

50376
1986
115

N° d'ordre 686

50376
1986
115

THESE

présentée

à

l'Université des Sciences et Techniques de Lille

pour obtenir

LE GRADE DE DOCTEUR ES SCIENCES

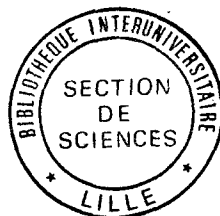
par

Catherine PRIESTER

Ingénieur ISEN

PROPRIETES ELECTRONIQUES DE PUIITS QUANTIQUES,
SUPERRESEAUX ET HETEROJONCTIONS DE SEMICONDUCTEURS

Soutenue le 9 Juin 1986, devant la commission d'examen :



Président : MM. SALMER
Rapporteurs : BASTARD
FARVACQUE
LANNOO
Examineurs : ALLAN
BENSOUSSAN
DUBOIS
TEJEDOR

*A René
Marie
François-Jean ...*

A ma famille

A Catherine et Marie

*Cette thèse a été préparée à L'INSTITUT SUPERIEUR
D'ELECTRONIQUE DU NORD qui a mis à ma disposition
L'infrastructure nécessaire à mes recherches.*

dans le cadre

*C'est au sein de l'U.A. 253 du CNRS (Laboratoire
d'Etude des Surfaces et interfaces), au sein de
l'équipe de Physique des Solides, que j'ai eu la
chance de pouvoir mener à bien ces recherches.*

*L'étude sur les hétérojonctions a été financée par
le C.N.E.T.*

J'exprime ma reconnaissance à Monsieur le Professeur G. SALMER qui a accepté la présidence de ce Jury.

Je remercie Messieurs les Professeurs ^HM. DUBOIS, J.L. FARVACQUE, et C. TEJEDOR pour leur participation au Jury.

Je remercie également Monsieur M. BENSOUSSAN, pour l'intérêt qu'il a porté à ce travail, et pour sa participation au Jury.

Monsieur G. BASTARD a suivi ce travail durant tout son déroulement. L'aide qu'il a apportée, les conseils qu'il a formulés, sa confiance et ses encouragements ont été très précieux et je l'en remercie chaleureusement.

Messieurs M. LANNOO et G. ALLAN ont assuré la direction de ces recherches, ont participé activement à toutes les phases de ce travail, m'aidant de leurs conseils et de leur soutien amical et constant. Je les en remercie vivement et les assure de ma reconnaissance.

Je suis également heureuse de remercier tous ceux sans lesquels ce travail n'aurait pu aboutir à son état actuel :

- les divers chercheurs avec lesquels j'ai pu avoir des échanges scientifiques,*
- les membres du laboratoire et le personnel de L'INSTITUT SUPERIEUR D'ELECTRONIQUE DU NORD, qui ont tous contribué à rendre agréable l'atmosphère dans laquelle j'ai travaillé,*

- les membres de ma famille qui m'ont plus d'une fois secondée dans mes activités extraprofessionnelles afin de me permettre de me consacrer plus longuement à mon travail.

De plus, je remercie sincèrement Madame M.T. LEMAN pour sa disponibilité et son amabilité constantes; j'ai tout particulièrement apprécié ces qualités pendant la période difficile où elle a dû réaliser la frappe de ce mémoire.

SOMMAIRE

INTRODUCTION	1
I. L'approximation de la masse effective	5
I.1. L'approximation de la masse effective à trois dimensions ..	6
I.2. Application au superréseau	9
I.3. Modèles existants	12
a) <i>Modèle de Bastard et ses dérivés</i>	12
b) <i>Calculs utilisant une base d'orbitales gaussiennes</i>	13
I.4. L'approximation de la masse effective bidimensionnelle	14
I.5. Conclusion	17
II. Etude d'une impureté hydrogénoïde dans un superréseau modélisé par un puits infiniment profond	18
II.1. Description du superréseau	19
a) <i>Définition</i>	19
b) <i>Influence de la traversée des barrières par effet tunnel</i>	21
II.2. Etude d'une impureté dans un puits étroit	23
II.3. Cas général : utilisation de l'approximation de la masse effective	25
a) <i>Puits constitué d'un faible nombre de plans</i>	25
b) <i>Puits constitué de N plans</i>	29 31
c) <i>Comparaison avec le modèle tridimensionnel de Bastard</i> ..	34
II.4. Application au calcul des états résonants	35
II.5. Conclusion	43

III. Etude d'une impureté hydrogéoïde dans un superréseau réaliste de type I	44
III.1. Impureté hydrogéoïde dans un puits de hauteur infinie sans saut de masse effective	45
III.2. Impureté hydrogéoïde dans un puits de hauteur infinie avec saut de masse effective	49 51
III.3. Effet d'un champ électrique sur l'énergie de liaison d'une impureté	56
a) <i>Introduction</i>	56
b) <i>Modèle</i>	57
c) <i>Résultats et discussion</i>	58
III.4. Conclusion	61
IV. Excitons de Wannier dans les structures à puits quantiques ...	63
IV.1. Notion d'exciton	64
IV.2. Energie de liaison d'excitons dans un puits quantique ..	67
IV.3. Conclusion	743
V. Structure électronique des superréseaux nipi silicium	72
V.1. Structure électronique d'un superréseau nipi AsGa	75
V.2. Structure électronique d'un superréseau nipi Silicium ..	82
V.3. Conclusion	90
VI. Structure électronique des hétérojonctions : étude de la discontinuité des bandes	91
VI.1. Introduction	92
VI.2. Interface Ge-GaAs °110\$	93
a) <i>Méthode de calcul</i>	93
b) <i>Résultats</i>	97
VI.3. Calcul de la charge par la méthode de décimation	100
a) <i>Méthode de décimation</i>	101
b) <i>Calcul de G dans le plan complexe</i>	102
c) <i>Application de la méthode</i>	103
VI.4. Conclusion et perspectives	103

CONCLUSION	107
REFERENCES	108/110
APPENDICES	
Appendice A1 : Conditions de raccordement pour la fonction enveloppe	115
Appendice A2 : Opérateur de Green et méthode de récursion ...	
A2.1 : Opérateur de Green, définition et propriétés	
A2.2: Méthode de récursion ou méthode des fractions continues	
Appendice A3 : Potentiel $U_n(\vec{r})$ dans un système composé de N plans, dans l'approximation des liaisons fortes	

INTRODUCTION

Le concept de superréseau est apparu en 1969. Le principe en est simple : en déposant successivement, par couches, des semiconducteurs différents, on obtient une structure "sandwich" dans laquelle les porteurs acquièrent des comportements bidimensionnels. L'étude de tels systèmes est devenue un sujet "chaud" depuis que la réalisation d'échantillons fiables a été possible grâce à l'épitaxie par jets moléculaires ou à l'épitaxie en phase vapeur de composés organométalliques. Les études expérimentales se sont alors multipliées (transport, absorption optique, luminescence, photoconductivité, diffusion Raman, effet Hall quantique) et de nouveaux composants ont vu le jour (lasers à puits quantiques, transistors bipolaires à hétérojonction, transistors à effet de champ à modulation de dopage..)

Quand nous avons entrepris ce travail (début 1982) les études théoriques étaient très rares et on en distinguait deux types : les calculs complets de structure électronique, applicables uniquement à des superréseaux de période très faible et des calculs dans l'approximation de la masse effective, qui modélisaient les superréseaux par des puits infiniment profonds et n'étaient pas adaptés aux couches de largeur très étroite. Les problèmes théoriques étaient nombreux : calcul des niveaux d'impureté et des niveaux excitoniques dans les structures à puits quantiques. Comment tenir compte de la possibilité de pénétration dans les barrières, comment prédire les discontinuités de bande aux interfaces, trouver un modèle capable de décrire le comportement électronique des puits quantiques très étroits ? Comment décrire simplement l' "effet superréseau" (quand il y a possibilité, pour les porteurs, de transiter d'un puits à l'autre par effet tunnel), trouver les domaines de validité des modèles utilisés, etc ...? Certaines de ces questions sont à l'heure actuelle résolues, d'autres sont encore à résoudre. Ce travail a pour but d'apporter une contribution à

l'étude théorique des dispositifs à puits quantiques et hétérojonctions.

Ces dispositifs étant principalement à caractère bidimensionnel, et souvent décrits dans l'approximation de la masse effective, il nous a paru important (cela fera l'objet du premier chapitre de ce rapport) d'étudier l'approximation de la masse effective, couramment utilisée dans ce genre de problèmes. Nous avons déterminé la limite de validité de l'approximation de la masse effective à trois dimensions ; pour la supplanter dans les cas limites, nous avons établi l'approximation de masse effective à deux dimensions, mieux adaptée à ce type de problèmes. Les systèmes à puits quantiques présentent une structure électronique qui se décompose en sous-bandes bidimensionnelles. L'équation établie dans ce premier chapitre permettra d'effectuer un traitement exact des sous-bandes des systèmes parfaits (sans impureté, ni exciton).

Dans le second chapitre, nous appliquons l'approximation de la masse effective à deux dimensions précédemment établie, au calcul de l'énergie de liaison d'une impureté hydrogénoïde dans un puits quantique supposé infiniment profond. La comparaison avec d'autres modèles et avec le calcul exact pour les puits très étroits nous permet de tester la validité de notre modèle. La présence de cette impureté hydrogénoïde crée des états situés non seulement en-dessous de la bande de conduction du système, mais aussi situés sous chacune des sous-bandes bidimensionnelles. Ces états se situent dans le continuum constitué par d'autres sous-bandes bidimensionnelles. Ce sont donc des états résonants. Nous calculons le couplage de ces états résonants avec le continuum et montrons que ce couplage est faible.

Les superréseaux réels sont en majeure partie constitués de matériaux dont les bandes interdites diffèrent de moins d'un eV. Il n'est donc pas possible de modéliser ces systèmes par des puits infiniment profonds. L'objet du troisième chapitre est de calculer les niveaux d'impureté dans des puits finis. Grâce à l'équation établie au premier chapitre, il nous est facile de tenir compte de la différence de masse effective entre les matériaux qui constituent les puits et les barrières. Nous montrons que la prise en compte de cette différence revient à remplacer la masse effective du matériau puits par une "masse effective équivalente parallèle" qui est fonction de la hauteur de barrière, de la sous-bande dont est issu l'état considéré et, bien sûr, des masses effectives volumiques des deux matériaux en jeu. Une étude variationnelle à un seul paramètre donne des résultats équivalents à ceux issus de calculs beaucoup plus compliqués (quelques dizaines de paramètres variationnels). Les structures à puits quantiques utilisées dans les composants sont, en général, soumises à des champs électriques ; c'est pourquoi nous avons

étudié l'effet d'un champ électrique parallèle à l'axe de croissance du superréseau.

Les expériences de photoluminescence ont permis d'observer une forte luminescence intrinsèque et notamment des pics excitoniques très bien définis. Le calcul des niveaux excitoniques est en principe loin d'être trivial, à cause de la complexité de haut de bande de valence des composés III-V. Dans le quatrième chapitre, après avoir utilisé quelques hypothèses simplificatrices (notamment l'approximation parabolique en haut de bande de valence) et munis du modèle mis au point pour le calcul des niveaux donneurs en bas de bande de conduction, nous l'étendons à l'étude des excitons dans les superréseaux. Ici encore une nouvelle masse effective équivalente parallèle est définie. Les résultats obtenus, notamment pour des puits assez étroits, sont en meilleur accord avec l'expérience que ceux issus des calculs théoriques antérieurs.

Les quatre premiers chapitres sont orientés sur l'étude des superréseaux de constitution (où les couches successives sont formées de semiconducteurs différents). Dans le cinquième chapitre nous traitons de la structure électronique des superréseaux de dopage (ou ni-pi) où le matériau est un seul semiconducteur, dopé alternativement n, p ou intrinsèque. Dans un tel système, les électrons sont principalement dans les "puits à électrons" constitués par les couches n, et les trous sous les "puits à trous" constitués par les couches p. On a un composant à "gap" indirect dans l'espace réel, séparation spatiale des électrons et des trous, et les recombinaisons sont donc moins probables. On obtient ainsi des composants où les porteurs ont une durée de vie très longue. De plus, en jouant sur les concentrations de dopage, on obtient des systèmes à gap variable. Le premier nipi AsGa a été réalisé en 1981, la fabrication du nipi Si est en cours d'étude (CNET Meylan). Dans le nipi Si, on bénéficie en plus d'un gap indirect dans l'espace réciproque, et les durées de vie sont encore plus longues que dans AsGa. Dès 1972, Ruden et Döhler ont effectué un calcul de la structure électronique des nipi AsGa. Avant d'étendre ce calcul au cas des nipi Si (qui nécessite la prise en compte des six minima, équivalents dans l'espace des \vec{k}) nous étudions les approximations faites par Ruden et Döhler et montrons qu'elles ne sont valides que dans une gamme réduite de concentration de dopage. Nous montrons aussi que, pour les concentrations de dopage usuelles, un modèle très simple de charge d'espace donne des résultats équivalents au calcul autocohérent complet de Ruden et Döhler étendu au cas du Si.

Le sixième chapitre porte sur l'étude des hétérojonctions. En effet un paramètre central régissant le comportement des systèmes à puits quantiques est la discontinuité des bandes de valence et de conduction à l'interface.

Il est actuellement difficile de prédire cette discontinuité avec une bonne précision. En pratique, le problème est rendu très difficile par l'existence des complications suivantes : accord de maille imparfait, charges d'interface elles-mêmes plus ou moins reliées aux défauts d'interfaces, hétérojonction entre matériaux polaires et non polaires. Nous proposons un calcul de la discontinuité de bandes (appliqué à l'interface Ge/GaAs [110]) dans l'approximation des liaisons fortes (car elle permet de bien décrire les bandes de valence, ce qui permet donc d'espérer une bonne description des charges à l'interface). Nous utilisons une condition de neutralité locale (qui permet d'éviter un calcul complet autocohérent). Les résultats obtenus sont encourageants, et une étude plus complète est en cours de réalisation.

CHAPITRE I

L'approximation de la masse effective

Dans ce chapitre nous présenterons le principe de l'approximation de la masse effective. Celle-ci est traditionnellement utilisée à trois dimensions. Nous rappellerons les conditions de validité et discuterons la vérification expérimentale des résultats.

Cette approximation de masse effective à trois dimensions peut être utilisée pour décrire des superréseaux parfaits. Toutefois elle peut conduire à des erreurs importantes dans le cas de superréseaux étroits comme nous le montrerons sur un exemple simple.

Un des buts de notre travail est l'étude d'impuretés et d'excitons dans des structures à puits quantiques. Des calculs ont été faits, qui utilisent l'approximation de la masse effective à trois dimensions. Nous soulèverons les problèmes posés par ce type de modèle et les applications qui en ont été faites.

La structure électronique d'un puits quantique se décrit en termes de sous-bandes bidimensionnelles. Aussi nous établissons une équation générale de l'approximation de masse effective bidimensionnelle. Cette équation permet de calculer des énergies repérées par rapport aux bas de bandes exacts du système parfait (en l'absence d'impureté, d'exciton, ou de toute autre perturbation). Ceci présente un grand intérêt, car nous nous affranchissons ainsi de la principale source d'erreur présente dans les traitements tridimensionnels. Nous pourrons ensuite appliquer cette équation à toute perturbation lentement variable.

I.1. L'approximation de la masse effective à trois dimensions

(On trouvera en réf. 1 une revue détaillée des méthodes de calcul applicables à la structure électronique des défauts ponctuels, développant la théorie de la masse effective).

L'approximation de la masse effective consiste à transformer l'équation de Schrödinger mettant en jeu l'hamiltonien du système et la fonction d'onde, par une équation équivalente (dont les solutions en énergie sont les mêmes), mettant en jeu un hamiltonien effectif et une fonction enveloppe.

* Soient H l'hamiltonien du système total, E_ν une de ses valeurs propres et ψ_ν la fonction propre associée. On écrit :

$$H = H_0 + U = T_0 + V_0 + U \quad (1.1)$$

$$H\psi_\nu = E_\nu \psi_\nu \quad (1.2)$$

H_0 est l'hamiltonien du cristal parfait et U un potentiel perturbateur. On peut développer ψ_ν dans la base des fonctions de Bloch du cristal parfait $\psi_{n\vec{k}}^0$:

$$* \quad \psi_\nu(\vec{r}) = \sum_{n\vec{k}'} F_{n\vec{k}'} \psi_{n\vec{k}'}^0(\vec{r}) \quad (1.3)$$

* Il est facile d'injecter (1.3) dans (1.2) en utilisant le fait que $\psi_{n\vec{k}}^0(\vec{r})$ est fonction propre de H_0 :

$$* \quad H_0 \psi_{n\vec{k}}^0(\vec{r}) = E_{n\vec{k}}^0 \psi_{n\vec{k}}^0(\vec{r}) \quad \text{faire le collage avec l'autre original} \quad (1.4)$$

Si l'on projette l'équation obtenue sur $\psi_{n\vec{k}}^0(\vec{r})$ et si l'on intègre sur tout l'espace, il vient :

$$* \quad E_{n\vec{k}}^0 F_{n\vec{k}} + \sum_{n'\vec{k}'} \psi_{n\vec{k}}^0 |U| \psi_{n'\vec{k}'}^0 > F_{n'\vec{k}'} = E_\nu F_{n\vec{k}} \quad (1.5)$$

les $F_{n\vec{k}}$ sont donc solutions d'un système d'équations linéaires couplées. Le théorème de Bloch permet d'écrire

$$* \quad \psi_{n\vec{k}}^0(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} u_{n\vec{k}}^0(\vec{r}) \quad (1.6)$$

où $u_{n\vec{k}}^0$ possède la périodicité du cristal parfait.

Si nous notons \vec{K}_p les vecteurs du réseau réciproque et développons le produit $u_{n\vec{k}}^{o*}(\vec{r}) u_{n'\vec{k}'}^o(\vec{r})$ en ondes planes :

$$* \quad u_{n\vec{k}}^{o*}(\vec{r}) u_{n'\vec{k}'}^o(\vec{r}) = \sum_p C_{\vec{k}\vec{k}'}^{nn'}(\vec{K}_p) e^{i\vec{K}_p \cdot \vec{r}} \quad (1.7)$$

l'élément de matrice apparaissant dans (1.5) devient

$$* \quad \langle \psi_{n\vec{k}}^o | U | \psi_{n'\vec{k}'}^o \rangle = \sum_p C_{\vec{k}\vec{k}'}^{nn'}(\vec{K}_p) \cdot U(\vec{k}-\vec{k}'-\vec{K}_p) \quad (1.8)$$

où $U(\vec{q})$ est la transformée de Fourier de $U(\vec{r})$.

A ce stade, il est nécessaire, pour poursuivre le calcul, de supposer que le potentiel $U(\vec{r})$ est lentement variable. Dans ce cas, sa transformée de Fourier $U(\vec{q})$ est très faible sauf pour des vecteurs d'onde très faibles devant la taille de la zone de Brillouin. Si l'on s'intéresse aux états d'énergie proches du minimum de la bande de conduction ou du maximum de la bande de valence (dans la plupart des semiconducteurs III-V, ces extrema sont situés au centre de la zone de Brillouin), les vecteurs \vec{k} et \vec{k}' ont des valeurs proches de zéro. Aussi, d'après la remarque précédente, les seuls termes qui auront une contribution non négligeable dans (1.8) correspondent à $\vec{K}_p = 0$ (en effet si \vec{K}_p est un vecteur non nul du réseau réciproque, $\vec{k}-\vec{k}'-\vec{K}_p$ ne sera jamais faible).

Pour l'évaluation de $C_{\vec{k}\vec{k}'}^{nn'}(0)$, on peut développer les termes $u_{n\vec{k}}^o(\vec{r})$ en perturbation $\vec{k} \cdot \vec{p}$, puisque l'on travaille avec des \vec{k} proches de zéro (ceci est développé en réf. 2). On obtient alors

$$\langle \psi_{n\vec{k}}^o | U | \psi_{n'\vec{k}'}^o \rangle = U(\vec{k}-\vec{k}') (\delta_{nn'} + A_{nn'}(1-\delta_{nn'})) \quad (1.9)$$

où le terme $A_{nn'}$ correspondant à la contribution non diagonale du couplage peut être, en première approximation, négligé et sinon, traité en perturbations, ce qui donne une correction en énergie au second ordre.

L'équation (1.5) devient alors

$$E_{n\vec{k}}^o F_{n\vec{k}} + \sum_{\vec{k}'} U(\vec{k}-\vec{k}') F_{n\vec{k}'} = E_v F_{n\vec{k}} \quad (1.10)$$

qui n'est autre que la transformée de Fourier de

$$* \quad [E_n^o(i\vec{\nabla}) - E_v + U(\vec{r})] F_n(\vec{r}) = 0 \quad (1.11)$$

où $F_n(\vec{r})$ est la transformée de Fourier des $F_{n\vec{k}}$.

L'équation (1.11) est l'équation de masse effective. Elle est tout à fait générale et s'applique à tous les systèmes qui présentent une périodicité et où le potentiel perturbateur est lentement variable. Il suffit alors de développer $E_{n\vec{k}}^0$ au second ordre au voisinage de l'extremum considéré pour introduire le concept de masse effective. Par exemple, dans le cas d'une seule bande isotrope et non dégénérée, m^* est définie par

$$\frac{1}{m^*} = \frac{1}{\hbar^2} \left. \frac{\partial^2 E_{n\vec{k}}^0}{\partial k^2} \right|_{\vec{k}=0} \quad (1.12)$$

$$E_{n\vec{k}}^0 = E_{n0}^0 + \frac{\hbar^2}{2m^*} k^2$$

On obtient alors l'équation

$$\left[E_{n0}^0 - E - \frac{\hbar^2}{2m^*} \Delta + U(\vec{r}) \right] F_n(\vec{r}) = 0 \quad (1.13)$$

Les cas correspondant à une bande présentant plusieurs extrema équivalents, ou à une bande dégénérée sont considérés en [1]. On trouvera en appendice A1 l'étude de ce que deviennent les conditions de continuité pour la fonction enveloppe.

L'approximation de la masse effective, utilisée avec un potentiel hydrogénoïde ($U(r) = -e^2/\kappa r$), donne des résultats très satisfaisants pour décrire les états excités proches des bords de bande interdite des donneurs et accepteurs. Par exemple le tableau 1 met en évidence l'excellent accord avec les valeurs mesurées obtenues par absorption infrarouge, pour les états p des donneurs dans le silicium et le germanium.

TABLE I. Spacings of selected excited states of shallow donors in Si and Ge as calculated by Faulkner (1969) compared with experimental^a values. All energies are in meV.

States	Theory	P	As	Sb	Bi	Li	S ⁰	S ⁺ /4
Si								
2p ⁺ -2p ⁰	5.11	5.06	5.12	5.06	4.94	5.13	5.2	5.15
3p ⁰ -2p ⁺	0.92	0.93	0.86	0.95	0.93	0.88	0.7	1.08
4p ⁰ -2p ⁺	3.07	3.11	2.6	...	2.61
3p ⁺ -2p ⁺	3.28	3.27	3.25	3.34	3.31	3.28	3.1	3.45
4p ⁰ -2p ⁺	4.07
4p ⁰ -2p ⁺	4.17	4.21	4.3	4.33	4.34	4.19	...	4.35
4p ⁺ -2p ⁺	4.21	4.21	4.3	4.33	4.35	4.19	4.35	...
5p ⁺ -2p ⁺	4.97	4.95	4.9	...	5.26	4.93
Ge								
2p ⁺ -2p ⁰	3.02	3.03	3.02	3.02	3.02	3.08	3.04	
2p ⁺ -3p ⁰	0.83	0.83	0.83	0.84	0.88	0.84	...	
3p ⁺ -2p ⁺	0.69	0.69	0.70	0.69	0.66	0.67	...	

^aExperimental values from Aggarwal and Ramdas (1965) for Si:P, As, Sb, Bi; from Reuszer and Fisher (1964) for Ge:P, As, Sb, Bi; from Aggarwal, Fisher, Mourzine and Ramdas (1965) for Si:Li; and Ge:Li; and from Krag and Zelger (1962) for Si:S.

Tableau 1 - Comparaison entre résultats de l'approximation de la masse effective et les valeurs expérimentales des énergies d'états excités de donneurs dans le Silicium et le Germanium (tableau tiré de la réf. 1).

L'approximation de la masse effective n'est, par contre, pas adaptée au calcul des niveaux profonds dans la bande interdite. De plus, pour le calcul du niveau fondamental, il faut ajouter une correction dite de cellule centrale. Cette correction est rendue nécessaire par le fait qu'un terme en $e^2/\kappa r$ décrit mal le potentiel vu par l'électron au voisinage de l'impureté (en $r = 0$). D'autre part, pour les semiconducteurs qui présentent plusieurs minima équivalents en bas de bande de conduction (comme c'est le cas du silicium et du germanium), la correction de cellule centrale permet de traduire la levée de dégénérescence du niveau fondamental (due au couplage intervallées). Pour reproduire la différence d'énergie obtenue pour différentes espèces chimiques d'impuretés, il faut utiliser au voisinage de l'impureté, un potentiel mieux adapté que le simple potentiel hydrogénéoïde. Le potentiel hydrogénéoïde décrit bien principalement les impuretés substitutionnelles isocores.

I.2. Application au superréseau

Nous verrons au chapitre suivant qu'un électron dans la bande de conduction d'un superréseau voit un potentiel de la forme suivante :

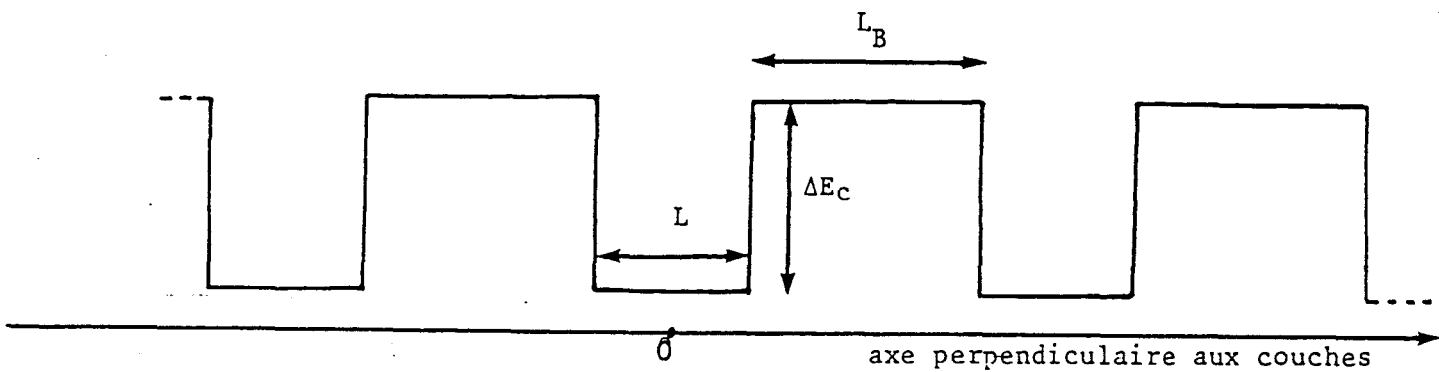


Fig. I.1. : Représentation schématique du bas de bande de conduction d'un superréseau

(ceci correspond au cas d'un superréseau de type I constitué d'une alternance de tranches de largeur L et L_B de deux semiconducteurs différents).

Nous représentons ci-dessous la densité d'états en bas de bande de conduction d'un tel système (trait plein).

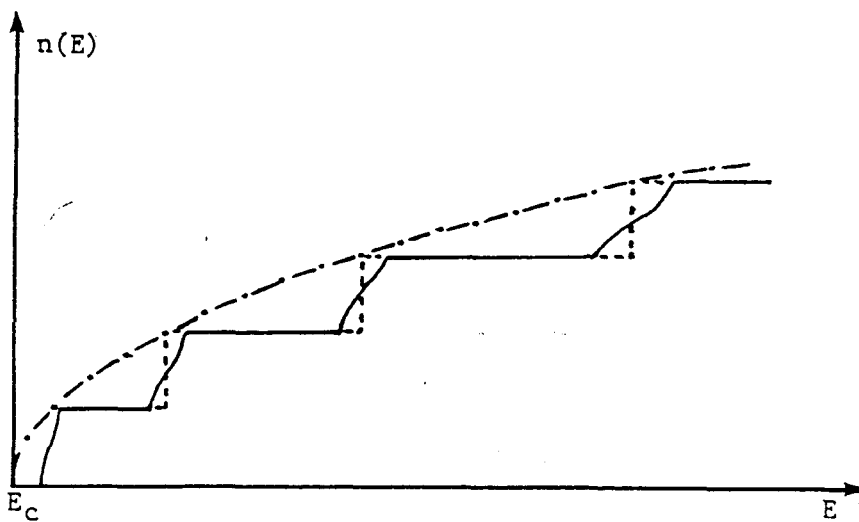


Fig. I.2. : Densité d'états en bas de bande de conduction d'un superréseau



La courbe en tirets pointillés correspond à la densité d'états volumique du matériau A (on retrouve le classique résultat parabolique). La courbe en tirets représente la densité d'états d'un système bidimensionnel

(correspondant au cas d'une barrière infranchissable : $\Delta E_c \rightarrow \infty$). Chacune des marches observées correspond à une valeur permise en k_z à l'intérieur du puits. Lorsque les barrières peuvent être traversées par effet tunnel, les valeurs permises en k_z s'élargissent en bandes et les marches s'adoucissent (courbes en trait plein).

On a vu précédemment que l'approximation de la masse effective utilise le fait que le potentiel est lentement variable. Or, il est clair que le potentiel défini précédemment (fig. I.1) présente des marches abruptes et n'est donc pas lentement variable aux interfaces entre les deux matériaux. Ceci engendre une erreur dans les énergies obtenues. Cette erreur sera d'autant plus grande que l'influence des barrières sera grande, c'est-à-dire que les puits seront étroits. Considérons le cas limite du puits de hauteur infinie. Le puits le plus étroit correspond au cas d'un seul plan. Le système est alors complètement bidimensionnel. Or si l'on traite dans l'approximation de la masse effective à trois dimensions un puits de hauteur infinie et de largeur $L = a$ (a étant la distance interplans), le problème à résoudre est le suivant :

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \Delta \psi(x,y,z) = E \psi(x,y,z) \quad (1.14)$$

où E est l'énergie repérée par rapport au bas de la bande de conduction du volume, et où ψ , la fonction d'onde, doit s'annuler en $z = \pm L/2$. Le bas de la bande de conduction d'un tel système se trouve en ϵ_1

$$* \quad \epsilon_1 = \frac{\hbar^2}{2m^*} \left(\frac{\pi}{L} \right)^2 \quad (1.15)$$

Ce niveau ϵ_1 est très haut en énergie et la fonction d'onde n'est pas bidimensionnelle. Pour obtenir un système effectivement bidimensionnel, il faut faire tendre L vers zéro, mais le niveau ϵ_1 tend alors vers l'infini. Dans ce cas particulier du puits contenant un seul plan, l'erreur sur le bas de bande de conduction est donc très grande. Aussi apparaît-il intéressant d'étudier jusqu'à quelles largeurs de puits le modèle tridimensionnel reste valable et de proposer une autre approximation dans laquelle il ne sera pas nécessaire de faire l'hypothèse d'un potentiel lentement variable en z , d'où l'idée d'approximation de la masse effective bidimensionnelle. Avant d'établir celle-ci, nous allons présenter brièvement les calculs existant pour les calculs de niveaux d'impureté et d'excitons dans les structures à puits quantiques.

I.3. Modèles existants

Les études sur les impuretés ou les excitons dans les systèmes à puits quantiques [3-7] utilisent toutes un hamiltonien de masse effective à trois dimensions.

a) Modèle de Bastard et ses dérivés

Le premier modèle simple qui permet le calcul des niveaux hydrogénoïdes dans un superréseau a été établi par G. Bastard [3]. Rappelons ici brièvement la démarche suivie. L'étude concerne principalement l'état d'impureté le plus bas. Dans l'approximation de la masse effective à trois dimensions, l'hamiltonien du problème est

$$H = - \frac{\hbar^2}{2m^*} \Delta - \frac{e^2}{\kappa r} \quad (1.16)$$

à l'intérieur d'un puits infini de largeur L.

En effet si, dans un premier temps, on néglige l'effet tunnel à travers les barrières et l'influence de la hauteur de barrière, le superréseau peut être modélisé par un puits quantique infiniment profond, possédant une constante diélectrique κ qui est celle du matériau constituant le puits. Le traitement est variationnel. Pour l'état fondamental ($1s$), la fonction d'essai choisie est :

$$F_{1s} = A \sin \frac{\pi z}{L} e^{-\alpha r} \quad (1.17)$$

qui décroît exponentiellement avec r , la distance de l'électron à l'impureté, de caractère tridimensionnel. Les équations (1.16) et (1.17) permettent d'accéder à l'énergie totale

$$E_{1s} = \varepsilon_1 + \Delta E_{1s} \quad (1.18)$$

où ε_1 repère le minimum de la bande d'énergie la plus basse du système sans impureté donné par (1.15).

Ce modèle introduit donc deux types d'approximations : la première sur ε_1 , l'autre sur ΔE_{1s} . L'approximation faite sur ε_1 est

importante, comme nous l'avons vu plus haut dans le cas d'un superréseau très étroit. Même dans le cas où L ne tend pas vers zéro, le bas de bande ϵ_1 donné par (1.15) est forcément différent du bas de bande exact du superréseau : le fait de modéliser les barrières de hauteur et de largeur finies par des barrières infinies engendre sur le niveau ϵ_1 une erreur non négligeable (ceci sera montré au chapitre suivant, où nous calculerons cette erreur).

Pour tenir compte de la hauteur finie du puits et de la possibilité de traversée des barrières par effet tunnel, S. Chaudhuri [8] adopte le même traitement variationnel, avec une fonction d'essai dont la partie non variationnelle en z est solution du problème constitué de trois puits :



b. Calculs utilisant une base d'orbitales gaussiennes

Greene et Bajaj [7], quant à eux, traitent le problème d'un puits fini avec le même type d'hamiltonien 3D, mais afin d'obtenir tous les états d'impureté résolvent l'équation de Schrödinger dans une base d'orbitales gaussiennes. Ils ont ainsi un problème à plusieurs dizaines de paramètres variationnels.

Mailhiot, Chang et Mc Gill [4,5] ont traité le cas d'une impureté de type donneur dans un puits fini, en tenant compte de la différence de constante diélectrique des deux matériaux. Ils utilisent également une base d'orbitales gaussiennes, ce qui impose des calculs assez lourds. Tous ces modèles partent d'un hamiltonien issu de l'approximation de la masse effective tridimensionnelle. Ils sont parfaitement adaptés pour décrire les superréseaux constitués de couches assez épaisses (car les porteurs ont alors un comportement tridimensionnel). Par contre dans le cas où les couches sont assez étroites, nous venons d'en montrer les limites (erreur grande sur l'énergie du bas de bande de conduction ou nécessité de recourir à un grand nombre de paramètres entraînant des calculs lourds). Nous présentons ci-dessous une équation de masse effective bidimensionnelle

(pour l'établir, il suffit d'utiliser le critère de potentiel lentement variable dans les deux directions parallèles aux couches du superréseau) qui présente l'avantage d'être mieux adaptée aux superréseaux de faible période.

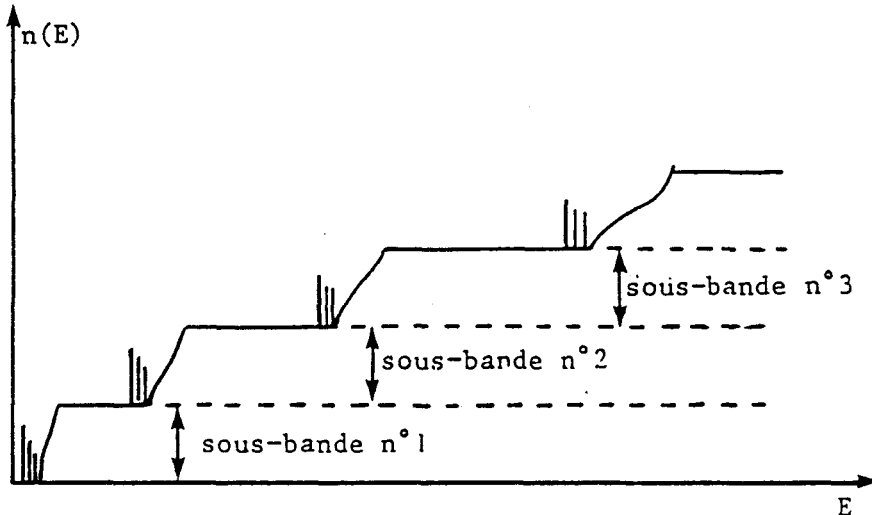
I.4. L'approximation de la masse effective bidimensionnelle

Notons H_0 l'hamiltonien de notre système en l'absence d'impureté. Nous utilisons le fait que le système présente une périodicité dans les plans perpendiculaires à l'axe de croissance Oz , et appliquons le théorème de Bloch. Les valeurs propres peuvent être groupées en plusieurs sous-bandes bidimensionnelles définies par

$$* \quad H_0 |\psi_n, \vec{k}_{//}\rangle = E_n(\vec{k}) |\psi_n, \vec{k}_{//}\rangle \quad (1.19)$$

* où n repère la sous bande bidimensionnelle considérée, les $|\psi_n, \vec{k}_{//}\rangle$ sont les ondes de Bloch relatives à cette sous bande, et $\vec{k}_{//}$ est le vecteur d'onde dans le plan perpendiculaire à Oz .

La présence d'une impureté dans un tel système crée des états d'impureté :



* Pour des puits étroits, les sous-bandes sont bien séparées et on observe des états d'impureté sous chacune ^{entre elles} des sous-bandes ; si les puits sont plus larges, on retrouve une situation de volume, les états d'impureté sortent tous de la bande pour donner tous les niveaux liés d'une impureté dans un cristal infini. Pour un puits de largeur L quelconque, certains états d'impureté ont une énergie située sous la sous-bande la plus basse, ce sont les états liés. Les autres, les états résonants, sont situés dans le continuum. Nous établirons au chapitre suivant que le couplage entre les états résonants et le continuum, dans le cas de puits quantiques, est faible.

Ici nous commençons par négliger le couplage et considérons que les états d'impureté sont issus d'une seule sous-bande. Ils peuvent donc s'écrire, pour chaque sous-bande n :

$$\psi_n = \sum_{\vec{k}_{//}} a_{n, \vec{k}_{//}} |\phi_{n, \vec{k}_{//}}\rangle \quad (1.20)$$

Si nous notons V le potentiel créé par l'impureté et si nous projetons l'équation de Schrödinger sur l'une des ondes de base $|\phi_{n, \vec{k}_{//}}\rangle$, nous obtenons :

$$[\epsilon_n(\vec{k}_{//}) - E] a_{n, \vec{k}_{//}} + \sum_{\vec{k}'_{//}} \langle \phi_{n, \vec{k}_{//}} | V | \phi_{n, \vec{k}'_{//}} \rangle a_{n, \vec{k}'_{//}} = 0 \quad (1.21)$$

Après avoir exprimé $|\phi_{n, \vec{k}_{//}}\rangle$ en onde de Bloch :

$$|\phi_{n, \vec{k}_{//}}(\vec{r}_{//})\rangle = e^{-i\vec{k}_{//} \cdot \vec{r}_{//}} |u_{n, \vec{k}_{//}}(r_{//}, z)\rangle \quad (1.22)$$

où u est une fonction périodique en x et y . On a alors

$$\langle \phi_{n, \vec{k}_{//}} | V | \phi_{n, \vec{k}'_{//}} \rangle = \int e^{i(\vec{k}'_{//} - \vec{k}_{//}) \cdot \vec{r}_{//}} u_{n, \vec{k}'_{//}}^*(\vec{r}_{//}, z) u_{n, \vec{k}_{//}}(\vec{r}_{//}, z) V(\vec{r}_{//}, z) dv \quad (1.23)$$

où $\vec{r}_{//}$ est le vecteur de coordonnées x et y .

Le produit $u_{n, \vec{k}_{//}}^* \cdot u_{n, \vec{k}'_{//}}$, comme toute fonction périodique, est développable en série de Fourier. En notant $\vec{K}_{//}$ les vecteurs du réseau réciproque, on peut écrire :

$$u_{n, \vec{k}_{//}}^* u_{n, \vec{k}'_{//}} = \sum_{\vec{K}_{//}} e^{i\vec{K}_{//} \cdot \vec{r}_{//}} C_{n, \vec{k}_{//}, \vec{k}'_{//}}(\vec{K}_{//}, z) \quad (1.24)$$

L'équation (1.23) devient alors :

$$\langle \phi_{n, \vec{k}_{//}} | V | \phi_{n, \vec{k}'_{//}} \rangle = \sum \int d^2r e^{i(\vec{k}'_{//} - \vec{k}_{//} + \vec{K}_{//}) \cdot \vec{r}_{//}} \int dz C_{n, \vec{k}_{//}, \vec{k}'_{//}}(\vec{K}_{//}, z) V(\vec{r}_{//}, z) \quad (1.25)$$

A ce stade nous opérons les mêmes simplifications que celles qui mènent à l'approximation de la masse effective à 3 dimensions, c'est-à-dire que, en utilisant le fait que $V(\vec{r}_{//}, z)$ est lentement variable en $\vec{r}_{//}$, nous négligeons les termes correspondant à $\vec{K}_{//}$ non nul, et nous approximations $C_{n, \vec{k}_{//}, \vec{k}'_{//}}(\vec{K}_{//}, z)$ pour des valeurs de $\vec{k}'_{//}$ et $\vec{k}_{//}$ proches du bas de bande $k_{//}^0$, par

$$C_n, \vec{k}_{//}, \vec{k}'_{//} = C_n(z),$$

où $C_n(z)$ est défini par :

$$C_n(z) = \int |\phi_n, \vec{k}'_{//}(\vec{r}_{//}, z)|^2 d^2 r_{//}. \quad (1.26)$$

Si l'on note $U_n(\vec{r}_{//})$ la quantité

$$U_n(\vec{r}_{//}) = \int V(\vec{r}_{//}, z) C_n(z) dz, \quad (1.27)$$

l'élément de matrice de l'équation (1.25) devient $U_n(\vec{k}'_{//} - \vec{k}_{//})$, la transformée de Fourier (à deux dimensions) de $U_n(\vec{r}_{//})$.

L'équation de base (1.21) se ramène alors à

$$[\varepsilon_n(k_{//}) - E] a_{n, k_{//}} + \sum_{k'_{//}} U_n(\vec{k}'_{//} - \vec{k}_{//}) a_{n, k'_{//}} = 0, \quad (1.28)$$

qui n'est autre que la transformée de Fourier de l'équation différentielle suivante :

$$[\varepsilon_n(-i\vec{\nabla}_{//}) - E + U_n(\vec{r}_{//})] F_n(\vec{r}_{//}) = 0 \quad (1.29)$$

où $F_n(\vec{r}_{//})$ est la fonction enveloppe, c'est-à-dire la transformée de Fourier de $a_{n, \vec{k}_{//}}$.

L'équation (1.29) n'est autre que l'équation de la masse effective à deux dimensions. Elle est tout à fait générale et s'applique à tous les systèmes qui présentent une périodicité bidimensionnelle et où le potentiel est lentement variable en $\vec{r}_{//}$.

Il suffit alors de développer $\varepsilon_n(\vec{k}_{//}})$ au second ordre au voisinage du bas de bande pour introduire le concept de masse effective bidimensionnelle.

Par exemple, dans le cas isotrope $m_{//}^*$ est définie par

$$\frac{1}{m_{//}^*} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 \varepsilon_n}{\partial k_{//}^2} \Bigg|_{k_{//}^0} \quad (1.30)$$

et on obtient l'équation

$$\left\{ \varepsilon_n(\vec{k}_{//}^0) - E - \frac{\hbar^2}{2m^*} \Delta_{//} + U_n(\vec{r}_{//}) \right\} F_n(\vec{r}_{//}) = 0 \quad (1.31)$$

similaire à l'équation de masse effective traditionnelle utilisée en volume.

1.5. Conclusion

Nous avons donc rappelé le principe de l'approximation de la masse effective. Puis nous avons vu comment l'approximation de la masse effective à trois dimensions a été utilisée par de nombreux auteurs pour traiter des systèmes à puits quantiques. Dans le cas où les puits sont assez étroits, cette approximation n'est pas légitime. Aussi nous avons établi l'équation de la masse effective bidimensionnelle, équation générale que nous utiliserons dans les chapitres suivants. Nous avons ainsi introduit la notion de masse effective bidimensionnelle. Celle-ci est différente de la masse effective volumique et c'est elle qui interviendra dans les calculs à venir, modifiant ainsi fortement les résultats dans le cas de structures à puits étroits.

CHAPITRE II

Etude d'une impureté hydrogénoïde dans un superréseau modélisé par un puits infiniment profond

Avant d'utiliser notre modèle pour traiter des structures plus réalistes, nous allons en premier lieu, ce sera l'objet de ce chapitre, le tester dans un cas où il est facile d'effectuer un calcul exact qui nous servira de référence. Nous étudierons ainsi une impureté hydrogénoïde dans un puits infiniment profond. Nous calculerons les niveaux liés à l'impureté, d'une part dans un modèle de liaisons fortes, et d'autre part en utilisant l'équation de masse effective établie au chapitre précédent. Nous vérifierons que notre modèle est plus performant que ceux utilisant l'approximation de masse effective tridimensionnelle. Un des atouts de ce modèle est de permettre également l'étude des états résonants (la densité d'états est constituée de plusieurs sous-bandes bidimensionnelles (2D), les états situés sous chacune des sous-bandes autres que la plus basse se trouvent dans le continuum des sous-bandes inférieures et sont donc résonants). Nous montrerons que le couplage de ces états avec le continuum est très faible.

II.1. Description du superréseau

a) Définition

Esaki et Tsu [8] ont proposé deux types de superréseaux :

- les superréseaux de dopage ou nipi, formés d'un semiconducteur volumique, dopé alternativement par couches n, p ou intrinsèque. Ces systèmes seront étudiés au chapitre V.
- les superréseaux de composition, formés d'un empilement périodique de couches assez fines de deux semiconducteurs A et B : ABAB...

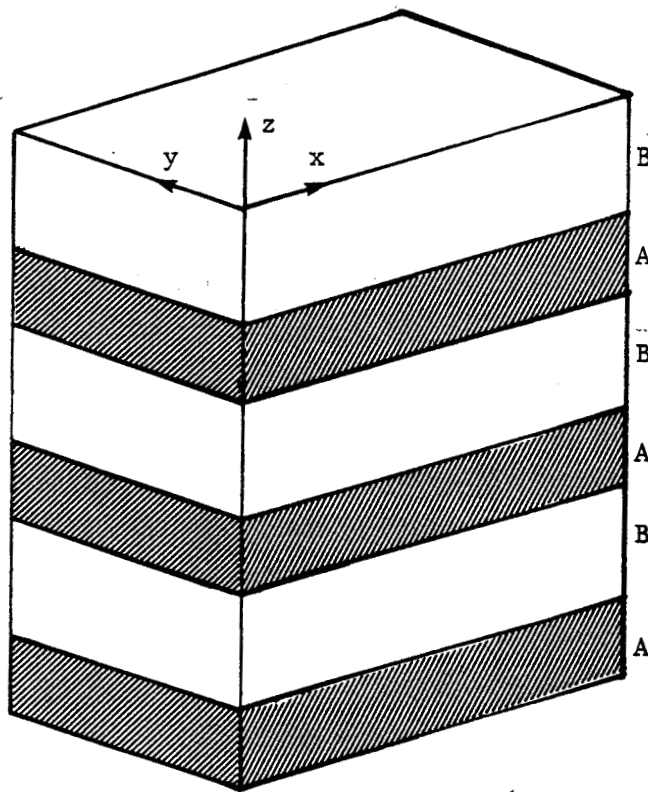


Figure II.1

Configuration géométrique d'un superréseau de composition ABAB ...

Dans la mesure où les deux conducteurs présentent des bandes interdites de largeurs différentes, on aura une variation spatiale des extrema de bande de conduction et de valence. Trois cas schématisés ci-dessous peuvent alors se présenter :

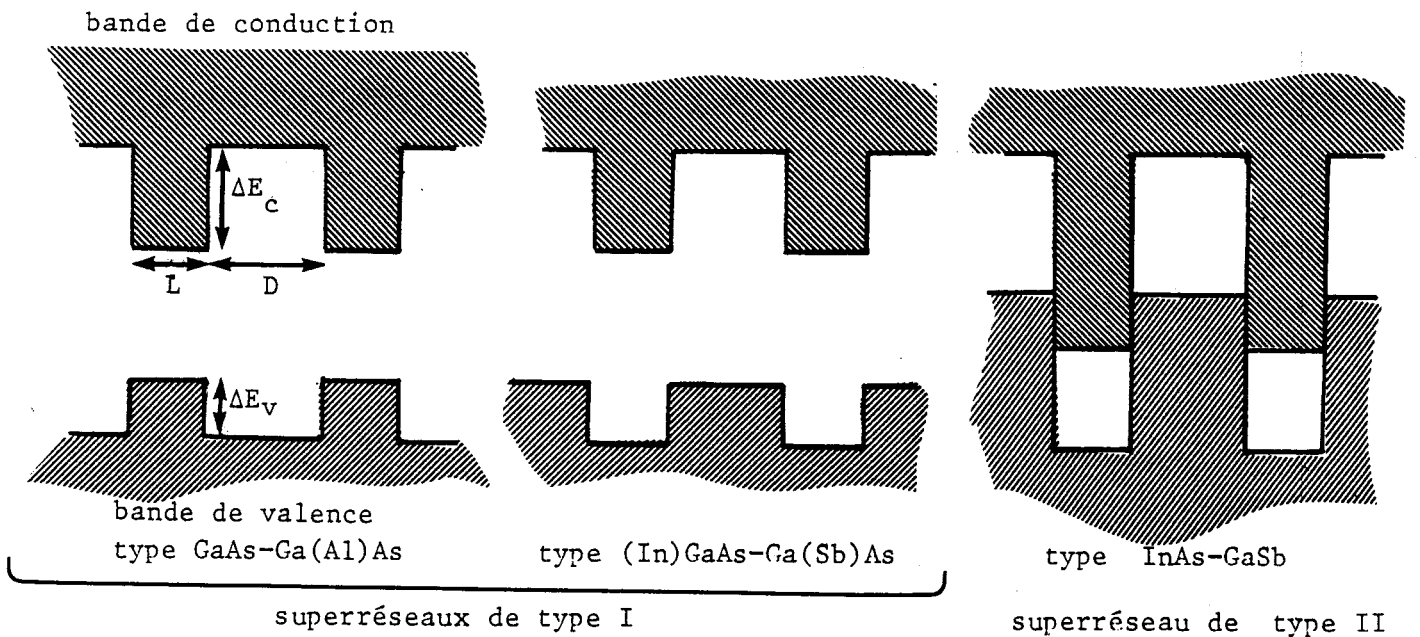


Figure II.2

Représentation schématique des bandes de valence et de conduction de trois types de superréseaux.

La structure de bande de tels systèmes peut être calculée suivant différentes approches :

- si la période du superréseau est très faible, la structure de bande complexe du superréseau peut être calculée par une méthode de pseudopotentiels [9,10] ou en liaisons fortes [11], mais ces calculs deviennent trop lourds pour des superréseaux de taille usuelle (tranches épaisses d'environ 100 Å ou plus)
- la méthode la mieux adaptée est celle dite "de la fonction enveloppe", qui utilise l'approximation de la masse effective [2,12-15].

Nous nous intéresserons ici uniquement aux superréseaux de type GaAs-Ga(Al)As. Nous avons représenté au chapitre précédent (fig. I.2, page 10) la densité d'états en bas de bande de conduction d'un tel système. Un électron dans la bande de conduction voit donc une série de puits quantiques. Plus la hauteur des puits (ΔE_c défini fig. II.2) et la largeur de barrière (D) seront grandes, plus l'électron sera confiné dans un puits. Pour tester notre modèle, nous nous placerons dans le cas simple idéal où le système peut être modélisé par un puits infini. Avant d'aller plus loin, nous calculons brièvement l'erreur sur le bas de bande engendrée par cette

modélisation.

b) Influence de la traversée des barrières par effet tunnel

La structure de bandes pour un seul puits quantique résulte de l'addition d'une bande parabolique $\hbar^2 k^2 / 2m^*$ avec les niveaux discrets qui résultent de la quantification en z . On obtient donc la densité d'états "en escalier" représentée fig. I.2, la largeur des marches est égale à la distance entre les niveaux quantifiés. Si l'on considère maintenant un grand nombre de puits disposés périodiquement, les niveaux quantifiés interagissent entre eux et s'élargissent en bandes. Cet élargissement ne modifiera pas le comportement bidimensionnel du système dans la mesure où il reste beaucoup plus petit que la largeur des marches du puits isolé. Nous avons calculé les élargissements et décalages des marches pour différentes valeurs de ΔE_c , L et D (définis figure II.2.). Le calcul des énergies permises est un problème élémentaire de mécanique quantique [16]. Elles sont solutions de l'équation :

$$\cos \frac{2\pi j}{N} = \cos(\alpha L) \cosh(\beta D) - \frac{2E - \Delta E_c}{2\sqrt{E(\Delta E_c - E)}} \sin(\alpha L) \sinh(\beta D) \quad (2.1)$$

où $\alpha = \left(\frac{2m^*E}{\hbar^2} \right)^{1/2}$

$$\beta = \left(\frac{2m^*(\Delta E_c - E)}{\hbar^2} \right)^{1/2}$$

Nous avons représenté sur la figure II.3 les bandes d'énergies permises pour différentes configurations de puits. Le nombre de bandes permises, c'est-à-dire de marches dans la densité d'états totale, est fixé par la quantité $\Delta E_c L^2$, alors que c'est le rapport D/L qui régit la largeur des bandes. On peut observer que, pour des puits contenant plus d'une seule bande permise, les bandes se réduisent à des états discrets quand les barrières sont plus larges que les puits. Alors l'approximation qui consiste à considérer un seul puits est tout à fait justifiée. Sur la figure II.3 nous avons également indiqué par des croix les niveaux correspondant à un puits infini. Ceci permet de constater que la modélisation par un puits infini engendre une erreur assez grande sur la position des niveaux.

De cette rapide étude nous pouvons donc conclure que, pour des

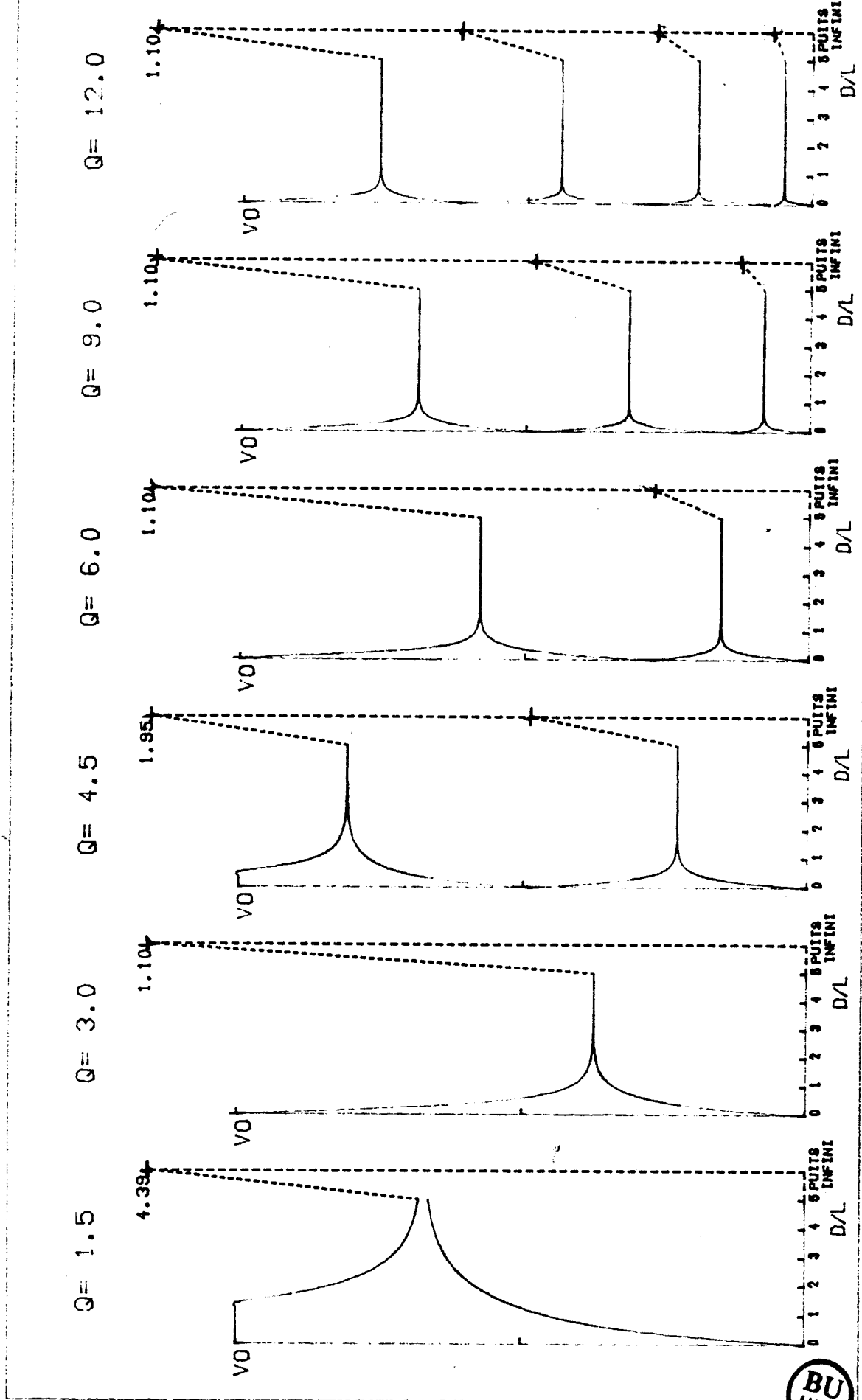


Fig II 3

Bandes d'énergies permises pour le potentiel représenté figure II.2., en fonction du rapport D/L , pour différentes profondeurs de puits ($V_0 = \frac{\hbar^2}{2mL^2} Q^2$, où Q prend les valeurs 1.5, 3, 4.5, 6, 9, et 12 de gauche à droite). Dans chaque cas les niveaux correspondant à un puits infiniment profond sont représentés par des croix.

superréseaux composés de puits possédant plus d'un état lié et dont les barrières sont plus larges que les puits, il est légitime d'approximer le superréseau par un puits unique. Nous reparlerons du cas où ces conditions ne sont pas vérifiées dans les chapitres suivants.

Dans la suite de ce chapitre nous étudierons le système correspondant à un puits infini. Ceci nous permettra de mettre au point et de tester le modèle qui sera, au chapitre suivant, appliqué à un calcul plus réaliste (prise en compte de la hauteur finie du puits).

II.2. Etude d'une impureté dans un puits très étroit

Pour un puits infiniment profond et très étroit, c'est-à-dire un système formé de quelques plans atomiques, nous calculons, sans utiliser l'approximation de la masse effective, les niveaux liés correspondant à une impureté hydrogénoïde.

Considérons tout d'abord le système formé d'un seul plan. Nous calculerons la structure électronique d'un tel cristal dans l'approximation des liaisons fortes. Nous traitons le cas d'un réseau carré de maille a et nous nous limitons aux interactions aux premiers voisins β . La relation de dispersion est alors :

$$E(\vec{k}) = -2\beta(\cos k_x a + \cos k_y a) \quad (2.2)$$

L'énergie minimale est obtenue pour $\vec{k} // 0$. La masse effective au voisinage de ce minimum est donnée par :

$$m^* = \frac{\hbar^2}{2\beta a^2} \quad (2.3)$$

Considérons dans ce plan un atome donneur substitutionnel créant un potentiel attractif $V(\vec{r})$. On repérera les atomes du plan par le vecteur \vec{R}_i qui relie l'impureté à l'atome i . V sera défini par

$$V(\vec{0}) = U$$

$$V(\vec{R}_i) = -\frac{e^2}{\kappa R_i} \quad \text{pour } \vec{R}_i \neq \vec{0} \quad (2.4)$$

où U représente le potentiel intraatomique.

La solution de ce problème sera numérique : par la méthode des fractions continues [17], nous calculons les éléments de matrice diagonaux de l'opérateur de Green [18]. (On trouvera en appendice A.2 quelques rappels de base, définissant l'opérateur de Green, et donnant le principe de la méthode des fractions continues). Les niveaux d'impuretés seront alors les pôles de ces fonctions de Green.

Ce calcul peut être étendu au cas de quelques plans (pour des raisons de taille et de temps de calcul numérique, le nombre N de plans doit toutefois rester faible). Dans la pratique, nous nous sommes limités au cas de N impair ($N=1,3$ ou 5). En effet le potentiel coulombien est alors une fonction symétrique en z (l'axe Oz est perpendiculaire aux plans, et l'origine appartient au plan central). Nous avons alors séparation des états symétriques et antisymétriques : les états symétriques (ou "pairs") se trouvent sous les bandes paires, et les états antisymétriques (ou "impairs") sous les bandes impaires. La figure II.4 représente les états liés dus à l'impureté, sous les deux bandes inférieures (pour tous les calculs dont les réponses sont données dans ce chapitre, les paramètres ont les valeurs suivantes : $\kappa = 10$, $a=5a_u = 2.65 \text{ \AA}$, $\beta=0.1a_u = 2.72 \text{ eV}$; ces valeurs correspondent aux ordres de grandeurs caractéristiques de cristaux usuels : Si, GaAs, etc...) (le potentiel intraatomique est ajusté pour obtenir un état ls comparable à celui donné par l'approximation de la masse effective : $U = -8a_u = -217.60 \text{ eV}$).

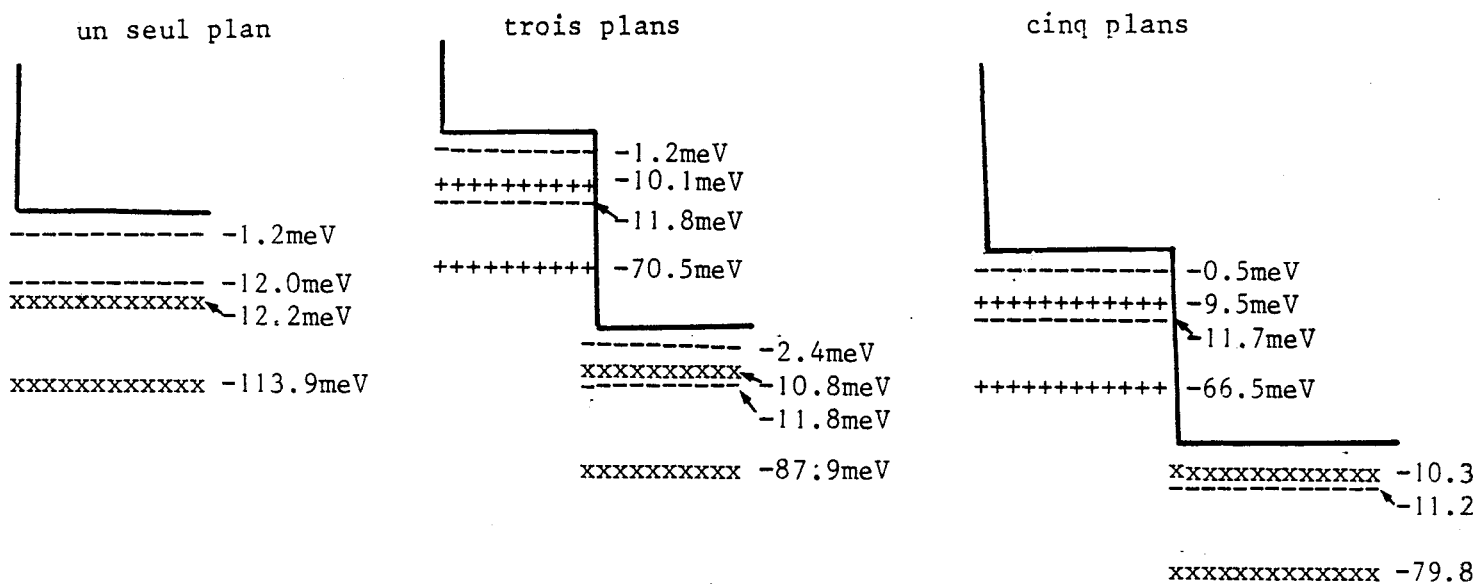


Figure II.4

Etats liés (pairs et impairs) dus à l'impureté, pour un système composé de 1, 3 et 5 plans

Sur cette figure nous avons différencié les états de type p (-----), les états s sensibles au terme intraatomique U (xxxxxx) et des états s indépendants de U (+++++). Lorsque le nombre de plans augmente, les sous-bandes se rapprochent jusqu'à obtention de la bande de volume (pour un nombre très grand de plans), et les états liés se superposent. On peut noter le comportement de l'état "s" le plus lié sous la bande impaire, qui a une allure de type "pz" et deviendra un niveau "p" à la limite d'un grand nombre de plans.

II.3. Cas général : utilisation de l'approximation de la masse effective

Comme nous l'avons vu plus haut, ce calcul ne peut pas être étendu à un nombre de plans N grand et fini. C'est dans ce cas que l'approximation de la masse effective nous permet de calculer les états liés de manière simple. Pour tester la validité de cette approximation, nous allons l'appliquer dans les cas où le calcul "exact" est faisable et comparer les deux résultats.

a) Puits constitué d'un faible nombre de plans

Le cas d'un seul plan peut être résolu de manière analytique. Les techniques classiques de l'approximation de la masse effective pour un système qui est alors bidimensionnel permettent d'obtenir l'équation

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{1}{m_x^*} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{m_y^*} \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) - \frac{e^2}{\kappa r} \right\} f(\vec{r}) = (E - E_0) f(\vec{r}) \quad (2.5)$$

Pour le cristal étudié ci-dessus (cubique simple en bandes "s") $m_x^* = m_y^*$ sont données par (2.3).

L'équation (2.5), qui n'est autre que l'équation de l'atome d'hydrogène à 2 dimensions, se résout à l'aide d'une méthode polynomiale (le traitement est similaire à celui donné par Pauling et Wilson [19], pour l'atome d'hydrogène à trois dimensions). Rappelons ici les grandes étapes du calcul : (2.4) s'écrit en coordonnées cylindriques (ρ, θ)

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \left\{ \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \right\} f - \frac{e^2}{\kappa \rho} f = E f \quad (2.6)$$

Après séparation des variables en posant $f(\rho, \theta) = R(\rho).y(\theta)$ on obtient :

$$\gamma = e^{im\theta} \quad \text{avec } m \in \mathbb{Z} \quad (2.7)$$

et R est donné par l'équation radiale :

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \left\{ \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial}{\partial \rho} R \right) - \frac{m^2}{\rho^2} R \right\} - \frac{e^2}{\kappa \rho} R = ER \quad (2.8)$$

après introduction des quantités

$$\left. \begin{aligned} \alpha^2 &= -2m^*E/\hbar^2 \\ \lambda &= 2m^*e^2/\hbar^2\alpha\kappa \\ r &= \alpha\rho \\ R &= e^{-r}g \end{aligned} \right\} \quad (2.9)$$

on obtient

$$r^2 g'' + g'(r-2r^2) + g((\lambda-1)r-m^2) = 0 \quad (2.10)$$

Si l'on pose

$$g = r^s (a_0 + a_1 r_1 + \dots + a_n r^n) \quad (2.11)$$

La résolution polynomiale donne $s = \pm |m|$ (seule la solution + est acceptable) et $\lambda = 2s + 2n + 1$.

Les énergies sont donc

$$E_{nm} = -\frac{2m^*e^4}{\kappa^2 \hbar^2} \left(\frac{1}{2(n+m) + 1} \right)^2 \quad (2.12)$$

Le tableau ci-dessous permet une comparaison entre le plus bas des niveaux donnés par l'approximation de la masse effective 2D et ceux obtenus par le calcul "exact" en liaisons fortes.



Etat	Calcul exact	Approximation de la masse effective 2D
E _{1s}	-113.9	-108.8
E _{2p}	- 12.0	- 12.1
E _{2s}	- 12.2	- 12.1

Tableau 1

*Niveaux d'énergie des états liés d'un atome hydrogénoïde bidimensionnel
(les énergies sont exprimées en meV)*

Le bon accord observé sur ce tableau témoigne de la bonne qualité de l'approximation de la masse effective. Nous noterons cependant que l'accord obtenu pour le niveau 1s n'est pas significatif, car la valeur numérique dépend fortement du potentiel intraatomique U considéré.

Pour pouvoir établir la comparaison sur un nombre plus grand de niveaux, nous avons traité le cas d'un cristal imaginaire où $\kappa = 1$. Les résultats sont reportés dans le tableau ci-dessous.

état	sensibilité à U	calcul exact	AME 2D
1s	forte	7156	10880
2s	oui	1289	1209
2p	non	1227	1209
3s	oui	468	435
3p	non	446	435
4s	oui	231	222
4p	non	226	222
5s	oui	141	134
5p	non	136	134
6s	oui	92	90
6p	non	90	90



Tableau 2

*Niveaux d'énergie des états liés d'un atome hydrogénoïde bidimensionnel
(les énergies sont exprimées en meV)*

Les niveaux de type "p" ont une fonction d'onde nulle sur le site, ils ne dépendent donc pas du terme U. Pour ces niveaux, l'accord est très bon : les résultats issus des deux calculs diffèrent de moins de 2%.

Appliquons maintenant l'approximation de la masse effective 2D au cas de plusieurs plans. Au lieu d'une seule équation différentielle, on obtient alors un système de N équations différentielles couplées. Ce système n'a pas de solution simple en général.

Cependant, pour un système de trois plans avec une impureté hydrogénoïde dans le plan central, il est encore possible de trouver une solution analytique simple :

Notons $|i, \ell\rangle$ la fonction atomique centrée sur l'atome ℓ du $i^{\text{ème}}$ plan ($i = 1, 2$ ou 3). En utilisant les symétries du problème, on construit, à partir de $|1, \ell\rangle$, $|2, \ell\rangle$ et $|3, \ell\rangle$ une combinaison antisymétrique :

$$|a, \ell\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|1, \ell\rangle - |3, \ell\rangle) \quad (2.13)$$

et deux autres combinaisons symétriques.

Les solutions antisymétriques s'expriment alors uniquement en fonction des $|a, \ell\rangle$ et on se ramène à un problème bidimensionnel pur : seuls les éléments de matrice du potentiel d'impureté sont différents du cas d'un plan unique :

$$\langle a, \ell | V | a, \ell' \rangle = \frac{1}{2} (\langle 1, \ell | V | 1, \ell' \rangle + \langle 3, \ell | V | 3, \ell' \rangle) \delta_{\ell, \ell'} \quad (2.14)$$

$$\langle a, \ell | V | a, \ell' \rangle = - \frac{e^2}{\kappa(R_\ell^2 + a^2)^{1/2}} \delta_{\ell, \ell'} \quad (2.15)$$

au lieu de $1/\kappa R_\ell$ pour un plan unique.

L'équation à résoudre est donc (2.6) où le potentiel est remplacé par $-e^2/\kappa(\rho^2+a^2)^{1/2}$. La résolution se fait par une méthode variationnelle. Pour l'état fondamental "1s" nous utilisons la fonction d'essai :

$$f_{1s}(r) = Ae^{-\alpha\rho} \quad (2.16)$$

On obtient donc :

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \left(\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) e^{-\alpha \rho} - \frac{e^2}{\kappa \sqrt{\rho^2 + a^2}} e^{-\alpha \rho} = E_{1s}(\alpha) e^{-\alpha \rho} \quad (2.17)$$

Après multiplication par $e^{-\alpha \rho}$ et intégration sur tout l'espace, il vient :

$$E_{1s}(\alpha) = \frac{-\frac{\hbar^2}{2m^*} \iiint e^{-\alpha \rho} \left(\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{\partial^2}{\partial \rho^2} \right) e^{-\alpha \rho} \rho \, d\rho \, d\theta \, dz - \frac{e^2}{\kappa} \iiint \frac{e^{-2\alpha \rho} \rho \, d\rho \, d\theta \, dz}{\sqrt{\rho^2 + a^2}}}{\iiint e^{-\alpha \rho} \rho \, d\rho \, d\theta \, dz} \quad (2.18)$$

soit encore

$$E_{1s}(\alpha) = \frac{\hbar^2}{2m^*} \alpha^2 - \frac{e^2}{\kappa} 4\alpha^2 \int_{\rho=0}^{\infty} \frac{e^{-2\alpha \rho}}{\sqrt{\rho^2 + a^2}} \rho \, d\rho \quad (2.19)$$

En utilisant (cf ref.[20])

$$\int_0^{\infty} \frac{x e^{-\mu x} dx}{\sqrt{x^2 + \beta^2}} = \frac{\beta \pi}{2} (H_1(\beta \mu) - N_1(\beta \mu)) - \beta \quad (2.20)$$

où H_1 et N_1 représentent les fonctions de Struve et Neuman du 1er ordre. Il vient :

$$E_{1s}(\alpha) = \frac{\hbar^2}{2m^*} \alpha^2 + 4 \frac{e^2 \alpha^2 a}{\kappa} \left\{ 1 - \frac{\pi}{2} [H_1(2\alpha a) - N_1(2\alpha a)] \right\} \quad (2.21)$$

Il suffit alors de minimiser $E_{1s}(\alpha)$ pour obtenir les valeurs optimales α_m et $E_{1s}(\alpha_m)$. Pour l'état "2p" qui est, pour des raisons de symétrie, orthogonal à l'état 1s, la même procédure est appliquée, avec comme fonction d'essai

$$f_{2p}(\rho, \theta) = A \rho e^{-\alpha \rho} \cos \theta \quad (2.22)$$

On obtient

$$E_{2p}(\alpha) = \frac{\hbar^2 \alpha^2}{2m^*} - \frac{4e^2 \alpha}{3\kappa} [a + F_1(1-2a^2\alpha^2) - 2\alpha a^2 F_2] \quad (2.23)$$

avec

$$F_1 = a\pi [H_1(2\alpha a) - N_1(2\alpha a)]/2 - a$$

et

$$F_2 = \pi [H_0(2\alpha a) - N_0(2\alpha a)]/2$$

où H_0 et N_0 sont les fonctions de Struve et Neuman d'ordre 0. Le cas de l'état 2s ne peut pas être traité de manière aussi rigoureuse, car nous ne pouvons pas choisir une fonction d'essai orthogonale à l'état 1s exact. Nous ne pouvons que l'orthogonaliser à l'état 1s variationnel obtenu plus haut.

Nous posons donc :

$$f_{2s}(\rho) = A(b-\rho)e^{-\alpha\rho} \quad (2.24)$$

b assure l'orthogonalité avec f_{1s} , soit $b = 2/\alpha + \alpha_{1s}$

Il vient alors

$$E_{2s}(\alpha) = \left(\frac{b^2}{4\alpha^2} - \frac{b}{3\alpha^3} - \frac{3}{8\alpha^4} \right)^{-1} \left[\frac{\hbar^2 \alpha^2}{2m^*} \left(\frac{b^2}{4\alpha^2} - \frac{1}{8\alpha^4} \right) - \frac{e^2}{\kappa} (b^2 F_0 - 2aF_1 + F_2) \right] \quad (2.25)$$

avec

$$F_0 = \pi a [H_1(2\alpha a) - N_1(2\alpha a)]/2 - a$$

$$F_1 = (a+F_0)/2\alpha - \alpha^2 \pi [H_0(2\alpha a) - N_0(2\alpha a)]/2$$

$$F_2 = -a^2 F_0 + F_1/2\alpha + (a+F_0)/(2\alpha)^2$$

Les résultats obtenus après minimisation de $E_{1s}(\alpha)$, $E_{2s}(\alpha)$, et $E_{2p}(\alpha)$ sont reportés dans le tableau ci-dessous

Etat	Calcul "exact"	AME 2D
1s	- 70.5	- 70.5
2s	- 11.8	- 11.3
2p	- 10.1	- 10.3

Tableau 3

Niveaux d'énergie (exprimés en meV) des états antisymétriques liés à une impureté hydrogénoïde pour un système composé de 3 plans

Le bon accord observé sur ce tableau montre la qualité de l'approximation de la masse effective 2D, appliquée à ce type de problème.

b) Puits constitué de N plans

Dans le cas d'un nombre de plans N, nous utilisons l'équation générale établie au chapitre 1 (1.31)

$$[\epsilon_n(\vec{k}_{//}^0) - E - \frac{\hbar^2}{2m_{//}^*} \Delta_{//} + U_n(\vec{r}_{//})] F_n(\vec{r}_{//}) = 0 \quad (1.31)$$

On trouvera en appendice A3 le calcul du $U_n(\vec{r}_{//})$ pour un système cubique simple en bande s.

Le potentiel obtenu est

$$U_n(\vec{r}_{//}) = \frac{\sum_{j=1}^N \sin^2 [n\pi j / (N+1)] V(\vec{r}_{//}, \vec{z}_j)}{\sum_{j=1}^N \sin^2 [n\pi j / (N+1)]} \quad (2.26)$$

Pour des superréseaux constitués d'un très petit nombre de plans (1 ou 3) nous retrouvons exactement les équations (2.5) et (2.17) traitées plus

haut. L'expression de $U_n(\vec{r})$ obtenue en (2.26) s'exprime comme une série. Ceci est dû au fait que nous traitons le problème en liaisons fortes. L'utilisation d'une série étant peu pratique, il est intéressant de passer de ce modèle discret à un modèle continu. Ceci est possible dès que le nombre de plans n'est plus trop faible ; il suffit alors d'approximer la série par une intégrale. Il vient alors

$$U_n(\vec{r}_{//}) = \frac{\int_0^L \sin^2(n\pi z/L) V(\vec{r}_{//}, z) dz}{\int_0^L \sin^2(n\pi z/L) dz} \quad (2.27)$$

avec $L = Na$

L'équation à résoudre est donc :

$$\left[E_n(\vec{k}_{//}^0) - E - \frac{\hbar^2}{2m_{//}^*} \left(\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \right) - \frac{\int_0^L \sin^2(n\pi z/L) \frac{e^z}{\kappa \sqrt{\rho^2 + (z-zi)^2}} dz}{\int_0^L \sin^2(n\pi z/L) dz} \right] F_n(\vec{r}_{//}) = 0$$

où z_i repère la position de l'impureté hydrogénéoïde.

Nous nous intéressons à la solution la plus basse (1s) issue de la sous bande inférieure (correspondant à $n = 1$). Nous utilisons à nouveau une méthode variationnelle. La fonction enveloppe utilisée est :

$$F_n(\vec{r}) = A e^{-\alpha_n \rho}$$

$E_{1s}(\alpha_n)$ est alors donnée par

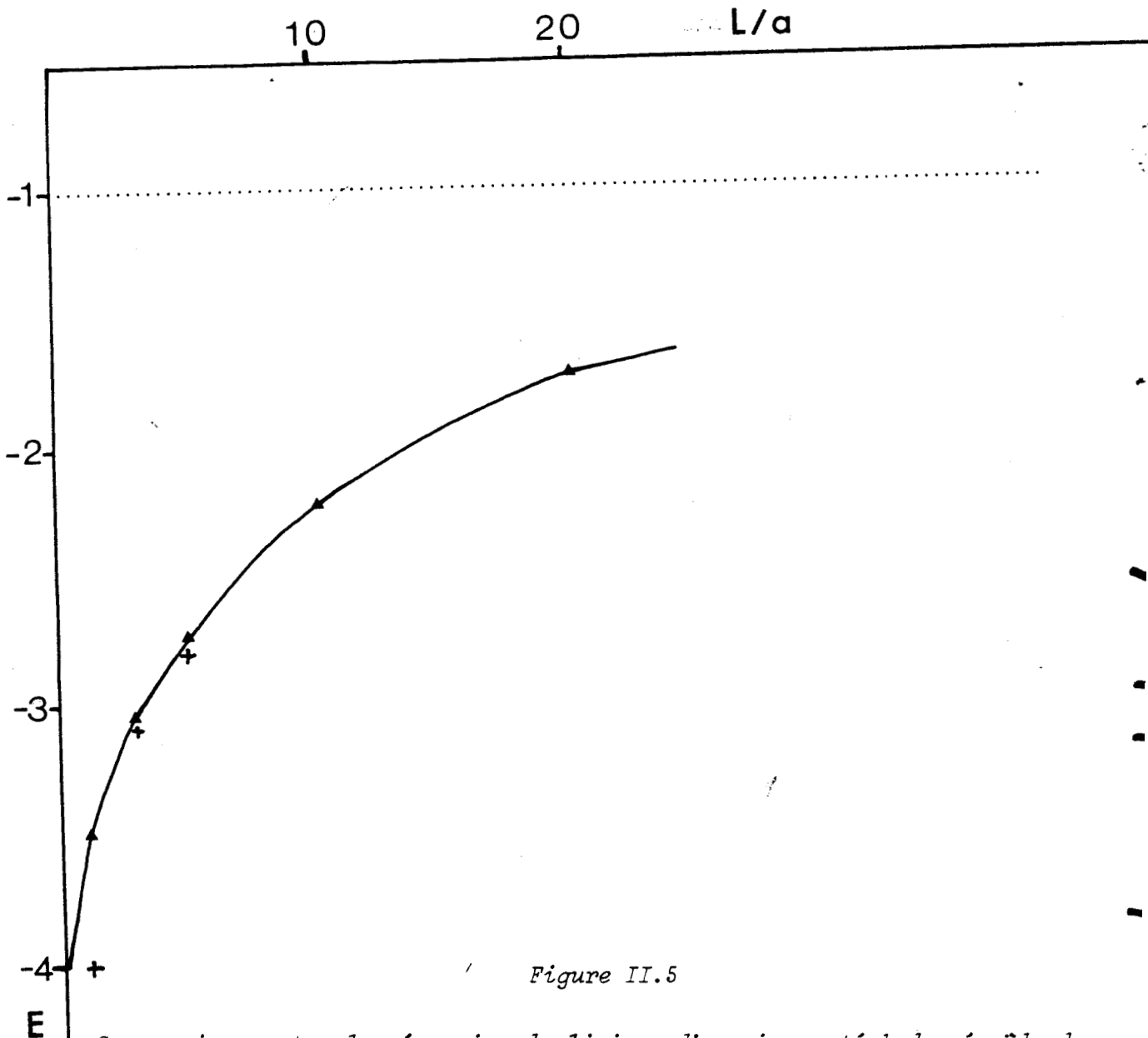
$$E_{1s}(\alpha_n) - E_n(\vec{k}_{//}^0) = \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m_{//}^*} \int_0^\infty \int_0^{2\pi} e^{-2\alpha \rho} \Delta_{//} e^{-\alpha \rho} \rho d\rho d\theta - \frac{2e^z}{L\kappa} \int_{-L/2}^{L/2} \int_0^{2\pi} \int_0^\infty \sin^2 \left[n\pi \left(\frac{z}{L} + \frac{1}{2} \right) \right] e^{-2\alpha_n \rho} / \sqrt{\rho^2 + (z-zi)^2} \rho d\rho d\theta \right\} / \int_0^\infty \int_0^{2\pi} e^{-2\alpha \rho} \rho d\rho d\theta \quad (2.29)$$

soit encore

$$E_{1s}(\alpha_n) - E_n(\vec{k}_{//}^0) = \frac{\hbar^2 \alpha_n^2}{2m_{//}^*} - \frac{8\alpha_n^2 e^z}{\kappa L} \int_{-L/2}^{L/2} \left[(\pi/2) (H_1(2\alpha_n(z-zi))) - N_1(2\alpha_n(z-zi)) - 1 \right] \sin^2 \left[n\pi \left(\frac{z}{L} + \frac{1}{2} \right) \right] |z-zi| dz \quad (2.30)$$

qu'il nous suffit de minimiser pour obtenir la valeur optimale.

Sur la figure (II.5) sont représentées les variations de l'énergie de liaison en fonction de la largeur du puits considéré. On a reporté sur ce graphique les résultats du calcul discret pour $N = 1, 3$ ou 5 plans (calcul numérique, en liaison fortes). On peut constater qu'il n'y a de différence significative entre le modèle continu et le modèle discret que pour des puits très étroits : l'erreur maximale qui a lieu pour $N = 1$, est de 13 % de l'énergie de liaison. Dès que $N > 1$ l'erreur est pratiquement négligeable.



Comparaison entre les énergies de liaison d'une impureté hydrogénoïde dans un puits infini obtenues par un modèle continu (courbe) et un calcul discret (croix) [les énergies sont exprimées en coordonnée réduite : $E/(m^*e^2/2\kappa^2\hbar^2)$].

On peut donc conclure que l'approximation de la masse effective à deux dimensions dans sa version continue est une méthode tout à fait adaptée au calcul des énergies de liaison pour un nombre relativement faible de plans atomiques.

c) Comparaison avec le modèle tridimensionnel de Bastard

Il est clair que, si le puits devient très large, l'approximation de la masse effective tridimensionnelle deviendra mieux adaptée au problème. Pour connaître la limite supérieure de N pour laquelle notre modèle reste valide, il est intéressant de comparer les énergies de liaison obtenues par le modèle que nous venons d'établir (noté 2D) et celles obtenues par le modèle de Bastard, que nous avons décrit au chapitre précédent (équations 1.16 à 1.18). Nous avons alors noté qu'une approche tridimensionnelle (notée 3D) introduit une erreur non négligeable sur le niveau fondamental ; par contre si l'on s'intéresse uniquement à l'énergie de liaison, les résultats sont beaucoup plus satisfaisants. La figure II.6 permet la comparaison entre les énergies de liaison issues d'un modèle 3D (en tirets) et 2D (en pointillés).

Nous pouvons constater que les deux modèles donnent des résultats pratiquement semblables pour des puits de largeur inférieure à 200 Å, le modèle 2D étant très légèrement supérieur au modèle 3D. Pour les puits plus larges, l'énergie de liaison issue du modèle 3D est la plus élevée, ce qui signifie que, pour les larges puits, la fonction d'essai 3D est mieux adaptée que la fonction d'essai 2D.

Nous avons donc vérifié que l'énergie de liaison de l'état $1s$ prédite par l'approximation de la masse effective 3D est correcte. Le principal défaut de cette approximation est donc que l'énergie obtenue n'est pas reliée au vrai bas de bande, et que l'erreur sur ce bas de bande peut être de l'ordre de l'énergie de liaison, ou même plus grande. L'approximation de la masse effective 2D, quant à elle, donne des énergies de liaison reliées aux bas de bande exacts. Nous verrons au chapitre suivant que, si l'on tient compte de la hauteur finie du puits, la méthode présente d'autres avantages par rapport à un modèle 3D.

Un autre intérêt du modèle 2D est qu'il permet aussi le calcul des états liés à l'impureté issus de chacune des sous-bandes bidimensionnelles du système. Ce calcul n'est pas possible dans un modèle 3D où l'on ne dispose pas de moyen systématique pour construire une fonction d'onde associée à un état d'impureté issu des sous-bandes supérieures qui soit orthogonale à tous les états d'énergie inférieure.

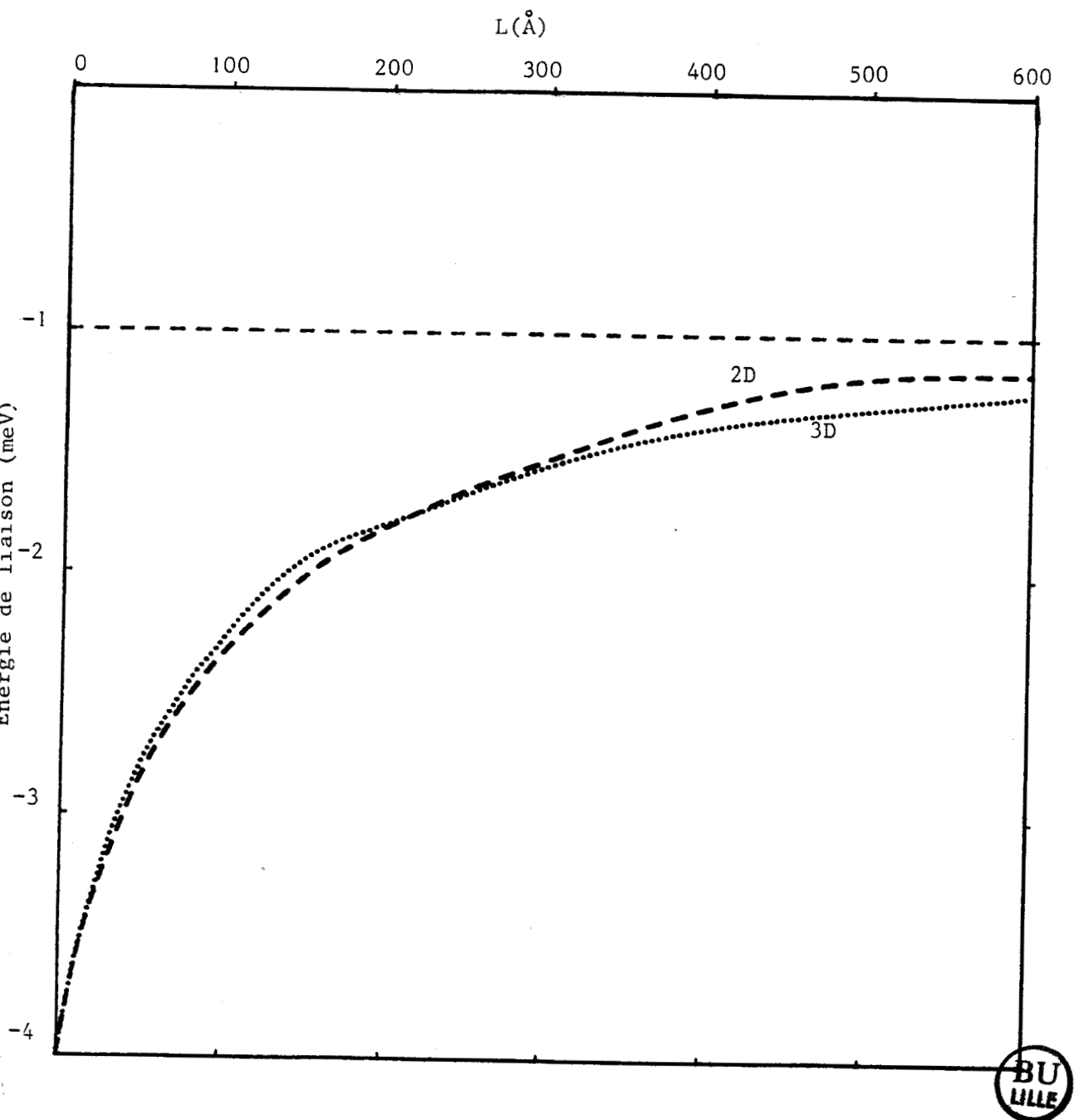


Figure II.6

Energie de liaison d'une impureté hydrogénoïde dans un puits infini issue d'un modèle 2D (pointillés) et 3D (tirets). Les paramètres m^* , et κ sont ceux en bas de bande de conduction de GaAs ($m^* = 0.067 m_0$ et $\kappa = 13.1$). Les énergies sont exprimées en énergies réduites : $(E/(m^*e^2/2\kappa^2\kappa^2))$.

II.4. Application au calcul des états résonants

• Nous avons établi au chapitre I (paragraphe I.4) que la bande de conduction d'une structure à puits quantique est composée de plusieurs

sous-bandes 2D. De chacune de ces sous-bandes peuvent sortir des états d'impuretés. Chaque état issu d'un sous-bande autre que la plus basse est situé dans le continuum formé par les sous-bandes inférieures à celle dont il est issu. Ces états résonnants sont, a priori, couplés avec le continuum. Nous allons calculer ce couplage. Il nous faut tout d'abord décrire la structure de bande du superréseau parfait. Celle-ci a été calculée de manière complète par Schulman et Mc Gill [61]. Nous nous contentons ici d'un modèle beaucoup plus simple où le superréseau est ramené à un puits infini de largeur L .

Nous obtenons la densité d'états en marches d'escalier représentée fig. II.7.

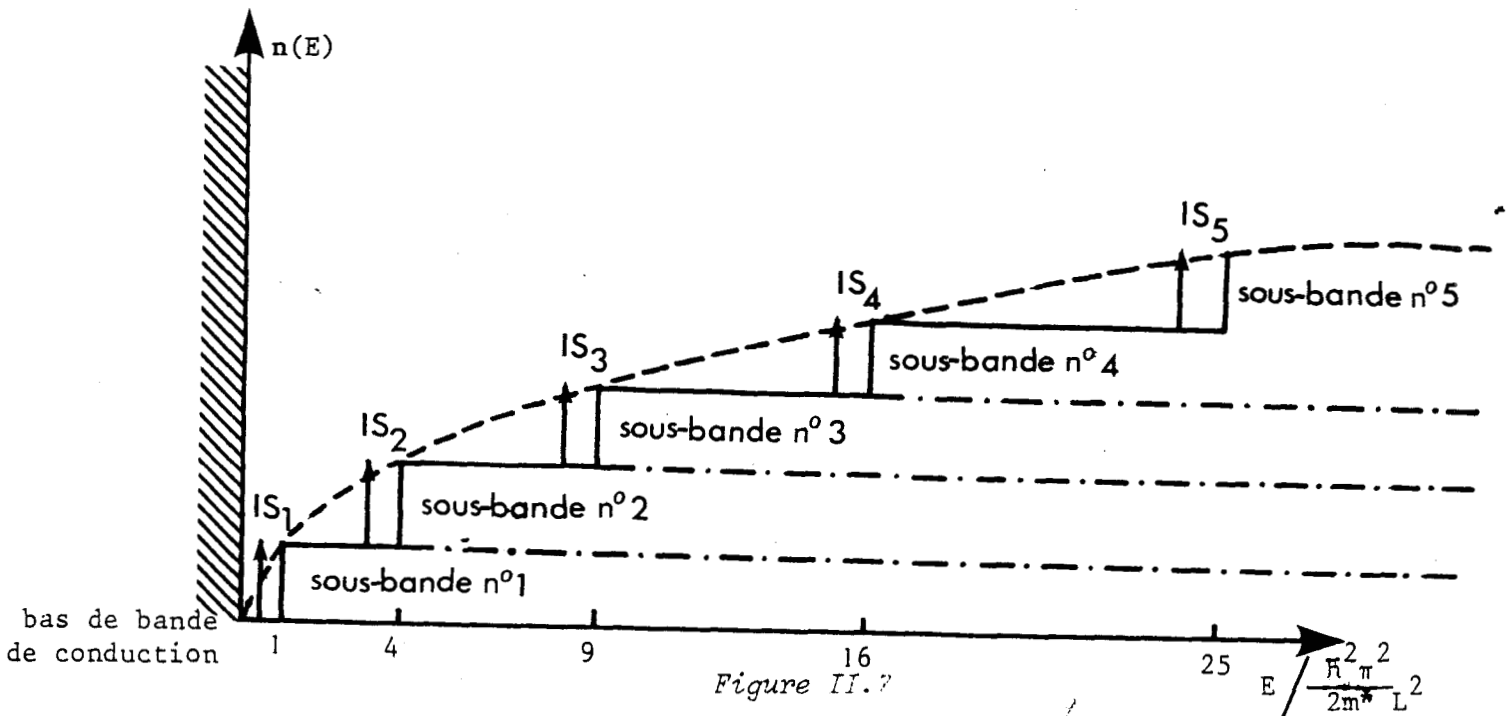


Figure II.7

Les états résonnants correspondant à un puits infiniment profond en z . Les états résonnants sont représentés par les flèches IS_n .

Dans l'approximation de la masse effective, les états propres de l'hamiltonien non perturbé s'expriment :

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \sqrt{2/LS} \exp(i \vec{k}_{\parallel} \cdot \vec{r}_{\parallel}) \sin(k_n(z+L/2)) \quad (2.31)$$

où \vec{r} et z sont les composantes du vecteur position \vec{r} , parallèlement et perpendiculairement aux couches, S est la surface des couches et $k_n = n\pi/L$

($n \geq 1$). Les énergies correspondant à ces fonctions d'onde sont alors

$$E_n(\vec{k}) = \hbar^2 k_{\parallel}^2 / 2m^* + \hbar^2 k_n^2 / 2m^* \quad (2.32)$$

Nous avons donc une superposition de sous-bandes bidimensionnelles. Si maintenant on introduit, au centre du puits, une impureté de potentiel perturbateur

$$V(\vec{r}) = - \frac{e^2}{\kappa \sqrt{r_{\parallel}^2 + z^2}} \quad , \quad (2.33)$$

des états localisés apparaîtront sous chacune des sous-bandes. L'utilisation de l'approximation de masse effective, nous l'avons vu au chapitre précédent, implique de développer la fonction d'onde associée à un état d'impureté en fonction des fonctions d'onde du système parfait de la sous-bande la plus proche (cf. eq. 1.20). Ce faisant, nous négligeons le couplage de l'état d'impureté avec les autres sous-bandes. L'énergie des états localisés est alors donnée par (2.29). Le tableau ci-dessous donne les énergies de liaison (en meV) du plus bas niveau d'énergie lié à l'impureté sous les cinq premières sous-bandes pour différentes largeurs de couches (exprimées en unités atomiques) ($m^* = 0.2$ u.at. $\kappa = 10$).

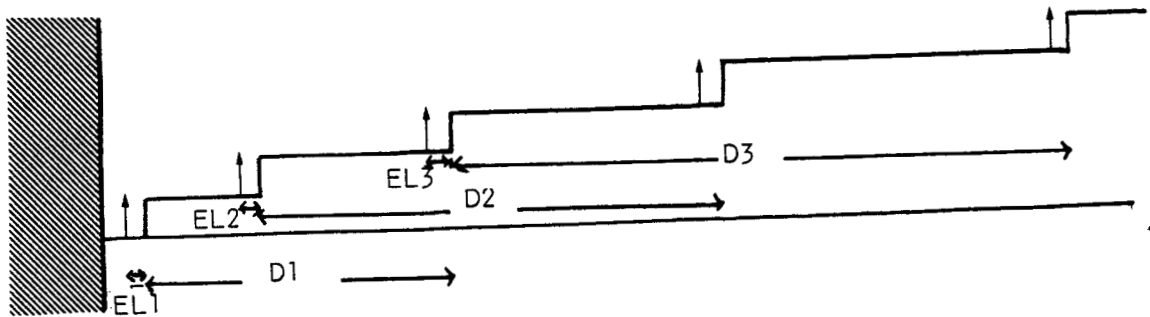
sous bande n° \ L (en 0.53 Å)	1	2	3	4	5	$\frac{\hbar^2 \pi^2}{2m^* L^2}$
50	61	50	51	52	50	270
100	47	46	38	37	37	67
200	34	24	26	25	25	17
300	27	19	21	20	20	7

Tableau 4

Energies de liaison (en meV) du plus bas niveau d'impureté sous les cinq premières sous-bandes.

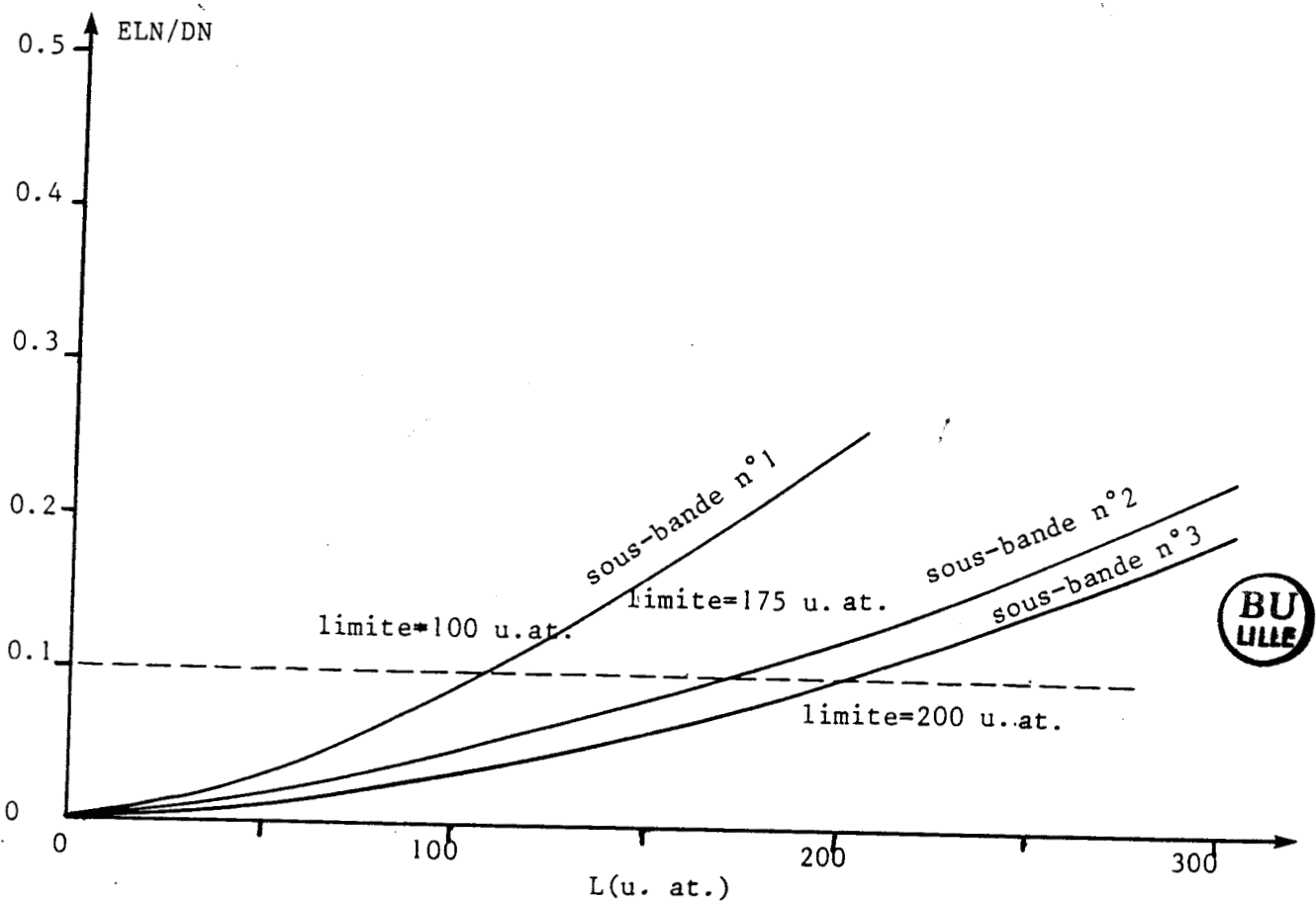
Il faut noter que, pour des puits larges, le modèle n'est plus valide. Nous avons jusqu'ici considéré que chaque état est issu d'une seule sous-bande. Ceci reste vrai tant que l'énergie de liaison de l'impureté

(notée ELN) est faible devant la distance (DN) entre la sous-bande dont on le suppose issu et la plus proche autre sous-bande à laquelle il peut être couplé :



(nous tenons compte de la parité des états).

Nous avons représenté ci-dessous le rapport ELN/DN pour les trois premières sous-bandes



Si l'on place la condition à $ELN/DN = 0.1$ (ce qui est probablement assez restrictif) les valeurs limites de L sont 100, 175 et 200 unités atomiques pour les états liés issus des sous-bandes n° 1, 2 et 3. Quand L est inférieur à la valeur limite donnée ci-dessus, nous pouvons considérer que l'état bidimensionnel obtenu est très proche de la solution exacte. Nous pouvons alors utiliser cet état pour étudier le couplage avec les autres sous-bandes, ce qui nous permettra d'évaluer le décalage et l'élargissement des résonances correspondantes.

L'étude du décalage et de l'élargissement d'un état d'impureté résonant en volume a été effectuée par Bassani et al. [21]. Nous rappellerons ici brièvement les principes de base.

Considérons une résonance résultant du couplage entre deux systèmes préalablement découplés : un état localisé et un continuum. Notons h et H les hamiltoniens des systèmes découplé et couplé, g et G les opérateurs de Green correspondants, $|\alpha\rangle$ les états propres du continuum découplé, $|0\rangle$ l'état localisé non couplé, et V l'opérateur couplant les deux sous-systèmes. Nous avons alors :

$$\begin{aligned} h |0\rangle &= E_0 |0\rangle \\ h |\alpha\rangle &= E_\alpha |\alpha\rangle \end{aligned} \tag{2.34}$$

l'équation de Dyson s'écrit :

$$G = g + gVG$$

ou encore

$$G_{00} = g_{00} + g_{00} \sum_{\alpha} V_{\alpha 0} G_{\alpha 0}$$

où

$$g_{00} = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{E - E_0 + i\epsilon} \tag{2.35}$$

et

$$G_{\alpha 0} = g_{\alpha\alpha} V_{\alpha 0} G_{00}$$

Il vient alors

$$G_{00} = \frac{g_{00}}{1 - g_{00} \sum_{\alpha} V_{\alpha 0} g_{\alpha\alpha} V_{\alpha 0}} \tag{2.36}$$

qui s'écrit encore

$$G_{00} = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left[E - E_0 - P \sum_{\alpha} \frac{|V_{0\alpha}|^2}{E - E_{\alpha}} + i\pi \sum_{\alpha} |V_{0\alpha}|^2 \delta(E - E_{\alpha}) \right]^{-1}$$

La partie imaginaire de $-(1/\pi)G_{00}$ correspond à une densité d'état parallèle qui présente, pour de faibles valeurs de V , un pic étroit centré sur l'énergie E_R donnée par

$$E_R = E_0 + \sum_{\alpha} \{ |V_{0\alpha}|^2 / (E_R - E_{\alpha}) \} \quad (2.37)$$

Au voisinage de E_R , la densité d'états peut être approximée par une Lorentzienne de largeur Γ

$$\Gamma = \pi \sum_{\alpha} |V_{0\alpha}|^2 \delta(E_R - E_{\alpha}) \quad (2.38)$$

L'expression (2.37) de E_R indique que le décalage sera significatif seulement si $(E_R - E_{\alpha})$ peut être faible. C'est pourquoi nous considérons uniquement les corrections dues au couplage avec les sous-bandes qui recouvrent le niveau E_0 (alors, comme le décalage est faible, E_R sera également dans la même sous-bande). Comme il apparaît sur la courbe de densité d'état représentée figure II.7, l'état d'impureté issu de la $n^{\text{ième}}$ sous-bande se couplera uniquement avec les $(n-1)$ sous-bandes inférieures.

L'expression d'un état propre de la $n^{\text{ième}}$ sous bande est donnée par (2.31) ; la fonction d'onde associée à l'état d'impureté ls issu de la $n^{\text{ième}}$ sous bande s'écrit :

$$\psi_n(\vec{r}) = N \exp(-\alpha_n \rho) \sin[n\pi(z/L + 1/2)] \quad (2.39)$$

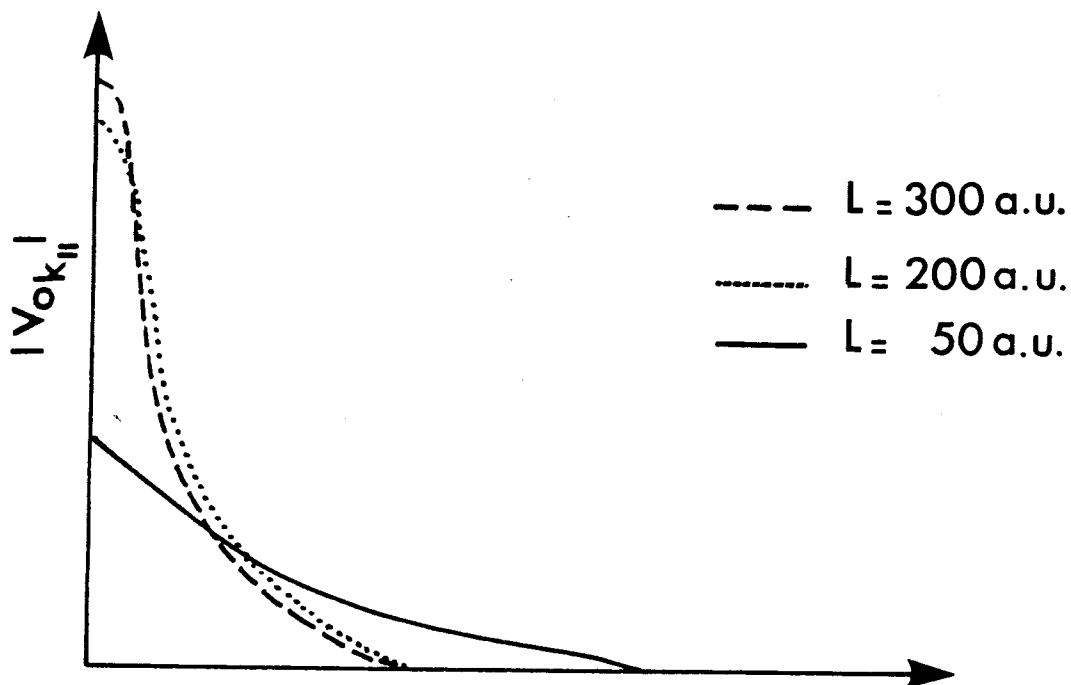
L'élément de matrice $V_{0k_{||}}$ couplant cet état d'impureté avec un état de la $m^{\text{ième}}$ sous-bande est alors donné, dans le cas d'une impureté centrale, par

$$V_{0k_{||}} = -\frac{e^2}{\kappa} N \left[\frac{z}{Ls} \right]^{1/2} \int_0^{2\pi} d\theta \int_0^{\infty} dp \int_{-L/2}^{L/2} dz \frac{\rho e^{-\alpha_n \rho}}{(\rho^2 + z^2)^{1/2}} \cdot \sin \left[n\pi \left(\frac{z}{L} + \frac{1}{2} \right) \right] \sin \left[m\pi \left(\frac{z}{L} + \frac{1}{2} \right) \right] e^{i k_{||} \rho} \quad (2.40)$$

Pour des raisons de symétrie cette quantité s'annule quand m et n n'ont pas la même parité. Un état d'impureté se couple donc uniquement avec les sous-

bandes de même symétrie. Il apparaît donc que les états d'énergie issus des deux sous-bandes les plus basses ne sont pas modifiés par le couplage avec le continuum. Par contre, pour les états issus des 3ème et 4ème sous-bandes, une correction doit être apportée, exprimant le couplage avec une seule sous bande (la 1ère ou la 2nde).

La figure ci-dessous représente les variations du couplage $|V_{0k_{||}}|$ entre un état issu de la 3ème sous-bande, et le continuum de la 1ère sous-bande, ceci pour différentes largeurs de puits.



Pour accéder au décalage $(E_R - E_0)$ il suffit de rechercher le zéro de la fonction :

$$f(E) = E - E_0 - \sum_{\alpha} \{ |V_{0\alpha}|^2 / (E - E_{\alpha}) \} \quad (2.41)$$

L'utilisation de la densité d'états bidimensionnelle $n(\vec{k}_{||})$ permet de remplacer la série par une intégrale :

$$\sum_{\alpha} \{ |V_{0\alpha}|^2 / (E - E_{\alpha}) \} = \int_0^{\infty} d\vec{k}_{||} |V_{0\vec{k}_{||}}|^2 n(\vec{k}_{||}) / (E - E_{\vec{k}_{||}})$$

Il est alors pratique d'intégrer sur l'énergie. Pour cela il suffit d'injecter



$$E' = \frac{\hbar^2}{2m^*} k_{//}^2 + E_B$$

Il vient alors

$$f(E) = E - E_0 - \frac{S}{2\pi} \frac{m^*}{\hbar^2} \int_{E_B}^0 \frac{V_{0E}}{E - E'} dE' \quad (2.42)$$

où E_B est l'énergie du bas de la sous bande considérée.

La même démarche permet d'exprimer l'élargissement :

$$\Gamma = \frac{S}{2\pi} \frac{m^*}{\hbar^2} |V_{0E_R}|^2$$

Dans le tableau ci-dessous sont reportés, pour différentes largeurs de puits le décalage et l'élargissement de l'état lié le plus bas, issu de la 3ème sous-bande.

L(u.at)	E_{B1}	E_{B3}	E_0	$E_{B3} - E_0$	$E_R - E_0$	Γ
50	268	2416	2365	51	(*)	0.1
200	16.8	150	132	26.3	1.3	0.8
300	7.5	67	46	20.8	0.5	1.1

(*) inférieur à la précision du calcul



Tableau 5

Valeurs du décalage $E_R - E_0$, et de l'élargissement Γ de l'état lié le plus bas, issu de la 3ème sous-bande. E_{B1} et E_{B3} repèrent les bas des 1ère et 3ème sous-bandes, et E_0 l'état d'impureté en l'absence de couplage. Les énergies sont toutes exprimées en meV.

Sur ce tableau, il apparaît que le couplage est très faible : le décalage et l'élargissement sont tous deux très faibles par rapport à l'énergie de liaison $E_{B3}-E_0$. Ce résultat peut être généralisé aux états issus des sous-bandes supérieures. En effet les valeurs E_B-E_0 étant plus grandes, le couplage sera encore plus faible et les résonances seront plus étroites. Nous concluons donc que, dans tous les cas, il est légitime de négliger les corrections dues au couplage entre les états d'impureté issus d'une sous-bande et le continuum dans lequel ils se trouvent. Cette remarque est en accord avec l'observation expérimentale de pics excitoniques très étroits issus de sous bandes d'ordre supérieur [22].

II.5. Conclusion

Dans ce chapitre nous avons mis au point un modèle 2D permettant le calcul des niveaux d'énergie liés à une impureté hydrogénoïde. Nous avons testé ce modèle dans le cas d'un puits infini. Ceci nous a permis de montrer qu'il est tout à fait adapté à l'étude de systèmes du type superréseau. De plus il nous offre la possibilité de calculer les états résonants. Nous avons ainsi établi que le couplage entre états d'impureté et continuum est très faible. Aussi le négligerons-nous désormais.

Nous allons maintenant nous intéresser à des superréseaux "réalistes" (composés d'alternance de couches GaAs et Ga(Al)As). L'approximation de la masse effective à deux dimensions est bien adaptée au traitement de tels systèmes, pourvu que la probabilité que l'électron traverse des barrières par effet tunnel reste faible. Dans le chapitre suivant nous calculerons les niveaux d'une impureté de type donneur. Les excitons seront étudiés au chapitre IV.

CHAPITRE III

Etude d'une impureté hydrogénoïde dans un superréseau réaliste de type I

Si nous considérons un superréseau GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs, la différence de bande interdite est, dans la plupart des systèmes réels étudiés, inférieure à 0.5 eV. Il n'est plus alors possible de modéliser le système par un puits infini. Par contre les expériences ont surtout été effectuées sur des puits séparés par des barrières assez épaisses ; la transmission par effet tunnel entre puits est alors très faible. Aussi, dans ce chapitre, nous modélisons le superréseau par un seul puits de hauteur finie.

Nous montrons que, si l'on tient compte, d'une part, du fait que la hauteur de barrière est finie et, d'autre part, que les masses effectives sont différentes dans les deux matériaux qui constituent le superréseau, notre modèle est le seul possible à un seul paramètre qui permette de satisfaire aux conditions de raccordement. Nous introduisons ici la notion de masse effective équivalente, de valeur très différente de la masse effective volumique. Nous comparons les résultats de nos calculs avec ceux issus de modèles beaucoup plus sophistiqués, donc moins maniables.

Les composants dans lesquels entrent en jeu des structures à puits quantiques sont très souvent, en fonctionnement, soumis à un champ électrique ; c'est pourquoi nous traitons ensuite le cas d'un superréseau sous champ électrique.

Nous avons testé au chapitre précédent la validité de notre modèle pour un puits infini. Les modèles 2D et 3D donnaient alors des résultats comparables. Nous étudions maintenant le cas plus réaliste où l'électron a une probabilité non nulle de pénétrer dans la barrière. Nous verrons que le modèle 2D devient ici nettement plus performant que le modèle 3D.

III.1. Impureté hydrogénoïde dans un puits de hauteur finie sans saut de masse effective

Considérons un superréseau GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs. Les tranches de GaAs forment les puits dans lesquels sont principalement confinés les électrons. Dans la plupart des échantillons, les épaisseurs des couches de Ga_{1-x}Al_xAs formant les barrières sont assez grandes pour que la probabilité qu'un électron saute d'un puits dans le puits voisin soit négligeable. Dans certains cas pourtant (études en cours au CNET de Lannion) les échantillons présentent des barrières qui sont assez minces. Il faut alors tenir compte de tous les puits (nous y reviendrons à la fin du chapitre suivant).

Considérons ici le cas plus fréquent où les barrières sont assez larges. Nous pouvons donc modéliser le superréseau par un puits unique de largeur L et de hauteur V_0 finie. La hauteur du puits sera déterminée par la composition x du matériau barrière. En effet Ga_{1-x}Al_xAs est un semiconducteur à gap direct tant que x reste inférieur à 0.435, et la largeur de bande interdite à basse température est donnée [23] par

$$E_G [\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}] = 1.519 + 1.245 x \quad (\text{eV}) \quad (3.1)$$

La hauteur du puits ΔE_c est inférieure à $\Delta E_G = 1.245x$ (eV) (la répartition de la différence de gap entre les bandes de valence et de conduction reste un problème ouvert dont nous ne traitons pas dans ce chapitre ; pour les applications numériques nous avons utilisé la "règle des 85%-15%" de Dingle [22] qui était admise au moment où les calculs ont été effectués).

Nous étudierons donc des puits de hauteur inférieure à 500 meV. Dans ce cas la probabilité pour l'électron de se trouver dans le matériau barrière est loin d'être négligeable. Dans un premier temps, nous ne prendrons pas en compte la différence entre les masses effectives du matériau puits et du matériau barrière (ceci est nécessaire pour permettre la comparaison entre les modèles 2D et 3D).

A nouveau, comme pour le puits infiniment profond, nous utilisons

l'équation générale dérivée au chapitre I (1.31)

$$[\varepsilon_n(\vec{k}_{//}^0) - E - \frac{\hbar^2}{2m^*} \Delta_{//} + U_n(\vec{r}_{//})] F_n(\vec{r}_{//}) = 0 \quad (1.31)$$

$$F_n(\vec{r}_{//}) = 0$$

m^* est donnée par (1.30), U_n par (1.26) et (1.27).

Ici encore, la quantification en z (direction perpendiculaire aux couches) permet de grouper les courbes de dispersion, en l'absence d'impureté, en sous-bandes bidimensionnelles. Considérons une impureté de type donneur située en $r_{//} = 0$, $z = z_i$. Pour l'état d'impureté le plus bas issu de la sous-bande la plus basse, nous utilisons la fonction d'essai $F(\vec{r}_{//}) = Ne^{-\alpha r_{//}}$. Le potentiel effectif $U_n(\vec{r}_{//})$ s'écrit

$$U_n(\vec{r}_{//}) = - \int_{-\infty}^{+\infty} |f_n(z)|^2 \frac{e^2}{\kappa \sqrt{r_{//}^2 + (z-z_i)^2}} dz \quad (3.2)$$

où $f_n(z)$ est la fonction propre du système non perturbé, en $k_{//}^0 (=0)$ pour la sous-bande considérée (ici la plus basse).

Après avoir multiplié (1.31) par $Ne^{-\alpha r_{//}}$ et intégré sur $\vec{r}_{//}$, l'énergie de l'état considéré est alors obtenue par minimisation de l'énergie variationnelle $E(\alpha)$.

$$E(\alpha) = \varepsilon(k_{//}^0) + E_B(\alpha) \quad (3.3)$$

où $\varepsilon(k_{//}^0)$ correspond à l'énergie de bas de bande de conduction, et

$$E_B(\alpha) = \frac{\hbar^2 \alpha^2}{2m^*} - \frac{4\alpha^2 e^2}{\kappa} \int_{-\infty}^{+\infty} f_n^2(z) F_1(z) dz \quad (3.4)$$

où $F_1(z)$ est donné par :

$$F_1(z) = |z-z_i| \left[\frac{\pi}{2} \{ H_1(2\alpha|z-z_i|) - N_1(2\alpha|z-z_i|) \} - 1 \right] \quad (3.5)$$

H_1 et N_1 étant les fonctions de Struve et Neuman d'ordre 1 [20].

Les figures III.1 et III.2 représentent les variations de l'énergie de liaison de l'impureté avec la largeur du puits, pour

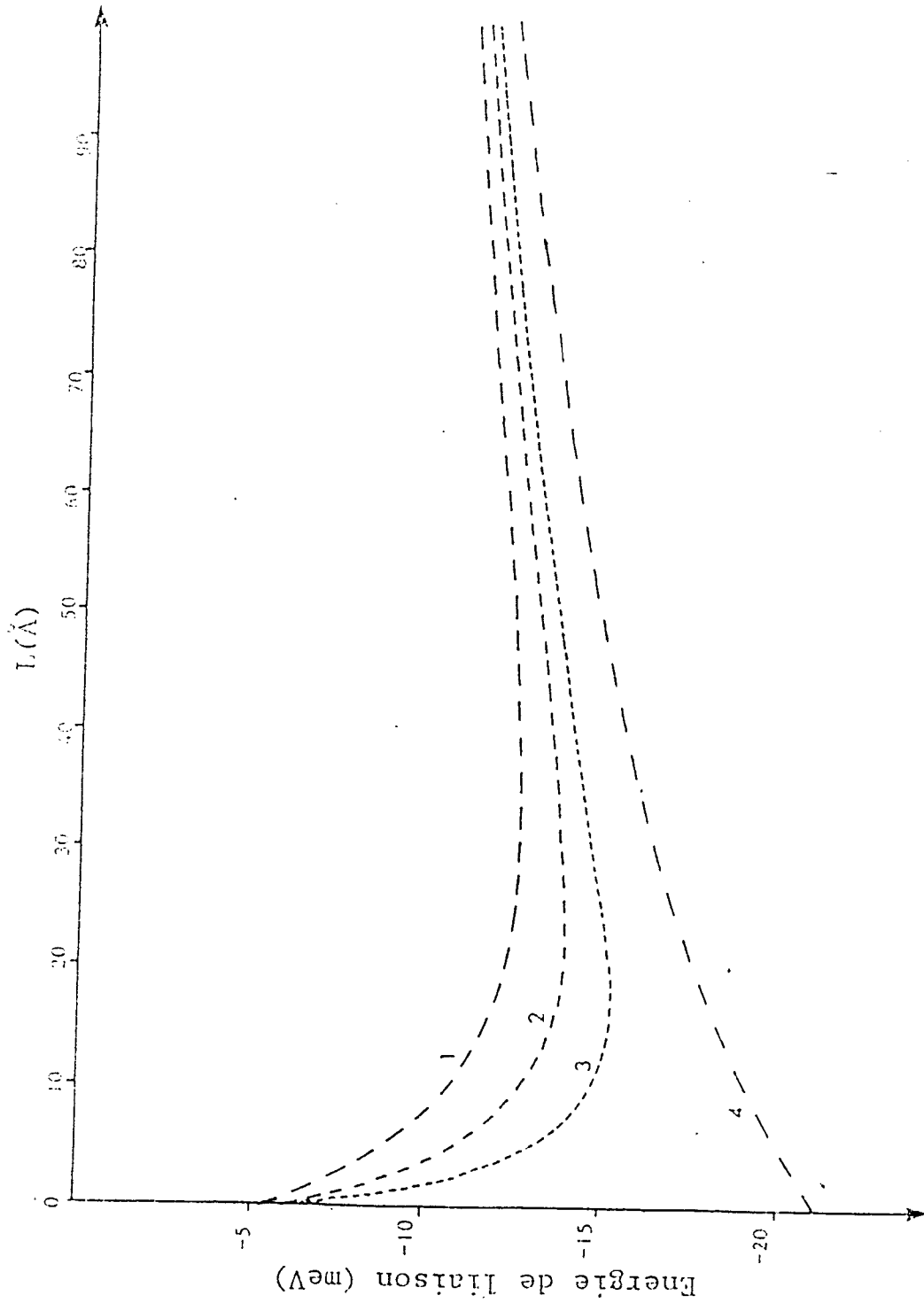


Figure III.1



Variations de l'énergie de liaison d'un donneur avec la largeur du puits, pour différentes profondeurs de puits. L'impureté est située au centre du puits. Le calcul est effectué dans l'approximation de la masse effective à trois dimensions. Les valeurs des paramètres qui décrivent le puits sont les suivantes : $\kappa=13.1$, $m^* = 0.067 m_0$, $V_0 = 106 \text{ meV}$ (courbe 1), 265 meV (courbe 2), 424 meV (courbe 3), infini (courbe 4).

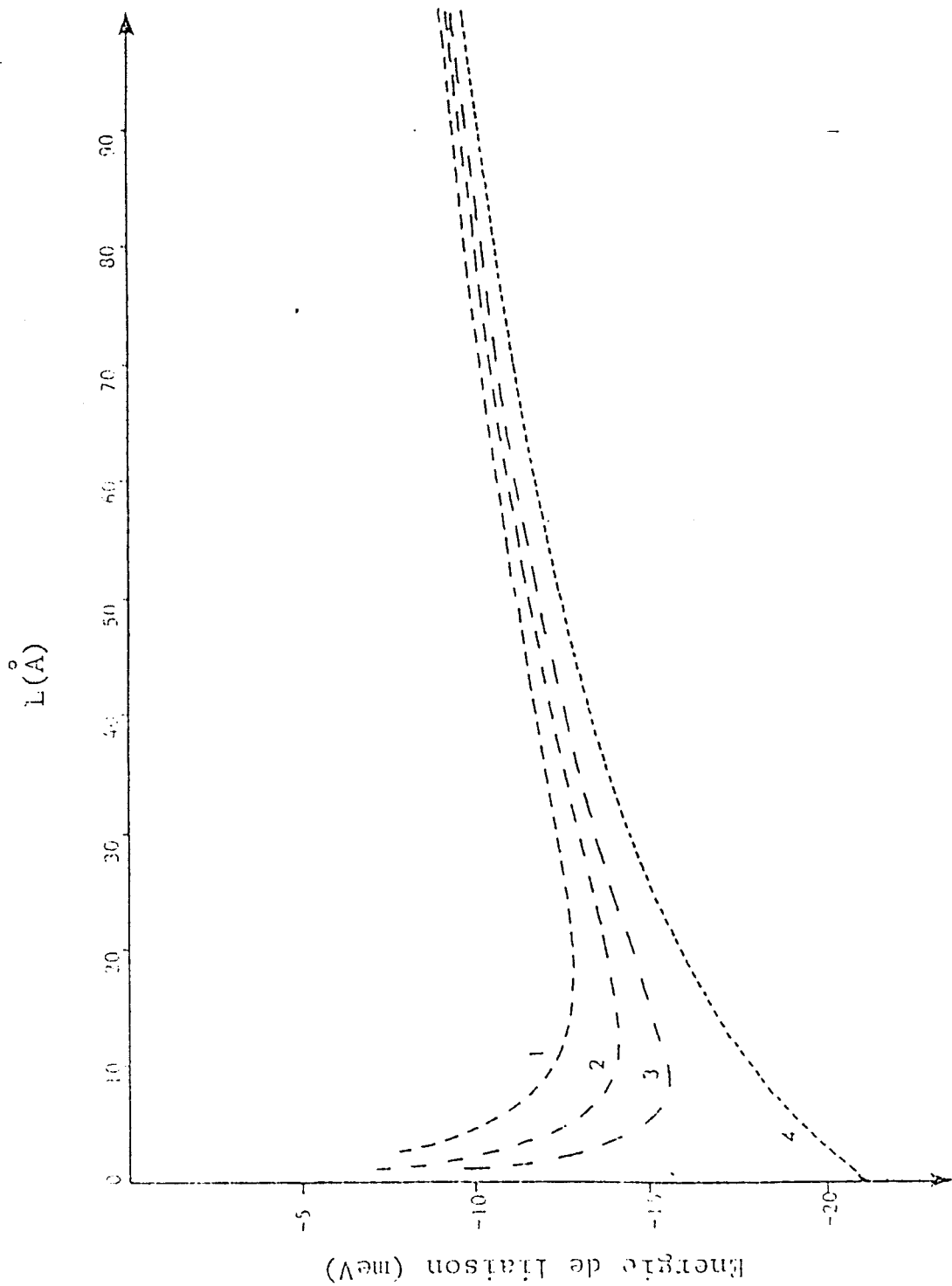


Figure III.2



Variations de l'énergie de liaison d'un donneur avec la largeur du puits, pour différentes profondeurs de puits. L'impureté est située au centre du puits. Le calcul est effectué dans l'approximation de la masse effective à deux dimensions. Les valeurs des paramètres qui décrivent le puits sont les mêmes que pour la figure III.1.

différentes profondeurs de puits, dans l'approximation de la masse effective à 3 dimensions (modèle de Bastard étendu au puits fini) et à 2 dimensions (dans le cas d'une impureté centrale). La figure III.3 permet une comparaison entre les deux modèles. Il apparaît que le modèle 3D donne des énergies de liaison légèrement inférieures à celles données par le modèle 2D dans la gamme de largeurs de puits de quelques Angströms à 200 Å.

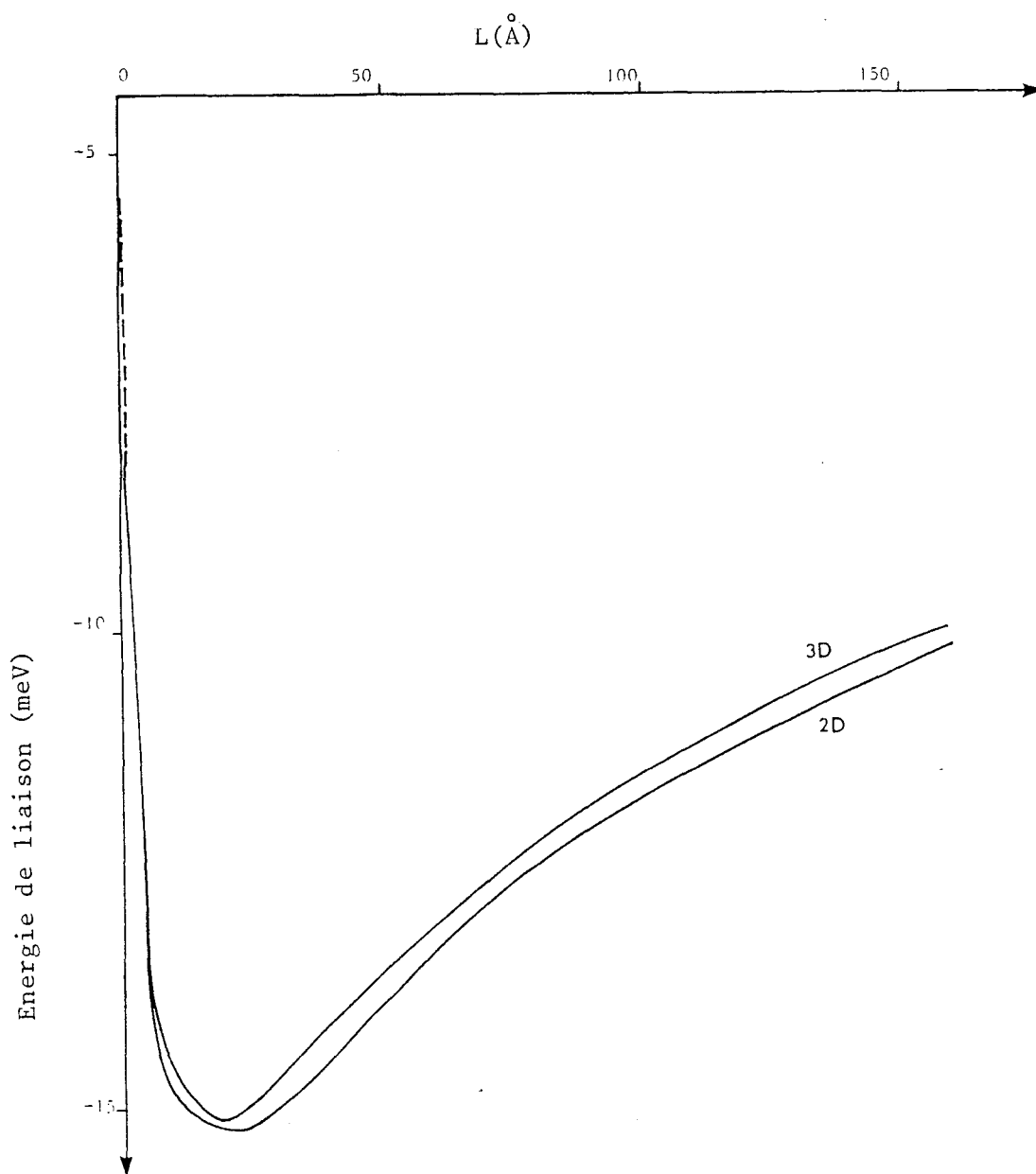


Figure III.3

Comparaison entre les énergies obtenues par un modèle 2D et 3D, pour des puits très étroits, de profondeur $V_0 = 424$ meV ($\kappa = 13.1$, $m^* = 0.067 m_0$). La limite asymptotique est donnée par la courbe en pointillés.

Greene et Bajaj [7] ont également calculé les énergies de liaison des impuretés hydrogénoïdes dans un puits quantique. Ils utilisent un hamiltonien tridimensionnel. Ils emploient une base d'orbitales gaussiennes et tiennent compte du caractère anisotrope du système en introduisant une variable d'excentricité. Cela permet à leur calcul d'être valable sur une plus grande gamme de largeur de puits. Il faut cependant noter qu'ils doivent utiliser plusieurs dizaines de paramètres variationnels. Ceci est dû au fait que, la base utilisée (orbitales gaussiennes elliptiques) décrivant mal un problème à caractère bidimensionnel, il est nécessaire d'utiliser un grand nombre de fonctions de bases pour décrire correctement le problème. Notre calcul donne des résultats équivalents pour des puits de moins de 200 Å, avec un seul paramètre variationnel. De plus le calcul de Greene et Bajaj ne tient pas compte de la différence de masse effective entre les matériaux puits et barrière. Leur modèle impose forcément une fonction enveloppe continue et à dérivée continue, ce qui empêche de satisfaire à la condition de continuité du courant (cf. appendice 1).

Il y a deux cas limites où le modèle 2D n'est plus satisfaisant car le système prend un caractère tridimensionnel. Il s'agit de L très grand (le système devient presque un volume de GaAs) et L très petit (le système correspond à un cristal volumique de $Ga_{1-x}Al_xAs$ présentant une perturbation dans une toute petite zone de l'espace). Dans chacun de ces deux cas limite on peut considérer le puits comme une faible perturbation par rapport au volume. Pour le volume, la solution exacte de l'état ls d'une impureté hydrogénoïde s'écrit :

$$\psi_0 = N e^{-\alpha r}$$

et l'énergie est

$$E_0 = \frac{\hbar^2 \alpha^2}{2m^*} - \frac{e^2 \alpha}{\kappa}$$

Si maintenant on ajoute la perturbation ΔV que forme le puits,

$$\Delta E = \frac{\langle \psi_0 | \Delta V | \psi_0 \rangle}{\langle \psi_0 | \psi_0 \rangle}$$

l'énergie obtenue (repérée par rapport au fond du puits) est

$$E(\alpha) = \frac{\hbar^2 \alpha^2}{2m^*} - \frac{e^2 \alpha}{\kappa} + V_0 e^{-\alpha L} \left(1 + \frac{\alpha L}{2}\right) \quad (3.6)$$

(le calcul montre que (3.6) est valable à la fois pour les puits très larges et très étroits).

Les énergies données par cette expression sont identiques à celles du calcul 3D pour des couches très fines ($L < 10 \text{ \AA}$, cf. Fig. III.3). A la limite de couches épaisses, elle ne devient valide que pour $L > 1000 \text{ \AA}$.

Nous pouvons donc constater, que pour des puits moyennement étroits, l'approximation de la masse effective 2D est légèrement supérieure au modèle 3D. L'intérêt du modèle 2D sera beaucoup plus grand dans le cas d'une différence de masse effective entre le matériau puits et le matériau barrière.

III.2. Impureté hydrogénéoïde dans un puits de hauteur finie avec saut de masse effective

L'équation (3.4) établie dans le cas précédent reste ici encore valable, à condition d'utiliser m^* et $f(z)$ issues du nouveau système sans impureté. Il nous faut donc décrire la nouvelle structure de bande qui n'est plus celle d'un puits de type Kronig et Penney. Si les niveaux que nous étudions ne sont pas trop loin du bas de la bande de conduction, nous pouvons approximer l'hamiltonien du système à l'intérieur du puits par

$$H_1 = \frac{p^2}{2m^*_1} \quad (3.7)$$

et à l'extérieur du puits par

$$H_2 = \frac{p^2}{2m^*_2} + V_0 \quad (3.8)$$

où m^*_1 et m^*_2 sont les masses effectives de volume de GaAs ($0.067 m_0$) et de $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ ($0.1 m_0$ pour $x = 0.4$ [3]).

A nouveau nous factorisons la fonction d'onde du système parfait sous la forme $f(z) \exp(i\vec{k}_{\parallel} \vec{r}_{\parallel})$. Il reste donc à résoudre l'équation de Schrödinger pour $f(z)$ dont les solutions symétriques seront :

$$\begin{aligned}
 f(z) &= C \cos(kz) && \text{pour } |z| < \frac{L}{2} \\
 f(z) &= C' \exp(-\lambda z) && \text{pour } z \geq \frac{L}{2}
 \end{aligned}
 \tag{3.9}$$

et

$$f(-z) = f(z)$$

avec

$$k^2 = \frac{2m^*_1}{\hbar^2} E - k_{//}^2, \quad \lambda^2 = \frac{2m^*_2}{\hbar^2} (V_0 - E) + k_{//}^2 \tag{3.10}$$

Les valeurs de k et λ sont obtenues en écrivant les conditions de continuité en $z = L/2$. Le problème des conditions de raccordement dans l'approximation de la masse effective est discuté en Appendice A1. Nous choisirons d'écrire la continuité de f et de $(1/m^*) df/dz$; ce sont les conditions le plus souvent utilisées. Elles sont compatibles avec l'étude récente de Morrow et Brownstein [24].

On obtient alors la relation entre k et λ :

$$\frac{k}{m^*_1} \tan\left(k \frac{L}{2}\right) = \frac{\lambda}{m^*_2} \tag{3.11}$$

Pour connaître la masse effective équivalente m^* , il est nécessaire de calculer la quantité $\partial^2 E / \partial k_{//}^2$ au voisinage du minimum (c'est-à-dire en $k_{//} = 0$).

Par (3.10) E et λ peuvent s'écrire en fonction de k et $k_{//}$. En exprimant λ en fonction de k et $k_{//}$ dans (3.11) (élevée au carré pour simplifier les calculs) on obtient une équation transcendante qui donne $k(k_{//})$. Il suffit alors de dériver deux fois par rapport à $k_{//}$ cette équation, pour obtenir $\partial k / \partial k_{//}$ et $\partial^2 k / \partial k_{//}^2$. Comme $\partial^2 E / \partial k_{//}^2$ s'exprime en fonction de ces deux quantités, on arrive donc à la masse effective équivalente parallèle $m^*_{//}$:

$$\frac{1}{m_{//}^*} = \frac{1}{m_1^*} \left\{ 1 + \frac{m_1^*}{m_2^*} \left(\frac{m_1^*}{m_2^*} - 1 \right) \cos^2(k_0 L/2) \right. \\ \left. [1 + (m_1^*/m_2^* - 1) \cos^2(k_0 L/2) + (k_0 L/2) \tan(k_0 L/2)]^{-1} \right\} \quad (3.12)$$

(quantité comprise entre m_1^* et m_2^*)
 où k_0 est la valeur de k pour $k_{//} = 0$.

La figure III.4 représente les variations de $m_{//}^*$ en fonction de la largeur du puits. On peut observer que, pour un puits de largeur inférieure à 50 Å, la valeur de la masse effective équivalente est sensiblement différente de celle de l'intérieur du puits.

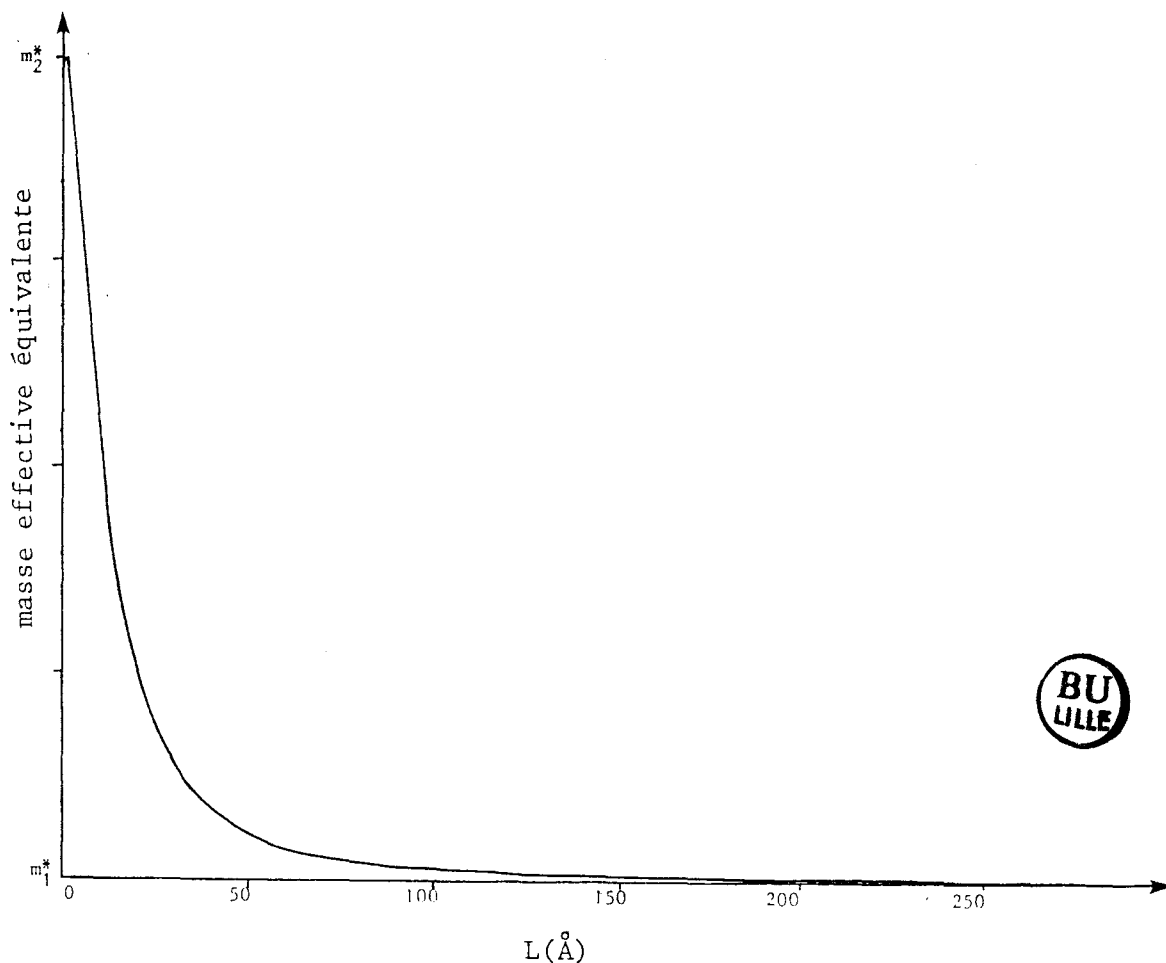


Figure III.4

Variations de la masse effective équivalente parallèle en fonction de la largeur du puits. La hauteur du puits est de 424 meV et $\kappa = 13.1$

Il suffit ensuite d'appliquer (3.4) pour obtenir l'énergie de liaison représentée figure III.5.

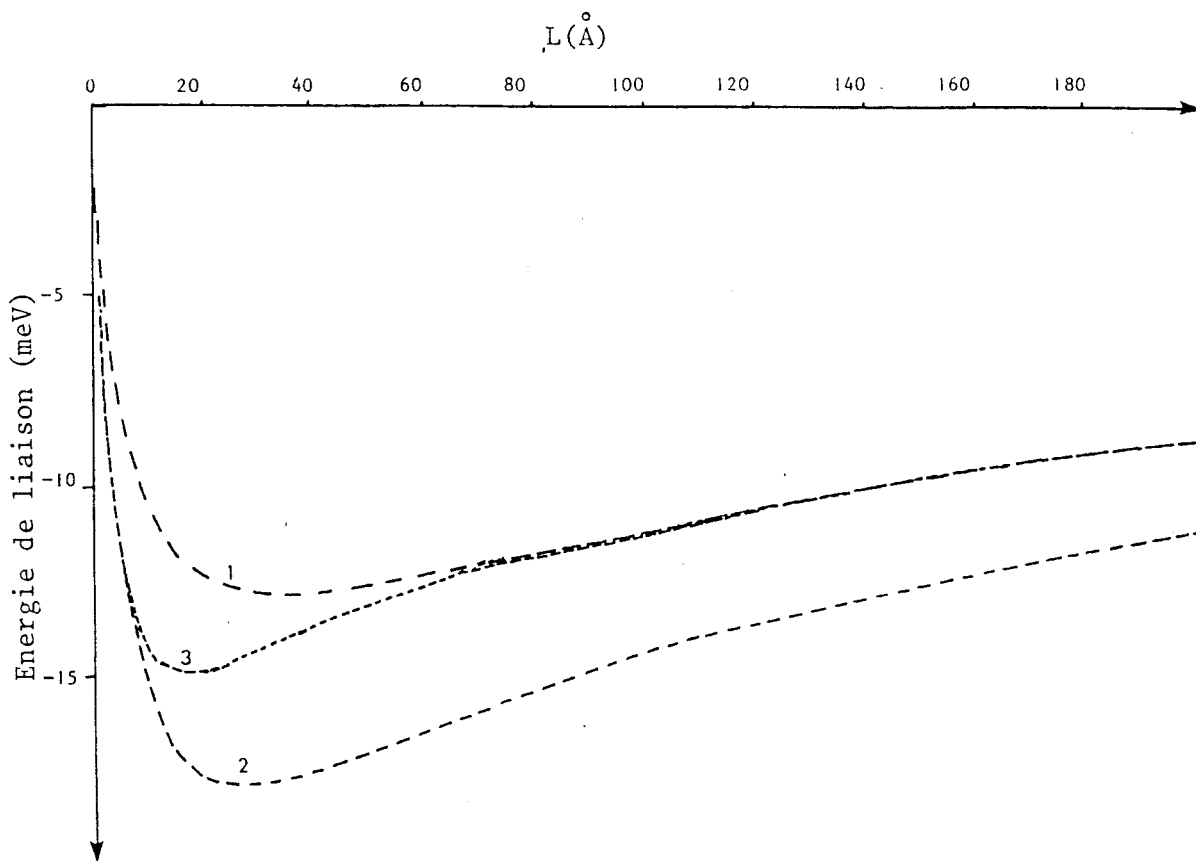


Figure III.5



Etude de l'influence du saut de masse effective. Les courbes 1, 2, 3 représentent les variations de l'énergie de liaison d'une impureté hydrogénoïde pour $m^*_1 = m^*_2 = 0.067 m_0$ (courbe 1), $m^*_1 = m^*_2 = 0.1 m_0$ (courbe 2), $m^*_1 = 0.067 m_0$ et $m^*_2 = 0.1$ (courbe 3). L'impureté est située au centre du puits. Le puits est caractérisé par $V_0 = 220$ meV et $\epsilon = 13.1$

Notre approche bidimensionnelle a donc permis la réduction d'un système composé de deux matériaux présentant des masses effectives différentes à un système correspondant à un matériau avec une seule masse effective. Il est important de noter qu'une approche 3D, avec une fonction d'essai du type $e^{-\alpha r}$, ne peut pas satisfaire à l'équation de continuité de $(1/m^*) \partial f / \partial z$ et ne permet donc pas de résoudre un tel problème.

Notre approche permet de traiter d'une manière très simple, le

problème d'une impureté dans un puits avec saut de masse effective, non seulement pour l'état fondamental, mais aussi pour les états issus de toutes les sous-bandes supérieures (notons que la masse effective équivalente dépendra de la sous-bande considérée).

Le désir de garder un traitement simple ne nous a pas permis de prendre en compte la différence de constante diélectrique entre les matériaux puits et barrière. Un calcul sophistiqué a été effectué par Mailhiot et al [4], prenant en compte les charges images de l'impureté, les fonctions enveloppe étant exprimées dans une base d'orbitales gaussiennes elliptiques. Nous avons reporté sur la fig. III.6 les résultats de l'énergie de liaison pour l'état fondamental, dans le cas d'une impureté au centre du puits, issus de notre calcul et de [4].

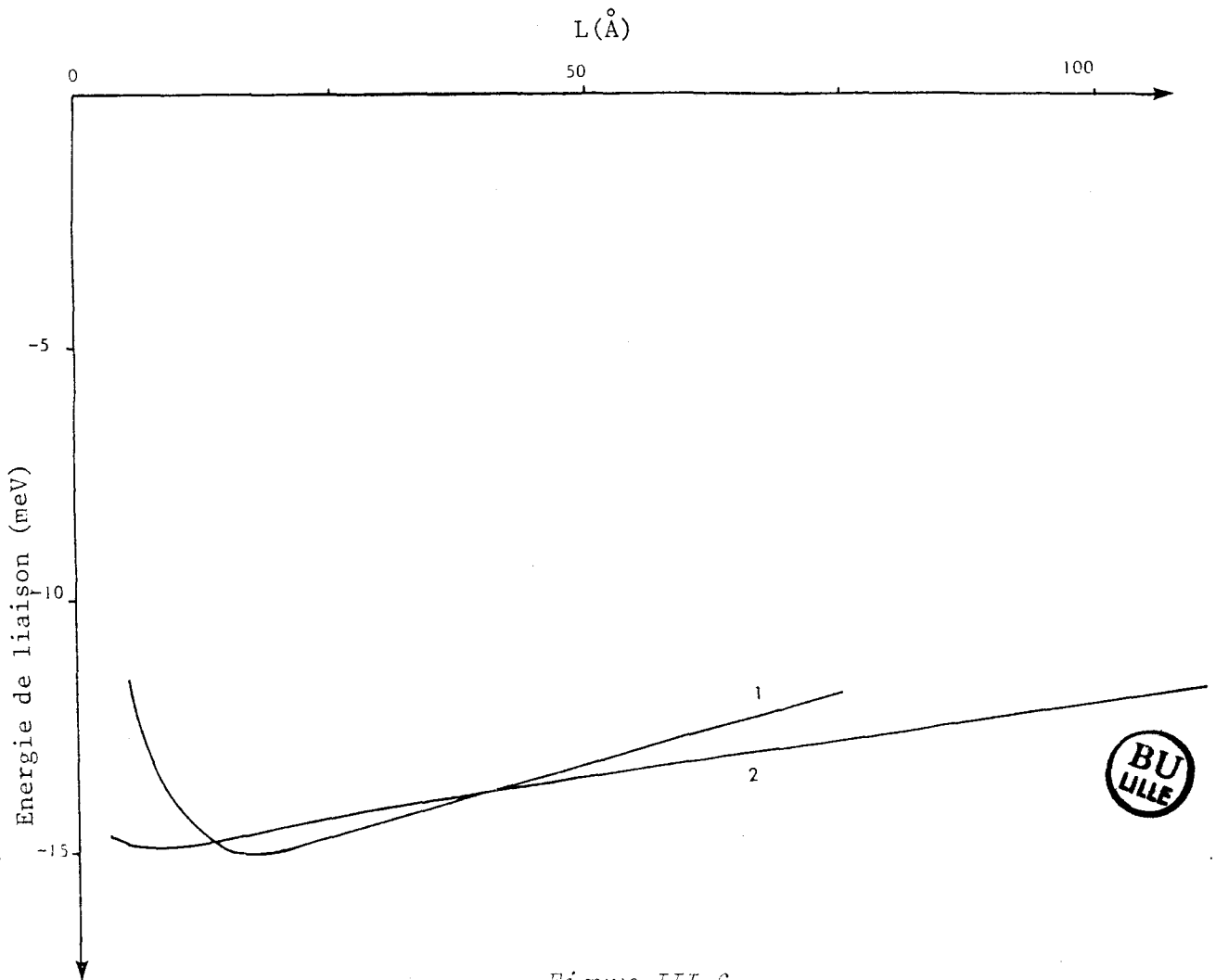


Figure III.6

Comparaison entre nos résultats (courbes 1) et un calcul tenant compte des charges images [ref. 14]. Les valeurs des paramètres qui décrivent le puits sont les suivantes : $\kappa = 13.1$, $m^*_1 = 0.067 m_0$, $m^*_2 = 0.1 m_0$, $V_0 = 424$ meV.

Dans la gamme des puits de largeur comprise entre 10 et 60 Å les résultats sont les mêmes, à 5% près. Ceci nous permet de dire que notre modèle est tout à fait compétitif et notre fonction d'essai (à un seul paramètre variationnel) adaptée à ce problème.

Les observations de luminescence extrinsèque dans les structures à puits quantiques sont peu nombreuses (la luminescence intrinsèque est beaucoup plus forte). Miller et al [35] ont d'abord mesuré l'énergie de liaison d'un accepteur (probablement du carbone) pour des puits GaAs de largeurs différentes. Ils ont constaté une augmentation de l'énergie de liaison quand le puits se rétrécit. De telles observations ont été effectuées pour le Beryllium (accepteur) [26] ou le silicium (donneur) [27]. La difficulté d'obtenir des mesures précises ne permet que de constater un accord qualitatif avec nos calculs théoriques.

Lorsqu'elles sont utilisées, les structures à puits quantiques sont en général soumises à une différence de potentiel : il règne donc un champ électrique à l'intérieur du puits. C'est pourquoi nous allons maintenant terminer l'étude d'une impureté hydrogénéoïde dans un superréseau en regardant l'effet d'un champ électrique sur celle-ci.

III.3. Effet d'un champ électrique sur l'énergie de liaison d'une impureté

a) Introduction

Récemment le problème de la présence d'un champ électrique dans un puits quantique a suscité de nombreuses études. Quand il est appliqué suivant la direction de croissance (ce que nous désignerons sous l'expression "champ longitudinal") le champ électrique modifie les énergies de confinement du puits. Mendez et al [28] ont observé une forte diminution du signal de photo-luminescence, et un décalage vers le rouge des pics quand le champ électrique augmente. Ces résultats ont été expliqués qualitativement par un calcul variationnel des états propres d'un puits quantique soumis à un champ électrique longitudinal, effectué par Bastard et al [29]. Miller et Gossard [30] ont observé des pics de luminescence intrinsèque et extrinsèque dans des puits dopés sous champ électrique longitudinal. Ils ont constaté de forts changements des signaux de photoluminescence intégrés, mais ils ont observé de faibles décalages en énergie des pics d'excitons et d'impureté. D'autres études expérimentales [31-33] et théoriques [34] ont été menées sur les excitons dans les systèmes à puits quantiques sous champ électrique longitudinal.

Nous nous intéressons ici à l'effet d'un champ électrique longitudinal sur l'énergie de liaison d'une impureté hydrogénéoïde. Nous

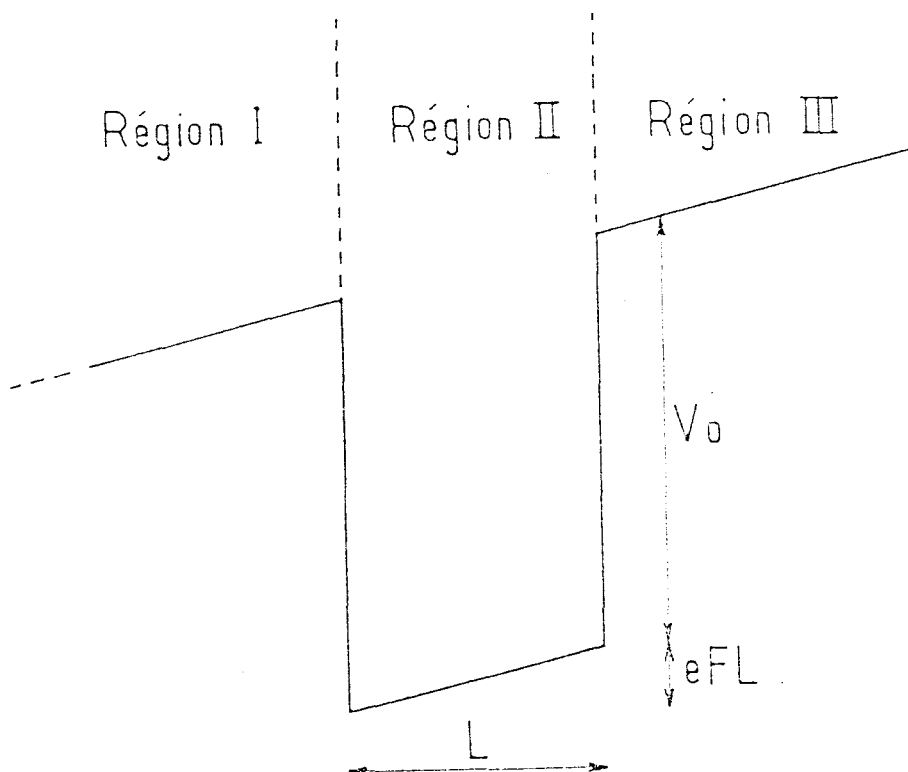
limitons notre étude à des champs assez faibles pour que la notion d'état quasi lié ait encore un sens (pour des champs plus forts, l'électron est arraché du puits). Nous avons effectué cette étude en collaboration avec J.A. Brum. Il a traité ce problème en étendant le modèle de Bastard sans tenir compte de la différence de masse effective entre les deux matériaux constituant le puits. De notre côté, nous avons appliqué le modèle décrit au début de ce chapitre. Pour permettre la comparaison entre les deux modèles nous avons, dans un premier temps, effectué les applications numériques en introduisant la même masse effective dans et hors du puits. Les énergies de liaisons obtenues sont alors sensiblement identiques. Nous allons montrer que l'énergie de liaison de l'impureté est augmentée ou diminuée suivant la position de l'impureté dans le puits.

b) Modèle

Les détails du modèle développé par Brum sont développés en [35]. Celui-ci décrit tout d'abord le puits sous champ électrique longitudinal par une méthode variationnelle où les fonctions propres sont exprimées à partir de celles d'un puits sous champ nul.

Nous avons choisi, pour notre part, de décrire les solutions propres du puits sans impureté hydrogénoïde de manière exacte.

Le potentiel vu par un électron dans le puits est représenté ci-dessous.



Dans chacune des trois régions de l'espace, le potentiel est linéaire en z et la masse effective est constante. La fonction propre $f_1(z)$ de l'état fondamental d'un électron dans ce puits s'écrit, dans chaque région, comme une combinaison linéaire de deux fonctions d'Airy : A_i et B_i . Elle s'exprime donc en fonction de six inconnues. Nous les déterminons en écrivant la continuité de la fonction d'onde et de la densité de courant aux interfaces. Les deux équations encore nécessaires sont obtenues en utilisant le fait que la fonction d'onde tend vers zéro quand z tend vers l'infini, et en imposant que la fonction reste finie dans la région I (cela revient à négliger l'effet tunnel à travers la barrière triangulaire située à gauche du puits). Il suffit ensuite d'utiliser la fonction $f_1(z)$ obtenue dans (3.4) et (3.5) pour obtenir l'énergie de liaison de l'impureté.

c) Résultats et discussion

Nous considérons d'abord, pour permettre la comparaison entre l'approche de J.A. Brum et la nôtre, une seule masse effective ($m^* = 0.067 m_0$) dans tout le système. Nous avons calculé la valeur F_{lim} pour laquelle le champ devient trop fort pour que l'effet tunnel dans la barrière triangulaire soit négligeable. Pour des puits de largeur 30 à 100 Å, au delà de $F_{lim} = 300$ kV/cm notre solution n'est plus exacte mais devient approchée.

L'observation de la figure (III.7) permet la comparaison de l'énergie du niveau fondamental obtenue, soit par le calcul exact (trait plein), soit par le calcul variationnel de J.A. Brum (traits pointillés). Le calcul a été effectué pour un puits de 100 Å. On constate que l'erreur engendrée par le modèle variationnel est assez faible (pour les champs les plus forts où le modèle reste valide, elle n'excède pas 13 %). Malgré cette différence non négligeable quant à l'énergie du niveau fondamental, les valeurs numériques des énergies de liaison obtenues par les deux calculs sont identiques. Ceci est lié au fait que

i) la fonction d'onde variationnelle n'est pas très différente de la fonction exacte,

ii) cette fonction d'onde intervient dans l'énergie de liaison, moyennée par le potentiel hydrogénoïde :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dz |f(z)|^2 (\rho^2 + (z-z_i)^2)^{-1/2}$$

(cf. eq. 3.2), et l'énergie de liaison est très stable par rapport à ce potentiel effectif.

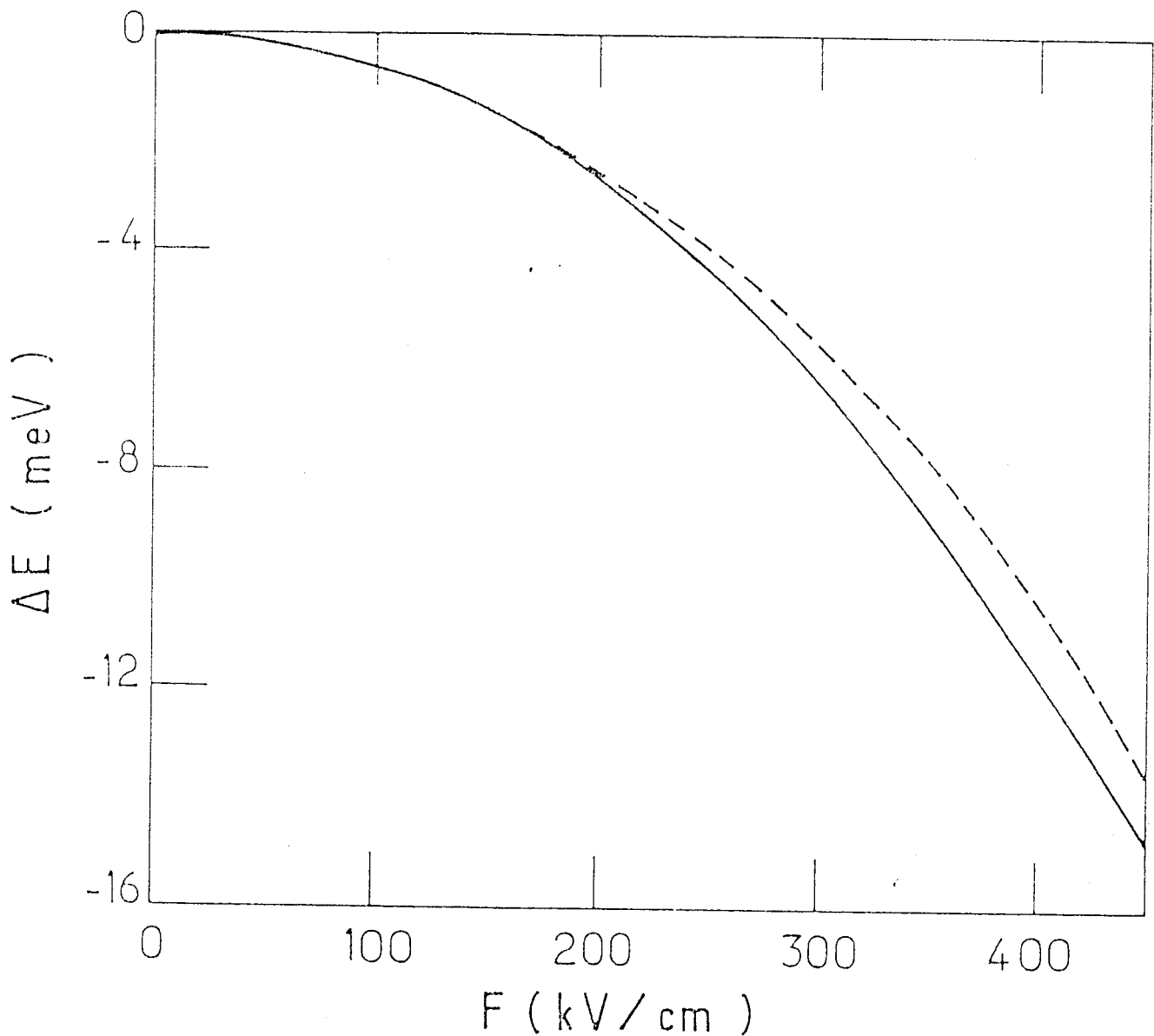


Figure III.7

Décalage de l'énergie de niveau fondamental d'un électron de conduction dans un puits de GaAs d'épaisseur 100 \AA et de profondeur 0.4 eV , en fonction du champ électrique F . En trait pointillé est reportée l'énergie obtenue par un calcul variationnel, et en trait plein celle obtenue par un calcul exact (qui utilise les fonctions d'Airy).

Sur la figure (III.8a) nous avons représenté les variations en fonction du champ électrique, de l'énergie de liaison d'une impureté hydrogénoïde dans un puits de largeur 100 \AA , pour différentes positions de l'impureté ($z_1 = L/2, L/4, 0, -L/4, -L/2$). On peut remarquer que pour des impuretés placées dans la moitié supérieure du puits ($z_1 \geq 0$) l'énergie de liaison de l'impureté diminue quand le champ électrique augmente.

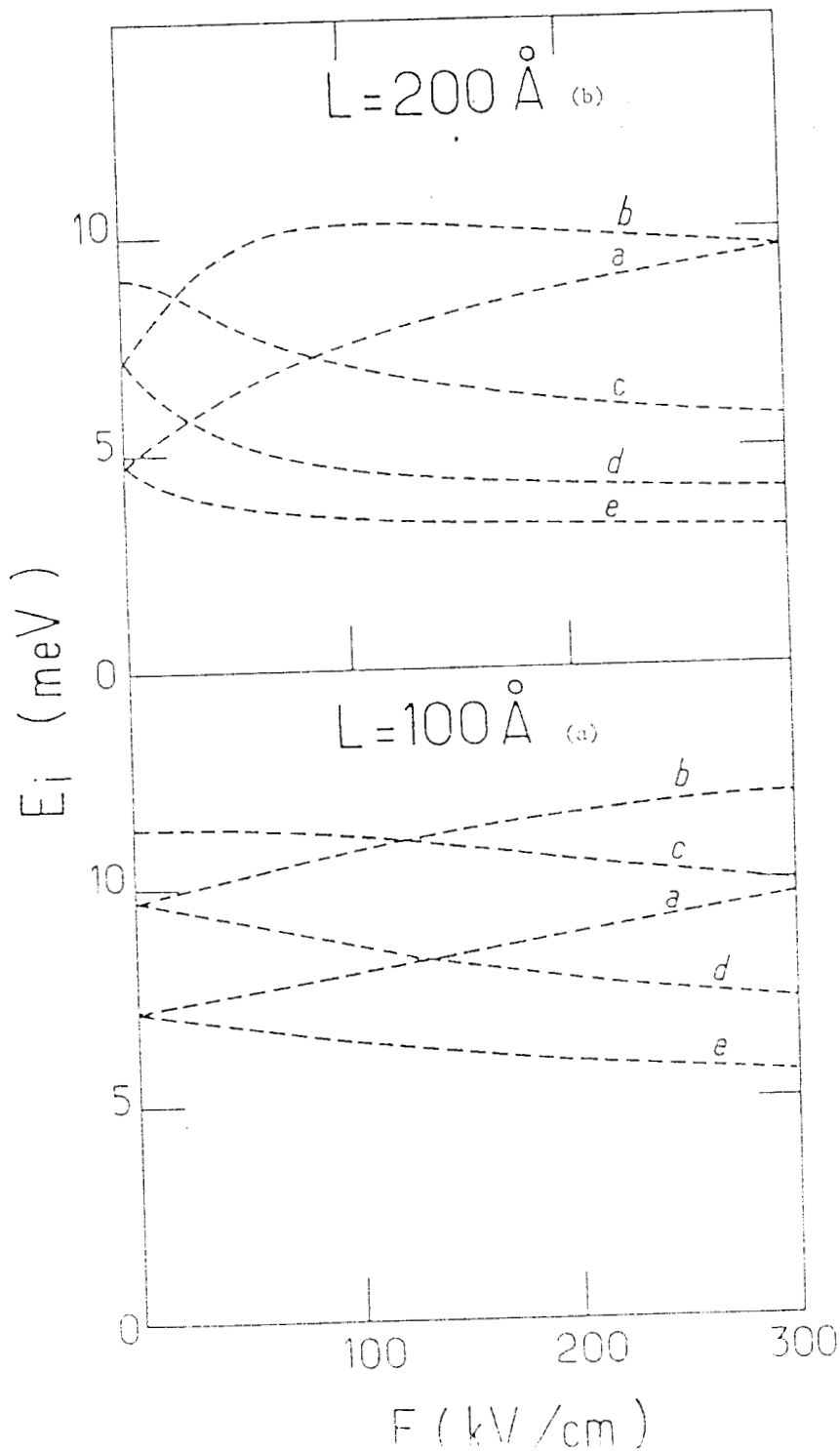


Figure III.8

Variations de l'énergie de liaison d'une impureté dans un puits quantique (de profondeur 0.4 eV) en fonction du champ électrique. La largeur du puits est de 100 Å (a) et 200 Å (b). L'impureté est située en 5 positions : $-L/2$ (a) ; $-L/4$ (b) ; 0 (c) ; $L/4$ (d) ; $L/2$ (e).



Par contre pour des impuretés placées dans la moitié inférieure du puits ($z_i < 0$), l'énergie de liaison augmente avec F . Ceci s'explique simplement par la déformation de la fonction d'onde de l'électron avec le champ électrique, qui tend à concentrer l'électron près de l'interface $z_i = -L/2$. L'effet du champ électrique est encore plus prononcé pour des puits larges, comme le montre la figure III.8 b.

Nous pourrions également effectuer les calculs en tenant compte du saut de masse effective. On utilise alors dans (3.4) la masse effective équivalente parallèle définie en (3.12). Pour des puits de plus de 100 Å de large, la correction à apporter sera minime, car la masse effective équivalente parallèle (cf. fig. III.4) est alors quasiment la masse effective de GaAs volumique. Pour des puits plus étroits l'influence du saut de masse effective est plus importante, mais c'est alors celle du champ électrique qui est faible.

Ces calculs ont été effectués pour un électron en bas de bande de conduction qui voit un potentiel hydrogénoïde, ce qui correspond à la situation d'un donneur (le bas de bande de conduction est, comme nous le verrons dans le chapitre suivant, beaucoup plus facile à décrire que le haut de bande de valence). Les observations de luminescence extrinsèque dont on dispose ont été effectuées par Miller et Gossard [30] dans une structure à puits quantiques GaAs-Ga(Al)As dopés au Béryllium (qui est un accepteur). Ils ont observé, quand le champ électrique augmente, que :

i) les pics de luminescence accepteurs se décalent vers les hautes énergies (ceci s'explique qualitativement par le calcul des états propres du puits [cf. Bastard et al, 29]),

ii) le pic correspondant à une impureté au bord du puits s'intensifie comparativement au pic correspondant à une impureté centrale.

On a un accord qualitatif entre cette dernière observation et nos calculs qui montrent que, pour une impureté localisée à l'interface ($z_i = -L/2$), l'énergie de liaison augmente avec le champ électrique, alors que pour une impureté centrale, elle diminue. Toutefois, comme il est, en pratique, très difficile d'évaluer avec précision les champs électriques à l'intérieur du puits quantique, nous ne pouvons pas faire une analyse quantitative des décalages en énergie.

III.4. Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons calculé l'énergie de liaison d'une impureté hydrogénoïde dans un puits quantique de hauteur finie. Le modèle

mis au point présente la particularité de pouvoir prendre en compte, de manière très simple, la différence de masse effective entre les deux matériaux en présence. La comparaison avec les autres modèles théoriques est tout à fait satisfaisante : quand on ne tient pas compte du saut de masse effective, notre modèle est légèrement meilleur que le modèle de Bastard du même degré de complexité, et équivalent, dans la gamme des puits de moins de 200 Å de large, au modèle de Greene et Bajaj qui utilise plusieurs dizaines de paramètres variationnels. Quand on tient compte du saut de masse effective, les modèles tridimensionnels simples ne peuvent être appliqués. Notre modèle à un seul paramètre variationnel donne des résultats d'aussi bonne qualité que ceux issus d'un calcul mettant en jeu un grand nombre de paramètres. Les résultats expérimentaux sur les donneurs dans un puits quantique sont très rares et ne permettent que de constater un accord qualitatif entre théorie et mesures.

Dans le cas où le superréseau est soumis à un champ électrique relativement modéré nous avons également calculé l'énergie de liaison d'une impureté. Nous pouvons aussi constater un accord qualitatif avec les rares observations.

Les études expérimentales sont beaucoup plus nombreuses et précises en ce qui concerne les excitons. Ceux-ci feront l'objet du chapitre suivant.

CHAPITRE IV

Excitons de Wannier dans les structures à puits quantiques

De nombreuses expériences de photoluminescence dans les systèmes semiconducteurs à puits quantiques (principalement les systèmes GaAs - Ga_{1-x}Al_xAs) ont permis l'observation de pics excitoniques [22,36]. Après avoir rappelé la notion d'exciton d'abord en volume, puis dans un système anisotrope tel qu'une structure à puits quantiques, nous regardons quelles hypothèses simplificatrices permettent de traiter simplement le calcul d'énergie de liaison de l'exciton dans un puits quantique. Nous appliquons alors le modèle simple mis au point dans les chapitres précédents. Les résultats obtenus sont en meilleur accord avec l'expérience que ceux issus des autres calculs théoriques.

IV.1. Notion d'exciton

Les excitons sont des paires électron-trou liés et peuvent constituer les états électroniques excités les plus bas pour les cristaux non métalliques. On les détecte facilement en spectroscopie optique, car ils donnent lieu à des pics très étroits. Le calcul théorique de l'énergie de liaison d'un exciton est beaucoup plus délicat que celui de l'énergie d'un donneur, car il nécessite une bonne description de la bande de valence. Pour pouvoir traiter correctement l'exciton dans un puits quantique, il nous est nécessaire de rappeler quelques notions de base sur les excitons en volume [37].

Dans l'approximation de la masse effective, l'hamiltonien de volume des excitons peut s'écrire [38] :

$$H_{exc} = H_e(\vec{p}_e) - H_h(\vec{p}_h) - e^2/\kappa|\vec{r}_e - \vec{r}_h| \quad (4.1)$$

où $\vec{r}_e(x_e, y_e, z_e)$ et $\vec{r}_h(x_h, y_h, z_h)$ repèrent les positions respectives de l'électron et du trou, $\vec{p}_e = -i\hbar\nabla_e$ et $\vec{p}_h = -i\hbar\nabla_h$. $H_e(\vec{p}_e)$ est simplement $p_e^2/2m_e^*$, l'énergie cinétique de l'électron en bas de bande de conduction. $H_h(\vec{p}_h)$, l'hamiltonien de Köhn et Luttinger [33] est pour les états de haut de bande de valence, une matrice 6 x 6 (les six états de base sont ($J=1/2$, $J_z = \pm 1/2$) et ($J = 3/2$, $J_z = \pm 1/2, \pm 3/2$) où J est le moment cinétique total, somme du moment cinétique orbital et du spin). Le couplage spin orbite est assez grand, on a alors levée partielle de dégénérescence. L'état le plus haut, 4 fois dégénéré, correspond à $J = 3/2$. On peut donc écrire H_h sous forme d'une matrice 4 x 4 :

$$H_h = \begin{pmatrix} 3/2 & -1/2 & 1/2 & -3/2 \\ a_+ & c & b & 0 \\ c^* & a_- & 0 & -b \\ b^* & 0 & a_- & c \\ 0 & -b^* & c^* & a^2 \end{pmatrix} \begin{matrix} 3/2 \\ -1/2 \\ 1/2 \\ -3/2 \end{matrix} \quad (4.2)$$

avec

$$a_{\pm} = E_V - \frac{\hbar^2}{2m_0} (\gamma_1 \pm \gamma_2) \left(\frac{\partial^2}{\partial x_h^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_h^2} \right) - \frac{1}{2m_0} (\gamma_1 \mp 2\gamma_2) \frac{\partial^2}{\partial z_h^2}$$

$$b = \sqrt{3} \frac{\gamma_3}{m_0} \left(\frac{\partial}{\partial x_h} - i \frac{\partial}{\partial y_h} \right) \frac{\partial}{\partial z_h} \quad (4.2')$$

$$c = \sqrt{3/2} \hbar^2 \frac{\gamma_2}{m_0} \frac{\partial^2}{\partial x_h^2} - \frac{\partial^2}{\partial y_h^2} - 2i \frac{\gamma_3}{m_0} \frac{\partial^2}{\partial x_h \partial y_h} \quad (4.2')$$

(la base dans laquelle H_h est exprimé correspond aux différentes valeurs de J_z , la composante du moment cinétique suivant l'axe z).

On effectue alors le changement de variable classique $\vec{r} = \vec{r}_e - \vec{r}_h$, coordonnée relative, et son moment conjugué \vec{p} , $\vec{R} = (\vec{r}_e + \vec{r}_h)/2$ et son moment conjugué $\vec{P} = (\vec{p}_e + \vec{p}_h)/2$ qui est une constante du mouvement, correspondant au moment total de la paire. Lors de transitions optiques, sont créés ou détruits des excitons à moment total nul. L'hamiltonien devient alors :

$$H_{exc} = H_e(\vec{p}) - H_h(\vec{p}) - \frac{e^2}{\kappa r} \quad (4.3)$$

Cet hamiltonien est donc une matrice 4 x 4. Les termes correspondant à l'électron et au potentiel coulombien sont ajoutés aux termes diagonaux de l'hamiltonien exprimé en (4.2). Dans cet hamiltonien H_{exc} on peut distinguer deux sortes de termes :

- ceux qui comportent la quantité $(1/m_e^* + \gamma_1)$ (ce sont tous des termes diagonaux)
- ceux qui ne comportent que des termes proportionnels à γ_2 ou γ_3 .

Dans GaAs, $m_e^* = 0.067$, $\gamma_1 = 6.85$, $\gamma_2 = 2.10$ et $\gamma_3 = 2.30$, aussi $(\gamma_1 + 1/m_e^*)$ est très grand devant γ_2 et γ_3 ; c'est pourquoi on peut, en première approximation, négliger les termes γ_2 et γ_3 . La matrice représentant H_{exc} devient donc diagonale. De plus si l'on néglige γ_2 , dans (4.2') $a_+ = a_-$, les termes diagonaux sont tous égaux. On obtient alors des excitons quatre fois dégénérés, dont l'énergie de liaison est :

$$R^* = \frac{e^4}{2(\gamma_1 + 1/m_e^*) \hbar^2 \kappa^2} \quad (4.4)$$

Les termes négligés peuvent être considérés comme une perturbation au second ordre [40]. On obtient une correction en énergie qui ne lève pas la dégénérescence.

Notons qu'il n'est pas possible de suivre la même démarche pour calculer les niveaux d'impuretés de type accepteur puisqu'alors il n'y a

plus le terme $1/m_e^*$ très grand.

Pour un exciton à l'intérieur d'un puits quantique, le problème n'est pas aussi simple : il n'y a plus d'invariance par translation dans la direction z (perpendiculaire au plan des couches). Nous pouvons encore définir \vec{P} , la composante de \vec{P} dans le plan des couches, et les transitions optiques auront lieu pour $\vec{P} = 0$, mais, selon l'expression consacrée, " K_z n'est plus un bon nombre quantique". De plus les conditions de continuité aux interfaces dépendent non pas de $z_e - z_h$, mais séparément de z_e et de z_h .

Contrairement au cas du volume, dans un puits quantique, il est beaucoup plus difficile de traiter l'exciton (en tenant compte de tous les termes de l'hamiltonien de Kohn et Luttinger) que les accepteurs.

Pour pouvoir mener l'étude de manière assez simple, nous faisons l'approximation de négliger les termes hors de la diagonale (ce qui n'est strictement exact que pour $k = 0$).

On obtient alors des "trous lourds" ($J_z = \pm 3/2$) qui ont une masse

$$\frac{1}{m_+} = \frac{1}{m_0} (\gamma_1 - 2\gamma_2) \quad \text{dans la direction } z \quad (4.5)$$

$$\star \quad \frac{1}{m_{//+}} = \frac{1}{m_0} (\gamma_1 + \gamma_2) \quad \text{dans le plan de couches}$$

et des "trous légers" ($J_z = \pm 1/2$) qui ont une masse

$$\frac{1}{m_-} = \frac{1}{m_0} (\gamma_1 + 2\gamma_2) \quad \text{dans la direction } z \quad (4.5')$$

$$\star \quad \frac{1}{m_{//-}} = \frac{1}{m_0} (\gamma_1 - \gamma_2) \quad \text{dans le plan des couches.}$$

On peut alors traiter séparément les excitons lourds et légers avec deux hauts de bande de valence différents (un pour les trous lourds, l'autre pour les trous légers) anisotropes. On pourrait ensuite ajouter la correction due au couplage entre trous lourds et trous légers (le premier calcul qui tient compte de la non parabolicité résultant de ce couplage

vient de paraître [41], ce traitement montre que la correction n'est pas très faible, au moins pour les puits larges pour lesquels le traitement est valide).

IV.2. Energie de liaison d'excitons dans un puits quantique

Nous nous intéressons ici aux structures composées d'une couche de GaAs, de largeur L , insérée entre deux tranches semi-infinies de $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$. Nous calculons plus précisément les énergies de liaisons des excitons de Wannier. Un tel calcul a été effectué par Greene, Bajaj et Phelps [42]. Ils ont négligé la différence de masse effective entre les deux matériaux. Avec une telle approximation, ils mettent en évidence une largeur de puits critique L_c , pour laquelle excitons lourd et léger ont la même énergie de liaison (dans l'état fondamental). Leur valeur obtenue pour L_c est en désaccord avec les observations de Miller, Kleinman, Tsang et Gossard [36]. Nous allons montrer ici comment la prise en compte des deux masses effectives permet une description en meilleur accord avec les données expérimentales. Nous utilisons à nouveau l'approximation de la masse effective à deux dimensions puisque le potentiel n'est plus lentement variable dans la direction z . De même qu'en volume nous passons des six variables $x_e, y_e, z_e, x_h, y_h, z_h$, grâce à la périodicité, aux trois variables $x_e - x_h, y_e - y_h, z_e - z_h$, cette fois, comme nous avons perdu la périodicité en z , nous avons quatre variables $x_e - x_h, y_e - y_h, z_e$, et z_h . La fonction d'onde totale dépendra donc de ces quatre variables. Au lieu d'utiliser les coordonnées cartésiennes $x_e - x_h, y_e - y_h$, nous utilisons les coordonnées polaires ρ et ϕ . En l'absence d'exciton, les courbes de dispersion peuvent être regroupées en sous-bandes 2D, qui résultent de la quantification en z . Pour des puits étroits ou modérément étroits ($L < 200 \text{ \AA}$) nous pouvons considérer que les états excitoniques sont issus d'une sous-bande 2D de valence et d'une sous-bande 2D de conduction. L'équation de la masse effective à 2D, en coordonnées polaires, s'écrit alors :

$$\left\{ E_e(k_{//}^0) + E_h(k_{//}^0) - \frac{\hbar^2}{2\mu_{//}} \left(\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \rho \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right) + U(\rho, \phi) \right\} F(\rho, \phi) = EF(\rho, \phi)$$

(4.6)

où $E_e(k_{//}^0)$ et $E_h(k_{//}^0)$ sont les extrema des sous-bandes d'électron et de trou considérées, et $\mu_{//}$ la masse réduite entre $m_{e//}$ et $m_{h//}$ (les masses effectives 2D déduites de la structure de bandes en l'absence d'exciton). Le potentiel d'interaction effectif $U(\rho, \phi)$ est une moyenne, sur z_e et z_h , du potentiel d'interaction électron-trou

$$U(\rho, \phi) = - \frac{e^2}{\kappa} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{f_e^2(z_e) f_h^2(z_h)}{|\vec{r}_e - \vec{r}_h|} dz_e dz_h \quad (4.7)$$

Dans (4.7) $f_e(z_e)$ et $f_h(z_h)$ représentent les fonctions d'ondes de l'électron et du trou, qui sont fonctions propres des puits unidimensionnels correspondant aux extrema de bandes.

Nous résolvons (4.6) par une méthode variationnelle. Nous utilisons la fonction d'essai $F(\rho, \phi) = N \exp(-\alpha\rho)$. L'énergie de liaison de l'exciton le plus bas s'obtient alors en minimisant l'énergie variationnelle $E(\alpha)$:

$$E(\alpha) = \frac{\hbar^2 \alpha^2}{2\mu_{//}} - \frac{4\alpha^2 e^2}{\kappa} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \left\{ \frac{\pi}{2} H_1(2\alpha|z_e - z_h|) - N_1(2\alpha|z_e - z_h|) - 1 \right\} |z_e - z_h| f_e^2(z_e) f_h^2(z_h) dz_e dz_h \quad (4.8)$$

où H_1 et N_1 sont les fonctions de Struve et Neuman d'ordre 1.

Pour évaluer la masse effective équivalente réduite $\mu_{//}$, il nous faut calculer les masses effectives équivalentes de l'électron $m_{e//}$ et du trou $m_{h//}$. Pour l'électron, le calcul a été effectué au chapitre précédent ($m_{e//}$ est donnée par (3.11)). Pour les trous, une démarche similaire est à suivre, en tenant compte cette fois de l'anisotropie. L'hamiltonien du système sans exciton s'écrit :

$$H_{\pm} = \frac{p_x^2 + p_y^2}{2m_{//\pm}} + \frac{p_z^2}{2m_{\pm}} + V_h \quad (4.9)$$

V_h étant la hauteur du puits vu par les trous, $m_{//\pm}$ et m_{\pm} sont données par (4.5).

Les solutions de (4.9) peuvent être factorisées sous la forme $f(z) \exp(i\vec{k}_{//} \cdot \vec{r}_{//})$. Nous écrivons la continuité de la fonction d'onde et de la densité de courant aux interfaces. Nous obtenons alors l'énergie en fonction du vecteur d'onde parallèle $E(\vec{k}_{//})$. La dérivée seconde de cette fonction à l'extremum de la première sous bande donne accès à la masse effective équivalente parallèle pour les trous. On obtient :

$$\frac{1}{m_{//}} = \frac{1}{m_{1//}} \left\{ 1 + \frac{m_{1//}}{m_2} \left(\frac{m_1}{m_{2//}} - \frac{m_1}{m_{1//}} \right) \cos^2 \frac{kL}{2} / \left[1 - (1 - m_1/m_2) \cos^2 \frac{kL}{2} + \frac{kL}{2} \operatorname{tg} \frac{kL}{2} \right] \right\} \quad (4.10)$$

où k est la composante en z du vecteur d'onde à l'intérieur du puits, m_1 et $m_{1//}$ représentent les masses effectives en z et (x,y) à l'intérieur du puits, m_2 et $m_{2//}$ les masses effectives en z et (x,y) à l'extérieur du puits. Il est intéressant de remarquer que (4.10) exprime simplement le fait que $(m)^{-1}$ est la moyenne de $(m_1)^{-1}$ et $(m_2)^{-1}$, avec comme pondération, les probabilités de trouver la particule à l'intérieur et à l'extérieur du puits.

Pour décrire $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$, nous avons besoin des différentes masses effectives des électrons et trous. Nous utilisons les relations [23,43]

$$\begin{aligned} m_e &= (0.067 + 0.083x) m_0 \\ m_+ &= (0.45 + 0.2x) m_0 \\ m_- &= (0.082 + 0.068x) m_0 \end{aligned}$$

A partir de m_+ et m_- , en utilisant (4.5), il est facile de déduire $m_{//+}$ et $m_{//-}$.

Pour décrire les puits, nous utilisons la règle de Dingle [22] et la différence de bande interdite nous est donnée par [44]

$$E_G = 1.425 + 1.155 x + 0.37 x^2$$

Nous obtenons alors, pour $x = 0.3$, $V_0 = 0.3228$ eV, $V_h = 0.057$ eV et pour les masses effectives :

	GaAs	$\text{Ga}_{0.7}\text{Al}_{0.3}\text{As}$
m_e/m_0	0.067	0.092
m_+/m_0	0.45	0.51
$m_{//+}/m_0$	0.1	0.128
m_-/m_0	0.08	0.102
$m_{//-}/m_0$	0.210	0.256

La figure IV.1 représente les variations de la masse effective équivalente parallèle en fonction de la largeur du puits, pour les paramètres précisés ci-dessus.

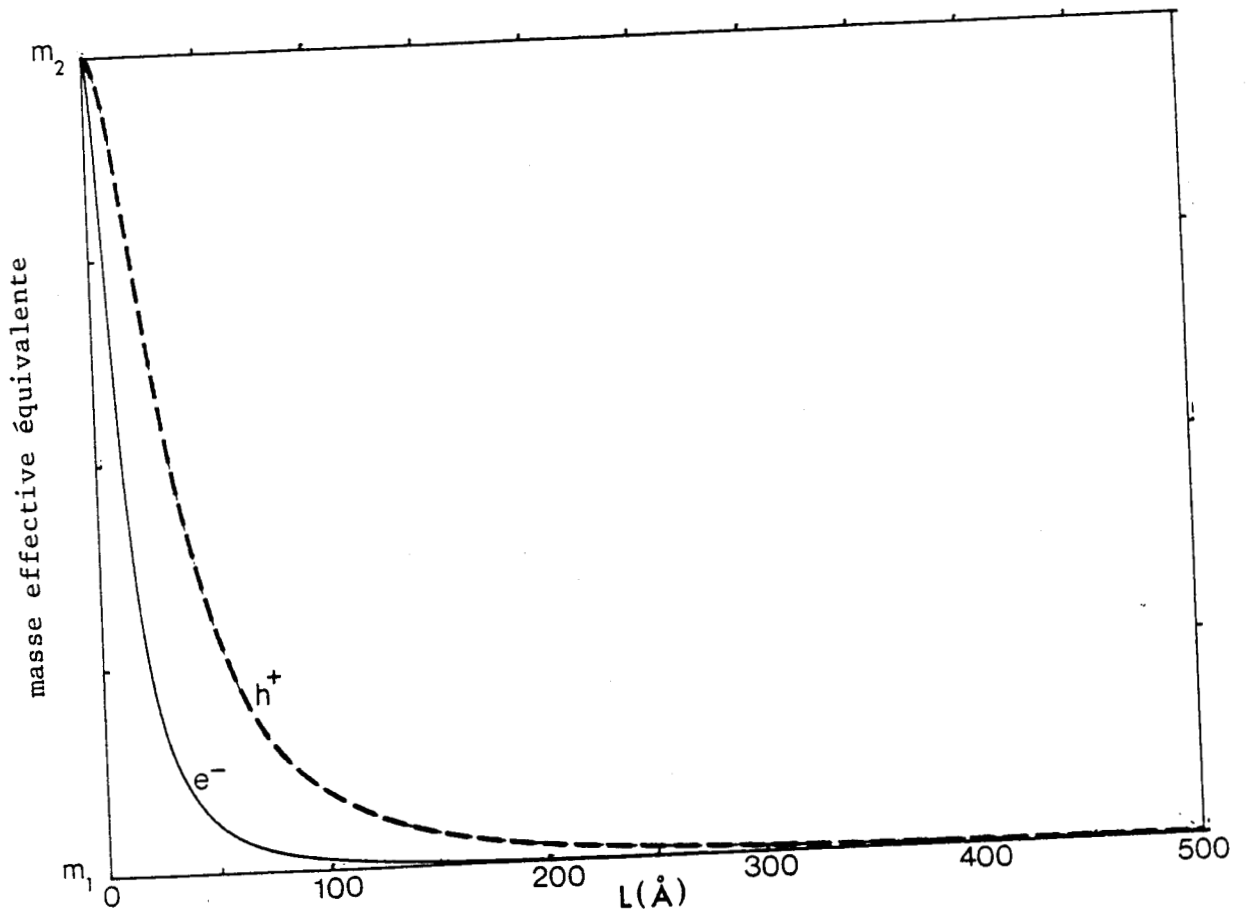


Fig. IV.1

*Variations de la masse effective équivalente parallèle
des électrons (trait plein) et des trous (tirets)
en fonction de la largeur du puits*

Sur cette figure on peut remarquer que l'influence du saut de masse effective est plus grande pour les trous que pour les électrons (ceci est simplement dû au fait que la barrière de potentiel est plus petite pour les trous) : en effet pour un puits de 50 Å de large, la masse effective équivalente de l'électron est très proche de celle de GaAs volumique, par contre celle du trou est au tiers entre la masse de GaAs et celle de Ga(Al)As. Aussi la masse réduite $\mu_{//}$, qui apparaît en (4.8) est tout à fait différente de la masse réduite de GaAs en volume.

Pour mettre en évidence l'importance de ce saut de masse effective, nous comparons, sur la figure IV.2 les énergies de liaison d'un exciton avec et sans saut de masse effective (les paramètres sont les mêmes que [42] avec $x = 0.3$).

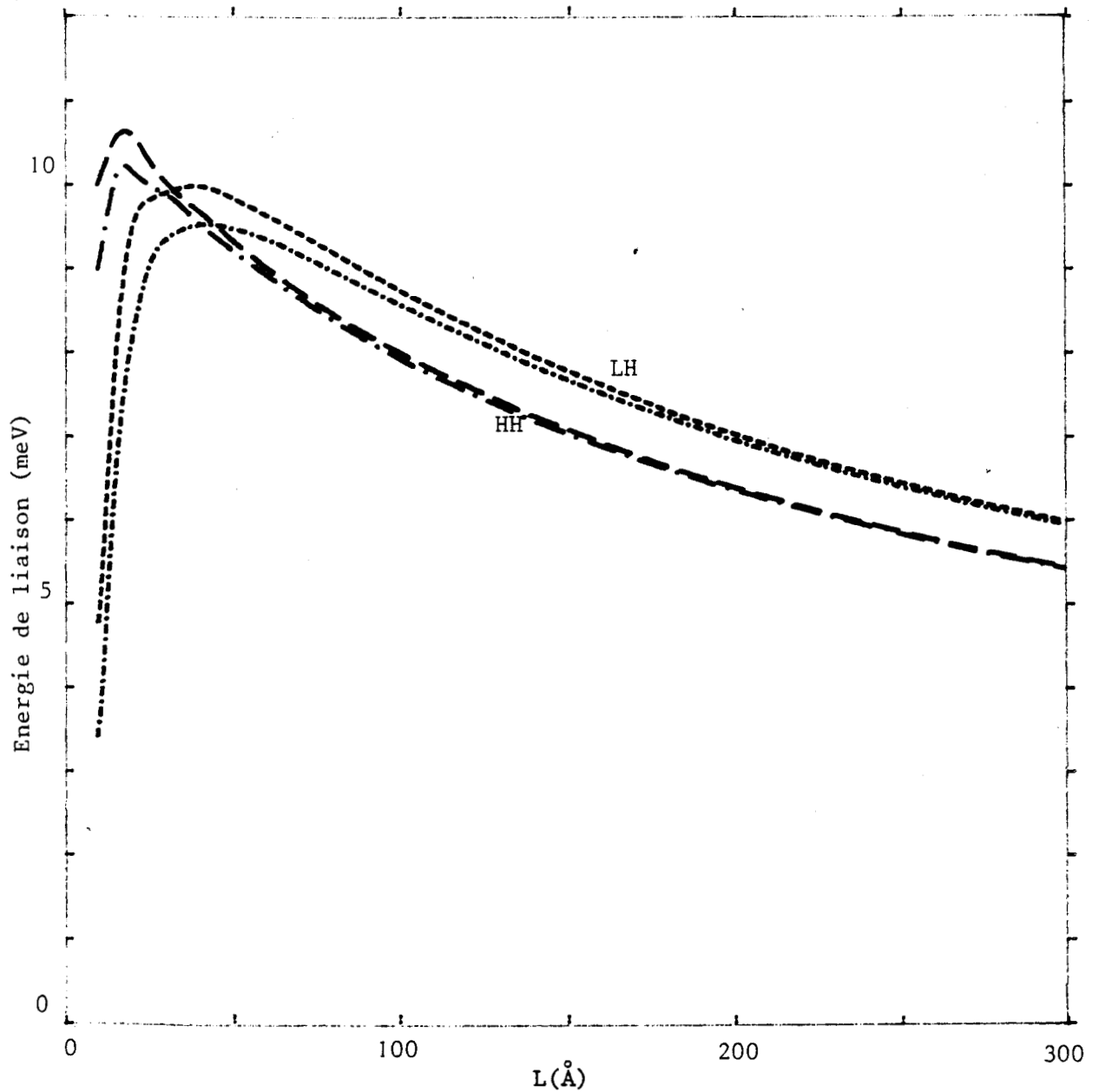


Fig. IV.2



Influence de la prise en compte du saut de masse effective sur les énergies de liaison de l'exciton à trou lourd (HH) et de l'exciton à trou léger (LH). Les courbes en tirets-pointillés correspondent à un calcul équivalent à celui de Greene et al (où le saut de masse effective est négligé), celles en tirets sont obtenues en tenant compte du saut de masse effective.

Le premier point important est que la prise en compte des deux masses effectives différentes décale la largeur critique L_c vers les puits plus étroits. Le modèle devient alors en accord avec l'observation expérimentale puisque, pour les puits de largeur supérieure à 42 Å,

L'exciton à trou léger est plus lié que l'exciton à trou lourd. Le second point est que, pour des puits assez étroits, les énergies de liaison sont plus grandes.

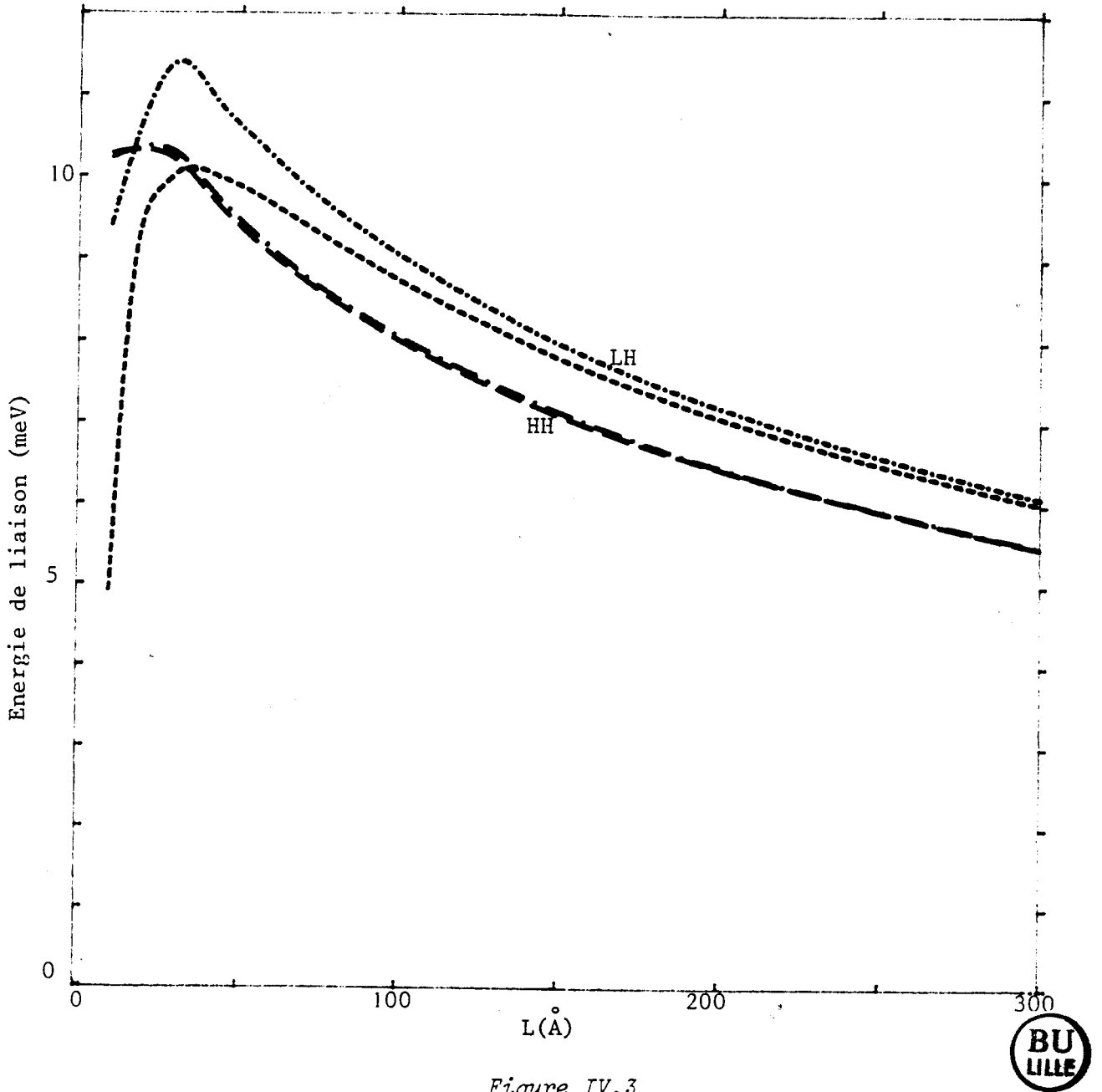


Figure IV.3

Variations des énergies de liaison des excitons à trous lourds (HH) et trous légers (LH) en fonction de la largeur du puits. Les courbes en tirets correspondent à $\Delta E_c = 0.85 \Delta E_G$ (règle de Dingle) et celles en tirets pointillés à $\Delta E_c = 0.6 \Delta E_G$.

La figure IV.3 donne les énergies de liaison calculées pour un puits où $x = 0.37$, ce qui correspond au puits étudié expérimentalement par Miller et

al.[22]. Les résultats sont en accord correct avec l'expérience : pour un exciton à trou léger dans un puits de 42 \AA , la quantité $(E_{1s} - E_{2s})$ mesurée est de 11.5 meV alors que notre calcul donne $E_{1s} = 10.9 \text{ meV}$ pour $\Delta E_c = 0.6 \Delta E_g$, et 10 meV pour $\Delta E_c = 0.85 \Delta E_g$. Par contre, pour l'exciton à trou lourd l'accord est meilleur puisque le E_{1s} mesuré est légèrement plus grand que le $(E_{1s} - E_{2s})$ mesuré. La valeur calculée pour l'exciton à trou léger est donc légèrement inférieure à la valeur expérimentale. Ceci peut s'expliquer par le fait que nous avons négligé les termes non diagonaux dans l'hamiltonien de Köhn et Luttinger. La prise en compte de ces termes stabilisera l'état le plus bas, c'est-à-dire l'exciton léger [41].

IV.3. Conclusion

Nous avons présenté un modèle simple qui permet de calculer les énergies de liaisons des excitons dans une structure à puits quantiques. Rappelons brièvement les limites du modèle :

- il n'est valable que pour des puits de moins de 200 \AA de large ; pour $L > 200 \text{ \AA}$, notre fonction d'essai n'est plus très bien adaptée au problème
- nous avons négligé les termes non diagonaux dans l'hamiltonien de Köhn et Luttinger. La prise en considération de ces termes stabiliserait le niveau le plus bas (soit l'exciton à trou léger)
- la simplicité des calculs numériques est nettement réduite par rapport au cas d'une impureté hydrogénoïde (ceci à cause de l'intégrale sur z_e et z_h dans (4.8)).

Toutefois ce modèle présente les richesses suivantes :

- il reste assez simple
- il permet de prendre en compte les différences de masse effective dans les deux matériaux
- il peut être formellement généralisé au cas d'un plus grand nombre de puits en interaction les uns avec les autres (mais cette fois le calcul numérique de l'intégrale sur z_e et z_h devient beaucoup plus fastidieux). L'éventualité d'une telle généralisation n'est pas à négliger, car des échantillons de superréseaux formés de couches de GaAs et Ga(Al)As d'égale épaisseur (70, 50, 40 et 30 \AA) viennent d'être réalisés et sont en cours d'étude au CNET-Lannion.

Chapitre V

Structure électronique des superréseaux nipi silicium

Dans les chapitres précédents, nous avons étudié des superréseaux de composition (formés d'une alternance de tranches de semiconducteurs différents). Ce cinquième chapitre est consacré à l'étude de superréseaux de dopage (ou nipi). Ceux-ci sont formés d'un semiconducteur volumique, dopé alternativement, par couches, n, p, ou intrinsèque. L'étude théorique des nipi AsGa a été menée par Döhler dès 1972 [45-46]. En 1981, Ploog, Fischer et Künzel [47], ont réalisé le premier échantillon de nipi AsGa. Depuis, de nombreuses études expérimentales ont permis de mieux connaître ces systèmes. On trouvera une revue complète sur les nipi AsGa en [48]. La principale caractéristique des nipi est de présenter un gap indirect dans l'espace réel. Les nipi silicium présentent en outre un gap indirect dans l'espace réciproque. Leur réalisation est actuellement en cours d'étude au CNET de Meylan. C'est pourquoi nous nous sommes attachés à calculer la structure électronique des nipi silicium.

La structure électronique des nipi AsGa a été calculée par Ruden et Döhler [49]. Ils ont fait plusieurs approximations afin de pouvoir simplifier les calculs. Nous étudions ces approximations et montrons qu'elles ne sont valides que dans une gamme réduite de concentration de dopants. Nous adaptons ensuite leur calcul au cas d'un semiconducteur à gap indirect, présentant donc plusieurs minima anisotropes dans l'espace des k . Nous présentons également un autre type d'approximation dans la gamme de concentration où l'on a un régime de bandes d'impuretés.

Dans un premier temps, nous rappelons les principes du calcul de Ruden et Döhler.

V.1. Structure électronique d'un superréseau nipi AsGa

Un superréseau nipi consiste donc en un semiconducteur dopé alternativement, par couches, n, p ou intrinsèque. Les impuretés présentes créent un potentiel de charge d'espace périodique qui module les bandes de valence et de conduction (cf. fig. V.1). Ainsi, les états électroniques proches du bas de bande de conduction sont séparés spatialement des états de haut de bande de valence, d'une demi-période du superréseau. Il en résulte un très faible recouvrement des états de trou et d'électron. Les couches dopées n fonctionnent comme des "puits à électrons" et présentent des niveaux permis (notons E_C^0 la distance entre le plus bas de ces niveaux et le fond du puits) ; de même les couches dopées p se comportent comme des "puits à trous" (E_V^0 repère le plus haut des niveaux permis, par rapport au fond du "puits"). Alors le semiconducteur présente un gap effectif

$$E_G^{eff} = E_G^0 - 2V_0 + E_C^0 + E_V^0$$

E_G^0 est le gap du semiconducteur volumique, $2V_0$ est l'amplitude du potentiel de charge d'espace (c'est une fonction des caractéristiques géométriques du nipi, et aussi des profils de dopage), E_C^0 et E_V^0 résultent du calcul complet de structure électronique (qui sera développé ci-dessous) et ils varieront avec le nombre de porteurs présents dans l'échantillon. On se trouve donc en présence d'un composant dont on peut ajuster le gap en jouant sur les profils de dopage. De plus, une fois ces profils de dopage fixés, il y a encore possibilité de faire varier la largeur du gap au moyen du nombre de porteurs injectés. Nous noterons z la direction perpendiculaire au plan des couches (soit le plan (xy)). Nous nous plaçons dans le cas de dopages homogènes, avec un profil de dopage rectangulaire (cf. fig. V.1a), et nous supposerons que toutes les impuretés sont ionisées. La résolution de l'équation de Poisson donne alors le profil de potentiel $v_0(z)$ représenté figure V.1b. Les critères utilisés par Ruden et Döhler (R.D.) pour simplifier leurs calculs sont les suivants :

i) les fluctuations de potentiel dues aux impuretés sont assez faibles pour être négligées : pour une concentration d'impuretés N_i , et donc un rayon moyen d'impureté $r_i = (3/(4\pi N_i))^{1/3}$, R.D. considèrent que l'on ne peut négliger les effets de fluctuations sur les états de bande de conduction que si l'énergie de Coulomb associée à une telle fluctuation (de l'ordre de $e^2/\kappa r_i$) est faible devant les différences d'énergie entre sous-bandes. De fait la grandeur caractéristique serait plutôt l'élément de matrice de la fluctuation entre deux états de la bande de conduction qui est de l'ordre

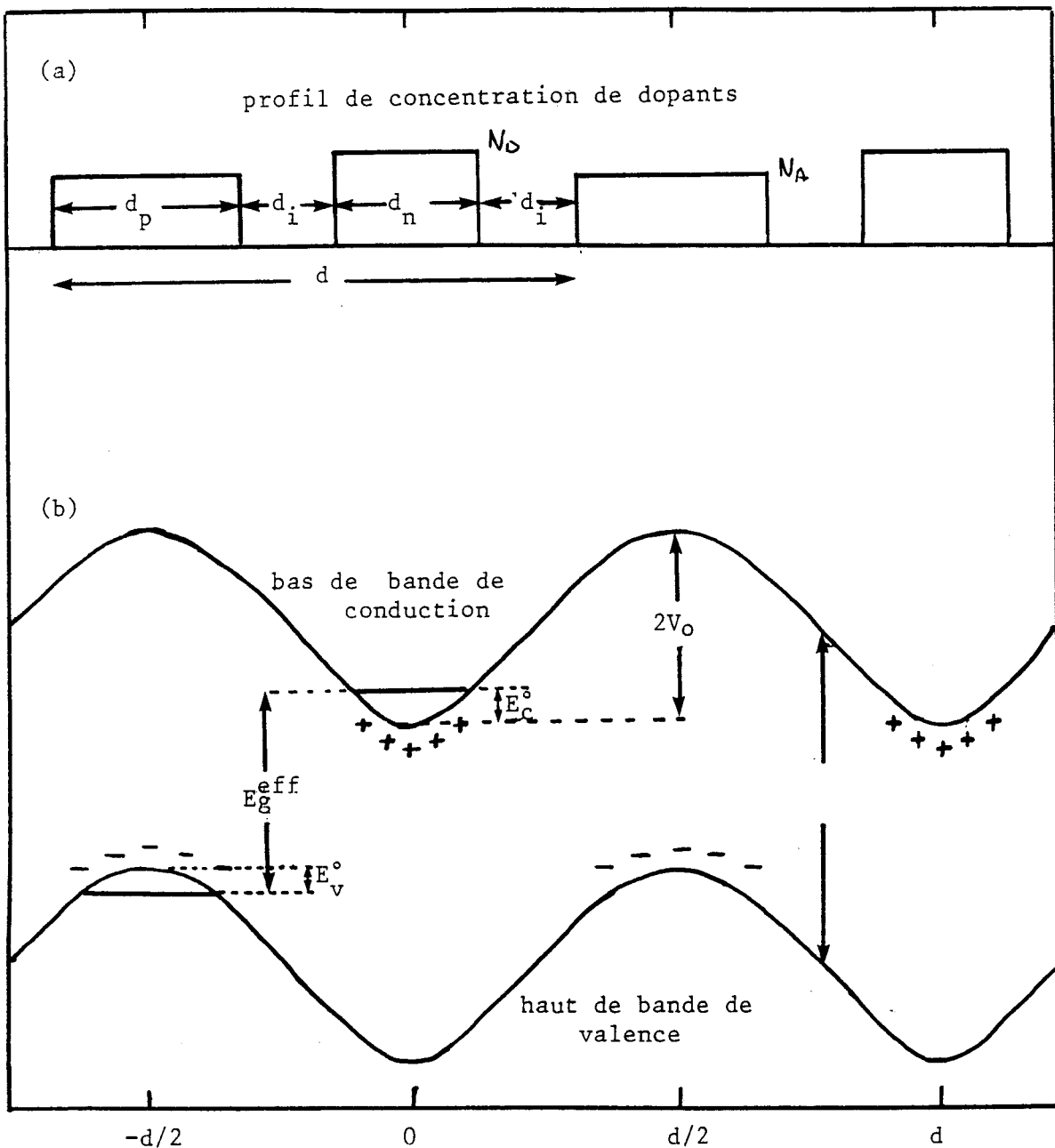


Figure V.1. : Représentation d'un nipi

- a) profil de concentration de dopants
- b) modulation, par le potentiel de charge d'espace $v_0(z)$ des bords de bandes de valence et conduction ; les signes + représentent les niveaux donneurs ionisés près de la bande de conduction, et les signes - les accepteurs chargés négativement près de la bande de valence. Les significations de E_{vc}^0 , E_{vv}^0 , E_g^{eff} sont données dans le texte

de grandeur de

$$\frac{e^2}{\kappa r_i} \cdot \frac{4\pi r_i^3}{3V}$$

(où V est le volume d'une couche). Cette quantité est toujours très petite; l'effet des fluctuations de potentiel sur les états de bande de conduction est donc toujours négligeable.

ii et iii) la bande d'impureté créée par les donneurs peut être négligée, mais on tient compte de celle créée par les accepteurs. Pour justifier ceci, il est bon, tout d'abord, de redéfinir la notion de bande d'impureté.

Un semiconducteur faiblement dopé n (ou p) présente des niveaux d'impureté discrets E_D (E_A) situés dans la bande interdite, au voisinage de la bande de conduction (valence). Tout électron (trou) situé sur un niveau d'impureté possède une énergie d'ionisation $E_i = m^*e^4/2\hbar^2\kappa^2$ et le rayon de Bohr de l'impureté est noté $a^* = \hbar^2\kappa/m^*e^2$. Si le nombre d'impuretés augmente, la distance moyenne entre deux électrons (trous) des impuretés ($r_i = N_i^{-1/3}$) ne sera plus très grande devant a^* . On peut alors avoir interaction entre les électrons (trous) des impuretés. Cette interaction élargit les niveaux d'impureté pour former une bande qui rejoint la bande de conduction (ou de valence) et donne au solide des propriétés métalliques.

On peut alors considérer les critères suivants :

- il y a formation d'une bande d'impureté :

On doit considérer la bande d'impureté tant que la largeur de celle-ci est beaucoup plus faible que l'énergie de liaison de l'impureté E_i car alors la bande d'impureté reste bien distincte de la bande de conduction (ou de valence). En liaisons fortes la largeur de la bande d'impureté (pour un cubique simple) est typiquement $12|\beta|$ (où β , l'intégrale de résonance entre les fonctions centrées sur deux atomes voisins, peut être approximée par $-E_i e^{-r_i/a^*}$). On obtient la condition

$$12 E_i \exp(-1/(a^*N_i^{1/3})) \ll E_i$$

soit encore

$$a^*N_i^{1/3} \ll \frac{1}{\ln(12)} \approx 0.4$$

- la bande d'impureté peut être négligée :

Dans un modèle d'électrons presque libres la largeur de la bande d'impureté la plus basse est égale à l'énergie cinétique en bord de zone de Brillouin

$$\text{soit } \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m^* r_i^2} = \frac{\hbar^2}{2m^*} \pi^2 N_i^{2/3} .$$

Tant que celle-ci reste très grande devant la largeur de la première bande interdite (qui est égale à la composante de Fourier du potentiel coulombien, soit $2e^2/4\pi\kappa r_i$), on pourra considérer que la bande d'impureté n'est plus distincte de la bande de conduction ; on peut alors la négliger. La condition s'écrit :

$$N_i^{1/3} a^* > \frac{4}{\pi^3} \approx 0.13$$

On peut donc considérer 3 possibilités :

- * a) si $N_i^{1/3} a^* \gg 0.4$, on ne doit pas avoir de bande d'impureté
- * b) si $N_i^{1/3} a^* \ll 0.13$, il doit y avoir une bande d'impureté
- c) si $0.13 < N_i^{1/3} a^* < 0.4$, on ne peut pas conclure.

Si l'on considère des électrons dans GaAs ($m^* = 0.067 \kappa = 12.5$) la condition a) est remplie si $N_D > 8.10^{16} \text{ cm}^{-3}$. Pour des concentrations de donneurs supérieures à cette valeur, il est donc légitime de négliger la bande d'impureté de donneurs.

Pour les trous dans GaAs, la masse effective de sous-bandes étant beaucoup plus grande, la condition b) est remplie pour $N_A \ll 2.10^{19} \text{ cm}^{-3}$. On a alors une bande d'impureté d'accepteurs. Le fait de peupler cette bande par des trous revient à neutraliser les charges négatives au centre des couches dopées p sur une largeur $d_p^0 = p^{(2)}/N_A$, si l'on note $p^{(2)}$ le nombre de trous présents dans une tranche de l'échantillon.

Pour un nipi silicium, les paramètres ont des valeurs différentes (la masse effective des électrons est beaucoup plus grande) ; nous rediscuterons les hypothèses simplificatrices en V.2.

Dans les échantillons on a en général, $N_D = N_A = N_i$. Pour N_i entre 5.10^{17} et $5.10^{18} \text{ cm}^{-3}$ on peut sans problème utiliser le traitement

autocohérent suivant :

Les niveaux électroniques proches du bas de bande de conduction (dans les couches de type n) sont calculés en utilisant le formalisme de la densité locale [50-51] et l'approximation de la masse effective. L'équation de Schrödinger s'écrit alors :

$$[(-\hbar^2/2m^*)\nabla^2 + v_o(z) + v_H(z) + v_{xc}(z)] \psi_{\mu\vec{k}}(\vec{r}) = \epsilon_{\mu\vec{k}} \psi_{\mu\vec{k}}(\vec{r}) \quad (5.1)$$

où $v_o(z)$ est le potentiel créé par les impuretés (parabolique dans les couches de dopage et linéaire dans les couches intrinsèques)
 $v_H(z)$ est le potentiel de Hartree
 $v_{xc}(z)$ est le potentiel d'échange et de corrélation
 m^* est la masse effective des électrons au voisinage du minimum considéré.

Comme le potentiel ne dépend pas de x et y et est périodique en z, les fonctions d'onde s'écrivent sous la forme :

$$\dots \quad \psi_{\mu\vec{k}}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{A}} \exp(i\vec{k}_{//} \cdot \vec{r}_{//}) \xi_{\mu k_z}(z) \quad (5.2)$$

* * où $k_{//}$ est le vecteur d'onde parallèle aux couches de dopage et $\xi_{\mu k_z}(z)$ la fonction de Bloch du superréseau pour la sous-bande μ et le vecteur d'onde k_z ($-\pi/d \leq k_z < \pi/d$).

On a alors :

$$\epsilon_{\mu\vec{k}} = \epsilon_{\mu k_z} + \hbar^2 k_{//}^2 / 2m^* \quad (5.3)$$

et l'équation à résoudre devient :

$$[-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + v_o(z) + v_H(z) + v_{xc}(z)] \xi_{\mu k_z}(z) = \epsilon_{\mu k_z} \xi_{\mu k_z}(z) \quad (5.4)$$

Le potentiel de Hartree est donné par l'équation de Poisson

$$\frac{\partial^2 v_H(z)}{\partial z^2} = -\frac{4\pi e^2 n(z)}{\kappa} \quad (5.5)$$

(On a noté κ la constante diélectrique des matériaux étudiés).

La densité électronique $n(z)$ s'écrit :

$$n(z) = 2 \sum_{\mu k'} |\xi_{\mu k_z}(z)|^2 \theta(\Phi_{\mu} - \epsilon_{\mu k_z} - \hbar^2 k_z^2 / 2m^* - E_c) \quad (5.6)$$

(θ étant la fonction d'Heaviside et Φ_{μ} le quasi niveau de Fermi).

Celle-ci nous permet alors d'accéder au potentiel de Hartree

$$v_H = - \frac{4\pi e^2}{\kappa} \int_0^z N(z) dz$$

où (5.7)

$$N(z) = \int_0^z n(z) dz$$

Le potentiel d'échange et corrélation s'exprime, lui aussi, à partir de la densité électronique. Ruden et Döhler ont utilisé la formule établie par Gunnarson et Lundquist [52] :

$$-\epsilon_{xc} = (0.916/r_s) e^2 / (2\kappa a_D^{EMA})$$

avec

$$r_s = \left(\frac{3}{4\pi n} \right)^{1/3} / a_D^{EMA} \quad (5.8)$$

et

$$a_D^{EMA} = m^* e^2 / \kappa \hbar^2$$

ce qui correspond au premier terme du développement de la formule issue du calcul complet d'Ando et Mori 53 .

Il est bon de noter que (5.8) est obtenue en tenant compte du fait que les états se trouvent au voisinage du minimum d'une vallée isotrope de masse effective m^* .

Pour résoudre (5.4), connaissant (5.7) et (5.8), il suffit donc d'exprimer $n(z)$.

Dans la plupart des cas étudiés, seules les sous-bandes

inférieures sont partiellement occupées. Or celles-ci ont une dispersion nulle en k_z (ceci est dû au fait que la probabilité de transition d'une couche dopée n à la couche voisine, par effet tunnel, est très faible). On peut donc traiter ce problème en liaisons fortes, alors

$$\xi_{\mu k_z}(z) = \frac{1}{\sqrt{N_{SL}}} \sum_m e^{ik_z md} \phi_{\mu}(z-md) \quad (5.9)$$

où N_{SL} est le nombre de périodes du superréseau

$\phi_{\mu}(z-md)$ correspond à la fonction d'onde de la $\mu^{\text{ième}}$ sous bande centrée sur le puits numéroté m .

Il vient alors :

$$n(z) = \sum_{\mu} \sum_m n_{\mu}^{(2)} |\phi_{\mu}(z-md)|^2 \quad (5.10)$$

la population $n_{\mu}^{(2)}$ de la $\mu^{\text{ième}}$ sous-bande est obtenue en écrivant que le niveau de Fermi est le même dans toutes les sous-bandes occupées

$$\phi_{\mu} - E_c = \epsilon_0 + (\hbar^2/2m^*) 2\pi n_0^{(2)} = \epsilon_{\mu} + (\hbar^2/2m^*) 2\pi n_{\mu}^{(2)}$$

avec

(5.11)

$$\sum_{\mu \text{ occ}} n_{\mu}^{(2)} = n^{(2)}$$

$n^{(2)}$, le nombre d'électrons par couche présents dans l'échantillon, est un paramètre du système.

La méthode de résolution est alors très simple : avec un potentiel empirique on calcule, par intégration numérique de (5.4), les niveaux des plus basses sous-bandes ϵ_{μ} et leurs états propres $\phi_{\mu}(z-md)$; à l'aide de (5.10) et (5.11) on en déduit $n(z)$ et par suite, via (5.7) et (5.8) on obtient un nouveau potentiel total $v_0 + v_H + v_{xc}$. Si celui-ci est différent du potentiel de départ, on recommence le calcul jusqu'à une solution autocohérente.

Ce formalisme a été établi par Ruden et Döhler [49]. Les structures électroniques résultantes sont données par les figures V.2 et V.3 pour un nipi AsGa dans un état fondamental ($n^{(2)} = 0$) et dans un état excité ($n^{(2)} = 1.4 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-2}$). Nous allons maintenant adapter ce calcul au cas des nipi silicium.

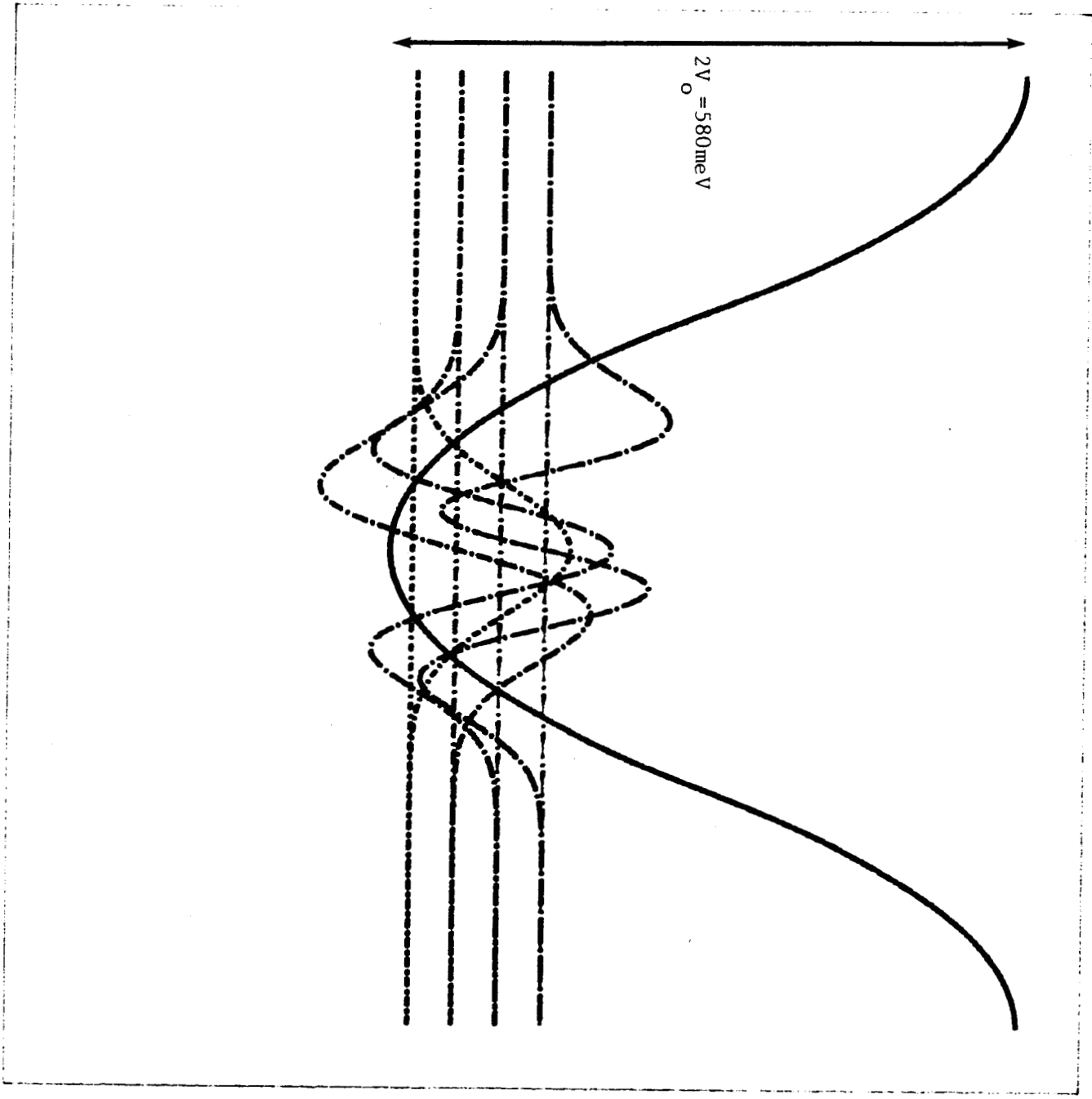


Figure V.2.

...
 ...
 ...
 ...

(t plein), niveaux d'énergie des plus
 ... fonctions envelope (pointillés) sur
 $d_p = d_n = 400 \text{ \AA}$, $d_f = 0$, $N_A = N_D = 10^{16} \text{ cm}^{-3}$.

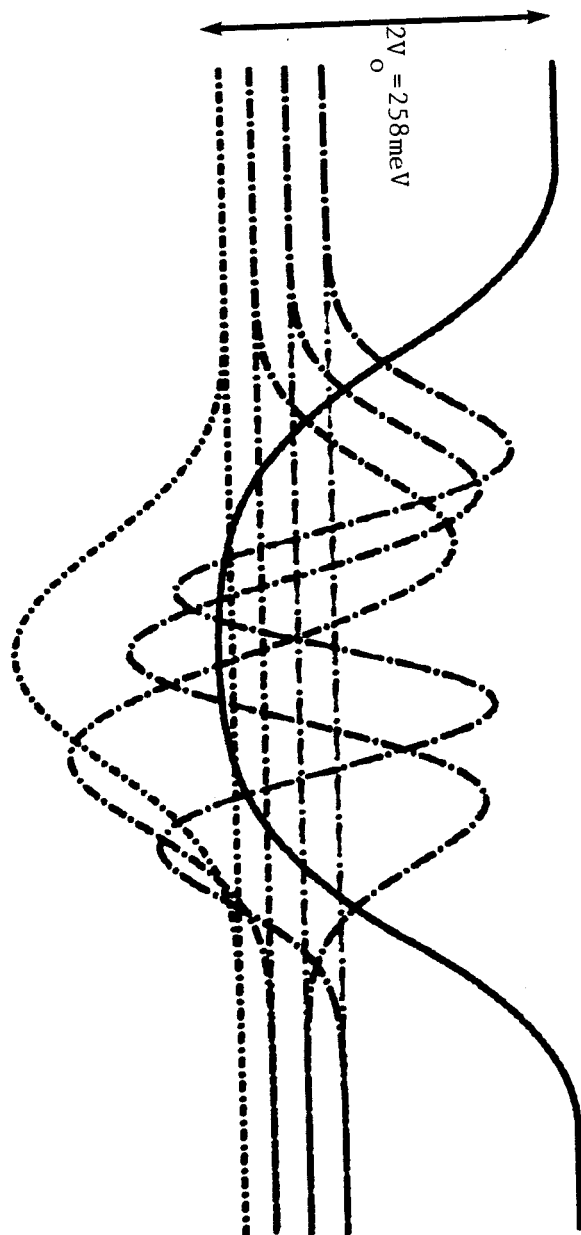


Figure V.3.

Potentiel autocohérent $v_{sc}(z)$ (trait plein), niveaux d'énergie des plus basses sous-bandes de conduction, et fonctions enveloppe (pointillés) sur une période d'un nipi AsGa défini par $d_n = d_p = 400 \text{ \AA}$, $d_i = 0$, $N_A = N_D = 10^{18} \text{ cm}^{-3}$, dans un état excité ($n^{(2)} = 1.4 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-2}$)

V.2. Structure électronique d'un superréseau nipi-silicium

Les deux principales différences entre un nipi AsGa et un nipi Si sont :

- la masse effective d'un ordre de grandeur supérieure dans le cas du silicium, ce qui impose de revoir les approximations
- la structure de bande du silicium, contrairement à celle de l'arseniure de gallium, ne présente pas un seul minimum de la bande de conduction au centre de la zone de Brillouin, mais six minima équivalents et anisotropes dans les directions [100] de la zone de Brillouin. La structure électronique s'en trouve fortement modifiée. Un nipi silicium est donc un matériau à gap indirect à la fois dans l'espace réel et dans l'espace réciproque.

Le recouvrement des fonctions d'ondes sera encore plus faible dans les nipi Si, ce qui implique des durées de vie de porteurs beaucoup plus longues, caractéristique a priori intéressante pour les études expérimentales, (malheureusement la réalisation de tels échantillons n'est pas encore maîtrisée et, comme nous le verrons ci-dessous, les sous-bandes électroniques sont tellement rapprochées que les expériences de diffusion Raman risquent d'être difficilement exploitables).

Considérons tout d'abord les approximations nécessaires au calcul.

i) Les masses effectives sont plus grandes dans Si que dans GaAs ; c'est pourquoi les différences d'énergie entre les sous-bandes sont beaucoup plus faibles (de l'ordre de la dizaine de meV), et deviennent du même ordre de grandeur que l'énergie de Coulomb non écrantée. Toutefois, tenant compte de la remarque faite en V.1., nous pouvons continuer de négliger les fluctuations du potentiel dues aux impuretés.

ii) Pour ce qui concerne la présence d'une bande d'impureté, nous pouvons utiliser des résultats issus de l'étude des bandes d'impureté dans du silicium volumique. Considérons tout d'abord la condition de Mott [54] qui donne la transition métal-isolant pour

$$N_i^{1/3} a^* \approx 0.25 .$$

Pour des concentrations inférieures à cette valeur, il est clair que nous sommes dans la limite du semiconducteur isolant, avec une bande d'impureté bien distincte de la bande de conduction ou de valence. Quand N_i est

légèrement supérieure à cette valeur limite, on est dans une situation plus complexe où les bandes d'impuretés sont encore bien définies, mais présentent un recouvrement partiel avec le continuum [55]. C'est seulement pour des concentrations encore plus grandes que la bande d'impuretés se noiera dans le continuum. Un critère approximatif pour lequel cette situation est réalisée, est donné par [56]

$$N_i^{1/3} a^* \geq (4\pi)^{-1/3} = 0.43$$

Cette condition est très proche de la condition a) donnée en V.1. Nous pouvons en déduire que, si la condition a) est réalisée, il faut appliquer le traitement autocohérent complet (semblable à celui établi par Ruden et Döhler dans le cas d'une bande de conduction présentant un seul minimum isotrope). Par contre pour $N_i^{1/3} \leq 0.43$, nous avons une bande d'impureté qui piège les porteurs à basse température. Pour les donneurs dans le silicium, la bande d'impureté est noyée dans le continuum pour $N_i \approx 2.10^{19} \text{ cm}^{-3}$ [57-58]. Pour des accepteurs (de masse plus grande) la valeur limite correspond à des N_i encore supérieurs.

Les concentrations usuelles ($N_i \approx 10^{18}, 10^{19} \text{ cm}^{-3}$) correspondent donc à des régimes de bandes d'impuretés. On peut alors calculer $2V_0$, l'amplitude de modulation des bandes de conduction et de valence (cf. fig. V.1) de manière très simple avec un modèle de charge d'espace : les bandes d'impuretés piègent les porteurs au centre des couches de dopage. Le profil de dopage effectif est alors représenté en figure V.4 (a).

La résolution de l'équation de Poisson donne alors simplement :

$$\begin{array}{ll} \text{si } 0 \leq z \leq d_n^0/2 & V(z) = 0 \\ d_n^0/2 \leq z \leq d_n/2 & V(z) = 2\pi e^2 N_D (z - d_n^0/2)^2 / \kappa \\ d_n/2 \leq z \leq (d - d_p)/2 & V(z) = 2\pi e^2 N_D (d_n - d_n^0) (z - (d_n + d_n^0)/4) / \kappa \\ (d - d_p)/2 \leq z \leq (d - d_p^0)/2 & V(z) = 2V_0 - 2\pi e^2 N_A (z - (d - d_p^0)/2)^2 / \kappa \\ (d - d_p^0)/2 \leq z \leq d/2 & V(z) = 2V_0 \end{array} \quad (5.12)$$

avec

$$V_0 = \frac{2\pi e^2}{\kappa} \{ N_D (d_n - d_n^0)^2 / 4 + N_D d_i (d_n - d_n^0) + N_A (d_p - d_p^0)^2 / 4 \}$$

où $d_i = (d - d_n - d_p) / 2$

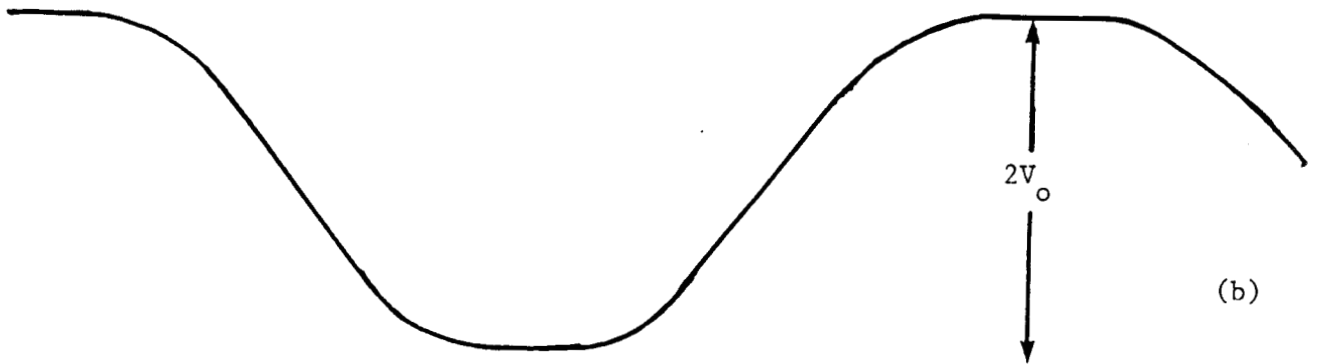
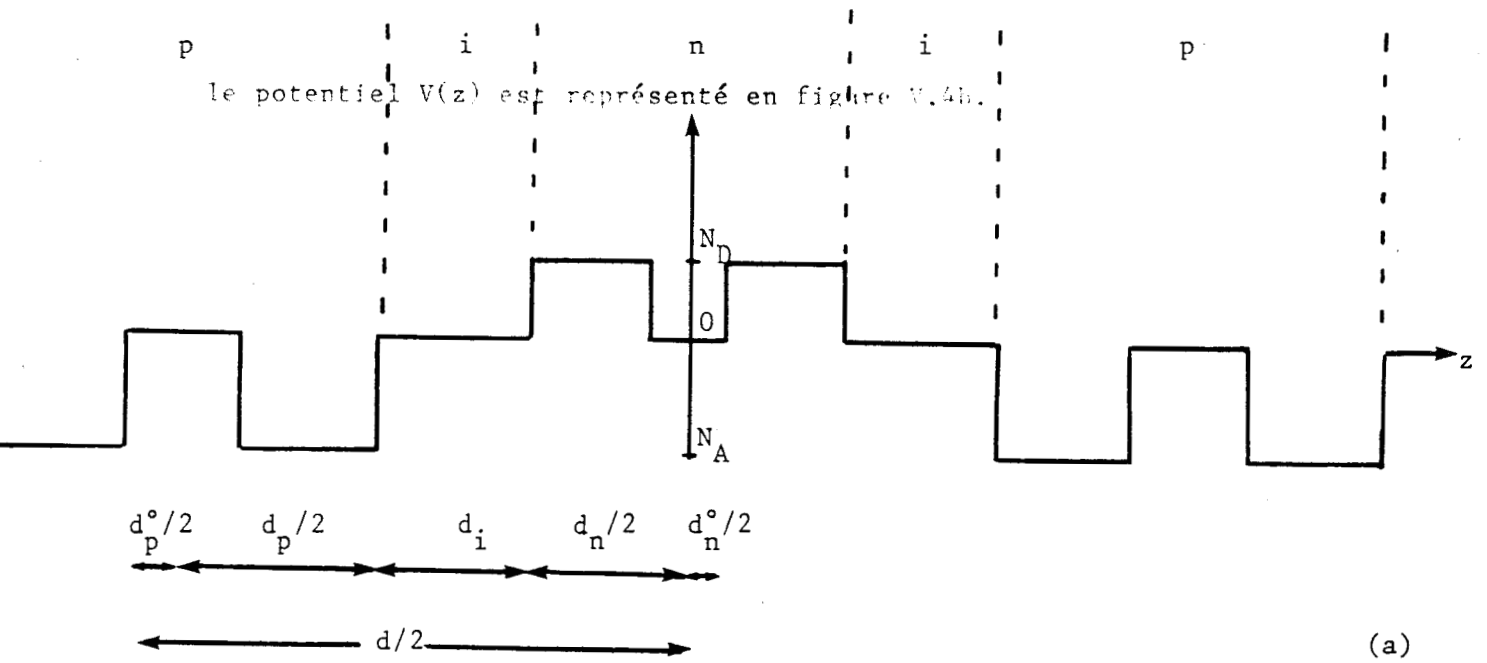


Figure V.4.

Représentation du profil de dopage effectif (a) et du potentiel $V_0(z)$ (b) pour un nipi en régime de bande d'impuretés, dans un modèle de charge d'espace.

Pour une concentration de donneurs voisine de la condition limite ($N_i \approx 10^{19} \text{ cm}^{-3}$) il n'est pas certain que l'on puisse utiliser le modèle simple de charge d'espace que nous venons de décrire. Il se pourrait que le calcul autocohérent des bandes (qui correspond aux situations où il n'y a plus de bande d'impureté) soit nécessaire. Nous avons effectué les deux calculs (pour $N_i = 2 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-3}$) et comparé les résultats. Pour le calcul complet autocohérent certaines modifications sont à apporter à celui présenté en V.1. Il faut en effet tenir compte du fait que l'on a maintenant six minima équivalents en bas de la bande de conduction. Si l'on prend l'axe z (perpendiculaire aux couches) suivant la direction [100], quatre de ces six minima sont totalement découplés, car ils correspondent à des $\vec{k}_{//}$ différents. Les deux autres minima, qui correspondent tous deux à $k_{//} = 0$ sont faiblement couplés. Nous avons évalué grossièrement ce couplage. Comme il est faible, nous le négligerons. Nous prenons en compte l'anisotropie des minima, dans l'approximation parabolique, en introduisant m_l et m_t les masses effectives longitudinales et transversales.

Selon que la direction de l'axe z est suivant l'axe [100], [110] ou [111], nous aurons deux, deux ou une équations correspondant à l'équation de Schrödinger exprimée en (5.4). De fait (5.4) reste valable, seule la valeur à donner à m^* variera avec le minimum considéré et la direction z choisie. Par contre les énergies propres $\epsilon_{\mu\vec{k}}$ ne s'expriment plus à l'aide de (5.3). mais comme suit :

$$\epsilon_{\mu\vec{k}} = \epsilon_{\mu k_z} + \frac{\hbar^2}{2m^*} k_x^2 + \frac{\hbar^2}{2m^*} k_y^2 \quad (5.13)$$

Les valeurs à donner à m^* , et m^*_1 , et m^*_2 sont récapitulées dans le tableau ci-dessous, en accord avec les résultats de Stern et Howard [59]

direction z	m^*	$m^*_{//1}, m^*_{//2}$	dégénérescence
[100]	m_t	m_t, m_l	4
	m_l	m_t, m_t	2
[110]	m_t	m_t, m_l	2
	$2m_t m_l / (m_t + m_l)$	$m_t, (m_t + m_l) / 2$	4
[111]	$3m_t m_l / (m_t + 2m_l)$	$m_t, (m_t + 2m_l) / 3$	6

De plus dans (5.10) la sommation sur μ doit tenir compte des sous bandes issues des six minima, et la dégénérescence doit être incluse dans $n_{\mu}^{(2)}$. Pour l'obtention des $n_{\mu}^{(2)}$, le niveau de Fermi est maintenant celui d'une bande bidimensionnelle anisotrope

$$\Phi_V - E_C = \epsilon_{\mu} - \frac{\hbar^2}{\sqrt{m_{//1}^* m_{//2}^*}} \pi n_{\mu}^{(2)} \quad (5.14)$$

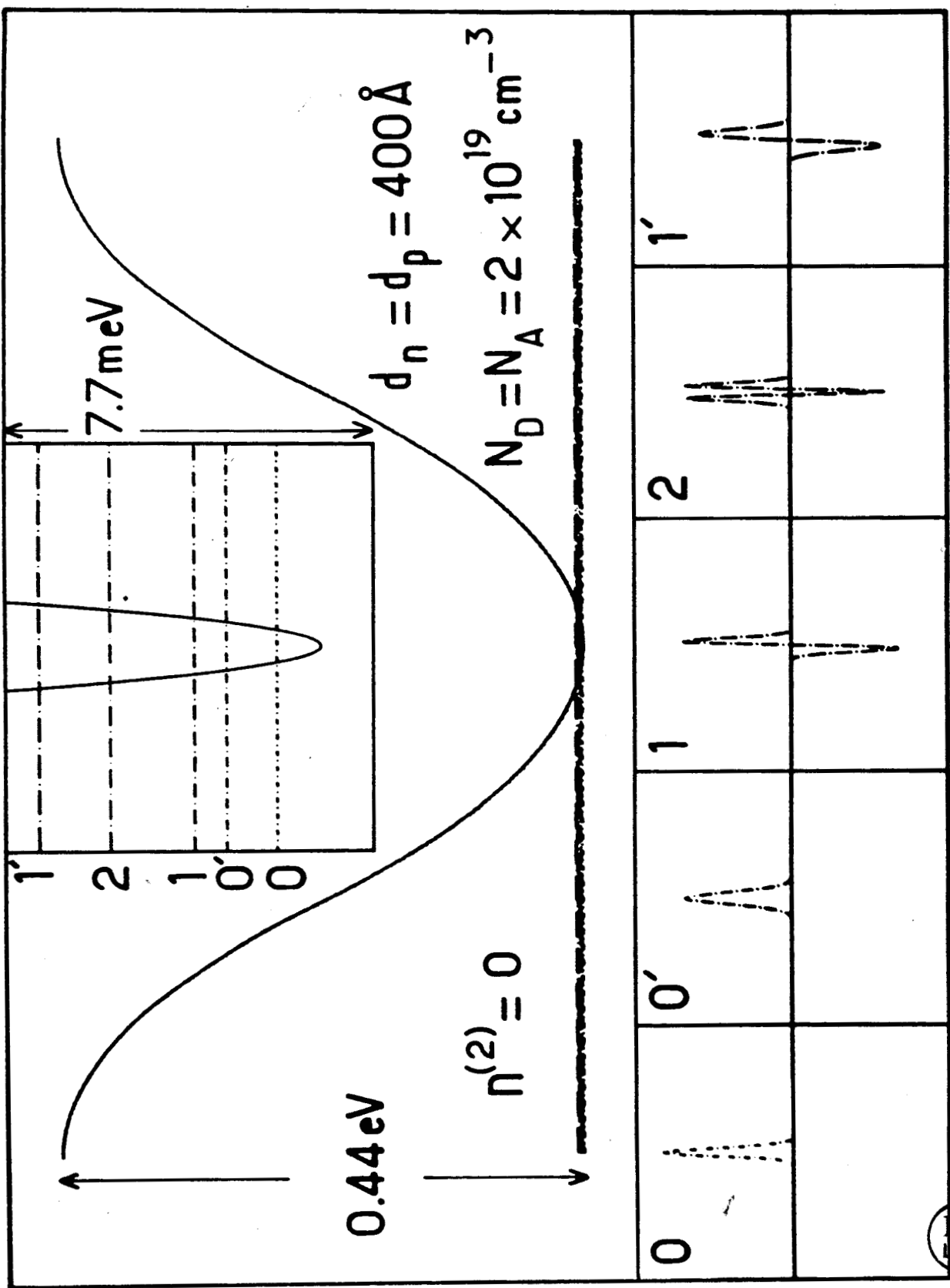
Ici $m_{//1}^*$ et $m_{//2}^*$ sont celles correspondant à la μ ième sous-bande, et la quantité $\Phi_V - E_C$ ne doit pas dépendre de la sous-bande occupée considérée.

D'autre part, la formule (5.8) qui donne une expression simple du potentiel d'échange et de corrélation, a été établie [52,53] au voisinage d'un minimum isotrope. Il est donc bon de garder à l'esprit que, bien que la masse effective n'apparaisse pas dans l'expression finale de v_{xc} , cette formule est, a priori, utilisable uniquement au voisinage d'un minimum isotrope. Plusieurs auteurs [60] ont étudié l'effet de l'anisotropie sur le potentiel d'échange et de corrélation et ont montré que, pour le silicium cet effet était faible. Alors on peut utiliser les expressions (5.8) où l'on remplace la masse m^* par une masse isotrope m_{is}^* définie par $1/m_{is}^* = (2/m_t + 1/m_l)/3$.

Sur les figures V.5 et V.6 on peut lire, pour un superréseau np-Si, dirigé suivant l'axe [100], et dopé à $N_i = 2 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-3}$, le potentiel autocohérent, les énergies des sous bandes de conduction et les fonctions enveloppe, ceci (fig. V.5) pour l'état fondamental ($n^{(2)} = 0$) et (fig. V.6) pour un état excité ($n^{(2)} = 1.4 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-2}$). Le comportement est tout à fait comparable à celui des nipi AsGa. La masse effective étant plus grande dans le silicium, les sous-bandes sont rapprochées. Comme dans le cas du nipi AsGa, quand la concentration en porteurs augmente, le potentiel autocohérent ($v_0 + v_H + v_{xc}$) s'applatit et s'élargit, sous l'effet de l'écrantage, par ces porteurs, des charges fixes des impuretés, et par conséquent, les distances entre sous-bandes diminuent.

Si l'on considère un nipi dont l'axe de croissance est dirigé suivant la direction [110] ou [111] les résultats seront très légèrement différents (pour la direction [111] les niveaux n et n' seront confondus puisque, comme indiqué dans le tableau précédent, les six minima donnent naissance à une bande six fois dégénérée).

Si l'on calcule le potentiel dans le simple modèle de charge d'espace (eq. 5.12) on constate que les deux calculs sont équivalents : pour $N_D = N_A = 2 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ la différence pour $2v_0$ est inférieure à un pour



BU
LLE

Figure V.5.

Potentiel autocohérent $v_{sc}(z)$ (trait plein), niveaux d'énergie des plus basses sous-bandes de conduction, et fonctions enveloppe (pointillés) sur une période d'un nipi Si défini par $d_n = d_p = 400 \text{ \AA}$, $d_i = 0$, $N_A = N_D = 2 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-3}$, dans l'état fondamental ($n^{(2)} = 0$).

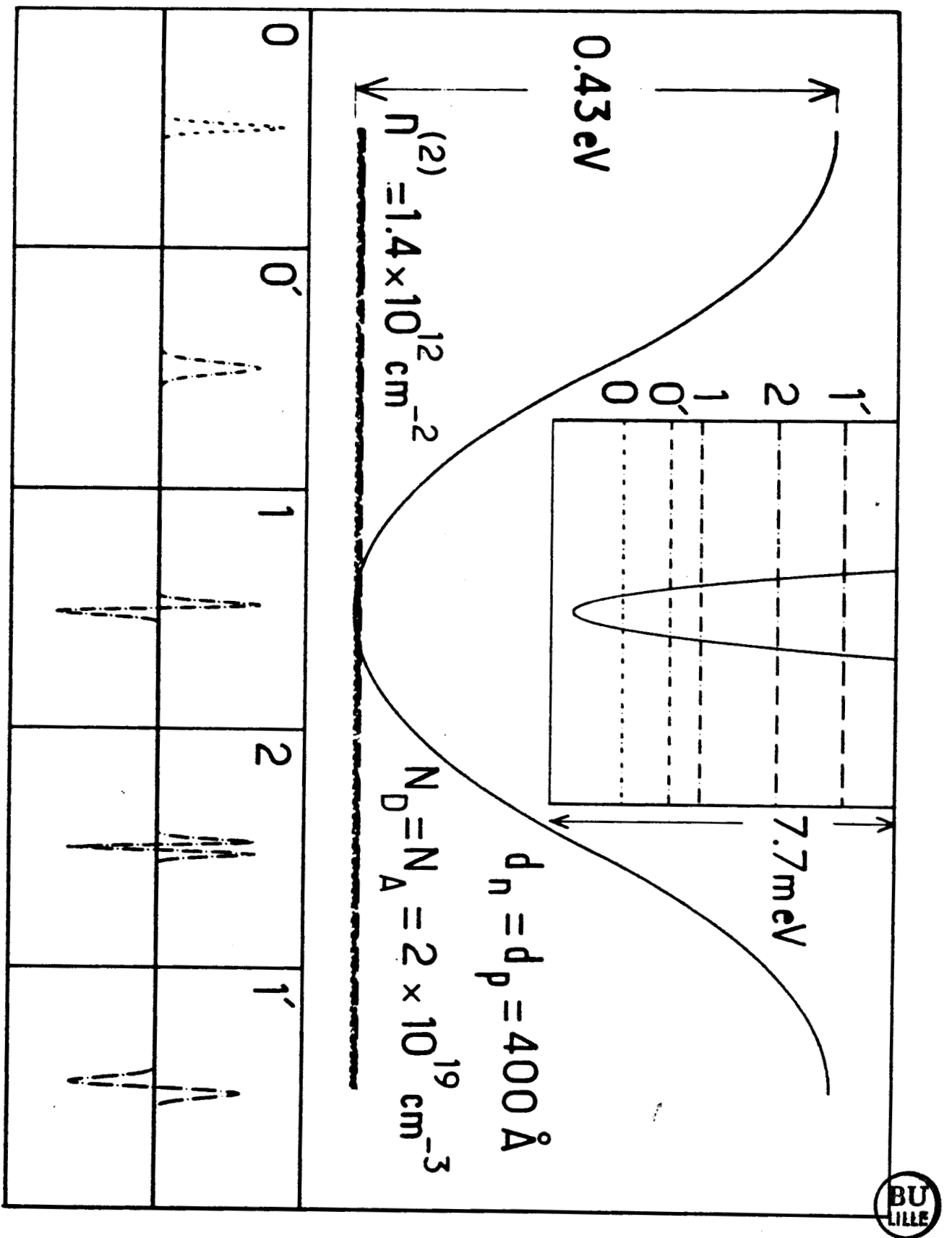


Figure V.6.

Potentiel autocohérent $v_{sc}(z)$ (trait plein), niveaux d'énergie des plus basses sous-bandes de conduction, et fonctions enveloppe (pointillés) sur une période d'un nipi Si défini par $d_n = d_p = 400 \text{ \AA}$, $d_i = 0$, $N_A = N_D = 2 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-3}$, dans un état excité ($n^{(2)} = 1.4 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-2}$).

cent. Nous pouvons donc conclure que, pour les concentrations usuelles, il est inutile d'effectuer le calcul complet autocohérent puisque le modèle de charge d'espace donne le même résultat. L'observation des figures V.5 et V.6 laissait d'ailleurs présager de cet accord, car les fonctions d'onde des états les plus bas sont très concentrées au centre du puits, il revient donc au même de peupler les sous-bandes inférieures ou de geler les porteurs au centre des couches de dopage.

Comme les sous-bandes de conduction sont très rapprochées, les expériences de diffusion Raman seront très difficilement réalisables dans les nipi Si. En effet les spectres Raman présenteront de nombreux pics très rapprochés correspondant aux différences d'énergie entre les sous-bandes de conduction, et seront donc difficilement exploitables.

Un autre point plus intéressant est la faible extension en z , des fonctions d'onde dans les nipi Si. La comparaison avec la situation dans les nipi AsGa laisse penser que, la fonction d'onde des électrons ne s'étendant pas dans les couches p, le recouvrement entre fonction d'électron et de trou sera encore plus faible et par conséquent la durée de vie d'un électron sera beaucoup plus longue que dans les nipi AsGa.

Nous pouvons avoir une estimation grossière de l'augmentation de la durée de vie [61] en approximant la fonction d'onde l'état le plus bas par la solution d'un oscillateur harmonique : en effet, dans l'état fondamental, le potentiel est parabolique à l'intérieur des couches dopées n ou p

$$v_o(z) = \pm 2\pi e N_{A,D} z^2 / \kappa + v_o(0)$$

(où z est repéré par rapport au centre de la couche considérée, le signe + correspond aux électrons en bas de bande de conduction, le signe - aux trous en haut de bande de valence).

Soit en notant

$$\omega_i = (4\pi e^2 N_{A,D} / m_i \kappa)^{1/2}$$

et

$$\alpha_i = (m_i \omega_i / \hbar)^{1/2}$$

où l'indice $i = (e, h)$ décrit les paramètres de l'électron ou du trou, la fonction d'onde du niveau fondamental ($E_i = (\hbar \omega_i / 2)$) s'écrit

$$\psi_i = \pi^{-1/4} \alpha_i^{1/4} \exp(-z^2 \alpha_i / 2)$$

La probabilité de recombinaison est proportionnelle au carré de l'élément de matrice de recouvrement $\langle \psi_e | \psi_h \rangle$. La durée de vie varie donc en $1/|\langle \psi_e | \psi_h \rangle|^2$.

$$|\langle \psi_e | \psi_h \rangle|^2 = [2\alpha_e \alpha_h / (\alpha_e^2 + \alpha_h^2)] \exp - [d^2 \alpha_e^2 \alpha_h^2 / (\alpha_e^2 + \alpha_h^2)] \quad (5.16)$$

soit, en supposant $N_D = N_A$

$$|\langle \psi_e | \psi_h \rangle|^2 = [2m_e^{1/4} m_h^{1/4} / (m_e^{1/2} + m_h^{1/2})] \exp[-d^2 (e^2 N_i / \hbar \kappa)^{1/2} m_e^{1/2} m_h^{1/2} / (m_e^{1/2} + m_h^{1/2})] \quad (5.17)$$

Dans GaAs (pour $N_A = N_D = 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ et $d_n = d_p = 400 \text{ \AA}$) ce facteur correspond à une durée de vie de quelques secondes. Dans Si, $|\langle \psi_e | \psi_h \rangle|^2$ sera beaucoup plus faible, et on obtiendrait, pour le même $N_A = N_D$, une durée de vie de plusieurs jours. De plus on voit en (5.17) que la durée de vie augmentera avec le dopage. Ces ordres de grandeur sont à considérer à titre indicatif car le recouvrement dépend fortement de l'approximation utilisée pour le calculer. Il faut aussi noter que, sous excitation, les sous-bandes supérieures (pour les électrons) seront occupées, les fonctions d'ondes seront plus étendues ce qui tendra à diminuer la durée de vie. Toutefois il est bon de noter que très récemment des durées de vie de plusieurs jours ont été observées [62], mais dans des superréseaux de dopage de silicium amorphe.

V.3. Conclusion

Nous avons traité les nipi silicium dans l'approximation de la masse effective. Nous avons étudié les arguments qu'ont utilisé Ruden et Döhler pour simplifier leurs calculs des nipi AsGa. Nous avons montré que, dans le cas du silicium, nous sommes en régime de bande d'impureté jusqu'à des concentrations en donneurs de l'ordre de $2 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-3}$. Nous avons pu établir que pour des concentrations usuelles il est inutile d'effectuer un calcul complet autocohérent mais qu'un modèle de charge d'espace est mieux justifié et de toute façon donne des résultats équivalents. Le nipi silicium (semiconducteur bidimensionnel à gap indirect dans l'espace réel et dans l'espace réciproque) est différent des autres semiconducteurs bidimensionnels. En particulier la durée de vie des porteurs y est très longue.

CHAPITRE VI

Structure électronique des hétérojonctions : étude de la discontinuité des bandes

Dans les chapitres précédents, pour l'étude de structures à puits quantiques, nous avons supposé que les bandes de valence et de conduction présentaient, à l'hétérojonction, une marche abrupte d'amplitude supposée connue. Ces discontinuités de bandes (ΔE_v , ΔE_c) constituent, en fait, un paramètre essentiel qui régit le comportement des systèmes à hétérojonctions [63-64]. Elles jouent le rôle de barrières de potentiel qui agissent fortement sur les déplacements des électrons et des trous.

Ceci permet de disposer, pour la conception de dispositifs à semiconducteurs, d'un nouveau moyen de contrôler les distributions et flux de porteurs. La connaissance de ces ΔE_v , ΔE_c est donc essentielle pour la conception de nouveaux dispositifs plus performants.

Dans ce chapitre, nous proposons un calcul des discontinuités de bandes. Nous utilisons pour cela l'approximation des liaisons fortes et une condition de neutralité locale. La mise au point du calcul a été effectuée sur l'interface Ge-GaAs [110]. Nous présentons les résultats obtenus pour cette interface. Etant donné les problèmes de précision rencontrés lorsque les fonctions de Green sont calculées par la méthode de récursion nous avons décidé, pour l'application aux autres interfaces, d'utiliser la méthode de décimation. Nous en exposons le principe en fin de ce chapitre.

VI.1. Introduction

A l'hétérojonction de deux semiconducteurs qui n'ont pas, a priori, la même largeur de bande interdite, trois situations peuvent se produire. Elles sont schématisées par la figure VI.1 (le cas le plus courant correspond au a).

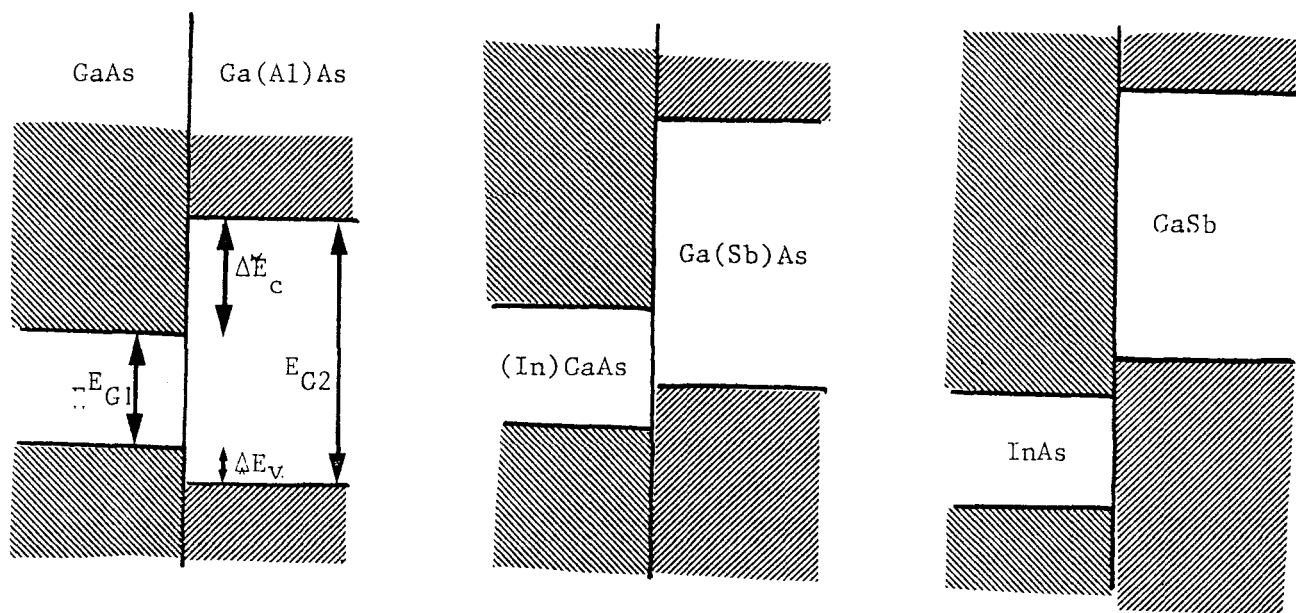


Figure VI.1

Trois configurations possibles à l'hétérojonction de deux semiconducteurs de gap E_{g1} et E_{g2}



La répartition de la différence de gap entre ΔE_v et ΔE_c dépend des deux semiconducteurs qui constituent l'hétérojonction et a priori, également, de leur orientation cristallographique et peut-être des défauts à l'interface (pour ces deux derniers critères les observations expérimentales sont contradictoires [65,66]).

Les études théoriques sur les propriétés électroniques des hétérojonctions de semiconducteurs sont déjà assez nombreuses. On peut en distinguer deux types :

- des calculs complets de structure électronique utilisant la densité

locale et des pseudopotentiels [67-71] que l'on applique à l'étude d'une interface donnée,

- des théories très simplifiées qui tiennent plutôt du modèle empirique ; elles peuvent s'appliquer à toute une gamme de composés [72-77] et ont pour but notamment, de prédire les discontinuités de bandes. Actuellement il existe des théories capables de prédire les ΔE_v , ΔE_c avec une précision moyenne de 0.2 à 0.3 eV [78,79]. La précision souhaitable pour une utilisation technologique serait de 0.1 eV. Nous proposons ici un calcul de discontinuité de bandes utilisant l'approximation des liaisons fortes. Comme l'approximation des liaisons fortes permet de bien décrire les bandes de valence des semiconducteurs constituant l'hétérojonction, nous pouvons espérer qu'en l'utilisant (de manière autocohérente) pour traiter l'interface, nous obtiendrons un résultat quantitatif.

Pour la mise au point du calcul, nous traiterons l'interface non polaire Ge-GaAs [110] qui a été beaucoup étudiée. Nous présenterons ensuite les autres calculs en cours.

VI.2. Interface Ge-GaAs [110]

a) Méthode de calcul

Dans l'approximation des liaisons fortes il faut d'abord écrire, dans la base des orbitales atomiques, la matrice d'interaction correspondant à l'hamiltonien. La plupart des semiconducteurs utilisés ont une structure de bandes bien connue. Des jeux de paramètres de liaisons fortes ont été ajustés pour décrire ces structures [80-82]. Il est important de connaître l'influence des paramètres sur le résultat obtenu. C'est pourquoi nous avons utilisé deux jeux de paramètres tout à fait différents.

- i) une approche aux premiers voisins, avec les paramètres de Vogl et al. [80]
- ii) une approche aux seconds voisins, avec les paramètres de Pandey et Phillips [81] pour le Germanium et de Talwar et Ting [82] pour GaAs.

(Ce choix a été guidé par le fait que dans ces modèles, les paramètres sont disponibles pour un grand nombre de semiconducteurs).

Afin d'explicitier ces deux approches, nous rappelons brièvement le principe de l'approximation des liaisons fortes. Dans cette approximation, on considère qu'un électron situé à proximité d'un ion lui est fortement lié. On exprime alors la fonction d'onde électronique comme

une combinaison linéaire d'orbitales atomiques $\phi_\alpha(\vec{r}-\vec{R}_i)$ où α indique le type d'orbitale (s, p, d, etc...) et la couche électronique considérée, et \vec{R}_i repère tous les atomes du cristal. Après avoir projeté l'équation de Schrödinger sur les orbitales atomiques de base, on obtient une équation séculaire où interviennent les éléments de la matrice de l'hamiltonien $H_{\beta j, \alpha i} = \langle \phi_\beta(\vec{r}-\vec{R}_j) | H | \phi_\alpha(\vec{r}-\vec{R}_i) \rangle$ et les éléments de la matrice des recouvrements $S_{\beta j, \alpha i} = \langle \phi_\beta(\vec{r}-\vec{R}_j) | \phi_\alpha(\vec{r}-\vec{R}_i) \rangle$. En général, on néglige tout recouvrement entre orbitales atomiques $S_{\beta j, \alpha i} = \delta_{\beta j, \alpha i}$. Dans la plupart des cas, pour obtenir une structure de bande correcte, il suffit de ne considérer que les interactions aux seconds voisins (c'est-à-dire de négliger $H_{\beta i, \alpha j}$ si les atomes en \vec{R}_i et \vec{R}_j sont plus éloignés l'un de l'autre que des seconds voisins). C'est ainsi que Talwar et Ting [82] ont calculé les paramètres qui permettent de décrire la structure de bande de nombreux composés III-V (avec 23 paramètres de base, et un hamiltonien 8x8: 2 atomes par maille et 4 orbitales - s, p_x , p_y , p_z - par atome).

On peut aussi se limiter aux interactions aux premiers voisins. Dans ce cas un modèle sp^3 donne une bonne description de la bande de valence mais ne permet pas de déterminer le bas de la bande de conduction. Il est alors nécessaire de compléter la base sp^3 . L'utilisation d'orbitales "d" supplémentaires (au nombre de 5) alourdit considérablement les calculs (matrices 18 x 18, grand nombre de paramètres). Aussi Vogl [80] a-t-il proposé un modèle " sp^3s^* " : la base sp^3 est complétée par une orbitale s^* , de type s, dont le niveau intraatomique associé E_{s^*} est supérieur au niveau E_p . L'état s^* est donc physiquement assimilable à un niveau s excité de l'atome. La matrice de l'hamiltonien est de dimension 10 x 10, et les paramètres de base sont au nombre de 13.

Nous disposons ainsi de tous les éléments de la matrice d'interaction en liaisons fortes, sauf

- des termes de couplage entre des atomes situés de part et d'autre de l'interface (Ge-Ga ou Ge-As). Comme nous ne disposons pas de paramètres pour ces termes, nous prenons la valeur moyenne entre les paramètres de Ge et de GaAs.

- des termes intraatomiques qui sont toujours définis, pour un semi-conducteur donné, à une constante additive près. Ceci ne modifie pas la structure électronique en volume mais, dans le cas de l'interface, le problème est précisément de pouvoir positionner les bandes des deux semi-conducteurs les unes par rapport aux autres. Nous utiliserons comme énergies de référence $\bar{E}(\text{Ge}) = E_{s\text{Ge}}/4 + 3E_{p\text{Ge}}/4$ correspondant au niveau sp^3 du Germanium et $\bar{E}(\text{GaAs})$ défini comme la moyenne des niveaux sp^3 des atomes d'Arsenic et de Gallium.

Le problème à l'interface consiste à déterminer la position du niveau $\bar{E}(\text{Ge})$ des atomes Ge loin de l'interface par rapport à $\bar{E}(\text{GaAs})$ loin de l'interface. Cette différence est liée à la formation d'une couche dipolaire qu'il nous faut calculer. Une fois $\Delta\bar{E} = \bar{E}(\text{Ge}) - \bar{E}(\text{GaAs})$ connue, la position relative des bandes côté Ge et GaAs est déterminée, et la discontinuité de bandes est donc connue. Pour déterminer $\Delta\bar{E}$ il faut effectuer, en principe, un traitement autocohérent. Nous montrerons qu'une condition de neutralité locale permet d'obtenir des résultats satisfaisants.

Il faut, en premier lieu, déterminer la densité de charge. Nous traitons le cas d'une interface parfaite. Nous utilisons la méthode des fonctions de Green pour calculer la population électronique n_i de chaque atome i . La charge nette portée par cet atome est alors $q_i = (Z_i - n_i)|e|$ où Z_i est la valence (3, 4 ou 5 pour Ga, Ge, As) ; n_i est donnée par (cf. appendice A2) :

$$n_i = - \frac{2}{\pi} \sum_{\alpha} \int f(E) \text{Im} G_{i\alpha, i\alpha}(E) dE \quad (6.1)$$

où $G_{i\alpha, i\alpha}$ est l'élément diagonal de l'opérateur de Green pour l'état α de l'atome i et $f(E)$ la fonction de Fermi ($=1$ si $E < E_F$, $=0$ si $E > E_F$, à $T=0^\circ\text{K}$).

Sur chaque atome, la présence de l'interface engendre une variation de concentration électronique $\delta n_i = n_i - n_i^{\text{vol}}$. Le δn_i correspondant à la situation réelle peut être calculé comme suit. Partons de la situation de référence (qui n'est pas la solution autocohérente) correspondant à $\Delta\bar{E}=0$ (on a aligné les niveaux sp^3 de Ge et GaAs et les décalages entre termes E_s et E_p d'un même matériau sont ceux du volume). Alors dans la situation "réelle" (ou autocohérente) les termes intraatomiques de chaque atome seront décalés (par rapport à la situation $\Delta\bar{E} = 0$) d'une quantité U_i reliée aux excès d'électrons par la matrice de Coulomb :

$$U_i = \sum_j \gamma_{ij} \delta n_j \quad (6.2)$$

D'autre part, les excès d'électrons δn_i peuvent s'écrire comme δn_i^0 (la valeur correspondant à $\Delta E = 0$) plus une contribution due aux décalages. Si l'on linéarise cette contribution, on obtient

$$\delta n_i = \delta n_i^0 + \sum_j \chi_{ij} U_j \quad (6.3)$$

(les χ_{ij} sont les éléments de la matrice de susceptibilité du problème).

Les équations (6.2) et (6.3) peuvent s'écrire sous forme matricielle $U = \gamma \delta n$ et $\delta n = \delta n^0 + XU$. Alors U s'écrit :

$$U = (1 - \gamma X)^{-1} \gamma \delta n^0 \quad (6.4)$$

Dans la mesure où les valeurs propres de γX sont grandes devant l'unité (cela sera vérifié plus bas) l'équation (6.4) admet comme solutions approchées

$$U \approx X^{-1} \delta n^0 \quad (6.5)$$

ce qui correspond, d'après (6.3), à une condition de neutralité locale : quel que soit i , $\delta n_i = 0$. Dans les systèmes où l'écrantage est fort, cette condition donne une bonne approximation pour le potentiel autocohérent mais pas pour les charges (qui sont faibles, mais pas nulles).

Le calcul autocohérent complet se ferait de la manière suivante :

- partant de la quantité $\Delta \bar{E} = 0$, on calcule les δn_i , de là (c'est ce qui constitue un problème difficile) on en déduit les U_i par (6.2). Pour ces valeurs de U_i on recalcule les charges δn_i , et ainsi de suite jusqu'à ce que les δn_i obtenues engendrent des U_i qui redonnent les mêmes δn_i . Il est malheureusement difficile d'appliquer (6.2). C'est pourquoi nous utilisons la condition de neutralité de charge locale. Mais il faut vérifier sa validité dans chacun des cas. Pour Ge/GaAs nous avons constaté que les charges créées par l'interface sur les plans autres que les deux plans jouxtant l'interface sont très faibles. Le transfert d'électron se fait principalement sur les deux plans d'interface. Comme il y a deux atomes par maille du réseau 2D des plans d'interface, nous pouvons décomposer ce transfert d'électrons en deux composantes δn_1 de Ga à Ge et δn_2 de As à Ge. Il faut noter que, dans le cas où $\Delta \bar{E} = 0$, δn_1^0 n'est pas exactement l'opposé de δn_2^0 . Il y a donc une couche dipolaire avec une population excédentaire $(\delta n_1^0 + \delta n_2^0)/2$ par atome dans le plan de Ge. Ce dipôle a pour effet de décaler, l'un par rapport à l'autre, les niveaux sp^3 de part et d'autre de l'interface, c'est-à-dire de modifier $\Delta \bar{E}$.

Le transfert d'électrons est lié à la différence des niveaux sp^3 . La condition de neutralité locale indique que la bonne valeur de ΔE vérifie la condition

$$\delta n_1(\Delta \bar{E}) + \delta n_2(\Delta \bar{E}) = 0 \quad (6.6)$$

les δn_i sont calculés par (6.1).

Pour que la condition (6.6) donne une solution correcte, il faut

que γX ait de grandes valeurs propres. La matrice de Coulomb γ correspond principalement à la capacité de la couche dipolaire (de l'ordre de 50 eV par électron et par atome pour Ge/GaAs). Comme la susceptibilité pour une liaison est de l'ordre de 0.2 eV^{-1} [83], le produit γX est de l'ordre de 10, ce qui justifie l'approximation utilisée.

Le problème se ramène donc au calcul des charges sur les plans proches de l'interface. Pour avoir une précision de 0.1 eV sur les énergies, il serait nécessaire d'avoir une précision sur les charges de quelque millièmes d'électrons. Ceci est très difficilement réalisable. Dans un premier temps, la méthode de calcul des charges via l'équation (6.1) (donc à partir des fonctions de Green) est la suivante :

Les éléments de matrice de Green sont calculés par la méthode de récursion (cf. appendice A2). Nous calculons les 18 premiers coefficients a_i et b_i . A partir de ces coefficients nous déduisons, par interpolation, [84] les coefficients suivants jusqu'à l'ordre 25. Nous faisons le choix de ne pas prolonger par une terminaison infinie, ce qui donnerait une densité d'états faible, mais non nulle dans la bande interdite, et conduirait à une imprécision dans le calcul des charges. Nous tronquons la fonction continue à 25 coefficients, ce qui fournit une densité d'états sous forme de fonctions delta et nous donne une meilleure précision sur les charges. Pour le jeu de paramètres correspondant à une approche aux seconds voisins [81-82] la précision sur les charges semble satisfaisante. Par contre pour les paramètres aux premiers voisins dans un modèle sps* [80] un sérieux problème de précision se pose : l'orbitale excitée s^* est destinée à obtenir une meilleure description du bas de la bande de conduction. Cette bande s^* est très étroite et, bien qu'elle n'ait qu'une influence directe négligeable sur les charges (car elle est très peu couplée aux états de bande de valence), elle empêche une convergence correcte des calculs. C'est pourquoi nous avons supprimé l'état s^* dans le calcul des charges.

b) Résultats

On trouvera en figure VI.2 et VI.3 les structures de bandes des matériaux volumiques Ge et GaAs données par [80] (fig. VI.2) et [81-82] (fig. VI.3).

Ces deux modèles sont sensiblement différents, comme le montre le calcul de l'excès de charge sur l'atome de Ga, dans GaAs en volume. En effet celui-ci est égal à $-0.2|e|$ avec les paramètres [82] et à $+0.18|e|$ avec ceux de [81]. La comparaison des discontinuités obtenues dans ces deux modèles représente donc un test assez probant de la stabilité possible des prédictions de liaisons fortes. Dans le tableau 6.1, les résultats des deux

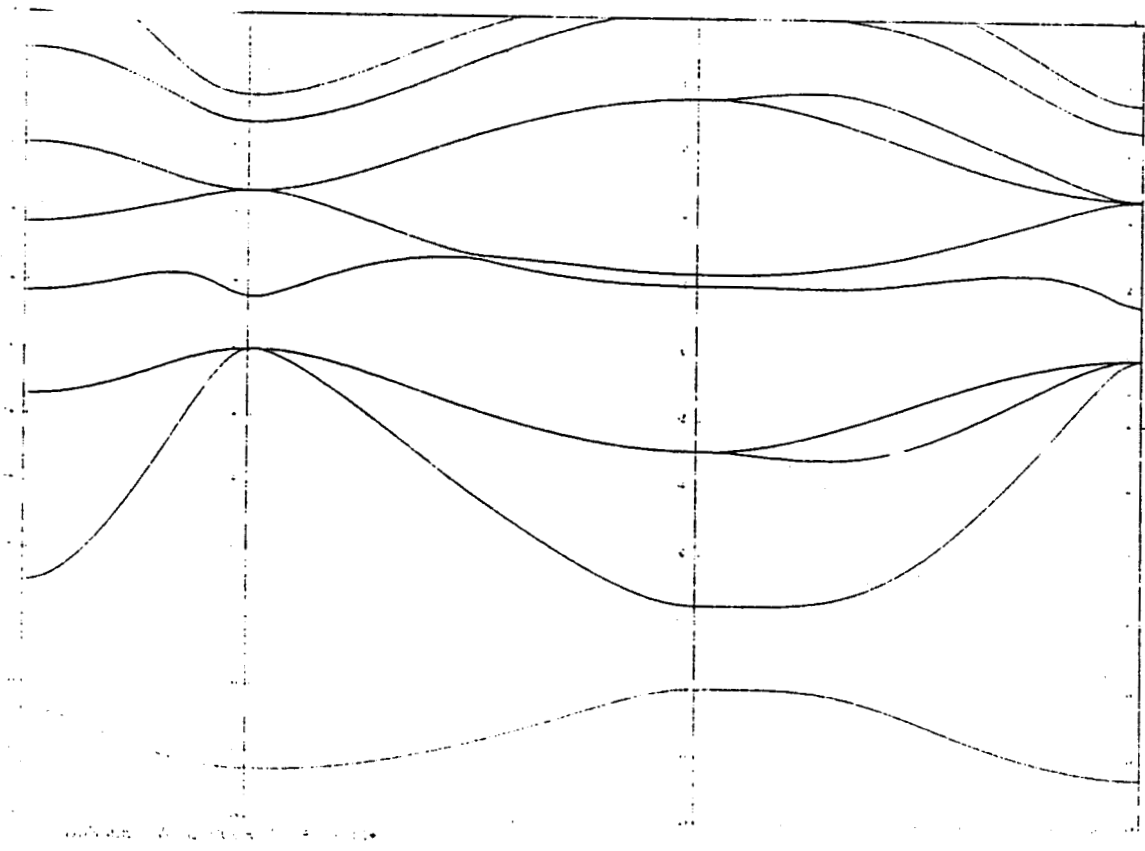
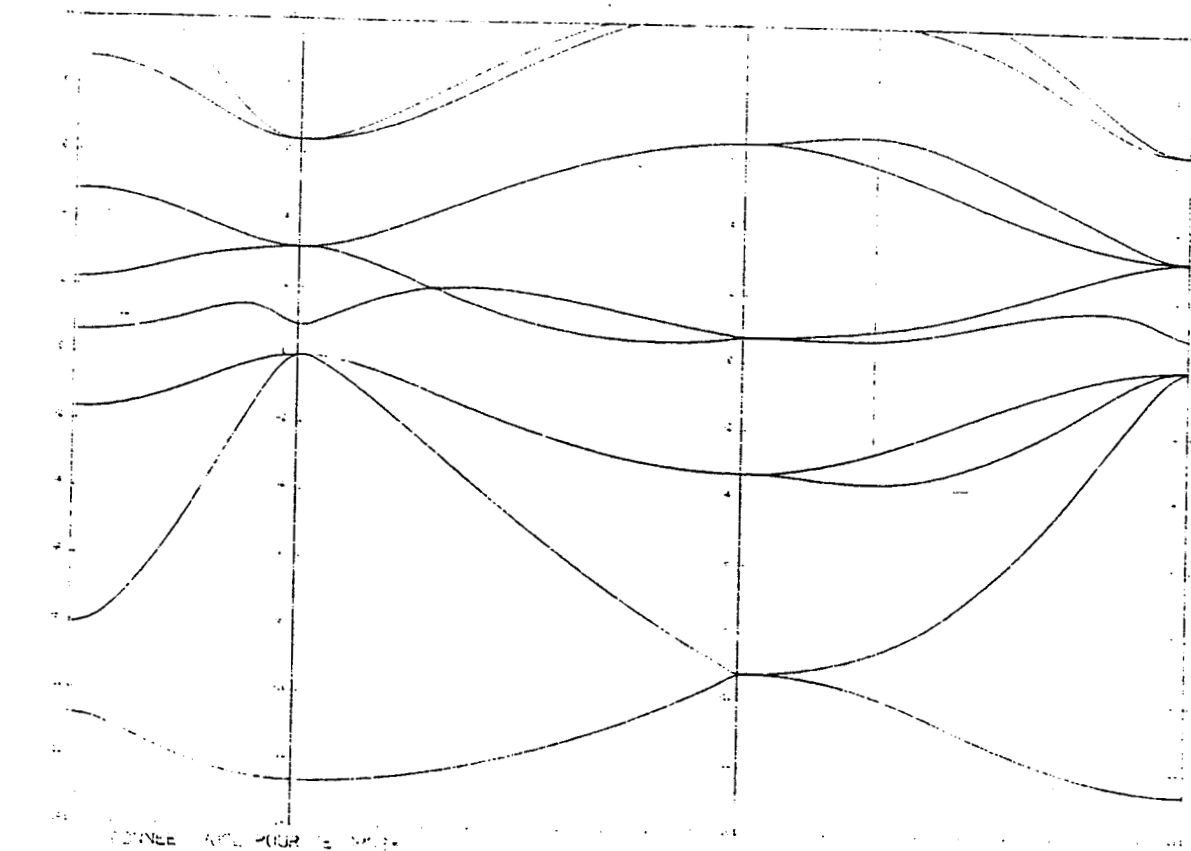
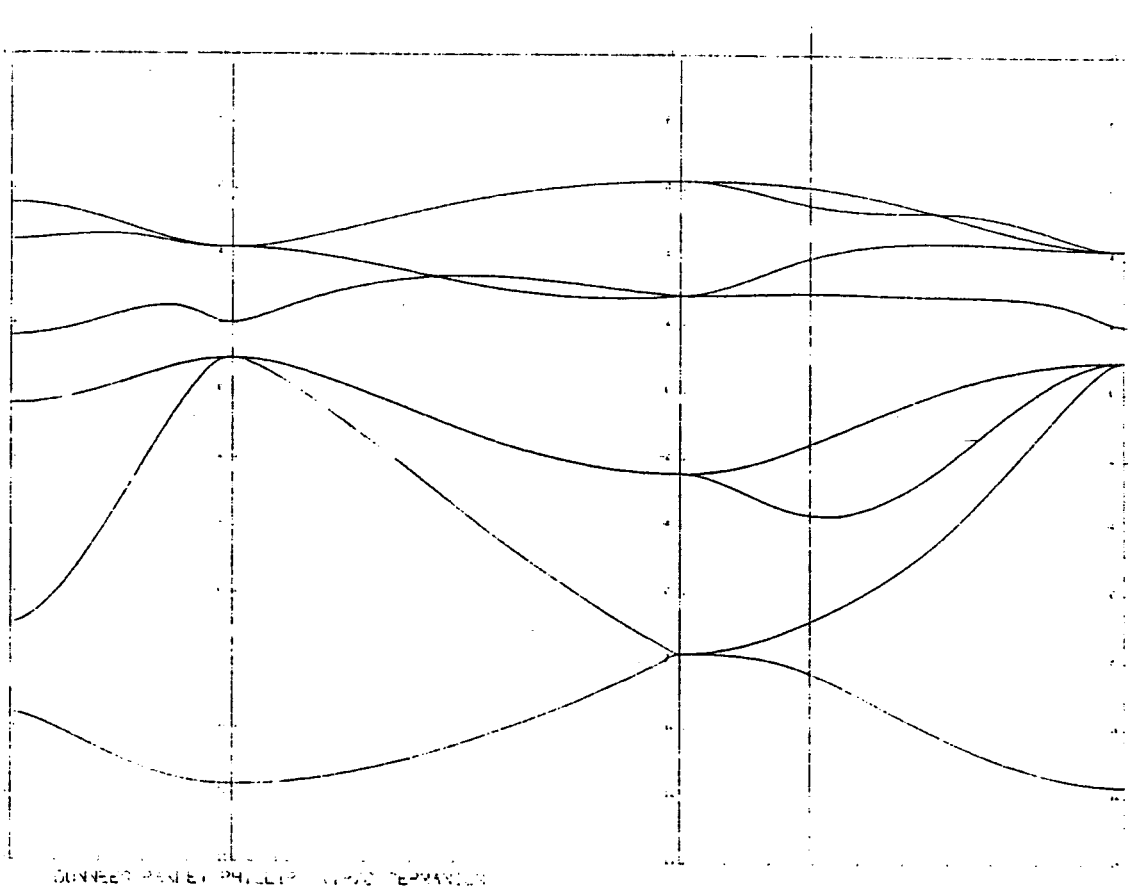
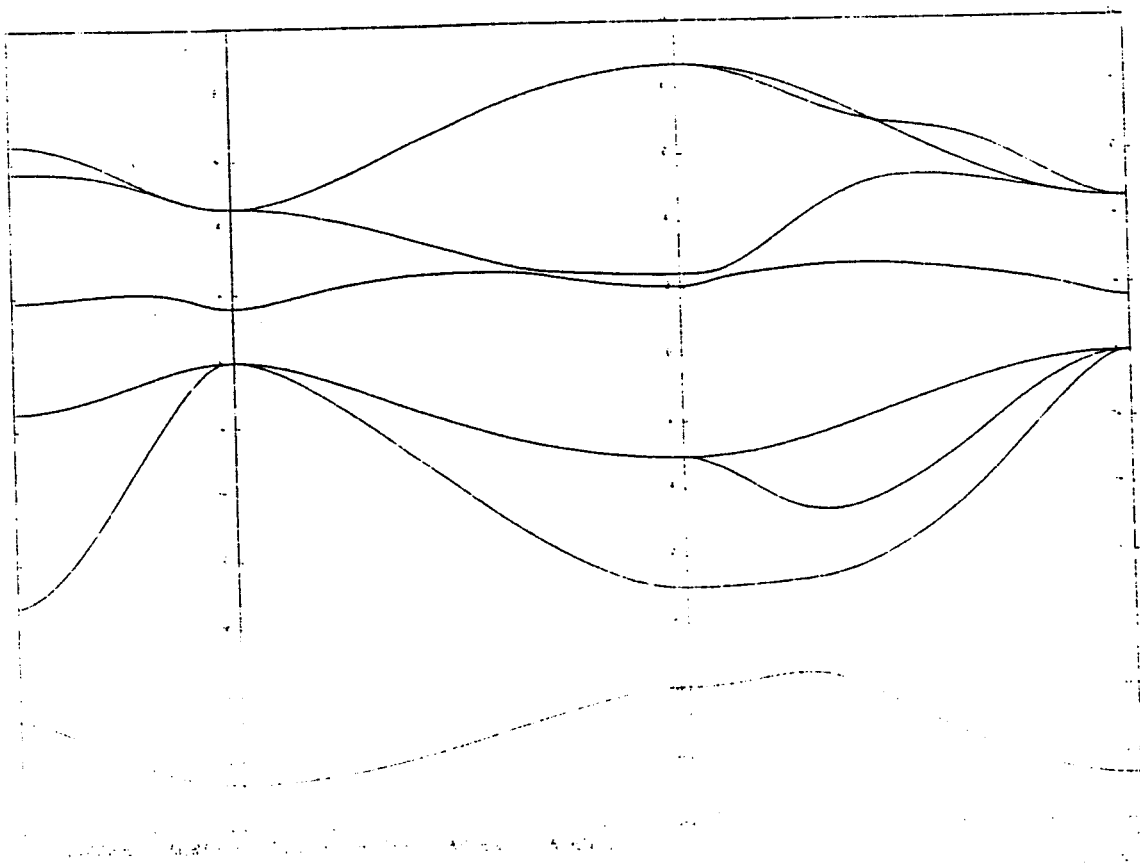


Figure VI.2

Structure électronique de Ge et GaAs en volume dans un modèle de liaisons fortes en sp^3s^* [80]



DUNNEE, PAN ET PHILLIPS, 1970, TERRYVILLE



DUNNEE, PAN ET PHILLIPS, 1970, TERRYVILLE

Figure VI.3

Structure électronique de Ge et GaAs en volume
 un modèle de liaisons fortes aux seconds voisins [81,82]

modèles sont comparés aux différentes valeurs expérimentales connues. On peut constater que le ΔE_v semble peu dépendre du modèle. Les valeurs expérimentales sont dispersées sur 0.3 eV ; notre résultat paraît concorder (à 0.1 eV près) avec les 0.56 eV de [85,86]. La dispersion pour les prédictions théoriques est du même ordre puisque le calcul autocohérent en pseudopotentiels de [79] donne 0.35 eV et que les modèles empiriques donnent des résultats qui s'étendent de 0.35 à 0.73 eV.

	premiers voisins sp^3s^*	seconds voisins	valeurs expérimentales
ΔE_v			0.56 ± 0.04 [65]
(en eV)	0.62	0.68	0.55 ± 0.05 [85]
			0.43 ± 0.04 [66]
			0.42 ± 0.1 [86]
			0.35 [78]
			0.25 [87]

Tableau 6.1.

Comparaison entre les valeurs de ΔE_v calculées avec les deux modèles décrits dans le texte et les valeurs expérimentales

Nous venons de traiter le cas idéal de l'interface Ge/GaAs [110] (non polaire) ; la discontinuité de bandes obtenue semble peu sensible au modèle de description du cristal parfait. D'autres études restent à faire. Le calcul de la charge par la méthode de fractions continues est un problème numérique délicat ; c'est pourquoi nous mettons en oeuvre actuellement un autre moyen de calculer ces charges. Ce calcul est en cours. Nous en exposons ici le principe.

VI.3. Calcul de la charge par la méthode de décimation

Le calcul des fonctions de Green par la méthode des fractions continues posant quelques problèmes de précision, il existe un autre moyen de calculer les fonctions de Green : la méthode de décimation [88,89] décrite ci-dessous.

a) Méthode de décimation

- Il s'agit d'une méthode itérative permettant de calculer les fonctions, à $\vec{k}_{//}$ fixé, d'une couche mince de taille quelconque. On considère une couche mince formée de n groupes de plans choisis de telle façon que chaque groupe de plans n'interagisse qu'avec les groupes premiers voisins.

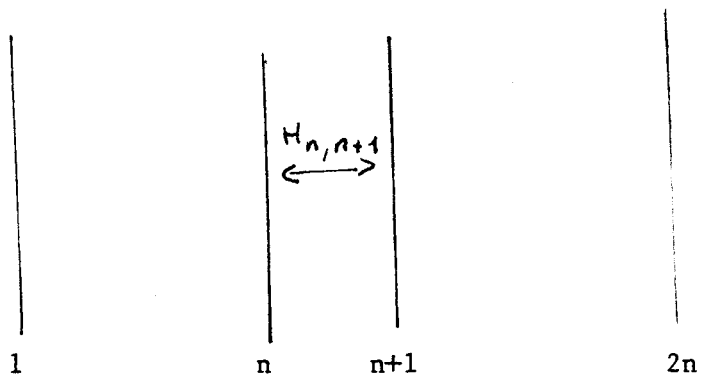


Figure VI.4

Supposons connues les matrices des fonctions de Green $G_{1,1}^0$, $G_{1,n}^0$ ($= G_{n,1}^{0t}$) et $G_{n,n}^0$ d'une couche mince. Nous allons établir une relation de récurrence pour les fonctions de Green en couplant les deux couches minces identiques de la figure VI.4 par la matrice $H_{n,n+1}$, où H est l'hamiltonien du système. Appelons donc G la matrice résolvante du système à $2n$ groupes de plans. Nous désirons évaluer les matrices $G_{1,1}$, $G_{2n,2n}$ et $G_{1,2n}$ équivalentes, pour la couche de n groupes. Pour ceci nous utilisons la relation de Dyson ($G = G^0 + G^0 H G$) qui nous donne

$$\begin{aligned}
 G_{1,1} &= G_{1,1}^0 + G_{1,n}^0 H_{n,n+1} G_{n+1,1} \\
 G_{2n,2n} &= G_{2n,2n}^0 + G_{2n,n+1}^0 H_{n+1,n} G_{n,2n} \\
 G_{1,2n} &= G_{1,n}^0 H_{n,n+1} G_{n+1,2n}
 \end{aligned}
 \tag{6.7}$$

Il nous faut maintenant écrire les matrices $G_{n+1,1}$, $G_{n,2n}$ et $G_{n+1,2n}$. Commençons par $G_{n+1,1}$

$$\begin{aligned}
 G_{n+1,1} &= G_{n+1,n+1}^0 H_{n+1,n} G_{n,1} \\
 G_{n,1} &= G_{n,1}^0 + G_{n,n}^0 H_{n,n+1} G_{n+1,1}
 \end{aligned}
 \tag{6.8}$$

En remplaçant $G_{n,1}$ dans la première équation on obtient l'expression de $G_{n+1,1}$. La même méthode s'applique au calcul de $G_{n,2n}$ et $G_{n+1,2n}$ permettant d'obtenir :

$$\begin{aligned}
 G_{n+1,1} &= (I - G_{n+1,n+1}^0 H_{n+1,n} G_{n,n}^0 H_{n,n+1})^{-1} G_{n+1,n+1}^0 H_{n+1,n} G_{n,1}^0 \\
 G_{n,2n} &= (I - G_{n,n}^0 H_{n,n+1} G_{n+1,n+1}^0 H_{n+1,n})^{-1} G_{n,n}^0 H_{n,n+1} G_{n+1,2n}^0 \quad (6.9) \\
 G_{n+1,2n} &= (I - G_{n+1,n+1}^0 H_{n+1,n} G_{n,n}^0 H_{n,n+1})^{-1} G_{n+1,2n}^0
 \end{aligned}$$

Les expressions (6.9) peuvent être injectées dans (6.7), ce qui permet d'établir la relation de récurrence désirée entre $G_{1,1}$, $G_{2n,2n}$, $G_{1,2n}$ d'une part et $G_{1,1}^0$, $G_{n,n}^0$, $G_{1,n}^0$ d'autre part. A partir de là, la procédure est simple. On commence avec $n=1$, soit un seul groupe de plans (ce groupe élémentaire est formé de deux plans pour GaAs en liaisons fortes aux premiers voisins) pour lequel il est facile de calculer G^0 . L'utilisation de (6.9) et (6.7) permet alors de calculer G pour $n=2$ et ainsi de suite. On arrête le processus lorsqu'une convergence satisfaisante est obtenue. C'est en général le cas après 6 ou 7 itérations.

b) Calcul de G dans le plan complexe

En principe la méthode précédente donne des densités d'états sous forme de fonctions delta puisqu'une tranche mince finie donne des niveaux discrets à $\vec{k} //$ fixé. Pour traiter le problème numériquement, il est nécessaire d'élargir ces fonctions delta. Pour ce faire, on réécrit G sous la forme

$$G(E, \eta) = (E + i\eta - H)^{-1} \quad (6.10)$$

où η est maintenant une quantité finie (0.1 eV par exemple). Ceci revient à calculer G pour E hors de l'axe réel. On obtient alors des densités d'états continues, ce qui se prête bien à l'utilisation de la méthode de décimation. Toutefois, si l'on veut décrire correctement les bords de bandes et en particulier le gap, il reste nécessaire d'en déduire la véritable fonction de Green $G(E, \eta = 0)$. Pour ceci G. Allan a mis au point une méthode très astucieuse de développement en série, écrivant que

$$G(E, 0) = G(E, \eta) + \frac{\partial G}{\partial E} (E, \eta)(i\eta) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 G}{\partial E^2} (E, \eta)(i\eta)^2 \dots \quad (6.11)$$

La convergence du développement est telle que la correction du premier ordre est pratiquement suffisante.

c) Application de la méthode

- Les fonctions de Green sont calculées à $\vec{k}_{//}$ fixé, le calcul des charges atomiques nécessite donc une sommation sur $\vec{k}_{//}$. Cette intégration se fait au moyen d'une sommation sur des points spéciaux de la première zone de Brillouin (méthode établie en volume par Chadi et Cohen [90], et pour les systèmes 2D par Cunningham [91]). La précision obtenue sur les charges est bien meilleure qu'avec la méthode des fractions continues.

VI.4. Conclusion et perspectives

Nous avons effectué un calcul de la discontinuité de bandes à l'interface Ge/GaAs[110], dans l'approximation des liaisons fortes en utilisant une condition de neutralité de charge locale. Les avantages de la méthode sont les suivants :

- puisqu'elle utilise l'approximation des liaisons fortes, nous avons un calcul beaucoup plus simple que les théories "a priori" (pseudo-potentiels, densité locale)
- elle prend en compte l'influence des dipôles à l'interface
- dans la mesure où les liaisons à l'interface sont proches de celles en volume, elle donnera un résultat quantitatif
- les discontinuités de bandes ne sont pas reliées au travail de sortie (celui-ci est caractéristique de l'interface solide-vide, qui résulte d'une perturbation par rapport à la situation volumique beaucoup plus forte dans le cas de l'hétérojonction).
- le calcul pourra être étendu au cas des interfaces polaires.

Les avantages cités ci-dessus ne doivent cependant pas masquer deux points importants :

- i) le calcul des charges doit être fait avec beaucoup de discernement
- ii) la discontinuité obtenue est celle "à charge nulle". Il serait très intéressant de la relier à la discontinuité réelle résultant d'un calcul autocohérent.

Ce sujet d'étude est loin d'être épuisé. Il serait intéressant de regarder comment se comporte l'interface entre deux matériaux qui

présentent un léger désaccord de maille (interface contrainte). L'utilisation de superréseaux contraints permet en effet d'élargir le choix des matériaux épitaxiables sur un substrat donné, ce qui est d'un intérêt technologique certain. De même, les hétérojonctions qui mettent en jeu des composés ternaires (type $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$), dont la modélisation est plus délicate, sont d'un intérêt évident.

CONCLUSION

L'objet de ce travail était d'apporter une contribution à l'étude théorique des systèmes semiconducteurs à puits quantiques et superréseaux.

Ces systèmes sont très souvent décrits dans l'approximation de masse effective, dans sa formulation tridimensionnelle 3D. Aussi nous sommes-nous attachés à étudier les limites de validité de cette approximation. Nous avons alors établi une équation de masse effective bidimensionnelle, équation générale qui permet de décrire tout système qui présente une périodicité et un potentiel lentement variable dans deux directions de l'espace.

A partir de cette équation, nous avons pu calculer les niveaux d'énergie correspondant à une impureté hydrogénoïde (de type donneur) dans un puits quantique. En particulier, les états résonants sont obtenus (seule une approche bidimensionnelle permet d'accéder à ces états). Le caractère bidimensionnel du modèle nous permet en outre d'utiliser des fonctions d'essai bien adaptées aux problèmes traités (structures à puits quantiques où la largeur des puits n'excède pas 200 Å). Dans de tels systèmes, l'application de l'approximation de masse effective sous sa forme habituelle, avec des fonctions d'essai de type volumique, nécessite l'utilisation de nombreuses fonctions de base (décrites par plusieurs dizaines de paramètres variationnels). Notre approche est plus naturelle, car elle ne suppose pas de potentiel lentement variable dans la direction de croissance des superréseaux. Elle permet d'obtenir des énergies de liaison repérées par rapport aux bas de bande exacts du système. Les énergies de liaison obtenues (pour le niveau fondamental) avec une seule fonction d'essai et un seul paramètre variationnel sont identiques (à

quelques pour cent près) à celles obtenues par des calculs beaucoup plus lourds issus du modèle 3D. De plus, nous avons pu prendre en compte de manière très simple la différence de masse effective entre les deux matériaux qui constituent les puits et les barrières.

Dans le même modèle, il est possible de calculer les énergies de liaison des excitons. Nous avons effectué ce calcul dans l'approximation parabolique (qui néglige le couplage entre trous lourds et trous légers en haut de bande de valence). Les résultats sont en meilleur accord avec l'expérience que tous les calculs antérieurs. Toutefois il a été montré récemment que la non-parabolicité n'est pas négligeable. Aussi paraît-il nécessaire, pour une exploitation future du modèle à d'autres types de systèmes, d'inclure l'effet de cette non-parabolicité.

Dans une optique tout à fait différente, nous nous sommes intéressés aux superréseaux de dopage (nipi). Nous avons repris l'étude menée par Ruden et Döhler sur les nipi GaAs, et l'avons étendue aux nipi Si, en tenant compte des six minima équivalents en bas de bande de conduction. Nous avons montré que les approximations incluses dans le calcul ne sont en fait valides que pour une gamme réduite de concentrations de dopants. Nous avons aussi établi que les nipi Si fonctionnent en régime de bandes d'impureté jusqu'à des concentrations en donneurs de l'ordre de $2 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-3}$. Nous avons mis en évidence le fait que, pour des concentrations usuelles, il est inutile d'effectuer un calcul complet autocohérent puisqu'un modèle de charge d'espace donne les mêmes résultats.

De plus, nous avons commencé une étude approfondie de la structure électronique des hétérojonctions ; nous calculons la répartition des charges à l'interface afin d'accéder aux discontinuités de bandes de valence et de conduction. Nous avons calculé ces charges dans l'approximation des liaisons fortes, ce qui mène à des calculs beaucoup plus simples que ceux issus des théories a priori, utilisant pseudopotentiels et densité locale. Nous avons appliqué une condition de neutralité locale, nous avons ainsi tenu compte des dipôles à l'interface. De plus les discontinuités de bandes obtenues ne sont pas reliées au travail de sortie (celui-ci est caractéristique de l'interface solide-vide qui constitue, par rapport au volume, une perturbation beaucoup plus grande qu'une hétérojonction).

Le travail que nous venons de décrire nous a permis de contribuer à une meilleure compréhension, une meilleure modélisation des superréseaux. Nous envisageons, dans un futur proche, l'extension de ce travail suivant plusieurs directions :

- étudier les structures à puits quantiques présentant des barrières étroites ; pour le calcul d'énergies de liaison d'excitons, il sera nécessaire d'inclure l'effet de la non parabolicité en haut de bande de valence.
- calculer les discontinuités de bandes aux hétérojonctions mettant en jeu des alliages ternaires (en particulier l'hétérojonction GaAs/Ga(Al)As).

REFERENCES

1. S. PANTELIDES, Rev. of Mod. Phys., 50, 791 (1978).
2. M. ALTARELLI, Proceedings de "Heterojunctions and Superlattices of Semiconductors", Les Houches, 1985, édité par M. Lannoo, G. Allan, M. Voos, G. Bastard.
3. G. BASTARD, Phys. Rev. B 24, 4714 (1981).
4. C. MAILHIOT, Y.C. CHANG and T.C. MCGILL, Phys. Rev. B 26, 4449 (1982)
5. C. MAILHIOT, Y.C. CHANG and T.C. MCGILL, Surf. Sci. 113 161 (1982).
6. S. CHAUDHURI, Phys. Rev. B 28, 4480 (1983).
7. R.L. GREENE et K.K. BAJAJ, Solid State Commun. 45, 825 (1983).
8. L. ESAKI et R. TSU, IBM J. Res. Develop. 14, 61 (1970).
9. E. CARUTHERS et P.J. LIN-CHUNG, J. Vac. Sci. Technol. 15, 1459 (1978)
10. W. ANDREONI, A. BALDERESCHI et R. CAR, Solid State Commun. 17, 821 (1978).
11. J.N. SCHULMAN et T.C. MCGILL, Phys. Rev. B 19, 6341 (1979).
12. M. ALTARELLI, Phys. Rev. B 28, 842 (1983).
13. M. ALTARELLI, Proc. 16th Int. Conf. on the Physics of Semiconductors, Montpellier, (1982), éd. M. Averous, Physica 117-118B, 747-749 (1983).
14. G. BASTARD, Phys. Rev. B 24, 5693 (1981)
15. G. BASTARD, Phys. Rev. B 25, 7584 (1982)
16. D. RAPP, Quantum Mechanics (Holt, Rinehardt and Winston, New York, 1971), p. 120.
17. R. HAYDOCK, Recursive Solution of the Schrödinger Equation, Vol. 35
* Solid State Physics, édité par M. Ehrenreich, F. Seitz and D. Turnbull (Academic, New York, 1980), p. 215.
18. J.C. SLATER et G.F. KOSTER, Phys. Rev. 94, 1498 (1954).
19. L. PAULING et E.B. WILSON, Introduction to Quantum Mechanics (McGraw Hill, New York, 1935), Chap. V, p. 121.
20. I.S. GRADSHTEYN et I.W. RYZHIK, Table of Integrals Series and Products (Academic, New York, 1965).
21. F. BASSANI, G. IADONOSI et B. PREZIOSI, Rep. Progr. Phys. 37, 1099 (1974).
22. R. DINGLE, in Festkörperprobleme XV (Advances in Solid State Physics), édité par M.J. Queisser (Pergamon, Vieweg, Braunschweig, 1975), p. 21.
23. H.C. CASEY et M.B. PANISH, Heterostructure Lasers (Academic, New York, 1978), Part A, Chap. 4.
24. R.A. MORROW et K.R. BROWNSTEIN, Phys. Rev. B 30, 678 (1984).
25. R.C. MILLER, A.C. GOSSARD, W.T. TSANG et O. MONTEANU, Phys. Rev. B 25, 3871 (1982).
26. R.C. MILLER, J. Appl. Phys. 56, 1136 (1974).
27. B.V. SHANABROOK et J. COMAS, Surf. Sci. 142, 504 (1984).

28. E.E. MENDEZ, G. BASTARD, L.L. CHANG, L. ESAKI, H. MORKOC et R. FISCHER, Phys. Rev. B 26, 7101 (1982).
29. G. BASTARD, E.E. MENDEZ, L.L. CHANG et L. ESAKI, Phys. Rev. B 28, 3241 (1983).
30. R.C. MILLER et A.C. GOSSARD, Appl. Phys. Lett. 43, 954 (1983).
31. D.S. CHEMLA, T.C. DAMEN, D.A.B. MILLER, A.C. GOSSARD et W. WIEGMANN, Appl. Phys. Lett. 42, 864 (1983).
32. T.H. WOOD, C.A. BURRUS, D.A.B. MILLER, A.C. GOSSARD et W. WIEGMANN, Appl. Phys. Lett. 44, 16 (1984).
33. C.A. ALIBERT, S. GAILLARD, J.A. BRUM, G. BASTARD, P. FRIJLINK et M. ERMAN, Solid State Commun. 53, 457 (1985).
34. J.A. BRUM et G. BASTARD, Phys. Rev. B 31, 3893 (1985).
35. J.A. BRUM, C. PRIESTER et G. ALLAN, Phys. Rev. B 32, 2378 (1985).
36. R.C. MILLER, D.A. KLEINMAN, W.T. TSANG et A.C. GOSSARD, Phys. Rev. B 84, 1134 (1981).
37. Ces notions de base sont expliquées beaucoup plus en détail dans le cours de M. ALTARELLI, Proceedings de "Heterojunctions and Superlattices of Semiconductors", Les Houches, 1985, édité par M. Lannoo, G. Allan, M. Voos, G. Bastard.
38. par exemple G. DRESSELHAUS, J. Phys. Chem. Solids, 1, 14 (1956).
39. J.M. LUTTINGER et W. KÖHN, Phys. Rev. 97, 869 (1955).
40. A. BALDERESCHI et N.O. LIPARI, Phys. Rev. B 3, 439 (1971).
41. G.D. SANDERS et C. CHANG, Phys. Rev. B, 32, 5517 (1985).
42. R.L. GREENE, K.K. BAJAJ et D.E. PHELPS, Phys. Rev. B 29, 1807 (1984).
43. TSIN-FY-SIANG, Solid State Commun. 50, 589 (1984).
44. H.J. LEE, L.Y. JURAVEL, J.C. WOOLEY et A.J. SPRINGTHORPE, Phys. Rev. B 21, 659 (1980).
45. G.H. DÖHLER, Phys. Stat. Sol. (b) 52, 79 (1972).
46. G.H. DÖHLER, Phys. Stat. Sol. (b) 52, 533 (1972).
47. K. PLOOG, A. FISCHER et M. KÜNZEL, L. Electrochem. Soc. 128, 400 (1981).
48. K. PLOOG, G.H. DÖHLER, Adv. Phys. 32, 286 (1983).
49. P. RÜDEN et G.H. DÖHLER, Phys. Rev. B 27, 3538 (1983).
50. P. HOHENBERG et W. KOHN, Phys. Rev. 136, B864 (1964).
51. W. KOHN et L. SHAM, Phys. Rev. 140, A1133 (1965).
52. O. GUNNARSON et B.I. LUNDQVIST, Phys. Rev. B 13, 4274 (1976).
53. T. ANDO et S. MORI, J. of Phys. Soc. of Japan, 47, 1518 (1979).
54. N.F. MOTT, Proc. Phys. Soc. 62, 416 (1949).
N.F. MOTT et Z. ZINAMON, Rep. Prog. Phys. 33, 881 (1970) (ceci constitue une revue détaillée à propos des transitions métal-non métal).
55. H.M. DUBOIS (communication privée).
56. T. MATSUBARA et Y. TOYOZAWA, Prog. Theor. Phys. (Kyoto) 26, 739 (1961).

57. K.F. BEREGREN, Phil. Mag. 27, 1027 (1973).
58. M.N. ALEXANDER et D.F. HOLCOMB, Rev. Mod. Phys. 40, 815 (1968).
59. F. STERN et W.E. HOWARD, Phys. Rev. 163, 816 (1967).
60. M. COMBESCOT et P. NOZIERES, J. Phys. C 5, 2369 (1972) ;
W.F. BRINKMAN et T.M. RICE, Phys. Rev. B 7, 1508 (1973).
61. J.C. MAAN, Proceedings de "Heterojunctions and Superlattices of Semiconductors", Les Houches, 1985, Edité par M. Lannoo, G. Allan, M. Voos, G. Bastard
62. J. KAKALIOS, Bull. of Am. Phys. Soc. 30, 501 (1983) (March Meeting)
63. H. KROEMER, Surf. Sci. 132, 543 (1983).
64. A.G. MILNES et D.L. FEUCHT, Academic Press, New York (1972) ;
E.A. KRAUT, J. Vac. Sci. Technol. B 2, 486 (1984).
65. J.R. WALDROP, E.A. KRAUT, S.P. KOWALCZYK et R.W. GRANT, Surf. Sci. 132, 513 (1983).
66. A.D. KATNANI, P. CHIARADIA, H.W. SANG. Jr, et R.S. BAUER, J. Vac. Sci. Technol. B 2, 471 (1984).
67. G.A. BARAFF, J.A. APPELBAUM et D.R. HAMANN, PHYS. REV. LETT. 38, 237 (1977).
68. W.E. PICKET, S.G. LOUIE et M.L. COHEN, PHYS. REV. B 17, 815 (1977)
69. J. POLLMAN et S. PANTELIDES, J. Vac. Sci. Technol. 16, 1498 (1979).
70. C.A. SWART, W.A. GODDARD et T.C. MCGILL, J. Vac. Sci. Technol. 19, 551 (1981).
71. R.M. MARTIN, (à paraître dans Phys Rev. B)
72. R. ANDERSON, Sol. State Electron. 5, 341 (1977).
73. W.R. FRENSELY et H. KROEMER, Phys. Rev. B 16, 1962 (1977).
74. W.A. HARRISSON, J. Vac. Sci. Technol. 14, 1016 (1977).
75. M.J. ADAMS et A. NUSSBAUM, Sol. State Electron. 22, 783 (1969).
76. O. Von ROOS, Sol. State Electron. 23, 1069 (1980).
77. J. TERSOFF, Phys. Rev. B, 30, 4874 (1984).
78. A.D. KATNANI and G. MARGARITONDO, Phys. Rev. B 28, 1944 (1983).
79. G. MARGARITONDO, Phys. Rev. B 31, 2526 (1985).
80. P. VOGL, H.P. HJALMARSON and J.D. DOW, J. Phys. Chem. Sol. 44, 365 (1983).
81. K.C. PANDEY ^{et} and J.C. PHILLIPS, Phys. Rev. B 13, 750 (1976).
82. D.N. TALWAR ^{et} and C.S. TING, Phys. Rev. B 25, 2660 (1982) ;
83. W.A. HARRISSON, Electronic Structure and the Properties of Solids, W.H. Freeman and Company (1980) X est égal à $(2V_2)^{-1}$ (donné p. 114).
84. G. ALLAN, J. Phys. C Solid State Phys. 17, 3945 (1984) ;
85. P. CHEN, D. BOLMONT et C.A. SEBENNE, J. Phys. C, Sol. State Phys. 15, 6101 (1982).
86. W. MÖNCH, R.S. BAUER, H. GRANT et R. MURSCHELL, J. Vac. Sci. Technol. 21, 498 (1982).
87. P. PERFETTI, D. DENLEY, K.A. MILLS et D.A. SHIRLEY, Appl. Phys. Lett. 33, 667 (1978).

88. F. GUINEA, J. SANCHEZ-DEHESA et F. FLORES, J. Phys. C, Sol. State Phys. 16, 6499 (1983).
89. F. GUINEA, C. TEJEDOR, F. FLORES et E. LOUIS, Phys. Rev. B 28, 4397 (1983).
90. D.J. CHADI et M.L. COHEN, Phys. Rev. B 8, 5747 (1973).
91. S.L. CUNNINGHAM, Phys. Rev. B 10, 4988 (1974).
92. R.W. NOSKER, P. MARK et J.D. LEVINE, Surf. Sci. 19, 291 (1975).
93. P. MASRI et M. LANNOO, Surf. Sci. 52, 377 (1975).
94. W.A. HARRISSON, Phys. Rev. 123, 85 (1961)
95. D.J. BEN DANIEL et C.B. DUKE, Phys. Rev. 152, 683 (1966).
96. J.P. GASPARD et F. CYROT-LACKMANN, J. Phys. C: Solid State Physics, 6, 3077 (1974).
97. G. ALLAN, M.C. DESJONQUERES et D. SPANJAARD, Sol. State Commun., 50, 401 (1984).

pour rapport - 2 Nov 87

Le travail reporté dans cette thèse a fait l'objet de plusieurs publications :

C. PRIESTER, G. ALLAN and M. LANNOO
Validity of the effective mass approximation for shallow impurity states in narrow superlattices.
Phys. Rev. B 28, 7194 (1983).

C. PRIESTER, G. ALLAN and M. LANNOO
Resonant impurity states in quantum well structures
Phys. Rev. B 29, 3408 (1984).

C. PRIESTER, G. BASTARD, G. ALLAN and M. LANNOO
Binding energies of hydrogenic impurities in finite quantum well structures with effective mass mismatch : simple and accurate variational treatments.
Phys. Rev. B 30, 6029 (1984).

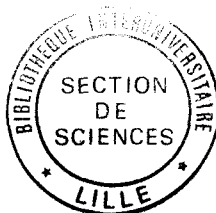
C. PRIESTER, G. ALLAN and M. LANNOO
Breakdown of three dimensional effective mass approximation in narrow superlattices.
Journal de Physique, 45 C5, 519 (1984).

C. PRIESTER, G. ALLAN and M. LANNOO
Wannier excitons in $\text{GaAs}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ quantum well structures. Influence of the effective mass mismatch.
Phys. Rev. B 30, 7302 (1984).

J.A. BRUM, C. PRIESTER and G. ALLAN
Electric field dependence of the binding energy of shallow donors in $\text{GaAs-Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ quantum wells.
Phys. Rev. B 32, 2378 (1985).

C. PRIESTER, G. ALLAN, M. LANNOO and G. FISHMAN
Theoretical approach of nipi-silicon.
soumis à Phys. Rev.

C. PRIESTER, G. ALLAN and M. LANNOO
Tight-binding calculation of the band offset at the [110] Ga-GaAs interface using a local charge neutrality condition.
Phys. Rev. B (publication prévue pour avril 86).



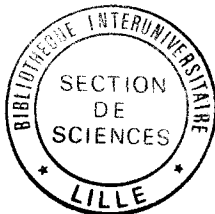
RESUME

Deux types de superréseaux sont étudiés : en premier lieu les superréseaux de constitution qui sont modélisés par des structures à puits quantiques, et ensuite les superréseaux de dopage (ou nipi).

Dans les structures à puits quantiques sont calculés les niveaux d'impuretés et les niveaux excitoniques. Pour ce faire, après une étude de l'approximation de masse effective à trois dimensions (couramment utilisée pour décrire des superréseaux) et de ses limites de validité, est proposée une équation de masse effective à deux dimensions, mieux adaptée à l'étude de systèmes bidimensionnels. Grâce à cette équation et à l'introduction d'une "masse effective équivalent parallèle", il est possible de tenir compte très simplement de la différence de masse effective entre les matériaux qui constituent les puits et les barrières. Les résultats obtenus sont en meilleur accord avec l'expérience que tous les calculs antérieurs.

La structure électronique des superréseaux nipi Silicium est étudiée. Ce calcul est précédé de l'analyse des approximations utilisées par Ruden et Döhler pour le traitement des nipi AsGa. Il s'avère que ces approximations ne sont valides que dans une gamme réduite de concentration de dopants. Cette gamme est déterminée. Le calcul de Ruden et Döhler est alors étendu aux nipi Silicium, ce qui impose la prise en compte de plusieurs minima anisotropes en bas de bande de conduction. Un modèle très simple de charge d'espace est aussi établi. Celui-ci est équivalent au calcul complet autocohérent pour les concentrations de dopants usuelles (où le système fonctionne en régime de bandes d'impuretés).

Enfin, un paramètre essentiel est la répartition de la discontinuité de bande interdite à l'hétérojonction. Un calcul de cette discontinuité est proposé, pour des interfaces non polaires et non contraintes. Ce calcul utilise une condition de neutralité locale.



MOTS CLES

Approximation de masse effective
Systèmes bidimensionnels
Impureté et exciton dans un superréseau
nipi silicium

discontinuités de bandes à
l'interface