la différence d'électronégativité au niveau des liaisons atomiques du matériau. Plus la différence d'électronégativité est grande, plus l'écart par rapport à la structure idéale est important, donc plus les propriétés de polarisation sont fortes. On peut déduire du tableau 4.1.1 que les propriétés de polarisation sont dans l'ordre croissant pour GaN, InN et AlN.

4.1.2 Masses effectives

Le GaN, le AlN et le InN sont des semi-conducteurs à large bande interdite directe (tableau 4.2). La masse effective de la bande de conduction est reliée à l'énergie de

	GaN	AlN	InN
a (Å)	$3,189 \pm 0,001$	$3,110 \pm 0,003$	$3,54 \pm 0,01$
c (Å)	$5,185 \pm 0,001$	$4,980 \pm 0,003$	$5,70 \pm 0,01$
$\frac{c}{a}$	1,626	1,601	1,610

TAB. 4.1 – Paramètres de maille et rapport $\frac{c}{a}$ du GaN, du AlN et du InN d'après [4].

	GaN	AlN	InN
E_g (eV)	3,4 [6]	6,2 [7]	$\sim$ 0,8 [8] ou $\sim$ 1,9 [9]

TAB. 4.2 – Énergies du gap du GaN, du AlN et du InN à température ambiante mesurées par absorption optique.

la bande interdite par la relation [5] :

$$\frac{m_0}{m^*} \approx 1 + \frac{2P^2}{m_0 E_g} \tag{4.1}$$

où m_0 est la masse d'électron dans le vide, m^* est la masse effective. P est un élément de matrice qui est constant pour la plupart des semi-conducteurs du groupe IV, III-V et II-VI, avec $2P^2/m_0 \approx 20$ eV. La masse effective m^* varie donc dans le même sens que l'énergie du gap E_g. Comme les semi-conducteurs à base de nitrure ont les grands gaps, ils ont par conséquent les grandes masses effectives de conduction. Le tableau 4.3 donne les valeurs des masses effectives dans le GaN, AlN et le InN pour l'électron (e). Notons que la masse effective pour l'électron est légèrement anisotrope.

En ce qui concerne la bande de valence, les effets du champ cristallin et du couplage spin-orbite lèvent la dégénérescence du triplet du sommet de bande. Ce triplet se scinde en trois sous-bandes de valence : trous lourds, trous légers et trous "split-off". Les masses effectives des trous dans les directions parallèle (z) et perpendiculaire (t) à l'axe de croissance sont aussi récapitulées dans le tableau 4.3. Une caractéristique générale des nitrures et éléments III est de présenter des grandes valeurs de masses effectives. Pour les masses effectives de l'électron, les mesures expérimentales [12–15] sont en accord avec les déterminations théoriques [10, 11, 16, 17]. Il n'en est pas de même pour les différentes masses de trous [18, 19]. En particulier, pour le InN, il n'existe aucune mesure expérimentale. Les travaux théoriques prévoient des masses effectives des bandes de valence très élevées et très anisotropes.

	m_e^z/m_0	m_e^t/m_0	m_{hh}^z/m_0	m_{hh}^t/m_0	m_{lh}^z/m_0	m_{lh}^t/m_0	m_{ch}^z/m_0	m_{ch}^t/m_0
GaN [10]	0,20	0,18	1,10	0,27	0,60	0,30	0,17	0,77
AlN [10]	0,33	0,25	3,70	0,47	0,26	3,25	2,90	0,48
InN [11]	0,11	0,10	1,67	1,61	1,67	0,11	0,10	1,67

TAB. 4.3 – Valeurs des masses effectives dans le GaN, AlN et InN pour l'électron (e) et les trous (hh, lh et ch qui se refèrent par un abus de langage aux trous lourds, trous légers et trous "split-off"). Les exposants z et t sont relatifs à la masse selon l'axe de croissance et perpendiculairement à celui-ci.

	GaN	AlN	InN
Polarisation spontanée (C/m^2) [20]	-0,029	-0,081	-0,032
Polarisation spontanée (C/m^2) [21]	-0,074	-0,120	-0,050

TAB. 4.4 – Polarisation spontanée des nitrures III-V d'après des calculs ab initio.

4.1.3 Polarisation électrique

Comme la structure wurzite est non centro-symétrique, les nitrures et éléments III présentent des propriétés remarquables de piézo-électricité et de polarisation spontanée. Par définition, la polarisation macroscopique est le moment dipolaire par unité de volume, la moyenne étant prise sur le volume de la maille cristalline. Elle vaut :

$$\vec{P} = \frac{1}{V} \sum_i q_i \vec{r_i} \tag{4.2}$$

avec V le volume de la maille élémentaire et $\vec{r_i}$ le vecteur position de la charge q_i. La maille élémentaire d'un cristal semi-conducteur étant électriquement neutre, la polarisation résulte du fait que les barycentres des charges positives et négatives ne coïncident pas. Certains cristaux présentent dans leur état fondamental, sans qu'aucune contrainte mécanique extérieure soit appliquée, une polarisation non nulle, appelée polarisation spontanée. Le tableau 4.4 montre les valeurs des polarisations spontanées dans les semi-conducteurs à base de nitrure.

La polarisation piézo-électrique apparaît pour certains cristaux lors de l'application d'une contrainte mécanique. Dans une première approximation, elle est proportionnelle à la contrainte appliquée. Au niveau microscopique, la contrainte appliquée fait varier la distance entre les barycentres des charges positives et négatives au niveau d'une maille élémentaire. Le champ de polarisation électrique macroscopique selon la coordonnée i est donné par la relation (notation de Voigt) :

$$P_i^{pz} = \sum_j e_{ij} \epsilon_j \tag{4.3}$$

où e et ϵ sont respectivement les tenseurs piézo-électrique et de déformation. Pour un matériau soumis à une contrainte biaxiale dans le plan (x, y), seules les composantes ϵ_{xx}, ϵ_{yy}, et ϵ_{zz} sont non nulles et le champ de polarisation est dirigé selon l'axe z :

$$P_z^{pz} = e_{31}(\epsilon_{xx} + \epsilon_{yy}) + e_{33}\epsilon_{zz} \tag{4.4}$$

Soit en introduisant les coefficients d'élasticité C_{13}, C_{33} et le fait que $\epsilon_{xx} = \epsilon_{yy}$ (les axes x et y sont équivalents) et $\epsilon_{zz} = -2\epsilon_{xx}C_{13}/C_{33}$ (l'échantillon est en équilibre de force $\sum F = 0$) :

$$P_z^{pz} = \Big(e_{31} - \frac{C_{13}}{C_{33}} e_{33}\Big) 2\epsilon_{xx} \tag{4.5}$$

Le tableau 4.5 donne les constantes e_{31} et e_{33} pour les nitrures et éléments III ainsi que pour GaAs et CdTe à titre comparatif.

On peut remarquer que les valeurs absolues des constantes piézo-électriques dans les nitrures sont un ordre de grandeur plus élevées que dans les semi-conducteurs

	GaN	AlN	InN	GaAs	CdTe
e_{31} (C/m^2)	-0,49	-0,60	-0,57	0,06	-0,01
e_{33} (C/m^2)	0,73	1,46	0,97	-0,12	0,03

TAB. 4.5 – Constantes piézo-électriques des nitrures et éléments III ainsi que GaAs et CdTe.

III-V et II-VI conventionnels. En conséquence, dans un puits quantique, le champ électrique qui résulte de la différence de polarisation entre le puits et la barrière, varie de plusieurs centaines de kV/cm à plusieurs MV/cm selon les matériaux constitutifs du puits et des barrières.

Dans cette section, nous avons vu que les semi-conducteurs binaires de GaN, de InN et de AlN possèdent des propriétés très remarquables par rapport aux semi-conducteurs plus classiques tels que GaAs, CdTe, etc ... Dans les sections suivantes, nous allons examiner les effets de ces propriétés physiques du mélange du GaN et InN dans les hétéro-structures comme les puits ou les boîtes quantiques.

4.2 Puits quantiques GaInN/GaN

Dans cette section, nous allons examiner un puits quantique $In_{0,17}Ga_{0,83}N$. Plusieurs hétéro-structures ayant la même concentration d'indium ont été étudiées expérimentalement par le groupe GES à Montpellier [22, 23]. La largeur du puits est prise égale à 3,2 nm. Les masses effectives de l'électron et des trous ont été interpolées linéairement des valeurs de masses effectives données dans le tableau 4.3. Nous considérons seulement les trous lourds dans ces calculs même si les effets tels que le champ piézo-électrique, ... mélangent les trois sous-bandes de trou. Cette simplification vient du fait que ces calculs ont pour but de donner des résultats qualitatifs. Par conséquent, les valeurs des masses effectives de l'électron et du trou dans la direction de croissance (z) et dans le plan des couches (t) sont : $m_{ez} = 0,184\ m_0$, $m_{et} = 0,166\ m_0$ et $m_{ez} = 1,1\ m_0$, $m_{et} = 0,5045\ m_0$. Le champ piézo-électrique est pris égal à 2,45 MV/cm dans $In_{0,17}Ga_{0,83}N$ et -0,1 MV/cm dans GaN [22, 23] suivant la direction de croissance z.

En ce qui concerne les offsets de bandes, ils sont souvent mal connus. En fait, pour déterminer les offsets de bande de conduction et de bande de valence, on introduit la notion d'affinité électronique qui définit l'énergie à fournir à un électron pour qu'il passe du bas de bande de conduction au vide. La position relative des bandes de conduction est ensuite déterminée par cette quantité. L'offset des bandes de valence est déduite de l'offset électronique et des énergies des gaps. Cependant, le paramètre d'affinité d'électron est très difficile à mesurer. Seule celle de l'interface AlGaAs/GaAs est bien connue (pour cette interface, les offsets de bande de conduction (ΔE_c) et de valence (ΔE_v) prennent deux tiers et un tiers respectivement de la différence de gap). Par conséquent, on a tendance à utiliser les mêmes proportions pour les autres interfaces semi-conductrices. Dans ces calculs, les offsets de bande de conduction et de bande de valence ont été pris égaux à 1,8 eV et 0,9 eV respectivement. Notons qu'il y a beaucoup plus de fluctuation d'énergie dans les nitrures et éléments III que dans les arséniures quand dans une cellule donnée, un atome de gallium remplace un atome d'indium (les offset correspondants dans le cas GaAs/InAs sont 0,41 eV et 0,29 eV).

4.2.1 Approximation du cristal virtuel (VCA)

Malgré l'absence de l'invariance par translation, on décrit très souvent le comportement électronique d'un alliage par une structure de bande appelée Approximation du Cristal Virtuel (Virtual Crystal Approximation en anglais) [24]. Cette approximation consiste à remplacer les fluctuations du potentiel cristallin par un potentiel lisse représentant leur moyenne (figure 4.2). Concrètement, pour l'alliage $Ga_{1-x}In_xN$ et pour un type de porteur donné, le potentiel de la VCA vaut :

$$V_{\mathrm{VCA}} = xV_{\mathrm{In}} + (1-x)V_{\mathrm{Ga}} \tag{4.6}$$

où V_{In} et V_{Ga} sont les potentiels cristallins pour In et Ga. La VCA a été utilisée pour décrire les propriétés électroniques des hétéro-structures GaInN [25].

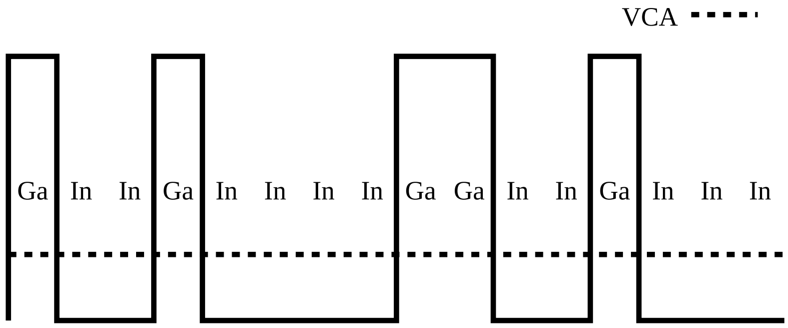


Fig. 4.2 – Fluctuation du potentiel cristallin dans un système unidimensionnel (ligne continue) et la VCA (ligne tiretée).

Dans ce qui suit de ce chapitre, nous allons montrer que le système $Ga_{1-x}In_xN$ se comporte d'une manière très différente. Des calculs numériques des états électroniques des puits et boîtes quantiques de $Ga_{1-x}In_xN$ montreront de grandes différences par rapport aux prédictions par la VCA. Parallèlement, nous indiquerons que les états électroniques de $Ga_{1-x}In_xAs$/GaAs sont très proches des prédictions par la VCA. La différence entre les deux familles d'alliage vient de l'offset beaucoup plus large entre GaN et InN que celui entre GaAs et InAs et des masses effectives plus lourdes dans les nitrures que les arséniures. Notons que Kent et Zunger ont, les premiers, prédit que les alliages à base de nitrure ne pouvaient être décrits par les modèles qui négligent des fluctuations [26].

4.2.2 Modèle

Le problème de puits quantique est réduit à un calcul bidimensionnel en considérant un potentiel effectif dans le plan des couches qui est la moyenne du potentiel tridimensionnel actuel pondéré par $|\Psi(z)|^2$. $\Psi(z)$ est la solution de fonction enveloppe d'un problème unidimensionnel en présence d'un champ piézo-électrique et un puits quantique carré avec une profondeur de 0,31 eV pour les électrons ($= 0,17\ \Delta E_c$) et 0,15 eV pour les trous ($= 0,17\ \Delta E_v$) (figure 4.3). Ψ est résolue par la méthode de différences finies (voir l'annexe C). Ce potentiel effectif bidimensionnel est ensuite mis dans une grande boîte de quantification qui confine les porteurs dans le plan des couches dans un carré avec les dimensions : $L \times L = 36$ nm $\times$ 36 nm. Un échantillon est engendré en remplissant de façon aléatoire chaque cellule unitaire par un atome d'indium avec une probabilité de 0,17 ou de gallium avec une probabilité de 0,83.

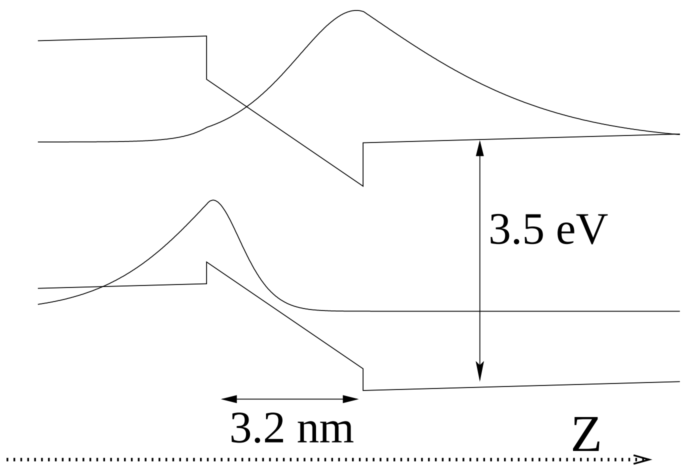


FIG. 4.3 – Diagramme de bande et fonctions d'onde dans une puits quantique dans la direction de croissance.

Les propriétés d'un seul échantillon n'ont aucune chance de pouvoir être comparées avec les expériences. Cependant, les propriétés moyennées, obtenues en prenant une moyenne arithmétique des résultats d'une quantité physique donnée (densité d'états, densité optique d'états, ...) dans une série d'échantillons, ont plus de signification physique car elles peuvent être (en principe) comparées aux résultats expérimentaux sur un ensemble de boîtes ou puits quantiques. C'est pour ces propriétés moyennes que l'on peut discuter l'efficacité ou l'échec de la VCA. Une quantité importante est D_e, la densité d'états électronique moyenne, qui est définie par :

$$D_e(\epsilon) = \frac{1}{\pi N} \sum_{j=1}^{N} \sum_{i} \frac{\Gamma/2}{\left(\epsilon - \epsilon_{ei}\,(j)\right)^2 + \left(\Gamma/2\right)^2} \tag{4.7}$$

où N est le nombre d'échantillons qui sont obtenus par les tirages aléatoires, $\epsilon_{ei}(j)$ la $i-$ème valeur propre de $j-$ème échantillon et Γ est prise égale à 1 meV. Nous replaçons les pics delta par des distributions lorentziennes pour des commodités de représentation. Une autre quantité également importante est la densité d'états optique électron-trou moyennée qui est définie comme :

$$D_{eh}(\epsilon) = \frac{1}{\pi N} \sum_{j=1}^{N} \sum_{k,l} \frac{(\Gamma/2)\left|\langle \Psi_{ek}(j) | \Psi_{hl}(j) \rangle\right|^2}{\left(\epsilon - \epsilon_{ek}(j) - \epsilon_{hl}(j)\right)^2 + \left(\Gamma/2\right)^2} \tag{4.8}$$

où Ψ_{ek} et Ψ_{hl} sont les états d'indice k et l d'électron et de trou.

4.2.3 Résultats et discussions

La figure 4.4 montre la distribution des écart-type $\delta\sigma$ tracé en fonction de la position moyenne dans une direction (x) dans le plan pour l'électron (panneau b) et pour le trou (panneau c). Les résultats de la VCA sont présentés dans le panneau a. Ils sont indépendants du type de porteurs. En fait, dans la VCA, les fonctions d'onde sont les solutions sinus, ou plus précisement les produits des solutions sinus dans chaque direction x et y. Par conséquent, la position moyenne $\langle x \rangle = L/2$ et l'écart-type $\delta\sigma = L\sqrt{\frac{1}{12} - \frac{1}{2\pi^2 n_x^2}}$ ($n_x = 1, 2, 3, ...$).

Il est évident que $\langle x \rangle$ et $\delta\sigma$ pour le trou diffèrent fortement des prédictions de la VCA. Les électrons avec leur masse plus légère sont moins confinés par les clusters riches en indium et présentent un $\delta\sigma$ plus proche des résultats de la VCA que les trous.

La figure 4.5 illustre la densité optique d'états électron-trou $D_{eh}(\epsilon)$ en fonction de l'énergie de transition ϵ sur $N = 50$ échantillons. D_{eh} est proportionnelle au coefficient d'absorption inter-bande si l'on néglige l'interaction coulombienne, ce qui est justifiable ici à cause de la forte séparation électron-trou par le champ électrique ($2,45$ MV/cm $\times$ $3,2$ nm $=$ 770 meV comparée à l'énergie d'interaction coulombienne de l'ordre de 44 meV). La VCA donne des pics d'absorption, discrétisés par les dimensions finies de la grande boîte de quantification (ligne tiretée). Nous voyons que l'alliage aléatoire (ligne continue) produit un élargissement de ces pics qui est très important. Notons par exemple la queue de bande considérable ($D_{eh} > 0.05$) qui se développe jusqu'à 15 meV au-dessous du premier pic de la VCA. Cette queue de bande correspond aux transitions entre les états localisés autour des clusters d'indium, en particulier pour les trous. La diminution de la densité optique d'états aux hautes énergies est non physique. Elle reflète la coupure des états propres des trous et des électrons aux hautes énergies. Notons finalement que la photo-luminescence est trouvée expérimentalement à $\approx\ 2,6\ eV$ dans les puits quantiques $Ga_{0,83}In_{0,17}N/GaN$ [22], valeur avec laquelle nos résultats sont cohérents.

4.3 Boîtes quantiques GaInN/GaN

4.3.1 Croissance de boîtes quantiques de GaInN

Les boîtes quantiques de GaInN s'obtiennent à partir du mode de croissance Stranski-Krastanov (bien contrôlé par MBE [27, 28], voir aussi la section 1.1.2) résultant des contraintes induites par la forte différence de paramètre de maille entre la couche de GaN et celle de GaInN (la différence de paramètre de maille entre le GaN et le InN atteint 11 %). La transition de mode de croissance de 2D à 3D se produit à partir d'une concentration critique en indium de 12 % [27]. Pour une concentration en indium de 15-20 % typique des échantillons étudiés par le groupe à Montpellier [23], la transition 2D-3D se réalise après le dépôt d'une couche de mouillage de GaInN d'environ 4-5 monocouche ($\approx$ 1 nm d'épaisseur). Les îlots ont la forme de pyramide tronquée dont le diamètre moyen et la hauteur moyenne sont respectivement 5-15 nm et 2-4 nm. L'angle d'une facette par rapport à la base est de l'ordre de 30°.

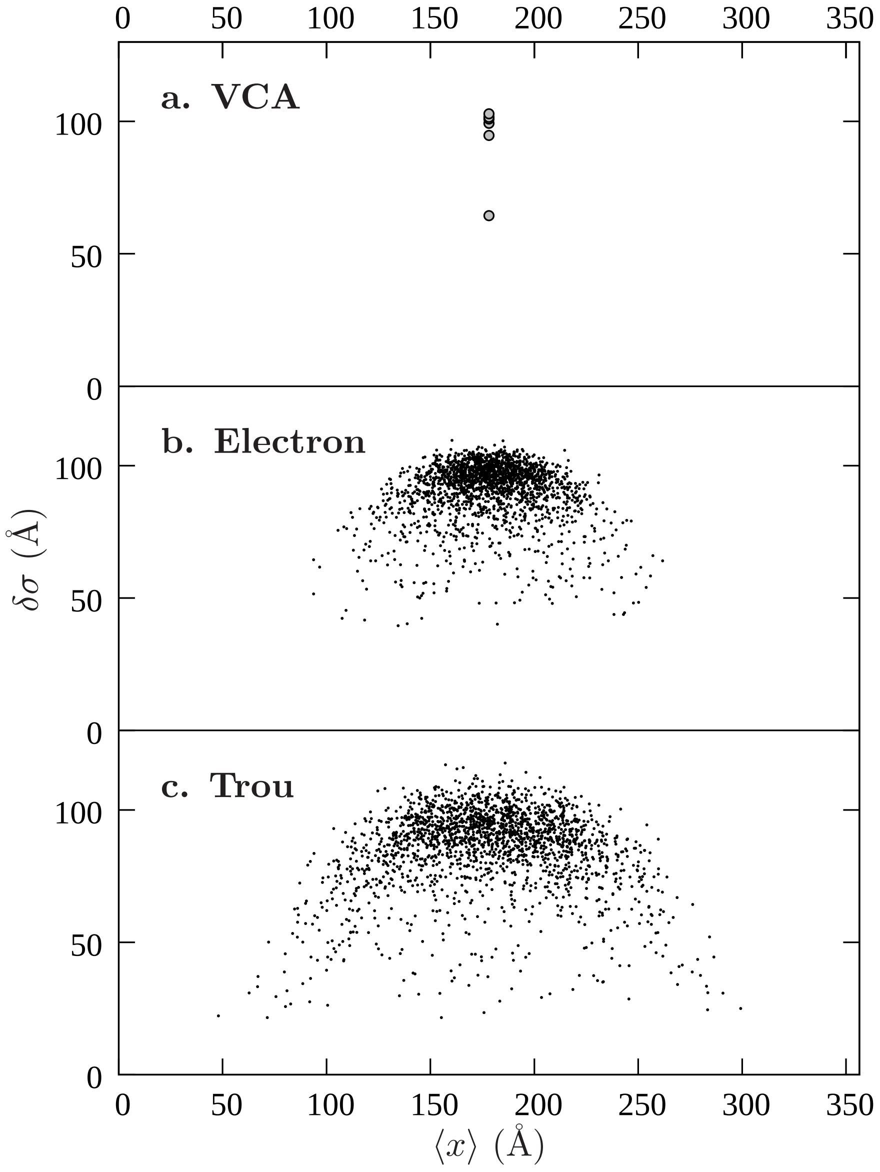


FIG. 4.4 – Distribution des écarts-type $\delta\sigma$ par rapport à la position moyenne $\langle x \rangle$ en x pour la VCA (a), électrons (b) et trous (c) dans un puits quantique $Ga_{0,83}In_{0,17}N/GaN$. Résultats obtenus par les différents alliages aléatoire (50 échantillons).

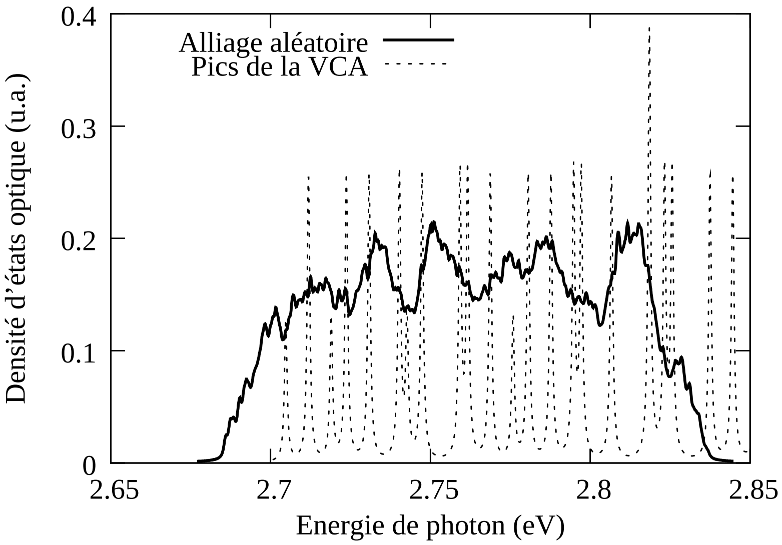


FIG. 4.5 – Densités d'états optiques moyennées sur $N = 50$ $Ga_{0,83}In_{0,17}N/GaN$ puits quantiques. Alliages aléatoires. Ligne tiretée : pics de la VCA.

4.3.2 Modèle

La structure de boîte quantique de GaInN/GaN dans nos calculs est basée sur les boîtes étudiées expérimentalement par le groupe à Montpellier. Il s'agit d'une pyramide tronquée avec une base hexagonale (12 nm de diamètre), une hauteur de 2,6 nm et un angle de base de 30°. Cette boîte flotte sur une couche de mouillage de 1,1 nm d'épaisseur et est insérée dans une matrice de GaN. Une pyramide avec les mêmes paramètres géométriques composée de $Ga_{0,5}In_{0,5}As/GaAs$ sera aussi considérée à titre de comparaison (50 % de In au lieu de 17 % a été considéré afin d'avoir des états liés dans la pyramide de GaInAs).

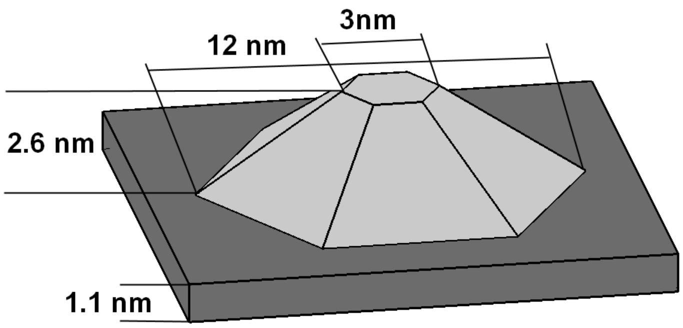


FIG. 4.6 – Géométrie d'une boîte quantique de GaInN/GaN avec sa couche de mouillage.

Le potentiel est discrétisé en cellules parallélipipédiques rectangles dans chacune desquelles le potentiel est constant. Un échantillon donné est ensuite obtenu en remplissant chaque cellule unitaire par un atome d'indium (dans la boîte et la couche de mouillage) ou un atome de gallium, ce qui correspond à un potentiel soit 0 (In) ou ΔE_c (Ga) pour les électrons et soit 0 (In) ou ΔE_v (Ga) pour les trous. Deux types de tirage ont été réalisés. Le premier type de tirage correspond aux cellules non corrélées où la probabilité pour qu'une cellule donnée soit occupée par un atome d'indium est x $(= 0,17)$. Cette probabilité est indépendante de l'occupation des autres cellules. Le deuxième type de tirage simule la ségrégation d'indium, qui a été observée en images de microscopie [29, 30]. Pour une cellule considérée, si au moins une de ses premières voisines a été occupée par un atome d'indium, une probabilité $p > x$ $(x = 0,17)$ est utilisée pour déterminer la présence d'un In. Dans le cas contraire, un atome In a une probabilité $p' < x$ d'occuper cette cellule. Cette probabilité conditionnelle favorise donc la formation des clusters d'indium dans GaInN. Les seuls échantillons retenus dans l'analyse sont ceux dont la fraction d'indium dans la boîte quantique (et la couche de mouillage) est dans l'intervalle $[0,17 - 0,18]$.

Pour déterminer le niveau de ségrégation d'indium, nous introduisons la quantité nombre moyen des premiers voisins d'indium d'un indium. Ce nombre $\langle n \rangle$ est calculé de manière suivante : pour chaque atome d'indium dans l'échantillon, nous comptons le nombre de ses premiers voisins qui contiennent un atome d'indium. Ensuite, nous prenons la moyenne arithmétique de ce nombre sur l'ensemble des sites d'indium, ce qui donne la quantité $\langle n \rangle$. Plus ce nombre est grand, plus la ségrégation d'indium est forte. Pour un alliage $Ga_{0,83}In_{0,17}N/GaN$ aléatoire, ce nombre vaut environ : $\langle n \rangle = 0,17 \times 6 = 1,02$ car une cellule a six premiers voisins.

La boîtes quantique et sa couche de mouillage sont mises dans une grande boîte de quantification avec une base carrée (14,9 nm de largeur) et une hauteur de 7,9 nm. Les fonctions d'onde sont développées sur 75.000 fonctions sinus. Les six premiers états propres sont évalués par une diagonalisation exacte basée sur l'algorithme de Lánczos.

4.3.3 Résultats et discussions

Boîtes quantiques à base de nitrure

La figure 4.7 montre la densité moyenne d'états électronique pour une pyramide de $Ga_{0,83}In_{0,17}N/GaN$ (100 échantillons) ; la densité optique d'états présente des résultats similaire bien que les états de trou puissent être non-liés dans la pyramide. Les résultats de la VCA montre un doublet excité qui se situe à 90 meV au-dessus de l'état fondamental et à 80 meV au-dessous d'un triplet. Le cas de l'alliage aléatoire $Ga_{0,83}In_{0,17}N/GaN$ (probabilité indépendante) montre un décalage vers le rouge et un élargissement considérable. Notons en particulier la tendance vers la fermeture des gaps entre les traces des pics de la VCA. Cet effet est plus important quand la ségrégation d'indium est présente dans nos calculs. De plus, augmenter la ségrégation rend la densité d'états de moins en moins ressemblante aux résultats de la VCA.

Comparaisons avec des boîtes d'arséniure

Dans cette dernière partie de ce chapitre, nous nous intéressons à l'effet de l'alliage dans les boîtes quantiques GaInAs/GaAs. Nous allons montrer que les pyramides GaInAs/GaAs (50 échantillons) présentent une densité d'états moyenne très

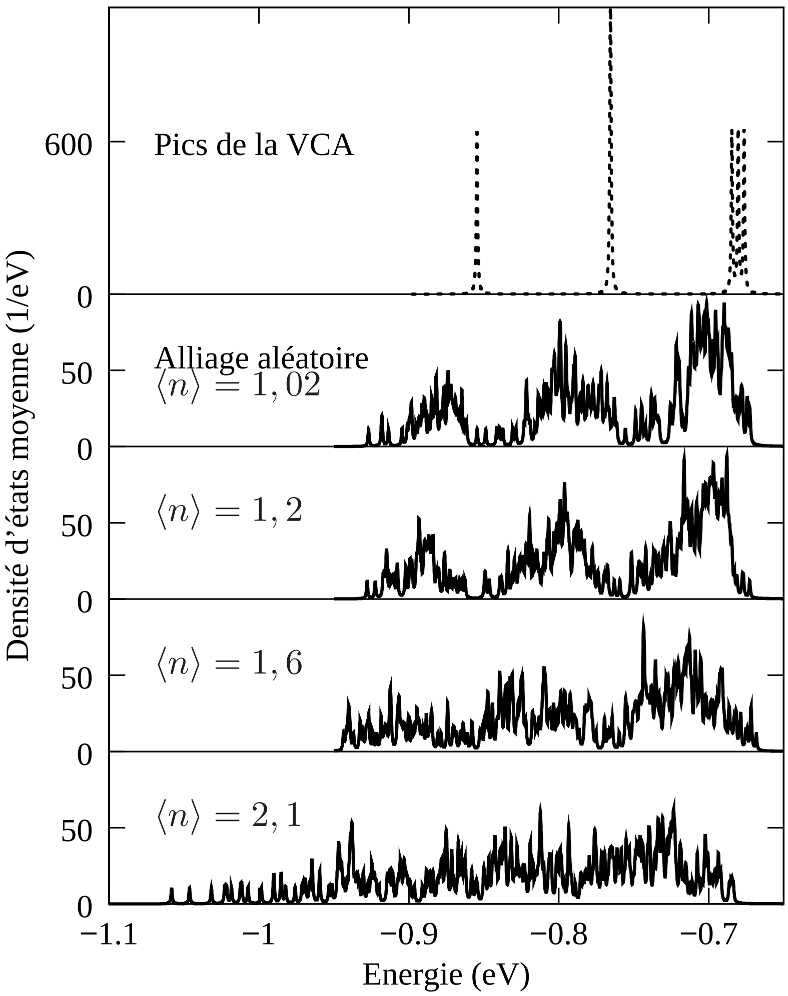


FIG. 4.7 – Densités d'états électroniques moyennées sur $N = 100$ $Ga_{0,83}In_{0,17}N/GaN$ pyramides. $\langle n \rangle$ est le nombre moyen des voisins d'Indium pour une cellule d'Indium. De haut en bas : résultats de la VCA (son échelle verticale est différente des autres), alliage aléatoire $\langle n \rangle = 0,17 \times 6 = 1,02$ et des alliages augmentant en ségrégation $\langle n \rangle = 1,2$; $\langle n \rangle = 1,6$; $\langle n \rangle = 2,1$.

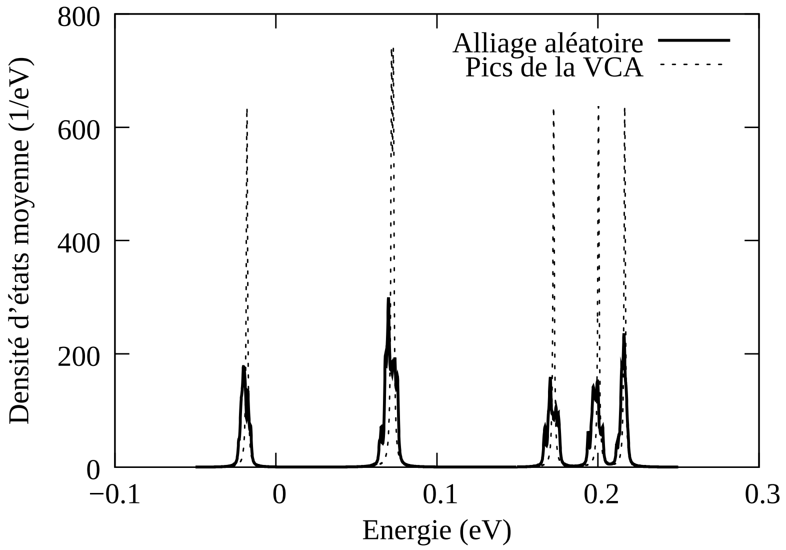


FIG. 4.8 – Densités d'états moyennées sur $N = 50$ $Ga_{0,5}In_{0,5}As/GaAs$ pyramides. Ligne continue : alliage aléatoire, ligne tiretée : résultat de la VCA.

proche des résultats de la VCA (figure 4.8). Nous considérons une boîte quantique avec les mêmes géométries que les boîte à base de nitrure. Cette boîte et sa couche de mouillage contiennent un alliage aléatoire de $Ga_{0,5}In_{0,5}As/GaAs$. Bien que le pourcentage de 50 % d'alliage doive présenter le maximum de désordre, nous voyons que les pics de la densité d'états calculée sont bien séparés l'un de l'autre, et plus étroits que ceux dans l'alliage de nitrure. Notons ensuite que la queue de bande s'étend seulement quelques meV au-dessous des pics de la VCA. Par conséquent, si l'on connaît la forme d'une pyramide de $Ga_{0,5}In_{0,5}As/GaAs$, la figure 4.8 montre qu'il est raisonnable d'essayer d'identifier les pics, fitter leur différence d'énergie, ... comme beaucoup de groupes l'ont fait. D'autre part, la grande déviation des résultats de la VCA dans les boîtes de nitrure démontre qu'une attribution de pic dans ce système est plutôt incertaine.

4.4 Conclusions

Dans ce chapitre, nous avons vu que les nitrures et éléments III, matériaux à grand gap, présentent des propriétés physiques originales de polarisation en comparaison avec des semi-conducteurs plus conventionnels tels que GaAs, CdTe, ... Cette propriété remarquable conduit à la présence de forts champs électriques de l'ordre du MV/cm dans les hétéro-structures. Ces semi-conducteurs à base de nitrure possèdent aussi les grandes valeurs des masses effectives. Ce sont ces grandes valeurs de masses effectives et de gap qui rendent l'Approximation du Cristal Virtuel (VCA) non valable dans les hétéro-structures d'alliage de nitrure, comme le montrent nos calculs numériques.

Bibliographie

[1] W. J. Meng, dans *Groupe III Nitride*, edité par J. H. Edgar (INSPEC, London, UK, 1994), pp. 22–29.

[2] I. Akasaki et H. Amano, dans *Groupe III Nitride*, edité par J. H. Edgar (INSPEC, London, UK, 1994), pp. 30–34.

[3] T. L. Tansley, dans *Groupe III Nitride*, edité par J. H. Edgar (INSPEC, London, UK, 1994), pp. 35–42.

[4] M. Leszcynski, T. Suski, J. Domagala, et P. Prystawko, dans *Properties, processing and applications of gallium nitride and related semiconductors*, edité par J. H. Edgar, S. Strite, I. Akasaki, H. Amano, et C. Wetzel (Electronic Materials Information Service, London, 1999), vol. 23, p. 6.

[5] P. Y. Yu et M. Cardona, *Fundamentals of semiconductors* (Springer, Berlin, 1999).

[6] H. P. Maruska et J. J. Tietjen, Appl. Phys. Lett. **23**, 117 (1969).

[7] W. M. Yim, E. J. Stofko, P. J. Zanzucchi, J. I. Pankove, M. Ettenberg, et S. L. Gilbert, J. Appl. Phys. **44**, 292 (1973).

[8] V. Y. Davydov, A. A. Klochikhin, R. P. Seisyan, V. V. Emtsev, S. V. Ivanov, F. Bechstedt, J. Furthmüller, H. Harima, A. V. Mudryi, J. A. O. Semchinova, et al., Phys. Stat. Sol. b **229**, R1 (2002).

[9] T. L. Tansley et C. P. Foley, J. Appl. Phys. **59**, 3241 (1986).

[10] S. L. Chuang et C. S. Chang, Phys. Rev. B **54**, 2491 (1996).

[11] Y. C. Yeo, T. C. Chong, et M. F. Li, J. Appl. Phys. **83**, 1429 (1998).

[12] P. Perlin, E. Litwin-Staszewska, B. Suchanek, W. Knap, J. Camassel, T. Suski, R. Piotrzkowski, I. Grzegory, S. Porowski, E. Kaminska, et al., Appl. Phys. Lett. **68**, 1114 (1996).

[13] W. Knap, S. Contreras, H. Alause, C. Skierbiszewski, J. Camassel, M. Dyakonov, J. L. Robert, J. Yang, Q. Chen, M. A. Khan, et al., Appl. Phys. Lett. **70**, 2123 (1997).

[14] T. Inushima, T. Yagushi, A. Nagase, et T. Shirashi, Inst. Phys. Conf. Ser. **142**, 971 (1996).

[15] V. A. Tyagai, A. M. Evstigneev, A. N. Krasiko, A. F. Adreeva, et V. A. Malakhov, Sov. Phys. Semicond. **11**, 1257 (1977).

[16] M. Susuki, T. Uenoyama, et A. Yanase, Phys. Rev. B **52**, 8132 (1995).

[17] T. Yang, S. Nakajima, et S. Sakai, Jpn. J. Appl. Phys. **34**, 5912 (1995).

[18] L. Eckey, A. Hoffmann, P. Thurian, I. Broser, B. K. Meyer, et K. Hiramatsu, Mater. Res. Soc. Symp. Proc. **482**, 555 (1998).

[19] M. Tchounkeu, O. Briot, B. Gil, J. P. Alexis, et R. L. Aulombard, J. Appl. Phys. **80**, 5352 (1996).

[20] F. Bernardini, V. Fiorentini, et D. Vanderbilt, Phys. Rev. B **56**, R10024 (1997).

[21] F. Bechstedt, U. Grossner, et J. Furthmüller, Phys. Rev. B **61**, 8003 (2000).

[22] A. Morel, P. Lefebvre, S. Kalliakos, T. Taliercio, T. Bretagnon, et B. Gil, Phys. Rev. B **68**, 045331 (2003).

[23] A. Morel, Thèse de doctorat, Université de Montpellier II (2002).

[24] W. A. Harrison, *Elementary electronic structure* (World Scientific, Singapore, 1999).

[25] A. Hangleiter, Phys. Stat. Sol. C **6**, 1816 (2003).

[26] P. Kent et A. Zunger, Phys. Rev. Lett. **86**, 2613 (2001).

[27] N. Grandjean et J. Massies, Appl. Phys. Lett. **72**, 1078 (1998).

[28] C. Adelman, J. Simon, G. Feuillet, N. T. Pelekanos, B. Daudin, et G. Fishman, Appl. Phys. Lett. **76**, 1570 (2000).

[29] Y. Narakawa, Y. Kuwakima, S. Fujita, S. Fujita, et S. Nakamura, Phys. Rev. B **55**, R1938 (1997).

[30] K. O'Donnell, R. Martin, et P. Middleton, Phys. Rev. Lett. **82**, 237 (1999).

Chapitre 5

Tétrapodes de CdSe

Ce chapitre présente un travail effectué en collaboration avec l'équipe expérimentale dirigée par J. Wang à Hong Kong. Nous nous intéressons à l'étude expérimentale et théorique des structures de boîtes en forme de sphère ou de tétrapode de CdSe. La croissance des nanocristaux CdSe a été faite par voie chimique à l'air libre. La structure cristalline des tétrapodes est déterminée par une analyse de microscopie électronique en transmission à hautes résolutions (HRTEM) qui montre que le tétrapode a un corps de zinc-blende et quatre bras de wurzite. La structure électronique du tétrapode a été calculée en parallèle avec celle de la boîte sphérique, notre objectif primordial étant de comprendre en quoi l'adjonction de quatre bras à une boîte sphérique modifient le confinement.

5.1 Croissance des échantillons

La synthèse des nanocristaux de CdSe a été faite par des techniques chimiques standards à l'air libre. Un mélange de CdO (1,8 mmole, 0,2311 g), acide oléique (OA, 6,0 mmole) et diphényléther (8 ml) a été chauffé jusqu'à 180°C pendant 2 heures. Ensuite, une solution de 3,2 g de sélenium-TOP, qui contient 0,32 g, 4,0 mmole de sélenium, a été injectée très rapidement dans cette solution chaude. La synthèse a été effectuée sous flux de N_2. A un temps de réaction donné (1 h), un aliquote a été sorti du flacon de réaction par un petit seringue et a été rapidement transféré dans une fiole avec du chloroforme. Le refroidissement rapide de l'aliquote chaud par le chloroforme froid a stoppé la croissance des nanocristaux. Les nanocristaux de CdSe obtenus par cette technique ont une forme sphérique et constituent l'échantillon A. De plus, il a été trouvé que des nanocristaux de CdSe ayant une forme de tétrapode pouvaient être obtenus en suivant la même procédure que celle décrite précédemment en ajoutant 0,2 mmole en plus de $MnCl_2$, $FeCl_2$ et HCl (solution aqueuse de 37%), respectivement, au mélange de CdO, OA et diphényléther avant de chauffer. Les trois échantillons obtenus par ajout séparé de $MnCl_2$, $FeCl_2$ et HCl sont appelés comme échantillons B, C et D respectivement.

La taille, la forme et les structures cristallines des nanocristaux de CdSe ont été examinées en utilisant une microscopie électronique en transmission à haute résolution (HRTEM) fonctionnant à 200 kV avec une résolution spatiale de 0,17 nm. La composition des nanocristaux de CdSe a été déterminée par un spectromètre dis-

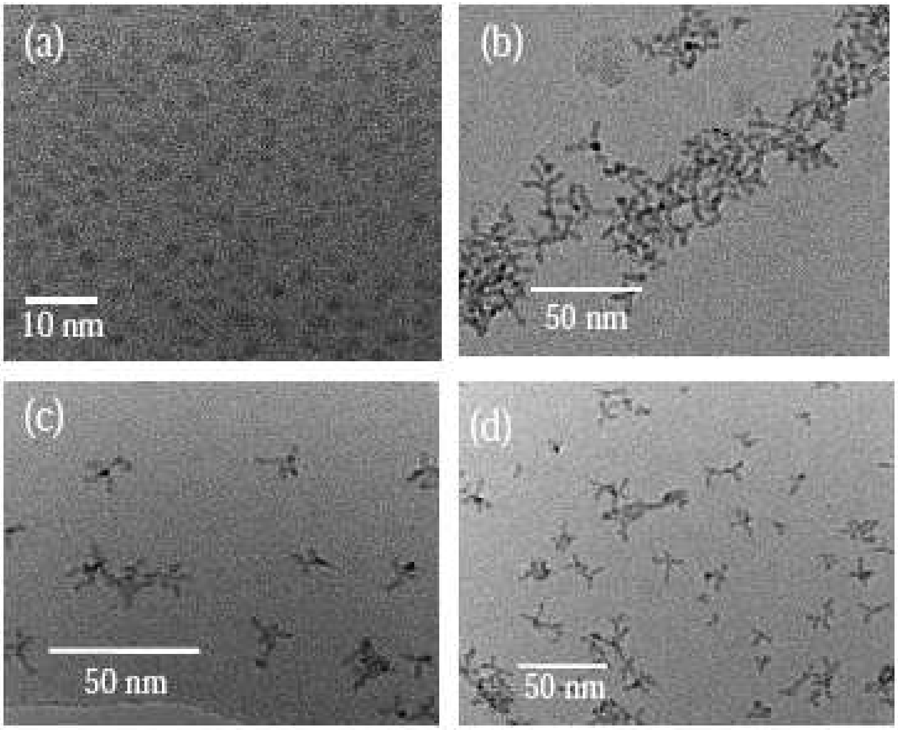


FIG. 5.1 – Images TEM de (a) échantillon A, CdSe ; (b) échantillon B, CdSe : $MnCl_2$; (c) échantillon C, CdSe : $FeCl_2$, (d) échantillon D, CdSe : HCl.

persif en énergie de rayon X (EDS) dans le microscope électronique en transmission. Des spectres d'absorption optique ont été obtenus par un spectromètre Milton Roy Spectronic 300. Des spectres de photo-luminescence ont été obtenus en utilisant un dispositif standard avec laser Argon ($\lambda = 488$ nm). Pour les deux expériences d'absorption optique et de photo-luminescence, les échantillons de CdSe ont été utilisés en solution.

5.2 Imagerie des échantillons

Figure 5.1 (a) montre une image TEM typique des nanocristaux de CdSe ayant une forme de la boîte sphérique (échantillon A). Comme on peut le constater, les boîtes quantiques de CdSe sont presque sphériques et le diamètre moyen des boîtes est environ 4 nm (estimé par moyenne sur 50 boîtes clairement visibles dans les images TEM). Les figures 5.1 (b), (c) et (d) sont des images TEM illustrant des nanocristaux de CdSe ayant une forme de tétrapode. Ils sont formés par ajout de 0,2 mmole de $MnCl_2$, $FeCl_2$ ou HCl respectivement dans le précurseur de cadmium du système de réaction de CdSe donnant la forme sphérique pure. Le pourcentage de tétrapode va jusqu'à 80 % pour tous les trois échantillons, ce qui est beaucoup plus grand que celui annoncé précédemment [1, 2]. Le diamètre du corps, la largeur et la longueur des bras sont estimés par une analyse HRTEM. Les résultats sont donnés dans le tableau 5.1.

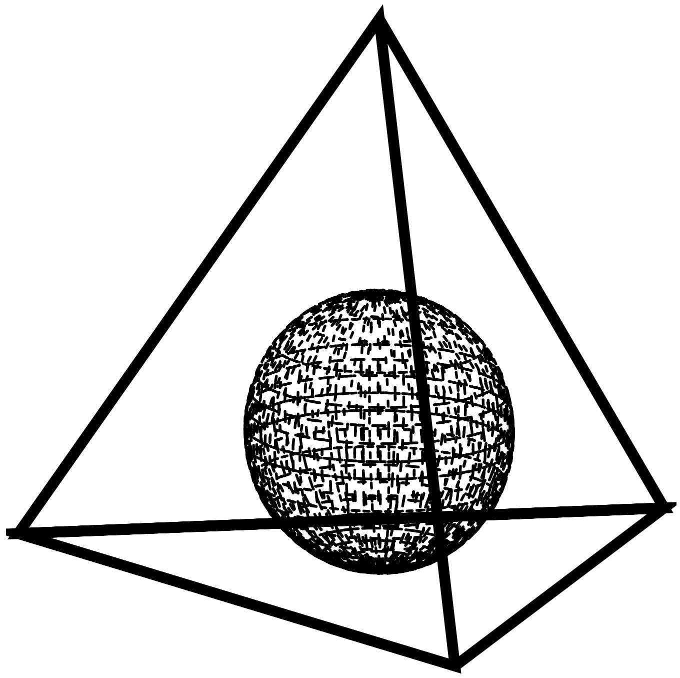


FIG. 5.2 – Le corps sphérique et ses quatre facettes équivalentes vers lesquelles pointent les bras.

Echantillon	Diamètre	Taille des bras (nm)		Pic de PL (eV)		Pic d'absorption (eV)	
	corps	Longueur	Largeur	Position	FWHM	Premier	Deuxième
A	4,0	/	/	2,249	0,120	2,255	2,755
B	4,2	9,5	3,3	2,123	0,144	2,171	2,659
C	4,1	8,5	3,1	2,204	0,254	2,207	2,690
D	4,0	8,1	3,0	2,141	0,272	2,215	2,716

TAB. 5.1 – Résumé des propriétés des échantillons.

La structure cristalline détaillée des tétrapodes CdSe a été analysée par HRTEM. Les tétrapodes ont un corps zinc-blende avec quatre bras wurzite pointant vers les quatre facettes équivalentes du corps (figure 5.2), comme ce qui a été proposé pour CdTe [3]. Les figures 5.3 (a) et (b) montrent les images HRTEM des structures de tétrapode de CdSe formées par un corps et 4 bras, qui sont vus presque le long de la direction [111] du corps de CdSe. Par conséquent, trois bras (indexés I, II et III) se trouvent à un angle de 120° l'un de l'autre autour du corps tandis que le quatrième bras superpose avec le corps. Tous les bras ont été identifiés comme ayant une structure hexagonale et presque épitaxialement connectés au corps sphérique de CdSe le long des quatre directions $< 111 >_{\mathrm{CdSe}}$. La structure d'interface est $\{111\}_{\mathrm{CdSe}} \parallel \{0001\}_{\mathrm{bras}}$. A partir des observations, presque tous les corps de CdSe ont une structure cristalline cubique simple. Pourtant, des défauts d'empilement peuvent coexister.

La figure 5.3 (c) montre une image HRTEM prise le long de la direction [110]

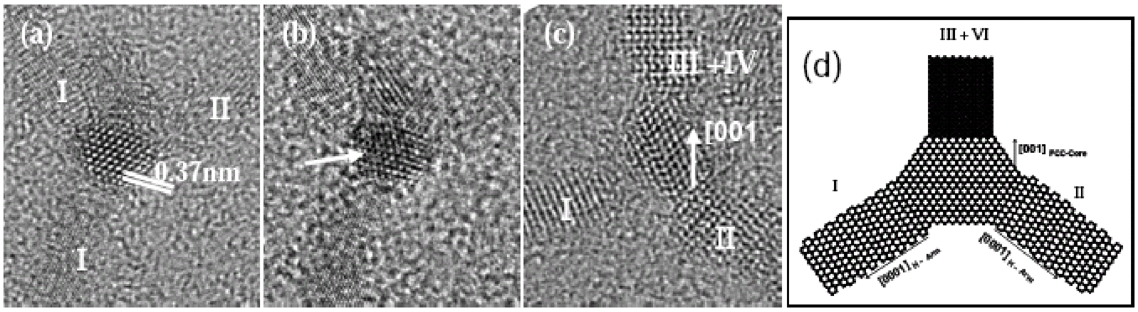


FIG. 5.3 – Images HRTEM de la structure tétrahédrale avec un corps de CdSe et quatre bras. (a) et (b) sont prises le long de la direction [111] avec différentes conditions focales, et (c) le long de la direction [110]. (d) est un dessin schématique des la nanostructure tétrahédrale vue le long de la direction [110] du corps de CdSe.

du corps. La flèche indique un défaut d'empilement dans le corps. Les bras I et II sont typiquement la structure vue le long de l'orientation $[1\bar{1}20]$ tandis que les bras III et IV se superposent (leur $[0\bar{2}23]$ est presque parallèle à la $[110]_{\mathrm{CdSe}}$ ou la direction du flux d'électron dans cette figure). La figure 5.3 (d) montre un dessin schématique de la structure de tétrapode vue le long de la direction [110]. Dans ce cas, la superposition des bras III et IV produit un plus fort contraste d'image que présenté dans la figure 5.3 (c). Les analyses ci-dessus confirment le modèle de structure proposé précédemment pour des tétrapodes CdTe [3]. Finalement nous montrons dans la figure 5.4 un dessin schématique en 3D d'un tétrapode avec les paramètres géométriques de nos échantillons (rayon du corps 4 nm, largeur des bras 3 nm et leur longueur 8 nm).

5.3 Calculs numériques

Dans cette section, nous présentons les résultats des calculs numériques que nous avons menés pour ces types de structure. Nous allons calculer seulement les états électroniques afin de donner des indications qualitatives pour les résultats expérimentaux. Nous utilisons toujours le formalisme fonction enveloppe à une bande. Le Hamiltonien étudié est :

$$H = \frac{\hat{p}^2}{2m^*} + V(\vec{r}) \tag{5.1}$$

où l'on suppose $V(\vec{r}) = -3$ eV dans le tétrapode et $V(\vec{r}) = 0$ à l'extérieur. La valeur 3 eV est choisie qualitativement et a pour but d'imposer un offset électronique important entre le tétrapode de CdSe et l'extérieur (qui est la barrière). Avec une telle masse effective et une telle barrière de confinement, les états électroniques sont très fortement localisés dans le tétrapode. La masse effective des électrons $m^* = 0,1\ m_e$ où m_e est la masse d'électron dans le vide.

Comme la structure tétrapode n'a pas de symétrie particulière, nous avons utilisé une base d'onde plane pour décrire la cinématique dans le système (voir la discussion sur le choix des bases d'état dans la section 1.2.1). 30 fonctions d'onde plane ont

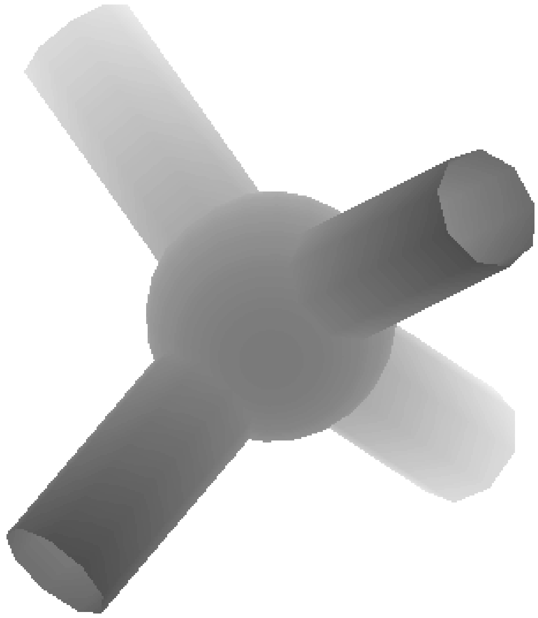


Fig. 5.4 – Dessin schématique en 3D d'un tétrapode avec les paramètres de nos échantillons.

utilisées pour chaque direction, ce qui fait une dimension de 27 000 de l'espace de Hilbert. Le potentiel est discrétisé en des cellules parallélipipédiques rectangles dans lesquelles le potentiel de confinement est constant. Les dix premiers états ont été obtenus par une diagonalisation exacte basée sur l'algorithme de Lánczos.

5.3.1 Niveaux d'énergie

La figure 5.5 montre la dépendance des énergies propres calculées de l'état fondamental, du premier état excité et du quatrième état excité en fonction du diamètre de la boîte sphérique ou du corps de tétrapode respectivement. Il existe une dégénérescence de 3 pour le premier état excité. C'est pour cette raison que le deuxième et le troisième état excité coïncident avec le premier état excité. Nous allons discuter de l'origine de cette dégénérescence dans la partie des fonctions d'onde. Pour le tétrapode, les dimensions des bras sont fixées à 8 nm de longueur et 4 nm de largeur. Aux petits diamètres (inférieurs à 2 nm, 3 nm et 4,5 nm pour l'état fondamental, le premier état excité et le quatrième état excité respectivement) l'énergie propre des états est presque inchangée avec la décroissance du diamètre du corps. Avec les dimensions fixées des bras, la distribution de la fonction d'onde dans le tétrapode est concentrée dans les bras pour la petite taille du corps (états des bras). Leur énergie propre est donc déterminée principalement par les dimensions du bras. Quand le diamètre du corps augmente, les énergies propres des états du tétrapode sont de plus en plus proches de celles des boîtes sphériques avec la même taille que le corps. La distributions des fonctions d'onde se concentre de plus en plus dans le corps pour un corps assez grand (états du corps). Pour notre échantillon de tétrapode (indiqué par une flèche dans la figure 5.5), l'état fondamental est dans le corps tandis que le

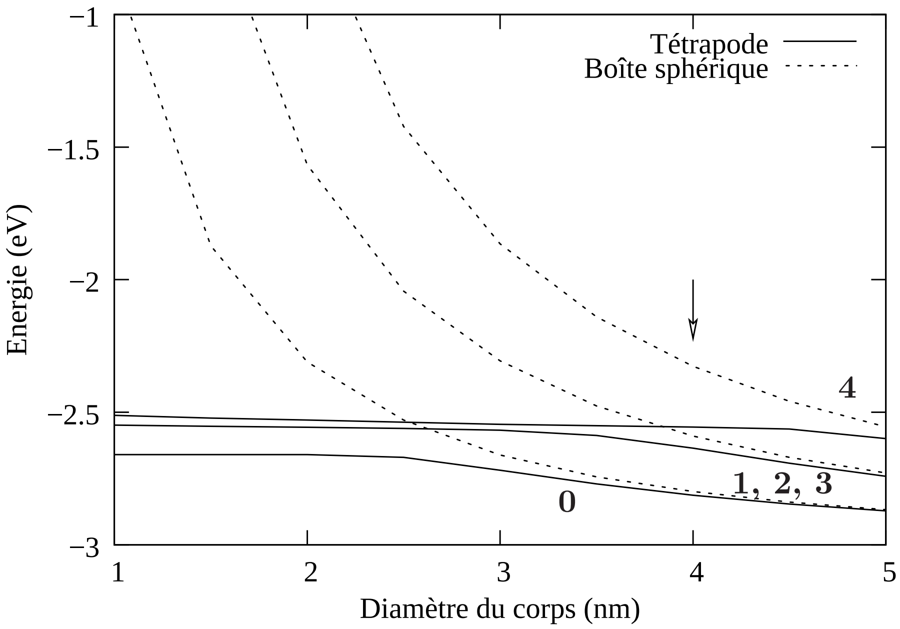


FIG. 5.5 – Variation des énergies propres en fonction du diamètre du corps pour un tétrapode (lignes continue) et une boîte sphérique (lignes tiretées). La longueur et la largeur des bras sont fixées à 8 nm et 4 nm. "0" se réfère à l'état fondamental, "1" au premier état excité et "4" au quatrième état excité. La flèche indique la taille physique du corps de nos échantillons.

quatrième état excité se trouve plutôt dans les bras.

La figure 5.6 montre la dépendance de l'énergie des trois états cités ci-dessus en fonction de la largeur et la longueur des bras. Le diamètre du corps est fixé à 4 nm. Les cercles pleins dans la figure indiquent les énergies propres correspondantes à nos échantillons. On peut remarquer que l'état fondamental et le premier état excité (ainsi que le deuxième et le troisième excité car ils sont dégénérés) se trouvent plutôt dans le corps car leur énergie ne change pas avec la variation des bras en taille. Par contre, l'énergie du quatrième état excité décroît considérablement (quelques dizaines de meV) avec l'augmentation de la largeur des bras puisque sa fonction d'onde pénètre beaucoup dans les bras. Ces affirmations sont confirmées par l'image des fonctions d'onde dans la prochaine partie de cette section. Pour la largeur des bras plus petite (inférieure à 3 nm), l'énergie du quatrième état excité est très peu sensible à la variation de la longueur des bras. Mais quand la largeur des bras est supérieure à 3 nm, la dépendance en longueur des bras de cette énergie est aussi évidente. Cette propriété est dû au fait que le confinement quantique des bras est déterminé par leur dimensionalité ou le rapport de leurs dimensions. Quand leur largeur est petite devant leur longueur, les bras ressemblent à des nano-fils où l'effet de confinement est dominé seulement par leur largeur. Quand leur largeur devient comparable avec leur longueur, les deux dimensions influencent l'effet de confinement pour les états dont la fonction d'onde se trouve dans les bras (par exemple le quatrième état excité). Pour conclure cette section, à l'égard des dimensions de

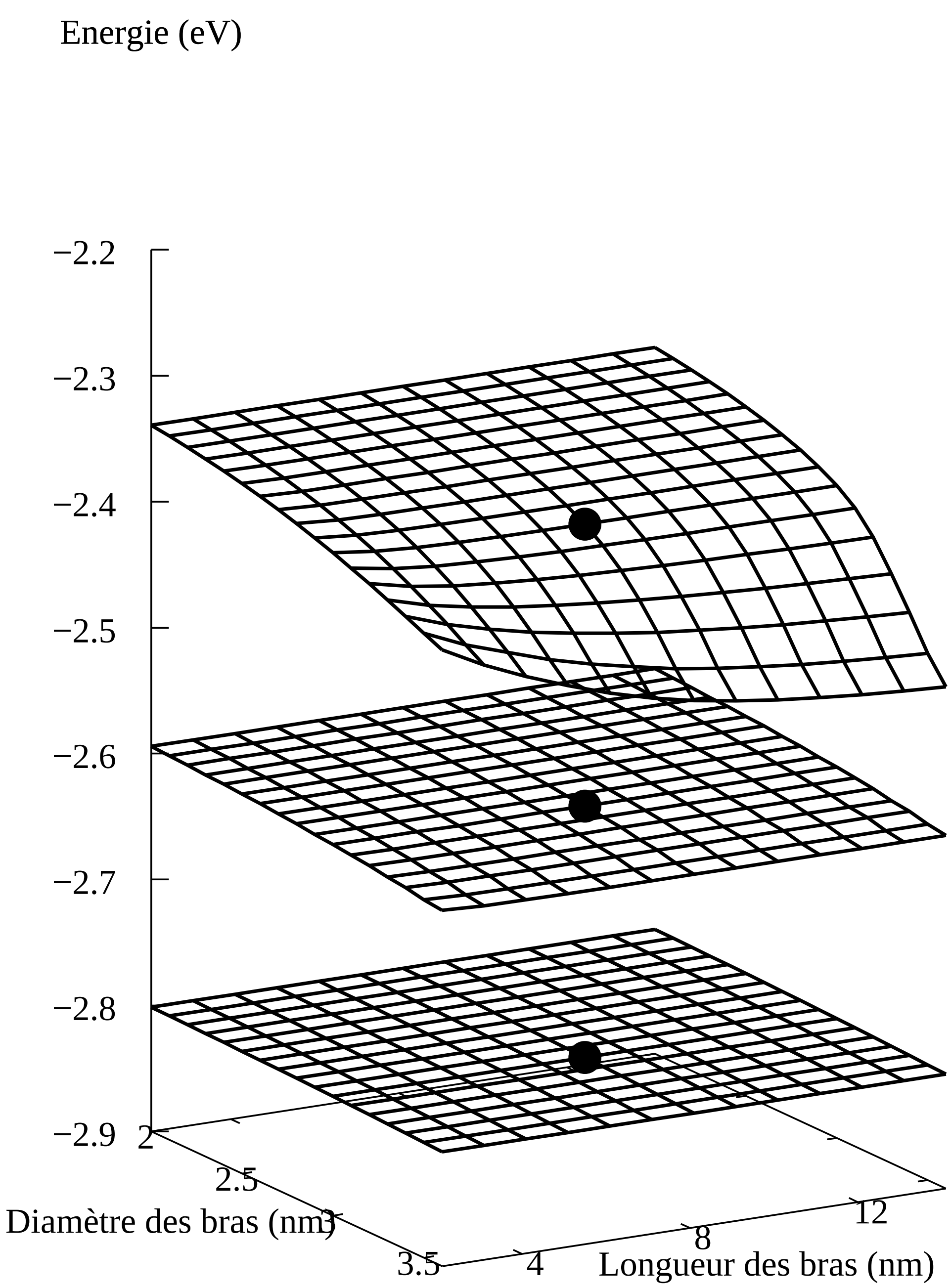


FIG. 5.6 – Énergies propres calculées en fonction de la longueur et la largeur des bras avec un diamètre du corps fixé à 4 nm. Du bas en haut : l'état fondamental, le premier état excité, le quatrième état excité. Les cercles pleins indiquent les énergies propres correspondantes de nos échantillons.

nos échantillons de tétrapode, l'état fondamental et les trois premiers états excités, qui sont dégénérés, sont contrôlés par le diamètre du corps tandis que l'effet de la largeur des bras devient important seulement pour les états au-dessus.

5.3.2 Fonctions d'onde

La figure 5.7 présente les surfaces d'équiprobabilité telles que $\int_{\Omega_n} |\Psi_n(r)|^2 d^3r = 0,9$ pour l'état fondamental, le premier état excité et le quatrième état excité pour nos échantillons. Nous pouvons remarquer que l'état fondamental, qui est de symétrie S dans un corps sphérique, reste toujours dans le corps car sa surface d'équiprobabilité est presque sphérique. Il est aussi évident que le quatrième état excité est un état des bras avec une petite présence dans le corps (représentée par un petit sphère dans la figure) et une grande présence dans les quatre bras (illustrée par quatre ellipsoïdes). Ces conclusions tirées de ces figures renforcent donc les affirmations de la partie précédente.

En ce qui concerne le premier état excité (et les deux états excités suivants), l'analyse est plus compliquée mais intéressante. La surface d'équiprobabilité est apparemment coupée en deux parties, chacune d'elle ayant une petite présence dans deux des bras. A partir de l'insensibilité aux dimensions des bras (figure 5.6), les trois premiers états sont en grande partie dans le corps. Cette affirmation est confirmée par le fait que leur surface d'équiprobabilité se trouve dans le corps dont la dimension planaire va de 0,37 à 0,53 (en unités des dimensions de la grande boîte de quantification, coordonnés planaires dans les surfaces au milieu de la figure 5.6). Les bras ont un effet d'orienter les quatre bouts des deux surfaces vers eux. Si l'on numérote les bras de I à IV, les combinaisons possibles de ces orientations sont : (I-II)&(III-IV), (I-III)&(II-IV), (I-IV)&(II-III). Les états qui suivent ces orientations sont équivalents, ce qui fait une dégénérescence de 3 pour les trois premiers états excités.

Dans cette section, nous n'avons calculé que des états électroniques mais les mêmes affirmations peuvent être appliquées pour les trous. Dans la section suivante, nous allons utiliser ces affirmations pour expliquer qualitativement les spectres optiques mesurés.

5.4 Résultats expérimentaux

La figure 5.8 montre les spectres d'absorption et de photoluminescence des échantillons A, B, C et D mesurés à température ambiante. Aucune différence qualitative n'est observée entre l'échantillon de boîte (A) et les échantillons de tétrapode (B, C et D). Cette observation est en bon accord avec les calculs numériques. Les spectres d'absorption linéaire de tous les échantillons ont deux pics. Le pic à basse énergie est associée à la transition fondamentale où une paire (électron−trou lourd) de symétrie $1S$ est engendrée. Le pic aux plus hautes énergies (vers 2,75 eV) a probablement pour origine la transition des trois premiers états excités de trou vers les trois premiers états excités de l'électron (de dégénérescence 3). Le décalage Stokes, qui est défini par la différence entre le pic principal d'absorption et le pic principal de photoluminescence, est très petit (3 meV). La largeur à mi-hauteur (FWHM) pour les spectres

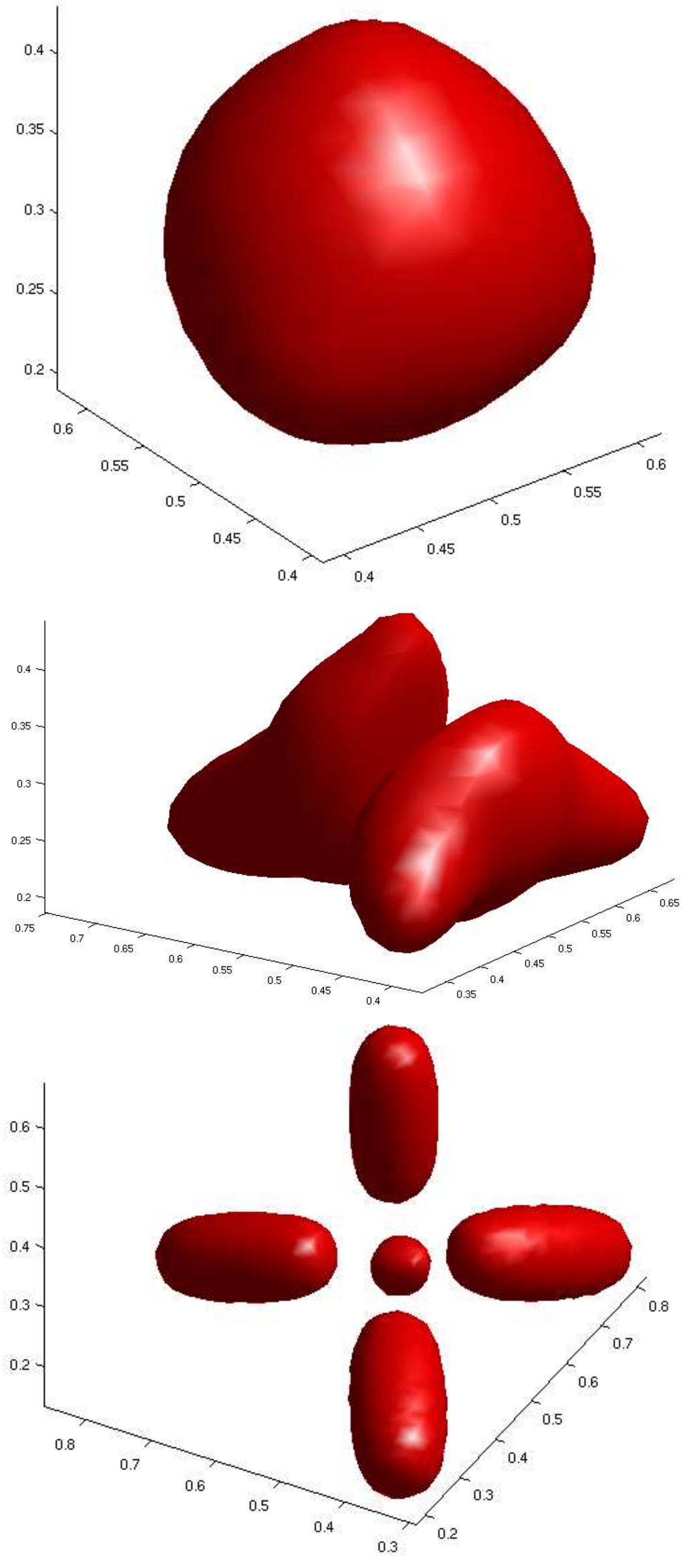


FIG. 5.7 – Surfaces d'équiprobabilité telles que la probabilité de présence de l'électron à l'intérieur soit de 0,9. De haut en bas : l'état fondamental, le premier état excité, le quatrième état excité.

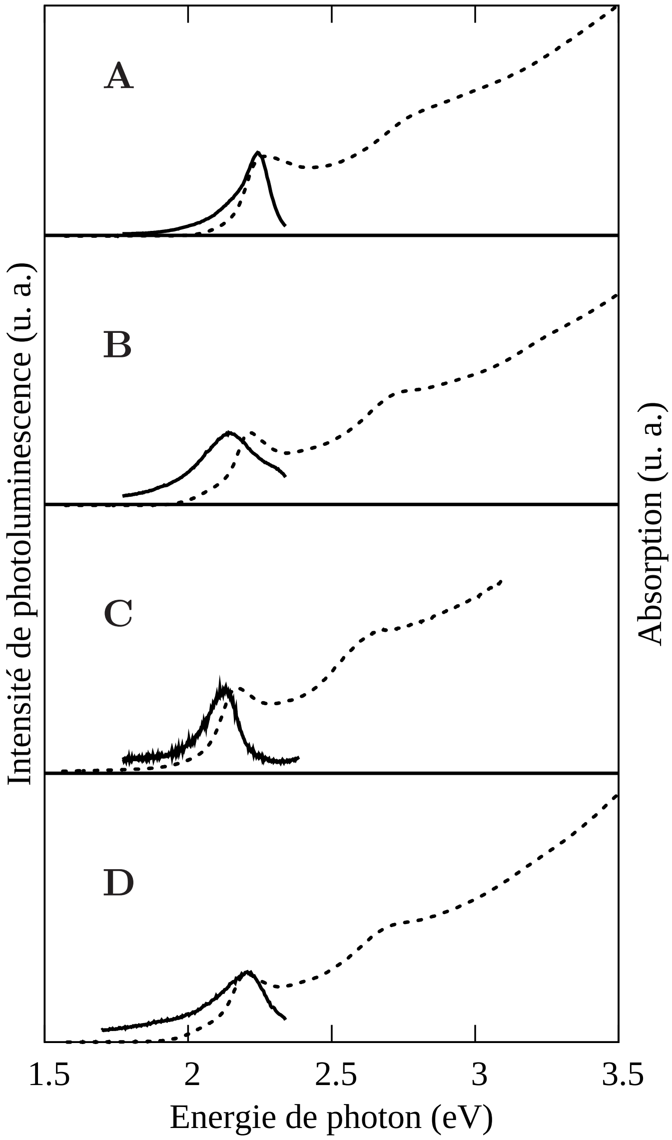


FIG. 5.8 – Spectres d'absorption (lignes tiretées) et de photoluminescence (lignes continues) à température ambiante pour les échantillons indiqués.

de photoluminescence de la boîte (A) est plus petite que celle des tétrapodes (B, C, D). Les propriétés optiques des échantillons sont résumées dans le tableau 5.1. Les énergies du pic principal d'absorption pour les échantillons de tétrapode montrent une augmentation de B à C, puis à D. Cette tendance indique que la taille du corps diminue de B à D, ce qui est cohérent avec les tailles moyennes du corps mesurées par TEM de ces échantillons.

5.5 Conclusions

Dans ce chapitre, nous avons présenté brièvement la croissance des tétrapodes de CdSe. Le diamètre du corps, la largeur et la longueur des bras sont estimés à 4 nm, 3 nm et 8 nm respectivement. Nos calculs numériques indiquent que l'état fondamental et les trois premiers états excités sont principalement confinés dans le corps tandis que l'effet de la largeur des bras devient important pour les états au-dessus. Ils permettent ainsi de comprendre qualitativement pourquoi les expériences d'absorption et de photoluminescence ne montrent aucune différence qualitative entre les échantillons de boîte sphérique et de tétrapode.

Bibliographie

[1] A. Peng et X. G. Peng, J. Am. Chem. Soc. **124**, 3343 (2002).

[2] L. Manna, E. C. Scher, et A. P. Alivisatos, J. Am. Chem. Soc. **122**, 12700 (2000).

[3] L. Manna, D. J. Milliron, A. Meisel, E. C. Scher, et A. P. Alivisatos, Nature materials **2**, 382 (2003).

Conclusions ou une revue sur les formalismes de calcul

Dans ce travail, nous nous sommes intéressés à des boîtes quantiques avec des confinements non-usuels. Avec nos outils numériques, nous avons traité théoriquement de nombreux systèmes comme des hétéro-structures à base de nitrure ou des boîtes quantiques insérées dans un super-réseau, ... Nos calculs donnent des résultats satisfaisants lorsque l'on les compare aux expériences de photo-courant ou de photo-luminescence. Nos méthodes de calculs sont basées sur le formalisme de masse effective qui est simple à construire et facile à comprendre physiquement. Ce formalisme marche plutôt bien pour les électrons puisque la bande de conduction est non-dégénérée et est loin des autres bandes. Par conséquent, la cinématique des électrons peut être bien décrite par le formalisme masse effective car le couplage avec les autres bandes est négligeable.

En ce qui concerne les trous, il est difficile d'obtenir des résultats précis dans le cadre de ce formalisme. Les bandes de valences (trous légers, trous lourds, spin-orbit) dans le massif sont dégénérées ou presque. Dans une boîte quantique, les effets comme le champ piézo-électrique ou l'interdiffusion mélangent les différentes bandes de valence. Par conséquent, le mouvement des trous est décrit par la cinématique des trois bandes de valence et les termes non-diagonaux de l'hamiltonien effectif sont importants. Pour pouvoir traiter d'une manière plus complète les trous, nous devrions utiliser les méthodes plus complètes comme $\vec{k}.\vec{p}$. Ces méthodes sont compliquées à construire en termes informatiques et elles demandent un investissement important en temps. Or, la durée d'une thèse est relativement courte et le thésard subit aussi la pression de devoir publier, ces méthodes ne sont pas encore construites au sein de notre équipe. En conséquence, nous nous contentons d'utiliser le formalisme masse effective pour nos calculs.

La plupart des boîtes quantiques dans ces études ont une croissance particulière, c'est-à-dire par le mode de Stranski-Krastanov. Elles sont formées par les désaccords de maille entre le substrat et le matériau de boîte, ce qui entraîne les contraintes mécaniques. Il est bien connu que les effets comme la piézo-électricité ou l'interdiffusion existent dans ces boîtes quantiques et modifient considérablement le potentiel de confinement. Pour tenir compte de ces effets, nous devrions aussi avoir recours à des méthodes plus compliquées comme les méthodes atomistiques. Dans ces méthodes, nous pouvons calculer les positions des atomes en tenant compte de la relaxation par les contraintes. Ces méthodes demandent aussi un investissement considérable en temps.

Nous pourrions nous contenter d'utiliser le formalisme masse effective à une bande avec sa simplicité et son accès direct à des interprétations physiques. Cependant, les phénomènes physiques deviennent de plus en plus compliqués quand on va vers les basses dimensionalités. Faire coïncider les calculs aux résultats expérimentaux devient à son tour une tâche de plus en plus difficile. Une méthode plus complète sera une nécessité si l'on veux une description plus réaliste des nano-objets.

Annexe A

Bases d'états

Cet annexe rappelle les bases de fonctions d'onde utilisées dans nos calculs. On présentera d'abord l'origine de ces fonctions d'onde. Ensuite, les applications seront indiquées dans chaque case. On montrera aussi les intégrales de recouvrement entre deux fonctions d'onde dans la même base.

A.1 Fonctions sinus

La base des sinus (ou cosinus) est la base des solutions de l'équation de Schrödinger pour une particule se mouvant dans un puits quantique infiniment profond d'une dimension. Dans cette limite, la particule reste confinée dans le puits et ne pénètre pas dans la barrière. Les fonctions d'onde normalisées dans un puits quantique de largeur L s'écrivent :

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{\pi n x}{L}\right) \qquad n \text{ entier} > 0 \tag{A.1}$$

elles satisfont $\psi(0) = \psi(L) = 0$. L'origine est prise à gauche du puits.

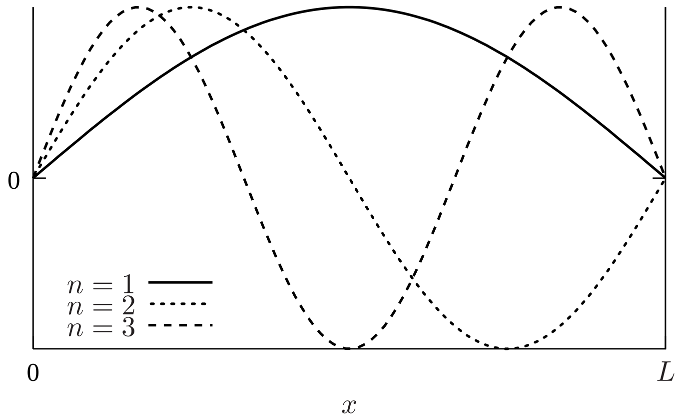


FIG. A.1 – Les premières fonctions sinus dans un puits quantique infiniment profond

Les niveaux d'énergie sont donnés par

$$E_n = n^2 \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} \qquad n \text{ entier} > 0 \tag{A.2}$$

où m est la masse de la particule. L'origine d'énergie est prise au fond du puits.

Le fait d'imposer les conditions d'annulation au bord veut dire que l'on néglige la physique dans les barrières. Cette base est donc particulièrement utile pour décrire la cinématique des directions dans lesquelles le système étudié est isolé.

Le recouvrement de deux fonctions sinus dans l'intervalle $[a, b]$ est facile à calculer :

$$\begin{aligned}
\int_a^b \psi_{n_1}(x)\psi_{n_2}(x)dx &= \frac{2}{L}\int_a^b \sin\left(\frac{\pi n_1 x}{L}\right)\sin\left(\frac{\pi n_2 x}{L}\right)dx \\
&= \frac{1}{\pi n_-}\left[\sin\frac{\pi n_- b}{L} - \sin\frac{\pi n_- a}{L}\right] - \frac{1}{\pi n_+}\left[\sin\frac{\pi n_+ b}{L} - \sin\frac{\pi n_+ a}{L}\right] \; \forall\, n_1 \neq n_2 \\
&= \frac{b-a}{L} - \frac{1}{\pi n_+}\left[\sin\frac{\pi n_+ b}{L} - \sin\frac{\pi n_+ a}{L}\right] \quad \forall\, n_1 = n_2
\end{aligned} \tag{A.3}$$

où $n_- = n_1 - n_2$ et $n_+ = n_1 + n_2$.

Symétrisation des fonctions des sinus

Si le Hamiltonien présente une symétrie par réflexion dans une direction, on peut profiter de cette symétrie pour accélérer les calculs. Les états propres sont divisés en deux catégories : les états pairs et impairs. Ceci est équivalent au fait que l'on peut symétriser les fonctions de base pour que la matrice hamiltonienne se divise en deux blocs non-connectés (voir par exemple [1] pour une discussion plus profonde sur la symétrisation des fonctions de base). Un bloc ne contient que les fonctions paires et l'autre impaires. Dans la base des sinus, cette symétrisation est déjà faite. Les états de (A.1) sont pairs par rapport au centre du puits si n est impair et impairs si n est pair.

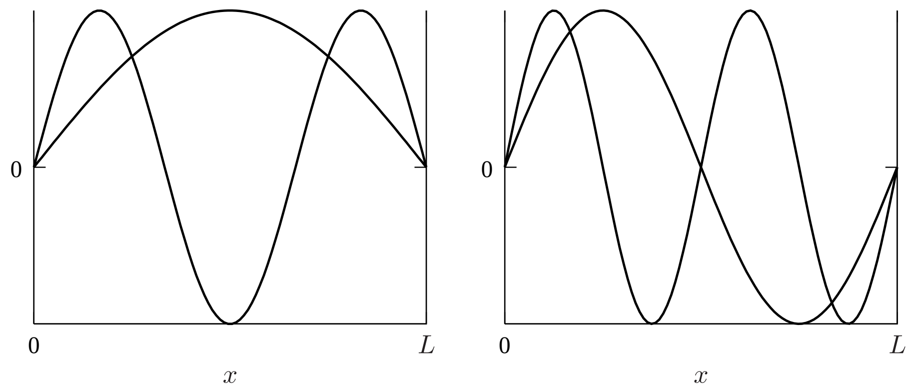


FIG. A.2 – Les premières fonctions des sinus symétrisées. A gauche : les états pairs, à droite : les états impairs

La symétrie par réflexion du Hamiltonien se trouve dans des systèmes comme une boîte quantique elliptique (sans effets piézo-electriques) ou un système soumis à un champ électrique (la symétrie par reflexion s trouve dans la direction perpendiculaire au champ). Cependant, jusqu'à ce jour la bibliothèque ne contient pas encore cette symétrisation des fonctions des sinus mais son implémentation peut se faire sans difficulté.

A.2 Ondes planes à une dimension

Les ondes planes à une dimension sont les solutions de l'équation de Schrödinger dans le vide. Les fonctions d'onde s'écrivent :

$$\psi_k(x) \sim \exp(ikx) \tag{A.4}$$

où k est un bon nombre quantique, appelé le vecteur d'onde. Son énergie correspondante est : $E_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$. Ces fonctions d'onde ne sont pas normalisées. Une façon de normaliser ces fonctions d'onde est de former un paquet d'onde, c'est-à-dire une superposition des ondes planes monochromatiques (A.4). Cependant, l'énergie d'un tel état n'est pas définie. Dans la pratique, on ne considère qu'une partie de l'espace, par exemple sur une longueur L, et l'on impose les conditions aux limites. Si les conditions d'annulation sont appliquées aux limites, ces ondes planes deviennent des ondes stationnaires, ce sont les fonctions sinus qui ont été décrites dans la section précédente. Si l'on applique les conditions aux limites périodiques (Born - Von Kármán), le vecteur d'onde k est quantifié : il ne prend que les valeurs $\frac{2\pi n}{L}$ avec n entier.

Les fonctions d'onde normalisées dans les conditions aux limites périodiques deviennent donc :

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} \exp\left(\frac{i2\pi n x}{L}\right) \qquad n \text{ entier} \tag{A.5}$$

avec l'énergie propre correspondante $E_n = \frac{2\pi^2 n^2 \hbar^2}{mL^2}$

Les fonctions d'onde plane avec les conditions périodiques sont convenables pour décrire la cinématique dans un problème périodique, par exemple un super-réseau de puits ou boîtes quantiques. Dans cette thèse, elles ont été utilisées pour décrire la partie périodique des fonctions de Bloch dans un super-réseau. Le paragraphe suivant va détailler cette application.

Supposons que nous avons un système physique dont le Hamiltonien H_0 est invariant par une translation de distance L dans une direction (supposons x) :

$$H_0(x,y,z) = \frac{\hat{p}_x^2}{2m_x} + \frac{\hat{p}_y^2}{2m_y} + \frac{\hat{p}_z^2}{2m_z} + V(x,y,z) \tag{A.6}$$

$$H_0(x,y,z) = H(x+L,y,z) \tag{A.7}$$

D'après le théorème de Bloch, le vecteur d'onde k_x est un bon nombre quantique et les états propres peuvent être classifiés par ce nombre. Ils sont écrits sous la forme :

$$\psi_{k_x}(\mathbf{r}) = \exp(ik_x x) u_{k_x}(\mathbf{r}) \tag{A.8}$$

où u_{k_x} est une fonction périodique en x de périodicité L. Le Hamiltonien agissant sur u_{k_x} se calcule très facilement :

$$H(k_x) = H_0 + \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m} + \frac{\hbar k_x \hat{p}_x}{m} \tag{A.9}$$

où m est la masse de la particule. Si cette masse est anisotrope, on prend m égale à m_x qui est la masse dans la direction x. Afin de chercher les états propres du système, on pourra utiliser la base d'ondes planes de périodicité L multipliée par une base d'états dans le plan.

Le recouvrement de deux ondes planes dans l'intervalle $[a, b]$ est donné par

$$\begin{aligned}
\int_a^b \psi_{n_1}^*(x)\psi_{n_2}(x)dx &= \frac{1}{L}\int_a^b \exp\left(\frac{-i2\pi n_1 x}{L}\right)\cdot \exp\left(\frac{i2\pi n_2 x}{L}\right)dx \\
&= \frac{1}{2\pi(n_2-n_1)}\left[\exp\left(\frac{i2\pi(n_2-n_1)b}{L}\right) - \exp\left(\frac{i2\pi(n_2-n_1)a}{L}\right)\right] \quad \forall n_1 \neq n_2 \\
&= \frac{b-a}{L} \qquad \text{si} \quad n_1 = n_2
\end{aligned} \tag{A.10}$$

On peut remarquer que le recouvrement de deux ondes planes dans un intervalle ne dépend que la différence $\Delta n = n_2 - n_1$. Cette particularité est extrêmement utile pour les calculs numériques car le nombre d'éléments différents de la matrice hamiltonienne est du même ordre que la dimension de l'espace de Hilbert. La quantité de stockage nécessaire pour la matrice représentant le Hamiltonien devient très petite. La base des sinus n'a pas cette propriété, ce qui entraîne une allocation de mémoire importante pour stocker la matrice hamiltonienne. Par conséquent, la base d'onde plane est préférée à la base des sinus dans beaucoup de situations, même dans le cas où l'on veut étudier une boîte isolée.

Symétrisation des fonctions d'onde plane

On considère maintenant le Hamiltonien agissant sur u_{k_x} comme dans l'équation (A.9) :

$$H(k_x) = H_0 + \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m} + \frac{\hbar k_x p_x}{m}$$

Comme dans le cas des fonctions des sinus, si le Hamiltonien H possède une symétrie par réflexion dans la direction x, on peut symétriser les fonctions de base. Cette condition requiert que H_0 soit pair et $k_x = 0$ car p_x n'est pas un opérateur pair. La symétrisation est triviale car la symétrie par réflexion est une symétrie d'ordre 2 et admet deux présentations irréductibles. L'une est la représentation identité (fonction paire) l'autre est une fonction impaire.

Les fonctions paires après la symétrisation s'écrivent :

$$\psi_{\text{paire}}(x) = \sqrt{\frac{2}{L}}\cos\left(\frac{2\pi n x}{L}\right) \qquad \text{pour } n \text{ entier} > 0 \tag{A.11}$$

$$= \sqrt{\frac{1}{L}} \qquad \text{pour } n = 0 \tag{A.12}$$

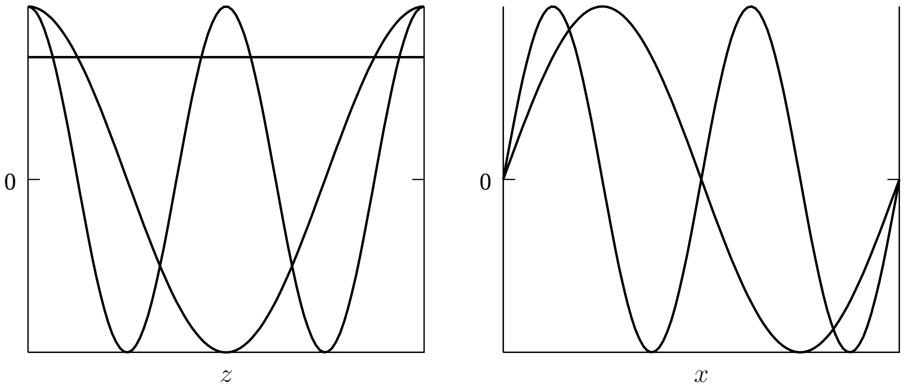


FIG. A.3 – Les premières fonctions d'onde plane symétrisées. A gauche : les états pairs, à droite : les états impairs

Les fonctions impaires sont données par :

$$\psi_{\text{impaire}}(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{2\pi n x}{L}\right) \qquad n \text{ entier} > 0 \tag{A.13}$$

Les intégrales de recouvrement sont obtenues sans difficulté. Il faut faire attention aux états pairs dans le cas $n = 0$ car la fonction d'onde prend une constante de normalisation différente. Pour les états pairs, on a

$$\begin{aligned}
& \int_a^b \psi_{n_1}(x)\psi_{n_2}(x)dx \\
= \; & \frac{b-a}{L} \quad \text{pour } n_1 = n_2 = 0 \\
= \; & \frac{1}{\sqrt{2}\pi n_2}\Big[\sin\frac{2\pi n_2 b}{L} - \sin\frac{2\pi n_2 a}{L}\Big] \forall\ n_1 = 0, n_2 \neq 0 \\
= \; & \frac{1}{\pi n_-}\Big[\sin\frac{\pi n_- b}{L} - \sin\frac{\pi n_- a}{L}\Big] + \frac{1}{\pi n_+}\Big[\sin\frac{\pi n_+ b}{L} - \sin\frac{\pi n_+ a}{L}\Big] \ \forall\ n_1 \neq n_2, n_1, n_2 \neq 0 \\
= \; & \frac{b-a}{L} - \frac{1}{\pi n_+}\Big[\sin\frac{\pi n_+ b}{L} - \sin\frac{\pi n_+ a}{L}\Big] \quad \forall\ n_1 = n_2 \neq 0
\end{aligned} \tag{A.14}$$

où $n_- = 2 \times (n_1 - n_2)$ et $n_+ = 2 \times (n_1 + n_2)$. Les intégrales de recouvrement des états impairs sont données par

$$\begin{aligned}
& \int_a^b \psi_{n_1}(x)\psi_{n_2}(x)dx = \frac{2}{L}\int_a^b \sin\left(\frac{2\pi n_1 x}{L}\right)\sin\left(\frac{2\pi n_2 x}{L}\right)dx \\
= \; & \frac{1}{\pi n_-}\Big[\sin\frac{\pi n_- b}{L} - \sin\frac{\pi n_- a}{L}\Big] - \frac{1}{\pi n_+}\Big[\sin\frac{\pi n_+ b}{L} - \sin\frac{\pi n_+ a}{L}\Big] \ \forall\ n_1 \neq n_2 \\
= \; & \frac{b-a}{L} - \frac{1}{\pi n_+}\Big[\sin\frac{\pi n_+ b}{L} - \sin\frac{\pi n_+ a}{L}\Big] \quad \forall\ n_1 = n_2
\end{aligned} \tag{A.15}$$

où $n_- = 2 \times (n_1 - n_2)$ et $n_+ = 2 \times (n_1 + n_2)$. On peut remarquer que les intégrales de recouvrement ne dépendent plus uniquement de $\Delta n = n_1 - n_2$. Le coût de stockage augmente beaucoup par rapport au cas non-symétrisé. Le nombre d'éléments de la matrice hamiltonienne à stocker est du même ordre que la dimension de l'espace de Hilbert au carré. L'algorithme de Lánczos que nous avons utilisé se repose sur les opérations de multiplication matrice vecteur qui est de la complexité d'ordre N^4 où N est la dimension du vecteur. La symétrisation pour la symétrie de réflexion diminue la dimension du vecteur d'état par deux. Par conséquent, on gagne environ un facteur 16 sur le temps de calcul pour une base symétrisée donnée.

A.3 Etats de Landau

Les états de Landau sont les états propres d'une particule soumise à un champ magnétique. Ils sont donc couramment utilisés dans la physique de l'effet Hall quantique, observé dans les années 1980. Dans un champ magnétique vertical B, leurs fonctions d'onde exprimées en coordonnées polaires sont de la forme [2] :

$$\psi_{n,m}(\mathbf{r}) \;=\; C_{n,m}\; \exp\left(i(n-m)\theta - \frac{\rho^2}{4l^2}\right) \left(\frac{\rho}{l}\right)^{|m-n|} \times\; L^{|m-n|}_{n+m-|m-n|}\left(\frac{\rho^2}{2l^2}\right) \qquad (A.16)$$

où $C_{n,m}$ est une constante de normalisation, $L^n_m(x)$ est un polynôme associé de Laguerre et l le rayon d'orbite cyclotron $l = \sqrt{\hbar/(|q|B)}$. La formule (A.16) n'a pas de composante en z puisque le champ magnetique vertical a seulement effet dans le plan. Les valeurs propres de l'énergie et de la composante en z du moment cinétique correspondantes sont : $E_n = \hbar\omega_c(n+\frac{1}{2})$ $(\omega_c = |q|B/m)$ et $L_z = \hbar(n-m)$. Chaque niveau d'énergie de Landau est infiniment dégénéré (voir fig. A.5). Les polynômes associés de Laguerre sont donnés dans la représentation de Rodrigues par :

$$L^k_n(x) = \sum_{m=0}^{n} (-1)^m \frac{(n+k)!}{(n-m)!(k+m)!m!}\; x^m \qquad (A.17)$$

Ils sont tracés dans la fig. A.4 pour les premières valeurs de k et de n.

Pour traiter le problème d'un super-réseau des boîtes quantiques soumis à un champ magnétique vertical, nous utilisons comme base de l'espace de Hilbert un produit des états de Landau couplés avec des ondes planes verticales. Les ondes planes décrivent l'aspect périodique du système. Cette base est bien adaptée à ce problème car le couplage horizontal entre les boîtes est négligeable.

Le recouvrement de deux états de Landau avec les moments cinétiques $k_1\hbar, k_2\hbar$ et les énergies $\hbar\omega_c(n_1+\frac{1}{2}), \hbar\omega_c(n_2+\frac{1}{2})$ dans un disque de rayon R est :

$$\begin{aligned} I(k_1,n_1,k_2,n_2,R) &= \int_0^R \int_0^{2\pi} \psi^*_{n_1}(\rho)\psi_{n_2}(\rho)\rho\; d\rho\; d\theta \qquad (A.18)\\ &= \int_0^R \int_0^{2\pi} \rho\; d\rho\; d\theta\; C^*_{n_1} \exp(-ik_1\theta - \frac{\rho^2}{4l^2}) L^k_{n_1}\left(\frac{\rho^2}{2l^2}\right) C_{n_2} \exp(ik_2\theta - \frac{\rho^2}{4l^2}) L^k_{n_2}\left(\frac{\rho^2}{2l^2}\right)\\ &= 2\pi\; C^*_{n_1}\; C_{n_2}\delta_{k_1,k_2} \int_0^R \rho\; d\rho\; \exp(-\frac{\rho^2}{2l^2})\; L^k_{n_1}\left(\frac{\rho^2}{2l^2}\right)\; L^k_{n_2}\left(\frac{\rho^2}{2l^2}\right) \end{aligned}$$

où C_{n_1} et C_{n_2} sont les constantes de normalisation. Un potentiel circulaire ne couple que les états avec le même moment cinétique $(k_1 = k_2 = k)$. On peut donc traiter

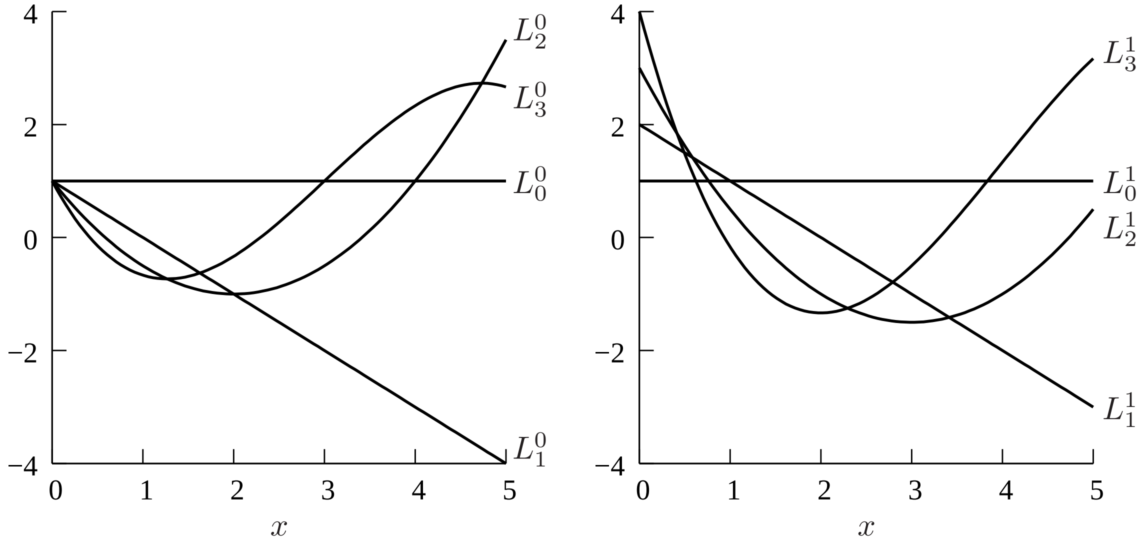


FIG. A.4 – Les premiers polynômes associés de Laguerre L_n^k avec $k = 0, 1$ et $n = 0, 1, 2, 3$. A gauche $k = 0$, à droite $k = 1$.

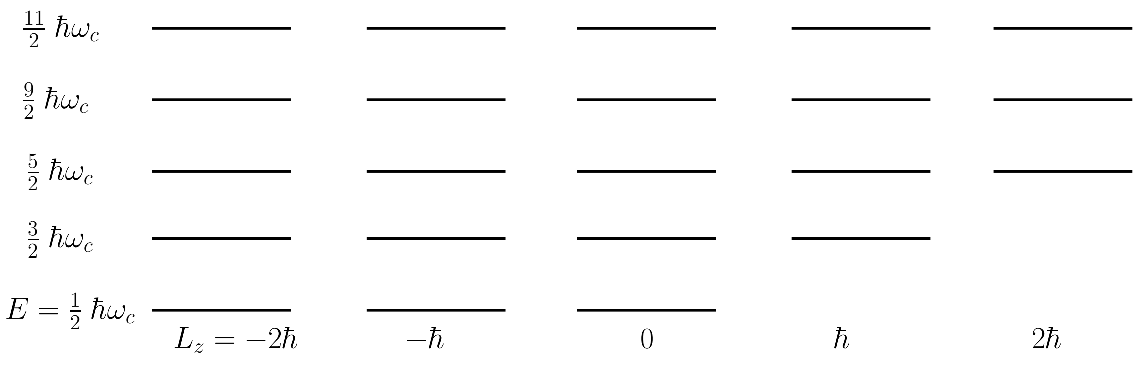


FIG. A.5 – Les états de Landau en fonction de l'énergie et du moment cinétique séparément les états de symétrie circulaire différente. Dans cette thèse, seuls les états $S(k=0)$ et $P(k=\pm 1)$ sont étudiés. Les constantes de normalisation pour ces états sont $C_n^0 = \sqrt{\frac{1}{2\pi l^2}}$ et $C_n^1 = \sqrt{\frac{1}{4\pi(n+1)l^2}}$. On va poser $x = \frac{\rho^2}{2l^2}$ et $\alpha = \frac{R^2}{2l^2}$. Cette intégrale devient

$$I(k,n_1,n_2,R) = 2\pi\ C_{n_1}^*\ C_{n_2}\ l^2 \int_0^\alpha dx\ \exp(-x)\ L_{n_1}^k(x)\ L_{n_2}^k(x) \tag{A.19}$$

On utilise la formule (A.17) pour les deux polynômes

$$\begin{aligned} I(n_1,n_2,R) = 2\pi\ C_{n_1}^*\ C_{n_2}\ l^2 \times \\ \sum_{m_1=0,m_2=0}^{n_1,n_2} \frac{(n_1+k)!}{(n_1-m_1)!(k+m_1)!m_1!}\frac{(n_2+k)!}{(n_2-m_2)!(k+m_2)!m_2!}\int_0^\alpha \exp(-x)x^{m_1+m_2}dx \end{aligned} \tag{A.20}$$

Le calcul des intégrales de recouvrement se résume à calculer les nombres $\frac{(n+k)!}{(n-m)!(k+m)!m!}$ et les intégrales $\int_0^\alpha dx\ \exp(-x)x^m$. Néanmoins, ces tâches ne sont pas simples ! Elles présentent à la fois des nombres très grands (si on remplace par exemple $n = 100$, $k = 0$, $m = 0$, on obtiendra un nombre 100 ! pour la première tâche) et des nombres très petits pour les intégrales, à savoir que la limite inférieure et supérieure pour un double dans les machines sont $1.7\mathrm{e}^{-308}$ et $1.7\mathrm{e}^{308}$ respectivement. Dans cette thèse, nous n'avons pas chercher les solutions pour contourner ce problème puisque nous nous contentons de prendre une base qui contient moins de 70 états de Landau. Ceci entraîne le fait que l'on doive se restreindre à un champ magnétique suffisamment fort ($\geq$ 10 T) dans nos problèmes pour que l'écart entre le premier état de Landau et le dernier état de Landau soit comparable au potentiel de confinement afin de ne pas sous-estimer l'effet du champ magnétique. Si on veut traiter le problème à bas champ, on peut par exemple utiliser la base Bessel présentée dans la prochaine section, puisqu'elle n'a pas ces problèmes de limite. On peut aussi envisager de contourner ce problème de limites de machine en utilisant une précision des nombres plus grande jusqu'à la précision infinie comme celle dans le logiciel Maple.

Pour calculer les intégrales $\int_0^\alpha dx\ \exp(-x)x^m$, on utilise la formule de convergence suivante :

$$\int_0^\alpha dx\ \exp(-x)x^m = \exp(-\alpha)\sum_{l=m+1}^{\infty}\frac{\alpha^l}{l!} \tag{A.21}$$

Dans la pratique, on ne calcule certainement pas cette somme jusqu'à l'infini. On s'arrête à une valeur de l telle que $\frac{\alpha^l}{l!}$ dépasse la limite inférieure de la machine.

On peut noter qu'il existe une formule de récurrence pour calculer les intégrales

$$\int_0^\alpha dx\ \exp(-x)x^m = m \times \int_0^\alpha dx\ \exp(-x)x^{m-1} - \exp(-\alpha)\alpha^m \tag{A.22}$$

Cependant, cette formule n'est pas utilisable car les erreurs d'arrondi rendent rapidement les intégrales imprécises.

A.4 Base Bessel en deux dimensions

Les fonctions de Bessel du premier type sont en fait les solutions radiales de l'équation de Schrödinger sur un disque avec la condition d'annulation au bord. Ces fonctions sont donc particulièrement adaptées aux problèmes à symétrie cylindrique, comme dans une boîte quantique circulaire soumis ou non à un champ magnétique vertical.

Puisque la symétrie par rotation existe dans notre système, il existe une base propre commune entre l'opérateur Hamiltonien et l'opérateur moment cinétique $\hat{L}_z$: $\exp(in\theta)\psi(\rho)$. On écrit l'équation de Schrödinger à deux dimensions dans une coordonné cylindrique pour cette base :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Big(\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}\rho\frac{\partial}{\partial\rho}+\frac{1}{\rho^2}\frac{\partial^2}{\partial\theta^2}\Big)\psi(\rho)\exp(in\psi)=E\psi(\rho)\exp(in\theta) \tag{A.23}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Big(\frac{1}{\rho}\big(\rho\psi''(\rho)+\psi'(\rho)\big)+\frac{1}{\rho^2}(-n^2)\Big)\psi(\rho)=E\psi(\rho)$$

$$\rho^2\psi''(\rho)+\rho\psi'(\rho)+\left(\frac{E}{\frac{\hbar^2}{2m}}\rho^2-n^2\right)\psi(\rho)=0 \tag{A.24}$$

On va poser $x=\rho\sqrt{\frac{E}{\frac{\hbar^2}{2m}}}$ et $y(x)=\psi(\rho)$. Cela nous conduit à l'équation suivante :

$$x^2y''+xy'+(x^2-n^2)y=0 \tag{A.25}$$

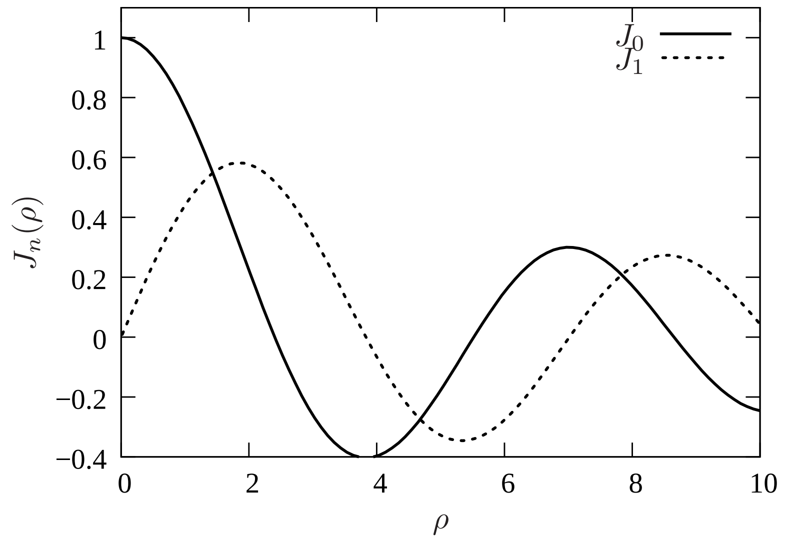


FIG. A.6 – Les deux premières fonctions de Bessel du premier type. Ces deux fonctions sont incluses dans la bibliothèque standarde.

$y(x)$ vérifié donc l'équation différentielle de Bessel. Cette équation admet deux types de solutions : une est singulière à l'origine et l'autre non. Comme la fonction d'onde n'est pas singulière à l'origine, seules les solutions non-singulières à l'origine sont retenues :

$$y(x) = J_n(x) \tag{A.26}$$

$$\psi(\rho) = J_n\left(\rho\sqrt{\frac{E}{\frac{\hbar^2}{2m}}}\right) \tag{A.27}$$

où J_n sont des fonctions de Bessel du premier type. Les deux premières fonctions de Bessel du premier type sont tracées dans la fig. A.6. On applique maintenant les conditions aux limites : les fonctions d'onde s'annulent au bord du grand cylindre $\psi(R) = 0$

$$J_n\left(R\sqrt{\frac{E}{\frac{\hbar^2}{2m}}}\right) = 0$$

$$E_{ni} = \lambda_{ni}^2 \frac{\hbar^2}{2mR^2} \tag{A.28}$$

où λ_{ni} est le i-ème zéro de J_n. Elles sont tabulées dans les livres de formules ou des logiciels comme Maple ou Mathematica. Les fonctions d'onde correspondant à ces énergies peuvent s'écrire sous la forme :

$$\psi(\rho) = C_{ni} J_n\big(\lambda_{ni}\frac{\rho}{R}\big)\exp(in\theta) \tag{A.29}$$

où C_{ni} sont les constantes de normalisation.

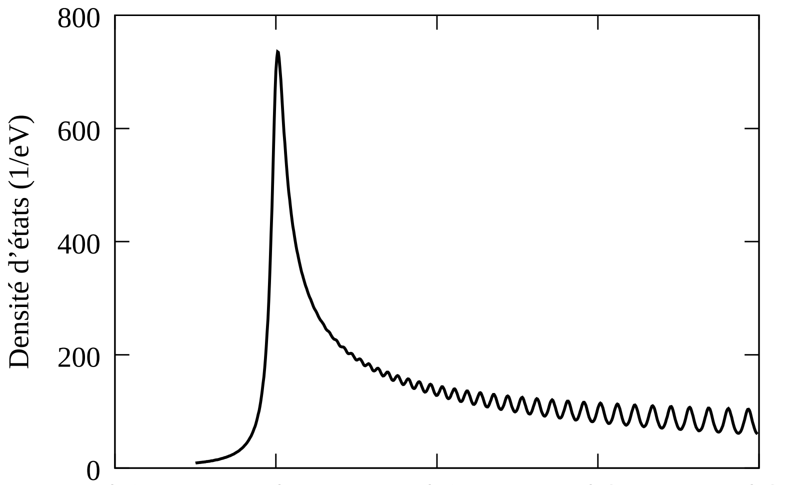


FIG. A.7 – Densité d'états de symétrie S confinés dans un cercle de rayon $R =$ 200 nm. La masse du porteur $m = 0,07\ m_0$. Chaque pic de Dirac est remplacé par une lorentzienne de largeur à mi-hauteur 8 meV.

La figure A.7 montre la densité d'états de symétrie S dans un cercle de rayon $R = 200$ nm avec la condition d'annulation au bord. Chaque état est représenté par une fonction de Bessel, la partie angulaire est une constante car il s'agit d'états S. Cette densité ressemble à la densité d'états d'un système unidimensionnel avec une divergence (ou presque) au démarrage (voir la section 1.1). Mathématiquement, les zéros des fonctions de Bessel de même valeur de n sont presque équidistancés (ils les sonts asymtotiquement à grandes valeurs de n). Comme l'énergie est proportionnelle au carré des zéros, les états à basses énergies sont plus serrés que ceux à hautes énergies. D'où vient la forme de la densité de la figure A.7. Physiquement, quand on considère une symétrie circulaire donnée (S dans ce cas) de ce système bidimensionnel, on soustrait le degré de liberté du système par un. Il devient donc un système "unidimensionnel" et sa densité d'états ressemble à la densité d'état d'un système unidimensionnel. Si l'on ajoute toutes les symétries possibles ($S, P, D, \ldots$), on va retrouver le comportement de la densité d'états d'un système bidimensionnel qui est caractérisé par une constante.

Pour terminer, signalons trois formules très importantes (voir par exemple [3]) qui sont utilisées pour calculer les éléments de la matrice hamiltonienne dans nos calculs :

$$\int_0^1 xJ_n(\alpha x)J_n(\beta x) = \frac{\alpha J_n(\beta)J_n'(\alpha) - \beta J_n(\alpha)J_n'(\beta)}{\beta^2 - \alpha^2} \qquad \forall \alpha \neq \beta \qquad \text{(A.30)}$$

$$\int_0^1 xJ_n^2(\alpha x) = \frac{\big(J_n'(\alpha)\big)^2 + (1 - n^2/\alpha^2)\big(J_n(\alpha)\big)^2}{2} \qquad \text{(A.31)}$$

$$xJ_n'(x) = xJ_{n-1}(x) - nJ_n(x) \qquad \text{(A.32)}$$

Dans la pratique, on modélise les boîte quantiques circulaires par les disques de potentiel constant. Les éléments de la matrice hamiltonienne sont calculés facilement à l'aide des formules citées.

Annexe B

Algorithme de Lánczos

La méthode de Lánczos permet de calculer les valeurs propres d'une matrice symétrique réelle ou hermitique en utilisant la notion d'espace de Krylov qui est défini ci-dessous. Cet annexe rappelle les lemmes et les résultats. Pour une démonstration de ces lemmes, on pourra consulter le cours de G. Allaire [4].

Dans ce qui suit, on note A une matrice symétrique réelle ou hermitique d'ordre n, $r_0 \neq 0 \in \mathbb{R}^n$ un vecteur donné non nul, et K_k l'espace de Krylov associé, engendré par les vecteurs $r_0, Ar_0, \ldots, A^k r$. Il existe un entier $k_0 \leq n-1$, appelé dimension critique de Krylov, tel que, si $k \leq k_0$, la famille $(r_0, Ar_0, \ldots, A^k r)$ est libre et $\dim K_k = k+1$, tandis que si $k > k_0$ on a $K_k = K_{k_0}$.

L'algorithme de Lánczos consiste à construire une suite de vecteurs $(v_j)_{1\leq j\leq k_0+1}$ par la formule de récurrence suivante

$$v_0 = 0, \qquad v_1 = \frac{r_0}{||r_0||},$$

et pour $2 \leq j \leq k_0 + 1$

$$\hat{v}_j = Av_{j-1} - (Av_{j-1} \cdot v_{j-1})v_{j-1} - ||\hat{v}_{j-1}||v_{j-2}, \quad v_j = \frac{\hat{v}_j}{||\hat{v}_j||} \tag{B.1}$$

Pour tout entier $k \leq k_0 + 1$, on définit une matrice V_k de taille $n \times k$ dont les colonnes sont les vecteurs $(v_1, \ldots, v_k)$, ainsi qu'une matrice symétrique tri-diagonale T_k de taille $k \times k$ dont les éléments sont

$$(T_k)_{i,i} = Av_i \cdot v_i, (T_k)_{i,i+1} = (T_k)_{i+1,i} = ||\hat{v}_{i+1}||, (T_k)_{i,j} = 0 \text{ si } |i-j| \geq 2.$$

Avec ces notations, la récurrence de Lánczos vérifie des propriétés remarquables.

Lemme 1 *La suite $(v_j)_{1\leq j\leq k_0+1}$ est bien définie par (B.1) car $||\hat{v}_j|| \neq 0$ pour tout $1 \leq j \leq k_0 + 1$, tandis que $\hat{v}_{k_0+2} = 0$. Pour $1 \leq k \leq k_0 + 1$, la famille $(v_1, \ldots, v_{k+1})$ coïncide avec la base orthonormée de K_k construite par le procédé de Gram-Schmidt appliqué à la famille $(r_0, Ar_0, \ldots, A^k r)$. De plus, pour $1 \leq k \leq k_0 + 1$, on a*

$$AV_k = V_k T_k + \hat{v}_{k+1} e_k^*, \tag{B.2}$$

où e_k est le k-ième vecteur de la base canonique de $\mathbb{R}^n$,

$$V_k^* A V_k = T_k \text{ et } V_k^* V_k = \mathbf{Id}_k \tag{B.3}$$

où $\mathbf{Id}_k$ *est la matrice identité de taille* $k \times k$.

Il faut faire attention au fait que les matrice carrées A et T_k ne sont pas de même taille, et que la matrice V_k étant rectangulaire n'est pas une matrice unitaire (sauf si $k = n$). On rappelle que, si $a \in \mathbb{R}^n$ et $b \in \mathbb{R}^k$ la notation ab^* désigne la matrice de taille $n \times k$ de coefficients $(a_i b_j)_{1 \le i \le n, 1 \le j \le k}$.

La récurrence de Lánczos (B.1) est bien plus économique en nombre d'opérations que l'algorithme de Gram-Schmidt appliqué à la famille $(r_0, Ar_0, \dots, A^k r)$ qui donne le même résultat. En effet, la récurrence (B.1) ne contient que deux termes alors que celle de Gram-Schmidt contient tous les termes précédents. Dans le cas où la dimension critique de Krylov est maximale, c'est-à-dire $k_0 = n-1$, les relations (B.2) ou (B.3) pour $k = k_0 + 1$ montrent que les matrices A et T_{k_0+1} sont semblables (car V_{k_0+1} est une matrice carrée inversible si $k_0 = n-1$). Autrement dit, l'algorithme de Lánczos apparaît comme une méthode de réduction sous forme tri-diagonale comme l'algorithme de Householder. Néanmoins, l'algorithme de Lanzos n'est pas utilisé en pratique comme une méthode de tridiagonalisation car, pour n grand, les erreurs d'arrondi détruisent en partie l'orthogonalité des derniers vecteurs v_j par rapport aux premiers.

Nous allons maintenant comparer les valeurs propres et vecteurs propres de la matrice A et de la matrice T_{k_0+1}. Remarquons tout de suite que ces matrices ne sont pas de même taille en règle générale (sauf si $k_0+1 = n$). On note $\lambda_1 < \lambda_2 < \cdots < \lambda_m$ les valeurs propres distinctes de A (avec $1 \le m \le n$), et $P_1, \dots, P_m$ les matrices de projections orthogonales sur les sous-espaces propres correspondants de A. On rappelle que

$$A = \sum_{i=1}^{m} \lambda_i P_i, \mathbf{Id} = \sum_{i=1}^{m} P_i \text{ et } P_i P_j = 0 \text{ si } i \neq j \tag{B.4}$$

Lemme 1 *Les valeurs propres de* T_{k_0+1} *sont simples et sont aussi valeurs propres de* A. *Réciproquement, si on suppose que* r_0 *vérifie* $P_i r_0 \neq 0$ *pour tout* $1 \le i \le m$, *alors toutes les valeurs propres de* A *sont aussi valeurs propres de* T_{k_0+1} *et* $k_0 + 1 = m$.

Dans le cas où $P_i r_0 \neq 0$ pour tout i, les matrices A et T_{k_0+1} ont exactement les mêmes valeurs propres, mais avec une multiplicité éventuellement différentes puisque les valeurs propres de T_{k_0+1} sont simples. La condition demandée sur r_0 pour la réciprocité de ce lemme est bien nécessaire. En effet, si r_0 est un vecteur propre de A, alors $k_0 = 0$ et la matrice T_{k_0+1} admet pour unique valeur propre celle qui est associée à r_0.

Le résultat du Lemme 1 pourrait laisser croire qu'il faut appliquer la récurrence de Lánczos jusqu'à l'itération maximale $k_0 + 1$, puis calculer les valeurs propres de T_{k_0+1} afin d'en déduire les valeurs propres et les vecteurs propres de A. Cela rendrait la méthode de Lánczos comparable à celle de Givens-Householder (en général k_0 est de l'ordre de n, ce qui rende le compte d'opérations similaires dans les deux cas). De plus, appliquée ainsi la méthode de Lánczos serait instable numériquement à cause de la perte d'orthogonalité des vecteurs v_j causée par les inévitables erreurs d'arrondi.

Fort heureusement, le résultat suivant indique qu'il n'est pas nécessaire de faire beaucoup d'itérations dans la récurrence de Lánczos pour obtenir des valeurs propres de T_k qui soient de bonnes approximations de celles de A (avec k beaucoup plus petit que k_0 ou n).

Lemme 1 *Soit un entier $1 \leq k \leq k_0 + 1$. Pour toute valeurs propre λ de T_k, il existe une valeur propre λ_i de A telle que*

$$|\lambda - \lambda_i| \leq ||\hat{v}_{k+1}||$$

De plus, si $y \in \mathbb{R}^k$ est un vecteur propre non nul de T_k associé à une valeur propre λ, alors il existe une valeur propre λ_i de A telle que

$$|\lambda - \lambda_i| \leq ||\hat{v}_{k+1}|| \frac{e_k \cdot y}{||y||}$$

où e_k est le k-ème vecteur de la base canonique de $\mathbb{R}^k$. Autrement dit, si la dernière composante de y est petite, alors λ est une bonne approximation d'une valeur propre de A même si $||\hat{v}_{k+1}||$ n'est pas petit.

La première conclusion du Lemme 1 est que, si $||\hat{v}_{k+1}||$ est petit, alors les valeurs propres de T_k sont de bonnes approximations de certaines valeurs propres de A. La deuxième conclusion est la plus importante en pratique : on teste la taille de la dernière composante d'un vecteur propre de T_k pour savoir si la valeur propre correspondante est une bonne approximation d'une valeur propre de A.

Dans la pratique, la méthode de Lánczos est toujours utilisée en se limitant à des valeurs de l'itération k beaucoup plus petites que n si n est grand.

Annexe C

Méthode des différences finies

La méthode des différences finies est très souvent utilisée pour résoudre numériquement des équations différentielles. Elle consiste à discrétiser l'espace de la variable (z) et à supposer que la fonction recherchée soit constante dans chaque région discrétisée. Cela suppose donc que le pas de discrétisation Δz soit assez petit. Ensuite, les termes différentiels ($df/dz, d^2f/dz^2, \ldots$) ou intégrales ($\int f dz, \int\int f dz, \ldots$) sont approximés par la fonction discrétisée. Dans cette section, on va étudier la résolution de l'équation de Schrödinger à une dimension par cette méthode à titre d'exemple.

Dans l'approximation des fonctions enveloppes, l'équation de Schrödinger pour un électron peut être remplacée par l'équation de la masse effective [5] :

$$\Big(-\frac{\hbar^2}{2}\frac{d}{dz}\frac{1}{m(z)}\frac{d}{dz}+V(z)\Big)f(z)=Ef(z) \tag{C.1}$$

où $f(z)$ est la fonction enveloppe, $V(z)$ est un potentiel dépendant de z. Afin de pouvoir résoudre le problème pour n'importe quelle forme de potentiel, nous allons diviser arbitrairement la structure en N couches de même épaisseur Δz, donc $N-1$ interfaces entre elles (fig. C.1)

Dans chaque couche, la masse et le potentiel sont constants (voir fig. C.2). Dans la n-ème couche, l'équation de la masse effective s'écrit :

$$\Big(-\frac{\hbar^2}{2}\frac{d}{dz}\frac{1}{m_n}\frac{d}{dz}+V_n\Big)f(z)=Ef(z) \tag{C.2}$$

où V_n joue le rôle qu'aurait une énergie potentielle dans une équation de Schrödinger. Il s'agit d'une équation différentielle au second ordre à coefficients constants, sans second membre ni terme du premier ordre. Pour n fixé, cette équation est relativement facile à résoudre.

La quantité $\frac{d}{dz}\big(\frac{1}{m_n}\frac{d}{dz}f\big)$ peut s'écrire :

$$\frac{d}{dz}\Big(\frac{1}{m_n}\frac{d}{dz}f\Big)=\lim_{\Delta z\to 0}\frac{\frac{1}{m_n}\big(\frac{df}{dz}\big)_{z_n}-\frac{1}{m_{n-1}}\big(\frac{df}{dz}\big)_{z_{n-1}}}{\Delta z}$$

On va ensuite exprimer les quantités $\frac{df}{dz}$ par la même convention :

$$\Big(\frac{df}{dz}\Big)_{z_n}=\lim_{\Delta z\to 0}\frac{f(z_n+\frac{\Delta z}{2})-f(z_n-\frac{\Delta z}{2})}{\Delta z}$$

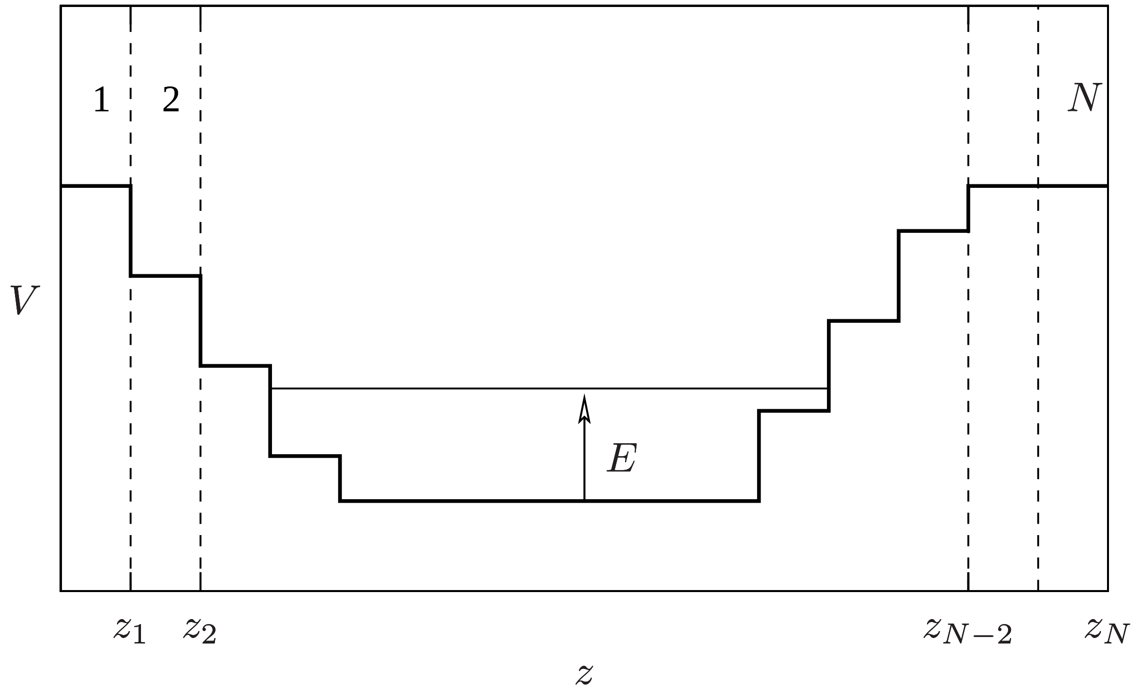


FIG. C.1 – Exemple de puits de potentiel discrétisé en N région dans lesquelles le potentiel est constant.

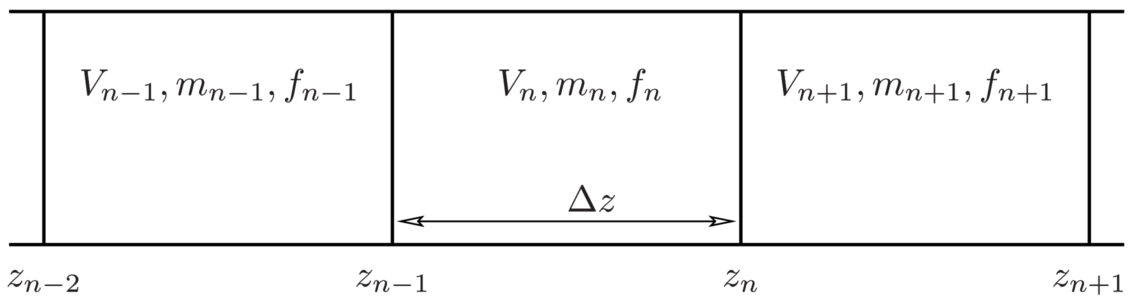


FIG. C.2 – La structure est découpée en N couches de même épaisseur Δz, dans lesquelles le potentiel V_n, la masse m_n et la fonction enveloppe f_n sont constants.

$$\frac{d}{dz}\Big(\frac{1}{m_n}\frac{d}{dz}f\Big) = \lim_{\Delta z \to 0} \frac{1}{\Delta z^2}\Big(\frac{f_{n+1} - f_n}{m_n} - \frac{f_n - f_{n-1}}{m_{n-1}}\Big) \tag{C.3}$$

Finalement, en injectant cette expression dans l'équation de la masse effective, on obtient :

$$\frac{f_{n+1}}{m_n} - f_n\Big(\frac{1}{m_n} + \frac{1}{m_{n-1}} + \frac{\Delta z^2}{\hbar^2}(V_n - E)\Big) + \frac{f_{n-1}}{m_{n-1}} = 0 \tag{C.4}$$

En remarquant que $\frac{2m_n(V_n-E)}{\hbar^2} = k_n^2$, on exprime la valeur de la fonction enveloppe dans la couche $n+1$ en fonction de la valeur dans les couches n et $n-1$:

$$f_{n+1} = f_n\Big(\frac{k_n^2\Delta z^2}{2} + \frac{m_n}{m_{n-1}} + 1\Big) - \frac{m_n}{m_{n-1}} f_{n-1} \tag{C.5}$$

Partant du principe que f est nulle en $\pm\infty$, on fixe $f_1 = f_2 \approx 0$. On ne doit pas poser réellement ces valeurs à 0 au départ sinon tous les f_n sont nulles. On donne à f_1 et f_2 une valeur très petite (en pratique $\sim 10^{-10}$) de l'ordre de grandeur de la précision numérique du langage de programmation utilisée. Ensuite, on calcule f_N en fonction de l'énergie E par les relations dans l'équation C.5. Théoriquement, quand $f_N = 0$ pour une énergie E_p, cela veut dire que E_p est l'énergie d'un état lié, de nombre quantique p, de la structure. Cependant, on obtient presque jamais cette annulation. En pratique, on détecte cette annulation par un changement de signe de f_N.

Lors de son utilisation, la méthode des différences finies nécessite impérativement que la quantité Δz soit petite. Autrement dit, le potentiel doit être découpé sur un grand nombre de couches, même pour décrire un simple puits quantique. En revanche, cette méthode est très efficace pour traiter des formes complexes de potentiel comme des puits quantiques sous champ électrique ou traiter le problème de l'exciton en potentiel effectif. Elle ne fait intervenir qu'une simple équation C.5 qui donne directement, par récurrence, la fonction d'onde dans toute la structure. Dans cette thèse, cette méthode a été utilisée pour résoudre le problème du mouvement vertical dans un puits quantiques GaInN/GaN (chapitre 4).

Annexe D

Règle de somme pour la force d'oscillateur

La force d'oscillateur d'une transition par une excitation lumineuse linéairement polarisée d'un niveau 0 à un niveau f est définie par

$$OS_{0\to f} = \frac{2}{m\hbar(\omega_f - \omega_0)} |\langle 0|\vec{\epsilon}.\hat{p}|f\rangle|^2 \tag{D.1}$$

où $\vec{\epsilon}$ est la direction de polarisation et $\hat{p}$ est l'opérateur d'impulsion. Elle donne le nombre d'oscillateur à la fréquence $(\omega_f - \omega_0)$ pour une polarisation $\vec{\epsilon}$.

La règle de somme établit que la somme des forces d'oscillateur de toutes les transitions à partir d'un niveau 0 donné est égale à 1

$$\sum_f OS_{0\to f} = 1$$

Pour démontrer cette règle de somme, nous utilisons la relation de commutation entre l'opérateur de position $\hat{r}$ et l'opérateur d'impulsion $\hat{p}$

$$\hat{p} = \frac{m}{i\hbar} \, [\hat{r}, \hat{H}] \tag{D.2}$$

On récrit le deuxième terme de l'équation (D.1)

$$|\langle 0|\vec{\epsilon}.\hat{p}|f\rangle|^2 = \langle 0|\vec{\epsilon}.\hat{p}|f\rangle \; \langle f|\vec{\epsilon}.\hat{p}|0\rangle \tag{D.3}$$

et on remplace $\hat{p}$ par (D.2) dans le premier terme de cette équation

$$\begin{aligned}
|\langle 0|\vec{\epsilon}.\hat{p}|f\rangle|^2 &= \langle 0|\vec{\epsilon}.\frac{m}{i\hbar}[\hat{r}, \hat{H}]|f\rangle \; \langle f|\vec{\epsilon}.\hat{p}|0\rangle \\
&= \frac{m}{i\hbar} \; \langle 0|\vec{\epsilon}.(\hat{r}\hat{H} - \hat{H}\hat{r})|f\rangle\langle f|\vec{\epsilon}.\hat{p}|0\rangle \\
&= \frac{m}{i\hbar} \; (E_f - E_0) \; \langle 0|\vec{\epsilon}.\hat{r}|f\rangle \; \langle f|\vec{\epsilon}.\hat{p}|0\rangle
\end{aligned}$$

Si on remplace $\hat{p}$ dans le deuxième terme de (D.3), on obtient

$$|\langle 0|\vec{\epsilon}.\hat{p}|f\rangle|^2 = \frac{m}{i\hbar} \; (E_0 - E_f) \; \langle 0|\vec{\epsilon}.\hat{p}|f\rangle \; \langle f|\vec{\epsilon}.\hat{r}|0\rangle$$

On peut donc écrire la somme des forces d'oscillateur $F = \sum_f OS_{0\to f}$ sous deux formes grâce aux deux remplacements ci-dessus

$$\begin{aligned} F &= \frac{2}{m}\sum_f \frac{1}{E_f - E_0}\,\frac{m}{i\hbar}\,(E_f - E_0)\,\langle 0|\vec{\epsilon}.\hat{r}|f\rangle\,\langle f|\vec{\epsilon}.\hat{p}|0\rangle \\ &= \frac{2}{i\hbar}\sum_f \langle 0|\vec{\epsilon}.\hat{r}|f\rangle\,\langle f|\vec{\epsilon}.\hat{p}|0\rangle \end{aligned}$$

ainsi que

$$F = -\frac{2}{i\hbar}\sum_f \langle 0|\vec{\epsilon}.\hat{p}|f\rangle\,\langle f|\vec{\epsilon}.\hat{r}|0\rangle$$

Comme la base $\{|f\rangle, 0\}$ est orthonormée

$$\sum_f |f\rangle\langle f| + |0\rangle\langle 0| = \hat{I}$$

la somme sur f dans la première expression de F peut être remplacée comme suivant

$$\begin{aligned} F &= \frac{2}{i\hbar}\,\langle 0|\vec{\epsilon}.\hat{r}\,\left(\hat{I} - |0\rangle\,\langle 0|\right)\,\vec{\epsilon}.\hat{p}|0\rangle \\ &= \frac{2}{i\hbar}\,\{\langle 0|(\vec{\epsilon}.\hat{r}).(\vec{\epsilon}.\hat{p})|0\rangle - \langle 0|\vec{\epsilon}.\hat{r}|0\rangle\,\langle 0|\vec{\epsilon}.\hat{p}|0\rangle\} \\ &= \frac{2}{i\hbar}\,\{\langle 0|\hat{r}_{\vec{\epsilon}}.\hat{p}_{\vec{\epsilon}}|0\rangle - \langle 0|\vec{\epsilon}.\hat{r}|0\rangle\,\langle 0|\vec{\epsilon}.\hat{p}|0\rangle\} \end{aligned}$$

Pour la deuxième expression de F, on a

$$F = \frac{2}{i\hbar}\,\{-\langle 0|\hat{p}_{\vec{\epsilon}}.\hat{r}_{\vec{\epsilon}}|0\rangle + \langle 0|\vec{\epsilon}.\hat{p}|0\rangle\,\langle 0|\vec{\epsilon}.\hat{r}|0\rangle\}$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow 2.F &= \frac{2}{i\hbar}\,\{\langle 0|\hat{r}_{\vec{\epsilon}}.\hat{p}_{\vec{\epsilon}}|0\rangle - \langle 0|\hat{p}_{\vec{\epsilon}}.\hat{r}_{\vec{\epsilon}}|0\rangle\} \\ &= \frac{2}{i\hbar}\,\{\langle 0|i\hbar\hat{I}|0\rangle \\ &= 2 \end{aligned}$$

grâce au commutateur $[\hat{r}_{\vec{\epsilon}}, \hat{p}_{\vec{\epsilon}}] = i\hbar\hat{I}$. Par conséquent, F est égale à 1 comme énoncé.

Il est intéressant de noter que la force d'oscillateur peut être aussi écrite sous la forme suivante :

$$OS_{0\to f} = \frac{2m(\omega_f - \omega_0)}{\hbar}|\langle 0|\vec{\epsilon}.\hat{r}|f\rangle|^2 \tag{D.4}$$

Si un champ magnétique est appliqué au système, on doit modifier la formule (D.1) : l'impulsion-p ($\hat{p}$) est remplacée par l'impulsion-mv ($\hat{p} - q\hat{A}$) [6]. La règle de somme pour la force d'oscillateur dans le cas général devient alors :

$$\sum_f \frac{2}{m\hbar(\omega_f - \omega_0)}|\langle 0|\vec{\epsilon}.(\hat{p} - q\hat{A})|f\rangle|^2 = 1 \tag{D.5}$$

où q est la charge de la particule et $\hat{A}$ est l'opérateur potentiel vecteur.

Par contre, la règle de somme pour la formule (D.4) reste toujours vraie :

$$\sum_f \frac{2m(\omega_f - \omega_0)}{\hbar} |\langle 0|\vec{\epsilon}.\hat{r}|f\rangle|^2 = 1 \tag{D.6}$$

Bibliographie

[1] M. Hulin et O. Berbeder, *Théorie des groupes appliquée à la physique* (Les éditions de physique, Les Ulis, 1991).

[2] D. Yoshioka, *The quantum Hall effect* (Springer, Tokyo, 2002).

[3] M. R. Spiegel, *Mathematical handbook of formulas and tables* (McGraw-Hill book company, New York, 1968).

[4] G. Allaire, *Cours analyse numérique et optimisation*, vol. 1 (Ecole Polytechnique, Palaiseau, 2002).

[5] G. Bastard, *Wave mechanics applied to semiconductor heterostructures* (Les éditions de physique, Les Ulis, 1996).

[6] R. P. Feynman, *The Feynman lectures on physics*, vol. 3 (Addison-Wesley, Massachusetts, 1966).

Annexe E

Publications

- *Alloy effects in GaInN/GaN heterostructures*, D. P. Nguyen,N. Regnault, R. Ferreira, G. Bastard, Sol. Stat. Com. **130**, 751 (2004), cond-mat/0311133

- *Intraband transitions in quantum dot-superlattice heterostructures*, F. F. Schrey, L. Rebohle, T. Mueller, G. Strasser, K. Unterrainer, D. P. Nguyen, N. Regnault, R. Ferreira, G. Bastard, Phys. Rev. B **72**, 155310 (2005), cond-mat/0407465

- *Electronic continuum and far infrared absorption of Ga(In)As/GaAs quantum dots*, D. P. Nguyen, N. Regnault, R. Ferreira, G. Bastard, Phys. Rev. B **71**, 245329 (2005), cond-mat/0502513
  Cet article a été sélectionné pour l'issue 3 (le 11 juillet 2005), volume **12** du Virtual Journal of Nanoscale Science & Technology, *http ://www.vjnano.org*

- *Cd-Se nano-tetrapods : controllable synthesis, structure analysis, electronic and optical properties*, Q. Pang, L. Zhao, Y. Cai, D. P. Nguyen, N. Regnault, N. Wang, S. Yang, W. Ge, R. Ferreira, G. Bastard, J. Wang, Chem. Mater. **17**, 5263 (2005)

Annexe F

Communications à des conférences

- **Congrès de la SFP** (Lyon 2003) : *Propriétés électroniques et optiques des puits quantiques InGaN/GaN*, D.P. Nguyen,N. Regnault, R. Ferreira, G. Bastard

- **OECS 8** (Lecce 2003) : *Optical properties of InGaN/GaN quantum wells and dots*, D.P. Nguyen, N. Regnault, R. Ferreira, G. Bastard

- **IRMMW 29** (Karlsruhe 2004) : *IR Quantum dot detectors with miniband tunnel extraction*, F.F. Schrey, D.P. Nguyen, T. Müller, L. Rebohle, N. Regnault, R. Ferreira, G. Bastard, G. Strasser et K. Unterrainer

- **NGS 12** (Toulouse 2005) : *Electronic continuum states and far infrared absorption of InAs/GaAs quantum dots*, D.P. Nguyen, N. Regnault, R. Ferreira, G. Bastard

- **MSS 12** (Alburquerque 2005) : *Electronic continuum states and far infrared absorption of InAs/GaAs quantum dots*, D.P. Nguyen, N. Regnault, R. Ferreira, G. Bastard

- **MSS 12** (Alburquerque 2005) : *Mid-infrared spectroscopy of bound-to-continuum transitions in InAs/GaAs self-assembled quantum dots*, T. Mueller, F. F. Schrey, L. Rebohle, G. Strasser, K. Unterrainer, D. P. Nguyen, N. Regnault, R. Ferreira, G. Bastard

Unusual confinements in the semiconductor quantum dots

Abstract

This thesis reports on numerical calculations of electronic and optical properties of quantum dots with unusual confinement such as InGaN/GaN dots, CdSe tetrapod, ...

After having shown the numerical calculation methods used throughout this work, we begin with a theoretical study on a superlattice of InAs/GaAs quantum dots with a short period. This short period causes a vertical alignment of quantum dots. We show that the ground state couples only with the continuum states which have nearly the same in-plane extension for the excitations with polarization along the growth direction (z). Following these particular couplings, the photo-responses in z polarization do not change when a vertical magnetic field is applied despite numerous quasi-Landau states in the continuum. Next, we show that strong bound-to-continuum absorption with in-plane polarizations is possible if we reduce the planar dimension of the dots. The results above are applied to explain the experimental results obtained by the group in Vienna. In this collaboration work, we study theoretically and experimentally the photo-detectors based on InAs/GaAs quantum dots embedded in a superlattice, with or without AlAs barriers. We show that these periodic structures can be used to fabricate photo-detectors in the far infrared range. The photo-current spectra are in good agreement with calculated optical absorption spectra.

In the next part of the work, we are interested in nitride heterostructures. These semiconductors have original physical properties such as large effective masses, large band offsets, giant piezoelectric field, ... We are interested in particular in InGaN/GaN heterostructures on which numerous optoelectronic applications are based. We show that the disorder effect as well as the large physical parameters make the Virtual Crystal Approximation no more valid in these systems. Finally, the calculations of electronic structures of the CdSe tetrapods are performed. We show that the first four states are well confined in the spherical body, which is coherent with the experiments.

Keywords

Quantum dot	Tetrapod
Semiconductor III-V	Semiconductor II-VI
Optical transition	Electronic properties

Confinements non-usuels dans les boîtes quantiques semiconductrices

Résumé

Cette thèse porte sur des calculs numériques des propriétés électroniques et optiques des boîtes quantiques avec des confinements non-usuels tels que des boîtes de InGaN/GaN, des tétrapodes de CdSe, ...

Après avoir présenté les méthodes de calculs numériques utilisées tout au long de cette thèse, nous commençons par étudier théoriquement un super-réseau des boîtes quantiques InAs/GaAs avec une petite périodicité. Cette petite périodicité entraîne l'alignement vertical des boîtes quantiques. Nous montrons que l'état fondamental ne couple qu'avec les états du continuum qui ont presque la même extension dans le plan pour les excitations avec la polarisation suivant la direction de croissance (z). En conséquence de ces couplages particuliers, les photo-réponses en polarisation z ne changent pas quand un champ magnétique est appliqué parallèle à z malgré la présence de nombreux états de quasi-Landau dans le continuum. Nous montrons ensuite qu'une absorption lié-continuum forte en polarisation dans le plan peut être obtenue si l'on réduit la taille latérale des boîtes. Ces résultats sont utilisés pour expliquer les résultats expérimentaux obtenus à Vienne. Dans ce travail effectué en collaboration, nous étudions théoriquement et expérimentalement les photo-détecteurs basés sur des boîtes quantiques InAs/GaAs insérées dans un super-réseau, sans ou avec les barrières de AlAs. Nous montrons que ces structures périodiques peuvent être utilisées pour fabriquer des photo-détecteurs dans la gamme infrarouge lointain. Les spectres de photo-courant sont en bon accord avec les spectres d'absorption optique obtenus par nos calculs.

Nous nous intéressons aussi à des hétéro-structures à base de nitrure. Ces semiconducteurs présentent des propriétés physiques originales comme des grandes masses effectives, de grands offsets de bande, un champ piézo-électrique colossal, ... Nous nous focalisons sur les hétéro-structures InGaN/GaN sur lesquelles de nombreuses applications opto-électroniques sont basées. Nous montrons que les effets du désordre ainsi que les grandes valeurs physiques rendent l'Approximation du Cristal Virtuel non valable dans ces systèmes. Enfin, nous effectuons des calculs des structures électroniques des tétrapodes de CdSe. Nous montrons que les quatre premiers états sont confinés en grande partie dans le corps sphérique, ce qui est cohérent avec les spectres expérimentaux.

Mots clés

Boîte quantique
Semiconducteur III-V
Transition optique
Tétrapode
Semiconducteur II-VI
Propriétés électroniques