

32-530-155-3

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE  
MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR  
ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE

*S. Commae*

UNIVERSITE SAAD DAHLEB  
FACULTE DES SCIENCES  
DEPARTEMENT DE PHYSIQUE



MEMEOIRE DE MAGISTERE

Présenté par

M<sup>elle</sup> SLIMANI Amel

En vue de l'obtention du diplôme de magistère en Physique Appliquée  
Option : Matériaux et composants

Thème

ETUDE ET MODELISATION DES  
HETEROSTRUCTURES A Puits  
QUANTIQUES CONTRAINTS GaInAs/InP

Devant le jury :

M.BEN TAIBA  
S.BOUSBIAT  
D.OUADJAOUT  
A.BOUMEDDIENE  
A.ALI MESSAOUD  
K.FERDJANI

Maître de conférences à l'U.S.T de Blida  
Maître de conférences à l'E.N.S de Kouba  
Maître de recherche à l'U.D.T.S d'Alger  
Chargé de Cours à l'U.S.T de Blida  
Chargé de Cours à l'U.S.T de Blida  
Maître de conférences à l'U.S.T de Blida

Président  
Examineur  
Examineur  
Invité  
Invité  
Rapporteur

Soutenu le : 29 / 10 / 2001.

Année Universitaire 2000/2001

## TABLES DES MATIERES

RESUME .....	i
ABSTRACT.....	ii
LISTE DES FIGURES .....	iii
SYMBOLES ET NOTATIONS.....	v
REMERCIEMENTS.....	vii
 HISTORIQUE .....	 1
INTRODUCTION GENERALE .....	3
 <b>Chapitre I : Généralités sur les semiconducteurs</b> .....	 6
I Propriétés cristallines et structure de bande des III-V .....	6
I.1 Propriétés cristallines .....	6
I.2 Propriétés électroniques .....	8
II Contraintes .....	10
II.1 Généralités sur les hétérostructures contraintes.....	10
II.2 Epaisseur critique de la couche épitaxiée .....	11
(i) Définition .....	11
(ii) Différents modèles calculant $L_c$ .....	11
II.3 Energie de déformation .....	13
II.4 Structure de bande de l'hétérostructure contrainte .....	14
III Notion de puits quantique .....	15
 <b>Chapitre II : Approximation de la fonction enveloppe et théorie K.P</b> ...	 19
II.1 Introduction .....	19
II.2 Approximation de la fonction enveloppe .....	19
II.3 Théorie KP .....	23
II.4 Le modèle de Kane .....	28
II.4.a Relation de dispersion du modèle de Kane .....	28
II.4.b Les masses effectives des extremas de bandes .....	31
 <b>Chapitre III : Calcul des énergies de confinement de l'hétérostructure InGaAs/InP</b> .....	 33
III.1 Calcul du décalage de bandes (bande offset) pour l'hétérostructure $Ga_xIn_{1-x}As/InP$ .....	33

III.1.1 Calcul général .....	33
III.1.2 Cas non contraint .....	37
III.1.3 cas contraint.....	39
III.2 Calcul des énergies de confinement.....	41
III.2.1 Approximation à une bande .....	41
III.2.1.1 Le modèle de Ben Daniel-Duke .....	41
III.2.1.2 Puits quantique des matériaux III-V.....	42
III.2.2 Approximation à trois bandes(Modèle de Kane-Bastard) .....	50
a. La bande de conduction .....	51
b. La bande de valence.....	52
III.2.3. Approche de Marzin.....	53
III.2.3.1 Pour les électrons .....	55
III.2.3.2 Pour les trous légers.....	56
III.2.4. Influence du couplage $\Gamma_8^-$ - $\Gamma_7$ sur les trous légers (Modèle à deux bandes).....	59
<b>Chapitre IV : Energie de dispersion dans le plan de la couche de croissance .....</b>	<b>65</b>
IV.1 Introduction.....	65
IV.2 Interaction trous lourds trous légers .....	66
IV.3 Méthode de la matrice de transfert.....	68
<b>CONCLUSION GENERALE .....</b>	<b>76</b>
<b>Annexe A : Fonction enveloppe.....</b>	<b>78</b>
<b>Annexe B : Loi de VEGARD et tableau de paramètres .....</b>	<b>82</b>
<b>Annexe C : Organigramme du confinement des porteurs et énergie de recombinaison du Modèle à une bande.....</b>	<b>83</b>
<b>Annexe D : Organigramme du confinement des porteurs et énergie de recombinaison du Modèle à deux bandes et trois bandes.....</b>	<b>84</b>
<b>Annexe E : La transformation unitaire.....</b>	<b>85</b>
<b>Annexe F : Organigramme de calcul de l'épaisseur critique.....</b>	<b>87</b>
<b>Bibliographie.....</b>	<b>89</b>

# Dédicaces

*A mes parents*

*A mes grands parents*

*A mes sœurs et frères*

*A toute ma famille*

Mots clés :

Semi-conducteur III-V, Puits quantiques contrastés, hétérojonction GaInAs/AlInAs.

## RESUME

Dans ce travail, nous avons présenté quelques propriétés électronique et optique des hétérostructures fabriqués à partir des semiconducteurs III-V désaccordés en paramètre de maille. Après avoir décrits l'état de déformation de telles structures, nous discutons les modifications de la structure de bande due aux contraintes biaxiales . Nous mettrons en évidence l'influence du couplage entre bandes sur les états de la bande de conduction (électrons ) et de la bande de valence ( trous lourds, trous légers et spin orbite). Nous étudierons les énergies de confinements des porteurs dans un modèle simple dit parabolique, dans un modèle à deux bandes avec couplage entre bande trous légers  $\Gamma_{81}$  et la bande spin-orbite  $\Gamma_7$  et dans le modèle à trois bandes en présence du couplage de la bande de conduction et la bande de valence pour le cas accordé (cas non contraint) et le cas désaccordé (cas contraint).

Nous avons comparé les résultats de ces modèles avec les résultats expérimentaux obtenus par photoluminescence. Nous avons aussi étudié la dispersion des porteurs dans la direction de croissance [001] ainsi que dans le plan de couche.

### Mots clefs :

Semi-conducteur III-V ; Puits quantiques contraints ; hétérostructure GaInAs/InP ;

## LISTE DES FIGURES

Figure I.1 : Structure cristalline du Zinc-blende.....	7
Figure I.2 : Première zone de Brillouin du réseau à face centré.....	7
Figure I.3 : Energie de gap en fonction des constantes de maille des cristaux III-V et leurs alliages ternaires .....	8
Figure I.4 : Les orbitales atomiques et leurs bandes correspondantes .....	9
Figure I.5 : Déformation tétragonal de la couche épitaxié ( $a_e$ ) sur un substrat ( $a_s$ ).....	10
Figure I.6 : Epaisseur critique en fonction de x pour l'hétérostructure $Ga_xIn_{1-x}As/InP$ .....	12
Figure I.7 : L'énergie stockée $E_{st}$ et l'énergie de dislocation par unité de surface $E_{dis}$ , en fonction de l'épaisseur de la couche active.....	13
Figure I.8 : Effet de la contrainte sur la structure de bande de l'hétérostructure $Ga_xIn_{1-x}As/InP$ au voisinage du centre de la zone de Brillouin, à la direction de croissance $k_z$ et dans le plan de couche $k_{//}$ .....	14
Figure I.9 : Hétérostructure $InGaAs/InP$ .....	15
Figure I.10 : Diagramme d'énergie de la bande de valence et de la bande de conduction dans l'hétérostructure .....	16
Figure I.11 : Profil de potentiel d'un puits quantique carré .....	16
Figure II.1 : La structure de bande au voisinage du centre de la 1 <sup>ère</sup> zone de Brillouin des bandes ( $\Gamma_6, \Gamma_7, \Gamma_8$ ) d'un composé III-V à gap direct.....	29
Figure III.1 : Diagramme schématique décrivant le décalage de bande dans le cas contraint et non contraint de l'hétérostructure $In_xGa_{1-x}As/InP$ à $k=0$ .....	36
Figure III.2 : bande de conduction et de valence pour le cas non contraint de l'hétérostructure $Ga_xIn_{1-x}As/InP$ .....	37
Figure III.3 : Bande offset non contrainte .....	38
Figure III.4 : Energie de la bande de valence et de conduction dans le cas contraint .....	38
Figure III.5 : Bande offset dans le cas contraint .....	38
Figure III.6 : La bande interdite dans le cas contraint.....	38

Figure III.7 : La bande relative de la bande de conduction et de valence non contrainte.....	40
Figure III.8 : La bande relative de la bande de conduction et de valence, contrainte .....	40
Figure III.9 : déplacement du gap par rapport à l'état non contraint .....	41
Figure III.10 : Energie de confinement du $Ga_xIn_{1-x}As/InP$ du modèle à une bande .....	43
Figure III.11 : Fonction enveloppe des trous lourds pour une largeur $L=60\text{\AA}$ et pour l'hétérostructure non contrainte $In_xGa_{1-x}As/InP$ .....	44
Figure III.12 : Fonction enveloppe des trous légers pour une largeur $L=60\text{\AA}$ et pour l'hétérostructure non contrainte $In_xGa_{1-x}As/InP$ .....	45
Figure III.13 : Energie de transition du $Ga_xIn_{1-x}As/InP$ du modèle à une bande .....	47
Figure III.14 : Les sous bande d'énergie des trous lourds et trous légers, pour une largeur $L=60\text{\AA}$ de l'hétérostructure $Ga_xIn_{1-x}As/InP$ .....	48
Figure III.15 : Les énergies de confinement des trous lourds et trous légers en fonction de la largeur du puits de l'hétérostructure $Ga_xIn_{1-x}As/InP$ .....	49
Figure III.16 : Energie de confinement du $Ga_xIn_{1-x}As/InP$ du modèle à trois bandes.....	57
Figure III.17 : Energie de transition du $Ga_xIn_{1-x}As/InP$ du modèle à trois bandes .....	58
Figure III.18 : La dispersion dans la direction de croissance du modèle à une bande et à deux bandes pour l' $InAs$ .....	62
Figure III.19a: Energie de confinement des trous légers en fonction de la largeur du puits dans le modèle parabolique et dans le modèle à deux bandes pour le $GaAs$ .....	63
Figure III.19b: Energie de confinement des trous légers en fonction de la largeur du puits dans le modèle parabolique et dans le modèle à deux bandes pour l' $InAs$ .....	63
Figure IV.1 : Diagramme d'énergie décrivant les zones du puits quantique de l'hétérostructure $Ga_xIn_{1-x}As/InP$ .....	71
Figure IV.2 : Energie de dispersion dans le plan de la couche de croissance dans le cas accordé.....	75

## SYMBOLES ET NOTATIONS

$\varepsilon$  : Constante de déformation.

$\varepsilon_{//}$  : Constante de déformation dans le plan de croissance.

$\varepsilon_{\perp}$  : Constante de déformation dans la direction de croissance.

$a_e$  : Paramètre de maille de la couche épitaxiée.

$a_s$  : Paramètre de maille du substrat.

$C_{ij}$  : Constante d'élasticité.

$\sigma$  : Tenseur de contrainte.

$L$  : Epaisseur du puits.

$L_c$  : Epaisseur critique.

$\nu$  : Module de poisson.

$W$  : Energie de déformation élastique stockée par unité de volume.

$E_{st}$  : Energie de déformation élastique stockée par unité de surface.

$G$  : Module de cisaillement.

$V$  : Potentiel du puits.

$H$  : Hamiltonien du système.

$m_0$  : masse de l'électron libre.

$m^*$  : masse effective de la particule.

$m_A^*$  : masse effective du matériau puits.

$m_B^*$  : masse effective du matériau barrière.

$P$  : Quantité de mouvement.

$k_A$  : Vecteur d'onde du matériaux puits.

$k_B$  : Vecteur d'onde du matériau barrière.

$\hbar$  : Constante de Planck.

$f_N$  : Fonction enveloppe correspondante à la bande N.

$f_N^A$  : Fonction enveloppe correspondante à la bande N du matériau puits.

$f_N^B$  : Fonction enveloppe correspondante à la bande N du matériau barrière.



- $U_{N,k_0}^A$  : Partie périodique de la fonction de Bloch correspondante à la bande N au centre de la zone de Brillouin du matériau puits.
- $U_{N,k_0}^B$  : Partie périodique de la fonction de Bloch correspondante à la bande N au centre de la zone de Brillouin du matériau barrière.
- $\Psi$  : Fonction d'onde.
- $\delta H_r$  : Correction du Hamiltonien relativiste.
- $\Gamma$  : Point de haute symétrie en  $k=0$ .
- $c$  : Vitesse de la lumière.
- $W(k)$  : La perturbation en fonction de  $k$ .
- $\delta$  : Symbole de Kronecker.
- $\lambda$  : Valeur propre.
- $\Delta_0$  : Le couplage spin orbite non contraint.
- $\Delta$  : Le couplage spin orbite contraint.
- $E_g$  : Energie de la bande interdite.
- $a_c$  : Le potentiel de déformation hydrostatique de la bande de conduction.
- $a_v$  : Le potentiel de déformation hydrostatique de la bande de valence.
- $\Omega$  : Le volume.
- $\frac{\Delta\Omega}{\Omega}$  : Le changement relatif du volume.
- $E_{v,av}$  : Energie moyenne de la bande de valence.
- $\delta E_{001}$  : Le décalage d'énergie dans la direction de croissance [001].
- $\Delta E_v$  : La bande offset de la bande de valence.
- EL : Energie de confinement des trous légers.
- EH : Energie de confinement des trous lourds.
- ErH : Energie de recombinaison de la bande trous lourds avec la bande de conduction.
- ErL : Energie de recombinaison de la bande trous légers avec la bande de conduction.
- $\gamma_A$  : Paramètre de Luttinger du matériau puits.
- $\gamma_B$  : Paramètre de Luttinger du matériau barrière.

## REMERCIEMENTS

Je remercie mon promoteur le docteur K.FERDJANI maître de conférence à l'université de Blida de la confiance qu'il m'a fait pour entamer ce travail et pour l'aide qu'il m'a apporté.

Je tiens à remercier très chaleureusement ma très chère amie et sœur M<sup>elle</sup> A.ALI MESSAOUD de son soutien moral et aide matériel aux moments difficiles.

Je remercie monsieur A.BOUMEDDIENE, chargé de cours au département de physique, du temps qu'il m'a consacré en abordant différents points de ce sujet et qui m'a fait bénéficier de sa grande connaissance au domaine de la physique du solide et de ces encouragements.

Je remercie beaucoup le docteur D.OUADJAOUT maître de recherche à l'U.D.T.S d'Alger de m'avoir reçue et m'a fait profiter de ces documents, thèses et autres et d'avoir accepté de juger ce travail.

Je remercie très vivement le professeur LAMBERTI CORLOS de l'université de TORINO en ITALY, travaillant dans le même domaine de recherche, que j'ai pu joindre par Internet, et qui m'a fait profiter de ces dernières publications, qui mon été d'une précieuse aide.

Je remercie le docteur M.BENTAIBA, le docteur S.BOUSBIAT de m'avoir fait l'honneur de s'intéresser à ce travail et d'avoir accepté de le juger.

Je remercie le docteur D.KADI HANIFI, M<sup>elle</sup> B.SILAKHAL, M<sup>elle</sup> O.AZZI, M<sup>elle</sup> N.CHERFI, ainsi que monsieur M.REMOUCHE pour les documents qu'ils m'ont envoyé de l'étranger, pendant leurs stages et je leurs souhaite la réussite en leurs travaux de recherches.

Je remercie aussi le docteur A.AMRANI le responsable du laboratoire LAMM de l'institut d'électronique, qui m'a fait bénéficier de l'environnement très favorable qui constitue le laboratoire d'analyse et de modélisation des microstructures.

Je remercie du fond du cœur mes très chères amies M<sup>elle</sup> Y.Mohamed Essaid et M<sup>elle</sup> K.TAHER CHAOUCH, de leurs encouragements et de leurs aides qui m'ont été bénéfique.

Enfin, je remercie mes parents et mes proches de m'avoir supporté, encouragé et aidé aux moments difficiles.

## Historique

En amenant en 1970 l'idée de fabriquer des empilements de couches très minces de semi-conducteurs, Esaki et Tsu[1] ont ouvert un nouveau domaine d'études en physique des semi-conducteurs : celui des structures quasi-bidimensionnelles. Les propriétés des puits quantiques, super réseaux, hétérojonctions à modulation de dopage ont dès lors été intensément étudiés. Les caractéristiques spécifiques de ces systèmes sont utilisées dans la réalisation de nombreux dispositifs opto et micro-électroniques.

Leur élaboration est tributaire des méthodes d'épitaxie disponibles, puisqu'il est nécessaire à la fois de contrôler les épaisseurs des couches déposées à quelque angström ( $\text{\AA}$ ) près, sur de grandes surfaces, et d'obtenir des matériaux de bonne qualité. Ces nécessités ont imposé pendant la première décennie suivant leur apparition le choix du semi-conducteur utilisable.

Ainsi, les premiers super-réseaux ont été fabriqués en épitaxie en phase vapeur ou les gaz de départ sont des chlorures, dans le système  $\text{GaAs}/\text{Ga}_x\text{As}_{1-x}\text{P}$ . Les matériaux constitutifs, s'ils ont la même structure Zinc Blende, ont des paramètres de mailles différents. Un tel système composé de matériaux de paramètres de maille notablement différents est dit « contraint ».

Le système  $\text{GaAs}/\text{Ga}_x\text{As}_{1-x}\text{P}$  fut rapidement abandonné avec l'apparition de deux nouvelles techniques de croissance : l'épitaxie par jet moléculaire (M.B.E), et l'épitaxie en phase vapeur à partir d'organométalliques (M.O.C.V.D). Ces deux techniques remplissent les exigences sur le contrôle des épaisseurs et la qualité du matériau épitaxié. L'effort a dès lors porté sur le système  $\text{GaAs}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ , le GaAs étant attractif pour certaines applications et ce matériau massif avait déjà été étudié en grand détail.

D'autre part l'alliage  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  a pratiquement le même paramètre de maille que le substrat GaAs, cette condition permet donc d'épitaxier des structures assez épaisses, les couches de GaAs des puits quantiques sont non déformées, les couches de l'alliage le sont faiblement et ces déformations ne modifient que très peu les propriétés des structures épitaxiées dans ce système.

Les premières études sur les hétérostructures contraintes ont été conduites par Matthews et Blakeslee [2-4], et depuis, l'intérêt des structures contraintes a augmenté vu le développement de techniques de croissance cristalline puissantes ( MBE [5], et MOCVD[6-9]), et la grande flexibilité offerte par le choix d'un certain désaccord de maille entre les composés d'une structure épitaxiale. De plus, les contraintes induisent des propriétés physiques intéressantes.

En 1982, Osbourn[15] examine la possibilité d'épitaxier des hétérostructures à partir des matériaux désaccordés, et peu après, son équipe[16] et celle du laboratoire de Bagnex[17] réalisent les premières structures dans le système contraint  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ . Plusieurs équipes américaines et japonaises se sont alors lancées dans l'étude de ces structures, posant ainsi les premières pierres des études sur les propriétés structurales par rétrodiffusion d'ions[18,19], sur le transport[20], sur la stabilité [21,22,23], sur la photoluminescence [24,25] et sur la faisabilité de dispositifs optiques ( Lasers[26,27] et photodiode[28,29] ) et électroniques(transistors à effet de champs[30]). Dès lors un nombre important d'hétérostructures contraintes est apparu [31] telle l'hétérostructure IV-IV(Si/Ge), les II-VI ( CdTe / CdMnTe , CdTe / ZnTe ), les V-VI (PbTe/PbSnTe), et les III-V qui sont largement étudiés pour différentes applications.

## INTRODUCTION GENERALE

Les hétérostructures à puits quantiques fabriquées à base de GaInAs/InP se sont révélées, ces dernières décennies [32], être d'un grand intérêt dans le domaine des dispositifs électroniques et optoélectroniques (transistors rapides, lasers à puits quantiques contraints [33,34] et photodétecteurs avalanche [35]).

L'hétérostructure InGaAs/InP préparée par la technique CBE [10-14] est d'une qualité meilleure en comparaison à celles faites par les techniques citées précédemment dans l'historique.

Après excitation d'une telle hétérostructure GaInAs/InP, la longueur d'onde émise varie entre 1.10 et 1.55  $\mu\text{m}$ . Cette hétérostructure est idéale pour les systèmes de communications optiques utilisant les fibres de silica. L'émission optique de ces puits quantiques est intense et de largeur de raie étroite [36].

Le système InGaAs/InP a une meilleure performance à très haute fréquence que le système AlGaAs/GaAs, à cause de la grande mobilité des électrons et également au meilleur confinement des trous à cause de sa plus grande discontinuité de bande de valence [37].

Pour l'étude de la structure électronique et des propriétés optiques des hétérostructures, plusieurs méthodes ont été employées. Parmi elles, la méthode de la liaison forte (tight-binding)[38], du pseudopotentiel [39,40] et la méthode de densité fonctionnelle(DFT)[41,42]. Ces méthodes donnent de bons résultats mais sont lourdes et coûteuses en temps de calcul.

L'approche de la fonction enveloppe[43], basée sur l'approximation de la masse effective est facile à utiliser et donne de bons résultats des sous bandes de valence et de conduction au voisinage du centre de la première zone de Brillouin, pourvu qu'il y est un accord de maille acceptable dans l'hétérostructure.

L'approximation de la masse effective basée sur la théorie  $k_p$  permet de prédire le couplage des particules (trous légers (lh), spin orbite (SO) et électron) le long de la direction de croissance ( $k_{||} = 0$ ). Ce couplage provoque la non-parabolicité dans l'espace quantifié de la structure de bande de valence, et cela a un grand effet sur toutes les propriétés optiques de l'hétérostructure comme la diffusion Raman, la polarisation de la luminescence et l'énergie de liaison excitonique [44].

Dans le premier chapitre nous citerons les propriétés cristallines des composés III-V, spécifierons les matériaux ternaires pouvant être formé par les binaires III-V. Nous décrirons le groupe de symétrie de ce type de structure utilisée. Nous décrirons également la notion physique de la contrainte et l'énergie de déformation crée par celle-ci, ainsi que la description du puits quantique rectangulaire.

Dans le deuxième chapitre nous définirons l'approximation de la fonction enveloppe dans l'hétérostructure d'après les approximations théoriques. Cette approximation est valable au voisinage des points de hautes symétries, dans notre cas d'hétérostructure au voisinage du point ( $\Gamma$ ). Nous avons donné l'expression de cette fonction en chaque zone du puits et nous l'avons appliqué dans l'équation de Schrodinger. Ce formalisme de la fonction enveloppe est basé sur la théorie  $k.p$  donnée par Kane.

Le chapitre III consiste dans l'étude des états de confinements des particules (trous lourds, trous légers et électrons) de l'hétérostructure InGaAs/InP dans la direction de croissance, pour différentes concentrations du Gallium et en présence de la contrainte tétragonale. Ces états de confinement sont calculés en appliquant le modèle parabolique, c'est à dire sans aucune interaction entre bandes.

Puis, nous avons utilisé un modèle non parabolique (plus réaliste) en tenant compte de l'existence d'interactions entre bandes interprétées par la théorie  $k.p$  de Kane et en présence de la contrainte. Nous utiliserons le modèle à deux bandes (interaction entre la bande trous légers et la bande spin orbite) et le modèle à trois bandes (interaction entre bandes des trous légers, spin orbite et électrons). Les énergies de transitions résultant de ces modèles sont comparées avec les résultats expérimentaux.

Dans le chapitre IV nous étudierons la dispersion des particules de l'hétérostructure dans le plan de couche pour le cas non contraint. Nous nous sommes restreint aux calculs des énergies de dispersion induites de l'interaction  $k_p$  entre la bande trous lourds et la bande trous légers. Les résultats sont obtenus par la méthode de la matrice de transfert, appliquée dans chaque zone de l'hétérostructure. Nous évaluerons les énergies de dispersion par optimisation c'est à dire en prenant la valeur minimale sur un intervalle d'énergie.

## Généralités sur les semi-conducteurs

### I. PROPRIÉTÉS CRISTALLINES ET STRUCTURE DE BANDE DES COMPOSÉS III-V :

#### 1.1. les propriétés cristallines :

Les composés binaires III-V, dans lesquelles le nombre d'électrons de valence appartenant à chacun des atomes est égal à quatre, forment des phases tétraédriques où chaque atome est entouré de quatre plus proches voisins, occupant les sommets d'un tétraèdre régulier. La majorité des composés III-V cristallisent dans la structure du zinc-blende [45].

Cette structure est construite à partir de deux cubes  $F$  interpenétrés, décalés l'un par rapport à l'autre d'un quart de la diagonale du cube principal (voir figure 1.1). La cellule primitive de ce réseau de zinc-blende contient deux atomes, un atome  $A$  au  $(0,0,0)$  l'origine et l'autre à  $(a/4, a/4, a/4)$  de l'origine du cube.

Le groupe de symétrie ponctuel de la structure du zinc-blende ne comporte pas tous les 24 éléments de symétrie du groupe ponctuel du réseau à faces centrées, il ne comporte que la moitié des 24 éléments de symétrie du groupe cubique  $O_h$  ( $m\bar{3}m$ ). De tous les éléments de symétrie du groupe  $O_h$ , 12 éléments seulement assurent l'invariance du tétraèdre [45]. Ils sont les suivants  $\{C_3, C_2, C_3^2, C_2, C_3, C_3^2, C_2, C_3, C_3^2, C_2, C_3, C_3^2\}$ . Le groupe ponctuel du tétraèdre est  $T_d$  qui ne comporte pas de centre d'inversion, le groupe spatial du réseau de la zinc-blende est  $T_d^c$  ou  $F\bar{4}3m$  [48]. Il ne comporte pas de translations et comporte des rotations ou des rotations avec réflexion par rapport à un plan.



# Chapitre I

## Généralités sur les semi-conducteurs

### I PROPRIETES CRISTALLINES ET STRUCTURE DE BANDE DES COMPOSES III-V :

#### I.1 les propriétés cristallines :

Les composés binaires III-V, dans lesquelles le nombre d'électrons de valence appartenant à chacun des atomes est égal à quatre, forment des phases tétraédriques ou chaque atome est entouré de quatre plus proche voisins, occupant les sommets d'un tétraèdre régulier. La majorité des composés III-V cristallisent dans la structure du zinc-blende [45].

Cette structure est construite à partir de deux cubes F interpénétrés, déplacés l'un par rapport à l'autre d'un quart de la diagonale du cube principal (voir figure I.1). La cellule primitive de ce réseau du zinc blende contient deux atomes, un atome situé à l'origine et l'autre à  $(a/4, a/4, a/4)$  de l'origine du cube.

Le groupe de symétrie ponctuel de la structure du zinc blende ne comporte pas tous les éléments de symétrie du groupe ponctuel du réseau à faces centrées, il ne comporte que la moitié des 48 éléments de symétrie du groupe cubique  $O_h$  ( $m\bar{3}m$ ). De tous les éléments de symétrie du groupe  $O_h$ , 24 éléments seulement assurent l'invariance du tétraèdre [45]. Ils sont les suivant:  $\{E; C_4^2(3); C_3(8); IC_2(6); C_2(6)\}$ . Le groupe ponctuel du tétraèdre est  $T_d$ , qui ne comporte pas de centre d'inversion, le groupe spatial du réseau de la zinc blende est  $T_d^2$  ou  $F\bar{4}3m$  [28]. Il ne comporte pas de translations et comporte des rotations ou des rotations avec réflexion par rapport à un plan.

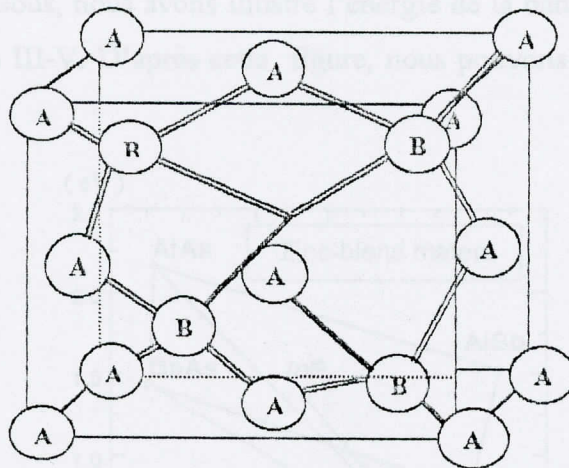


Figure I.1 :Structure cristalline du zinc blende.

De base :  $\text{A}$   $(0,0,0)$

$\text{B}$   $(1/4,1/4,1/4)$

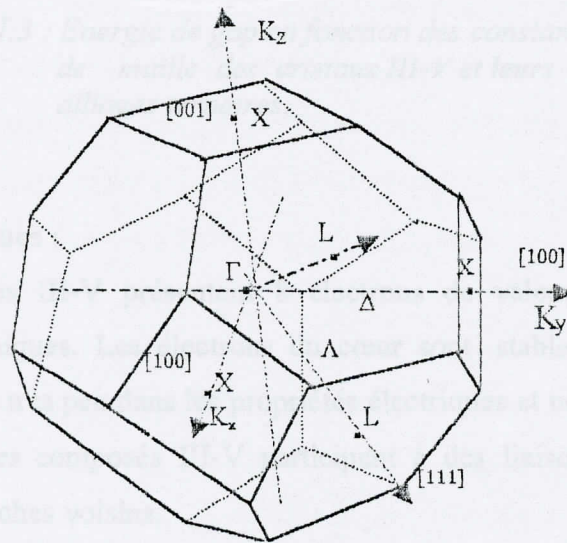


Figure I.2 :Première zone de Brillouin du réseau cubique à faces centrées.

Le réseau réciproque est cubique type F. La figure I.2 représente la zone de Brillouin réduite du réseau de la zinc-blende. La zone se présente sous la forme d'un octaèdre tronqué et sur lequel sont présentés des points et axes de symétrie. Les points de haute symétrie dans la première zone de Brillouin sont notés :

$\Gamma$  :  $2\pi/a (0.0.0)$  ;  $X$  :  $2\pi/a (1.0.0)$  et  $L$  :  $2\pi/a (1.1.1)$ .

En figure I.3 ci dessous, nous avons illustré l'énergie de la bande interdite ainsi que le paramètre de maille pour les binaires III-V. D'après cette figure, nous pouvons construire des ternaires formés à partir de ces binaires.

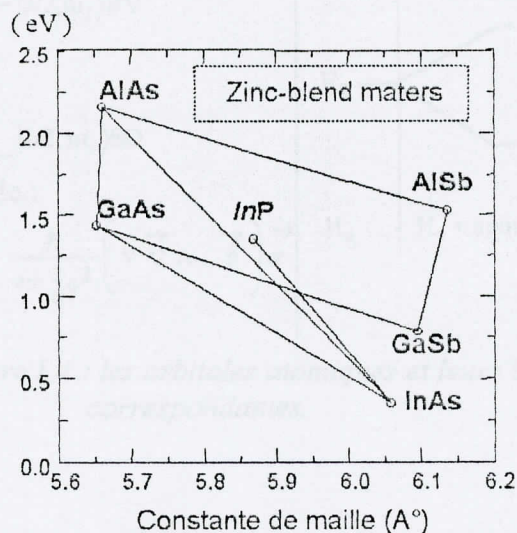


Figure I.3 : Energie de gap en fonction des constantes de maille des cristaux III-V et leurs alliages ternaires.

## I.2 Les propriétés électroniques :

Les composés binaires III-V présentent 8 électrons de valence par maille élémentaire qui participent aux liaisons chimiques. Les électrons du cœur sont stables, fortement liés à leur noyau respectif et ne contribuent que très peu dans les propriétés électriques et ne contribuent pas aux propriétés optiques. Les 8 électrons des composés III-V participent à des liaisons tétraédriques entre un type d'atome et ses quatre plus proches voisins.

Dans les fonctions de base, les orbitales de chaque atome hybrident (s ou p) avec une orbitale de l'atome du voisinage, donc il y a production de deux niveaux ; un liant et un anti-liant. Les orbitales s anti-liantes sont fortement liées et toujours occupées par deux électrons par maille élémentaire. Les six électrons restant remplissent les trois orbitales p liantes. Les bandes qui proviennent de l'orbitale antiliante sont toutes vides, le plus bas (souvent une bande s) forme la bande de conduction du matériau (voir figure I.4).

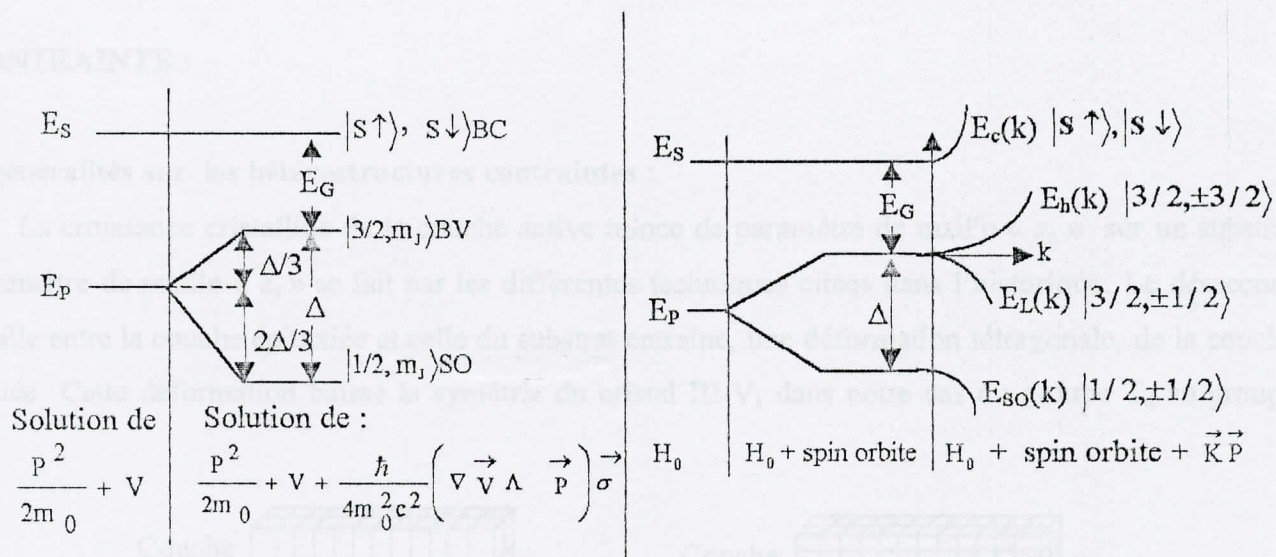


Figure I.4 : les orbitales atomiques et leurs bandes correspondantes.

Dans les composés III-V, l'extremum de la bande de valence se situe au centre de la zone de Brillouin au point  $\Gamma$  [43]. La bande de valence est principalement originaire des orbitales p. En l'absence du couplage spin-orbite, les trois bandes de valence (trou lourd, trou léger et spin orbite) sont dégénérées au point  $\Gamma$  de symétrie  $\Gamma_8$  correspondant à  $J=3/2$  et  $\Gamma_7$  correspondant à  $J=1/2$ , avec  $J$  le moment angulaire total. Dans les composés III-V, l'extremum de bande de conduction se situe en général au point  $\Gamma$  ou proche du point L ou X.

Il est possible de former des composés ternaires ou quaternaires à partir des composés binaires III-V. Nous considérons les solutions  $AB_{1-x}C_x$ , les atomes A se localisent dans des sites d'un des réseaux F de la structure Zinc-Blende, cependant, les atomes B et C occupent les emplacements du deuxième réseau F.

Le potentiel créé par les atomes B et C est remplacé par un potentiel périodique donné comme suit :

$$\langle V \rangle = V_A + xV_C + (1-x)V_B.$$

II CONTRAINTE :

II.1 généralités sur les hétérostructures contraintes :

La croissance cristalline de la couche active mince de paramètre de maille «  $a_e$  » sur un substrat de paramètre de maille «  $a_s$  » se fait par les différentes techniques citées dans l'historique. Le désaccord de maille entre la couche épitaxiée et celle du substrat entraîne, une déformation tétragonale, de la couche épitaxiée. Cette déformation baisse la symétrie du cristal III-V, dans notre cas du groupe  $T_d$  au groupe  $D_{2d}$ .

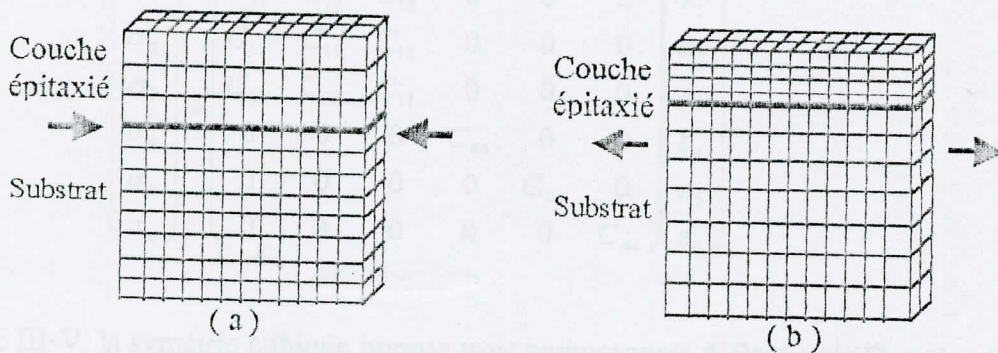


Figure 1.5 : Déformation tétragonale de la couche épitaxiée de paramètre de maille  $a_e$ , sur un substrat de paramètre  $a_s$ .  
 (a) Compression biaxiale  $a_e > a_s$ .  
 (b) Tension biaxiale  $a_e < a_s$ .

Le substrat de paramètre de maille «  $a_s$  », différent de celle de la couche épitaxiée, impose sa maille à cette dernière. Cette différence de maille provoque une déformation de la couche épitaxiée, soit en tension biaxiale ( $a_e < a_s$ ) ou en compression biaxiale ( $a_e > a_s$ ). Le tenseur de déformation est diagonal et ses paramètres non nuls sont :

Dans le plan de couche :

$$\epsilon_{//} = \epsilon_{xx} = \epsilon_{yy} = \frac{a_s - a_e}{a_e} \tag{I.1}$$

Dans la direction de croissance [001]:

$$\epsilon_{zz} = \epsilon_{\perp} = \frac{a_{\perp} - a_e}{a_e} = a_e + (a_s - a_e) \frac{2C_{12}}{C_{11}} = - \frac{2C_{12}}{C_{11}} \epsilon_{xx} \tag{I.2}$$

D'après la loi de Hook :

$$\sigma = \varepsilon \times C \quad (I.3)$$

où :

$\sigma$  : tenseur de contrainte.

$\varepsilon$  : tenseur de déformation.

$C$  : tenseur d'élasticité.

$$\begin{pmatrix} \sigma_1 \\ \sigma_2 \\ \sigma_3 \\ \sigma_4 \\ \sigma_5 \\ \sigma_6 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{11} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{12} & C_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varepsilon_1 \\ \varepsilon_2 \\ \varepsilon_3 \\ \varepsilon_4 \\ \varepsilon_5 \\ \varepsilon_6 \end{pmatrix} \quad (I-4)$$

Pour un composé III-V, la symétrie cubique impose trois composantes d'élasticités  $C_{11}$ ,  $C_{12}$ ,  $C_{44}$ .

## II.2 Epaisseur critique de la couche épitaxiée :

### (i) Définition :

L'épaisseur de la couche contrainte  $L$ , inférieure à l'épaisseur critique  $L_c$  qui maintient la cohérence entre la couche contrainte et la couche barrière, et au-dessous de laquelle l'hétérostructure est dans un état thermodynamiquement stable et au-dessus de laquelle apparaissent des dislocations qui agissent comme des centres de recombinaisons non radiatifs, réduisant l'intensité du rayonnement émis pouvant être détecté par photoluminescence.

### (ii) Les différents modèles calculant $L_c$ :

La stabilité des couches contraintes a été étudiée en premier par Frank and Van der Merwe [46]. L'épaisseur critique peut être estimée par le modèle de l'équilibre mécanique de Matthews et Blackeslee [47] donné comme suit:

$$L_c = \frac{a_e}{\sqrt{2}} \frac{1-0.25\nu}{4\pi \varepsilon_{XX}(1+\nu)} \left[ \ln\left(\frac{\sqrt{2}L_c}{a_e}\right) + 1 \right] \quad (I.5)$$

avec :  $\nu = c_{11}/(c_{11} + c_{12})$  le module de Poisson.

La relation ci dessus s 'applique à une seule couche supportant la contrainte épitaxiée sur un substrat épais[48]. Pour un système multicouche A/B/A/B la contrainte est partagée entre les matériaux A et B, l'épaisseur critique systématiquement supérieure au cas précédent est donnée par la relation suivante:

$$L_c(x) = \left( \frac{a_e}{\sqrt{2\pi}|\epsilon_{xx}|} \right) \left( \frac{1-0.25\nu}{1+\nu} \right) \left[ \ln \left( \frac{L_c \sqrt{2}}{a_e} \right) + 1 \right] \quad (I-6)$$

People et Bean[49 ] évaluèrent l'épaisseur critique en égalisant l'énergie élastique stockée (équation( I.8) ci dessous ) et l'énergie de création d'une dislocation [84] et trouvèrent :

$$L_c(x) = \left( \frac{a}{32\sqrt{2}\pi\epsilon_{xx}^2} \right) \left( \frac{1-\nu}{1+\nu} \right) \left[ \ln \left( \frac{L_c \sqrt{2}}{a_e} \right) \right] \quad (I-7)$$

Nous avons calculé numériquement l'épaisseur critique à partir des deux modèles (voir Annexe F). Les résultats sont montrés en figure I.6. Ceux de Matthews et Blakeslee sont en bon accord avec ceux données par l'expérience[50], tandis que les résultats de People et Bean sont surestimés.

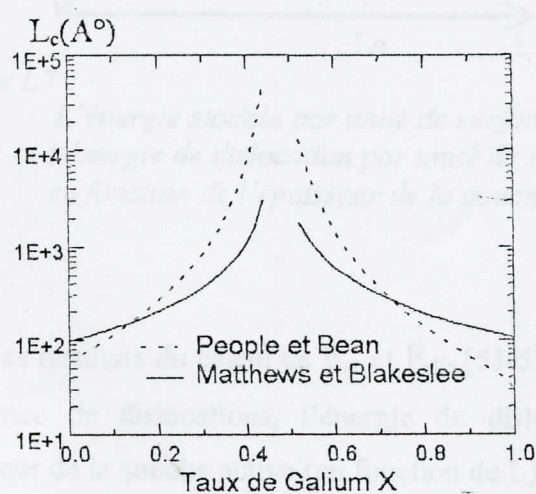


Figure I.6: Epaisseur critique de couche( $L_c$ ) en fonction de  $x$  pour l'hétérostructure  $Ga_xIn_{1-x}As/InP$ .

### II.3 Energie de déformation :

L'énergie de déformation élastique stockée dans les couches contraintes par unité de volume

$$\text{s'écrit : } W = \frac{1}{2} \varepsilon_{ij} \sigma_{ij} = \left( C_{11} + C_{12} - 2 \frac{C_{12}^2}{C_{11}} \right) \varepsilon_{ij}^2 \quad (\text{I.8})$$

l'énergie stockée par unité de surface,  $E_{st}$  croit linéairement avec l'épaisseur de la couche  $L$  :

$$E_{st} = 2G \left( \frac{1+\nu}{1-\nu} \right) \varepsilon_{ij}^2 L \quad (\text{I.9})$$

où :  $G$  : le module de cisaillement du matériau couche.

$\nu$  : le module de poisson.

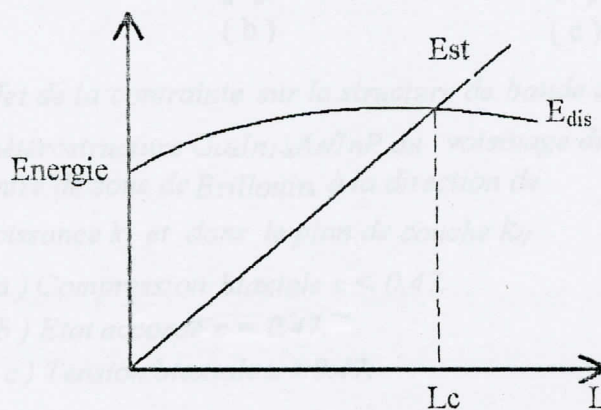


Figure I.7 :

*L'énergie stockée par unité de surface  $E_{st}$  et l'énergie de dislocation par unité de surface  $E_{dis}$  en fonction de l'épaisseur de la couche.*

La figure I.7, présente les résultats du calcul de  $E_{st}$  et  $E_{dis}$  [51-53] en fonction de l'épaisseur de la couche active ( $L$ ). En présence de dislocations, l'énergie de dislocation augmente lentement en logarithme népérien de l'épaisseur de la couche active (en fonction de  $L$ ).



#### II.4 Structure de bande d'énergie des hétérostructures contraintes :

Les effets de contrainte sur la structure de bandes d'énergie des semi-conducteurs cubiques ont été étudiés par Pikus et Bir [54]. Les courbes de dispersion du GaInAs/InP en présence de la contrainte biaxiale dans le plan de couche ainsi que dans la direction de croissance sont représentées en figure.I.8.

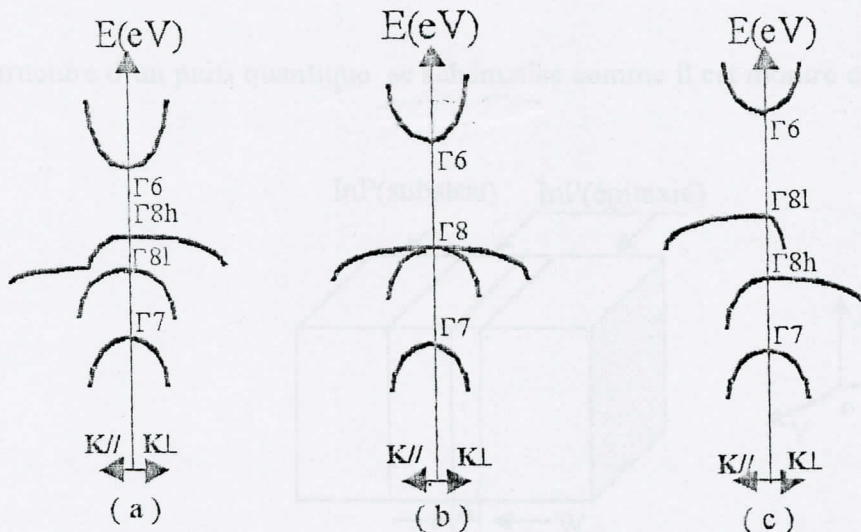


figure.I.8: Effet de la contrainte sur la structure de bande de l'hétérostructure  $Ga_xIn_{1-x}As/InP$  au voisinage du centre de zone de Brillouin, à la direction de croissance  $k_{\perp}$  et dans le plan de couche  $k_{\parallel}$

(a) Compression biaxiale  $x < 0.47$ .

(b) Etat accordé  $x = 0.47$ .

(c) Tension biaxiale  $x > 0.47$ .

La structure de bande de l'hétérostructure est affectée par la contrainte dans la direction de croissance ainsi que dans le plan de couche. Les traits principaux de cet effet sont les suivants :

- Une augmentation de la bande interdite quand l'hétérostructure est sous compression biaxiale alors que dans le cas d'une tension biaxiale la bande interdite diminue par rapport à l'état accordé(sans contrainte).

- Le haut de bande de valence dans le cas d'une compression est la bande des trous lourds, alors que dans le cas d'une tension, la plus haute bande de valence est la bande des trous légers. Ces variations surviennent du fait de la baisse de la symétrie du cristal du groupe  $T_d$  au groupe  $D_{2d}$  sous l'effet de la contrainte.

### III Notion de puits quantique :

La structure d'un puits quantique se schématise comme il est montré en figure.I.9 ci dessous:

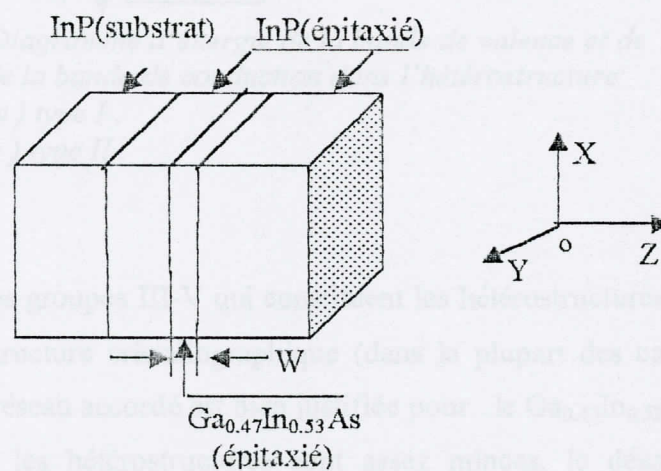


Figure I.9 : Hétérostructure InGaAs/InP.

La couche mince GaInAs se positionne en sandwich entre deux couches InP, le plan (x, y) représente le plan de croissance et (oz) la direction de croissance.

Les bandes de valence et de conduction pour une hétérostructure B/A/B sont représentées en figure I.10. Dans la figure I.10a, B est une barrière pour les électrons de conduction ainsi que pour les trous de valence ( hétérostructure type I ). Une autre situation se présente où un matériau agit comme un puits pour les électrons de conduction mais comme une barrière pour les trous ( hétérostructure type II ) figure.I.10b.

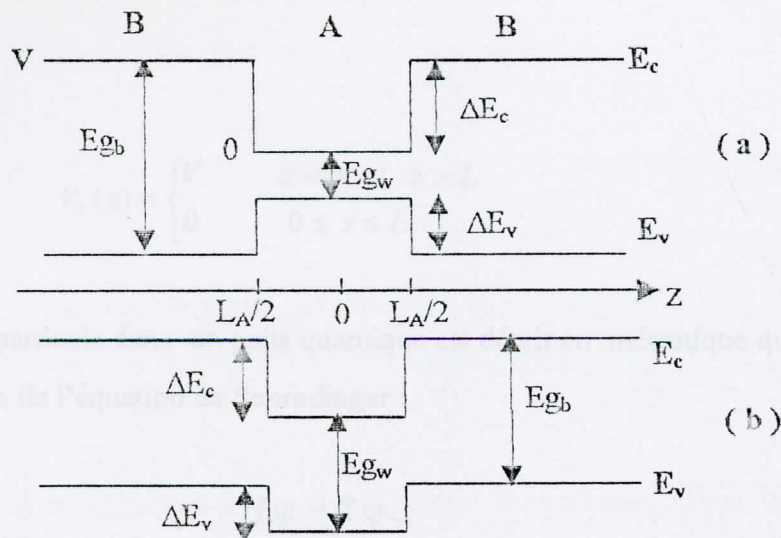


Figure I.10 : Diagramme d'énergie de la bande de valence et de la bande de conduction dans l'hétérostructure  
 (a) type I.  
 (b) type II.

Les matériaux A et B des groupes III-V qui constituent les hétérostructures sont des réseaux qui se cristallisent dans la même structure cristallographique (dans la plupart des cas la structure du zinc blende). L'approximation d'un réseau accordé est bien justifiée pour le  $\text{Ga}_{0.47}\text{In}_{0.53}\text{As-InP}$ .

Si les couches qui constituent les hétérostructures sont assez minces, le désaccord de maille est accommodé par les effets de la contrainte dans chaque type de couche pour donner un paramètre de maille commun dans le plan [55-57].

La représentation schématique d'un profil de potentiel de l'hétérostructure est montrée sur la figure I.11.

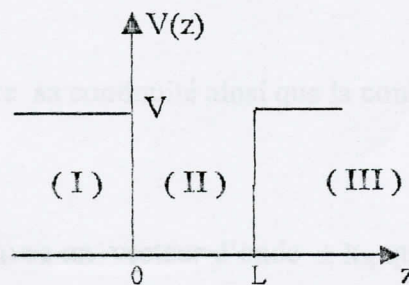


Figure I.11 : Profil de potentiel d'un puits quantique carré.

Avec :

$$V_z(z) = \begin{cases} V & z < 0 \text{ et } z > L \\ 0 & 0 \leq z \leq L \end{cases} \quad (\text{I.10})$$

Le mouvement d'une particule dans un puits quantique est décrit en mécanique quantique par la fonction d'onde  $\psi(z)$ , solution de l'équation de Schrodinger :

$$H\psi = E\psi \quad (\text{I.11})$$

Avec :

$$H = \frac{P_z^2}{2m^*} + V(z) \quad (\text{I.12})$$

où :  $m^*$  : masse effective de la particule.

$P_z$  : quantité de mouvement dans la direction [001] avec  $P_z = \frac{\hbar}{i} \nabla_z$ .

Donc, l'équation de Schrodinger s'écrit comme suit :

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2}{dz^2} + V(z) \right] \psi(z) = E\psi(z) \quad (\text{I.13})$$

La fonction d'onde  $\psi(z)$  doit satisfaire sa continuité ainsi que la continuité de la densité de courant

$$\frac{1}{m^*} \frac{d\psi}{dz}$$

Les ondes dans le puits se propagent avec un vecteur d'onde  $\pm k_A$  qui se caractérise par :

$$K_A = \sqrt{\frac{2m_A^*}{\hbar^2}(V-E)} \quad (I.14)$$

Les ondes sont évanescentes hors du puits, ainsi le module du vecteur d'onde imaginaire associé est :

$$K_B = \sqrt{\frac{2m_B^*E}{\hbar^2}} \quad (I.15)$$

avec :

$m_A$  et  $m_B$  : les masses effectives du matériaux puits et barrière respectivement.

$\hbar$  : constante de Plank.

$E$  : énergie de confinement de la particule.

## I.2 Approximation de la fonction enveloppe :

Les fonctions d'ondes à un électron se décrivent par le formalisme de la fonction enveloppe. C'est une approximation qui est formellement identique à celle utilisée pour décrire la propagation d'une onde électromagnétique dans un milieu inhomogène, comme celle présente dans les guides d'ondes ou en optique non linéaire [62].

L'approximation de la fonction enveloppe est restreinte au voisinage des points de bande symétriques  $(\Gamma, X, L)$  dans le zone de Brillouin. Ce modèle est très intéressant à cause de sa simplicité et de sa précision [63].

Le développement théorique (voir Annexe A) mène alors à la définition de la fonction enveloppe correspondante à la bande  $N$  :

$$\psi_N(\mathbf{r}) = \sum c_{N\mathbf{k}} \psi_{N\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (I.1)$$

$c_{N\mathbf{k}}$  représentent les coefficients.

## Chapitre II

### APPROXIMATION DE LA FONCTION ENVELOPPE ET THEORIE K.P

#### II.1 Introduction :

Parmi les méthodes utilisées pour la détermination de la structure de bande des hétérostructures, il y a la méthode des liaisons fortes (tight-binding) [58,59], où la fonction d'onde est construite en tenant compte de tous les atomes, l'hétérostructure n'est alors qu'une très grande cellule qui nécessite un calcul très long, la méthode du pseudopotentiel [39,40,60,61] qui est très efficace et s'étale sur toute la zone de Brillouin et la méthode de la densité fonctionnelle [41,42].

Ces méthodes analytiques sont lourdes et coûteuse en temps de calcul. Pour cela une autre méthode est développée dans le même but et tient compte de certaines hypothèses, c'est la méthode de la fonction enveloppe [43] que nous utiliserons dans ce travail.

#### II.2 Approximation de la fonction enveloppe :

Les fonctions d'ondes à un électron se décrivent par le formalisme de la fonction enveloppe. C'est une approximation qui est formellement identique à celle utilisée pour décrire la propagation d'une onde électromagnétique dans un milieu inhomogène, comme celle présentée dans les guides d'ondes ou en optique non linéaire [62].

L'approximation de la fonction enveloppe est restreinte au voisinage des points de haute symétrie ( $\Gamma$ , X, L) dans la zone de Brillouin. Ce modèle est très intéressant à cause de sa simplicité et de sa souplesse [43].

Le développement théorique (voir Annexe A) mène alors à la définition de la fonction enveloppe correspondante à la bande N.

$$f_N(r) = \sum_k a_{Nk} e^{ikr} \quad (\text{II.1})$$

$a_{Nk}$  représentent les coefficients.

Pour trouver l'état stationnaire d'une particule dans l'hétérostructure, il faut réaliser les deux conditions à l'interface :

- la continuité de la fonction d'onde.
- la solution exacte doit conserver le flux de probabilité qui traverse l'interface, c'est à dire le courant de probabilité. Ce qui donne :

$$\frac{1}{m_A} \frac{\partial f_N}{\partial z} = \frac{1}{m_B} \frac{\partial f_N}{\partial z}$$

Cette condition peut être incorporée dans le formalisme en écrivant l'équation de Schrodinger pour la fonction enveloppe sous la forme :

$$\left[ -\nabla \frac{\hbar^2}{2m_N^*} \nabla + V(r) \right] f_N(z) = (E - E_{N0}) f_N(z) \quad (\text{II.2})$$

avec  $m_N^*$  la masse effective du niveau N du matériau considéré.

$f_N(z)$  : la fonction enveloppe de la bande N.

$E_{N0}$  : Energie du niveau initial.

Ce développement concerne l'approximation à une bande simple, dont la masse effective ne dépend pas de  $k$ , c'est à dire une bande parabolique.

Nous admettons que l'approximation de la fonction enveloppe avec l'équation de Shrodinger est suffisante pour déterminer le comportement quantique d'un électron dans l'hétérostructure.

L'approximation de la fonction enveloppe peut être généralisée pour inclure les effets de la contrainte[43,63]. Les hypothèses conduisant à l'approximation de la fonction enveloppe sont données comme suit :

- A l'intérieur de chaque couche, la fonction d'onde est étendue sur les parties périodiques des fonctions de Bloch et peut être écrite sous la forme suivante :

$$\text{Dans la couche A :} \quad \psi(r) = \sum_N f_N^{(A)}(r) U_{N,k_0}^{(A)}(r) \quad (\text{II.3})$$

$$\text{Dans la couche B :} \quad \psi(r) = \sum_N f_N^{(B)}(r) U_{N,k_0}^{(B)}(r) \quad (\text{II.4})$$

avec :

$f_N$  : la fonction enveloppe correspondante à la bande N.

$U_N$  : la partie périodique de la fonction de Bloch.

$k_0$  : le vecteur d'onde au centre de la zone de Brillouin.

- Les parties périodiques des fonctions de Bloch sont supposées être les mêmes dans chacune des couches qui constitue l'hétérostructure :

$$U_{N,k_0}^{(A)}(r) = U_{N,k_0}^{(B)}(r) \quad (\text{II.5})$$

Donc la fonction d'onde de notre hétérostructure sera écrite comme suit :

$$\psi(r) = \sum_N f_N^{(A,B)}(r) U_{N,k_0}(r) \quad (\text{II.6})$$

$f(z)$  ne doit pas diverger quant  $z \rightarrow \pm \infty$ , ainsi certains paramètres doivent s'annuler.

Alors  $f(z)$  peut être écrite comme suit dans le puits quantique décrit précédemment (figure I.11):

Dans la zone ( I ) :

$$V(z) = V$$

l'équation du mouvement :

$$\frac{\partial^2 f_I}{\partial z^2} + \frac{2m_B^*}{\hbar^2} (E - V) f_I = 0$$

$$\text{posant : } k_B^2 = \frac{2m_B^*}{\hbar^2} (V - E)$$

$$f_I'' - k_B^2 f_I = 0$$

accepte une solution générale :

$$\text{lorsque } z \rightarrow -\infty \quad b = 0 \quad \text{et} \quad f_I(z) = a e^{k_B z} \quad (\text{II.7})$$



Dans la zone ( II ) :  $V(z)=0$

L'équation du mouvement :

$$\frac{\partial^2 f_{II}}{\partial z^2} + \frac{2m_B^*}{\hbar^2} (E - V) f_{II} = 0$$

posant :  $k_A^2 = \frac{2m_A^*}{\hbar^2} E$

$$f_{II}'' + k_A^2 f_{II} = 0$$

accepte une solution générale :

$$f_{II}(z) = ce^{ik_A z} + de^{-ik_A z} \quad (\text{II.8})$$

Dans la zone ( III ) :  $V(z)=V$

l'équation du mouvement :

$$\frac{\partial^2 f_{III}}{\partial z^2} + \frac{2m_B^*}{\hbar^2} (E - V) f_{III} = 0$$

posant :  $k_B^2 = \frac{2m_B^*}{\hbar^2} (V - E)$

$$f_{III}'' - k_B^2 f_{III} = 0$$

accepte une solution générale :  $f_{III}(z) = Qe^{k_B z} + Fe^{-k_B z}$

lorsque  $z \rightarrow \infty$   $Q = 0$  et  $f_{III}(z) = F e^{-k_B z}$  (II.9)

En appliquant les conditions aux limites :

$$f_I(0) = f_{II}(0)$$

$$\frac{1}{m_B^*} f_I'(0) = \frac{1}{m_A^*} f_{II}'(0)$$

(II.10)

$$f_{II}(L) = f_{III}(L)$$

$$\frac{1}{m_B^*} f_{II}'(L) = \frac{1}{m_A^*} f_{III}'(L)$$

La résolution de ce système d'équations ( II.10 ) donne les paramètres a, c, d, F.

Nous supposons que toutes les particules sont diffusées ce qui fait que  $a=1$ .

Nous trouvons :

$$d = \frac{1}{2} - \frac{m_A}{2m_B} \frac{k_B}{ik_A}$$

$$c = \frac{1}{2} + \frac{m_A}{2m_B} \frac{k_B}{ik_A}$$

$$F = e^{k_B L} \left[ \left( \frac{1}{2} + \frac{m_A}{2m_B} \frac{k_B}{ik_A} \right) e^{ik_A L} + e^{-ik_A L} \left( \frac{1}{2} - \frac{m_A}{2m_B} \frac{k_B}{ik_A} \right) \right]$$

avec L : la largeur du puits.

$m_A, m_B$  : la masse effective du matériau puits et barrière respectivement.

$k_A, k_B$  : le vecteur d'onde dans le puits et dans la barrière respectivement.

Donc les fonctions enveloppes s'écrivent dans chaque intervalle comme suit :

$$f_I(z) = e^{k_B z} \quad ; \quad z \leq 0$$

$$f_{II}(z) = \cos k_A z + \frac{m_A}{m_B} \frac{k_B}{k_A} \sin k_A z \quad ; \quad 0 < z < L \quad (\text{II.11})$$

$$f_{III}(z) = e^{-k_B z} \left[ \cos k_A z + \frac{m_A}{m_B} \frac{k_B}{k_A} \sin k_A z \right] e^{k_B L} \quad ; \quad z \geq L$$

### II.3 Théorie k.p:

La base de la théorie k.p est décrite dans deux articles de Kane[64,65]. Les descriptions des relations de dispersion par les méthodes analytiques des matériaux massifs sont valables. Cependant, elles fournissent rarement des expressions explicites des quantités d'usage commun dans la physique des semi-conducteurs : le masse effective, la fonction d'onde. En fait, pour

beaucoup d'aspects des propriétés électroniques du semi-conducteur, de telles descriptions globales des

La résolution de ce système d'équations ( II.10 ) donne les paramètres a, c, d, F.

Nous supposons que toutes les particules sont diffusées ce qui fait que  $a=1$ .

Nous trouvons :

$$d = \frac{1}{2} - \frac{m_A}{2m_B} \frac{k_B}{ik_A}$$

$$c = \frac{1}{2} + \frac{m_A}{2m_B} \frac{k_B}{ik_A}$$

$$F = e^{k_B L} \left[ \left( \frac{1}{2} + \frac{m_A}{2m_B} \frac{k_B}{ik_A} \right) e^{ik_A L} + e^{-ik_A L} \left( \frac{1}{2} - \frac{m_A}{2m_B} \frac{k_B}{ik_A} \right) \right]$$

avec L : la largeur du puits.

$m_A, m_B$  : la masse effective du matériau puits et barrière respectivement.

$k_A, k_B$  : le vecteur d'onde dans le puits et dans la barrière respectivement.

Donc les fonctions enveloppes s'écrivent dans chaque intervalle comme suit :

$$f_I(z) = e^{k_B z} \quad ; \quad z \leq 0$$

$$f_{II}(z) = \cos k_A z + \frac{m_A}{m_B} \frac{k_B}{k_A} \sin k_A z \quad ; \quad 0 < z < L \quad (\text{II.11})$$

$$f_{III}(z) = e^{-k_B z} \left[ \cos k_A z + \frac{m_A}{m_B} \frac{k_B}{k_A} \sin k_A z \right] e^{k_B L} \quad ; \quad z \geq L$$

### II.3 Théorie k.p:

La base de la théorie k.p est décrite dans deux articles de Kane[64,65]. Les descriptions des relations de dispersion par les méthodes analytiques des matériaux massifs sont valables. Cependant, elles fournissent rarement des expressions explicites des quantités d'usage commun dans la physique des semi-conducteurs : le masse effective, la fonction d'onde. En fait, pour

beaucoup d'aspects des propriétés électroniques du semi-conducteur, de telles descriptions globales des

relations de dispersion sur l'entière zone de Brillouin sont peu utiles[43].

Ainsi on a besoin d'une connaissance de la relation de dispersion sur un petit intervalle de  $k$  autour de l'extréma de la bande ( point  $\Gamma$  ). Donc, dans la suite, nous décrivons les résultats d'une description locale de la structure de bande décrite par la méthode  $k \cdot p$ .

L'équation de Shrodinger à résoudre est :

$$H\Psi_{n,k}(r) = \left( \frac{p^2}{2m_0} + V(r) \right) \Psi_{n,k}(r) = E_{n,k} \Psi_{n,k}(r) \quad (\text{II.12})$$

$m_0$  : la masse de l'électron libre.

Les fonctions d'onde  $\psi_{n,k}(r)$  sont des fonctions de Bloch :

$$\psi_{n,k}(r) = U_{n,k}(r) e^{ik \cdot r} \quad (\text{II.13})$$

$$\left( \frac{p^2}{2m_0} + V \right) e^{ik \cdot r} U_k(r) = E_k e^{ik \cdot r} U_k(r) \quad (\text{II.14})$$

ou :

$V = V(r)$  : est le potentiel cristallin. Nous supposons connues les solutions de :

$$\left( \frac{p^2}{2m_0} + V(r) + \frac{\hbar}{4m_0^2 c^2} (\sigma^* \nabla V) p + \delta H_r \right) U_k = E_k U_k \quad (\text{II.15})$$

$\delta H_r$  : est une correction relativiste, ce terme est important seulement pour les atomes lourds.

Autrement dit, on suppose le problème résolu à  $k=0$ .

Utilisant le fait que :

$$p^2 [e^{ik \cdot r} U_k(r)] = e^{ik \cdot r} (p^2 + 2\hbar k \cdot p + \hbar^2 k^2) U_k(r) \quad (\text{II.16})$$

On réécrit l'équation de Schrodinger :

$$e^{ik.r} \left( \frac{p^2}{2m_0} + \frac{\hbar}{m_0} k.p + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + V(r) + \frac{\hbar}{4m_0^2 c^2} (\alpha \nabla V).p + \delta H_r \right) U_k(r) = e^{ik.r} E_k U_k(r) \quad (\text{II.17})$$

Posant :

$$E_k = E_{nk} - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \quad (\text{II.18})$$

$E_{nk}$  : énergie de l'état n pour un vecteur d'onde k.

L'approximation k.p consiste à supposer k suffisamment petit pour que le terme  $\frac{\hbar}{m_0} k.p$  puisse être considéré comme une perturbation.

Donc l'équation(II.17) prend la forme suivante dont les parties périodiques des fonctions de Bloch  $U_{nk}$  sont les solutions de:

$$\left[ \frac{p^2}{2m_0} + V(r) + \frac{\hbar}{4m_0^2 c^2} (\sigma^* \nabla V).p + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + \frac{\hbar k}{m_0} \left( p + \frac{\hbar}{4m_0^2 c^2} \sigma^* \nabla V \right) \right] U_{nk} = E_{nk} U_{nk} \quad (\text{II.19})$$

La théorie des groupes nous donne les propriétés de symétrie des fonctions  $U_{nk}$ .

$U_{nk}$  est la base de représentation. Le terme  $\frac{\hbar}{4m_0^2 c^2} (\sigma^* \nabla V).p$  de l'équation ci dessus décrit l'interaction spin orbite indépendante de k, alors que le terme  $\frac{\hbar k p}{m_0}$  décrit l'interaction K.P, et finalement le terme

$\frac{\hbar^2 k}{4m_0^2 c^2} \sigma \cdot \nabla V$  correspond à l'interaction spin orbite dépendante de k et donne une énergie linéaire en (k)

dans la bande de valence.

L'énergie linéaire en k résulte aussi des termes de perturbations du second ordre contenant le terme k.p et l'interaction spin orbite indépendante de k. En négligeant le terme relativiste pour simplification, l'équation (II.17) peut être réécrite comme suit :

$$[H(k=0) + W(k)]U_{nk} = E_{nk} U_{nk} \quad (\text{II.20})$$

$W(k)$  désigne la perturbation.

$H(k=0)$  est l'hamiltonien du cristal dont les fonctions propres sont  $\Psi_{n0}$  (ou en équivalence  $U_{n0}$ ):

$$H(k=0)U_{n0} = E_{n0} U_{n0} \quad (\text{II.21})$$

D'où nous pouvons tirer la forme de l'énergie au deuxième ordre de perturbation

Pour  $k=0$ , on constate que l'équation (II.19) est identique à celle de Schrodinger qui s'applique sur la partie périodique de Bloch.

$$[H(k=0) + W(k)]U_{n0}(r) = E_{n0} U_{n0}(r) \quad (\text{II.22})$$

L'opérateur de perturbation  $W(k)$  s'annule à  $k=0$ .

On posant :

$$U_{nk}(r) = \sum_{\bar{m}} C_{\bar{m}}(k) U_{\bar{m}0}(r) \quad (\text{II.23})$$

En insérant la relation (II.23) dans l'équation (II.22), en multipliant par  $U_{\bar{m}0}^*$  et en intégrant, nous obtenons :

$$\sum_{\bar{m}} \left[ \left( E_{n0} - E_{\bar{m}k} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \right) \delta_{\bar{m}n} + \frac{\hbar k}{m_0} \langle n0 | p + \frac{\hbar}{4m_0 c^2} (\sigma \cdot \nabla V) | \bar{m}0 \rangle \right] C_{\bar{m}}(k) = 0 \quad (\text{II.24})$$

où :

$$\langle n0 | A | \bar{m}0 \rangle = A_{\bar{m}n} = \int_{\text{maillelementaire}} u_{n0}^* A u_{\bar{m}0} d^3 r \quad (\text{II.25})$$

L'équation (II.24) représente un problème de diagonalisation de la matrice correspondante, si nous connaissons tous les éléments de la matrice  $\langle n0|p|m0\rangle$ , nous pourrions procéder à la normalisation. Cela n'est pas le cas. Notant, en équation (II.24) l'absence des termes diagonaux(en n) proportionnel à k. Ces termes s'annulent par identification.

L'équation (II.24) équivalente à l'équation (II.22), est bien convenable pour une approche perturbative, c'est à dire que les termes dus à l'opérateur k.p deviennent des perturbations à k=0. En supposant que le n<sup>ème</sup> extrema de bande (énergie  $E_{n0}$ ) est dégénéré, nous pouvons considérer que pour de petit k, seules les bandes avoisinant le gap présentent un réel intérêt.

Pour de petit k :

$$C_m(k) = \alpha.k \quad (\text{II.25})$$

En fait :

$$C_m(k) = \frac{\hbar k}{m_0} \pi_{nm} \frac{1}{E_{n0} - E_{m0}} \quad (\text{II.26})$$

avec :

$$\pi = p + \frac{\hbar}{4m_0 c^2} (\sigma_x \nabla V)$$

Pour une correction du deuxième ordre  $E_{nk}$  s'écrit comme suit :

$$E_{nk} = E_{n0} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + \frac{\hbar^2}{m_0^2} \sum_{m \neq n} \frac{|\pi_{nm} k|^2}{E_{n0} - E_{m0}} \quad (\text{II.27})$$

Ainsi les relations de dispersion des bandes non dégénérées sont paraboliques en k au voisinage du point  $\Gamma$  et sont comme suit :

$$E_{nk} = E_{n0} + \frac{\hbar^2}{2} \sum_{\alpha, \beta} k_\alpha \frac{1}{\mu_n^{\alpha\beta}} k_\beta \quad (\text{II.28})$$

$$\text{Ou : } \frac{1}{\mu_n^{\alpha\beta}} = \frac{1}{m_0} \delta_{\alpha\beta} + \frac{2}{m_0^2} \sum_{m \neq n} \frac{\pi_{mn}^\alpha \pi_{nm}^\beta}{E_{n0} - E_{m0}} \quad (\text{II.29})$$

$\alpha, \beta, \gamma$  représente les coordonnées  $x, y, z$  respectivement.

#### II.4 Le modèle de Kane :

La détermination des valeurs propres dans les hétérostructures est basée sur l'analyse de Kane des relations de dispersion de l'ensemble de matériaux. Dans la description de la fonction enveloppe [66-70], le problème sera de trouver les conditions aux limites que les parties lentement variables des fonctions d'onde de l'hétérostructure doivent accomplir aux hétéro interfaces.

Pour améliorer le calcul des énergies, il est plus commode d'étendre le traitement de la perturbation  $W(k)$  au deuxième ordre. Kane diagonalise exactement la perturbation  $W(k)$  dans un ensemble limité des bords de bande de conduction et de valence ( $\Gamma_6, \Gamma_8$ ) et les autres bords  $\Gamma$  dans un traitement perturbatif du deuxième ordre [64,65].

##### II.4 a Relation de dispersion du modèle de Kane :

Puisque le couplage spin orbite n'est pas nul dans les composés III-V, il est désirable d'avoir une base en  $k=0$  dans laquelle ce terme est diagonal. Donc, au lieu d'utiliser les fonctions de Bloch des 8 bords de bande de  $|S\uparrow\rangle, |X\uparrow\rangle, |Y\uparrow\rangle, |Z\uparrow\rangle, |S\downarrow\rangle, |X\downarrow\rangle, |Y\downarrow\rangle, |Z\downarrow\rangle$ , nous formons une combinaison linéaire de ces fonctions. Elles sont telles que le moment angulaire total  $J=L+\sigma$  et sa projection  $J_z$  le long de l'axe  $z$  sont diagonaux dans la nouvelle base.

Pour la bande S, on a  $J=1/2$  (symétrie  $\Gamma_6$ ), et pour les bandes P,  $J=3/2$  ou  $J=1/2$ . Dans les composés III-V, le quadruplé  $J=3/2$  est alors toujours plus haut en énergie que le doublet  $J=1/2$ . Le quadruplé correspond à la symétrie  $\Gamma_8$  et le doublet à la symétrie  $\Gamma_7$ . Leur séparation d'énergie est notée  $\Delta$  (voir la figure.II.1).



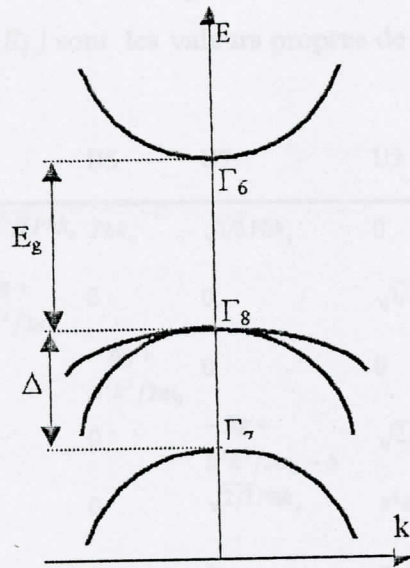


Figure.II.1 : La structure de bande au voisinage du centre de la <sup>1ère</sup> zone de Brillouin des bandes ( $\Gamma_6, \Gamma_7, \Gamma_8$ ) d'un composé III-V à gap direct.

Les fonctions d'onde de base des bandes  $\Gamma_6, \Gamma_7, \Gamma_8$ , que nous utiliserons sont indiqués dans le tableau II.1 :

	$ J, m_J\rangle$	$ \Psi_{J, m_J}\rangle$	Symétrie	$E(k=0)$
U1	$ \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle$	$i S \uparrow\rangle$	$\Gamma_6$	0
U3	$ \frac{3}{2}, \frac{1}{2}\rangle$	$-\sqrt{\frac{2}{3}} Z \uparrow\rangle + 1/\sqrt{6} (X + iY) \downarrow\rangle$	$\Gamma_8$	$-E_g$
U5	$ \frac{3}{2}, \frac{3}{2}\rangle$	$1/\sqrt{2} (X + iY) \uparrow\rangle$	$\Gamma_8$	$-E_g$
U7	$ \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle$	$1/\sqrt{3} (X + iY) \downarrow\rangle + 1/\sqrt{3} Z \uparrow\rangle$	$\Gamma_7$	$-E_g - \Delta$
U2	$ \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle$	$i S \downarrow\rangle$	$\Gamma_6$	0
U4	$ \frac{3}{2}, -\frac{1}{2}\rangle$	$-1/\sqrt{6} (X - iY) \uparrow\rangle - \sqrt{\frac{2}{3}} Z \downarrow\rangle$	$\Gamma_8^-$	$-E_g$
U6	$ \frac{3}{2}, -\frac{3}{2}\rangle$	$1/\sqrt{2} (X - iY) \downarrow\rangle$	$\Gamma_8$	$-E_g$
U8	$ \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle$	$-1/\sqrt{3} (X - iY) \downarrow\rangle + 1/\sqrt{3} Z \downarrow\rangle$	$\Gamma_7$	$-E_g - \Delta$

Tableau II.1 : Les parties périodiques  $\Gamma_6, \Gamma_7, \Gamma_8$  des fonctions de Bloch. Les notations  $J, m_J$  indiquent les valeurs propres de  $H(k=0)$  des opérateurs  $J, J_z$ , respectivement.

Notons que chaque bande est deux fois dégénérées et correspond aux valeurs de  $m_J$  qui sont les valeurs propres de  $J_z$ . Les énergies ( $E_k$ ) sont les valeurs propres de la matrice 8x8 suivante :

	U1	U3	U5	U7	U2	U4	U6	U8
U1	$\hbar^2 k^2 / 2m_0$	$-\sqrt{2/3} P \hbar k_x$	$P \hbar k_x$	$\sqrt{1/3} P \hbar k_x$	0	$-\sqrt{1/3} P \hbar k_x$	0	$-\sqrt{2/3} P \hbar k_x$
U3	$-\sqrt{2/3} P \hbar k_x$	$-\frac{E_g}{2} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0}$	0	0	$\sqrt{1/3} P \hbar k_x$	0	0	0
U5	$P \hbar k_x$	0	$-\frac{E_g}{2} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0}$	0	0	0	0	0
U7	$\sqrt{1/3} P \hbar k_x$	0	0	$-\frac{E_g}{2} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} - \Delta$	$\sqrt{2/3} P \hbar k_x$	0	0	0
U2	0	0	0	$\sqrt{2/3} P \hbar k_x$	$\hbar^2 k^2 / 2m_0$	$-\sqrt{2/3} P \hbar k_x$	$P \hbar k_x$	$\sqrt{1/3} P \hbar k_x$
U4	$-\sqrt{1/3} P \hbar k_x$	0	0	0	$-\sqrt{2/3} P \hbar k_x$	$-\frac{E_g}{2} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0}$	0	0
U6	0	0	0	0	$P \hbar k_x$	0	$-\frac{E_g}{2} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0}$	0
U8	$-\sqrt{2/3} P \hbar k_x$	0	0	0	$\sqrt{1/3} P \hbar k_x$	0	0	$-\frac{E_g}{2} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} - \Delta$

Tableau II.2 : Matrice de Kane 8x8 dans la base des fonctions de Bloch dans la 1<sup>ère</sup> zone de Brillouin. L'origine des énergies est prise au bas de bande de conduction.

avec:

$$k_{\pm} = \frac{1}{\sqrt{2}}(k_x \pm ik_y)$$

Les valeurs propres sont dépendantes de trois paramètres :

1. la bande interdite du fondamental  $E_g$  : 
$$E_g = E_{\Gamma_6} - E_{\Gamma_8} \tag{II.30}$$

2. le couplage spin-orbite  $\Delta$  de la plus haute bande de valence  $\Gamma$  :

$$\Delta = E_{\Gamma_2} - E_{\Gamma_7} \tag{II.31}$$

3. l'élément de la matrice interbande de Kane :

$$P = \frac{-i}{m_0} \langle S | p_x | X \rangle = \frac{-i}{m_0} \langle S | p_y | Y \rangle = \frac{-i}{m_0} \langle S | p_z | Z \rangle \tag{II.32}$$

Tous les autres éléments de la matrice P s'annulent par symétrie.

Posant :

$$\lambda(k) = E(k) - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \quad (\text{II.33})$$

De la matrice du tableau II.2 nous trouvons que :

$$\lambda(k) = -E_g \quad (\text{II.34})$$

et

$$\lambda(k) \left[ \lambda(k) + E_g \right] \left[ \lambda(k) + E_g + \Delta \right] = \hbar^2 k^2 P^2 \left[ \lambda(k) + E_g + \frac{2\Delta}{3} \right] \quad (\text{II.35})$$

sont des solutions du système du tableau II.2 dans la direction de croissance.

Chaque solution est deux fois dégénérée. Nous remarquons que les relations de dispersion sont isotropiques en  $k$ . l'énergie  $E(k)$  dépend seulement du module de  $k$ .

L'analyse est restreinte aux bandes  $\Gamma_6, \Gamma_7, \Gamma_8$  et en présence d'interaction  $k.p$  entre ces bandes, avec le moment cinétique total  $J$  quantifié le long de la direction de croissance  $k_z$ , ce qui fait que  $k_{\pm} \neq 0$ , et ce qui rend la matrice du tableau II.2 bloc diagonal. Ainsi les solutions des équations II.34 et II.35 correspondent à  $m_J = \pm 3/2$  et  $m_J = \pm 1/2$  respectivement.

Pour un matériau cristallin (massif), la quantification de  $J$  le long de l'axe du vecteur d'onde  $k$  représente une solution simple due à l'isotropie des relations de dispersion. Alors que dans le cas des hétérostructures, il est plus convenable de quantifier  $J$  le long de la direction de croissance, ainsi les relations de dispersion deviennent anisotropique et peuvent être obtenues seulement pour  $K // J // OZ$ .

#### II.4.b Les masses effectives des extrema de bandes :

Les états  $m_J = \pm 1/2$ , sont associés aux particules légères ( $\Gamma_6$  les électrons,  $\Gamma_8$  les trous légers,  $\Gamma_7$  les trous spin orbite), leur masse effective est même plus légère que  $m_0$  si le couplage  $K.P$  est pris seulement dans l'espace  $\Gamma_6, \Gamma_7, \Gamma_8$ . Au voisinage de l'extrema de bande ( $E=0, E=-E_g, E = -E_g - \Delta$ ) nous pouvons étendre les solutions de l'équation (II.35) au deuxième ordre en  $k$ , ainsi nous obtenons des expressions explicites des masses effectives des particules légères pour les extrema de bandes comme suit :

$$\frac{1}{m_{\Gamma_6}} = \frac{1}{m_0} + \frac{4P^2}{3E_g} + \frac{2P^2}{3(E_g + \Delta)} \quad (\text{II.36})$$

$$\frac{1}{m_{\Gamma_{8l}}} = \frac{1}{m_0} - \frac{4P^2}{3E_g} \quad (\text{II.37})$$

$$\frac{1}{m_{\Gamma_7}} = \frac{1}{m_0} - \frac{2P^2}{3(E_g + \Delta)} \quad (\text{II.38})$$

P : l'élément de la matrice de Kane.

Nous pouvons connaître la valeur de P pour les matériaux III-V par méthode empirique, c'est à dire en mesurant la masse effective expérimentalement par résonance cyclotron, et en l'insérant dans l'équation (II.36).

Les équations (II.36 , II.38) représentent les masses effectives de l'extrema de bandes de valence, de conduction et de spin-orbite avec  $m_{\Gamma_6} > 0$  et  $m_{\Gamma_{8l}}, m_{\Gamma_7} < 0$ , l'indice ( l ) indique les trous légers.

La masse  $m_{\Gamma_{8l}}$  ne dépend pas de  $\Delta$ , puisqu'il n'existe aucune interaction K.P entre les extremas  $\Gamma_8$  et

$\Gamma_7$ . La masse  $m_{\Gamma_7}$  dépend seulement de  $E_g + \Delta$  qui est l'écart entre la bande  $\Gamma_7$  de  $\Gamma_6$  couplées par K.P.

## Chapitre III

### Calcul des énergies de confinement pour la structure GaInAs/InP

#### III.1. Calcul de décalage de bandes (band offset) pour l'hétérostructure Ga<sub>x</sub>In<sub>1-x</sub>As/InP :

##### III.1.1 calcul général :

Le calcul des décalages de bandes dans une hétérostructure est donné par la théorie du modèle solide proposée par Van de Walle et Martin[71], qui tient compte également de l'effet de la contrainte. Les trois plus hautes bandes de valence au point  $\Gamma$  ( $k=0$ ) sont : la bande des trous légers, trous lourds et la bande spin orbite. D'où  $E_{v,av}$  (énergie de bande de valence moyenne) est choisie comme une référence de niveau d'énergie.

Les changements des énergies de  $E_{v,av}$  et  $E_c$  [72] induits par la composante de la déformation hydrostatique peuvent être exprimés comme suit:

$$dE_{v,av} = a_v \left( \frac{\Delta\Omega}{\Omega} \right) \quad (\text{III.1})$$

$$dE_c = a_c \left( \frac{\Delta\Omega}{\Omega} \right) \quad (\text{III.2})$$

Où  $a_v$  et  $a_c$  sont les potentiels de déformation hydrostatiques pour la bande de valence et la bande de conduction respectivement,  $\Delta\Omega/\Omega$  est le changement relatif du volume qui, pour de petites contraintes sur le substrat (001), peut être approximé comme suit :

$$\frac{\Delta\Omega}{\Omega} = (\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}) = (2\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{zz}) \quad (\text{III.3})$$

Les composantes de la contrainte ( $\varepsilon_{ij}$ ) sont définis comme suit :

$$\text{Parallèle à l'interface: } \varepsilon_{xx} = \varepsilon_{yy} = \left( \frac{a_s}{a_e} - 1 \right) \quad (\text{III.4})$$

$$\text{Perpendiculaire à l'interface: } \varepsilon_{zz} = \left( -\frac{2C_{12}}{C_{11}} \right) \varepsilon_{xx} \quad (\text{III.5})$$

( $a_s$ ) est la constante de maille de l'*InP*, et ( $a_e$ ) est la constante de maille de la couche epitaxiée du *Ga<sub>x</sub>In<sub>1-x</sub>As*, et  $C_{ij}$  les constantes élastique du *Ga<sub>x</sub>In<sub>1-x</sub>As*. La loi de Vegard (voir annexe B) est appliquée pour obtenir les valeurs de paramètre de maille ( $a$ ) et de  $C_{ij}$  pour le ternaire *Ga<sub>x</sub>In<sub>1-x</sub>As* en fonction de la concentration du Gallium ( $x$ ).

La levée de la dégénérescence de la bande de valence au point  $\Gamma$  est causée par l'effet de la composante de la contrainte de cisaillement. Le décalage d'énergie résultant de la bande de valence  $|J, m_J\rangle = |3/2, 3/2\rangle$  (ou  $E_{v,2}$ ), la bande  $|3/2, 1/2\rangle$  ( $E_{v,1}$ ) et la bande spin orbite  $|1/2, 1/2\rangle$  ( $E_{v,3}$ ) est calculé en respectant la moyenne  $E_{v,av}$  [73,74], et exprimé comme suit :

$$dE_{v,2} = \frac{\Delta_0}{3} - \frac{\delta E_{001}}{2} \quad (\text{III.6})$$

$$dE_{v,1} = -\frac{\Delta_0}{6} + \frac{\delta E_{001}}{4} + \frac{1}{2} \left[ \Delta_0^2 + \Delta_0 \delta E_{001} + \frac{9}{4} (\delta E_{001})^2 \right]^{1/2} \quad (\text{III.7})$$

$$dE_{v,3} = -\frac{\Delta_0}{6} + \frac{\delta E_{001}}{4} - \frac{1}{2} \left[ \Delta_0^2 + \Delta_0 \delta E_{001} + \frac{9}{4} (\delta E_{001})^2 \right]^{1/2} \quad (\text{III.8})$$

avec :

$$\delta E_{001} = 2b(\varepsilon_{zz} - \varepsilon_{xx}) \quad (\text{III.9})$$

$\Delta_0$  : le spin-orbite du  $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}$  non contraint.

$b$  : le potentiel de déformation de cisaillement.

Les valeurs de  $b$ ,  $\Delta_0$ ,  $a_v$ ,  $a_c$ ,  $C_{ij}$  et  $E_{v,av}$  pour l'alliage  $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}$  sont obtenus par interpolation linéaire des données des binaires  $\text{InAs}$  et  $\text{GaAs}$  (voir le tableau I de l'annexe B).

$E_{v,2}$  et  $E_{v,1}$  sont donc dégénérées pour le réseau accordé, la plus haute bande de valence se situe à  $\Delta_0/3$  au-dessus de  $E_{v,av}$ . Pour le cas d'une compression biaxiale ( $x < 0.47$ ),

donc  $\delta E_{001} < 0$ , les sous bandes  $E_{v,2}$  seront toujours les plus hautes bande de valence ( voir figure III.1).

Les bandes de valence et de conduction du réseau  $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}/\text{InP}$  contraint peuvent donc être exprimées comme suit :

Pour l'InP (cubique) :

$$\begin{aligned} E_v(\text{InP}) &= E_{v,av} + \Delta_0/3 = -7.00333\text{eV}. \\ E_c(\text{InP}) &= E_v - E_g = -5.5833\text{eV}. \end{aligned} \quad (\text{III.10})$$

Pour le  $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}$  (tétraogonal) :

$$E_{v,i} = E_{v,av} + a_v \left( \frac{\Delta\Omega}{\Omega} \right) + dE_{v,i} \quad \text{pour } i=1-3 \quad (\text{III.11})$$

$$E_c = E_{v,av} + \frac{\Delta_0}{3} + E_{g,0} + a_c \left( \frac{\Delta\Omega}{\Omega} \right) \quad (\text{III.12})$$

Les décalages de bande ( band offset ) de la bande de valence et de conduction sont définis comme suit :

$$\Delta E_{v,i} = E_{v,i} - E_{v,InP} \quad \text{pour } i=1-3 \quad (\text{III.13})$$

$$\Delta E_c = E_{c,InP} - E_c \quad (\text{III.14})$$

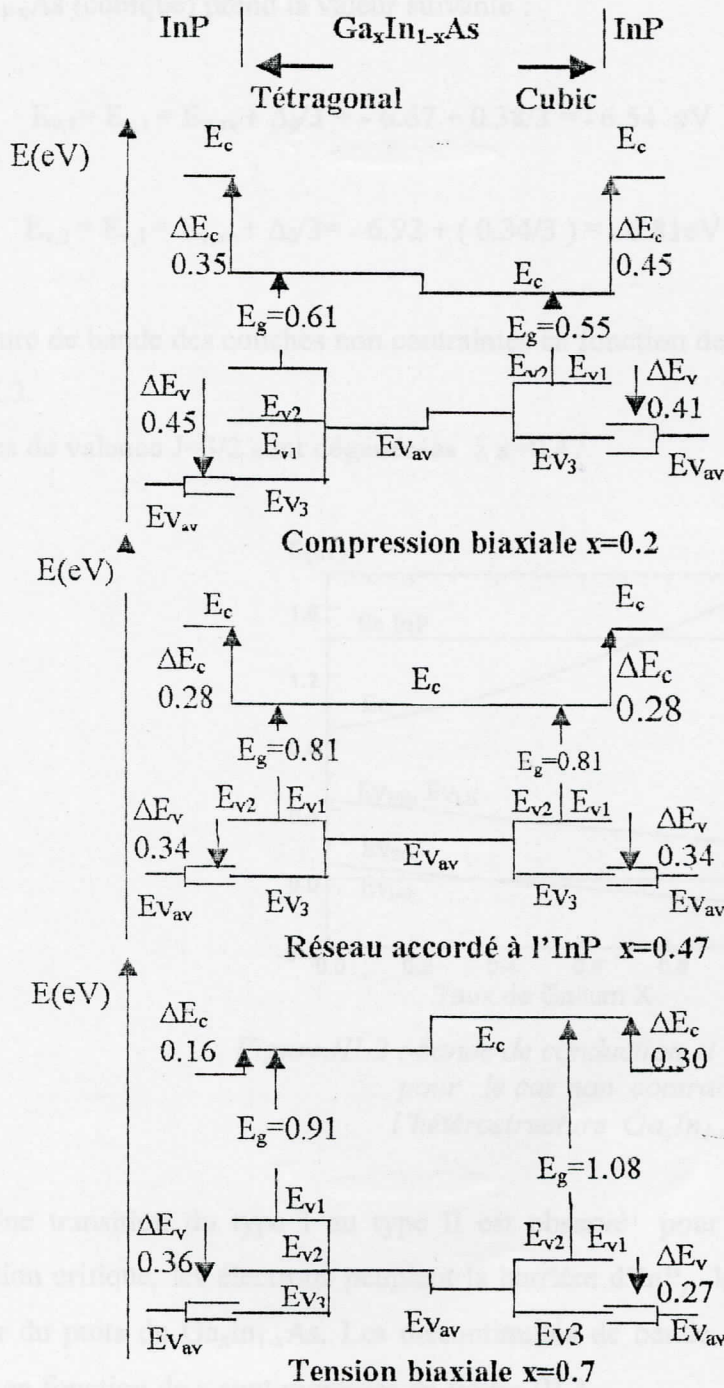


Figure.III.1 : Diagramme schématique décrivant le décalage de bande dans le cas contraint et non contraint de l'hétérostructure  $In_xGa_{1-x}As/InP$  à  $k=0$ .



### III.1.2 cas non contraint :

Pour le cas non contraint,  $\Delta\Omega/\Omega=0$ ,  $\delta E_{001}=0$ . Les équations (III.6) et (III.7) deviennent :  $dE_{v,1} = dE_{v,2} = \Delta_0/3$ . Remplaçant dans l'équation (III.11), la bande de valence du  $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}$  (cubique) prend la valeur suivante :

$$E_{v,2} = E_{v,1} = E_{v,av} + \Delta_0/3 = -6.67 + 0.38/3 = -6.54 \text{ eV} \quad \text{pour l'InAs,}$$

et

$$E_{v,2} = E_{v,1} = E_{v,av} + \Delta_0/3 = -6.92 + (0.34/3) = -6.81 \text{ eV} \quad \text{pour le GaAs.}$$

La structure de bande des couches non contraintes en fonction de  $x$  est tracée dans la figure III.2.

les bandes de valence  $J=3/2$  sont dégénérées à  $x=0.47$ .

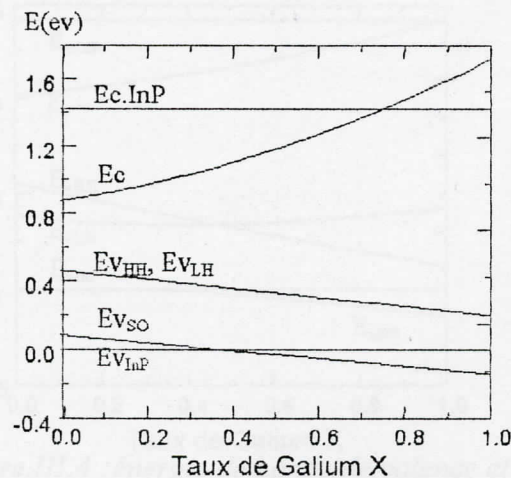


Figure.III.2 : bande de conduction et de valence pour le cas non contraint de l'hétérostructure  $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}/\text{InP}$ .

Une transition du type I au type II est observé pour  $x > 0.47$ . A travers cette composition critique, les électrons peuplent la barrière d'InP, les trous restent confinés à l'intérieur du puits du  $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}$ . Les discontinuités de bande de valence non contraintes prédites en fonction de  $x$  sont montrées en figure III.3.

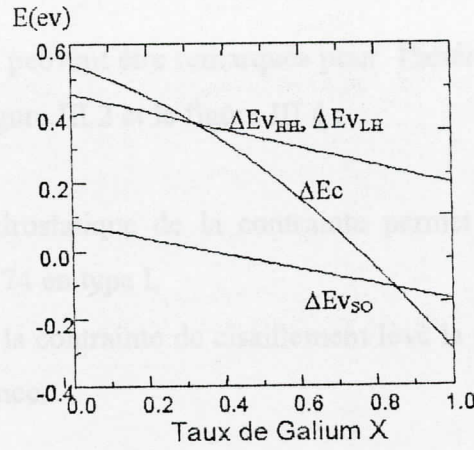


Figure.III.3 : bande offset non contraint.

A  $x = 0.47$ , les valeurs calculées de  $\Delta E_c$  et  $\Delta E_v$  sont 0.28 et 0.34ev, respectivement. Les résultats sont en bons accords avec les données de [55-57,75-76]. Les bandes d'énergies de conduction et de valence des couches contraintes sont tracées en figure.III.4 en fonction de  $x$ .

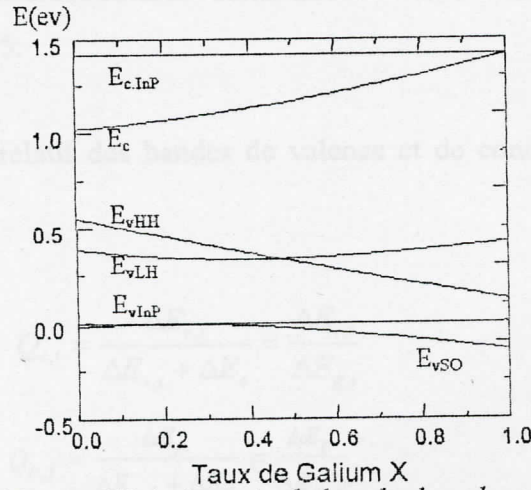


Figure.III.4 : énergie de bande de valence et de conduction dans le cas contraint

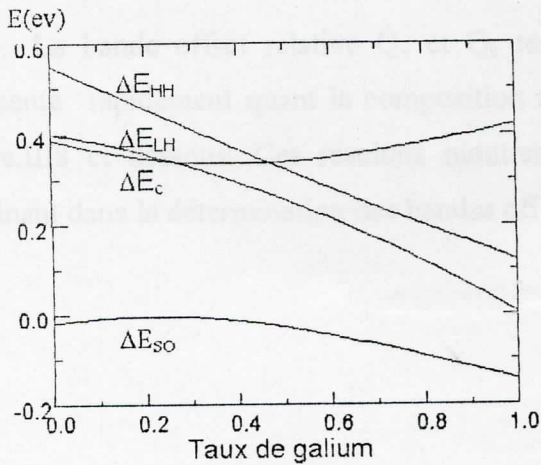


Figure.III.5 : bande offset dans le cas contraint.

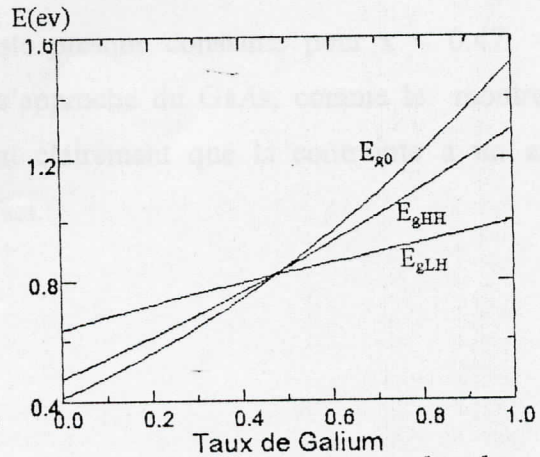


Figure.III.6 : la bande interdite dans le cas contraint.

Deux points différents peuvent être remarqués pour l'hétérojonction non contrainte par la comparaison entre la figure.III.2 et la figure III 4 :

...

- La composante hydrostatique de la contrainte permet de convertir l'hétérostructure type II pour  $x \geq 0.74$  en type I.
- La composante de la contrainte de cisaillement lève la dégénérescence au minimum  $\Gamma$  de la bande de valence.

### III.1.3 Cas contraint :

Pour  $x > 0.47$ ,  $E_{v,1}$  est la plus haute bande d'énergie de valence, et pour  $x < 0.47$   $E_{v,2}$  devient la plus haute bande de valence. Les bandes-offset contraintes et les bandes interdites en fonction de ( $x$ ) sont montrées dans les figures III.5 et III.6, respectivement. Les band-offset des hétérostructures contraintes et non contraintes sont montrés en figure.III.3 et figure III.5.

Le décalage de bande relatif des bandes de valence et de conduction, peut être exprimé comme suit:

$$Q_{v,i} = \frac{\Delta E_{v,i}}{\Delta E_{v,i} + \Delta E_c} = \frac{\Delta E_{v,i}}{\Delta E_{g,i}} \quad (\text{III.15})$$

$$Q_{c,i} = \frac{\Delta E_c}{\Delta E_{v,i} + \Delta E_c} = \frac{\Delta E_c}{\Delta E_{g,i}} \quad (\text{III.16})$$

La bande offset relative  $Q_v$  et  $Q_c$  reste presque constante pour  $x < 0.47$ ,  $Q_v$  augmente rapidement quand la composition s'approche du GaAs, comme le montre la figure.III8 ci dessous. Ces résultats montrent clairement que la contrainte a un effet dominant dans la détermination des bandes offset.

En utilisant les données pour  $\Delta E_v$  et de  $E_g$  contraint et non contraint, les band offset relatifs  $Q_v$  et  $Q_c$  calculés sont presque constants sur tout l'intervalle de l'alliage.

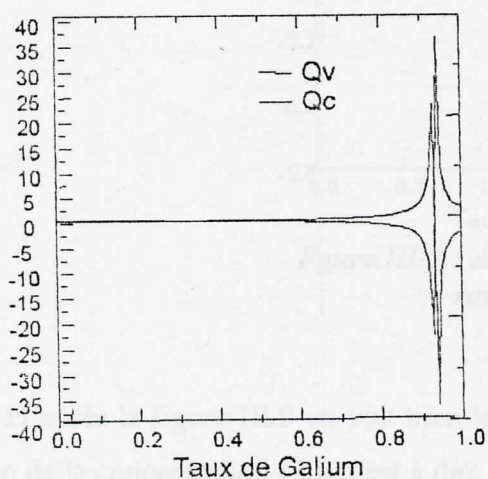


Figure.III.7: band offset relative BV et BC - cas non contraint.

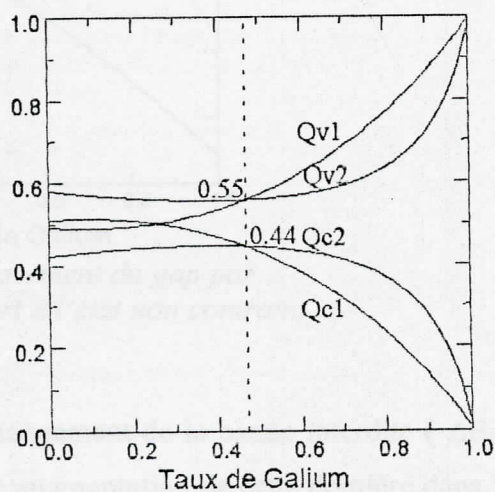


Figure.III.8 :La bande relative BV et BC - cas contraint.

Sachant que :

$$E_{g0} = 0.4105 + 0.6337x + 0.475x^2 \quad \text{à } 4^\circ\text{K} \quad (\text{III.17})$$

$E_{g,0}$  : l'énergie de la bande interdite du  $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}$  non contraint déterminé par Goetz et al[77]:

$$\text{et} \quad E_{g,i} = E_c - E_{v,i} \quad \text{pour } i=1-3 \quad (\text{III.18})$$

les énergies de la bande interdite ( $E_g$ ) de la relation (III.18) sont montrées en figure III.6.

La variation de la bande interdite ( $\Delta E_g$ ) en fonction de la contrainte biaxiale est exprimée comme suit:

$$\Delta E_{Gi} = E_{g,i} - E_{g,0} \quad \text{pour } i=1,3 \quad (\text{III.19})$$

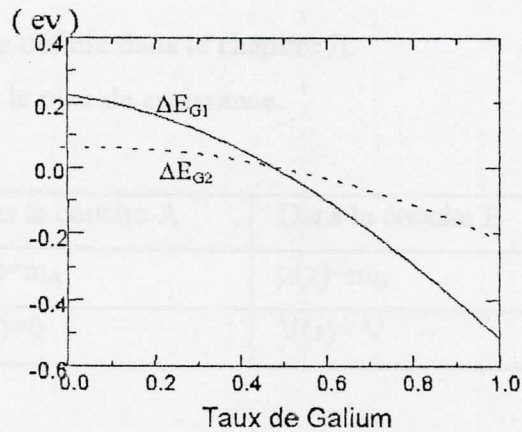


Figure.III.9 : déplacement du gap par rapport à l'état non contraint

D'après la figure III.9 on voit bien le changement de la bande interdite ( $\Delta E_G$ ) en fonction de la concentration ( $x$ ), c'est à dire une augmentation de cette dernière dans le cas d'une compression par rapport à l'état accordée et une diminution de  $\Delta E_G$  dans le cas d'une tension par rapport à l'état accordée.

## III.2 Calcul des énergies de confinement :

### III.2.1 Approximation à une bande:

#### III.2.1.1 Le modèle de Ben Daniel-Duke :

Ce modèle de calcul des niveaux des énergies de l'hétérostructure est le plus simple. Il suppose que la fonction enveloppe de l'hétérostructure est construite à partir des états quantiques qui appartiennent à une seule bande parabolique.

Les masses effectives dans les couches A (puits) et B (barrière) seront notées par  $m_A$  et  $m_B$ . Chacun des niveaux est deux fois dégénéré. Nous pouvons écrire [43]:

$$\left( V(z) - \frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial z} \frac{1}{\mu(z)} \frac{\partial}{\partial z} + \frac{\hbar^2 k_{II}^2}{2\mu(z)} \right) f(z) = Ef(z) \quad (\text{III.20})$$

$f(z)$  : la fonction enveloppe définie dans le chapitre II.

$K_{II}$  : le vecteur d'onde dans le plan de croissance.

$\mu(z)$  : masse effective.

Dans la couche A	Dans la couche B
$\mu(z)=m_A$	$\mu(z)=m_B$
$V(z)=0$	$V(z)=V$

### III.2.1.2 Puits quantique des matériaux III-V :

La fonction d'onde dans la structure A/B/A s'écrit comme suit :

$$\psi(r) = \sum_l f_l^{(A,B)}(r) U_{l,k_0}(r) \quad (\text{III.21})$$

$U_{l,k_0}$  : partie périodique de la fonction de Bloch du matériau A ou B dans la première zone de Brillouin.

Les solutions de l'équation de Schrodinger dans la couche A sont les suivantes:

En appliquant les conditions aux limites pour  $f(z)$  et  $\mu^{-1}(z) \frac{df}{dz}$  aux interfaces  $z=0$  et  $z=L$ , on obtient les équations implicites dont les racines sont bien les solutions du puits quantique de Ben Daniel-Duke.

Les fonctions enveloppes sont données (voir paragraphe II.2 du chapitre II) dans les trois zones de l'hétérostructure (I, II et III):

$$\begin{aligned} f_I(z) &= e^{k_b z} & ; & \quad z \leq 0 \\ f_{II}(z) &= \cos k_A z + \frac{m_A k_b}{m_b k_A} \sin k_A z & ; & \quad 0 < z < L \\ f_{III}(z) &= e^{-k_b z} \left[ \cos k_A z + \frac{m_A k_b}{m_b k_A} \sin k_A z \right] e^{k_b L} & ; & \quad z \geq L \end{aligned}$$

les solutions dans ce cas sont celles de l'équation (III.22):

$$\cos \varphi_A - \frac{m_B k_A}{m_A k_B} \sin \varphi_A = 0 \quad (III.22)$$

avec :

$$\varphi_A = \frac{1}{2} k_A L, \quad k_A = \sqrt{\frac{2m_A^*}{\hbar^2} (V - E)} \quad \text{et} \quad k_B = \sqrt{\frac{2m_B^* E}{\hbar^2}} \quad (III.23)$$

Nous avons calculé les états de confinement des porteurs pour ce modèle par la méthode à balayage (voir annexe C), les résultats sont représentés en figure.III.10.

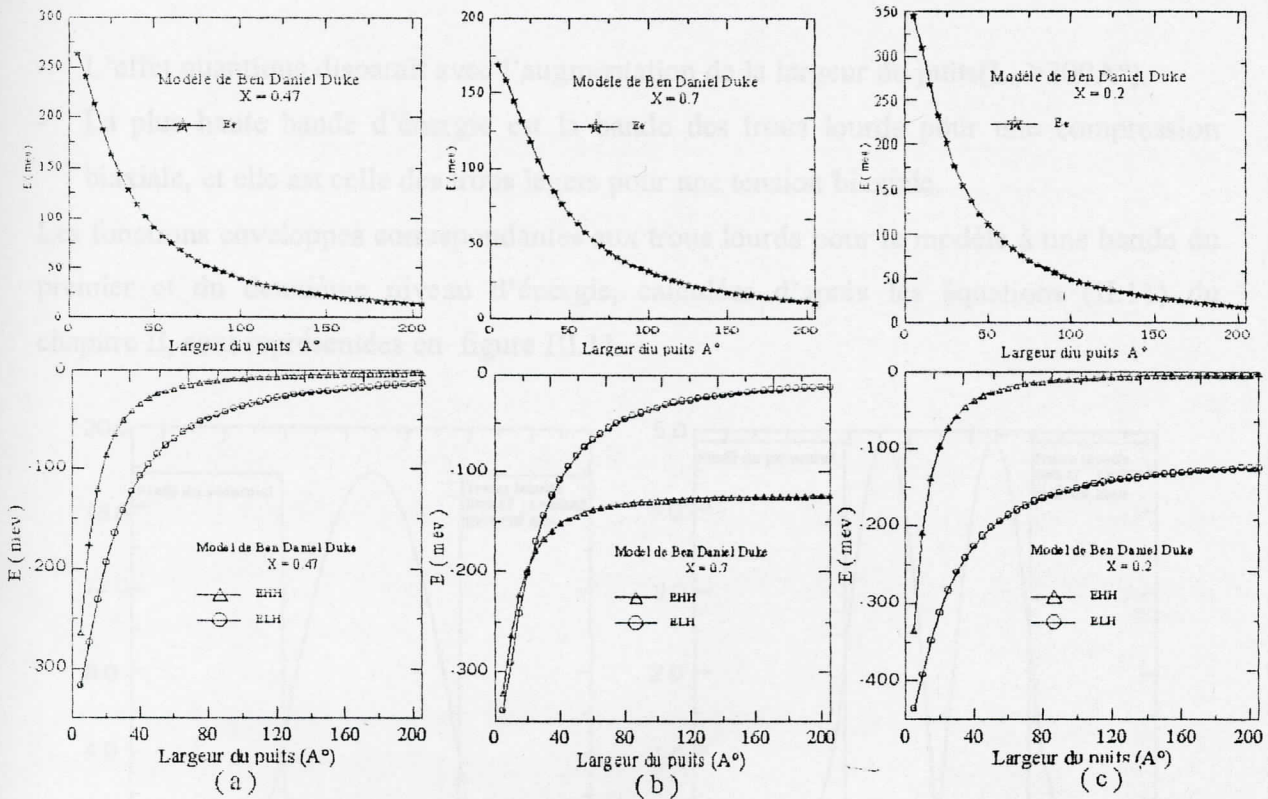


Figure.III.10 :Energie de confinement du  $Ga_xIn_{1-x}As/InP$ .  
 (a) dans le cas non contraint ( $x=0.47$ )  
 (b) tension biaxiale ( $x=0.7$ )  
 (c) compression biaxiale ( $x=0.2$ )

Avec  $E_e$  : énergie de confinement des électrons,

EHH et ELH les énergies de confinement des trous lourds et des trous légers respectivement.

Le nombre des états liés [43] par puits (à  $k_{\parallel}=0$ ) est donné comme suit:

$$N = 1 + \text{Int} \left[ \left( \frac{2m_A}{\hbar^2 \pi^2} V L_A^2 \right)^{1/2} \right] \quad (\text{III.24})$$

avec :

$L_A$  : la largeur du puits.

$V$  : le potentiel de la barrière.

$\text{Int}(x)$  : la partie entière de  $x$ .

D'après la figure III.10, on peut remarquer les points suivants :

- L'effet quantique disparaît avec l'augmentation de la largeur du puits ( $L_z > 200 \text{Å}$ ).
- La plus haute bande d'énergie est la bande des trous lourds pour une compression biaxiale, et elle est celle des trous légers pour une tension biaxiale.

Les fonctions enveloppes correspondantes aux trous lourds pour le modèle à une bande du premier et du deuxième niveau d'énergie, calculées d'après les équations (II.11) du chapitre II, sont représentées en figure III.11.

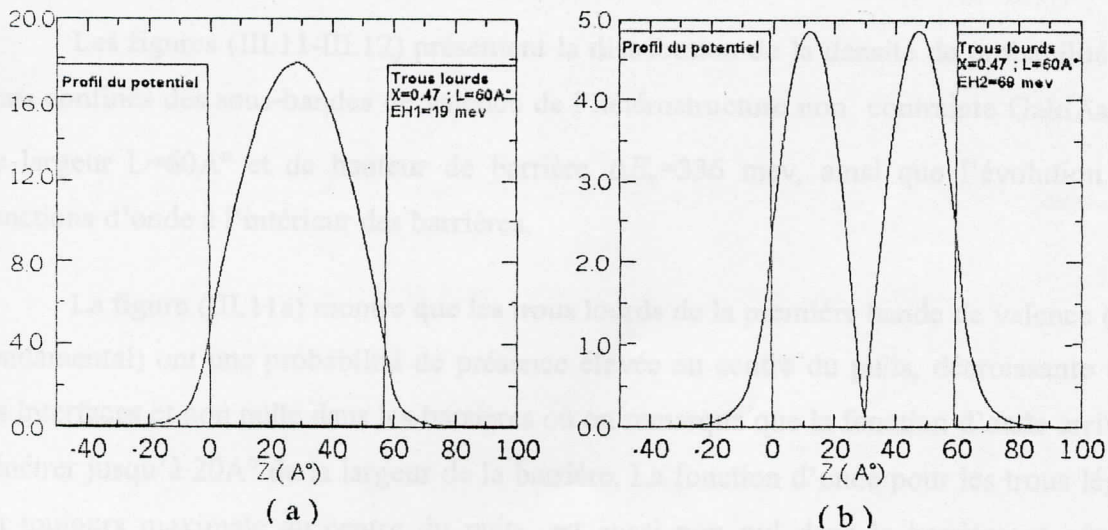


Figure III.11 : Fonction enveloppe normalisée des trous lourds pour une largeur  $L = 60 \text{Å}$  et pour l'hétérostructure non contrainte  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{InP}$ .  
 (a) : du premier niveau.  
 (b) : du deuxième niveau.



Ainsi que les fonctions enveloppes correspondantes aux trous légers pour le modèle à une bande du premier et du deuxième niveau d'énergies sont représentées en figure III.12.

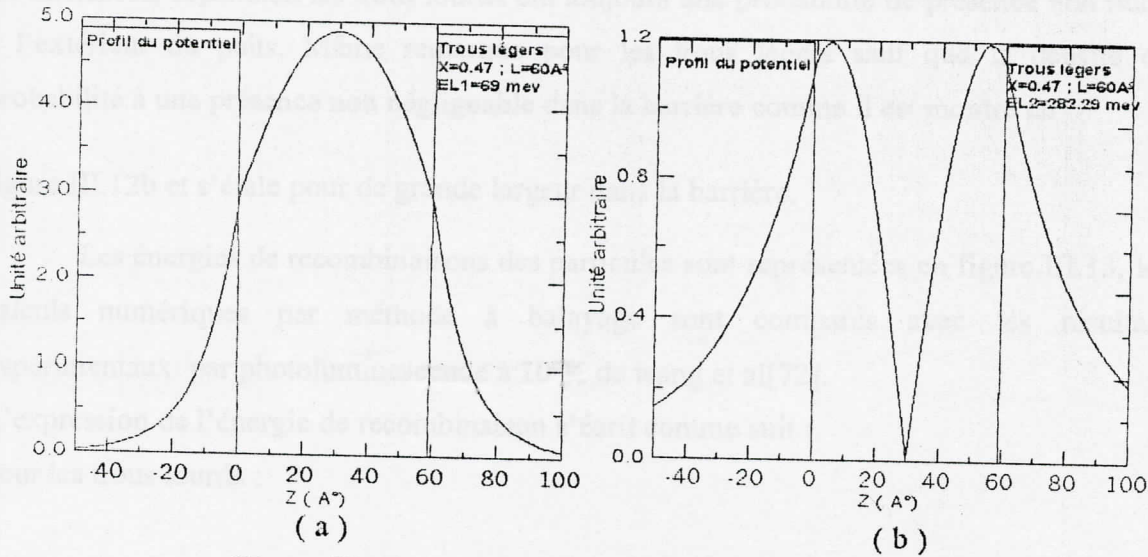


Figure III.12 : Fonction enveloppe normalisée des trous légers pour une largeur  $L = 60\text{\AA}$  et pour l'hétérostructure non contrainte  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{InP}$ .

(a) : du premier niveau.  
(b) : du deuxième niveau.

Les figures (III.11-III.12) présentent la distribution de la densité de probabilité des états confinés des sous-bandes de valence de l'hétérostructure non contrainte GaInAs/InP de largeur  $L=60\text{\AA}$  et de hauteur de barrière  $\Delta E_v=336\text{ meV}$ , ainsi que l'évolution des fonctions d'onde à l'intérieur des barrières.

La figure (III.11a) montre que les trous lourds de la première bande de valence (état fondamental) ont une probabilité de présence élevée au centre du puits, décroissante vers les interfaces et non nulle dans les barrières où on remarque que la fonction d'onde arrive à pénétrer jusqu'à  $20\text{\AA}$  de la largeur de la barrière. La fonction d'onde pour les trous légers est toujours maximale au centre du puits, est aussi non nul dans la barrière et pénètre jusqu'à  $45\text{\AA}$  de la largeur de la barrière comme le montre la figure III.12 a.

Sur la figure (III.11 b) qui présente la distribution de la densité pour les trous lourds de la seconde bande, on remarque qu'une probabilité de présence nulle au centre du puits, maximale au deuxième quart et au troisième quart de la largeur du puits, elle diminue vers les interfaces, cependant les trous lourds ont toujours une probabilité de présence non nulle à l'extérieur du puits. Même remarque pour les trous légers sauf que la densité de probabilité à une présence non négligeable dans la barrière comme il est montré en

figure III.12b et s'étale pour de grande largeur dans la barrière.

Les énergies de recombinaisons des particules sont représentées en figure.III.13, les calculs numériques par méthode à balayage sont comparés avec les résultats expérimentaux par photoluminescence à 10°K de wang et al[72].

L'expression de l'énergie de recombinaison s'écrit comme suit :

pour les trous lourds :

$$E_{rh} = E_{nh} + E_{ne} + E_{gh} \quad (\text{III.25})$$

Pour les trous légers :

$$E_{rl} = E_{nl} + E_{ne} + E_{gl} \quad (\text{III.26})$$

avec :

$E_{nh}$ ,  $E_{nl}$  et  $E_{ne}$  : l'énergie de confinement des trous lourds et trou légers et de l'électron respectivement.

$E_{gh}$  et  $E_{gl}$  : l'énergie de la bande interdite des trous lourds et trous légers respectivement.

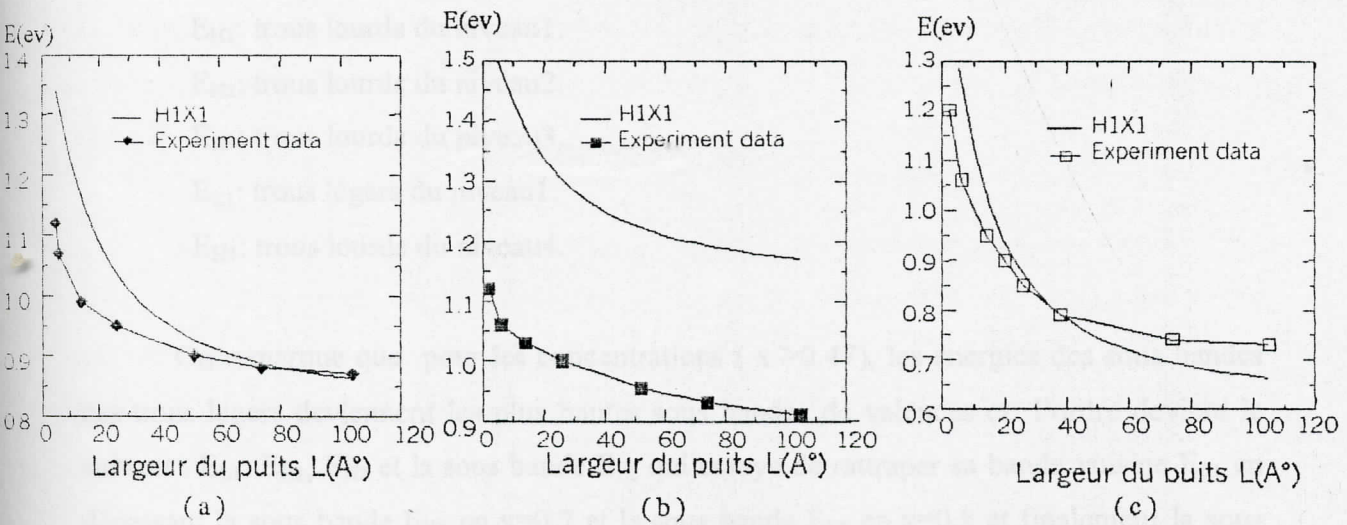


Figure.III.13 :Energie de transition du  $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}/\text{InP}$ .  
 (a) dans le cas non contraint ( $x=0.47$ )  
 (b) tension biaxiale ( $x=0.7$ )  
 (c) compression biaxiale ( $x=0.2$ )

D'après la figure III.13, nous remarquons l'accord des résultats des énergies de transitions calculées et celles mesurées par photoluminescence pour le taux de Gallium  $x \leq 0.47$ , mais un certain écart des résultats numériques et expérimentaux pour les concentrations  $x > 0.47$ , dû aux approximations théoriques du modèle à une bande qui négligent les interactions entre bandes. Pour cet intervalle de concentration la recombinaison se fait entre la bande de conduction et la plus haute bande de valence, dans ce cas, celle des trous légers.

Théoriquement la bande des trous légers interagit avec la bande spin orbite surtout pour de faibles largeurs du puits, alors que dans le modèle utilisé on ne tient pas compte de cet effet.

Les sous bandes d'énergies pour les trous lourds et les trous légers pour  $k=0$  et pour une largeur du puits  $L=60 \text{ \AA}$  en fonction de la concentration du Gallium sont montrées en figure III.14.

On voit bien que les hautes sous bandes de valences sont celles des trous lourds pour  $x \leq 0.47$  et l'ordre des sous bandes est le suivant  $E_{H1}, E_{H2}, E_{H3}, E_{L1}$  et  $E_{H4}$ .

Avec :

$E_{H1}$ : trous lourds du niveau1.

$E_{H2}$ : trous lourds du niveau2.

$E_{H3}$ : trous lourds du niveau3.

$E_{L1}$ : trous légers du niveau1.

$E_{H4}$ : trous lourds du niveau4.

On remarque que pour les concentrations ( $x > 0.47$ ), les énergies des sous bandes des trous légers deviennent les plus hautes sous bandes de valences et l'ordre devient le suivant :  $E_{L1}$ ,  $E_{H1}$ ,  $E_{H2}$  et la sous bande  $E_{L2}$  qui essaye de rattraper sa bande voisine  $E_{L1}$  en dépassant la sous bande  $E_{H3}$  en  $x=0.7$  et la sous bande  $E_{L2}$  en  $x=0.8$  et finalement la sous bande  $E_{H1}$  en  $x=0.9$  et l'ordre des sous bandes sera le suivant :  $E_{L1}$ ,  $E_{L2}$ ,  $E_{H1}$ ,  $E_{H2}$ ,  $E_{H3}$ .

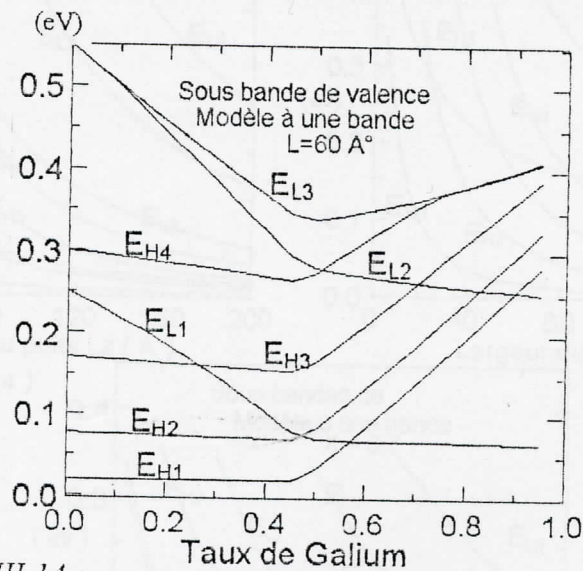


Figure III.14 :

Les sous bandes d'énergies des trous lourds et trous légers, pour une largeur du puits  $L = 60 \text{ \AA}$  de l'hétérostructure  $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}/\text{InP}$  en fonction du taux de Gallium.

Nous avons aussi représenté les énergies de confinement des porteurs (trous lourds, trous légers) du modèle parabolique pour différents niveaux en fonction de la largeur du puits ( $L$ ), et pour les cas contraint et non contraint montrées en figure III.15. La contrainte affecte ces sous bandes d'énergies en ce qui concerne l'ordre des niveaux ainsi que la valeur de l'énergie du porteur lui-même.

La haute bande de valence est celle des trous lourds dans le cas d'une compression avec croisement des niveaux d'énergies et changement d'ordre des niveaux en fonction de la largeur du puits. Dans le cas d'une tension biaxiale la haute bande de valence est celle des trous légers. Dans ce cas, l'ordre des niveaux des énergies des porteurs change en fonction de la largeur du puits.

Donc nous pouvons conclure que la variation de la concentration du Gallium ( $x$ ) ainsi que la variation de la largeur du puits affecte les énergies de confinement des porteurs, ainsi que celle du gap.

Cet effet est un avantage et il est d'une grande importance dans le domaine optoélectronique.

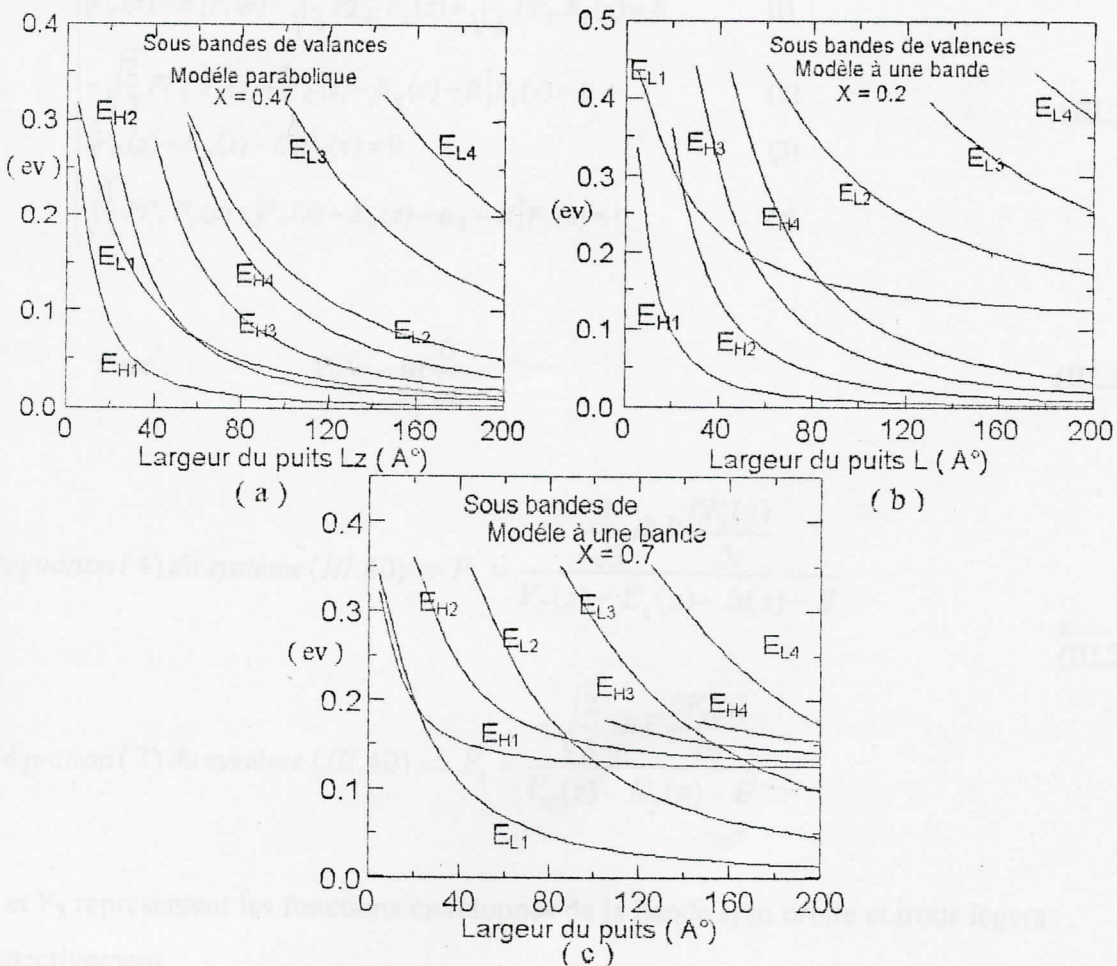


Figure III.15 :

*Les énergies de confinement des trous lourds et trous légers en fonction de la largeur du puits de l'hétérostructure  $Ga_xIn_{1-x}As/InP$  pour :*

- (a) cas non contraint.
- (b) cas d'une compression biaxiale.
- (c) cas d'une tension biaxiale.

### III 2.2 Approximation à trois bandes (modèle de Kane-Bastard) :

Pour  $k_y=0$ , les trous lourds sont découplés des particules légères et l'Hamiltonien  $H(z)$  devient bloc-diagonal (dégénérescence de Kramer non levée).

Le système du tableau.II.2 du chapitre II se réduit à deux systèmes différentiels identiques(4X4) portant sur les fonctions enveloppes  $F_1, F_3, F_5, F_7$  et  $F_2, F_4, F_6, F_8$ . Dans la base  $F_1, F_3, F_5$  et  $F_7$  nous pouvons écrire le système d'équation suivant:

$$\begin{cases} [V_C(z)-E]F_1(z) - \sqrt{\frac{2}{3}}PP_z F_3(z) + \sqrt{\frac{1}{3}}PP_z F_7(z) = 0 & (1) \\ -\sqrt{\frac{2}{3}}PP_z F_1(z) + [V_C(z)-E_g(z)-E]F_3(z) = 0 & (2) \\ [V_C(z)-E_g(z)-E]F_5(z) = 0 & (3) \\ \sqrt{\frac{1}{3}}PP_z F_1(z) + [V_C(z)-E_g(z)-\Delta_z-E]F_7(z) = 0 & (4) \end{cases} \quad (III.27)$$

$$\text{avec :} \quad P_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial z} \quad (III.28)$$

$$\text{L'équation (4) du système (III.40)} \Rightarrow F_7 = \frac{\frac{1}{\sqrt{3}}i\hbar P \frac{\partial F_1(z)}{\partial z}}{V_C(z) - E_g(z) - \Delta(z) - E} \quad (III.29)$$

$$\text{L'équation (2) du système (III.40)} \Rightarrow F_3 = \frac{-\sqrt{\frac{2}{3}}i\hbar P \frac{\partial F_1(z)}{\partial z}}{V_C(z) - E_g(z) - E}$$

$F_7$  et  $F_3$  représentent les fonctions enveloppes de la bande spin orbite et trous légers respectivement.

En remplaçant  $F_3$  et  $F_7$  dans équation (1) du système(III.27), nous trouvons :

$$EF_1(z) = \left[ V_c(z) + \frac{2}{3} P^2 \left( \frac{P_z^2}{E+E_g-V_c} + \frac{P_z^2}{2(E+E_g+\Delta-V_c)} \right) \right] F_1(z) \quad (\text{III.30})$$

### a. La bande de conduction :

Par identification nous pouvons tirer la formule de la masse effective des électrons dépendante de l'énergie:

$$\frac{1}{m(E,z)} = \frac{2}{3} P^2 \left[ \frac{2}{E+E_g-V_c} + \frac{1}{E+E_g+\Delta-V_c} \right] \quad (\text{III.31})$$

En utilisant la notation suivante :

Dans le puits

Dans la barrière

$$E_g = E_{gA}$$

$$E_g = E_{gB}$$

$$\Delta = \Delta_A$$

$$\Delta = \Delta_B$$

$$V_c = 0$$

$$V_c = dE_c$$

En posant :

$$E = \frac{\hbar^2 K_{A,B}^2}{2m(E,z)} + V_c(z) \Rightarrow \frac{1}{m(E,z)} = \frac{2(E-V_c)}{\hbar^2 K_{A,B}^2} \quad (\text{III.32})$$

par identification de (III.32) et (III.31), nous obtenons :

$$\frac{2E}{\hbar^2 k_A^2} = \frac{2}{3} P^2 \left[ \frac{2}{E+E_{gA}-V_c} + \frac{1}{E+E_{gA}+\Delta_A-V_c} \right] \quad (\text{III.33})$$

dans le puits :

$$E \left( E_{gA} + E \right) \left( E_{gA} + \Delta_A + E \right) = \hbar^2 k_A^2 P^2 \left( E_g + E + \frac{2}{3} \Delta_A \right) \quad (\text{III.34})$$

dans la barrière :

$$\frac{E - dE_c}{\hbar k_B^2} = \frac{P^2}{3} \left[ \frac{2}{E_{gB} + E - dE_c} + \frac{1}{E_{gB} + \Delta_B + E - dE_c} \right] \quad (\text{III.35})$$

$$(E - dE_c) \left( E_{gB} + E - dE_c \right) \left( E_{gB} + \Delta_B + E - dE_c \right) = \hbar^2 k_B^2 P^2 \left( E_{gB} + E - dE_c + \frac{2}{3} \Delta_B \right) \quad (\text{III.36})$$

Les relations ( III.34 ) et ( III.36 ) sont les relations de dispersion de Kane relatives aux matériaux puits (A) et barrière (B) respectivement.

b. La bande de valence :

(i) Les trous lourds :

Le confinement des trous lourds (hh) ne peut se faire dans le cadre du modèle de Bastard, l'équation ( 3 ) du système(III.27) ne conduit à aucune solution pour  $F_3$ . Les trous lourds sont donc découplés des particules légères à  $k_x=0$  ce qui conduit au fait que l'interaction  $\Gamma_{hh}$  avec les bandes supérieures sera décrit par une masse effective  $m_{hh}$  indépendante de l'énergie, exprimé à l'aide des paramètres du 2<sup>ème</sup> ordre de Luttinger :

$$m_{hh} = \frac{m_0}{\gamma_1 - 2\gamma_2} \quad (\text{III.37})$$

Leurs niveaux d'énergies seront déterminés avec le modèle à une bande de Ben Daniel-Duke



(ii) Les trous légers :

On peut appliquer la méthode de résolution, utilisé pour les électrons au calcul des niveaux de valence proches du maximum de la bande  $\Gamma_{8h}$  ( $F_3$  et  $F_7$  sont alors discontinues).

### III.2.3 Approche de Marzin :

Le modèle à trois bandes de Bastard (cas non contraint) peut être appliqué aux calculs des niveaux de confinement d'un puits contraint comme là démontré J.Y. Marzin dans ses travaux [63]. Il montre que :

$$EF_1(z) = \left[ V_c(z) + \frac{p^2 p_z^2}{2m(E, \varepsilon)} \right] F_1(z) \quad (\text{III.38})$$

avec :

$$\frac{1}{m(E, \varepsilon)} = \frac{2P^2 \left[ E_g + \text{atr}(\varepsilon) + \frac{2}{3}\Delta + b\varepsilon_u + E - V_c \right]}{\left[ E - V_c + E_g + \text{atr}(\varepsilon) - b\varepsilon_u \right] \left[ E - V_c + E_g + \text{atr}(\varepsilon) + \Delta \right] - b^2 \varepsilon_u^2} \quad (\text{III.39})$$

$\varepsilon_u$  : la déformation planaire :

avec

$$\varepsilon_u = \varepsilon_{zz} - \varepsilon_{xx} = -\varepsilon_{//} (C_{11} - 2C_{12}) / C_{11}$$

et :

$$\text{tr}(\varepsilon) = \varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz} = 2\varepsilon_{//} + \varepsilon_{zz} = 2\varepsilon_{//} (C_{11} - C_{12}) / C_{11}$$

L'hamiltonien total  $H_T$  s'écrit comme suit.

$$H_T = H + H_c \quad (\text{III.40})$$

Avec :

$$H_{\varepsilon} = \begin{vmatrix} E_g + a_c \text{tr}(\varepsilon) & 0 & 0 & 0 \\ 0 & a_v \text{tr}(\varepsilon) - b(\varepsilon_{ZZ} - \varepsilon_{XX}) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & a_v \text{tr}(\varepsilon) + b(\varepsilon_{ZZ} - \varepsilon_{XX}) & -\sqrt{2}b(\varepsilon_{ZZ} - \varepsilon_{XX}) \\ 0 & 0 & -\sqrt{2}b(\varepsilon_{ZZ} - \varepsilon_{XX}) & a_v \text{tr}(\varepsilon) - \Delta \end{vmatrix} \quad (\text{III.41})$$

$H_{\varepsilon}$  : hamiltonien de la contrainte.

Donc  $H_T$  aura la forme suivante :

$$H_T = \begin{vmatrix} D & 0 \\ 0 & D \end{vmatrix} \quad (\text{III.42})$$

avec :

$$D = \begin{vmatrix} E_g + a_c \text{tr}(\varepsilon) & 0 & -\sqrt{\frac{2}{3}} P p_z & \sqrt{\frac{1}{3}} P p_z \\ 0 & a_v \text{tr}(\varepsilon) - b(\varepsilon_{ZZ} - \varepsilon_{XX}) & 0 & 0 \\ -\sqrt{\frac{2}{3}} P p_z & 0 & a_v \text{tr}(\varepsilon) + b(\varepsilon_{ZZ} - \varepsilon_{XX}) & -\sqrt{2}b(\varepsilon_{ZZ} - \varepsilon_{XX}) \\ \sqrt{\frac{1}{3}} P p_z & 0 & -\sqrt{2}b(\varepsilon_{ZZ} - \varepsilon_{XX}) & a_v \text{tr}(\varepsilon) - \Delta \end{vmatrix} \quad (\text{III.43})$$

les valeurs propres de D sont :

$$E = a_v \text{tr}(\varepsilon) - b \varepsilon_{ii} \quad (\text{III.44})$$

Il n'y a pas de dispersion pour les particules lourdes (hh).

L'équation de dispersion des particules légères s'écrit comme suit :

$$(E - E_g - a_c \text{tr}(\epsilon))(E - E_1)(E - E_2) = P^2 \hbar^2 k_z^2 \left( E + \frac{2}{3} \Delta + b\epsilon_u - a_v \text{tr}(\epsilon) \right) \quad (\text{III.45})$$

$$\left. \begin{aligned} E_1 &= a_v \text{tr}(E) + \frac{b\epsilon_u}{2} - \frac{\Delta}{2} + \frac{\Delta}{2} \sqrt{1 + 2 \frac{b\epsilon_u}{\Delta} + 9 \left( \frac{b\epsilon_u}{\Delta} \right)^2} \\ E_2 &= a_v \text{tr}(E) + \frac{b\epsilon_u}{2} - \frac{\Delta}{2} - \frac{\Delta}{2} \sqrt{1 + 2 \frac{b\epsilon_u}{\Delta} + 9 \left( \frac{b\epsilon_u}{\Delta} \right)^2} \end{aligned} \right\} \quad (\text{III.46})$$

$E_1$  et  $E_2$  sont les énergies de la bande des trous légers et de la bande spin orbite au point  $\Gamma$ .  $a_v \text{tr}(\epsilon)$  et  $a_c \text{tr}(\epsilon)$  représentent les décalages d'énergie des bandes de conduction et de valence respectivement en  $k=0$  causés par la composante hydrostatique de la contrainte, alors que  $b(\epsilon_{zz} - \epsilon_{xx})$  représente la levée de dégénérescence de la bande de valence en  $k=0$ . La composante de cisaillement induit le couplage  $\Gamma_{81}$  et  $\Gamma_7$  (modèle à deux bandes).

### III.2.3.1 Pour les électrons :

dans le puits :

$$\frac{1}{m_A(E, \epsilon, z)} = \frac{\left[ (E_g + \Delta + dE_{hyd})(E_g + dE_{hyd} - b\epsilon_u) - b^2 \epsilon_u^2 \right] \left( E + E_g + dE_{hyd} + \frac{2}{3} \Delta + b\epsilon_u \right)}{m_A \left( E_g + dE_{hyd} + \frac{2}{3} \Delta + b\epsilon_u \right) \left[ (E + E_g + dE_{hyd} - b\epsilon_u)(E + E_g + dE_{hyd} + \Delta) - b^2 \epsilon_u^2 \right]} \quad (\text{III.47})$$

$$\text{et } 2P^2 = \frac{\left[ (E_g + dE_{hyd} + \Delta)(E_g + dE_{hyd} - b\epsilon_u) - b^2 \epsilon_u^2 \right]}{m_A \left( E_g + dE_{hyd} + \frac{2}{3} \Delta + b\epsilon_u \right)} \quad (\text{III.48})$$

avec :

$$dE_{hyd} = a_v \text{tr}(\epsilon)$$

dans la barrière :

$$\frac{1}{m_B(E, \epsilon, z)} = \frac{E_{gB}(E_{gB} + \Delta_B)(E - \Delta E_c + E_{gB} + \frac{2}{3}\Delta)}{m_B(E_{gB} + \frac{2}{3}\Delta_B)(E_{gB} + \Delta_B + E - \Delta E_c)(E - \Delta E_c + E_{gB})} \quad (III.49)$$

Dans l'approximation  $kp$  les bandes  $m_J = \pm 3/2$  ne sont pas couplées à une autre bande, donc le modèle parabolique est appliqué. Un des principaux inconvénients de restreindre l'interaction  $k.p$  aux bandes  $\Gamma_6, \Gamma_7, \Gamma_8$  est que les états de la particule lourde sont très peu dispersifs donc il faut introduire des termes  $kp$  du 2<sup>ème</sup> ordre en ( $k^2$ ) dans la matrice  $D$  pour pouvoir calculer la dispersion des trous lourds.

Puisque les états légers et lourds se découplent, nous devons faire attention au couplage  $kp$  entre  $\Gamma_6, \Gamma_7, \Gamma_8$  et les bandes éloignées seulement pour les états de la particule lourde. En faisant ainsi, les états  $m_J = \pm 3/2$  acquièrent une masse effective finie. Puisque cela survient d'une interaction avec les bandes éloignées, un traitement parabolique suffit[26].

Ainsi :

$$E(k) = -E_g - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_{hh}}, \text{ qui correspond à } m_J = \pm \frac{3}{2} \quad (III.50)$$

### III.2.3.2 Pour les trous légers :

Dans le puits :

$$\frac{1}{m_{lh}(E, z)} = \frac{1}{m_{lh}} \frac{2(E + E_g)(\Delta - E)}{3E_g \left( \frac{2}{3}\Delta - E \right)} \quad (III.51)$$

$$m_{lh} = \frac{m_0}{\gamma_1 + 2\gamma_2} \quad (III.52)$$

Dans la barrière :

$$m_{lhB} = \frac{m_0}{\gamma_{1B} + 2\gamma_{2B}} \quad (III.53)$$

Les indices A et B indique le matériau puits et barrière respectivement.

Les énergies de confinement correspondant à ces états, que nous avons calculé (voir Annexe D) sont représentées en figure.III.16.

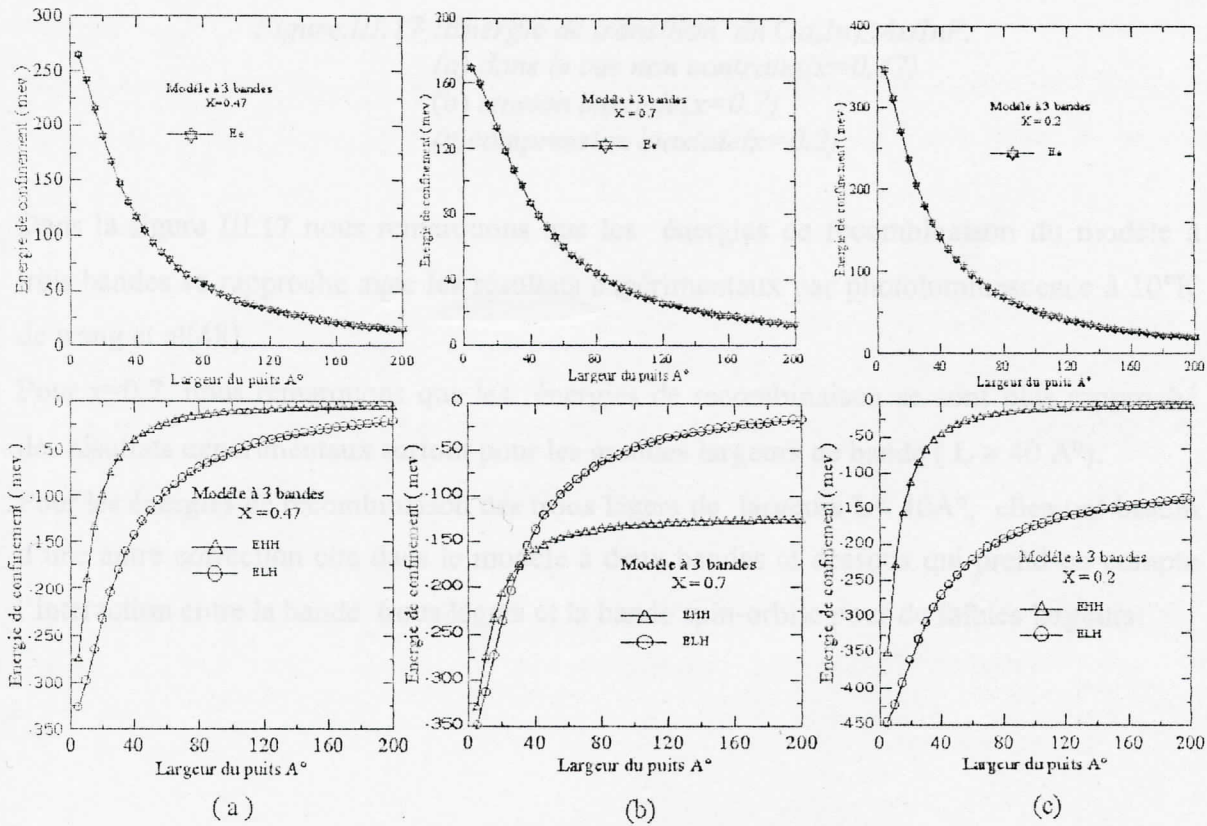


Figure.III.16: Energie de confinement du  $Ga_xIn_{1-x}As/InP$ .  
 (a) dans le cas non contraint ( $x=0.47$ )  
 (b) tension biaxiale ( $x=0.7$ )  
 (c) compression biaxiale ( $x=0.2$ )

D'après la figure III.16 nous remarquons clairement que le modèle à trois bandes du aux couplage entre bande trous légers, spin orbite et électrons, apporte des corrections aux énergies des porteurs du modèle à une bande, qui vont à leur tour corriger les énergies de recombinaisons représentées en figure III.17.

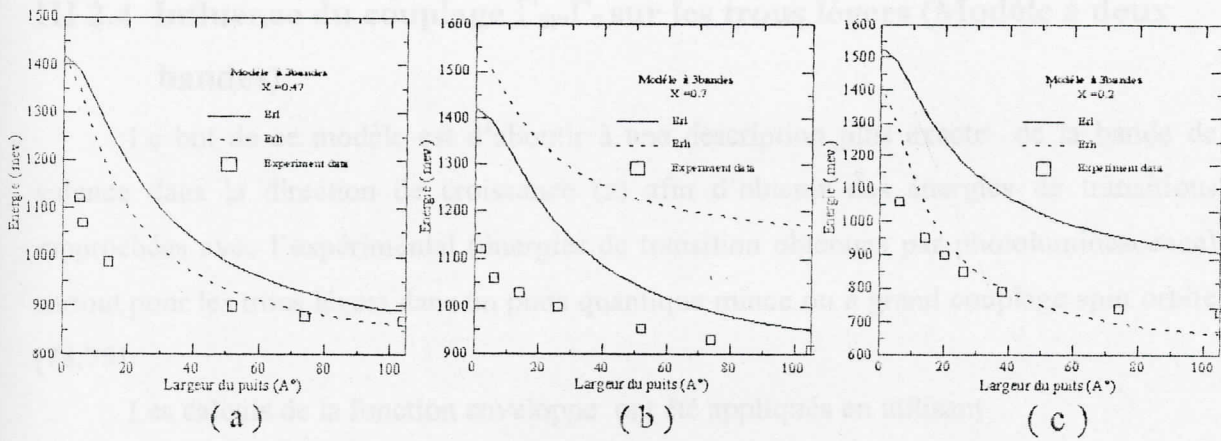


Figure.III.17 :Energie de transition du  $Ga_xIn_{1-x}As/InP$ .  
 (a) dans le cas non contraint( $x=0.47$ )  
 (b) tension biaxiale( $x=0.7$ )  
 (c)compression biaxiale( $x=0.2$ )

Dans la figure III.17 nous remarquons que les énergies de recombinaison du modèle à trois bandes se rapproche avec les résultats expérimentaux par photoluminescence à 10°K de wang et al[48].

Pour  $x=0.7$ , nous remarquons que les énergies de recombinaison se sont plus rapproché des résultats expérimentaux surtout pour les grandes largeurs de bande ( $L > 40 \text{ Å}$ ).

Pour les énergies de recombinaison des trous légers de largeurs  $L < 40 \text{ Å}$ , elles ont besoin d'une autre correction cité dans le modèle à deux bandes ci dessous qui prend en compte l'interaction entre la bande trous légers et la bande spin-orbite pour de faibles largeurs.

### III 2.4 Influence du couplage $\Gamma_{81}-\Gamma_7$ sur les trous légers (Modèle à deux bandes):

Le but de ce modèle est d'aboutir à une description plus exacte de la bande de valence dans la direction de croissance (z) afin d'obtenir des énergies de transitions rapprochées avec l'expérimental (énergies de transition obtenues par photoluminescence) surtout pour les trous légers dans un puits quantique mince ou à grand couplage spin orbite [78,79].

Les calculs de la fonction enveloppe ont été appliqués en utilisant « l'approximation des sous bandes découplées » qui est utilisée pour le calcul de la structure électronique du puits quantique à  $k_x=k_y=0$  [80,81]. Dans cette approximation, les fonctions propres du puits quantique sont directement proportionnelles aux fonctions de Bloch, pour les trous lourds  $|3/2, \pm 3/2\rangle$  et les trous légers  $|3/2, \pm 1/2\rangle$  respectivement.

Nous négligeons les termes linéaires en k qui apparaissent à cause de l'inexistence de la symétrie d'inversion dans le réseau du zinc blende et qui déplace légèrement la bande de valence du maximum  $k=0$  et nous prenons en compte les termes de perturbation du deuxième ordre qui décrivent le couplage K.P entre les bandes de valence.

L'Hamiltonien cinétique 6x6 de la masse effective à  $k_x=k_y=0$ , peut être représenté par deux matrices 3x3 bloc-diagonales qui correspondent aux fonctions de base ( $U_h, U_l, U_{so}$ )

$$U_h = (X+iY)\uparrow/\sqrt{2}, \quad U_l = [-2Z\uparrow + (X+iY)\downarrow]/\sqrt{6}, \quad U_{so} = [Z\uparrow + (X+iY)\downarrow]/\sqrt{3}.$$

Pour  $k_x=k_y=0$ , la matrice est bloc diagonale et la dégénérescence de Kramer est conservée. Dans ce modèle, l'Hamiltonien de la masse effective est donné par [78] :

$$H_I = \begin{pmatrix} |U_h\rangle & |U_l\rangle & |U_{so}\rangle \\ -\frac{\hbar^2}{2m_0}(\gamma_1^l - 2\gamma_2^l)k_z^2 & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{\hbar^2}{2m_0}(\gamma_1^l + 2\gamma_2^l)k_z^2 & \frac{\hbar^2}{m_0}\sqrt{2}\gamma_2^l k_z^2 \\ 0 & \frac{\hbar^2}{m_0}\sqrt{2}\gamma_2^l k_z^2 & -\frac{\hbar^2}{2m_0}\gamma_1^l k_z^2 - \Delta \end{pmatrix} \quad (\text{III.54})$$

$\gamma_1^l, \gamma_2^l$  : sont les paramètres de Luttinger qui prennent les valeurs suivantes pour l'InAs et l'InP.

	InAs	InP
$\gamma_1^l$	19.77	5.05
$\gamma_2^l$	8.63	1.63

$$\gamma_1^l = \gamma_1^l - \frac{E_p}{3E_g + \Delta} \quad \text{et} \quad \gamma_{2,3}^l = \gamma_{2,3}^l - \frac{E_p}{2E_g + \Delta} \quad [82].$$

$$E_p = \frac{2m_0}{\hbar^2} P_0^2 \quad (\text{III.55})$$

$E_p$ : paramètre qui contrôle l'interaction de la bande de valence et la bande de conduction.

$\Delta$  : écart d'énergie entre la bande de trous légers et la bande spin orbite du matériau considéré.

L'influence de la contrainte sur les énergies des états de valence peut être estimée à partir de l'Hamiltonien de Susuki-Hensel [83] donné sous la forme suivante :



$$H_\varepsilon = \begin{pmatrix} |U_h\rangle & |U_l\rangle & |U_{so}\rangle \\ a_v \text{tr}(\varepsilon) - b\varepsilon_u & 0 & 0 \\ 0 & a_v \text{tr}(\varepsilon) + b\varepsilon_u & -\sqrt{2}b\varepsilon_u \\ 0 & -\sqrt{2}b\varepsilon_u & a_v \text{tr}(\varepsilon) \end{pmatrix} \quad (\text{III.56})$$

«  $a_0$  » et «  $a$  » sont les constantes de maille de l'InP et du  $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}$  respectivement. Nous appliquons la loi de Vegard pour calculer la valeur de «  $a$  » et les constantes d'élasticité «  $C_{ij}$  » pour le  $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}$ .

Ainsi  $H_T$  l'Hamiltonien global du matériau massif est le suivant :

$$H_T = H_l + H_\varepsilon \quad (\text{III.57})$$

Les solutions propres de cette matrice représentent les énergies de confinement des particules légères. Ces solutions s'obtiennent en calculant le déterminant séculaire :

$$\left| H_T - EI \right| = 0 \quad (\text{III.58})$$

Les relations auront la forme suivante :

$$E = \frac{1}{2} \left( P + Q \pm \sqrt{(P + Q)^2 - 4(PQ - M^2)} \right) \quad (\text{III.59})$$

avec :

$$P = -\frac{\hbar^2}{2m_0} (\gamma_1^l + 2\gamma_2^l) k_z^2 + a_v \text{tr}(\varepsilon) + b\varepsilon_u \quad (\text{III.60})$$

$$Q = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \left( \gamma_1^l k_z^2 - \Delta + a_v \text{tr}(\varepsilon) \right) \quad (\text{III.61})$$

$$M = \frac{\hbar^2}{2m_0} 2\sqrt{2}\gamma_2^l k_z^2 - \sqrt{2}b\varepsilon_u \quad (\text{III.62})$$

Le signe(+) dans l'équation (III.59) désigne la bande des trous légers( $\Gamma_{81}$ ), tandis que le signe(-), désigne la bande spin orbite( $\Gamma_7$ ). La dispersion à une bande est calculée en annulant les termes hors diagonale de l'équation (III.54 ou III.56) qui décrivent le couplage entre bandes tout en gardant tous les termes de la contrainte ( voir figure.III.18).

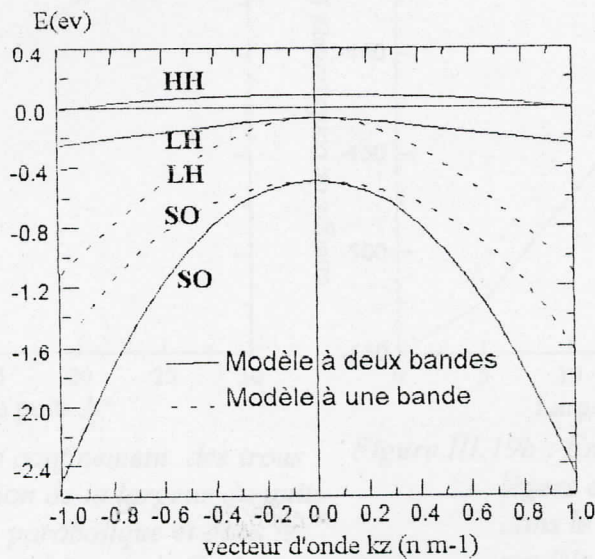


Figure.III.18: dispersion dans la direction de croissance modèle à deux bandes et à 1 bande pour l'InAs.

Le confinement des trous légers en fonction de la largeur du puits  $L_z$  est montré en figure.III.19 ci dessous, pour les deux modèles : le modèle à une bande avec une dispersion parabolique de la bande  $\Gamma_{81}$  possédant une masse effective légère  $m_{lh} = m_0 / (\gamma_1 + 2\gamma_2)$  et le modèle à deux bandes où la masse effective dépend de l'énergie.

La masse effective est donnée comme suit :

dans le puits :

$$\frac{1}{m_A(E)} = \frac{4P^2}{3(E + E_{gA})} \quad (\text{III.63})$$

dans la barrière :

$$\frac{1}{m_B(E)} = \frac{4P^2}{3(E - \Delta E_c + E_{gB})} \quad (\text{III.64})$$

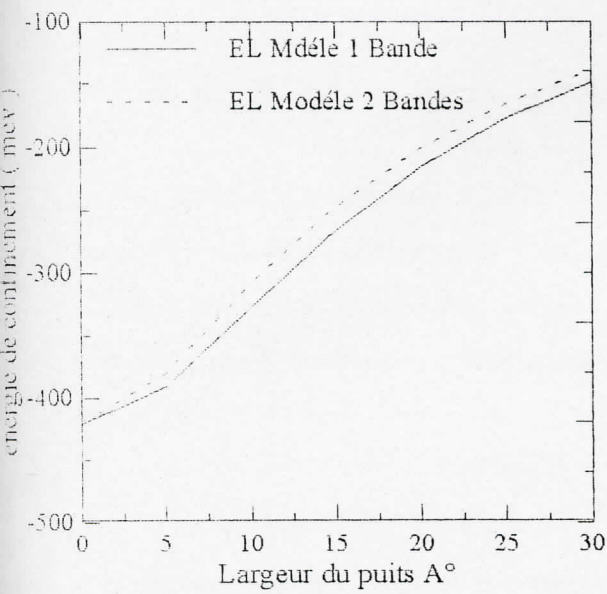


Figure.III.19a : Energie de confinement des trous légers en fonction de la largeur du puits dans le modèle parabolique et dans le modèle à deux bandes pour le GaAs.

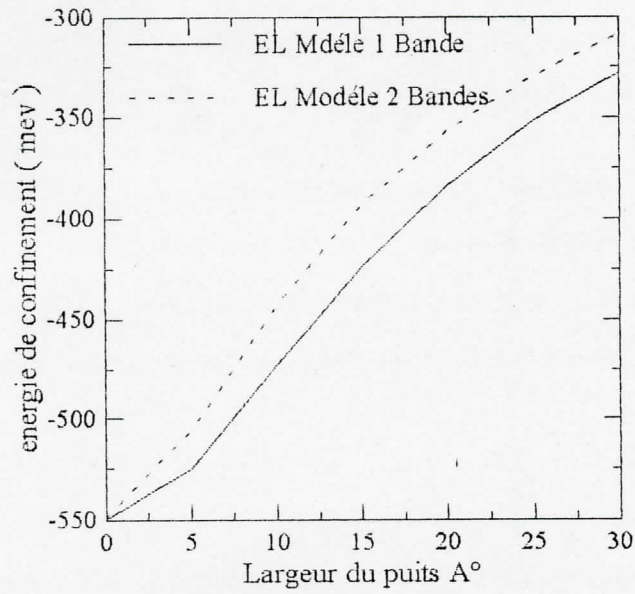


Figure.III.19b : Energie de confinement des trous légers en fonction de la largeur du puits dans le modèle parabolique et dans le modèle à deux bandes pour l'InAs.

$$P = (-i/m)\langle S | p_x | X \rangle = (-i/m)\langle S | p_y | Y \rangle = (-i/m)\langle S | p_z | Z \rangle$$

On remarque d'après la figure.III.19, la surestimation des énergies de confinement des particules légères (trou léger (lh)) par rapport au modèle à une bande pour l'InAs et surtout pour de faible largeur du puits  $L_z \leq 30\text{Å}$ .

Finalement, le formalisme du modèle à deux bandes doit être utilisé pour calculer les énergies de la bande de valence des trous légers tout en introduisant l'effet de la contrainte par l'utilisation du potentiel de déformation dépendant de l'orbitale et du spin [83].

## ENERGIE DE DISPERSION DANS LE PLAN DE CROISSANCE

### VI.1 Introduction :

Dans les matériaux soumis à une déformation tétragonale, les deux axes principaux ne sont plus l ou l<sub>z</sub>, mais x ou y, pour décrire la bande de valence, mais l ou l<sub>z</sub>. La déformation tétragonale induit des trous supplémentaires dans l'hamiltonien de Luttinger (voir relation IV.1). Nous nous sommes contentés dans nos calculs de ces trous concrets.

La levée de dégénérescence de la bande de valence résulte l'affaiblissement des termes de couplage en L<sub>x</sub>, L<sub>y</sub>, R et S du hamiltonien IV.1 entre les bandes des trous lourds (3/2, 3/2) et des trous légers. Pour de faibles valeurs de L<sub>x</sub>, L<sub>y</sub> ou L<sub>z</sub> la masse, pour chacune de ces deux bandes, qui peuvent être considérées comme dégénérées, est maintenant donnée par le terme diagonal dépendant de k. Il en résulte que la masse dans la direction (x) n'est pas modifiée par une contrainte tétragonale d'axe x, et que, par contre, la masse dans les directions x et y changent. Les masses sont données comme suit:

$$m_x = m_y = m_{lh} = \frac{m_0}{\gamma_1 - \gamma_2} \quad \text{et} \quad m_z = m_{ll} = \frac{m_0}{\gamma_1 + \gamma_2} \quad \text{pour la bande } (3/2, 3/2)$$

## Chapitre IV

### ENERGIE DE DISPERSION DANS LE PLAN DE CROISSANCE

#### VI.1 Introduction :

Dans les matériaux massifs soumis à une déformation tétragonale, les bons nombres quantiques ne sont plus  $J$  ou  $J_\alpha$ , avec  $\alpha$  valant  $x$ , ou  $y$ , pour décrire la bande de valence, mais  $J$  ou  $J_z$ . La déformation tétragonale induit des termes supplémentaires dans l'hamiltonien de Luttinger (voir relation IV.1). Nous nous sommes contentés dans nos calculs du cas non contraint.

La levée de dégénérescence de la bande de valence réduit l'efficacité des termes de couplages en  $k_\alpha k_\beta$ ,  $R$  et  $S$  du hamiltonien IV.1 entre les bandes des trous lourds  $|3/2, \pm 3/2\rangle_z$  et des trous légers. Pour de faibles valeurs de  $k_x$ ,  $k_y$  ou  $k_z$ , la masse, pour chacune de ces deux bandes, qui peuvent être considérées comme découplées, est maintenant donnée par le terme diagonal dépendant de  $k$ . Il en résulte que la masse dans la direction ( $z$ ) n'est pas modifiée par une contrainte tétragonale d'axe  $z$ , et que, par contre les masses dans les directions  $x$  et  $y$  changent. Les masses sont données comme suit:

$$m_x = m_y = m_{lh\parallel} = \frac{m_0}{\gamma_1 + \gamma_2} \quad \text{et} \quad m_z = m_{hh\perp} = \frac{m_0}{\gamma_1 - 2\gamma_2} \quad \text{pour la bande } |3/2, \pm 3/2\rangle_z$$

et

$$m_x = m_y = m_{lh//} = \frac{m_0}{\gamma_1 - \gamma_2} \quad \text{et} \quad m_z = m_{lh//} = \frac{m_0}{\gamma_1 + 2\gamma_2} \quad \text{pour la bande}$$

$$|3/2, \pm 1/2\rangle_z.$$

Ce phénomène est souvent qualifié de «retournement de masse», puisque dans le plan (x,y), la masse pour la bande  $|3/2, \pm 3/2\rangle_z$  est plus faible que celle correspondante à la bande  $|3/2, \pm 1/2\rangle_z$ , alors que c'est l'inverse dans la direction z.

L'existence de contraintes modifie les relations de dispersion dans le plan des couches principalement via la modification des positions des niveaux de valence de l'hétérostructure.

En particulier, quand la levée de dégénérescence de la bande de valence est plus grande que les effets de confinement, la première sous bande de trous lourds peut être suffisamment éloignée de la première sous bande de particule légère, et sa masse dans le plan peut alors présenter le renversement discuté dans le cas des matériaux déformés. Il doit en découler une amélioration de la mobilité des particules correspondantes dans le plan des couches, ce qui a une grande importance dans les dispositifs optoélectronique.

## IV.2 Interaction trous lourds trous légers :

Le hamiltonien H4X4 correspondant à l'interaction bande trous lourds trous légers, s'écrit comme suit :

$$H = \begin{bmatrix} P+Q & R & -S & 0 \\ R^* & P-Q & 0 & S \\ -S^* & 0 & P-Q & R \\ 0 & S^* & R^* & P+Q \end{bmatrix} \quad (\text{IV.1})$$

avec les termes dans le cas accordé:

$$\begin{aligned}
 P &= \frac{1}{2} \left( \frac{\hbar^2}{m} \right) \gamma_1 (K_{//}^2 + K_Z^2) \\
 Q &= \frac{1}{2} \left( \frac{\hbar^2}{m} \right) \gamma_2 (K_{//}^2 - 2K_Z^2) \\
 S &= \sqrt{3} \gamma_3 K_Z (K_X - iK_Y) \\
 R &= - \left( \frac{\hbar^2}{m} \right) \left[ \frac{\sqrt{3}}{2} \gamma_1 (K_X - iK_Y)^2 - \frac{\sqrt{3}}{4} (\gamma_3 - \gamma_2) (K_X + iK_Y)^2 \right]
 \end{aligned} \tag{IV.2}$$

$K_{//}$  : le vecteur d'onde dans le plan de couche, avec  $K_{//} = \sqrt{k_x^2 + k_y^2}$ .

$K_Z$  : le vecteur d'onde dans la direction de croissance.

$R^*$ ,  $S^*$  étant les termes conjugués de R et S respectivement.

$\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3$  représentent les paramètres de Luttinger.

Pour simplifier le problème, nous appliquons une transformation unitaire à la matrice  $H_{4 \times 4}$  ( voir Annexe E ) suivant la méthode illustrée en la référence [84-86] comme suit:

$$\bar{H} = U H U^+ = \begin{bmatrix} H^U & 0 \\ 0 & H^L \end{bmatrix} \tag{IV.3}$$

avec  $H^U$  et  $H^L$  matrice bloc supérieur et inférieur respectivement sont données comme suit :

$$H^\sigma = \begin{bmatrix} P \pm Q & \tilde{R} \\ \tilde{R}^* & P \mp Q \end{bmatrix} \quad \text{et} \quad \tilde{R} = |R| - i|S| \tag{IV.4}$$

Le symbole  $\sigma$  correspond soit au hamiltonien  $H^U$  ou soit au hamiltonien  $H^L$ .

Nous utilisons aussi l'approximation axiale  $\gamma_2 = \gamma_3$  dans le terme de R. Nous avons

$$\tilde{R} = |R| - i|S| = \left( \frac{\hbar^2 \gamma_2}{2m_0} \right) \sqrt{3} k_{\parallel}^2 - i \left( \frac{\hbar^2 \gamma_3}{2m_0} \right) 2\sqrt{3} k_{\parallel} k_z \quad (\text{IV.5})$$

avec cette approximation axiale,  $\tilde{R}$  s'écrit comme suit :

$$\tilde{R} = \frac{\hbar^2}{2m_0} \left( \frac{\gamma_2 + \gamma_3}{2} \right) \sqrt{3} k_{\parallel}^2 - i \left( \frac{\hbar^2 \gamma_3}{2m_0} \right) 2\sqrt{3} k_{\parallel} k_z \quad (\text{IV.6})$$

Pour le calcul des sous bandes d'énergies dans le plan de croissance, plusieurs méthodes peuvent être utilisées: La méthode de la matrice de transfert[85,86], la méthode des différences finis[87] et la méthode des éléments finis[88].

### IV.3 La méthode de la matrice de transfert :

La méthode de la matrice de transfert est une méthode qui est utilisée dans l'étude de la propagation des ondes, elle est aussi utilisée dans la mécanique quantique[89] et l'électromagnétisme[90]. Dans notre calcul des sous bandes dans le plan de croissance avec le couplage entre la bande des trous lourds et la bande des trous légers, nous avons utilisé cette méthode[86].

Supposant que nous avons une structure à N couches, dans notre cas N=3 (voir figure IV.1). Dans chaque zone, les quatre solutions indépendantes sont  $F_{1HH}(\pm k_{\parallel}^{HH})$  et  $F_{2HH}(\pm k_{\parallel}^{HH})$  pour les trous lourds et  $F_{1LH}(\pm k_{\parallel}^{LH})$  et  $F_{2LH}(\pm k_{\parallel}^{LH})$  pour les trous légers.



Les valeurs propres du hamiltonien  $H^U$  pour les trous lourds sont :

$$\bar{E} = P - \left[ (Q + \zeta)^2 + \tilde{R}\tilde{R}^* \right]^{1/2} \quad (\text{IV.7})$$

$$\zeta = \frac{1}{2} \delta E_{sh} \quad (\text{IV.8})$$

avec :

$$\delta E_{sh} = -2b \left| 1 + \frac{C_{12}}{C_{11}} \right| \varepsilon_{xx} \quad (\text{IV.9})$$

$\delta E_{sh}$  est l'énergie de cisaillement.

pour les trous  $\bar{E} = -E$ .

Et leurs vecteurs propres sont :

$$\begin{pmatrix} F_{1HH} \\ F_{2HH} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -(Q + \zeta) + \left[ (Q + \zeta)^2 + \tilde{R}\tilde{R}^* \right]^{1/2} \\ -\tilde{R}^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} P - (Q + \zeta) - \bar{E} \\ -\tilde{R}^* \end{pmatrix} \quad (\text{IV.10})$$

Pour les trous légers, les valeurs propres du Hamiltonien  $H^U$  sont les suivant:

$$\bar{E} = P + \left[ (Q + \zeta)^2 + \tilde{R}\tilde{R}^* \right]^{1/2} \quad (\text{IV.11})$$

Et leurs vecteurs propres sont :

$$\begin{pmatrix} F_{1LH} \\ F_{2LH} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \tilde{R} \\ -(Q + \zeta) + \left[ (Q + \zeta)^2 + \tilde{R}\tilde{R}^* \right]^{1/2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \tilde{R} \\ \bar{E} - P - (Q + \zeta) \end{pmatrix} \quad (\text{IV.12})$$

Ainsi les fonctions d'ondes après normalisation pour les trous lourds, s'écrivent comme suit dans les bases notées  $|1\rangle$  et  $|2\rangle$ :

$$\Psi_{HH}(r) = F_{1HH} e^{ik \cdot r} |1\rangle + F_{2HH} e^{ik \cdot r} |2\rangle \quad (\text{IV.13})$$

et pour les trous légers :

$$\Psi_{LH}(r) = F_{1LH} e^{ik \cdot r} |1\rangle + F_{2LH} e^{ik \cdot r} |2\rangle. \quad (\text{IV.14})$$

Par la même procédure nous pouvons écrire les fonctions d'ondes des trous lourds et trous légers pour le Hamiltonien inférieur ( $H^L$ ), en utilisant d'autres bases, notées  $|3\rangle$  et  $|4\rangle$ .

D'après la propriété d'invariance translationnelle dans le plan x-y,  $k_x$  et  $k_y$  doivent être les mêmes dans le puits et la barrière et  $k_z$  doit être différent.

Dans chaque zone du puits, nous avons :

$$\begin{aligned} \bar{E} - V_h(z) &= P \pm \left[ (Q + \zeta)^2 + \tilde{R}\tilde{R}^* \right]^{1/2} \\ &= A(k_{//}^2 + k_z^2) \pm \left[ B^2(k_{//}^2 + k_z^2)^2 + C^2(k_x^2 k_y^2 + k_z^2 k_y^2 + k_x^2 k_z^2 + B\zeta(k_{//}^2 - 2k_z^2) + \zeta^2) \right]^{1/2} \end{aligned} \quad (\text{IV.15})$$

avec :

$$k_{//}^2 = k_x^2 + k_y^2$$

Les paramètres A, B et C dépendent du matériau, et s'écrivent comme suit :

$$A = \frac{\hbar^2 \gamma_1}{2m_0}, \quad B = 2 \left( \frac{\hbar^2 \gamma_2}{2m_0} \right) \quad \text{et} \quad C = \frac{\hbar^2}{2m_0} \sqrt{12(\gamma_3^2 - \gamma_2^2)} \quad (\text{IV.16})$$

De la relation (IV.15), nous pouvons exprimer  $k_z$  en fonction de E et  $k_{//}$  comme suit :

$$k_z^2 = \frac{1}{(A^2 - B^2)} \left\{ \pm \left[ \begin{aligned} & A(\bar{E} - V) - \left[ A^2 - B^2 - \frac{C^2}{2} \right] k_{//}^2 - B\zeta \\ & B^2(\bar{E} - V)^2 + AC^2 k_{//}^2 (\bar{E} - V) - C^2 \left[ A^2 - B^2 - \frac{C^2}{4} \right] k_{//}^4 + C^2 (A^2 - B^2) k_x^2 k_y^2 \\ & - B\zeta [2A(\bar{E} - V) - 3(A^2 - B^2) k_{//}^2 + C^2 k_{//}^2] + A^2 \zeta \end{aligned} \right]^{1/2} \right\} \quad (\text{IV.17})$$

Le signe (+) dans la relation (IV.17) désigne les trous lourds et le signe (-) désigne les trous légers.

Donc nous pouvons noter  $k_z$  dans la zone (j) (voir figure IV.1) par  $k_{jz}^{(HH)}$  pour les trous lourds et  $k_{jz}^{(LH)}$  pour les trous légers.

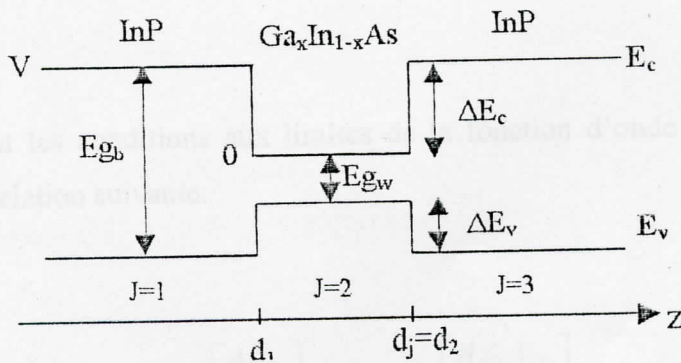


Figure IV.1: Diagramme d'énergie décrivant les zones du puits quantique de l'hétérostructure  $Ga_xIn_{1-x}As/InP$

La fonction d'onde dans chaque zone (j) est une combinaison linéaire des ondes planes, et s'écrit comme suit :

$$\begin{aligned} \Psi^j(\mathbf{r}) &= \Psi_{HH}^j(\mathbf{r}) + \Psi_{LH}^j(\mathbf{r}) \\ &= A_{HHj} \begin{pmatrix} F_{1HH}^j \\ F_{2HH}^j \end{pmatrix} e^{ik_{//}\rho + ik_{jz}^{(HH)}(z-d_j)} + A_{LHj} \begin{pmatrix} F_{1LH}^j \\ F_{2LH}^j \end{pmatrix} e^{ik_{//}\rho + ik_{jz}^{(LH)}(z-d_j)} + \\ &\quad B_{HHj} \begin{pmatrix} F_{1HH}^{j-} \\ F_{2HH}^{j-} \end{pmatrix} e^{ik_{//}\rho - ik_{jz}^{(HH)}(z-d_j)} + B_{LHj} \begin{pmatrix} F_{1LH}^{j-} \\ F_{2LH}^{j-} \end{pmatrix} e^{ik_{//}\rho - ik_{jz}^{(LH)}(z-d_j)} \end{aligned} \quad (\text{IV.18})$$

Le signe (-) dans les termes  $F_{1HH}^{j-}$  et  $F_{2HH}^{j-}$  indique le remplacement de  $k_{jz}^{(HH)}$  par  $-k_{jz}^{(HH)}$ , il est de même pour  $F_{1LH}^{j-}$  et  $F_{2LH}^{j-}$  des trous légers.

Les conditions aux limites sont telles que la fonction enveloppe  $\begin{pmatrix} F_1 \\ F_2 \end{pmatrix}$  est continue aux interfaces ainsi que la densité de courant:

$$\begin{bmatrix} \frac{\hbar^2}{2m_0}(\gamma_1 - 2\gamma_2) \frac{\partial}{\partial z} & \sqrt{3} \frac{\hbar^2 \gamma_3}{2m_0} k_x \\ -\sqrt{3} \frac{\hbar^2 \gamma_3}{2m_0} k_x & \frac{\hbar^2}{2m_0}(\gamma_1 + 2\gamma_2) \frac{\partial}{\partial z} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} F_1 \\ F_2 \end{bmatrix} \quad (\text{IV.19})$$

En appliquant les conditions aux limites de la fonction d'onde dans chaque zone, nous obtenons la relation suivante:

$$M_j \begin{bmatrix} A_{HHj} \\ A_{LHj} \\ B_{HHj} \\ B_{LHj} \end{bmatrix} = M_{j+1} P_{j+1} \begin{bmatrix} A_{HH(j+1)} \\ A_{LH(j+1)} \\ B_{HH(j+1)} \\ B_{LH(j+1)} \end{bmatrix} \quad (\text{IV.20})$$

avec  $M_j$  la matrice accordant ces conditions, elle s'écrit comme suit :

$$M_j = \begin{vmatrix} F_{1HH}^j & F_{1LH}^j & F_{1HH}^{j-} & F_{1LH}^{j-} \\ F_{2HH}^j & F_{2LH}^j & F_{2HH}^{j-} & F_{2LH}^{j-} \\ iu_j k_{jz}^{HH} F_{1HH}^j + v_j F_{2HH}^j & iu_j k_{jz}^{LH} F_{1LH}^j + v_j F_{2LH}^j & -iu_j k_{jz}^{HH} F_{1HH}^{j-} + v_j F_{2HH}^{j-} & -iu_j k_{jz}^{LH} F_{1LH}^{j-} + v_j F_{2LH}^{j-} \\ -v_j F_{1HH}^j + iw_j k_{jz}^{HH} F_{2HH}^j & -v_j F_{1LH}^j + iw_j k_{jz}^{LH} F_{2LH}^j & -v_j F_{1HH}^{j-} - iw_j k_{jz}^{HH} F_{2HH}^{j-} & -v_j F_{1LH}^{j-} - iw_j k_{jz}^{LH} F_{2LH}^{j-} \end{vmatrix} \quad (IV.21)$$

avec :

$$U = \frac{\hbar^2}{2m_0} (\gamma_1 - 2\gamma_2), \quad V = \frac{\sqrt{3}\hbar^2}{2m_0} \gamma_3 k_{//}, \quad W = \frac{\hbar^2}{2m_0} (\gamma_1 + 2\gamma_2)$$

$P_j$  est la matrice de la propagation diagonale.

$$P_j = \begin{vmatrix} e^{-ik_{jz}^{(HH)} l_j} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & e^{-ik_{jz}^{(LH)} l_j} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{ik_{jz}^{(HH)} l_j} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{ik_{jz}^{(LH)} l_j} \end{vmatrix} \quad (IV.22)$$

avec  $l_j$  est la largeur de la zone  $j$  :

$$l_j = d_j - d_{j-1}$$

Les éléments  $A_{HHH}$ ,  $A_{LHH}$  s'annulent pour  $z \rightarrow \infty$ , et  $B_{HHB}$  et  $B_{LHB}$  s'annulent pour  $z \rightarrow -\infty$ , ainsi nous obtenons la relation suivante:

$$\begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ B_{HH1} \\ B_{LH1} \end{bmatrix} = U \begin{bmatrix} A_{HH3} \\ A_{LH3} \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (\text{IV.23})$$

U : la matrice de transfert, s'écrit comme suit :

$$U = (M_1^{-1} M_2 P_2) (M_2^{-1} M_3 P_3) \quad (\text{IV.24})$$

$$U = \begin{bmatrix} u_1 & u_2 \\ u_3 & u_4 \end{bmatrix} \quad (\text{IV.25})$$

Les sous matrices  $u_1$ ,  $u_2$ ,  $u_3$  et  $u_4$  sont de dimension  $2 \times 2$ .

Les valeurs propres E sont obtenus en annulant le déterminant de la sous matrice  $u_1$ , c'est à dire :

$$\det |u_1| = 0 \quad (\text{IV.26})$$

Il est plus convenable de prendre la valeur absolue du  $\det |u_1|$  et chercher le minimum de E sur l'intervalle des énergies de  $[0, \Delta E_v]$  pour chaque vecteur d'onde  $k_{//}$ .

Les résultats obtenus pour le cas accordé sont montrés en figure IV.1.

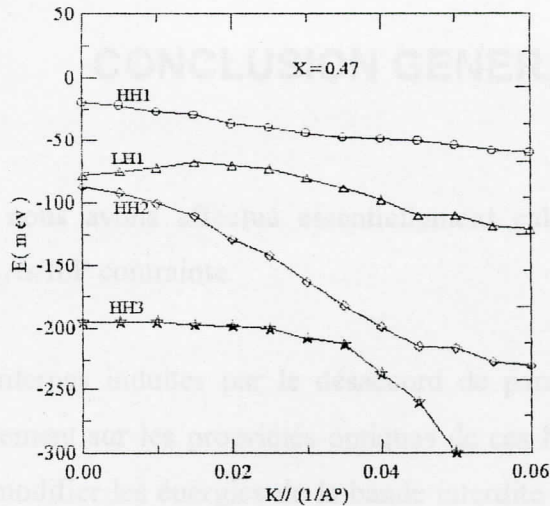


Figure IV.2 :

Les sous bandes d'énergie de l'hétérostructure  $Ga_xIn_{1-x}As/InP$  dans le plan de couche pour une largeur du puits  $L=60\text{\AA}$ .

Les résultats représentés en figure IV.2 sont en bons accords avec celles donnés par [85].

Pour le cas  $k_{//}=0$ , les états trous lourds, et trous légers sont découplés, donc les énergies en ce point sont prise à partir du chapitre III (calcul des énergies de confinements des porteurs).

Nous remarquons à partir de la figure IV.2 les points suivant :

- La première sous bande des énergies est celle des trous lourds.
- Une lente variation des énergies de dispersion au centre de la zone de Brillouin, alors que cette variation deviennent plus importante pour les plus hautes bandes et pour les grandes valeurs des vecteurs d'ondes.

## CONCLUSION GENERALE

Dans ce travail nous avons effectué essentiellement calcul des énergies de confinement de l'hétérostructure  $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}/\text{InP}$  contrainte.

Les contraintes internes induites par le désaccord de paramètre de maille entre les matériaux constituants influent fortement sur les propriétés optiques de ces hétérostructures. Les effets principaux des contraintes sont de modifier les énergies de la bande interdite des constituants contraints et de lever la dégénérescence de leur bande de valence. Ces changements dans la structure de bande provoquent le déplacement en énergies des transitions optiques inter sous-bandes

Le confinement des électrons et des trous a été calculé par un modèle simple (modèle parabolique) ainsi que la dispersion des porteurs dans la direction de croissance dont lequel le couplage entre la bande de valence et la bande spin-orbite n'est pas pris en considération et par un modèle à deux bandes (interaction  $\Gamma_{81}$  et  $\Gamma_7$ ).

Un calcul correct du courant de seuil dans des lasers à puits quantique contraint exige un traitement physique correcte de la bande de valence donc un modèle plus élaboré.

Ce travail montre que l'influence de la bande spin-orbite provoque une diminution des énergies de confinement des états des trous légers pour de faible largeur du puits  $L_z \leq 30 \text{ \AA}$ . Nous avons également montré que l'interaction  $kp$  entre les bandes entraîne la non parabolicité de bandes.

Nous avons aussi utilisé le modèle à trois bandes qui prend en compte l'interaction entre bande de conduction, la bande des trous légers et celle du spin-orbite pour améliorer les énergies de confinement des porteurs. Ce modèle apporte une bonne correction des confinements, car nous avons pu comparer les énergies de recombinaison calculées par ce modèle avec les résultats expérimentaux donnés par photoluminescence.



Annexe A

Nous avons pu voir que pour les faibles largeurs du puits  $L < 30 \text{ \AA}$  ce modèle n'est plus valable et est remplacé par le modèle à deux bandes cité ci dessus.

Nous avons également étudié la dispersion des particules trous lourds et trous légers dans le plan de la couche en utilisant la méthode de la matrice de transfert.

Ce modeste travail a donné des résultats intéressants sur le confinement du porteur dans les hétérostructures  $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}/\text{InP}$  ainsi que sur la dispersion de leur énergies. Une continuation souhaitable de ce travail pourrait affiner les résultats en tenant compte des excitons et en calculant la dispersion pour le cas contraint.

## Annexe A

### La FONCTION ENVELOPPE

La description de l'approximation de la fonction enveloppe dans le cadre général d'un semi-conducteur dans lequel règne, en plus du potentiel  $V_c(r)$  du réseau cristallin, un potentiel  $v(r)$  lentement variant par rapport à la maille cristalline.

On considère donc un potentiel  $v(r)$  présentant une variation lente en fonction de  $(r)$ , l'hamiltonien de l'électron dans cette combinaison de potentiel s'écrit :

$$H = \frac{p^2}{2m_0} + V_c(r) + V(r) \quad (1)$$

Pour  $V(r)=0$ . Les solutions de l'équation de Schrodinger, sont des ondes de Bloch  $|n,k\rangle$  ;

$$\psi_{nk}(r) = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} e^{ikr} U_{nk}(r) \quad (2)$$

avec :

$\Omega$  : le volume du cristal.

$N$  : désigne la bande.

$U_{nk}(r)$  : la périodicité du réseau cristallin, et l'énergie correspondante est  $\epsilon_{nk}$ .

Pour  $V \neq 0$ , le développement des solutions de l'équation de Shrodinger (1) sur cette base de fonction de Bloch selon :

$$\psi(r) = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \sum_{nk} a_{nk} e^{ikr} U_{nk}(r) \quad (3)$$

qui doivent satisfaire l'équation suivante :

$$\left[ \frac{p^2}{2m_0} + V_c(r) \right] \sum_{nk} a_{nk} e^{ikr} U_{nk}(r) + \sum_{nk} V(r) a_{nk} e^{ikr} U_{nk}(r) = E \sum_{nk} a_{nk} e^{ikr} U_{nk}(r) \quad (4)$$

aque onde de Bloch étant une solution du problème:

la dernière expression peut alors s'écrire :

$$\sum_{nk} E_{nk} a_{nk} e^{ikr} U_{nk}(r) + \sum_{nk} V(r) a_{nk} e^{ikr} U_{nk}(r) = E \sum_{nk} a_{nk} e^{ikr} U_{nk}(r) \quad (5)$$

projetant alors cette expression sur une onde :

$$|Nk\rangle = \Omega^{-1/2} e^{ikr} U_{Nk}(r) \quad (6)$$

utilisant l'orthogonalité des ondes de Bloch, nous obtenons une expression équivalente de l'équation de Schrödinger :

$$a_{nk} \int_{\Omega} e^{-ikr} U_{Nk}^*(r) V(r) e^{ikr} U_{nk}(r) dr = (E - E_{Nk}) a_{Nk} \quad (7)$$

$V(r)$  étant constant, le terme de gauche de l'équation (7) serait une transformée de Fourier d'une quantité  $U_{nk}(r)$ , et  $U_{Nk}(r)$  ne dépendant que du cristal.

Nous utilisons donc le fait que, le potentiel  $V(r)$  étant lentement variable, sa transformée de Fourier  $V_q$  est définie par :

$$V(r) = \sum_q \bar{V}_q e^{iqr} \text{ avec } \bar{V}_q = \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} V(r) e^{-iqr} dr. \quad (8)$$

est nulle sauf pour des valeurs de  $(q)$  très petites par rapport au rayon de la zone de Brillouine.

Reportant la transformée (8) dans l'équation (7), on voit apparaître le terme :

$$\sum_{nkq} a_{nk} \frac{\bar{V}_q}{\Omega} \int_{\Omega} e^{i(k+q-K)r} U_{Nk}^* U_{nk}(r) dr \quad (9)$$

qui serait majoritairement nul si  $V$  était constant. Puisque les fonctions  $U_{Nk}$  et  $U_{nk}$  sont périodiques,

nous pouvons poser  $r = R_i + r'$  ou  $R_i$  désigne la position de la cellule  $i$ , et  $r'$  est restreint au volume d'une cellule élémentaire, qui mène à la somme sur  $i$  suivant :

$$\begin{aligned} \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} e^{i(k+q+K)r} U_{NK}^*(r) U_{nk}(r) dr &= \frac{1}{\Omega} \sum_i e^{i(k+q-K)R_i} \int_{cell} e^{i(k+q-K)r'} U_{NK}^*(r') U_{nk}(r') dr' \\ &= \Delta_{k+q-K} \frac{1}{\Omega_{cell}} \int_{cell} U_{NK}^*(r') U_{nk+q}(r') dr' \end{aligned} \quad (10)$$

où  $\sum_{cell}$  désigne l'intégration sur une cellule élémentaire, et  $\Delta_k$  est le symbole de Kronecker.

Nous utiliserons le fait que seules les petites valeurs de  $(q)$  contribuent au potentiel, pour développer l'intégrale de recouvrement des parties périodiques des ondes de Bloch selon  $q$ , soit :

$$\begin{aligned} \frac{1}{\Omega_{cell}} \int_{cell} U_{NK}^*(r') U_{n,k+q}(r') &= \frac{1}{\Omega_{cell}} \int_{cell} U_{NK}^*(r') U_{nk}(r') dr' + \frac{1}{\Omega_{cell}} \int_{cell} U_{NK}^*(r') q \nabla_k U_{nk}(r') dr' + .. \\ &\cong \Delta_{nk} + \frac{1}{\Omega_{cell}} q \int_{cell} U_{NK}^*(r') \nabla_k U_{nk}(r') dr' \end{aligned} \quad (11)$$

L'orthogonalité pour le même vecteur d'onde  $k$  des fonctions  $U_{NK}$  et  $U_{nk}$  provient de l'orthogonalité des ondes de Bloch pour des états différents.

L'approximation la plus simple est maintenant de ne retenir que le premier terme ce qui permet de découpler les différentes bandes dans l'équation de Schrodinger (7). Compte tenu de (10) et (11), cette équation de Schrodinger dans l'espace réciproque prend la forme :

$$E_{NK} a_{NK} + \sum_q a_{NK+q} \tilde{V}_q = E a_{NK} \quad (12)$$

En introduisant la fonction enveloppe :

$$f_N(r) = \sum_k a_{NK} e^{ikr} \quad (13)$$

## ANNEXE B

## Loi de VEGARD et tableau de paramètres Physiques

## Loi de VEGARD :

Pour le calcul des paramètres physiques des matériaux ternaires de la forme  $A_xB_{1-x}C$  constitués des binaires III-V, nous avons utilisé la loi de Vegard [1]. D'où les paramètres en fonction de x sont estimés par interpolation linéaire, et s'écrivent comme suit :

$$T_{ABC}(x) = x * B_{AB} + (1-x) * B_{AC}$$

avec :

AB : le binaire GaAs.

AC : le binaire InAs.

Dans notre cas x représente la concentration du Gallium.

Les paramètres physiques utilisés sont représentés dans le tableau suivant :

Tableau de paramètres physique:

	GaAs	InAs	InP
$\alpha$ ( $A^\circ$ )	5.6533	6.0584	5.8686
$C_{11}$ ( $10^{11} \text{ dyn/cm}^2$ )	11.88	8.329	10.22
$C_{12}$ ( $10^{11} \text{ dyn/cm}^2$ )	5.38	4.526	5.76
$\chi$ (ev)	-1.7	-1.8	-2.0
$\Delta_0$ (ev)	0.34	0.38	0.11
$E_g$ (ev)	1.52	0.41	1.42
$E_{v,av}$ (ev)	-6.92	-6.67	-7.04
$\chi_v$ (ev)	1.16	1.00	1.27
$\chi_c$ (ev)	-7.17	-5.03	-5.04
$m_{hh}$ ( $m_0$ )	0.45	0.41	0.56
$m_{lh}$ ( $m_0$ )	0.082	0.025	0.12
$m_c$ ( $m_0$ )	0.067	0.023	0.080
$m_{so}$ ( $m_0$ )	0.143	0.048	0.197
$\tau_1$	6.85	19.67	4.95
$\tau_2$	2.10	8.37	1.65
$\tau_3$	2.90	9.29	2.35

[1] :MPC M Krinjin

Semicond.Sci.Technol, 6(1991) 27-31,P27.

## ANNEXE C

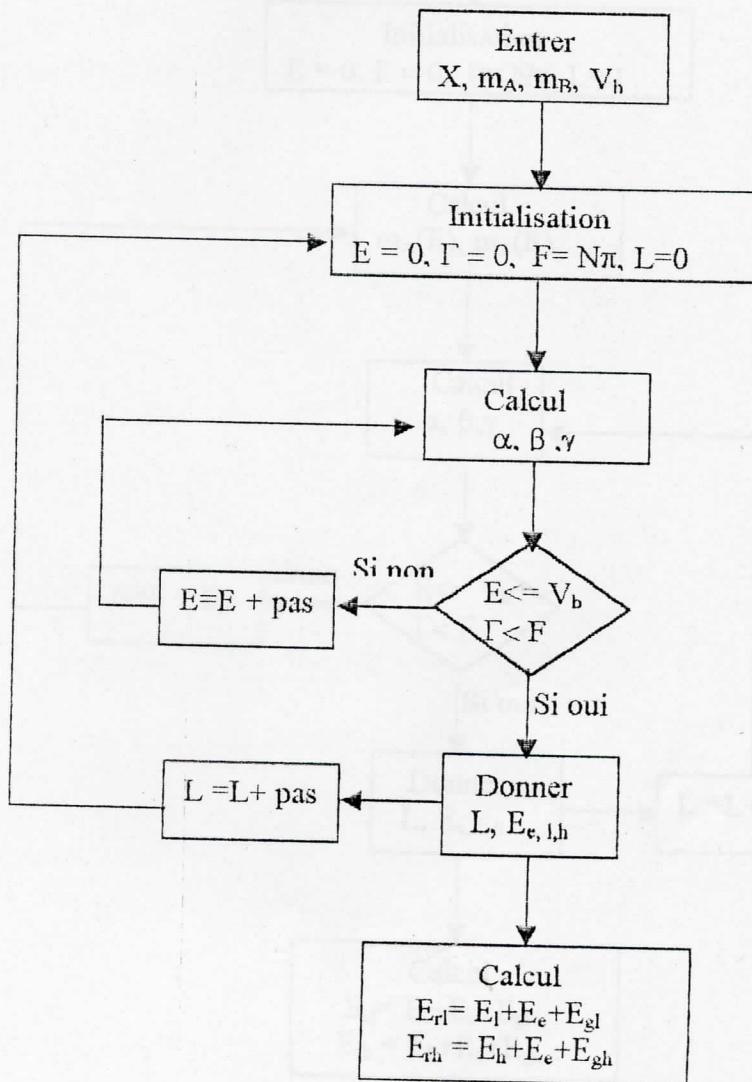
Organigramme de calcul du confinement des porteurs  
et energies de recombinaison  
Du modèle à une bande

$$\frac{L}{h} \sqrt{2m_A E} = 2 \text{Arctg} \sqrt{\frac{m_B E}{m_A (V_b - E)}} + n\pi$$

Le but est de calculer  $E = f(L)$  par la méthode à balayage :

C'est à dire on balayant l'intervalle des énergies  $E[0, V_b]$  et celle des largeurs du puits  $L[0, L_b]$

$$\alpha = \sqrt{2m_A E} \frac{L}{h}, \quad \beta = \sqrt{\frac{m_B E}{m_A (V_b - E)}}, \quad \gamma = 2 \text{Arctg} \sqrt{\frac{m_B E}{m_A (V_b - E)}}, \quad \Gamma = \alpha - \gamma, \quad F = N\pi$$

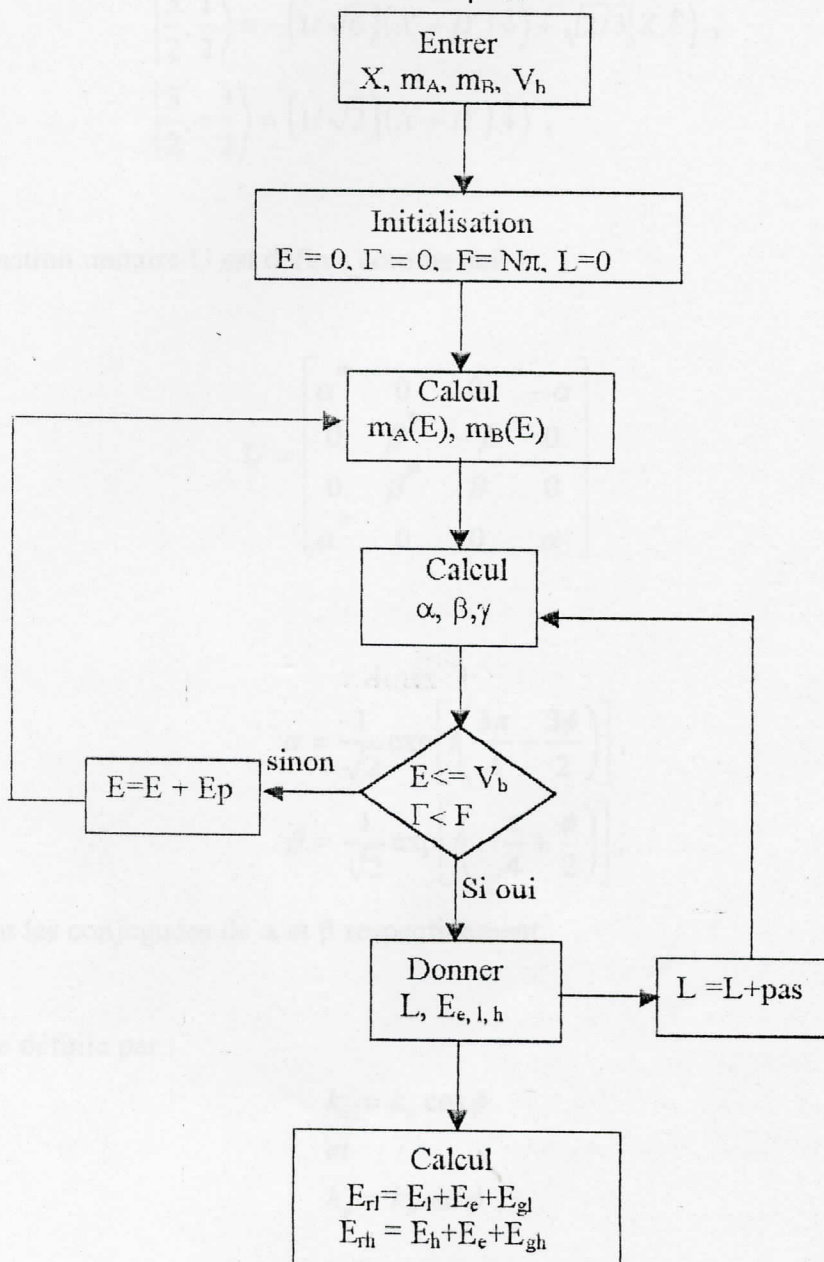


## ANNEXE D

**Organigramme de calcul du confinement des porteurs  
et energies de recombinaison  
Du modèle à deux bandes et à trois bandes**

Pour le modèle à 2 bandes et à 3 bandes la masse effective dépende de l'énergie:  $m_A(E) = m_A \cdot f(E)$   
et  $m_B(E) = m_B \cdot f(E)$ .  
la procedure de programmation est la suivante :

$$\frac{L}{h} \sqrt{2m_A(E) \cdot E} = 2 \text{Arctg} \sqrt{\frac{m_B(E)}{m_A(E)(V_b - E)}} + n\pi$$



## Annexe E

## La transformation unitaire

Le hamiltonien H4X4 écrit dans la base  $|J, m_J\rangle$  suivante:

$$\begin{aligned}
 \left| \frac{3}{2}, \frac{3}{2} \right\rangle &= -\left(1/\sqrt{2}\right)(X + iY) \uparrow, \\
 \left| \frac{3}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle &= -\left(1/\sqrt{6}\right)(X - iY) \uparrow + \sqrt{2/3} |Z \downarrow\rangle, \\
 \left| \frac{3}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle &= -\left(1/\sqrt{6}\right)(X + iY) \downarrow + \sqrt{2/3} |Z \uparrow\rangle, \\
 \left| \frac{3}{2}, -\frac{3}{2} \right\rangle &= \left(1/\sqrt{2}\right)(X - iY) \downarrow,
 \end{aligned}
 \tag{1}$$

La transformation unitaire U est définis comme suit :

$$U = \begin{bmatrix} \alpha^* & 0 & 0 & -\alpha \\ 0 & \beta^* & -\beta & 0 \\ 0 & \beta^* & \beta & 0 \\ \alpha^* & 0 & 0 & \alpha \end{bmatrix}
 \tag{2}$$

avec :

$$\begin{aligned}
 \alpha &= \frac{1}{\sqrt{2}} \exp \left[ i \left( \frac{3\pi}{4} - \frac{3\phi}{2} \right) \right], \\
 \beta &= \frac{1}{\sqrt{2}} \exp \left[ i \left( -\frac{\pi}{4} + \frac{\phi}{2} \right) \right],
 \end{aligned}
 \tag{3}$$

$\alpha^*$  et  $\beta^*$  sont les conjuguées de  $\alpha$  et  $\beta$  respectivement.

$\phi$  est l'angle définie par :

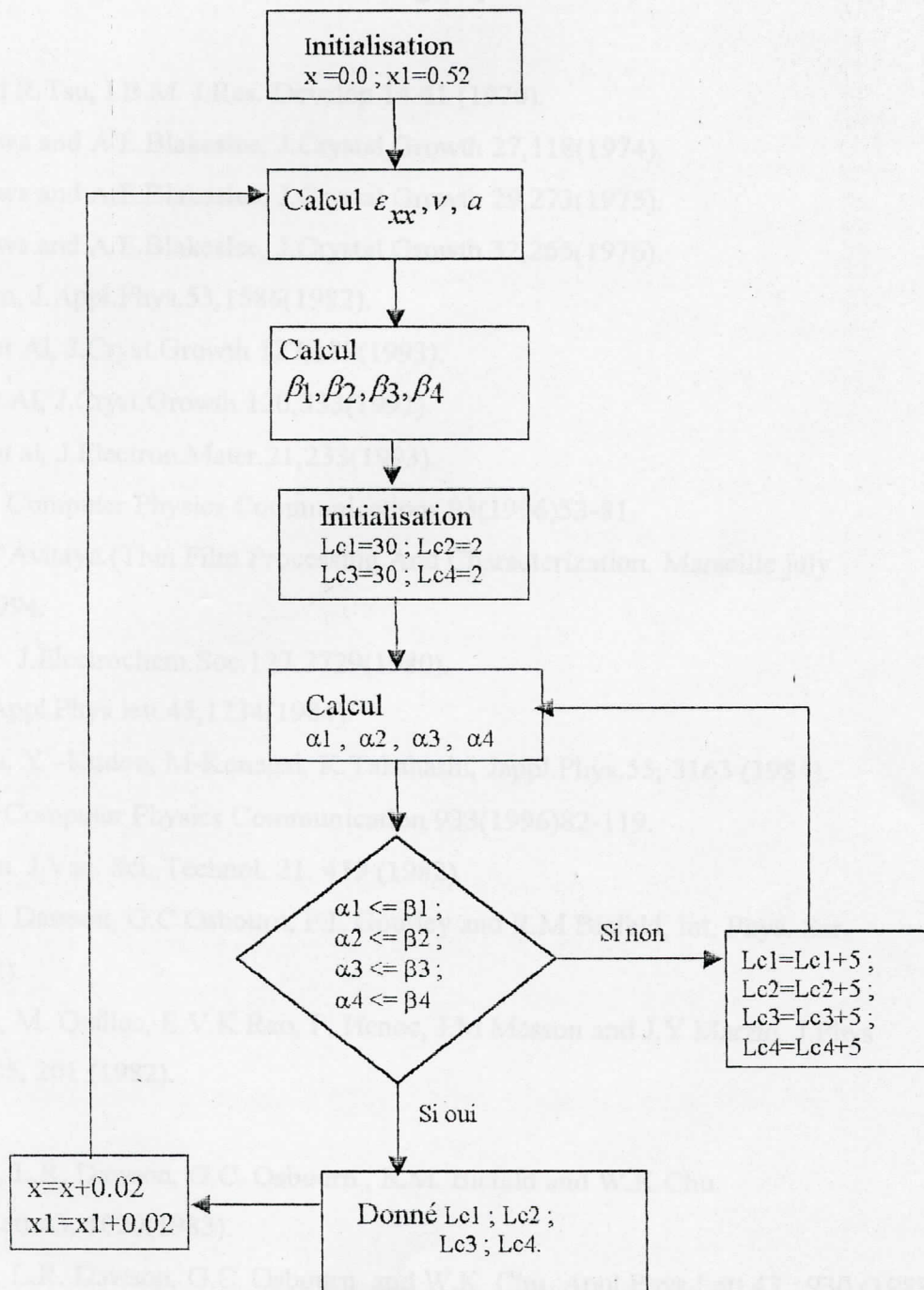
$$\begin{aligned}
 k_x &= k_{\parallel} \cos \phi \\
 \text{et} \\
 k_y &= k_{\parallel} \sin \phi
 \end{aligned}
 \tag{4}$$



et la nouvelle base est donnée comme suit :

$$\begin{aligned}
 |1\rangle &= \alpha \left| \frac{3}{2}, \frac{3}{2} \right\rangle - \alpha^* \left| \frac{3}{2}, -\frac{3}{2} \right\rangle, \\
 |2\rangle &= \beta \left| \frac{3}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle - \beta^* \left| \frac{3}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle, \\
 |3\rangle &= \beta \left| \frac{3}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle + \beta^* \left| \frac{3}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle, \\
 |4\rangle &= \alpha \left| \frac{3}{2}, \frac{3}{2} \right\rangle + \alpha^* \left| \frac{3}{2}, -\frac{3}{2} \right\rangle,
 \end{aligned} \tag{5}$$

## L'Organigramme

Remarque :

Les logiciels de programmation utilisés dans ce travail sont :

- Le BORLANDC 3.1
- Le BORLANDC++ 4.5
- Le MATHCAD 2000

## Bibliographie

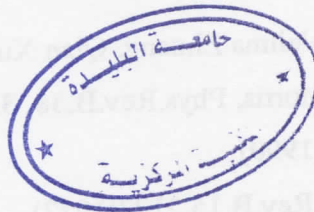
- [1] : L. Esaki and R.Tsu, I.B.M J.Res. Develop 14 61 (1970).
- [2] : J.W.Matthews and A.E.Blakeslee, J.Crystal Growth 27,118(1974).
- [3] : J.W.Matthews and A.E.Blakeslee, J.Crystal Growth 29,273(1975).
- [4] : J.W.Matthews and A.E.Blakeslee, J.Crystal Growth 32,265(1976).
- [5] : G.C.Osourn, J.Appl.Phys.53,1586(1982).
- [6] : A.Antolini et Al, J.Cryst.Growth 127,189(1993).
- [7] : F.Genova et Al, J.Cryst.Growth 120,333(1992).
- [8] : A.Antolini et al, J.Electron.Mater.21,233(1993).
- [9] : C.Lamberti. Computer Physics Communications 93(1996)53-81.
- [10] : F.Arnaud D'Avitaya.(Thin Film Processing And Characterization. Marseille july 18-29 :1994.
- [11] : M.B.Panish, J.Electrochem.Soc.127.2729(1980).
- [12] : W.T.Tsan, Appl.Phys.lett.45,1234(1984).
- [13] : E.Tokumitsu, Y -Kudou, M-Konagai, K.Takahashi, Jappl.Phys.55, 3163 (1984).
- [14] : C.Lamberti, Computer Physics Communication 933(1996)82-119.
- [15] : G.C Osourn, J.Vac. Sci. Technol. 21. 459 (1982).
- [16] : I.J Fritz, L.R Dawson, G.C Osourn, P.L Gourley and R.M Biefeld, Int. Phys. Ser. 65 241(1982).
- [17] : L. Goldstein, M. Quillec, E.V.K Rao, P. Henoc, J.M Masson and J.Y Marzin, J.Phys (Paris) 12, C5, 201 (1982).
- [18] : S.T Picraux , L.R. Dawson, G.C. Osourn , R.M. Biefeld and W.K.Chu. Appl.Phys.Lett.43, 1020(1983).
- [19] : S.T. Picraux, L.R. Dawson, G.C. Osourn and W.K. Chu. Appl.Phys.Lett.43 , 930 (1983).
- [20] : I.J Fritz, L.R. Dawson and T.E Zipperian, Appl. Phys. Lett. 43, 846, (1983).
- [21] : I.J Fritz, S.T. Picraux, L.R. Dawson, T.J. Drummond, W.D. Laidig and N.G. Anderson , Appl. Phys. Lett, 46,967 (1985).
- [22] : W.K. Chu, C.K. Pan and C.A. Chang, Phys.Rev B28, 4033 (1983).

- [23] : W.D Laidig, J.W. Lee, P.K. Chiang, L.W. Simpson and S.M. Bedair,  
J.Appl Phys. 54. 6382 (1983).
- [24] : M.D. Camras, J.M. Brown, N. Holonyak, M.A. Nixon, R.W. Kalisky,  
M.J. Dietze. J. Appl. Phys 54, 6183 (1983).
- [25] : W.D. Laidig, D.K. Blanks and Scherzina, J Appl. Phys . 56. 1791(1984).
- [26] : W.D. Laidig, P.J. Caldwell, Y.F. Lin and C.K. Peng, Appl. Phys. Lett. 43.560 (1983).
- [27] : W.D. Laidig, P.J. Caldwell and Y.F. Lin, J. Appl. Phys. 57. 33(1985).
- [28] : D.R. Myers, T.E. Zipperian, R.M. Biefeld and J.J. Wiczer, Proc IEEE. Electr. Dev.  
Meet, p.700(1983).
- [29] : L.R. Dawson, J.C. Osbourn, T.E. Zipperia, j.j. Wiczer, C.E. Barnes, I.J.Fritz and  
R.M. Feld , J. Vac. Sci. Technol, B 2, 179 (1984).
- [30] : T.E. Zipperian, L.R. Dawson, G.C. Osbourn and I.J. Fritz, Proc of IEEE Int.  
Devices Meet, p 696 (1983).
- [31] : Optical Properties of some III-V strained-Layer Superlattices.  
J.Y.Marzin and J.M.Gérard.  
Superlattices and Microstructures V5 N°1, 51(1989).
- [32] : G.Zhang, A.Ovtchinnikovf and M.Pessa, J.Crystal Growth 127(1993)209.
- [33] : C.Stark, J.-Y.Emeny, R.J.Simes, M.Matabon, L.Goldstein and J.Barrau, J.Crystal  
Growth 120(1992)180.  
\*Woo-Yong Choi and C.G.Fonstard, J.Crystal Growth 127(1993)555.  
\*K.Streubel, J.Wallin, G.Landgren, U.Öhlander, S.Lourdudoss and O.Kjebon, J.Crystal  
Growth 143(1994)7.
- [34] : C.P.Seltzer, S.D.Perrin, M.C.Tatham and D.M.Cooper , Electron.Lett 28(1992)63.  
\*J.Y.Emeny, C.Stark, L.Goldstein, A.Poncher and A.Rocher, J.Crystal  
Growth 127(1993)241.
- [35] : W.Gershoni, H.Temkin and M.B.Panish, Appl.Phys.Lett.63(1988)1294.
- [36] : Spectroscopy Of Excited States In  $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As} / \text{InP}$   
Single Quantum Wells Grown By Chemical-Beam Epitaxy.  
Phys.Rev B34(1986)9023-9026.
- [37] :  $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As} / \text{InP}$  Double Heterostructure-Emitter Bipolar Transistors.  
Solid State Electronic 1994.
- [38] : C.Herring, Phys.Rev.57,1169(1940).
- [39] : J.C.Phillips and L.Kleinman, Phys.Rev.116, 287(1959).

- [40] : Tomonori.ito, J.Appl.Phys.77(10), 4845(1995).
- [41] : Hohenberg and W.Kohn, Phys.Rev.136, B 864(1964).
- [42] : W.Kohn and L.J.Sham, Phys.Rev.140, B 1133(1965).
- [43] : G.Bastard, Wave Mechanics Applied To Semiconductor Heterostructures, les éditions de Physique, les Ulis, PP63-86 (1988).
- [44] : Lucio Claudio Andreani Pasquarello, and Franco Bassani. Phys.Rev B36 11(5887-5893). 15 october 1987.
- [45] : Electronique des semi-conducteurs, deuxième partie. P.Baranski et al. Edition Mir(1978).
- [46] : Frank.F.C and Van der Merwe.J.H 1949 Proc.R.Soc. A 198 216.
- [47] : J.W.Matthews and A.E.Blakeslee, J.Cryst.Growth 27,118 (1974).
- [49] : R.People and J.C.Bean, Appl.Phys.Lett, 47, 322(1985) ;49,229(1986).
- [50] : H.Temkin, D.G.Gershoni, S.N.G Chu, J.M.Vandenberg, R.A.Hammet et M.B.Panish, Appl.Phys.Lett 55(1989).
- [51] : Matthews J.W and Blakeslee.A..E. 1974.J.Cryst Growth 27 118 ; 1975 J.Crystal Growth 29 273 ; 1976 J.Crystal Growth 32 265.
- [52] : People R and Bean.J.C 1985. Appl.Phys. Lett.47 322.
- [53] : Voisin P 1988 Quantum Wells and superlattices in Optoelectronic Devices and Integrated Optics, SPIE vol.861( Bellingham WA : SPIE) p88.
- [54] : G.L.Bir and G.E.Pikus, Symmetry and Strain-Induced Effects in Semiconductors (Villey, New York, 1974).
- [55] : G.C.Osourn, J.Vac. Sci.Technol.B1 (1983)379.
- [56] : P.Voisin in two dimensional systems, Heterostructures and superlattices edited by G.Bauer, F.Kuchar and H.Heinrich, Spring Series in Solid State Sci.53 (springer Verlag, Berlin)1984, 9192.
- [57] : J.Y.Marzin in hétérostructure and Semiconductor Superlattices edited by G.Allan. G.Bastard.N.Boccara.M.Lannoo and M.Voos (Springer Verlag Berlin)1986, p161.
- [58] : J.N.Schulman and Yia-Chung Chang, Phys.Rev.B24(1981)4445 ; Phys.Rev.B31(1985)2056.
- [59] : Yia-Chung Chang and J.N.Schulman, J.Vac.Sci, Technol.21(1982)540.
- [60] : M.Jaros and K.B.Wong, J.Phys.C17(1984)L765.
- [61] : M.Jaros, K.B.Wong and M.A.Gell, Phys.Rev.B31(1985)1205.

- [62] : Emmanuel Rosencher, Borge Vinter, Optoélectronique; (Enseignement de la physique) Masson, Paris 1998.
- [63] : Thèse de doctorat d'état Es Sciences Physiques à l'université de Paris VII. Jean-Yves Marzin 1987.
- [64] : see, e.g., E.O.Kane in Physics of III-V Compounds, Volume 1, edited by R.K. Willardson and A.C. Beer (Academic Press, New York) 1966.
- [65] : E.O.Kane in Narrow Gap Semiconductors. Physics and Applications edited by W. Zawadzki, Lect. Notes Phys. Volume 133 (Springer Verlag, Berlin) 1980.
- [66] : S.R. White and L.J. Sham, Phys.Rev.Lett.47(1981)879.
- [67] : M. Altarelli, Phys.Rev.B28(1983)842 ;Physica 117&118B(1983)747.
- [68] : M.F.H. Schuurmans and G.W. 't Hooft, Phys.Rev.B31(1985)8041.
- [69] : G. Bastard, Phys. Rev. B24(1981)5693 ;Phys.Rev.B25(1982) 7584.
- [70] : G. Bastard and J.A. Brum in Quantum Well Structures, Physics and Applications, IEEE J. Quant. Electr. QE22(1986) 1625.
- [71] : C.G. Van de Walle, Ph.D, thesis, Stanford University, 1986(unpublished) ; Mater. Res. Soc. Symp. Proc. 102, 565(1988) ; C.G. Van de Walle and R.M. Martin, PHYS.Rev.B34,5621(1986) ;35,8154(1987). J. Vac. Sci. Technol. B6.1350(1988) ;S. Satpathy, R.M. Martin, and C.G. Van de Walle, Phys.Rev.B38,13237(1988).
- [72] : T.Y. Wang and G.B. Stringfellow. J. Appl. Phys. 67(1), (1990)344.
- [73] : G.E. Pikus and G.L. Bir, Sov. Phys. Solid State 1, 1502 (1960).
- [74] : F.H. Pollak and M. Cardona, Phys. Rev. 172, 816(1968) ;M. Chandrasekhar and F.H. Pollak, Phys. Rev. 15, 2127(1977).
- [75] : D.V. Lang, M.B. Panish, F. Capasso, J. Allem, R.A. Hamm, A.M. Sergent and W.T. Tsang, Appl. Phys. Lett, 50, 736(1987) ; J. Vac. Sci. Technol. B5, 1215(1987) ; R.E. Caviechi, D.V. Lang, D. Gershoni, A.M. Sergent, J.M. Vandenberg, S.N.G. Chu, and M.B. Panish, Appl. Phys. Lett, 54, 739(1989).
- [76] : S.R. Forrest, P.H. Schmidt, R.B. Wilson, and M.L. Kaplan, Appl. Phys. Lett. 45, 1199(1984).
- [77] : K.H. Goetz, D. Bunderg, H. Jurgenasen, J. Solders, A.V. Solomonov, G.F. Glinskii, and M. Razeghi, J. Appl. Phys, 54, 4543(1982).

- [78] : Bernard Gil, Pierre Lefevre, Philippe Boring, Karen J. Moore, Geoffrey Duggan, and Karl Woodbridge, *Phys. Rev. B.* 44, 1942 (1991).
- [79] : B. Gil, D. J. Howard, D. J. Dunstan, P. Boring and P. Lefevre, *Phys. Rev. B* 45, 3906 (1992).
- [80] : G. Ji, D. Huang, U. K. Reddy, T. S. Handerson, R. Hondre, and H. Morkoç, *J. Appl. Phys.* 62 (1987).
- [81] : S. H. Pan, H. Shen, Z. Hang, F. H. Pollak, Weilma Zhuang, Qian Xu, A. P. Roth, R. A. Masut, C. Lacelle, and D. Morris, *Phys. Rev. B.* 38, 3375 (1988).
- [82] : Thomas Bahder, *Phys. Rev. B.* 41, 11 992 (1990)
- [83] : M. Chandrasekhar and F. H. Pollak, *phys. Rev. B.* 15, 2127 (1977).
- [84] : Thèse de doctorat d'état de l'université Blaise Pascal 1994, Pierre Disseix.
- [85] : Calvin Yi-Ping Chao and Shun Lien Chuang, *Phys. Rev. B* 46 4110 (1992).
- [86] : Shun Lien Chung, *Phys. Rev. B* 43, 9649 (1991).
- [87] : D. Ahn, S. L. Chung and Y. -C. Chang, *J. Appl. Phys.* 64 (8) 4056 (1988).
- [88] : J. Los and A. Fasolino and A. Catellani, *Phys. Rev. B* 53 (8), 4630 (1996).
- [89] : L. Kripning and W. J. Penney, *Proc. R. Soc. London, Ser. A* 130, 499 (1930) ;  
R. Tsu and L. Esaki, *Appl. Phys. Lett.* 22, 562 (1973).
- [90] : J. A. Kong, *Electromagnetic Wave Theory* (Wiley, New York (1987)).



رقم الجرد ..... 20064  
رقم الفاتورة ..... 1  
التاريخ: 08.01.2017  
الأصل: Don