République Algérienne Démocratique et Populaire
Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique

Université Ferhat Abbas–SETIF

MEMOIRE

Présenté à la Faculté des Sciences
Département de Physique

Pour l'obtention du diplôme de

MAGISTER

Option : Physique du Solide

Par

BEKLI Mohamed Réda

THEME

Propriétés Magnéto-Optiques des Puits Quantiques

Soutenue Publiquement le: 02/07/2007
Devant la commission d'examen :

Président:	Hacène HACHEMI	Professeur	(UFAS – Sétif)
Rapporteur:	Saadi LAMARI	Professeur	(UFAS – Sétif)
Examinateur:	Abdelhamid CHERGUI	Professeur	(UFAS – Sétif)
Examinateur:	Noureddine BENOUATTAS	Professeur	(UFAS – Sétif)

Dédicaces

Jedédie cemodeste travail

Principalement à ma mère

A mes très chères frères et soeurs

A ma future épouse Ilhem

A tous mes collègues (Tayev, Fahima,Mesaoud, Taous, Mounir, Abd-Hakim, Amar, Said, Youcef, Mebarak, Tahar, Réda, Mohamed, Nabil, Nacer, Mourad, Djamel,…etc)

Aux gents que j'aimes

A la mémoire de mon Père

Remerciements

Tout d'abord, je suis très reconnaissant à mon directeur de thèse Monsieur Saadi LAMARI, Professeur à l'Université Ferhat Abbas de Sétif, d'avoir proposé le problème et accepté de diriger ce travail. J'ai beaucoup apprécié son soutien et je tiens à signaler que ses conseils se sont toujours révélés judicieux. Ses remarques constructives m'ont été très précieuses pour la rédaction de ce mémoire et je tiens à lui exprimer ici ma profonde gratitude.

J'ai aussi un grand plaisir à remercier Monsieur Hacène HACHEMI, Professeur à la même Université, pour avoir bien voulu juger ce travail en me faisant l'honneur de présider le jury.

J'adresse également mes très vifs remerciements à Monsieur Noureddine BENOUATTAS, Professeur à l'Université Ferhat Abbas de Sétif, d'avoir accepté d'examiner ce travail.

Comme je suis aussi très reconnaissant à Monsieur Abdelhamid CHERGUI, Professeur à l'Université Ferhat Abbas de Sétif, d'avoir honoré le jury en qualité d'examinateur.

Ma dette de reconnaissance va aussi à mes professeurs de l'Université Ferhat Abbas de Sétif pour l'intérêt qu'ils ont manifesté à mon égard et leurs encouragements.

Ce mémoire n'aurait pas pu s'écrire sans l'appui moral de ma famille, de mes amis et de mes collègues. Qu'ils trouvent ici mes sincères remerciements.

A tous un grand merci.

Introduction

Actuellement, des recherches intenses sont menées sur les puits quantiques à semiconducteurs, après leurs premières conceptions par Esaki et Tsu en 1970, ainsi que sur les composants qui leurs sont associés. Le fait que les électrons soient prisonniers dans les états discrets d'un puits quantique, engendre de nouveaux phénomènes.

L'objet de notre travail est l'étude des propriétés électroniques ainsi que les différentes transitions optiques, intersousbandes et intrasousbandes, d'un puits quantique soumis à un champ magnétique parallèle. Une attention particulière est accordée à la résonance de spin induite par l'interaction spin orbite de Dresselhaus.

Les deux semiconducteurs que nous avons favorisés le plus dans notre étude sont : l'InSb et l'InAs. Ces derniers sont des III-V, caractérisés par une importante interaction spin orbite, une faible valeur de la masse effective, un gap très étroit et de ce fait une forte non-parabolicité.

Le présent mémoire est divisé en quatre chapitres, comme suit :

Le premier chapitre décrit les différents types et les conditions de formation des puits quantiques, ainsi que les techniques de leurs fabrications. A la fin de ce chapitre, plusieurs exemples sur leurs applications sont exposés.

Dans le deuxième chapitre, se trouvent quelques préliminaires sur la théorie de la fonction enveloppe et de la méthode numérique des différences finies suivis de quelques tests. Des développements analytiques, pour la détermination des fonctions d'ondes et du spectre énergétique, sont exposés dans le cas d'un puits quantique rectangulaire de profondeur finie; la limite où cette dernière devient infinie est aussi traitée.

Dans le troisième chapitre, on examine l'effet de la masse effective, de la hauteur de la barrière, et de la largeur du puits quantiques, sur le spectre d'énergie et les fonctions d'ondes. Par la suite, on s'intéresse à l'influence d'un champ électrique et d'un champ magnétique appliqués.

Dans le dernier chapitre, nous exposons le modèle qui nous permet le calcul des éléments de matrices des transitions inter et intrasousbandes, ainsi que de la force d'oscillateur. Ce développement sera appliqué au cas de l'InSb/CdTe. On termine ce chapitre par l'exposé de la méthode de calcul du spectre d'absorption avant de l'appliquer à un puits d'InAs/AlSb.

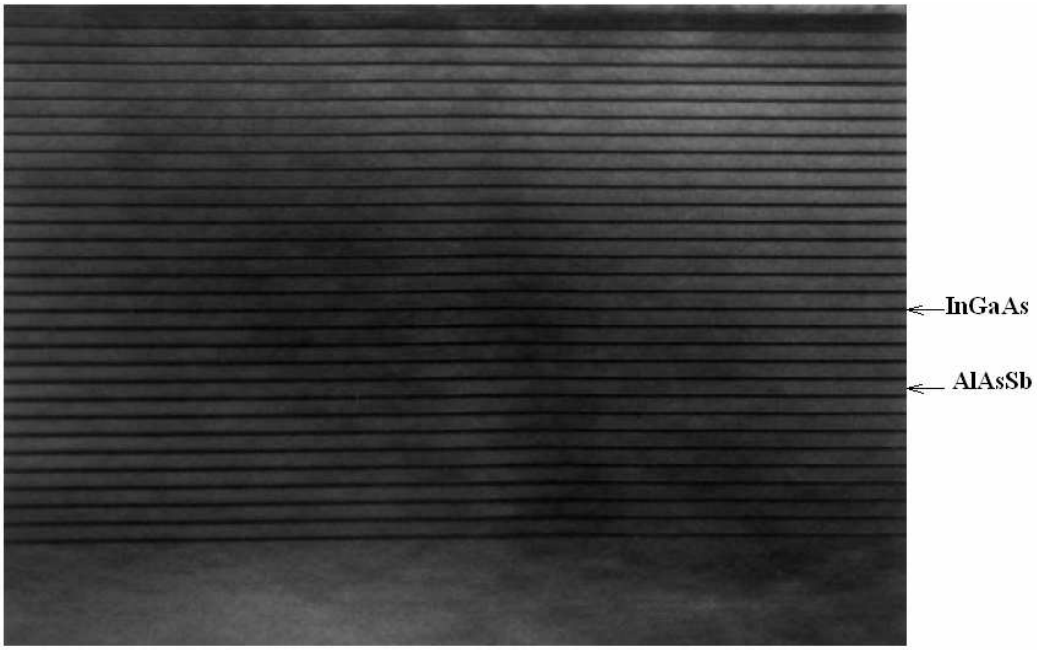
CHAPITRE I :

Notions générales sur la croissance et les applications des puits quantiques

1.1 Types et conditions de formation despuits quantique

Le développement de nouvelles techniques de croissance des couches semiconductrices, telles que la MBE (l'Epitaxie par Jets Moléculaires) et la MOCVD (Metal Organic Chemical Vapor Deposition) qu'on va détailler par la suite, ont permis l'élaboration de films ultra-minces dont les épaisseurs sont de l'ordre du nanomètre. Ces méthodes permettent une très bonne maitrise de la composition chimique, du dopage, de la structure cristalline, ainsi que des épaisseurs sur des échelles de l'ordre de l'angström.

Pour obtenir, expérimentalement, une bonne hétéro-épitaxie, il est en général nécessaire d'utiliser deux semiconducteurs de structures cristallines identiques, et possédant presque le même paramètre de maille, afin d'éviter d'éventuels contraintes internes.



Cette Figure montre une vue en coupe suivant le plan (100) d'un puits quantiques de InGaAs/AlAsSb avec 2.8nm de InGaAs séparer par une barrière de 12.7nm de AlAsSb (Cliché de microscopie électronique à transmission) [1]. Remarquons la variation abrupte de la composition à l'échelle atomique.

Prenant maintenant une hétérostructure, constituée d'une couche d'un semiconducteur SC1 d'épaisseur L très faible, de l'ordre de quelques nanomètres, en sandwich entre deux autres couches d'un semiconducteur différent, SC2, tel que le gap de ce dernier est plus large que celui du premier. La différence de gap entre ces deux semiconducteurs, SC1 et SC2, est partagée entre les bandes de conduction et de valence de quatre façons différentes [2]:

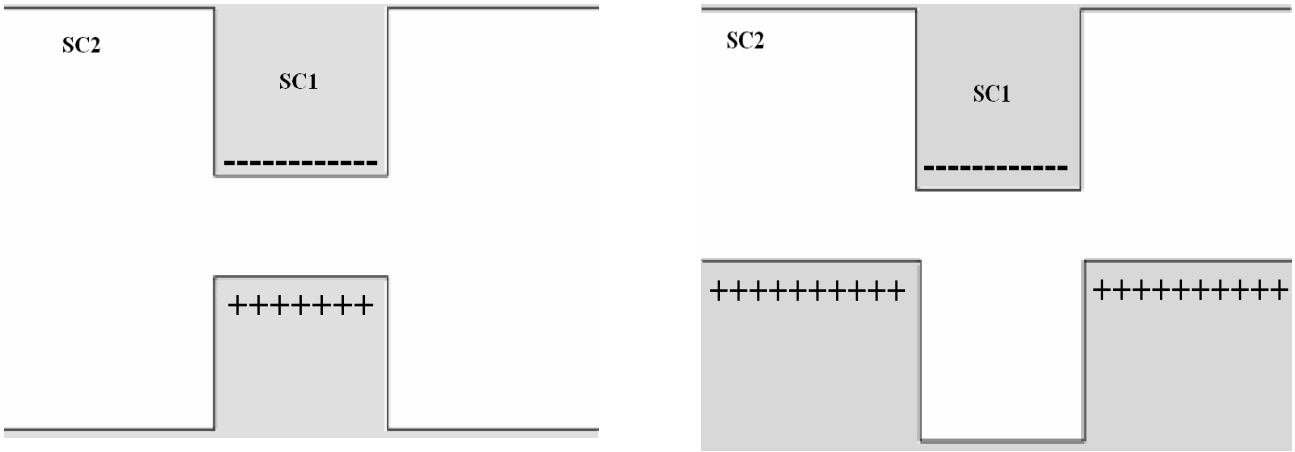
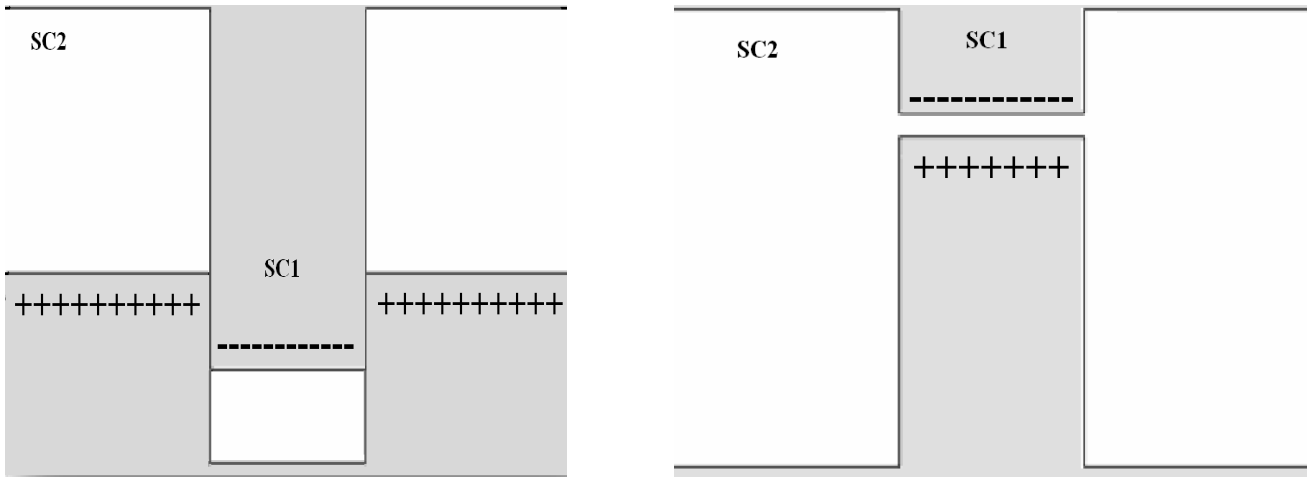


Fig. 1.1

(a) Hétérostructures de Type I
(b) Hétérostructures de Type II-décalé



(c) (d)

Fig. 1.1

(c) Hétérostructures de Type II- désaligné
(d) Hétérostructures de Type III

Dans les hétérostructures, dites de type I, voir la Figure (1.1-a), les extrema de la bande de valence et de conduction, se situent dans le même matériau ; les électrons et les trous sont, par conséquent, confinés dans cette même région. Les hétérostructures d'AlGaAs/GaAs se trouvent dans cette catégorie [2].

Dans les hétérostructures, dites de type II-décalé, voir la Figure (1.1-b), les extrema de la bande de valence et de conduction, se situent dans des régions spatialement séparées ; les électrons et les trous sont, par conséquent, confinés dans des régions différentes, le système GaAs/AlAs est de ce type [2]. Lorsque le maximum de la bande de valence de SC2 se trouve au dessus du minimum de la bande de conduction de SC1, le puits quantique est dit de type II- désaligné, voir la Figure (1.1-c). On rencontre cette situation dans l'InAs/GaSb par exemple [3].

Dans les hétérostructures, dites de type III, le gap du semiconducteur SC1 est très étroit devant celui de SC2, voir la Figure (1.1-d). Les propriétés électriques du puits dépendent ainsi de la position du gap de SC1 [2], suivant qu'il est près du minimum de la bande de conduction ou du maximum de la bande de valence de SC2. Exemple : HgTe/CdTe.

Un paramètre important, conjointement avec le gap, entrant en jeu dans la détermination du type de puits quantique formé, est l'affinité électronique $e\chi$ [3]. Cette dernière représente l'énergie nécessaire pour extraire un électron, situé au minimum de la bande de conduction, et le ramener au niveau du vide avec une énergie cinétique nulle. Pour illustrer son importance prenant l'exemple suivant :

Dans une hétérostructure de AlGaAs /GaAs / AlGaAs, les couches AlGaAs ont une affinité électronique plus petite et un gap plus grand que celui du GaAs, les électrons seront, de toute évidence, confinés dans la couche de GaAs [4], formant un puits quantique de type I, voir la Figure (1.2). Les couches AlGaAs, dans ce cas, joueront le rôle de barrières de potentiel.

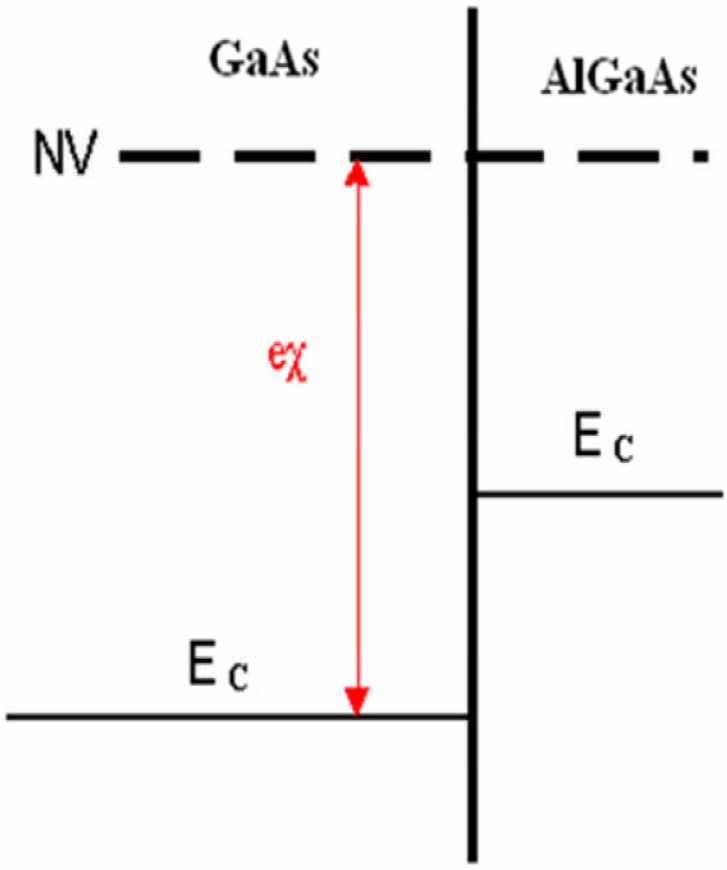


Fig. 1.2 *Affinité électronique dans une hétérostructure de GaAs/AlGaAs [3]*

Enfin, notez qu'on peut introduire plus d'électrons dans un puits quantique en dopant certaines couches avec un élément donneur.

1.2 Techniques de fabrication des puits quantiques

Actuellement, il existe deux principales techniques pour élaborer des hétérostructures abritant des puits quantiques [5]:

1.2.1 Epitaxie par jet moléculaire (MBE)

Le développement des techniques de l'ultravide, durant les années soixante-dix du XX siècle, a permis à J. Arthur et A. Cho des laboratoires Bell [23], d'inventer une technique de dépôt révolutionnaire l'Epitaxie par Jets Moléculaires ou la MBE (Molecular Beam Epitaxy).

Le principe de cette technique, consiste à évaporer des matériaux dans une chambre où règne un vide assez important proche de 10^{-11} mbar, ce qui permet d'éviter toute contamination de la surface, sur un substrat monocristallin qui impose l'organisation spatiale des atomes déposés. L'alternance des atomes émis et le temps d'exposition du substrat au flux, permettent de créer la nanostructure désirée.

La croissance grâce à l'épitaxie par jet moléculaire, comporte plusieurs étapes fondamentales :

Après polissage, à une monocouche atomique près, le substrat est nettoyé de toutes les impuretés et mis en isolation de l'air ambiant. Il est retiré à l'intérieur de la boîte à gant, pour le mettre dans la chambre d'introduction où on installe un vide poussé, après quoi il est placé dans un module de recuit où il sera chauffé (600° C pour le GaAs [11]), afin d'éliminer toutes les impuretés à la surface et pour faciliter le dépôt des couches atomiques. Dans le module de transfert, où il sera mis par la suite, on installe un vide plus important que le précédent avant de le faire passer à la chambre d'épitaxie.

Apres avoir placé le substrat sur le manipulateur d'échantillon, dans la chambre d'épitaxie, et avant de débuter le dépôt des couches atomiques, un ultravide d'environ 10^{-10} torr est créé pour que le flux moléculaire ne soit pas perturbé [6].

La cellule d'effusion, contenant les différents éléments qui composeront le film semiconducteur, est chauffée à une certaine température (157°C dans le cas d'une source d'indium par exemple) afin de générer un flux moléculaire se propageant à une vitesse voulue, qui peut être estimé grâce à la loi des gaz parfaits.

Notons que l'utilisation des panneaux refroidis à l'azote liquide (Cryopanel), voir Figure (2.1), empêchent la ré-évaporation des pièces autres que les cellules chaudes. En outre, ils fournissent l'isolement thermique pour les différentes cellules, ainsi que le pompage additionnel du gaz résiduel.

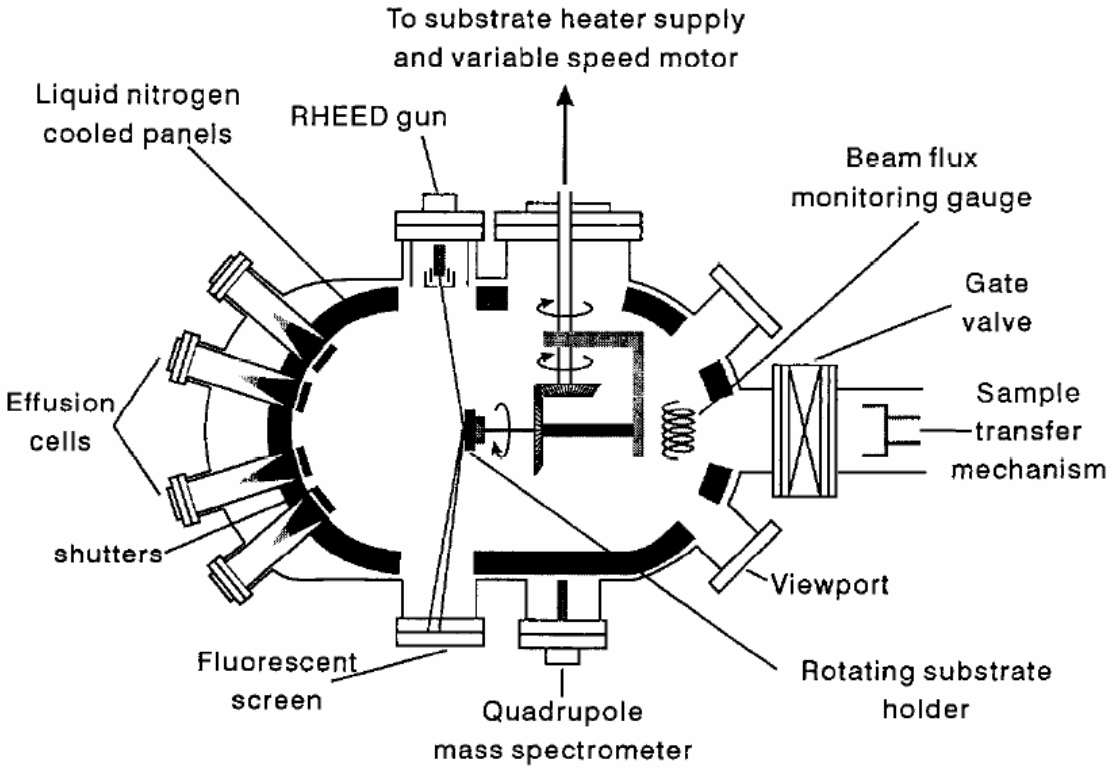


Fig. 2.1 *Principe de la croissance par jet moléculaire (MBE) [7]*

Pour voir l'état de la surface (sa structure cristalline et sa composition chimique) et obtenir le nombre exact de monocouches déposées, le système RHEED (Reflection High-Energy Electron Diffraction) est utilisé [5]. Il est constitué d'un canon à électrons, utilisé pour bombarder le substrat en incidence rasante. Le faisceau d'électrons hautement énergétique, afin d'obtenir des longueurs d'ondes petites, interagit avec la surface avant

d’être réfléchi et diffusé par le réseau, conduisant ainsi à des interférences et à des pics de diffraction suivant la loi de Bragg [18].

L'intensité de la raie centrale du spectre de diffraction dépend de la configuration de la surface du substrat. Ainsi, lorsque la dernière couche est déposé complètement et d’une manière homogène, l’intensité atteint son maximum. Cela conduit à l’apparition d’oscillations de l’intensité de la raie centrale en fonction du temps de déposition (Oscillations RHEED) de période T, voir Figure (2.2). L’amplitude de ces oscillations diminue en fonction du temps, et cela à mesure que le nombre de couches déjà déposés augmente.

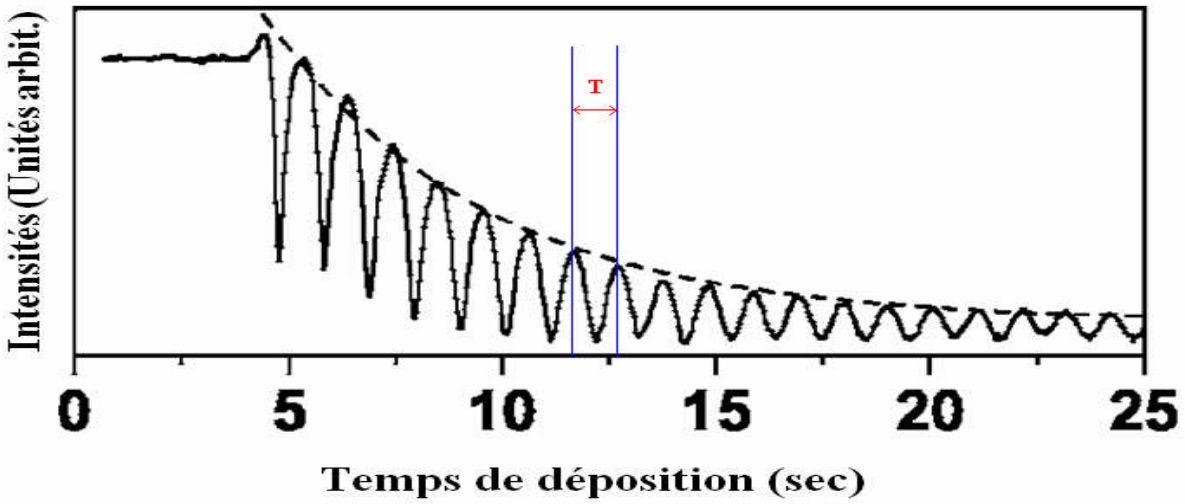


Fig. 2.2 *Oscillations RHEED observées durant la déposition de l’In0.13Ga0.87As sur un substrat de GaAs (001) [8]*

Lorsque le nombre de couches voulues est atteint, on arrête le flux de la cellule d'effusion grâce à un cache mécanique. À la fin de l’expérience, le substrat est retiré en passant successivement par la chambre de transfert, la chambre d'introduction et enfin la boîte à gant où il est récupéré.

1.2.2 Dépôt chimique en phase vapeur (CVD)

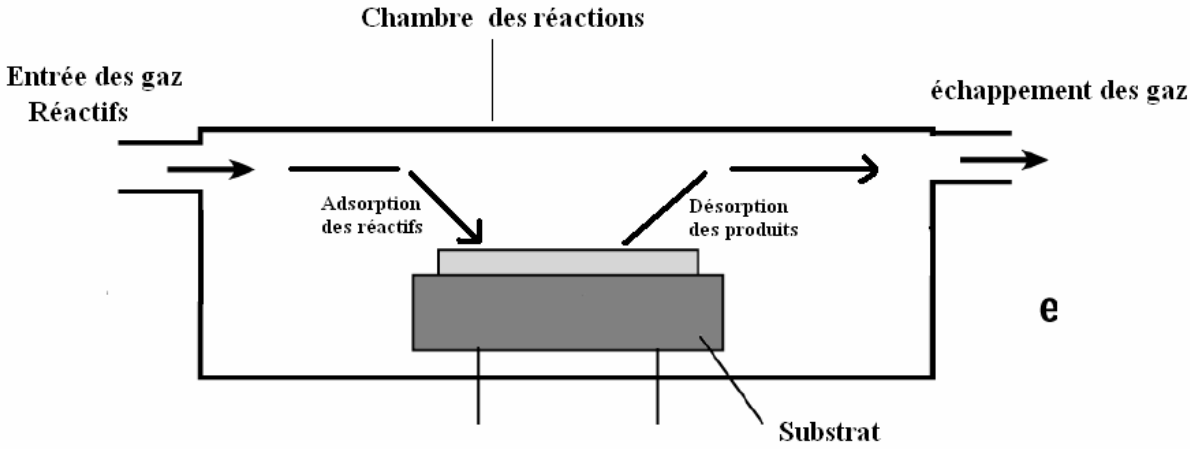
Cette technique consiste à injecter des flux de gaz, appelés précurseurs gazeux, comme le AsH_3 et le $Ga(CH_3)_3$ avec le H_2 par exemple s'il s'agit de déposer le GaAs [5], dans une enceinte sous atmosphère contrôlée. L’adsorption des réactifs gazeux par le

substrat, porté à une température élevée (600-1400°C), provoque la croissance du film grâce à une réaction chimique [9]. Les autres dérivés de cette réaction doivent être gazeux, afin d'être éliminés hors de l'enceinte via un système d'évacuation.

Ainsi, la réaction chimique, permettant la croissance du film mince, nécessite des conditions thermodynamiques spécifiques pour lui apporter l'énergie nécessaire ; Cela se fait en chauffant l'intégralité de l'enceinte (four à paroi chaude) ou seulement le porte-substrat (four à parois froides).

Sous la pression de la microélectronique, une nouvelle technique issue de la CVD a été développée dans les années soixante-dix la MOCVD (Metal Organic Chemical Vapor Deposition) qui utilise des précurseurs gazeux organométalliques (comme les Triméthylgallium $Ga(CH_3)_3$, triméthylindium $In(CH_3)_3$, …) réagissant à basses températures (200-500 °C), en vu de diminuer la température d'élaboration [9].

Cette technique qui ne nécessite pas d'enceinte ultra-vide [10], est une véritable rivale de la MBE, après avoir bien sur résolu les problèmes, tel que l'important taux d'impureté. Pendant de longues années, cette méthode fut la seule technique disposant de sources de phosphore permettant la croissance des matériaux semiconducteurs phosphorés tels que l'InP ou l'GaInAsP, cependant le prix élevé des précurseurs organométalliques limite son utilisation [9].



Cette Figure illustre les séquences des événements dans un réacteur CVD

1.3 Effets liés aux faibles dimensions

La course vers la miniaturisation des composants électroniques, s'est heurtée à des effets nouveaux liés aux faibles dimensions. Ces phénomènes, cités ci-dessous, doivent être intégrés beaucoup plus dans la technologie actuelle en concevant de nouveaux dispositifs permettant leurs exploitations.

Le confinement des électrons, dans un puits de potentiel à faibles dimensions, entraîne l'apparition d'effets totalement nouveaux, qui sont dus à la nature ondulatoire des électrons. Parmi les plus importants, on cite:

a- La discrétisation des niveaux d'énergie

Le spectre des électrons localisés, dans un espace très étroit, est caractérisé par des niveaux d'énergie discrets. Cette discrétisation des niveaux d'énergie présente un intérêt considérable pour la réalisation de composants électroniques et optoélectroniques, tel que les lasers à puits quantiques [13].

b- Les transitions optiques

Les densités d'états, qui ont des formes différentes de celle d'un solide, influent sur les propriétés électroniques et les probabilités de transitions optiques (absorption, émission de lumière) [19].

c- L'effet tunnel

L'effet tunnel, qui désigne la capacité que possède une particule quantique de franchir ou de pénétrer une barrière de potentiel, prend une grande ampleur lorsqu'on utilise des nanostructures, tel que les puits quantiques dans notre cas [19].

1.4 Dispositifs à puitsquantiques

Pour illustrer l'importance des puits quantiques on citera dans ce qui suit les principaux dispositifs technologiques utilisant les puits quantiques comme composants de base:

1.4.1 Lasers à puits quantiques

Les lasers à semiconducteurs [3], qui représentent l'immense majorité des lasers utilisés dans l'industrie sont essentiellement constitués de diodes à semiconducteurs afin de produire un faisceau lumineux. La lumière, où le faisceau laser, est produit au niveau de la jonction suite à la recombinaison des paires électron-trou. Ces dernières sont produites par un pompage grâce à un courant électrique (inversion de population).

En 1963, H. Kroemer, Z.I. Alferov et R. F. Kazarinov, ont proposé pour la première fois le concept du laser à double-hétérostructures [12]. Dans une zone P typiquement de largeur 0.2µm (définie comme la zone active), d'une double hétérojonction constituée d'une succession de zone (NPN), favorisant la recombinaison des paires électron-trou, un confinement électronique des porteurs et un confinement optique des photons peuvent être obtenu par un choix convenable de la composition des alliages qui permet, un saut de potentiel, et une variation d'indice de réfraction (ce dernier est plus grand dans un semiconducteur à petit gap que dans un matériau à grand gap), au niveau des jonctions. Ceci signifie que beaucoup plus de paires électron-trou peuvent contribuer à l'amplification, là même où la lumière est confinée, c'est-à-dire, dans la région où l'amplification a lieu. Remarquons que la longueur de la zone active est comparable aux longueurs d'ondes optiques, ce qui permet un confinement optimisé de ces dernières.

Un confinement plus efficace des porteurs peut être obtenu par une largeur de la zone active de l'ordre du nanomètre, proche de la longueur d'onde électronique, ce qui nous mène au concept des lasers à puits quantiques [13]. Les photons dans ce cas, qui ont une longueur d'onde plus importante que celle des porteurs électronique, sont confinés en utilisant un guide d'onde (autour du puits quantique) [14]. On profite encore plus du

confinement des porteurs électronique et des photons en utilisant des structures à puits quantiques multiples de largeur proche des ondes onde optique, voir Figure (4.1). L'efficacité d'un laser à puits quantique, s'avère ainsi, plus grande que celui à double-hétérostructure [3].

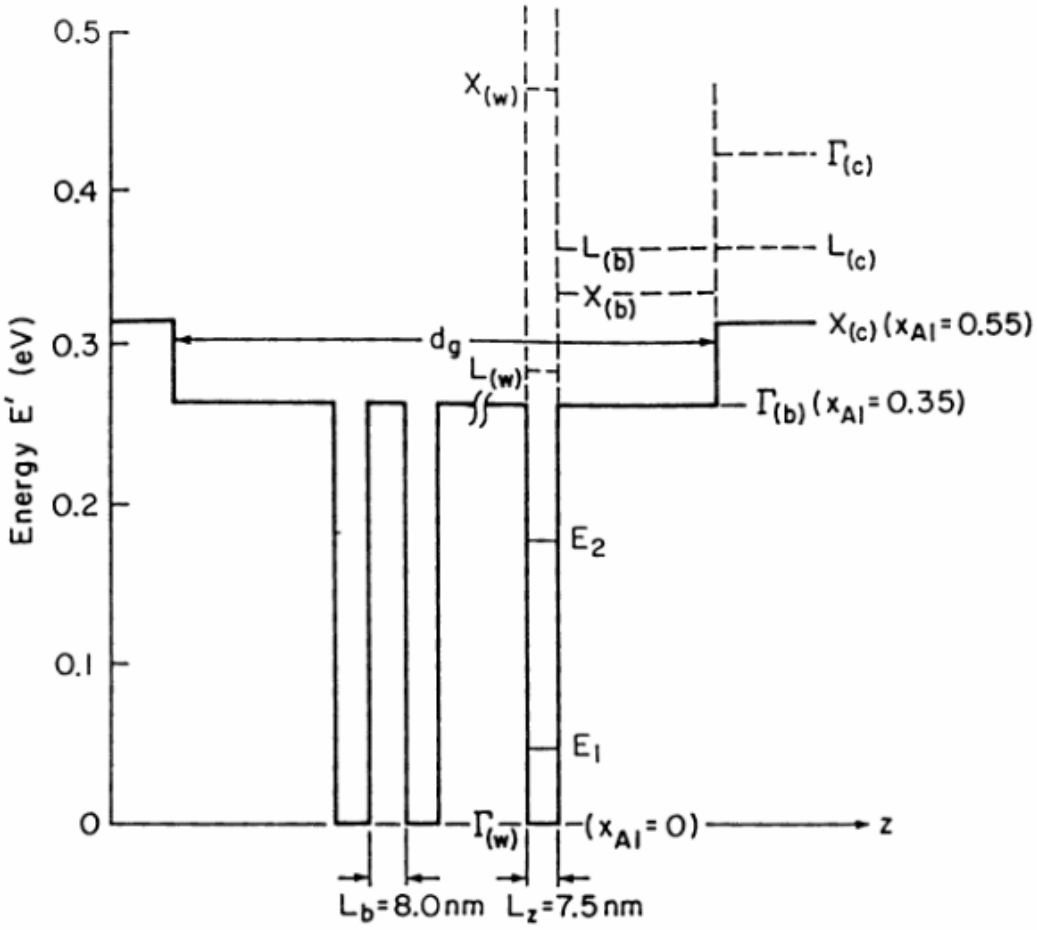


Fig. 4.1 *Puits quantique multiples de GaAs/GaAlAs [13].*

La longueur du guide d'onde d_g~250µm
E_n niveaux d'énergies du puits quantique (avec n=1,2)
Γ(i), L(i), X(i), représentent les bandes de conduction suivant les directions du vecteur d'onde pour un puits quantique (i=w) et la barrière (i=b)

Dans le cas de la Figure (4.1), la largeur des puits quantique L_z est choisie de façon à diminuer le courant de seuil (courant minimum nécessaire pour engendrer une inversion de population) d'une manière optimisée. La largeur de la barrière L_b, quant à elle, est choisie assez petite pour contenir le maximum de puits quantiques, mais pas trop afin d'éviter leurs couplages.

1.4.2 Photodétecteur infrarouge à puits quantiques

Le fonctionnement du détecteur de rayonnement infrarouge [20], QWIP (Quantum Well Infrared Photodetector), repose sur une hétérostructure de semiconducteurs à base du GaAs et l'AlGaAs, refroidie à très basse température, de l'ordre de 80°K, pour éviter les perturbations dus aux phonons [4]. L'absorption du rayonnement, se fait par l'intermédiaire d'une transition électronique entre le niveau fondamental du puits quantique et le premier niveau excité du même puits, s'il existe, autrement, c'est avec le continuum d'états délocalisés que la transition va s'effectuer. L'électron ainsi libéré du puits quantique est enregistré pour former, après traitement, une image de la source infrarouge en question.

Les règles de sélection, régissant les transitions d'états des électrons soumis à un rayonnement électromagnétique, conduisent à deux particularités d'une grande importance pour le QWIP : le détecteur absorbe dans une bande étroite de longueurs d'ondes (l'absorption est dite résonante), et n'absorbe pas le rayonnement arrivant à incidence normale [21].

L'objectif du NASA Goddard Space Flight Center [15], qui a développé en 2003 ce type de détecteur, est d'offrir une alternative moins onéreuse que les détecteurs infrarouges classique, avec une large gamme d'applications. Le premier prototype du QWIP ne détectait que les rayonnements infrarouges de longueurs d'onde comprises entre 8.7 et 9.0 µm, mais l'actuel modèle est capable d'œuvrer dans une plus large gamme de longueurs d'onde (entre 8 et 12 µm). Actuellement ce détecteur est utilisé dans plusieurs domaine, tel que : l'imagerie spatiale, la microscopie infrarouge, la télésurveillance, …etc.

1.4.3 Transistor à haute mobilité électronique (HEMT)

Le HEMT (High Electron Mobility Transistor) [3], également connu sous le nom HFET (Heterostructure Field Effect Transistor), est un transistor à effet de champ, basé sur la modulation de la conductance entre les contacts ohmiques, la Source S et le Drain D, par l'action électrostatique d'une électrode, la Grille g, voir Figure(4.2). Il est constitué de trois

matériaux de bases : le substrat (Semi-isolant), un matériau à grand gap et un autre à petit gap.

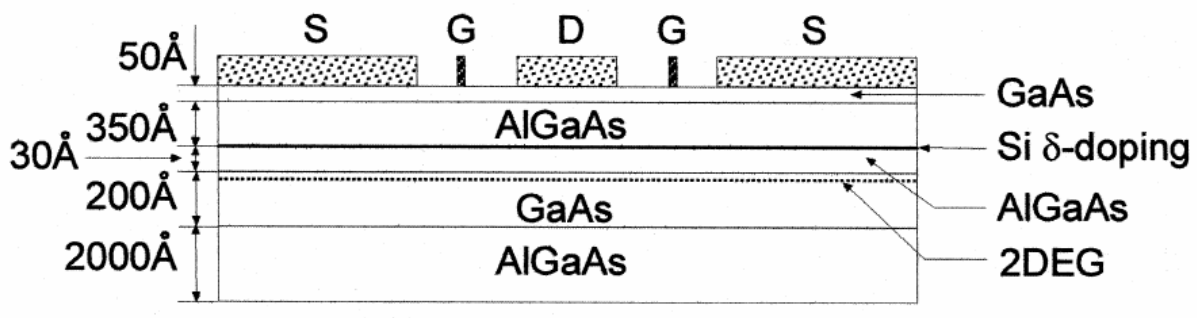


Fig. 4.2 *Vue en coupe du HEMT d'une hétérostructure de GaAs/GaAlAs [22].*

Dans le cas du HEMT, la juxtaposition d'un matériau dopé à grand gap (comme l'AlGaAs) et d'un matériau à petit gap (comme le GaAs), induit la formation d'un puits de potentiel dans le matériau à petit gap où les électrons venant de la couche donneuse vont s'accumuler. Le transfert de charges engendre, dans la couche donneuse, une zone désertée. Ces électrons libres, qui ne sont donc plus soumis aux interactions des impuretés ionisées qui leurs ont donné naissances, peuvent atteindre des mobilités importantes. De part sa mobilité électronique élevée, le HEMT peut fonctionner à des hautes températures (imposées par certains dispositifs de puissance).

1.4.4 Nano-composants électroniques à base de spin

L'électronique traditionnelle, utilise seulement la charge de l'électron comme caractéristique de base, et néglige l'envergure des possibilités offertes par l'une de ses caractéristiques intrinsèques, le spin. Récemment est apparue, suites à des découvertes et à des études importantes notamment sur la magnétorésistance géante, une nouvelle électronique baptisée magnéto-électronique, qui associe ces deux caractéristiques de l'électron. Cette dernière a conduit à l'émergence de nouvelles générations de composants, utilisés dans plusieurs domaines, tel que : l'enregistrement magnétique et les capteurs magnétiques (les têtes de lecture de disques durs), les mémoires électroniques (Les MRAM pour Magnetic Random Acces Memory), …etc.

Aujourd'hui, les chercheurs essayent d'associer des matériaux semiconducteurs et ferromagnétiques pour former des nanodispositifs hybrides exploitant les différentes possibilités offertes par le premier, telles que la modulation des porteurs, la non-linéarité, le couplage avec l'optique, et les propriétés typiques de puits ou boites quantiques et du second, tel que le contrôle de courants par le spin et le principe des mémoires permanentes.

Le spin-FET [16], qui est un parfait exemple, est un transistor à effet de champ de type HEMT, dans lequel les zones habituelles de drain et de source, fortement dopés, sont substituées par des contacts ferromagnétiques. La source jouera ainsi le rôle de polariseur et le drain celui d'un analyseur de spin pour les électrons traversant le canal entre eux. Quant à la grille, sa tension V_g permet un contrôle, à la fois de la densité de porteurs dans le canal, et de la rotation de spin des électrons au cours de leur passage dans le semiconducteur à travers l'interaction spin-orbital de Rashba. Suivant que le spin des électrons est parallèle ou antiparallèle le courant drain I_d est soit faible, soit important. Par le biais de tous ces effets, on peut obtenir, avec une rotation approprié du spin, des valeurs positives ou négatives élevées de transconductance, c'est-à-dire de la pente de la fonction I_d=F (Vgs) [17].

RÉFÉRENCES :

[1] Teruo Mozume, Haruhiko Yoshida, Arup Neogi, Makoto Kudo, Near-infrared intersubband absorption in InGaAs/AlAsSb grown by molecular beam epitaxy, Journal of Crystal Growth **2001-2002**, *P 1077* (1999).

[2] E.L. Ivchenko et G.E. Pikus, Superlattices and other heterostructures : symmetry and optical phenomena (Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, 1995).

[3] Henry Mathieu, Physique des semiconducteurs et des composants électronique, 4e édition (Masson, Paris, 1998).

[4] A. J. Ekpunobi, A. O. E. Animalu, Band offsets and properties of AlGaAs/GaAs and AlGaN/GaN material systems, Superlattices and Microstr. **31**, *P 247* (2002).

[5] H. Luth, Solid surfaces, interfaces and thin films, 5e édition (Springer, Berlin, Heidelberg, 2001).

[6] Milton Ohring, The Materials Science of Thin Films, (Academic Press, San Diego, 1992).

[7] M. Henini, Molecular beam epitaxy: from research to manufacturing, Thin Solid Films **306** *P 331* (1997).

[8] S. Martini, A. A. Quivy, T. E. Lamas et E. C. F. da Silva : Real-time RHEED investigation of indium segregation in InGaAs layers grown on vicinal GaAs(001) substrates, Phy. Rev. **B 72**, *P 153304* (2005).

[9] Hervé HIDALGO, Dépôt chimique en phase vapeur de couches minces d'alumine dans une post-décharge micro-onde, Thèse de doctorat, Université de LIMOGES (2003).

[10] Jonathan PRADELLES, Association des structures diffractantes 1D et de microsystèmes Opto-Electro-Mécanique, Thèse de doctorat, Ecole Centrale de Lyon (2006).

[11] Aimé Richardt, Anne-Maie Durand, Le Vide : Les couches minces – Les couches dures (IN FINE, Paris, 1994).

[12] Zhores I. Alferov, Nobel Lecture: The double heterostructure concept and its applications in physics,electronics, and technology, Rev. Mod. Phys. **73**, *P 767* (2001).

[13] Peter S. Zory, Quantum well lasers (Academic press, San Diego, 1993)

[14] Weng W. Chow, Stephan W. Koch, Semiconductor-Laser fundamental (Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, 1999).

[15] NASA Goddard Space Flight Center, URL : www.gsfc.nasa.gov/

[16] Igor Zutic, Jaroslav Fabian et S. Das Sarma, Spintronics : Fundamentals and applications, Rev. Mod. Phys. **76**, *P 323* (2004).

[17] J.P. Zou, L.J. Wang, L.L. Tian, Z.P.Yu, Modeling of gate-induced spin precession in a Ge 2DHG channel, Phys. Lett. **A322**, *P 179* (2004).

[18] Thierry Delage, Optimisation du dépôt de films minces de BSTO et de tricouches YBCO/BSTO/YBCO ; phénomènes de croissance et d'interfaces, application à la réalisation de composants hyperfréquences accordables, Thèse de doctorat, Université de LIMOGES (2003).

[19] Raphael Tsu, Superlattice to Nanoelectronics (Elsevier Science, Oxford, 2005)

[20] S. D. Gunapala et S. V. Bandara, Quantum Well Infrared Photodetector (QWIP) Focal Plane Arrays Semiconductors and Semimetals, Vol. 62, P 197, Academic Press (1999).

[21] John H. Davies, The physics of low-dimensional semiconductors (Cambridge university press, 1998).

[22] Junmin Hu, Tao Deng, Rex G. Beck, Robert M. Westervelt, Kevin D. Maranowski, Arthur C. Gossard, George M. Whitesides, Fabrication of GaAs/AlGaAs high electron mobility transistors with 250 nm gates using conformal phase shift lithography, Sensors and Actuators **86**, *P 122* (2000).

[23] A.Y. Cho et J.R. Arthur, Molecular beam epitaxy, Prog. Solid-State Chem. **10**, *P 157* (1975).

CHAPITRE II :

Préliminaires Théoriques

2.1 Théorie dela fonction enveloppe

2.1.1 Électron dans un potentiel périodique

La théorie de la fonction enveloppe s'appuis sur l'approximation à un électron dans un cristal infini, les potentiels possèdent ainsi la périodicité du réseau cristallin. Ecrivant l'équation de Schrödinger d'un électron dans un potentiel périodique comme :

$$H\Psi(\vec{r}) = E\Psi(\vec{r}) \text{ (II.1)}$$

où $H = \frac{-\hbar^2}{2m_e}\Delta + U$ et $\mathrm{U}(\vec{\mathrm{r}} + \vec{\mathrm{R}}) = \mathrm{U}(\vec{\mathrm{r}})\,\frac{1}{2}$

Dans l'équation (II.1) U représente le potentiel effectif cristallin et $\vec{\mathrm{R}}$ un vecteur du réseau.

Le théorème de Bloch stipule que la solution de l'équation (II.1) est de la forme :

$$\Psi_{n,\vec{k}} = u_{n,\vec{k}}(\vec{r})\exp(i\vec{k}.\vec{r}) \quad \text{(II.2)}$$

où **k** appartient à l'espace réciproque.

L'indice n dans les fonctions de Bloch, désigne une bande d'énergie précise, ce qui nous permet de constater l'existence d'un ensemble discrets de solutions (un spectre d'énergie discret $E_n(\vec{k})$) pour chaque valeur de $\vec{k}$.

Ce même théorème permet de démontrer que, deux vecteurs d'ondes **k** et **k'** conduisent à des solutions équivalentes, s'ils ne différent que par un vecteur du réseau réciproque **K**. On observe ainsi une redondance dans les solutions, ceci permet de translater et de restreindre les valeurs de **k** à la première zone de Brillouin.

2.1.2 Approximation de la masse effective :

Développons en séries de Taylor l'énergie d'un seul électron $E_n(\mathbf{k})$ au voisinage de l'extremum d'une bande, situé au niveau du vecteur d'onde $\mathbf{k}_0$:

$$E_n(\vec{k}) = E_n(\vec{k}_0) + \sum_{i=x,y,z} (k_i - k_{0,i}) \cdot \left.\frac{\partial E_n(\vec{k})}{\partial k_i}\right|_{\vec{k}_0} + \sum_{i,j=x,y,z} \frac{(k_i - k_{0,i})(k_j - k_{0,j})}{2} \cdot \left.\frac{\partial^2 E_n(\vec{k})}{\partial k_i \partial k_j}\right|_{\vec{k}_0} + \ldots \quad \text{(II.3)}$$

Comme on a choisi l'extremum de la bande dans notre développement, on a nécessairement [6]:

$$\left.\frac{\partial E_n(\vec{k})}{\partial k_i}\right|_{k_0} = 0 \quad \text{(II.4)}$$

En se limitant ainsi au deuxième ordre du développement, la masse effective est un tenseur naturellement défini par :

$$\frac{1}{m_{i,j}^*} = \frac{1}{\hbar^2} \left.\frac{\partial^2 E_n(\vec{k})}{\partial k_i \partial k_j}\right|_{\vec{k}_0} \quad \text{(II.5)}$$

Comme on peut l'apercevoir, cette approximation n'est valable qu'au voisinage de l'extremum de la bande, là où, par conséquent, on a une dépendance quadratique avec le vecteur d'onde **k**.

Dans un cristal à symétrie cubique et au voisinage du point Γ, qui correspond au minimum de la bande de conduction de la plupart des semiconducteurs binaires à gap direct de type III-V (à l'exception du GaP, AlP, AlAs, AlSb) [2], on peut écrire:

$$E_n(\vec{k}) - E_n(0) = \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m^*} \quad \text{(II.6)}$$

Ceci est valable dans la mesure où la courbure de la bande varie peu au voisinage du point Γ, ainsi l'électron se comporte comme un électron libre de masse m*.

2.1.3 Théorie de la masse effective dans le cadre de la fonction enveloppe :

Prenant la fonction d'onde $\Psi_{n,\vec{k}}(\vec{r})$ solution de l'équation de Schrödinger, dans le cas d'un cristal parfait :

$$H\Psi_{n,\vec{k}}(\vec{r}) = (\frac{-\hbar^2}{2m^*}\Delta + U(\vec{r}))\Psi_{n,\vec{k}}(\vec{r}) = E_n(\vec{k})\Psi_{n,\vec{k}}(\vec{r}) \quad \text{(II.7)}$$

Comme elle est une fonction de Bloch, elle peut s'écrire sous la forme :

$$\Psi_{n,\vec{k}} = u_{n,\vec{k}}(\vec{r})\exp(i\vec{k}.\vec{r}) \quad \text{(II.8)}$$

Ainsi, pour **k**=0, l'équation de Schrödinger précédente s'écrit :

$$(\frac{-\hbar^2}{2m^*}\Delta + U(\vec{r}))u_{n,0}(\vec{r}) = E_{n,0}u_{n,0}(\vec{r}) \quad \text{(II.9)}$$

où $E_{n,0}$ représente l'extremum de la bande d'énergie

Habituellement on est forcé de décrire notre matériau en présence d'une perturbation V_p, soit externe (tel un champ électrique appliqué), soit interne (telle que les impuretés) ; On doit ainsi intégrer son effet dans notre Hamiltonien :

$$(\frac{-\hbar^2}{2m}\Delta + U(\vec{r}) + V_p)\mathrm{X}_n(\vec{r}) = (H + V_p)\mathrm{X}_n(\vec{r}) = E_n \mathrm{X}_n(\vec{r}) \quad \text{(II.10)}$$

Développons la fonction $\Phi_n(\vec{r})$ sur la base des états propres de l'Hamiltonien non perturbé H:

$$\mathrm{X}_n(\vec{r}) = \sum_{n,\vec{k}} F_{n,\vec{k}} \Psi_{n,\vec{k}}(\vec{r}) \quad \text{(II.11)}$$

En négligeant les transitions interbandes (cela est possible pour une assez faible perturbation), on peut omettre l'indice de bandes n de la somme :

$$\mathrm{X}_n(\vec{r}) = \sum_{\vec{k}} F_{\vec{k}} \Psi_{\vec{k}}(\vec{r}) \quad \text{(II.12)}$$

Par la suite on ne va s'intéresser qu'aux états proches de l'extremum de la bande, ce qui nous permet d'écrire :

$$\left(\frac{-\hbar^2}{2m}\Delta + U(\vec{r})\right)\Psi_{\vec{k}}(\vec{r}) \approx \left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} + E_{n,0}\right)\Psi_{\vec{k}}(\vec{r}) \quad \text{(II.13)}$$

En remplaçant la solution (II.12) dans l'équation (II.10), et tenant compte de (II.13), on trouve :

$$\sum_{k} F_{\vec{k}} (\frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} + E_{n,0} + V_p)\Psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = E_n \mathrm{X}_n(\vec{r}) \quad \text{(II.14)}$$

Sachant que les fonctions $\Psi_{\vec{k}}(\vec{r})$, sont des fonctions de Bloch, il résulte :

$$\mathrm{X}_n(\vec{r}) = \sum_{n,\vec{k}} F_{n,\vec{k}} e^{i\vec{k}\vec{r}} u_{n,\vec{k}}(\vec{r}) \quad \text{(II.15)}$$

Comme on ne s'intéresse qu'aux états proches de l'extremum de la bande, cela nous permet d'approximer $u_{n,\vec{k}}(\vec{r})$ par $u_{n,0}(\vec{r})$, et de prendre ainsi la fonction $\Phi_n(\vec{r})$ sous la forme :

$$X(\vec{r}) = u_{n,0}(\vec{r})\sum_{\vec{k}} F_{\vec{k}} e^{i\vec{k}.\vec{r}} = u_{n,0}(\vec{r})F(\vec{r}) \quad \text{(II.16)}$$

La fonction F(**r**) ainsi définie, est appelée fonction enveloppe.

En remplaçant cette forme de solution dans l'équation (II.14), on aboutit à l'équation suivante :

$$u_{n,0}(\vec{r})\sum_{k} F_{\vec{k}}\left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} + E_{n,0} + V_p\right)e^{i\vec{k}\,\vec{r}} = E_n u_{n,0}(\vec{r})F(\vec{r}) \quad \text{(II.17)}$$

d'où,

$$u_{n,0}(\vec{r})\left(\frac{-\hbar^2}{2m^*}\Delta + E_{n,0} + V_p\right)F(\vec{r}) = E_n u_{n,0}(\vec{r})F(\vec{r}) \quad \text{(II.18)}$$

En éliminant la fonction $u_{n,0}(\vec{r})$, on aboutit finalement à l'équation voulue :

$$\left[\left(\frac{-\hbar^2}{2m^*}\Delta + E_{n,0}\right) + V_p(\vec{r})\right]F(\vec{r}) = E_n F(\vec{r}) \quad \text{(II.19)}$$

Soit en décalant l'origine des énergies:

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2m^*}\Delta + V_p(\vec{r})\right]F(\vec{r}) = (E_n - E_{n,0})F(\vec{r}) = EF(\vec{r}) \quad \text{(II.20)}$$

Ainsi l'effet du réseau cristallin et de la perturbation peut être représenté au voisinage de l'extremum de la bande d'énergie par la fonction enveloppe F(**r**). Cela permet de simplifier dans plusieurs cas les calculs.

2.2 Modèle du puitsquantique rectangulaire :

2.2.1 Principe du modèle :

Un puits quantique est un système où les électrons (ou les trous), sont confinés dans une dimension de l'espace, si on rajoute une autre dimension de confinement on a un fil quantique, en rajoutant encore une autre on obtient un point quantique.

Pour pouvoir modéliser un puits quantique, on a besoin de lui attribuer une forme simplifiée proche de la réalité.

2.2.2 Développements analytiques

On considère une particule de masse m* dans un puits de potentiel. A l'intérieur du puits (0 < x <L) le potentiel est nul et à l'extérieur, il prend une certaine valeur :

$V(x) = 0$ Si 0 < x <L

$V(x) \neq 0$ Si x>L ou x <0

L'équation de Schrödinger s'écrit alors :

$$[-\frac{\hbar^2}{2m^*}\Delta + V(x)]\Psi(\vec{r}) = E\Psi(\vec{r}) \quad \text{(II.21)}$$

Notons que l'Hamiltonien peut s'écrire comme la somme de l'Hamiltonien selon chaque axe. Nous avons donc:

$$H = H_x + H_y + H_z \quad \text{(II.22)}$$

Tel que :

$$H_x = -\frac{\hbar^2}{2m*}\partial_x^2 + V(x)\,, H_y = -\frac{\hbar^2}{2m*}\partial_y^2\,, H_z = -\frac{\hbar^2}{2m*}\partial_z^2 \quad \text{(II.23)}$$

où, $\partial_x^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2}, \partial_y^2 = \frac{\partial^2}{\partial y^2}, \partial_z^2 = \frac{\partial^2}{\partial z^2}$

Une telle forme est dite "forme séparable" : l'Hamiltonien est la somme d'opérateurs individuels H_i chacun ne dépendant que d'une seule variable ou degré de liberté q_i. Cette forme traduit le caractère indépendant des mouvements décrits par les variables q_i.

Rappelons-nous que la probabilité conjointe de deux événements indépendants est le produit des probabilités individuelles des deux événements, pris séparément. Nous nous attendons donc à ce que la densité de probabilité de présence dans l'espace de configuration multidimensionnel soit, dans le cas où l'Hamiltonien est de forme séparable, un simple produit de densités de probabilités individuelles. En fait, la forme séparable de l'Hamiltonien permet une séparation de variables sur la fonction d'onde elle-même.

Ecrivons donc les solutions de l'équation de Schrödinger sous la forme:

$$\Psi(\vec{r}) = \Psi(x) \times \Psi(y) \times \Psi(z) \quad \text{(II.24)}$$

Ainsi, on peut écrire la solution de l'équation (II.21) sous la forme :

$$\Psi(\vec{r}) = e^{i(k_y y + k_z z)} \Phi(x) \quad \text{(II.25)}$$

L'équation (II.21) se réduit ainsi à :

$$[-\frac{\hbar^2}{2m^*}\partial_x^2 + V(x)]\Phi(x) = (E - \frac{\hbar^2}{2m^*}(k_y^2 + k_z^2))\Phi(x) \quad \text{(II.26)}$$

Dans ce qui suit, on va résoudre l'équation de Schrödinger dans deux cas typiques :

a- Puits à barrières infinies

On considère une particule de masse m* dans un puits de potentiel à barrières infinies. A l'intérieur du puits le potentiel est nul et à l'extérieur, il est infini.

$$V(x) = 0 \quad \text{Si } 0 < x < L \qquad \text{(II.27)}$$

$$V(x) = +\infty \text{ Si } x > L \text{ ou } x < 0 \qquad \text{(II.38)}$$

Les conditions aux limites qui conviennent, sont par conséquent :

$$\Phi(0) = 0 \text{ et } \Phi(L) = 0 \quad \text{(II.29)}$$

A l'intérieur du puits l'équation se réduit à :

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*}\frac{d^2}{dx^2}\Phi(x) = (E - \frac{\hbar^2}{2m^*}(k_y^2 + k_z^2))\Phi(x) \quad \text{(II.30)}$$

On aperçoit clairement que les solutions de cette équation sont une combinaison linéaire des fonctions, qui ont comme caractéristique le changement de signe lors d'une double dérivation.

$$\Phi(x) = a_1 \sin(k_x x) + a_2 \cos(k_x x) \quad \text{(II.31)}$$

Les conditions aux limites permettent d'écrire :

$$\Phi(0) = 0 \quad \text{Donc} \quad a_2 = 0 \qquad \text{(II.32)}$$

$$\Phi(L) = 0 \quad \text{Donc} \quad k_x = \frac{n\pi}{L} \qquad \text{(II.33)}$$

La fonction d'onde normalisée de notre système, se met donc sous la forme:

$$\Phi(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi}{L} x\right) \quad \text{(II.34)}$$

En remplaçant cette dernière fonction dans (II.30), on trouve l'énergie totale de notre système :

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m*} \frac{n^2}{L^2} + \frac{\hbar^2}{2m*}\left(k_y^2 + k_z^2\right) \quad \text{(II.35)}$$

Ces fonctions d'ondes sont représentées dans la Figure (2.1), dans le cas d'un seul électron, pour les états n=1 ,2 ,3 ,4 .

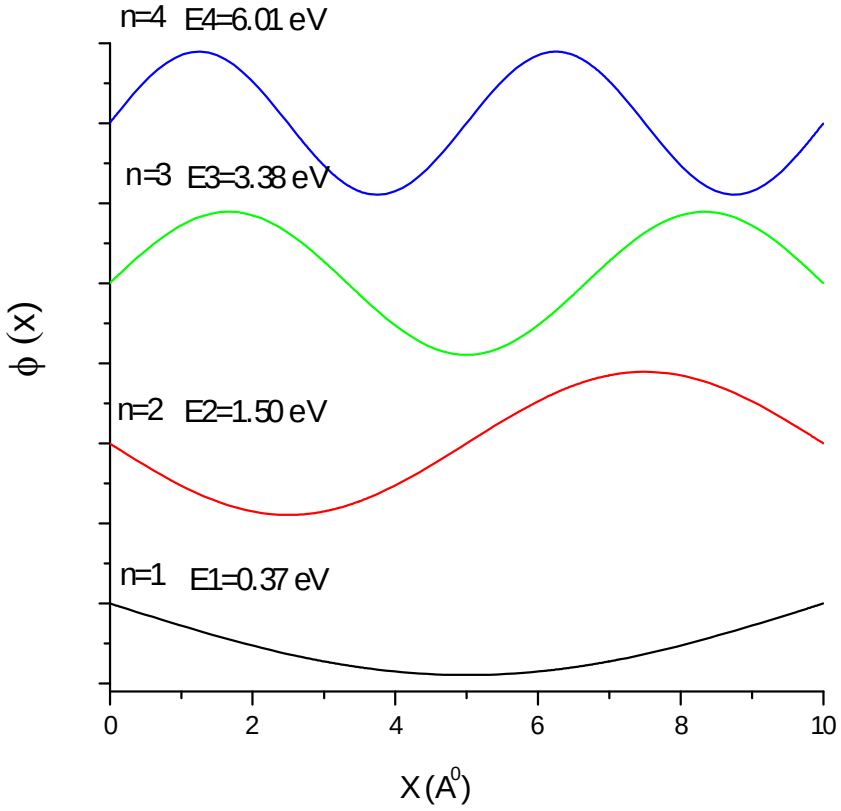


Fig.2.1: *Puits quantique de profondeur infinie et de largeur L =10 Å.*

On remarque aussi, à partir de l'expression de l'énergie totale obtenue précédemment, l'existence de plusieurs sous bandes correspondant chacune à une valeur de *n*. Dans la Figure (2.2), on a représenté les courbes de dispersion, où on a pris $k_{//} = \sqrt{k_y^2 + k_z^2}$.

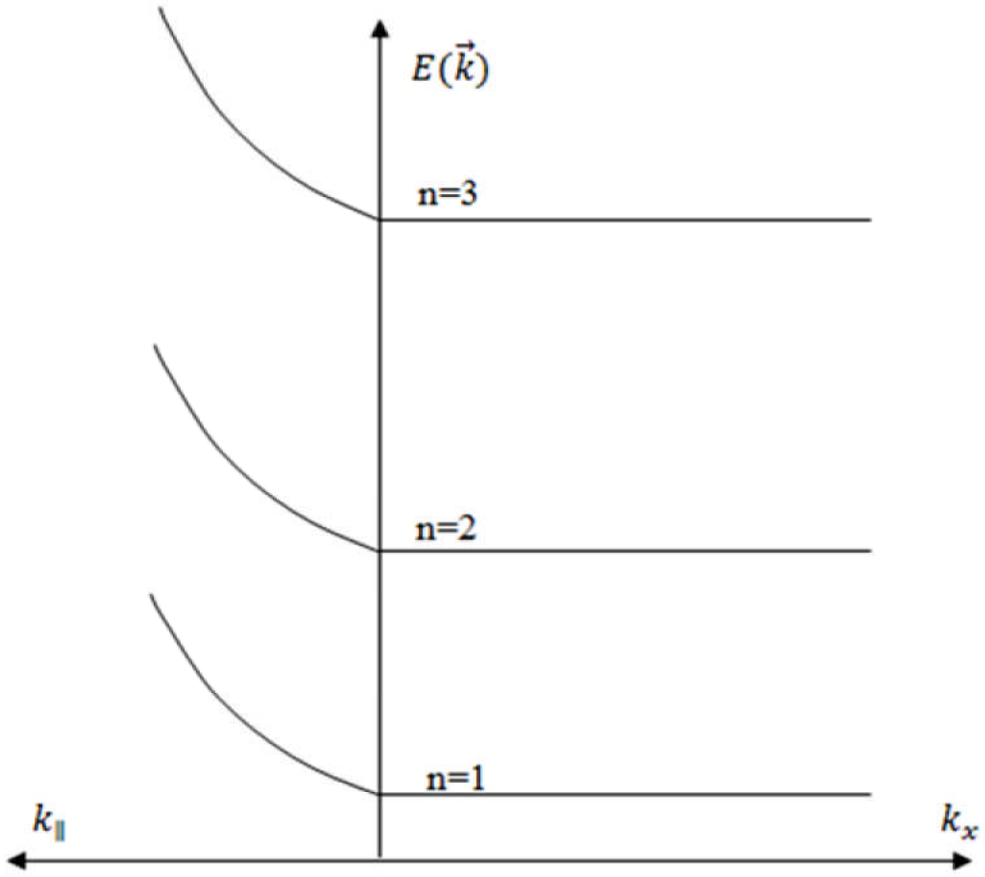


Fig. 2.2 *Structure en sous bandes d'énergie pour un puits quantique de profondeur infinie.*

b- Puits symétrique à barrières finies

Dans le cas d'un puits de profondeur finie, où l'énergie des électrons n'est plus négligeable devant la hauteur de la barrière, la pénétration de la fonction d'onde électronique à l'intérieure de celle-ci doit être prise en compte.

Ecrivant le potentiel comme suit :

I. $V(x) = V_0$ Si x <0

II. $V(x) = 0$ Si 0 < x <L (II.36)

III. $V(x) = V_0$ Si x>L

Il existe ainsi trois régions distinctes :

1) Dans la première région, l'équation de Schrödinger à une dimension, s'écrit :

$$\frac{d^2}{dx^2}\Phi_1(x) + k_1^2\Phi_1(x) = 0 \quad \text{(II.37)}$$

où $k_1^2 = \frac{2m_1^*}{\hbar^2}(V - E)$

La solution de cette équation, en supposant qu'elle s'annule à la limite de l'infini, c'est-à-dire $\Phi_1(-\infty) = 0$, est immédiate :

$$\Phi_1(x) = B_1 \exp(k_1 x) \quad \text{(II.38)}$$

2) Dans la seconde région, là où le potentiel est nul, la solution s'écrit, comme on l'a vu précédemment, sous la forme :

$$\Phi_2(x) = a_1 \sin(k_2 x) + a_2 \cos(k_2 x) \quad \text{(II.39)}$$

où $k_2 = \frac{\sqrt{2m_2^* E}}{\hbar}$

Un simple développement trigonométrique, permet de mettre cette fonction sous la forme :

$$\Phi_2(x) = a \sin(k_2 x + \alpha) \quad \text{(II.40)}$$

où $a = \sqrt{a_1^2 + a_2^2}$ et $\alpha = arctg\left(\frac{a_2}{a_1}\right)$

3) Dans la troisième région, pareille à la première région puisque on traite seulement le cas où les barrières du puits quantique sont symétriques, la solution doit avoir ainsi la même forme :

$$\Phi_3(x) = B_2 \exp(-k_1 x) \quad \text{(II.41)}$$

La continuité de la fonction d'onde et du courant, impose les conditions aux limites suivantes :

$$\Phi_1(0) = \Phi_2(0) \text{ et } \frac{1}{m_1^*}\Phi'_1(0) = \frac{1}{m_2^*}\Phi'_2(0) \quad \text{(II.42)}$$

$$\Phi_2(L) = \Phi_3(L) \text{ et } \frac{1}{m_2^*}\Phi'_2(L) = \frac{1}{m_1^*}\Phi'_3(L) \quad \text{(II.43)}$$

En remplaçant dans ces équations les fonctions Φ_1, Φ_2 et Φ_3, par leurs expressions obtenues précédemment, on trouve, après quelques développements analytiques, qui permettent l'élimination des constantes a, B_1, B_2 et α , l'expression suivante:

$$\frac{\sqrt{2m_2^* E}}{\hbar} L = n\pi - 2\arcsin\sqrt{\frac{E}{V\frac{m_2^*}{m_1^*} + E(1 - \frac{m_2^*}{m_1^*})}} \quad \text{(II.44)}$$

Cette expression, définit les valeurs possibles de l'énergie de l'électron à l'intérieur du puits correspondant à chaque valeur de *n*. On a ainsi une quantification de l'énergie.

2.3 La méthodedes différences finies

2.3.1 Principe de la méthode

La méthode numérique des différences finies qu'on a choisie pour résoudre l'équation de Schrödinger, qui est une équation aux dérivées partielles [7], consiste à diviser l'intervalle d'intégration en *n* petit intervalles de longueurs finies. Ainsi la dérivée d'une fonction F(x), par exemple, s'écrit :

$$\frac{\partial F(x)}{\partial x} = \lim_{\Delta x \to 0}\left(\frac{\Delta F(x)}{\Delta x}\right) \approx \frac{F(x + \delta x) - F(x)}{\delta x} \quad \text{(II.45)}$$

où δx doit être assez petit.

L'extrapolation à la seconde dérivée, est maintenant donné par :

$$\frac{\partial^2 F(x)}{\partial x^2} \approx \frac{\left.\frac{\partial F(x)}{\partial x}\right|_{x+\delta x} - \left.\frac{\partial F(x)}{\partial x}\right|_{x}}{\delta x} = \frac{F(x+\delta x) - 2F(x) + F(x-\delta x)}{(\delta x)^2} \quad \text{(II.46)}$$

Pour mieux illustrer cette méthode, on prendra l'équation de Schrödinger à une dimension comme exemple :

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*}\frac{d^2}{dx^2}\Psi(x) + V(x)\Psi(x) = E\Psi(x) \quad \text{(II.47)}$$

Choisissons l'indexation suivante :

$$\Psi_i = \Psi\left((i-1)\delta x\right) \quad \text{(II.48)}$$

$$V_i = V\left((i-1)\delta x\right) \quad \text{(II.49)}$$

Réécrivant ainsi l'équation de Schrödinger, comme suit [4] :

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*}\frac{\Psi_{i+1} - 2\Psi_i + \Psi_{i-1}}{\delta x^2} + V_i\Psi_i = E\Psi_i \quad \text{(II.50)}$$

Grâce à cette méthode, on peut représenter l'Hamiltonien de Schrödinger comme une matrice de dimension (n×n). Les valeurs et les vecteurs propres de cette matrice, sont les énergies associées à leurs fonctions d'onde.

Implicitement, dans cette matrice, on a fixé $\Psi_0 = \Psi_{n+1} = 0$, ce qui correspond à l'hypothèse que la fonction d'onde est nulle à l'infini ; on a donc remplacé une équation différentielle avec conditions aux limites, par un problème de vecteurs propres.

Pour résoudre ce dernier problème, nous avons utilisé des sous programmes issus de la bibliothèque Lapack, publiquement disponible [5]. Le sous programme est choisi suivant le type de matrice obtenu dans chaque cas (Complexe ou réel, tridiagonal, …etc.).

2.3.2 Application à un puits rectangulaire

Lorsque la masse effective varie en fonction de x, ou change brusquement de valeur, à l'interface de deux semiconducteurs, on doit prendre l'opérateur énergie cinétique T sous une forme hermitienne :

$$T = p_x \frac{1}{m^*(x)} p_x \quad \text{(II.51)}$$

Sous cette forme, l'opérateur T vérifie bien la condition $T^+=T$. L'équation de Schrödinger s'écrit ainsi :

$$-\frac{\hbar^2}{2}\frac{d}{dx}\left(\frac{1}{m^*(x)}\frac{d}{dx}\Psi(x)\right)+V(x)\Psi(x)=E\Psi(x) \quad \text{(II.52)}$$

En appliquant la méthode des différences finies cela conduit à :

$$\frac{-\frac{\hbar^2}{2m^*(x+\delta x)}\left[\frac{\Psi(x+2\delta x)-\Psi(x)}{2\delta x}\right]+\frac{\hbar^2}{2m^*(x-\delta x)}\left[\frac{\Psi(x)-\Psi(x-2\delta x)}{2\delta x}\right]}{2\delta x}+V(x)\Psi(x)=E\Psi(x) \quad \text{(II.53)}$$

En simplifiant cette expression, on trouve :

$$-\frac{\hbar^2}{2\delta x^2}\left(\frac{\Psi(x+\delta x)}{m^*(x+\frac{\delta x}{2})}-\frac{\Psi(x)}{m^*(x+\frac{\delta x}{2})}-\frac{\Psi(x)}{m^*(x-\frac{\delta x}{2})}+\frac{\Psi(x-\delta x)}{m^*(x-\frac{\delta x}{2})}\right)+V(x)\Psi(x)=E\Psi(x) \quad \text{(II.54)}$$

Plusieurs tests ont été effectués pour vérifier cette méthode. Dans le tableau (II.1), on trouve une comparaison entre, les valeurs qu'on a obtenues par nos propres programmes, et celles tirées de la référence [4], dans le cas d'un puits quantique de 20 Å de GaAs entouré par une barrière de $Ga_{0.25}Al_{0.75}As$, et cela en fonction de N, qui représente le nombre de points d'intégration par Å, c'est-à-dire $dx = 1/N$:

Tableau II.1 : comparaison entre nos résultats numérique et celles tirées de la référence [4] concernant l'énergie de l'état fondamental, dans le cas d'un puits quantique de 20 Å de $GaAs/Ga_{0.25}Al_{0.75}As$.

N($Å^{-1}$)	Solution analytique (meV)	Solution numérique de Harrison (meV)	Nos Solutions (meV)
2	270.764969	270.663106	270.662118
4	270.764969	270.739499	270.738511
8	270.764969	270.758601	270.757616

REFERENCES :

[1] Hung T. Diep, Physique de la matière condensée (Dunod Paris, 2003).

[2] Henry Mathieu, Physique des semiconducteurs et des composants électronique, 4e édition (Masson, Paris, 1998).

[3] E.L. Ivchenko, Superlattices and other heterostructuresG.E. Pikus (Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, 1995).

[4] Paul Harrison, Quantum well, wires and Dots (Wiley, New York, 2000).

[5] La Bibliotheque LAPACK -- Linear Algebra PACKage : http://www.netlib.org/lapack/

[6] P. S. Kireev, Semiconductor physics (Mir, Moscou, 1978)

[7] Jean-Pierre Demailly, Analyse numérique et equations différentielles (PU Grenoble, 1991)

CHAPITRE III :

Puitsquantique s libres ou soumis à un champ

3.1 Structure électronique d'un puitsquantique en absence d'un champ externe

La valeur de la masse effective, la hauteur de la barrière ainsi que la largeur du puits quantique, ont une influence directe sur le spectre d'énergie ainsi que sur tous les phénomènes liés à ce dernier, tel que le spectre d'absorption. Dans ce qui suit on examine leurs effets sur le confinement et les énergies des électrons.

3.1.1 Effets de la hauteur de la barrière

Pour distinguer l'effet de la barrière, nous avons effectué plusieurs calculs numériques à base de l'équation (II.54), en variant la hauteur de la barrière qui entoure un puits quantique. La masse effective des électrons est prise égale à celle de l'InSb, c'est-à-dire $m^* = 0.0135 m_e$ [3]. Le pas d'intégration, quant à lui, est pris égal à 1Å dans ce chapitre.

On a ainsi constaté l'existence de deux effets :

1) Les électrons sont de plus en plus confinés à l'intérieur du puits, et cela à mesure que la hauteur de la barrière augmente, comme on peut l'apercevoir dans la figure (3.1), où on

a représenté la densité de la fonction d'onde du premier état d'un puits quantique de largeur 100Å, et cela pour plusieurs hauteurs de la barrière.

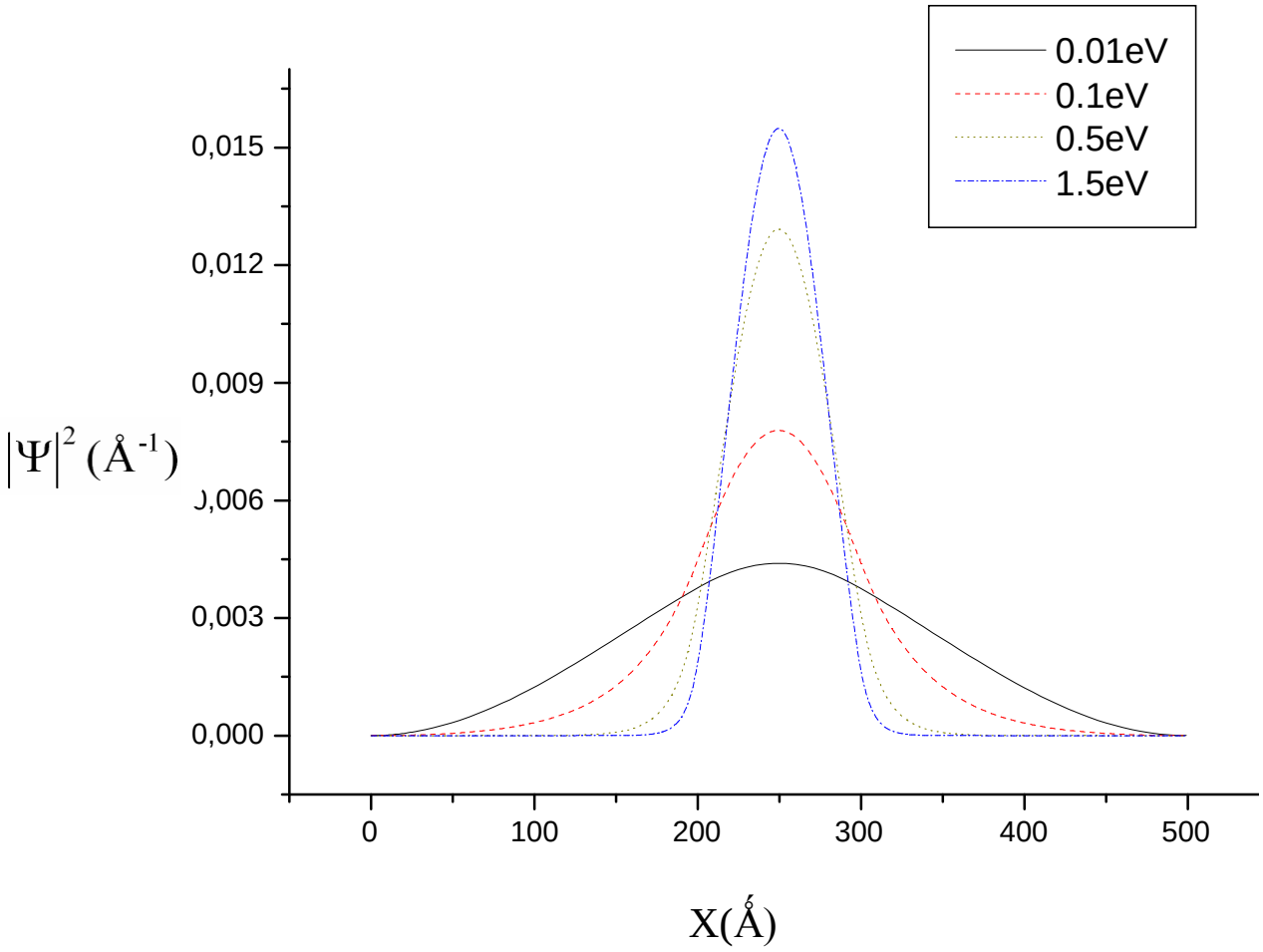


Fig. 3.1 *Distribution de la densité de la fonction d'onde de l'état fondamental, d'un puits quantique de largeur 100Å.*

2) Les énergies des états quantiques du puits, dépendent elles aussi de la hauteur de la barrière, et tendent vers les états d'énergies d'un puits quantique infini, comme illustré dans la figure (3.2).

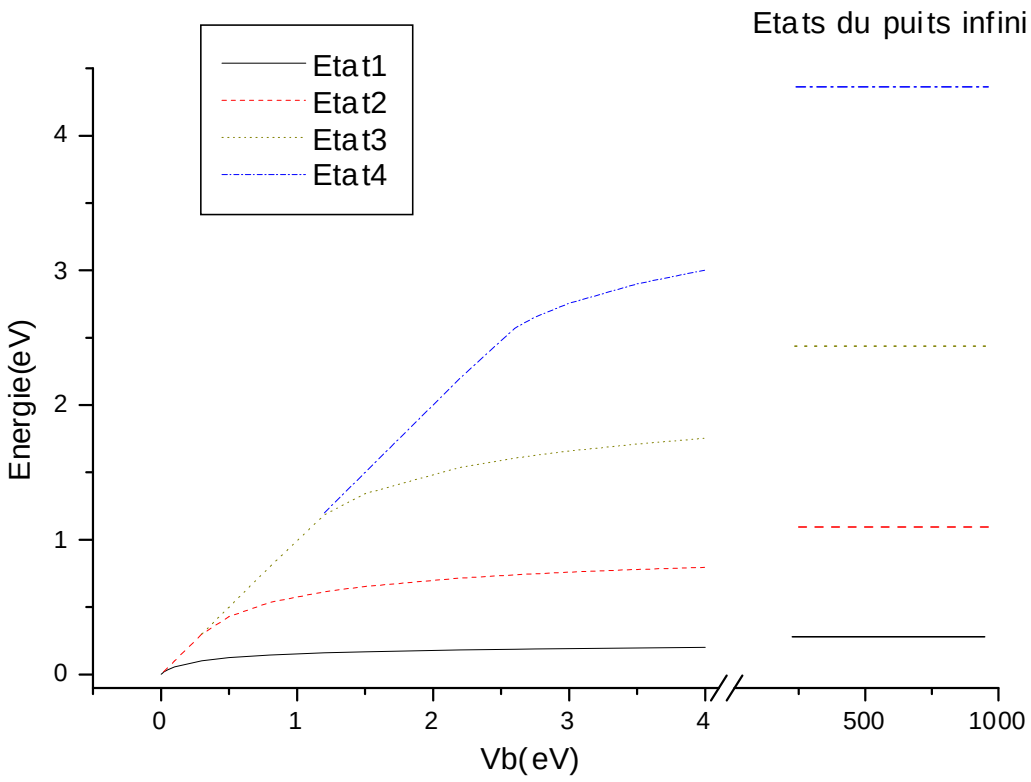


Fig. 3.2 *Evolution de l'énergie des quatre premiers états quantiques, d'un puits quantique de largeur 100Å, en fonction de la hauteur de la barrière Vb.*

3.1.2 Effets de la largeur du puits

Les calculs numériques qu'on a effectués pour des puits quantiques de différentes largeurs, montre l'influence de cette dernière sur les états électroniques du puits.

1) L'électron est confiné à l'intérieur du puits dès que son énergie s'abaisse au dessous de celle de la barrière. Dans la Figure (3.3), on a représenté la densité de la fonction d'onde, du premier état d'un puits quantique d'InSb/CdTe, pour certaines largeurs du puits. La masse effective des électrons dans la barrière CdTe est prise égale à $m^*=0.09m_e$ [4], et la hauteur de la barrière de potentiel du puits est prise égale à Vb=0.605eV [5].

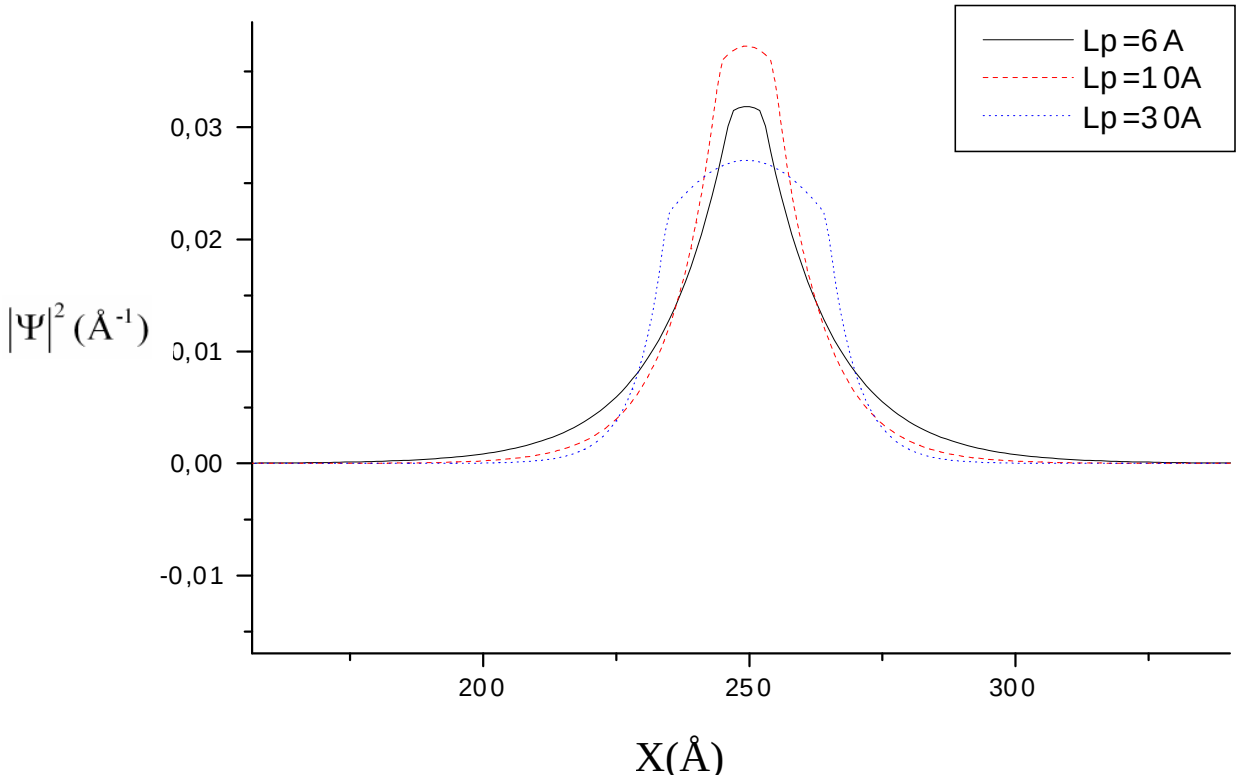


Fig. 3.3 *Distribution de la densité de la fonction d'onde du premier état quantique, d'un puits d'InSb/CdTe, pour plusieurs largeurs Lp*

2) l'équation (II.35) montre que l'énergie de confinement des électrons à l'intérieur d'un puits quantique diminue quand sa largeur, Lp, augmente, par contre le nombre d'états quantique n quant à lui augmente par bond. Cela est bien vérifié dans le cas d'un puits quantique d'InSb/CdTe, voir la Figure (3.4).

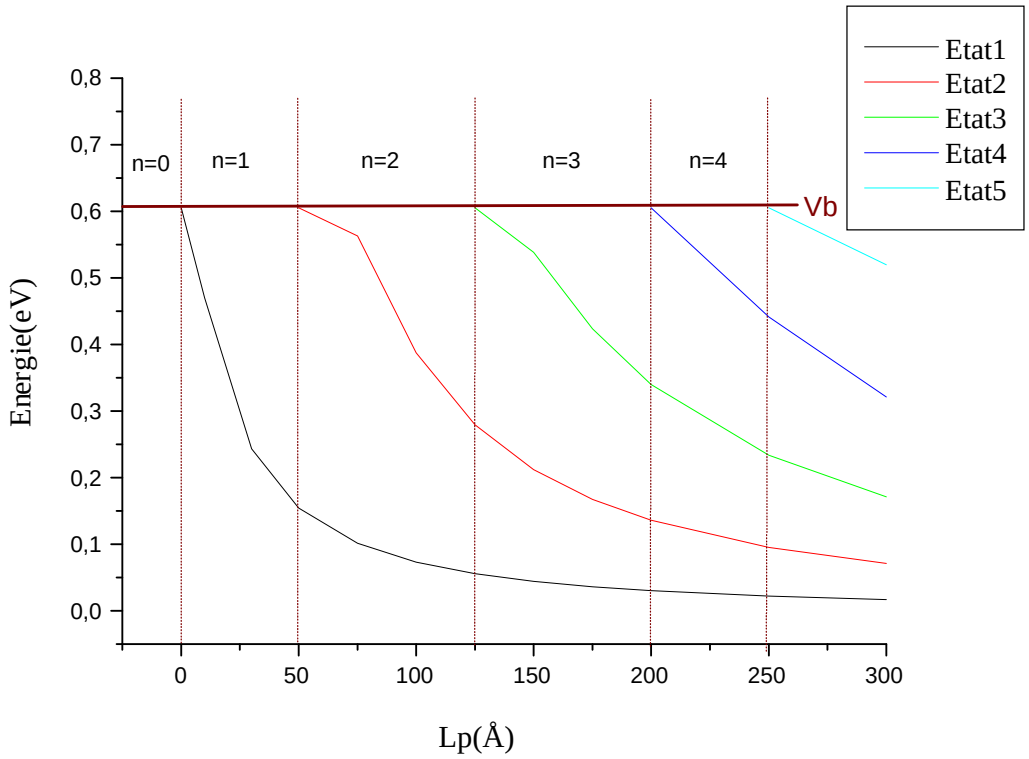


Fig. 3.4 *Evolution de l'énergie des cinq premiers états quantiques, d'un puits d'InSb/CdTe, en fonction de sa largeur Lp, la hauteur de la barrière est de Vb= 0.605ev*

3.1.3 Effets de la masse effective

Prenant toujours l'exemple du puits quantique d'InSb/CdTe, mais cette fois-ci avec la masse effective de la barrière, m_b, comme une variable. Nos calculs montrent que le confinement des électrons dans le puits est moins important, lorsque la masse effective des électrons à l'intérieur du puits est proche de celle de la barrière, Figure (3.5).

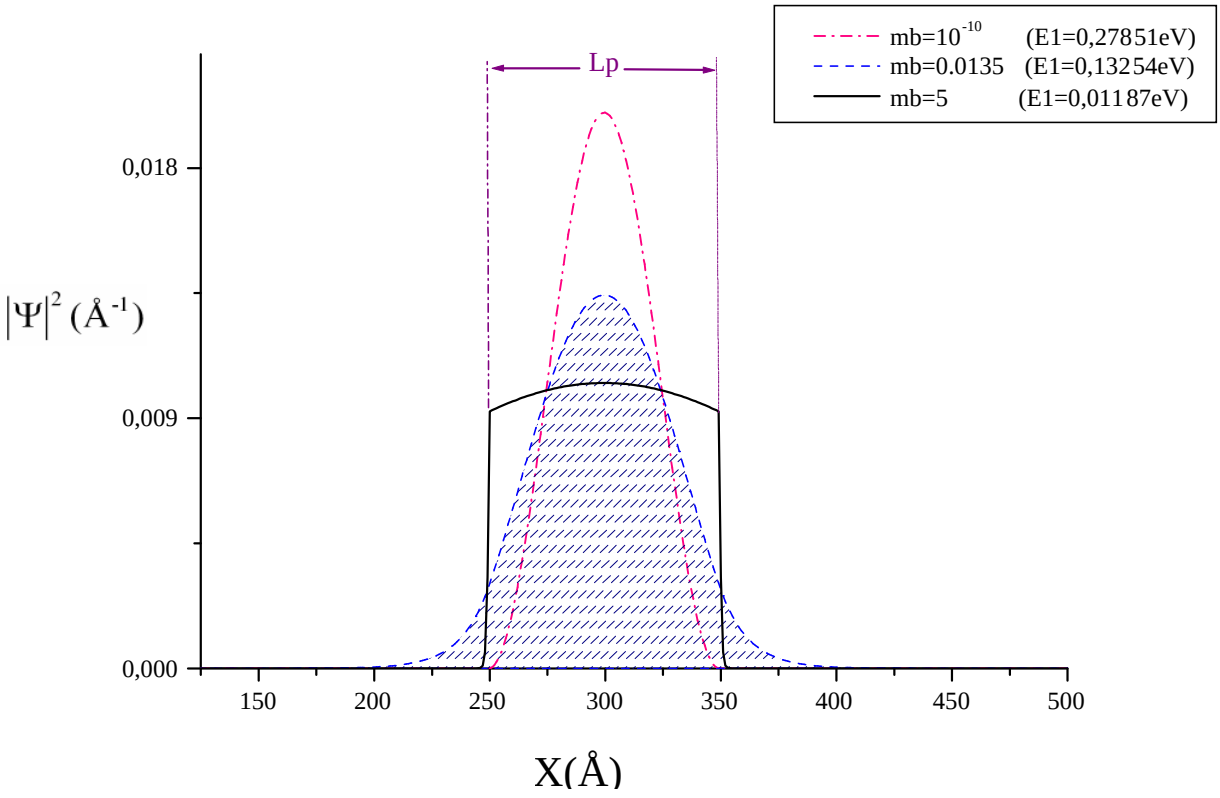


Fig. 3.5 *Distribution de la densité de la fonction d'onde du premier état quantique, d'un puits d'InSb/CdTe, pour chaque valeur de la masse effective de la barrière* m_b.

3.2 Puitsquantique asymétrique

Jusqu'à présent on a traité seulement le cas des puits quantiques ayant des barrières symétriques, mais dans certaines situations l'aspect de la barrière d'un côté du puits est différent de l'autre, cela engendre un puits quantique dit asymétrique. Expérimentalement, cette asymétrie peut être obtenue soit en jouant sur le dopage, soit en variant la concentration des éléments constituants le semiconducteur de la barrière afin d'augmenter ou de diminuer son gap.

Prenant le cas d'un puits de GaAs/$Ga_{0.25}Al_{0.75}As$, de largeur 100Å. La masse effective du GaAs est $m^*=0.067m_e$ et celle du $Ga_{0.25}Al_{0.75}As$ est $m^*=0.129m_e$ [1], et la hauteur de barrière est de 1.582eV. Comme on ne s'intéresse qu'à l'effet de la barrière, on fait changer la hauteur de la barrière d'un seul côté du puits, sans tenir en compte l'effet, que cela engendre sur la valeur de la masse effective.

De toute évidence, on remarque que la partie évanescente de la fonction d'onde, à l'intérieur de la barrière, diminue au fur et à mesure que sa hauteur augmente, Figure (3.6). L'énergie des électrons, quant à elle, augmente rapidement avant de prendre une valeur presque constante, Figure (3.7).

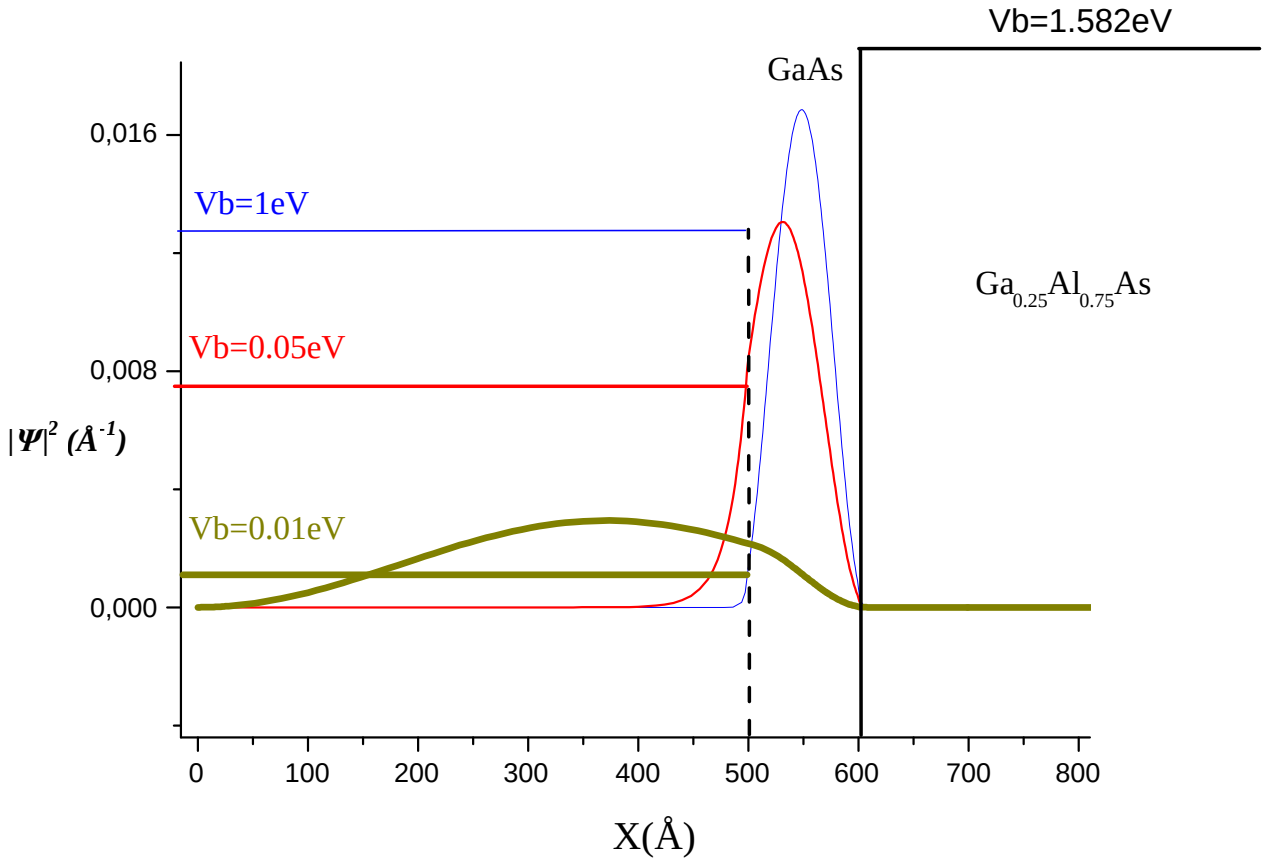


Fig. 3.6 *Distribution de la densité de la fonction d'onde du premier état quantique, d'un puits de GaAs/$Ga_{0.25}Al_{0.75}As$, pour plusieurs valeurs de la barrière Vb.*

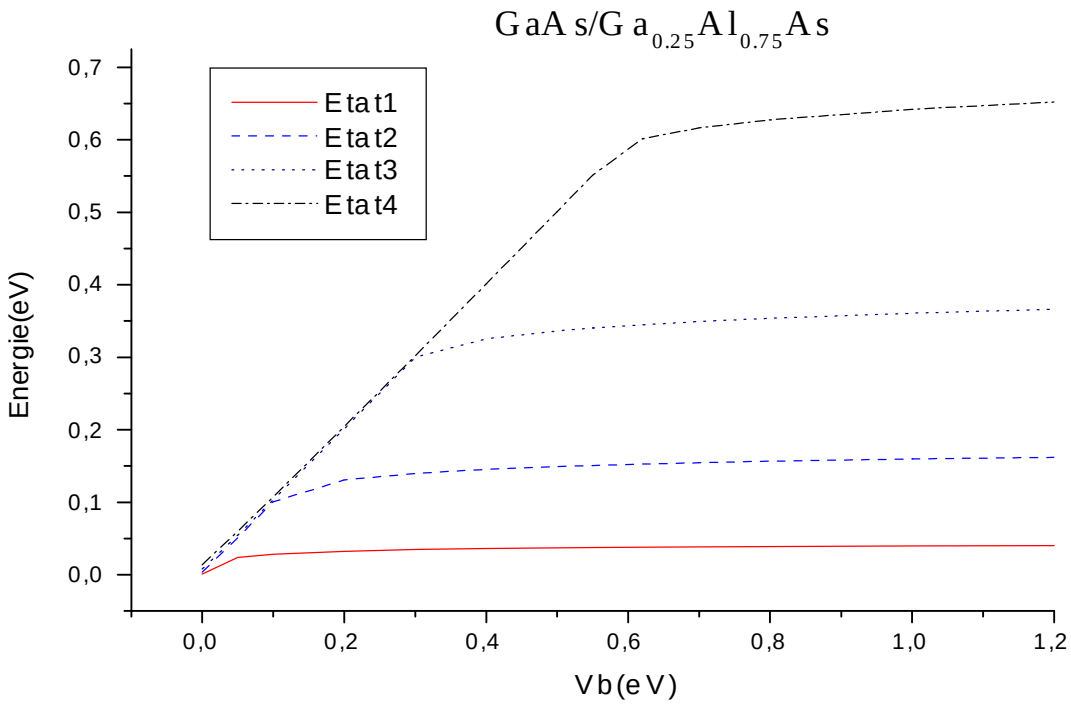


Fig. 3.7 *Evolution de l'énergie des quatre premiers états quantiques, d'un puits de GaAs/$Ga_{0.25}Al_{0.75}$As, en fonction de la hauteur de la barrière Vb.*

3.3 Effetsdu champ électrique sur lespectre et lesf onctions d'ondes

Ajoutons à présent l'effet d'un champ électrique, **F**, appliqué le long de l'axe de croissance du puits quantique, c'est-à-dire l'axe (XX'). On peut représenter l'effet de ce dernier par le potentiel V_p, qui s'écrit:

$$V_p = eF.(x - x_0) \quad \text{(III.1)}$$

Ajoutons ce potentiel à l'équation de Schrödinger, comme suit:

$$[-\frac{\hbar^2}{2m^*}\Delta + V(x) + V_p]\Psi(x) = E\Psi(x) \quad \text{(III.2)}$$

La résolution numérique de cette équation nous a permis d'observer certaines propriétés. On remarque un décalage des fonctions d'ondes, et une augmentation des

valeurs propres, à mesure que le champ électrique appliqué devient grand. Lorsque l'énergie d'un électron dans le puits devient plus grande que celle de la barrière, l'électron sort du puits, voir Figure (3.9).

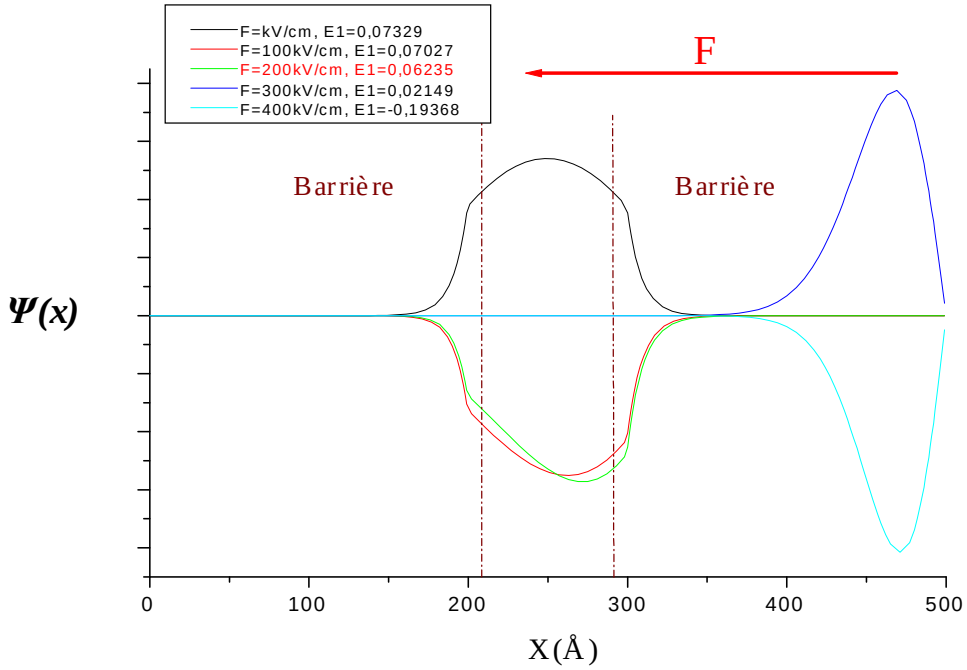


Fig. 3.8 *Distribution des fonctions d'ondes du premier état quantique, d'un puits d'InSb/CdTe de largeur 100Å, pour chaque valeur du champ électrique appliqué.*

Un simple traitement par la théorie des perturbations du terme $V_p(x)$ au deuxième ordre, dans le cas d'un puits quantique symétrique, permet de remarquer une dépendance du potentiel $V_p(x)$ en fonction du champ électrique appliqué, F, c'est à dire [1]:

$$\Delta E \approx \Delta E^{(2)} \propto -F^2 \quad \text{(III.3)}$$

Notez que le terme du premier ordre des perturbations s'annule vu la symétrie du puits quantique, et donc des fonctions d'ondes, c'est à dire :

$$\Delta E^{(1)} = 0 \quad \text{(III.4)}$$

Ce résultat est vérifié par nos calculs numériques pour les faibles valeurs du champ électriques, voir Figure (3.9). On a approximativement :

$$E_1(F) \approx E_1(0) - 0.00025\mathrm{F}^2 \quad \text{(III.5)}$$

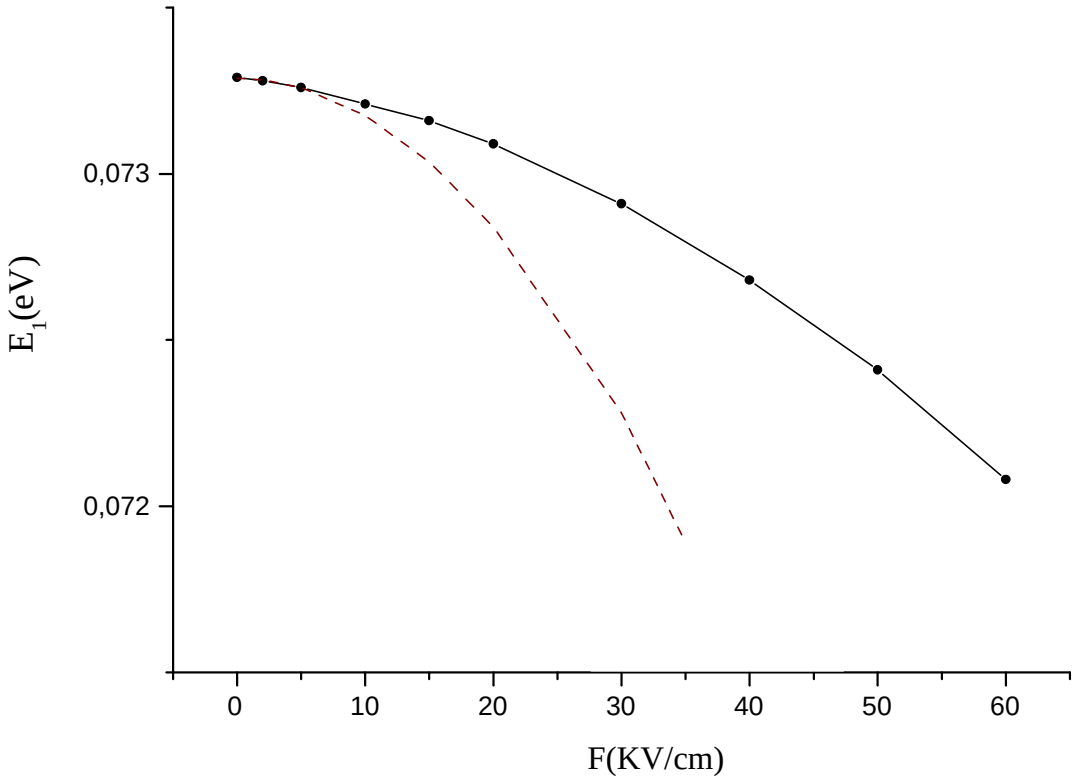


Fig. 3.9 *Evolution de l'énergie du premier état quantique, d'un puits d'InSb/CdTe de largeur 100Å, en fonction du champ électrique appliqué (courbe continue).*

3.4 Les effets d'un champ magnétique

L'Hamiltonien total d'un puits quantique, en présence d'un champ magnétique parallèle et d'un champ électrique perpendiculaire, comme illustré dans la Figure (3.10), s'écrit [2]:

$$H = \left[\frac{\hbar^2}{2}\hat{K}\frac{1}{m^*(x)}\hat{K} + eF_x(x-x_0) + V(x)\right] \times \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + \frac{1}{2}g(x)\mu_B B_0 \sigma_z \quad \text{(III.6)}$$

Où le vecteur d'onde $\hat{K} = (\hat{p} - (-e)\vec{\mathrm{A}}_0)/\hbar$ est écrit en fonction de l'opérateur impulsion $\hat{p} = -i\hbar(\partial_x, \partial_y, \partial_z)$ et du potentiel vecteur $\vec{\mathrm{A}}_0$.

σ_z représente la matrice de Pauli suivant l'axe Z : $\sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$

μ_B est le magnéton de Bohr : $\mu_B = \dfrac{e\hbar}{2m_0}$

g(x) représente le facteur de Landé, qui dépend des matériaux constitutif du puits quantique, donc de la position x.

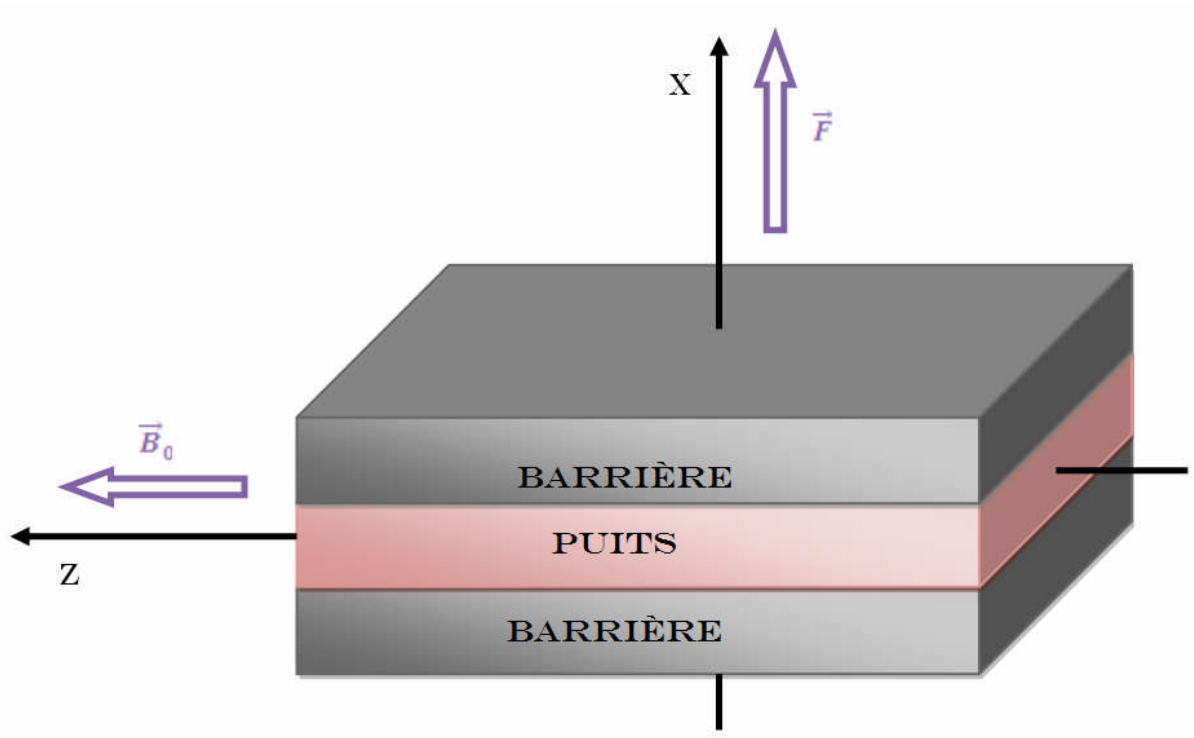


Fig. 3.10

La jauge qu'on utilise est la suivante :

$$\vec{\mathrm{A}}_0 \equiv \mathrm{A}_0(0, B_0 x, 0) \quad \text{(III.7)}$$

Remarquons que les opérateurs $\hat{p}_y$ et $\hat{p}_z$ commutent avec l'opérateur Hamiltonien $\hat{H}$, c'est-à-dire :

$$\left[H, \hat{p}_y\right] = \left[H, \hat{p}_z\right] = 0 \quad \text{(III.8)}$$

Donc $\hat{p}_y$ et $\hat{p}_z$ peuvent être remplacés par des constantes, ce qui permet d'écrire :

$$\Psi(x,y,z) = e^{i(k_y y + k_z z)}\Phi(x) \quad \text{(III.9)}$$

où k_y et k_z sont les constantes du mouvement

Avec toutes ces considérations, (III.7) et (III.8), on aboutit finalement à l'Hamiltonien suivant :

$$H = [-\frac{\hbar^2}{2}\frac{\partial}{\partial x}\frac{1}{m^*(x)}\frac{\partial}{\partial x} + \frac{(\hbar k_z)^2}{2m^*(x)} + \frac{(\hbar k_y + eB_0 x)^2}{2m^*(x)} + V(x) + eF_x(x - x_0)] \times \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$
$$+ \frac{1}{2} g(x)\mu_B B_0 \sigma_z \quad \text{(III.10)}$$

Pour apercevoir l'effet du champ magnétique, on traite le terme dépendant en B_0 dans l'Hamiltonien (III.10), comme perturbation. On néglige aussi la dépendance en x de la masse effective et du facteur de Landé, ainsi que l'effet du champ électrique. La perturbation s'écrit alors comme suit :

$$V_p = \frac{1}{2m^*}(2\hbar k_y eB_0 x + (eB_0 x)^2) + \frac{1}{2} g(x)\mu_B B_0 \sigma_z \quad \text{(III.11)}$$

L'énergie d'un électron dans le puits quantique, au premier ordre de la théorie des perturbations, peut être mise sous forme d'une somme de l'énergie non perturbée avec le terme perturbateur comme suit :

$$E_T = E_n + \frac{(\hbar k_z)^2}{2m^*} + \frac{\hbar^2}{2m^*}k_y^2 + \frac{e^2 B_0^2}{2m^*}\langle x^2 \rangle + \frac{e\hbar B_0}{2m^*}\langle x \rangle k_y + \frac{1}{2} g\mu_B B_0 \sigma_z \quad \text{(III.12)}$$

où $\langle x \rangle = \langle \Psi | \hat{X} | \Psi \rangle$

En posant $K_{shift} = -\frac{eB_0}{\hbar}\langle x \rangle$ et $E_h = \frac{e^2 B_0^2}{2m^*}\left(\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2\right)$, on trouve :

$$E_T = E_n + \frac{(\hbar k_z)^2}{2m^*} + \frac{\hbar^2}{2m^*}(k_y - K_{shift} t)^2 + E_h + \frac{1}{2} g\mu_B B_0 \sigma_z \quad \text{(III.13)}$$

Ainsi l'application d'un champ magnétique parallèle, a translaté la courbe de dispersion d'un K_{shift} dans l'espace réciproque et l'a élevé d'une valeur constante égale à E_h. En effet, nos calculs numériques donnent ce résultat, comme dans le cas de l'InSb/CdTe, voir Figure (3.11).

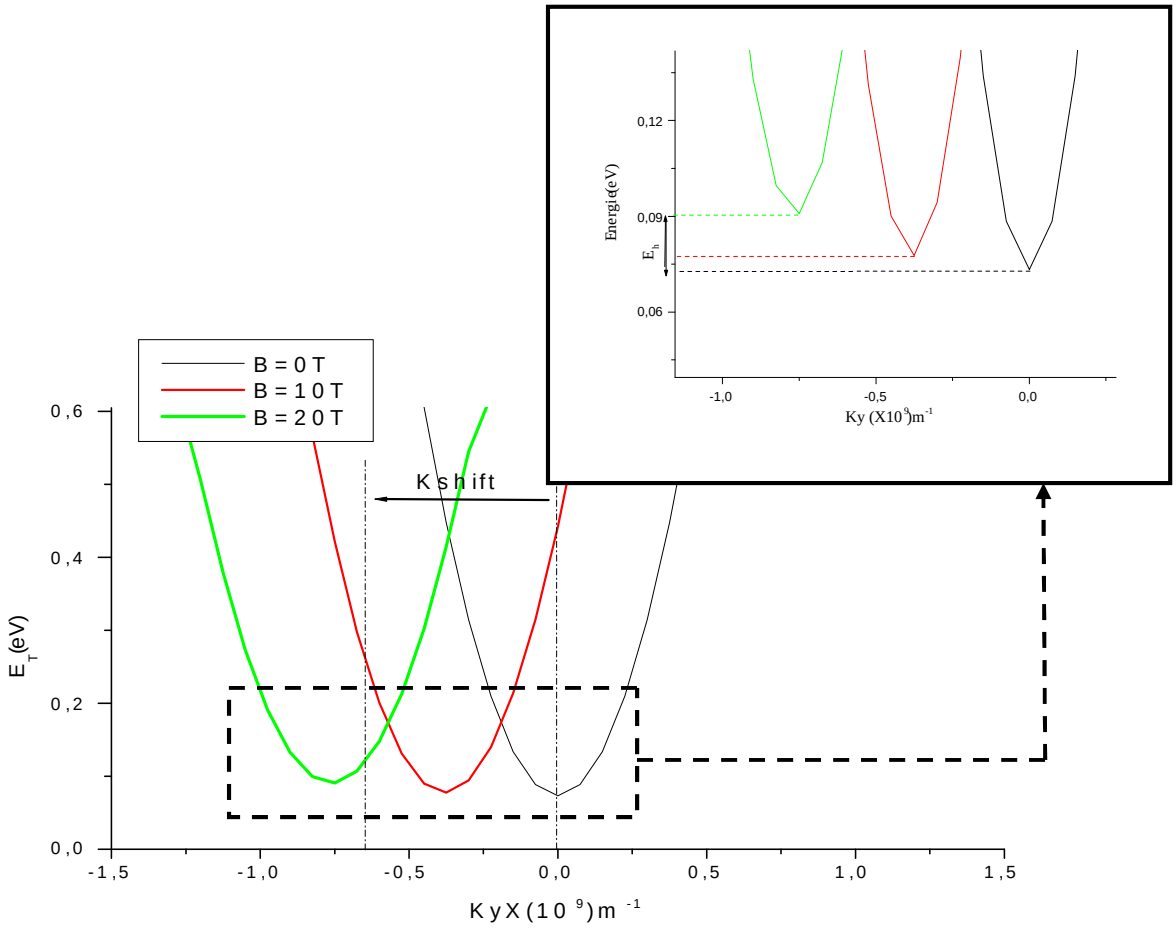


Fig. 3.11 *Effet d'un champ magnétique parallèle sur la courbe de dispersion d'un puits quantique d'InSb/CdTe de largeur 100Å (en négligeant l'effet Zeeman).*

D'autre part, le terme $g(x)\mu_B B_0 \sigma_z / 2$ de l'énergie E_T, proportionnel au champ magnétique appliqué B_0, est responsable de la levée de dégénérescence de spin, appelé effet Zeeman [6]. La courbe de dispersion se scinde donc en deux parties, une pour chaque orientation de spin. Dans la Figure (3.12), on observe cet effet dans le cas de l'InSb/CdTe. Le facteur g de l'InSb est pris égal à -50.6 [7], et celui du CdTe est pris égal à -1.653 [8]. Le champ magnétique appliqué est de 20T.

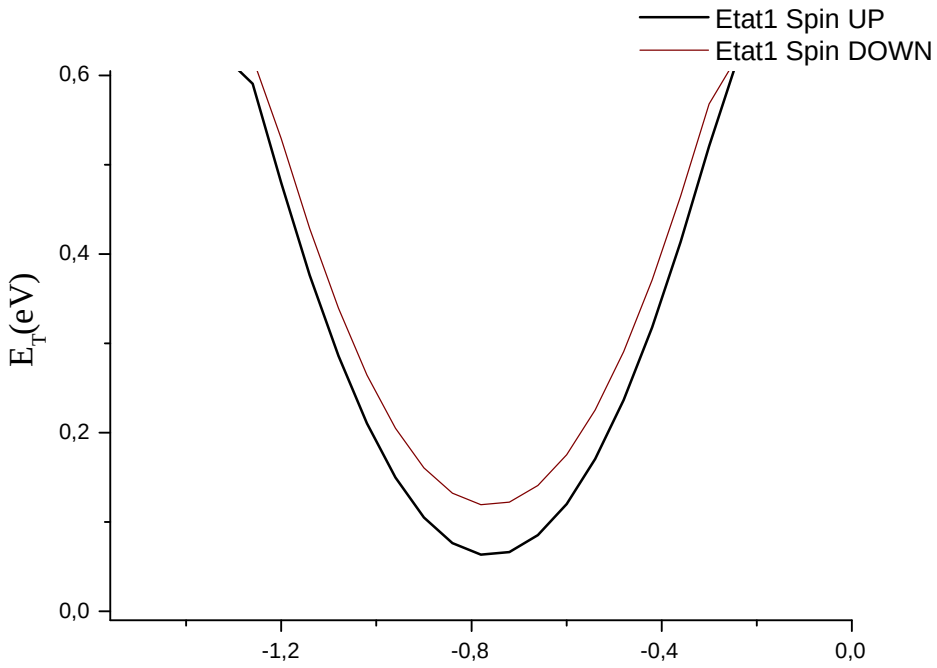


Fig. 3.12 *Levée de dégénérescence due à l'effet Zeeman dans le premier état quantique d'un puits d'InSb/CdTe de largeur 100Å.*

RÉFÉRENCES :

[1] Paul Harrison, Quantum well, wires and Dots (Wiley, New York, 2000).

[2] C.C. Tannoudji, B. Diu et F. Laloe, Mécanique quantique (Herman, Paris, 1977).

[3] J.R. Meyer, L.R. Ram-Mohan, et I. Vurgaftman, Band parameters for III-V compound semiconductors and their alloys, J. Appl. Phys. **89**, *P 5815* (2001).

[4] Henry Mathieu : Physique des semiconducteurs et des composants électronique, 4e édition (Masson, Paris, 1998).

[5] R. G. Van Welzenis, E. J. D. Vredenbregt, Band bending at the InSb-CdTe interface, Solid State Electron. **28**, *P1057* (1985).

[6] D. Blokhintsev, Principe de Mécanique Quantique (Mir, Moscou, 1981).

[7] Rogerio de Sousa et S. Das Sarm, Gate control spin dynamics in III.V semiconductor quantum dots, Phy. Rev. **B68**, *P 155330* (2003).

[8] M. Oestreich, S. Hallstein, A. P. Heberle, K. Eberl, E. Bauser, et W. W. Rühle, Temperature and density dependence of the electron Landé g factor in semiconductors, Phy. Rev. **B53**, *P 7911* (1996).

CHAPITRE IV :

Les transitionsinte rsousbandes

Il existe deux types de transition, les transitions interbandes, où l'électron passe de la bande de valence à la bande de conduction, et les transitions intrabandes, où l'électron passe d'un état à un autre au sein de la même bande d'énergie.

Les transitions intersousbandes sont un cas particulier des transitions intrabandes. Elles ont lieu entre les sous bandes formées par un puits quantique. Dans ce qui suit on va s'intéresser seulement aux transitions intersousbandes ayant lieu dans la bande de conduction.

4.1 L'Hamiltonien du système

Soit un champ magnétique parallèle $\mathbf{B_0}$, appliqué sur un puits quantique comme illustré dans la figure (3.10).

L'Hamiltonien total d'un électron dans ce puits quantique, en présence de ces deux champs, s'écrit:

$$H = \left[\frac{\hbar^2}{2} \hat{K} \frac{1}{m^*(x)} \hat{K} + V(x) \right] \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + \frac{1}{2} g(x) \mu_B B_0 \sigma_z \quad \text{(IV.1)}$$

Où le vecteur d'onde $\hat{K}$ est écrit en fonction de l'opérateur impulsion $\hat{p}$ et du potentiel vecteur $\vec{A}_0$ comme suit :

$$\hat{K} = (\hat{p} - (-e)\vec{A}_0)/\hbar \quad \text{(IV.2)}$$

Remarquons que les opérateurs $\hat{p}_y$ et $\hat{p}_z$ commutent avec l'Hamiltonien $\hat{H}$, donc ils peuvent être remplacés par des constantes:

$$\left[H, \hat{p}_y\right] = \left[H, \hat{p}_z\right] = 0 \quad \text{(IV.3)}$$

d'où,

$$\Psi(x,y,z) = \frac{1}{\sqrt{S_{//}}} e^{i(k_y y + k_z z)} \Phi(x) \quad \text{(IV.4)}$$

où k_y et k_z sont des constantes du mouvement et $S_{//}$ la surface parallèle du puits quantique.

En remplaçant cette forme de solution dans l'équation (IV.1) et en utilisant la jauge de Landau :

$$\vec{\mathrm{A}}_0 \equiv \mathrm{A}_0(0, B_0 x, 0) \quad \text{(IV.5)}$$

L'Hamiltonien total s'écrit :

$$H = [-\frac{\hbar^2}{2}\frac{\partial}{\partial x}\frac{1}{m^*(x)}\frac{\partial}{\partial x} + \frac{(\hbar k_z)^2}{2m^*(x)} + \frac{(\hbar k_y + eB_0 x)^2}{2m^*(x)} + V(x)] \times \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + \frac{1}{2} g(x) \mu_B B_0 \sigma_z \quad \text{(IV.6)}$$

Pour trouver les valeurs et les vecteurs propres de l'Hamiltonien considéré, nous utilisons la subroutine DSTEQR de la bibliothèque Lapack. La normalisation des fonctions d'ondes, quant à elle, est effectuée grâce la méthode numérique d'intégration Simpson d'ordre 3.

4.2 Effets d'une perturbationélectromagnétique

Dans ce qui suit, on rajoute dans l'Hamiltonien (IV.1) l'effet d'une onde électromagnétique, représentée par le potentiel vecteur $\vec{A}$, tel que $\vec{B} = \nabla \times \vec{A}$ et $\vec{E} = -\frac{\partial \vec{A}}{\partial t}$. L'Hamiltonien total s'écrit alors sous la forme :

$$H + H_I = \left[(\hbar \hat{K} + e\vec{A}) \frac{1}{2m^*(x)} (\hbar \hat{K} + e\vec{A}) + V(x) \right] \times \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + \frac{1}{2} g(x)\, \mu_B B_0 \sigma_z + \frac{1}{2} g(x)\, \mu_B \vec{B} \cdot \vec{\sigma} \quad \text{(IV.7)}$$

Où H_I désigne la perturbation :

$$H_I = \left[\frac{e\hbar}{2} \left(\hat{K}.\frac{\vec{A}}{m^*(x)} + \frac{\vec{A}}{m^*(x)}.\hat{K} \right) + \frac{e^2 \vec{A}^2}{2\, m^*(x)} \right] \times \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + \frac{1}{2} g(x) \mu_B \vec{B} \cdot \vec{\sigma} \quad \text{(IV.8)}$$

Regardons de près l'effet de chaque terme de la perturbation H_I :

- Le terme $\frac{e\hbar}{2} \left(\hat{K}.\frac{\vec{A}}{m^*(x)} + \frac{\vec{A}}{m^*(x)}.\hat{K} \right)$, est responsable de l'absorption par résonance cyclotron, dans le cas de la configuration perpendiculaire (la polarisation de l'onde est perpendiculaire au champ magnétique $\vec{B}_0$) [1].
- Le terme $\frac{1}{2} g(x) \mu_B \vec{B} \cdot \vec{\sigma}$ est responsable de la résonance de spin.
- A la limite des faibles intensités, correspondant aux sources lumineuses usuelles, l'intensité des ondes électromagnétiques est suffisamment faible pour pouvoir négliger le terme qui dépend quadratiquement de A, c'est-à-dire $\frac{e^2 \vec{A}^2}{2m^*(x)}$.

Sachant que:

$$\vec{E} = -\frac{\partial \vec{A}}{\partial t} \text{ et } \vec{\nabla} \times \vec{E} = \frac{-\partial \vec{B}}{\partial t} \quad \text{(IV.9)}$$

On trouve, pour une onde électromagnétique plane et monochromatique, que

$$\vec{A} = \frac{\vec{E}}{i\omega} \text{ et } \vec{B} = \frac{\vec{n} \times \vec{E}}{c} \quad \text{(IV.10)}$$

En remplaçant ces expressions dans (IV.8), on trouve :

$$H_I = \left[\frac{e\hbar}{2i\omega} \left(\hat{K}.\frac{\vec{E}}{m^*(x)} + \frac{\vec{E}}{m^*(x)}.\hat{K} \right) \right] \times \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + \frac{1}{2c} g(x) \mu_B (\vec{n} \times \vec{E}) \cdot \vec{\sigma} \quad \text{(IV.11)}$$

4.3 Règle d'or deFermi:

Soit une perturbation de la forme :

$$\tilde{U}(t) = \theta(t).U(t) \quad \text{(IV.12)}$$

où $\theta(t)$ est la fonction de Heaviside et U(t) sous la forme $U(t) = U_0 e^{-i\omega t}$

La règle d'or de Fermi, stipule que la probabilité de transition par unité de temps, W_{fi} d'un état initial $|i\rangle$ à l'état final $|f\rangle$, s'écrit à la limite de t grand sous la forme :

$$W_{if} = \frac{2\pi}{\hbar} |U_{0fi}|^2 \delta(\varepsilon_{fi} - \varepsilon) \quad \text{(IV.13)}$$

où $\varepsilon_{fi} = \hbar\omega_{fi}$, $\varepsilon = \hbar\omega$ et $|U_{0fi}| = |\langle \Psi_f | U_0 | \Psi_i \rangle|$

4.4 Probabilité detransition:

Dans ce qui suit on présente un modèle pour calculer numériquement les transitions optiques, et cela sans tenir en compte l'effet de l'onde électromagnétique sur le spectre d'énergie et les fonctions d'ondes, c'est-à-dire on garde les vecteurs et les valeurs propres donnés par l'Hamiltonien non perturbé (IV.1). On néglige aussi,

pour l'instant, le terme responsable de la résonance de spin dans l'équation (IV.11). On prend en compte seulement la perturbation suivante :

$$\hat{Vp} = \frac{e\hbar}{2i\omega}\left(\hat{K}.\frac{\vec{E}}{m^*(x)} + \frac{\vec{E}}{m^*(x)}.\hat{K} \right) \text{(IV.14)}$$

En utilisant la jauge précédente, $A_0(0, B_0 x, 0)$ et en remplaçant l'opérateur $\hat{K}$ par son expression, c'est-à-dire $-i\vec{\partial} + e\vec{A}_0 / \hbar$, on trouve :

$$\hat{Vp} = \frac{e}{2i\omega}\left(\left(\frac{-2i\hbar\vec{E}}{m^*(x)}.\vec{\nabla} - i\hbar\vec{\nabla}.\left(\frac{\vec{E}}{m^*(x)} \right) \right) + 2eB_0 x \frac{E_y}{m^*(x)} \right) \text{(IV.15)}$$

Prenant le cas d'une onde électromagnétique polarisée rectilignement. Le champ **E** s'écrit sous la forme :

$$\vec{E} = E_0(e^{i(\vec{Q}.\vec{r}-\omega t)} - e^{-i(\vec{Q}.\vec{r}-\omega t)})\vec{e} \quad \text{(IV.16)}$$

où **Q** représente le vecteur d'onde et $\vec{e}$ le vecteur unitaire de polarisation.

Développons l'expression $e^{\pm i\vec{Q}.\vec{r}}$, de l'équation (IV.23), en puissance de $\vec{Q}.\vec{r}$:

$$e^{\pm i\vec{Q}.\vec{r}} = 1 \pm i\vec{Q}.\vec{r} - \frac{1}{2}(\vec{Q}.\vec{r})^2 + ... \text{ (IV.17)}$$

Tant que la variable **r** est de l'ordre d'une centaine d'Angstrom, et sachant que la longueur d'onde est supérieure au micromètre, on a comme plus haut :

$$\vec{Q}.\vec{r} = \frac{2\pi r}{\lambda} << 1 \text{ (IV.18)}$$

On obtient ainsi une bonne approximation de $\hat{Vp}$ en ne gardant que le premier terme du développement (IV.17). Cette approximation est dite « approximation du dipôle électrique ». Il vient compte tenu de (IV.16) :

$$\hat{V}p = \frac{eE_0}{2i\omega}\left(\left(\frac{-2i\hbar\vec{e}}{m^*(x)}.\vec{\nabla} - i\hbar e_x\partial_x\left(\frac{1}{m^*(x)}\right)\right) + 2eB_0 x\frac{e_y}{m^*(x)}\right) \quad \text{(IV.19)}$$

La probabilité de transition par unité de temps, s'écrit :

$$W_{fi} = \frac{2\pi}{\hbar}\left|\left\langle \Psi_f \left| V_p \right| \Psi_i \right\rangle\right|^2 \delta(E_f - E_i - \hbar\omega) \quad \text{(IV.20)}$$

Sachant que les vecteurs propres de l'Hamiltonien (IV.1) sont de la forme (IV.4), on obtient après substitution :

$$W_{fi} = \frac{2\pi}{S_{//}\hbar}\left(\frac{eE_0}{2\omega}\right)^2 \delta(E_f - E_i - \hbar\omega)\int\left[e^{i((k_y^i - k_y^f)y + (k_z^i - k_z^f)z)}\,dydz\right]\times$$
$$\left|\left\langle \Phi_f \left|\left(\left(\frac{-2i\hbar}{m^*(x)}(e_x\partial_x + ie_y k_y + ie_z k_z) - i\hbar e_x\partial_x\left(\frac{1}{m^*(x)}\right)\right) + 2eB_0 x\,\frac{e_y}{m^*(x)}\right)\right| \Phi_i \right\rangle\right|^2 \quad \text{(IV.21)}$$

L'intégrale dans l'équation (IV.21) est égale à :

$$\int e^{i((k_y^i - k_y^f)y + (k_z^i - k_z^f)y)}dydz = S_{//}\delta_{k_y^i, k_y^f}\delta_{k_z^i, k_z^f} \quad \text{(IV.22)}$$

où δ représente le symbole de Kronecker.

La valeur de cette intégrale réduit ainsi les transitions aux états ayant le même vecteur d'onde k par le biais du symbole de Kronecker (transitions directes).

Aussi, le terme $(ie_y k_y + ie_z k_z)$ de l'équation (IV.21) disparaît vu l'orthogonalité des fonctions d'ondes $\Phi_i(x)$ et $\Phi_f(x)$. La probabilité de transition devient :

$$W_{fi} = \frac{2\pi}{\hbar}\left(\frac{eE_0}{\omega}\right)^2 \delta(E_f - E_i - \hbar\omega)\delta_{k_y^i, k_y^f}\delta_{k_z^i, k_z^f}\left|M_{fi}\right|^2 \quad \text{(IV.23)}$$

Où l'élément de matrice M_{fi} est égale à :

$$M_{fi} = \left\langle \Phi_f \left| \left(\left(\frac{\hbar e_x}{m^*(x)} \partial_x + \frac{\hbar}{2} e_x \partial_x \left(\frac{1}{m^*(x)} \right) \right) + ieB_0 x \frac{e_y}{m^*(x)} \right) \right| \Phi_i \right\rangle \text{(IV.24)}$$

Remarquons bien en absence de champ magnétique, que la probabilité de transitions est beaucoup plus importante lorsque l'onde électromagnétique est polarisée suivant l'axe X et qu'elle est nulle lorsqu'elle est polarisée suivant l'axe Z; le puits devient transparent. Lorsque le rayonnement est polarisé suivant l'axe Y, le puits quantique n'intervient plus dans l'absorption. Par conséquent, on va considérer seulement le cas où l'onde est polarisée suivant l'axe X, donc qui se propage dans le plan parallèle à l'axe de croissance du puits quantique. La probabilité (IV.24) devient :

$$M_{fi} = \left\langle \Phi_f \left| \left(\frac{\hbar}{m^*(x)} \partial_x + \frac{\hbar}{2} \partial_x \left(\frac{1}{m^*(x)} \right) \right) \right| \Phi_i \right\rangle \text{(IV.25)}$$

Le terme $\partial_x \left(m^{*-1}(x) \right)$ de (IV.24) varie seulement à l'interface du puits quantique, où la masse effective des électrons dans la barrière et à l'intérieur du puits est différente. Son influence, par conséquent, s'abaisse lorsque la largeur du puits quantique augmente (Voir les courbes T0 et T1 de la Figure (4.1) dans le cas de l'InSb/CdTe, où la largeur de la barrière est de 500Å, et le pas d'intégration est de 1Å). Remarquons que les deux courbes passent par un pic (Pic1 et Pic2 respectivement), avant de converger toute les deux vers celle du puits quantique infini.

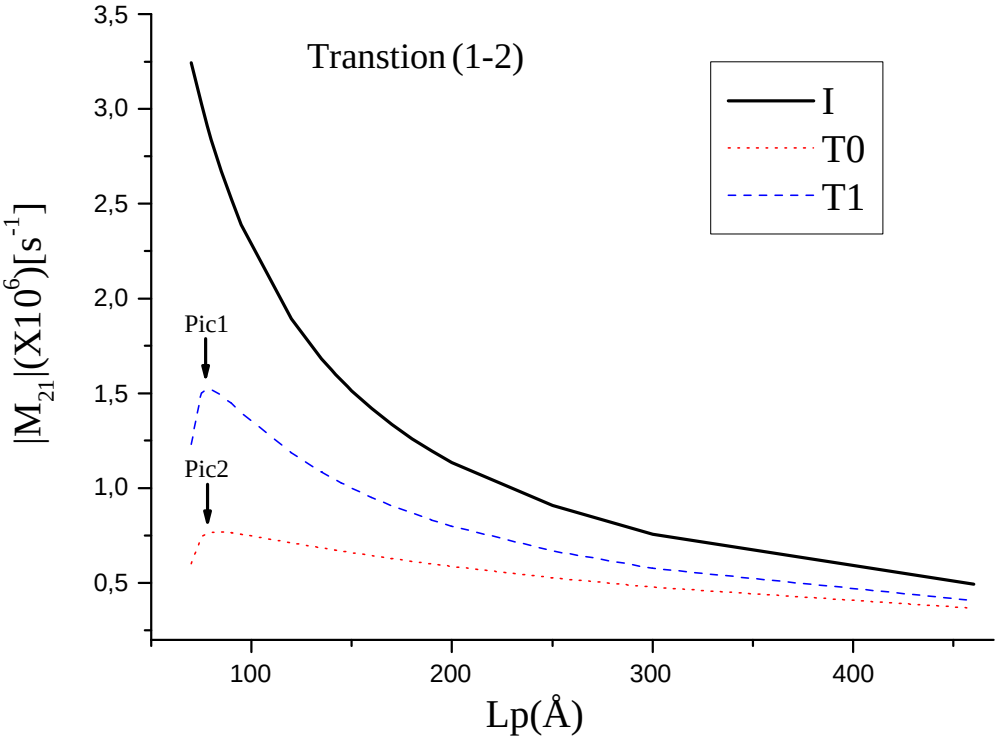


Fig. 4.1 *Evolution de* M_{21} *en fonction de la largeur du puits Lp :*

Courbe I : *Puits quantique infini. La masse effective des électrons est* $0.0135m_e$
Courbe T1 : *Puits quantique d'InSb/CdTe*
Courbe T0 : *Puits quantique d'InSb/CdTe (sans prendre en compte le terme* $\partial_x\left(m^{*-1}(x)\right)$ *de l'équation (IV.24))*

En pratique les transitions entre les états ayant un vecteur d'onde k différents pourraient avoir lieu par l'absorption simultanée d'un photon et d'un phonon. On a ainsi des transitions indirectes, Fig. (4.2).

Sachant que l'impulsion du photon est égale à ħQ, la conservation de la quantité de mouvement permet d'écrire :

$$\vec{k}_f = \vec{k}_i + \vec{Q} \quad \text{(IV.26)}$$

où $\vec{k}_i$ et $\vec{k}_f$ représentent la quantité de mouvement de l'électron à l'état initial et final.

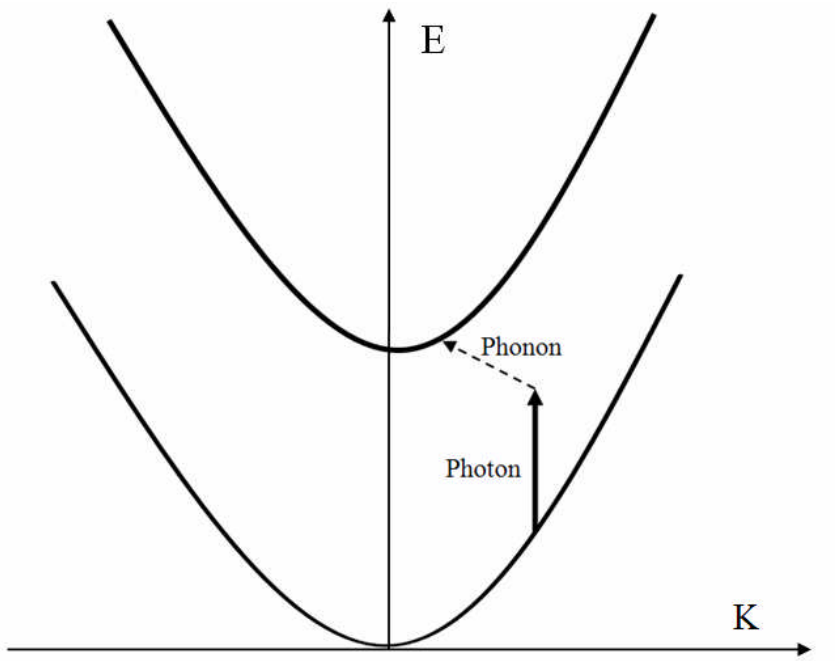


Fig. 4.2 *Transition indirecte*

La différence d'énergie entre deux sousbandes est toujours inférieure à 1eV, donc Q est inférieur à 10^7 m^{-1}. Comme la largeur de la zone de Brillouin est de l'ordre de $10^{10}m^{-1}$, on déduit que la valeur de Q est infime à l'échelle de cette zone. Par conséquent, ce type de transitions peut être négligé, c'est-à-dire on peut prendre :

$$\vec{k}_f \approx \vec{k}_i \quad \text{(IV.27)}$$

4.5 Règles desélections :

Prenant le cas d'un électron dans un puits quantique infini, où la masse effective ne dépend plus de x. L'élément de matrice (IV.25) devient :

$$M_{fi}^{0} = \left\langle \Phi_f \left| \left(\frac{\hbar}{m^*(x)} \partial_x \right) \right| \Phi_i \right\rangle \quad \text{(IV.28)}$$

Étant donné que les fonctions d'ondes, dans un puits quantique infini, sont connues et données par :

$$\Phi(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right) \quad \text{(IV.29)}$$

On peut ainsi calculer analytiquement l'élément de matrice M_{fi}^{0} en remplaçant (IV.29) dans (IV.28). On obtient ainsi après intégration pour un puits de largeur L:

$$M_{fi}^{0} = \frac{m_e}{m^*}\left[\frac{i\left(-f + i\sin(i\pi)\sin(f\pi) + f\cos(i\pi)\cos(f\pi)\right)}{i^2 + f^2}\right]\frac{23153.5\times10^{-8}}{L} \quad \text{(IV.30)}$$

où i et f représentent les indices des états initial et final.

Remarquons le fait que : M_{fi}^{0} est inversement proportionnel à la masse effective, et la largeur du puits L. Voir la courbe I de la Figure (4.1).

Dans le tableau (IV.1), se trouve une comparaison entre nos résultats analytiques, et ceux obtenus numériquement avec un pas d'intégration de 0.1Å :

Tableau IV.1 : *Valeurs de* M_{fi}^{0} *pour les cinq premiers états d'un puits quantique infini de largeur égale à 100Å.*

Etat initial « i »	Etat Final « f »	$\left\|M_{fi}^{0}\right\|$ [m.s^{-1}] numérique	$\left\|M_{fi}^{0}\right\|$ [m.s^{-1}] analytique
1	1	8,79963E-13	0
1	2	30839,91	30871,33
1	3	2,03038E-12	0
1	4	12335,12	12348,53
1	5	7,29194E-13	0
2	2	2,90079E-12	0
2	3	55510,93	55568,4
2	4	6,33715E-12	0
2	5	22026,12	22050,95
3	3	2,49623E-12	0
3	4	79299,77	79383,42
3	5	30835,25	0
4	4	7,11431E-13	0
4	5	102793,6	102904,44
5	5	2,31104E-12	0

Remarquons un autre effet important : lorsque la différence d'indices des sous bandes (f-i) est paire, la transition est nulle. Cela vient du fait que les fonctions d'ondes sont soient paires, lorsque l'indice de la sous bande est impair, soit impaires, lorsque l'indice de la sous bande est paire, voir Tableau (IV.1). Comme l'opérateur impulsion p, présent dans (IV.28), est impair, il change par conséquent la parité des fonctions d'ondes, et on n'a de transition que lorsque l'une des deux fonctions d'onde est paire et l'autre impaire. Rappelons que la parité d'un système est définie positive si sa fonction d'onde ne change pas de signe par une symétrie de réflexion (la fonction est dite paire), et négative dans le cas inverse (la fonction est dite impaire).

Les règles de sélections, citées ci-dessus, s'applique aussi à tous les puits quantiques symétriques, où les fonctions d'ondes gardent une symétrie paire ou impaire, et cela en absences d'un champ magnétique appliqué. Voici un exemple, Tableau (IV.2), dans le cas de l'InSb/CdTe ayant une largeur de 230Å, donc 4 sousbandes (Voir Figure 3.4) :

Tableau IV.2 : *Valeurs de* M_{fi}^{0} *et de* M_{fi} *pour les quatre premiers états d'un puits quantique d'InSb/CdTe de largeur égale à 230Å.*

Etat initial « i »	Etat Final « f »	$\left\|M_{fi}^{0}\right\|$ [m.s^{-1}]	$\left\|M_{fi}\right\|$ [m.s^{-1}]
1	1	2,34208E-11	2,04504E-12
1	2	549379,9	714680
1	3	1,15833E-11	1,75205E-11
1	4	134538	353179,5
2	2	3,9716E-11	2,8802E-11
2	3	1,00591E6	1,3576E6
2	4	1,01281E-9	1,12923E-9
3	3	1,96585E-11	9,44533E-12
3	4	1,52219E6	1,98744E6
4	4	2,7069E-7	2,70784E-7

4.6 La force d'oscillateur :

Pour étudier minutieusement les transitions intersousbandes, spécialement celles qui incluent le niveau fondamental, on fait introduire une nouvelle grandeur : la force d'oscillateur.

4.6.1 Définition de la force d'oscillateur et influence de la largeur du puits quantique :

Remarquons qu'en utilisant l'Hamiltonien total du puits quantique (IV.6), l'élément de matrice (IV.25) peut se mettre sous la forme :

$$M_{fi} = \frac{1}{\hbar}\left\langle \Phi_f \left| [x, H] \right| \Phi_i \right\rangle \quad \text{(IV.31)}$$

d'où,

$$M_{fi} = \frac{E_i - E_f}{\hbar}\left\langle \Phi_f \left| x \right| \Phi_i \right\rangle \quad \text{(IV.32)}$$

Afin de comparer l'efficacité des différentes transitions, on fait introduire à la place de la probabilité de transition, un nombre sans dimension : la force d`oscillateur f_{fi}. Elle est définie comme suit [3]:

$$f_{fi} = \frac{2m^*(E_f - E_i)\left|\left\langle \Phi_f \left| x \right| \Phi_i \right\rangle\right|^2}{\hbar^2} \quad \text{(IV.33)}$$

Il existe une autre forme de la force d'oscillateur donnée par [4]:

$$f_{fi} = \left\langle \Phi_i \left| \partial_x \right| \Phi_f \right\rangle \left\langle \Phi_f \left| x \right| \Phi_i \right\rangle - \left\langle \Phi_i \left| x \right| \Phi_f \right\rangle \left\langle \Phi_f \left| \partial_x \right| \Phi_i \right\rangle \quad \text{(IV.34)}$$

Comme les fonctions d'ondes données par l'Hamiltonien (IV.6) sont réelles, on peut écrire la force d`oscillateur sous la forme:

$$f_{fi} = \langle \Phi_f | x | \Phi_i \rangle \left(\langle \Phi_i | \partial_x | \Phi_f \rangle - \langle \Phi_f | \partial_x | \Phi_i \rangle \right) \quad \text{(IV.35)}$$

Un simple calcul, à partir de (IV.35), permet de retrouver la forme (IV.33) [3]. La définition de la force d'oscillateur donnée ci-dessus n'est valable que si on prend la masse effective des électrons à l'intérieur de la barrière et à l'intérieur du puits égaux. Nous traiterons seulement ce cas.

Les coefficients f_{fi} jouissent des propriétés suivantes :

1- Ils sont positifs si $|\Phi_i\rangle$ est l'état Fondamental.

2- Ils satisfont la règle de sommation suivante dite de Reiche-Thomas-Kuhn :

$$\sum_f f_{fi} = 1 \quad \text{(IV.36)}$$

Dans le cas de la transition du premier au deuxième état dans un puits quantique infini, on trouve analytiquement en utilisant l'équation (IV.30) :

$$f_{21} = \frac{256}{27\pi^2} \approx 0.9607 \quad \text{(IV.37)}$$

La transition inverse possède exactement la même valeur mais avec un signe opposé. Remarquons que la transition (1-2) est la plus importante parmi celles de l'état fondamental. Une chose importante, la force d'oscillateur ne dépend ni de la largeur du puits ni de la masse effective.

Dans le cas de l'InSb/CdTe, où les barrières ont une hauteur finie de 0.605 eV, la largeur du puits a une influence notable. Dans la Figure (4.3), on a tracé la force d'oscillateur, pour la transition (1-2), en fonction de la largeur du puits. On remarque que la courbe atteint son maximum à la largeur 114 Å, avant de décroitre et tendre vers la valeur du puits quantique infini, c'est-à-dire 0.96. Le fait que la force d'oscillateur décroit avec la largeur du puits influe directement sur le spectre

d'absorption; cela a bien été observé expérimentalement, dans le cas de l'InAs/AlSb par exemple [5].

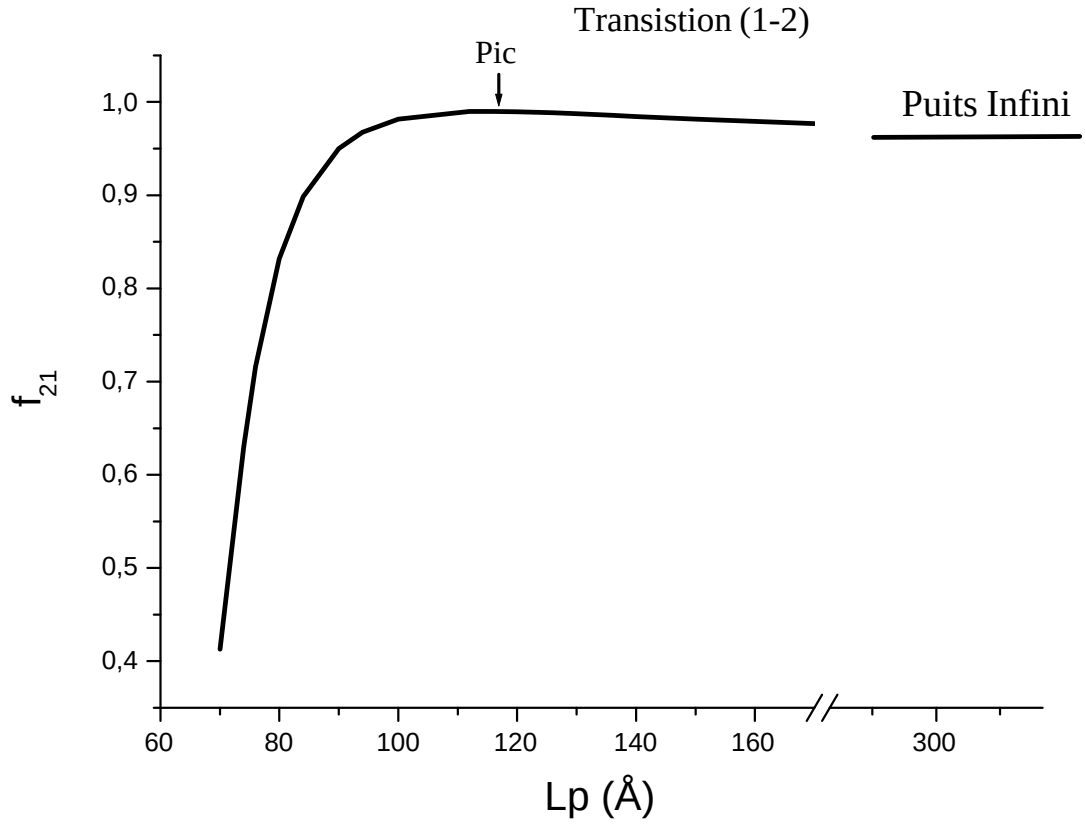


Fig. 4.3 *Evolution de* f_{21} *en fonction de la largeur du puits Lp*

4.6.2 Influence du champ magnétique dans l'InSb/CdTe :

L'application du champ magnétique influe directement sur les transitions intersousbandes. Les courbes de la Figure (4.4), représentent la variation de la force d'oscillateur, entre le premier et le deuxième état quantique ayant le même spin, en fonction de la largeur du puits, et cela pour un vecteur d'onde K_y nul. On remarque que les courbes passent par un seuil à Lp=114Å. Ce pic apparait clairement pour des valeurs du champ magnétique égales à 2T ou 3T ; et au-delà de B=5T il disparaît complètement.

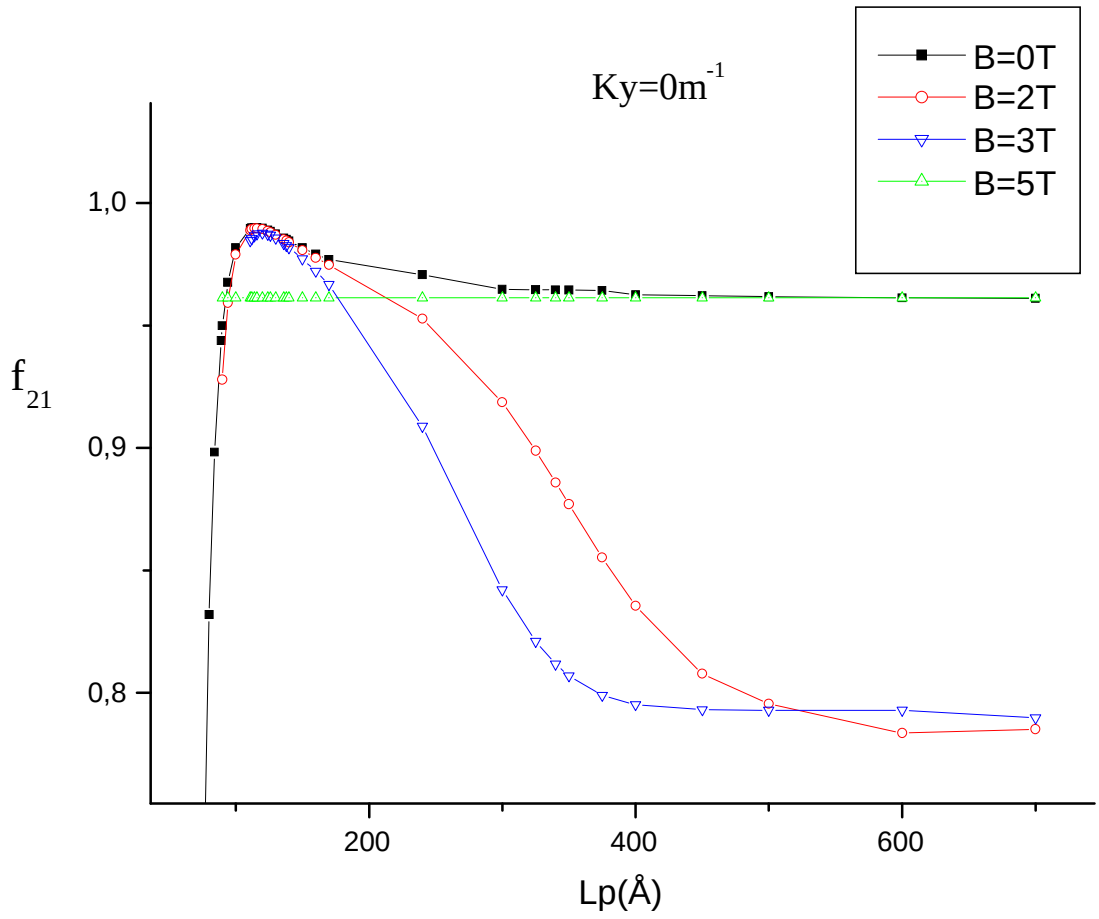


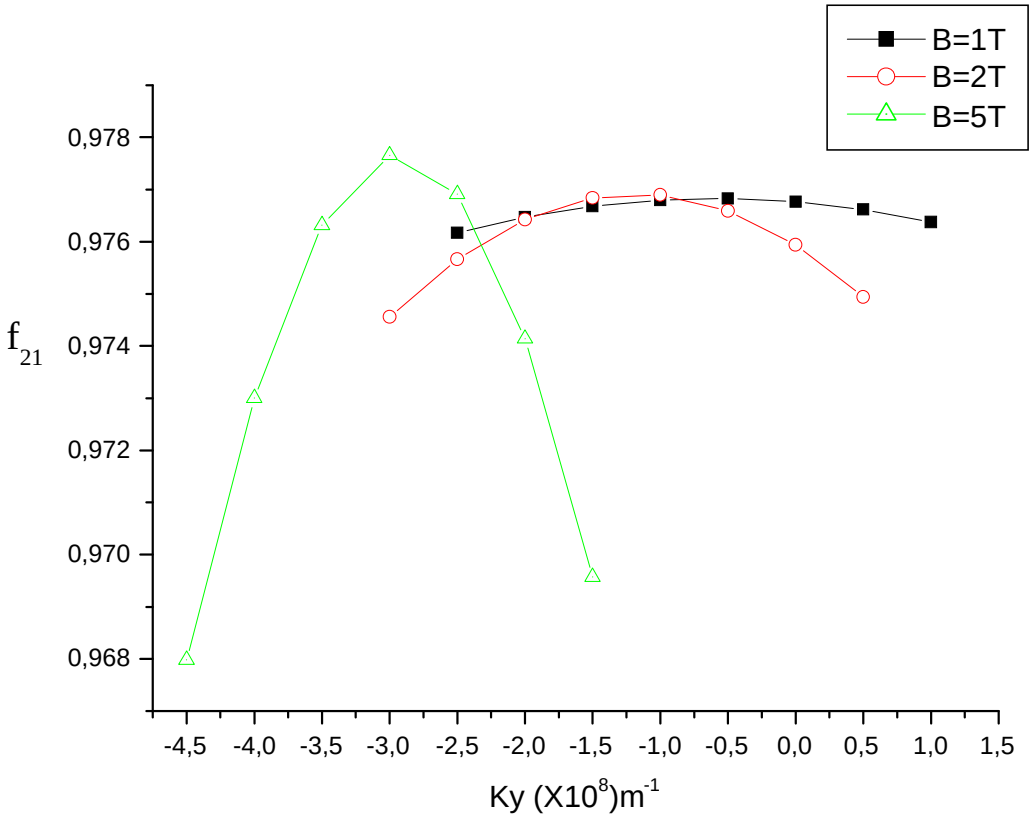
Fig. 4.4 *Evolution de* f_{21} *en fonction de la largeur du puits Lp et pour certaines valeurs du champ magnétique pour un puits d'InSb/CdTe.*

Le terme mixte de l'Hamiltonien (IV.6), c'est-à-dire ($\hbar m^{*-1} k_y e B_0 x$), rend les fonctions d'ondes dépendantes de la valeur du vecteur d'onde K_y, ainsi que sur toutes les grandeurs qui lui sont associées.

Prenant maintenant le cas de l'InSb/CdTe. La largeur du puits est de 170 Å, et celle de la barrière est prise égale à 300Å. Les courbes de la Figure (4.5), pour les transitions (1-2), et de la Figure (4.6), pour les transitions (2-3), représentent l'évolution de la force d'oscillateur, de la différence d'énergie entre les sous bandes, ainsi que de l'élément de matrice $|M_{fi}|^2$, en fonction du vecteur d'onde K_y, et cela pour quelque valeurs du champ magnétique.

La force d'oscillateur atteint son maximum pour un K_y qui correspond au minimum de la courbe de dispersion, voir Figure (4.7), et l'extremum des courbes représentant $|M_{fi}|^2$ *et* E_{fi}, voir Figure (4.5) et Figure (4.6). Remarquez le comportement inverse de $|M_{21}|^2$ et $|M_{32}|^2$, ainsi que de E_{21} et E_{32}. Notez enfin que pour le spin opposé on a obtenu un comportement similaire.

a)



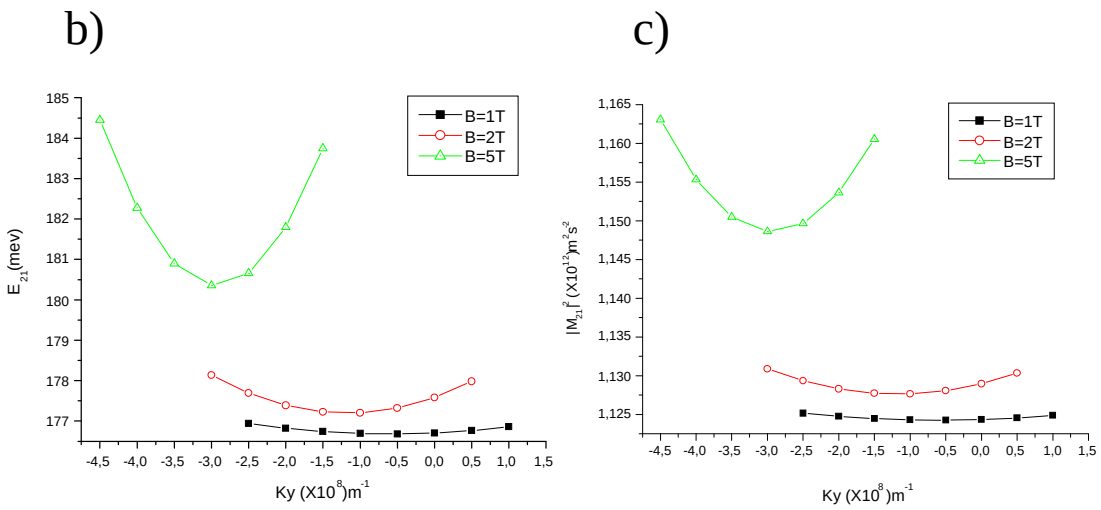


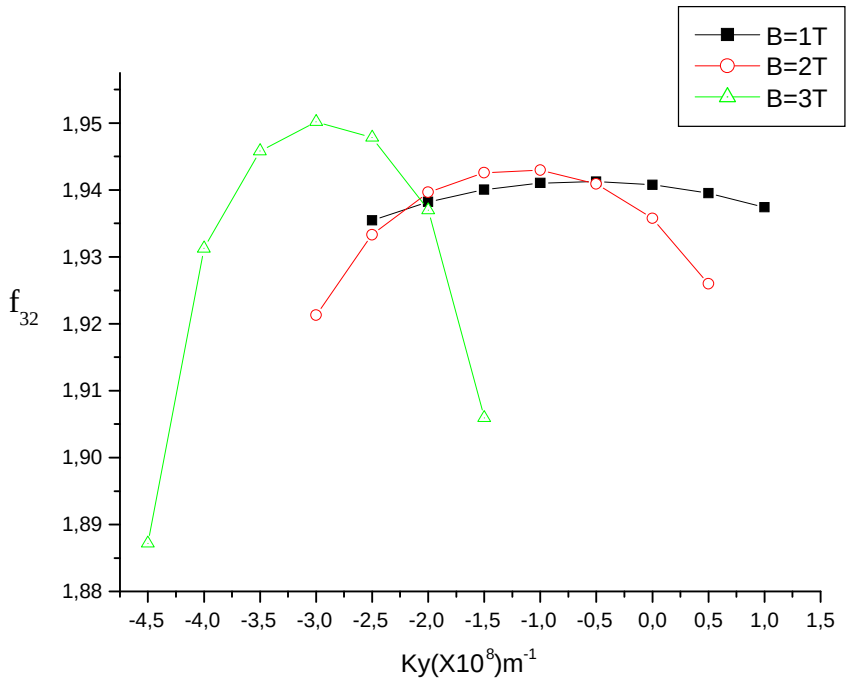
Fig. 4.5 *Transition (1-2)*

a) Evolution de la force d'oscillateur f_{21} en fonction du vecteur d'onde K_y et pour quelques valeurs du champ magnétique

b) Evolution de la différence d'énergie entre la première et la deuxième sousbande, E_{21}, pour certaines valeurs du champ magnétique

c) Evolution de l'élément de matrice $|M_{21}|^2$ en fonction du vecteur d'onde K_y et pour certaines valeurs du champ magnétique

a)



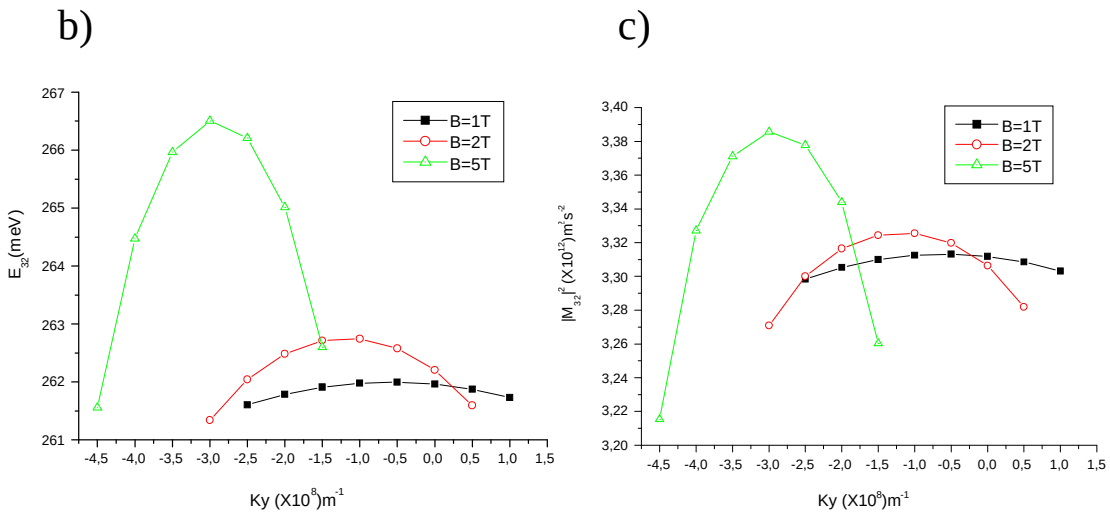


Fig. 4.6 *Transition (2-3)*

a) Evolution de la force d'oscillateur f_{32} en fonction du vecteur d'onde K_y et pour quelques valeurs du champ magnétique

b) Evolution de la différence d'énergie entre la deuxième et la troisième sous bandes E_{32}, pour certaines valeurs du champ magnétique

c) Evolution de l'élément de matrice $|M_{32}|^2$ en fonction du vecteur d'onde K_y et pour certaines valeurs du champ magnétique

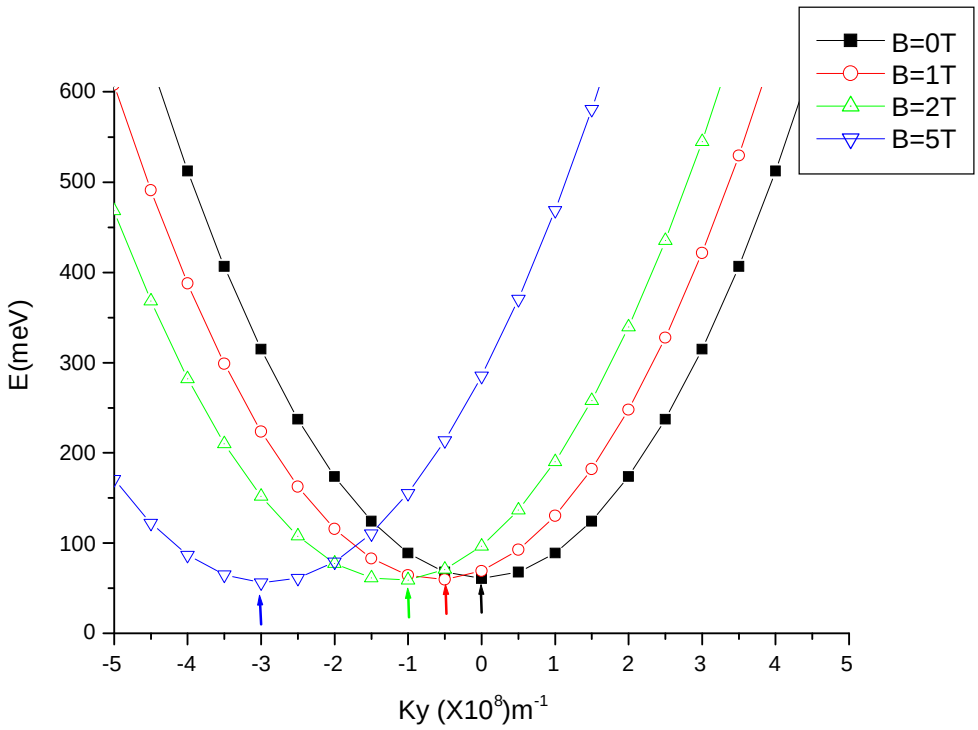


Fig. 4.7 *Courbe de dispersions de la première sousbande, pour différentes valeurs du champ magnétique.*

4.6.3 Influence de la différence de masse :

En tenant compte de la différence de masse effective entre la barrière et le puits, on a remarqué, toujours dans le cas de l'InSb/CdTe, qu'on obtient presque le même comportement pour $|M_{32}|^2$, mais un comportement inverse pour $|M_{21}|^2$, voir Figure (4.8).

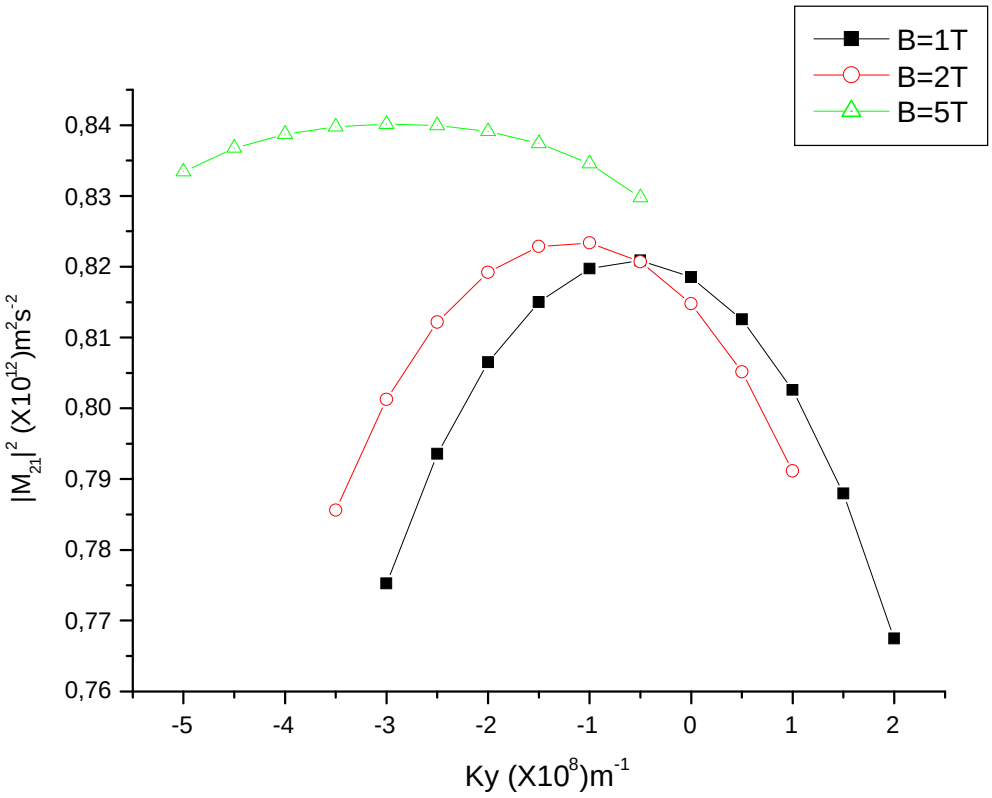


Fig. 4.8 *Evolution de l'élément de matrice $|M_{21}|^2$ en fonction du vecteur d'onde K_y pour quelques valeurs du champ magnétique*

4.7 Interaction du moment magnétique propre de l'électron avec une ondeélectromagnétique

Sous l'effet d'un champ magnétique externe, pour créer une levée de dégénérescence, la perturbation d'une onde électromagnétique peut engendrer le passage d'un électron d'une orientation de spin à une autre. Ces transitions s'accompagnent d'une émission ou d'absorption d'un photon d'une énergie égale à la différence des deux niveaux d'énergie.

Le choix de l'InSb dans notre étude est dû à son facteur de Landé élevé (-50.6), et sa forte interaction spin-orbite, comme on va le voir par la suite. Notons que le premier à avoir observé la résonance de spin dans l'InSb massif est G. Bemski en 1960 [6].

A présent, prenant dans l'Hamiltonien (IV.8) seulement la perturbation responsable de la résonance de spin, c'est-à-dire le terme :

$$H_{IZ} = \frac{1}{2} g(x) \mu_B \vec{B}.\vec{\sigma} \quad \text{(IV.38)}$$

Pour une onde électromagnétique, polarisée rectilignement suivant l'axe X, et dirigée suivant l'axe Z, H_{IZ} devient :

$$H_{IZ} = \frac{1}{2} g(x) \mu_B B \sigma_y \quad \text{(IV.39)}$$

Notons qu'une onde électromagnétique dirigée suivant un axe perpendiculaire à l'axe des X, n'engendre aucune résonance de spin.

En utilisant la relation (IV.10) et l'approximation du dipôle électrique, la perturbation H_{IZ} peut se mettre sous la forme :

$$H_{IZ} = \frac{\mu_B E_0}{2c} g(x) \sigma_y \quad \text{(IV.40)}$$

Pour étudier les différentes transitons, induites par la perturbation (IV.40), prenant l'élément de matrice suivant :

$$M_{fi} = \left\langle \Phi_f \left| g(x) \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \right| \Phi_i \right\rangle \quad \text{(IV.41)}$$

Dans un puits quantique d'InSb/CdTe, de largeur 170Å, il existe trois sous bandes, ce qui fait qu'il existe six différentes possibilités de transitions qui induisent un changement de spin, les autres sont équivalentes à l'une d'eux, voir Figure (4.9).

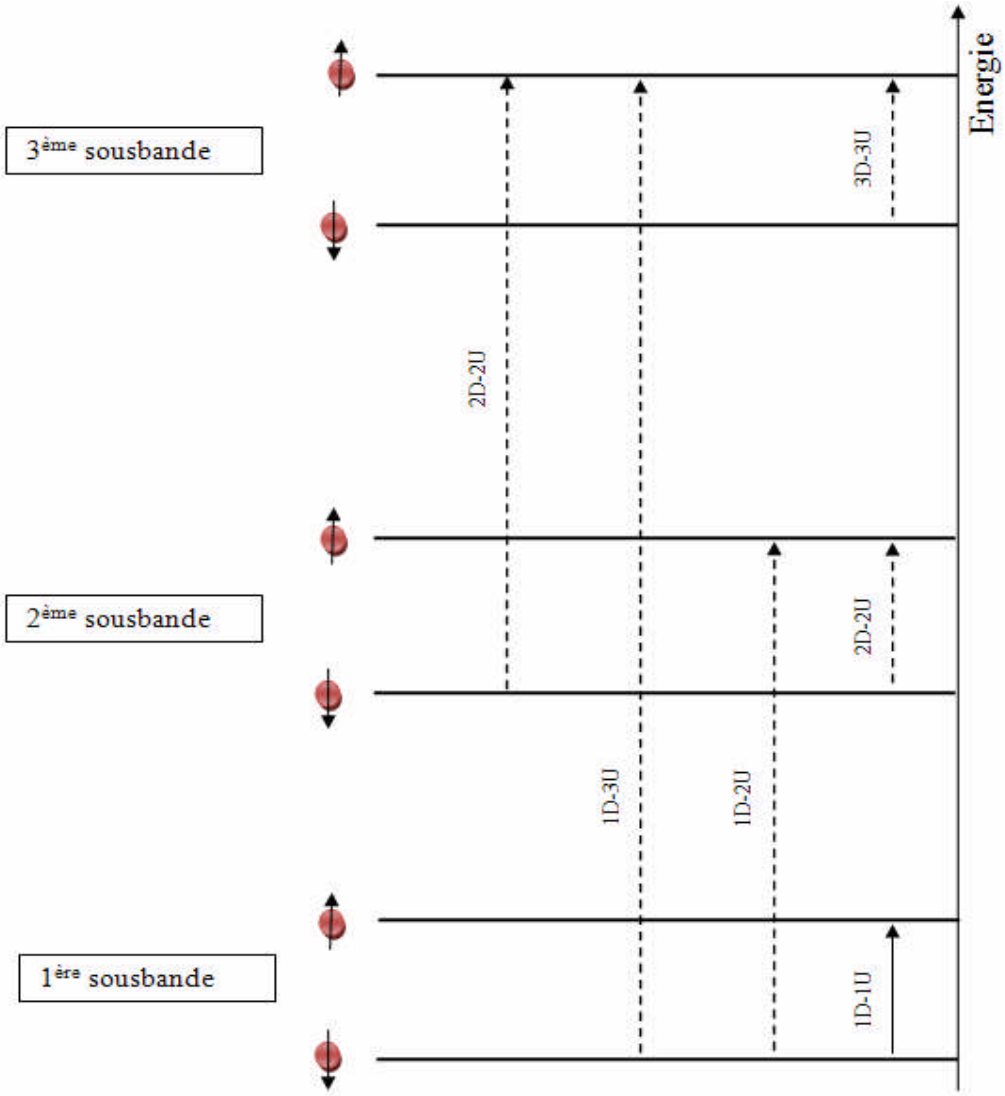


Fig. 4.9 *Les différentes transitions qui induisent un changement de spin*

La Figure (4.10) illustre la variation de l'élément de matrice (IV.41), pour les différentes transitions et valeurs du champ magnétique, sauf pour la transition (3D-3U), qui est beaucoup plus importante que les autres. Remarquons un fait, pour des valeurs de Ky proche du minimum de la courbe de dispersion, voir Figure (4.7), la transition (2D-2U) est prédominante.

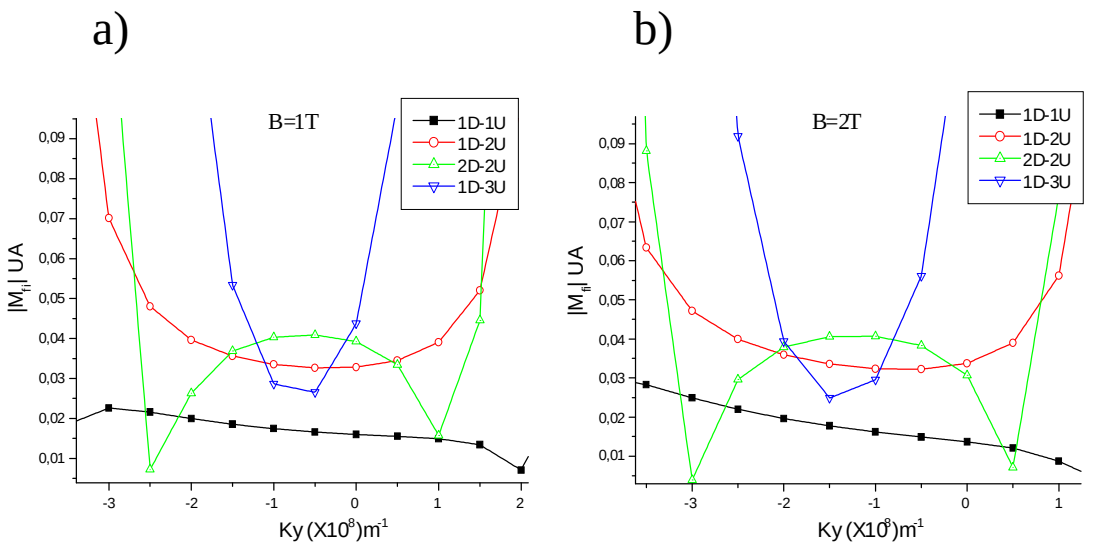


Fig. 4.10 *variation de l'élément de matrice (IV.41) en fonction de K_y pour deux valeurs du champ magnétique :*

a) B = 1T
b) B = 2T

4.8 Influence de l'interaction spin-orbite de Dresselhaus sur larésonance despin

4.8.1 Les mécanismes agissant sur le spin dans les semiconducteurs

Dans un semiconducteur massif, plusieurs mécanismes peuvent agir sur le spin de l'électron. Ces mécanismes sont essentiellement les mêmes pour les hétérostructures. On distingue trois grandes catégories :

1- La collision quasi-élastique d'un électron avec les impuretés ou les phonons, peut être accompagnée par un retournement de spin selon le mécanisme dit d'Elliot-Yafet [7]. Cela vient du fait que le spin n'est pas un bon nom nombre quantique, donc n'est pas une constante de mouvement, pour des vecteurs d'ondes non nul, en raison de l'interaction spin-orbite

(l'opérateur du spin ne commute plus avec l'Hamiltonien du système). L'influence de ce mécanisme reste tout de même négligeable, du moins pour des mobilités pas trop faibles, donc tant que le nombre de chocs n'est pas trop important [7].

2- L'interaction d'échange entre le spin des électrons et le moment cinétique des trous. Ce mécanisme est d'autant plus important que la densité de trous est grande [7].
3- Dans le référentiel propre d'un électron en mouvement suite au champ électrique des noyaux atomiques (et des autres électrons), apparaît un champ magnétique qui interagit avec le moment magnétique intrinsèque de l'électron ; c'est l'interaction spin-orbite [3]. Ainsi, La disposition des noyaux, et la symétrie cristalline par conséquent, joue un rôle important dans cette interaction.

4.8.2 Interaction spin-orbite de Dresselhaus

Dans les puits quantiques à base de semiconducteur III-V, deux types d'interactions interviennent : l'interaction spin orbite de Rashba [8] [17], qui trouve son origine dans le caractère fortement asymétrique d'un puits quantique, et l'interaction spin orbite de Dresselhaus [9], qui apparaît dans le volume contrairement à la première.

Au voisinage du point Γ_6 dans un semiconducteur de structure zinc-blende, tel que l'InSb, apparait une levée de dégénérescence, proportionnel à K^3 [10], dû à l'absence d'un centre de symétrie d'inversion (asymétrie d'inversion). La forme de l'interaction spin-orbite de Dresselhaus, est obtenue en combinant les composants de l'opérateur intrinsèque de spin σ et ceux du vecteur d'onde K, de sorte qu'elle possède toutes les symétries du cristal si on applique les opérations du groupe T_d [1]. On obtient ainsi le terme de Dresselhaus :

$$H_D = \delta(\vec{\sigma}\vec{\kappa}) \quad \text{(IV.42)}$$

Tel que,

$$\kappa_x = K_y K_x K_y - K_z K_x K_z$$
$$\kappa_y = K_z K_y K_z - K_x K_y K_x \quad \text{(IV.43)}$$
$$\kappa_z = K_x K_z K_x - K_y K_z K_y$$

où δ est un paramètre et les $\vec{\sigma}$ sont les matrices de Pauli.

4.8.3 Le terme responsable de la résonance de spin

Au premier ordre de la théorie des perturbations, l'influence de l'interaction spin-orbite de Dresselhaus sur les énergies et les fonctions d'ondes peut être négligée [11]. N'empêche qu'à travers cette interaction, des transitions entres des états ayant des spins opposés peuvent avoir lieu. Ainsi le spin des électrons est dirigé suivant l'axe du champ magnétique, c'est-à-dire l'axe Z, et l'interaction de Dresselhaus n'intervient que dans le renversement de celui-ci en présence de champs électromagnétiques externes.

À présent, prenant le terme (IV.42) comme perturbation. Sous l'influence d'une onde électromagnétique polarisée suivant l'axe X et dirigée suivant l'axe Z, et un champ magnétique $\mathbf{B_0}$ dirigé suivant l'axe Z, les vecteurs d'ondes s'écrivent sous la forme :

$$K_x = -i\partial_x$$
$$K_y = k_y + \frac{e}{\hbar} B_0 x \quad \text{(IV.44)}$$
$$K_z = k_z - \frac{e}{\hbar} Bx$$

La jauge de l'onde a été choisie comme suit :

$$\vec{\mathrm{A}} \equiv (0,0,-Bx) \quad \text{(IV.45)}$$
$$\vec{\mathrm{A}}_0 \equiv (0,B_0 x,0) \quad \text{(IV.46)}$$

En substituant les vecteurs d'ondes donnés par (IV.44) dans l'Hamiltonien (IV.42), on trouve :

$$H_{ID} = \delta[\sigma_x(-i(k_y + \frac{e}{\hbar}B_0 x)\partial_x(k_y + \frac{e}{\hbar}B_0 x) + i(k_z - \frac{e}{\hbar}Bx)\partial_x(k_z - \frac{e}{\hbar}Bx)) +$$
$$\sigma_y((k_z - \frac{e}{\hbar}Bx)(k_y + \frac{e}{\hbar}B_0 x)(k_z - \frac{e}{\hbar}Bx) + \partial_x(k_y + \frac{e}{\hbar}B_0 x)\partial_x) + \qquad \text{(IV.47)}$$
$$\sigma_z(-\partial_x(k_z - \frac{e}{\hbar}Bx)\partial_x - (k_y + \frac{e}{\hbar}B_0 x)(k_z - \frac{e}{\hbar}Bx)(k_y + \frac{e}{\hbar}B_0 x))]$$

Comme on ne tient pas compte des corrections sur les énergies et les fonctions d'ondes, gardons dans (IV.46) les termes qui dépendent seulement du temps, donc de B. A la limite des faibles intensités, correspondant aux sources lumineuses usuelles, on peut négliger les termes qui dépendent quadratiquement de B. Finalement en utilisant l'approximation du dipôle électrique, on trouve :

$$H_{ID} = \frac{e}{\hbar}B\delta\left[-i\sigma_x k_z(2x\partial_x + 1) - 2\sigma_y x k_z(k_y + \frac{e}{\hbar}B_0 x) + \sigma_z(\partial_x - (\frac{\hbar}{eB}k_z - x)\partial_x^2 + x(k_y + \frac{e}{\hbar}B_0 x)^2)\right] \text{(IV.48)}$$

En remplaçant les matrices de Pauli par leurs expressions, on trouve :

$$H_{ID} = \frac{e}{\hbar}B\delta\begin{pmatrix} \partial_x - (\frac{\hbar}{eB}k_z - x)\partial_x^2 + x(k_y + \frac{e}{\hbar}B_0 x)^2 & -ik_z(2x\partial_x + 1 - 2x(k_y + \frac{e}{\hbar}B_0 x)) \\ -ik_z(2x\partial_x + 1 + 2x(k_y + \frac{e}{\hbar}B_0 x)) & -\partial_x + (\frac{\hbar}{eB}k_z - x)\partial_x^2 - x(k_y + \frac{e}{\hbar}B_0 x)^2 \end{pmatrix} \text{(IV.49)}$$

Dans cette dernière expression, les éléments qui interviennent dans la résonance de spin sont seulement les termes non diagonaux. En ne gardant ainsi que ces derniers, on aboutit finalement, en utilisant la relation (IV.10), à la perturbation suivante :

$$H_{ID} = -i\frac{e}{\hbar c}E_0 k_z \delta\begin{pmatrix} 0 & 2x\partial_x + 1 - 2x(k_y + \frac{e}{\hbar}B_0 x) \\ 2x\partial_x + 1 + 2x(k_y + \frac{e}{\hbar}B_0 x) & 0 \end{pmatrix} \text{(IV.50)}$$

Multipliant, à présent, (IV.50) par le facteur $\frac{2ic}{\mu_B E_0}$; on obtient :

$$H_{ID} = \frac{4m_e}{\hbar^2} k_z \delta \begin{pmatrix} 0 & 2x\partial_x + 1 - 2x(k_y + \frac{e}{\hbar} B_0 x) \\ 2x\partial_x + 1 + 2x(k_y + \frac{e}{\hbar} B_0 x) & 0 \end{pmatrix} \text{(IV.51)}$$

Afin d'étudier les différentes transitons, induites par le terme (IV.50), prenant l'élément de matrice suivant :

$$M_{fi} = \left\langle \Phi_f \left| H_{ID} \right| \Phi_i \right\rangle \text{(IV.52)}$$

4.8.4 Application à l'InSb/CdTe

Dans la perturbation (IV.51), le vecteur d'onde K_z ne figure qu'en facteur, ainsi le choix d'une seule valeur de K_z suffit pour voir le comportement de l'élément de matrice (IV.52). Prenant : $K_z = 5 \times 10^7 m^{-1}$

En se servant de l'élément de matrice donné par (IV.52), plusieurs calculs numériques ont été effectués dans le cas d'un puits quantique d'InSb/CdTe, de largeur 170Å, et cela pour les différentes transitions et valeurs du champ magnétique. Cela nous a permis de remarquer un comportement équivalent pour les transitions (1D-1U), (2D-2U) et (3D-3U). Aussi, on a constaté que ces dernières possèdent un minimum qui coïncide exactement avec celui de la sousbande, voir Figure (4.11). Le décalage de ces courbes en fonction du champ magnétique revient au terme $(k_y + \frac{e}{\hbar} B_0 x)$ de (IV.51).

Dans la figure (4.12), on remarque que les droites, représentant l'élément de matrice (IV.52) pour les transitions (1D-2U), (1U-2D), se croisent au même point k_y que les transitions (2D-3U) et (2U-3D). Ces courbes se décalent aussi en fonction du champ magnétique et d'une manière plus accentuée que celles de la figure (4.11). Remarquons que les transitions (2D-3U) et (2U-3D) sont plus importantes que les transitions (1D-2U) et (1U-2D).

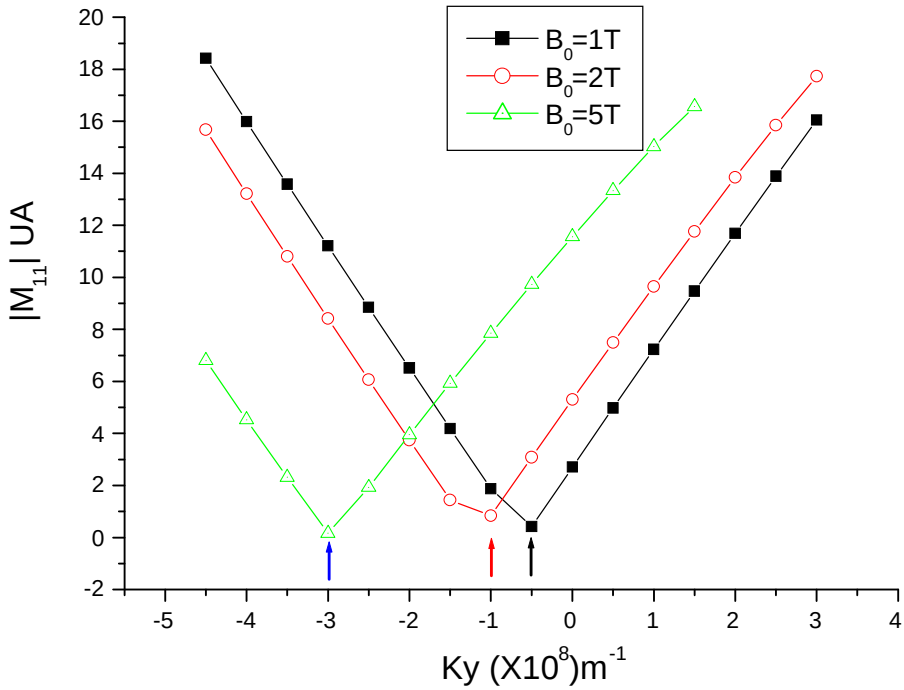


Fig. 4.11 *Variation de l'élément de matrice (IV.52) en fonction de K_y et pour différentes valeurs du champ magnétique pour la transition (1D - 1U)*

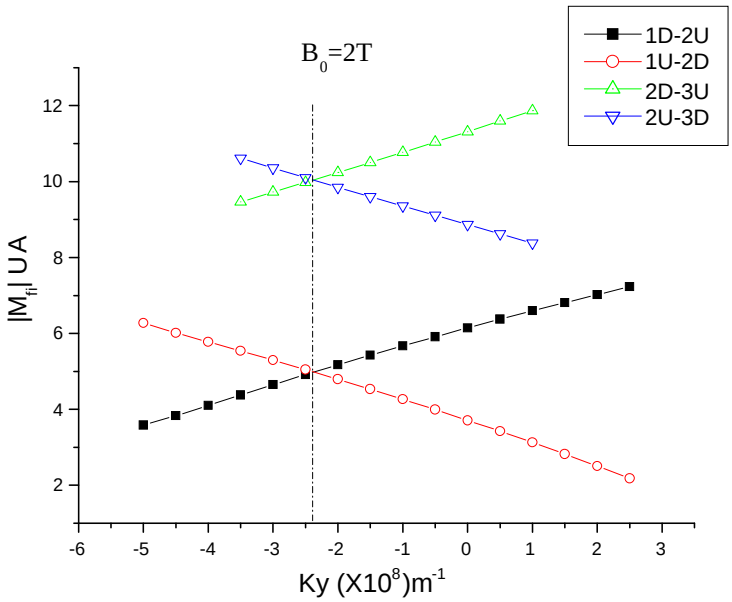


Fig. 4.12 *Variation de l'élément de matrice (IV.52) en fonction de Ky sous un champ magnétique de 2T, et cela pour les transitions (1D-2U), (1U-2D), (2D-3U) et (2U-3D).*

Quant aux transitions restantes, c'est-à-dire (1D-3U) et (1U-3D), elles sont représentées dans la Figure (4.13), et cela pour différentes valeurs du champ magnétique.

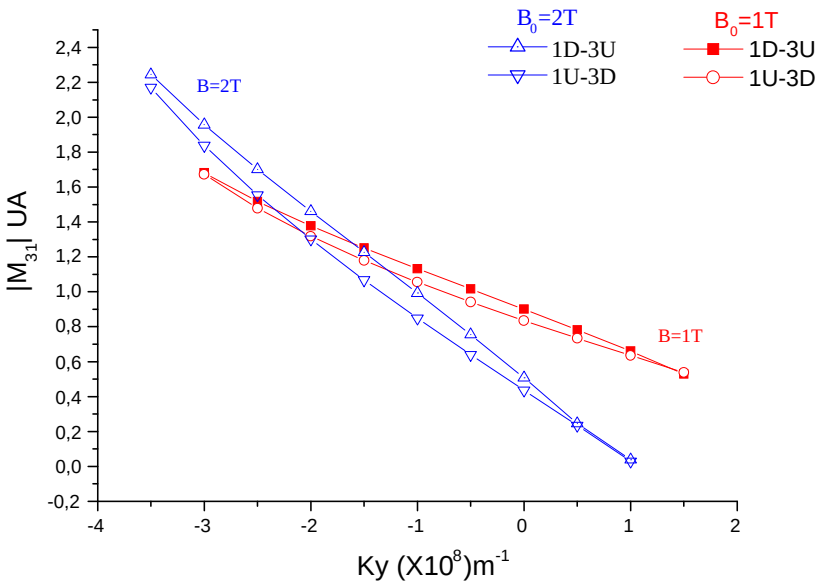


Fig. 4.12 *Variation de l'élément de matrice (IV.52) en fonction de Ky sous un champ magnétique de 1T et 2T, et cela pour les transitions (1D-3U) et (1U-3D).*

Pour voir l'effet de la largeur du puits quantique, prenant $k_y = -2\times10^8 m^{-1}$ et B=1T. On remarque, Figure (4.13), que les transitions intrasousbandes l'emportent sur les transitions intersousbandes pour les grandes largeurs du puits.

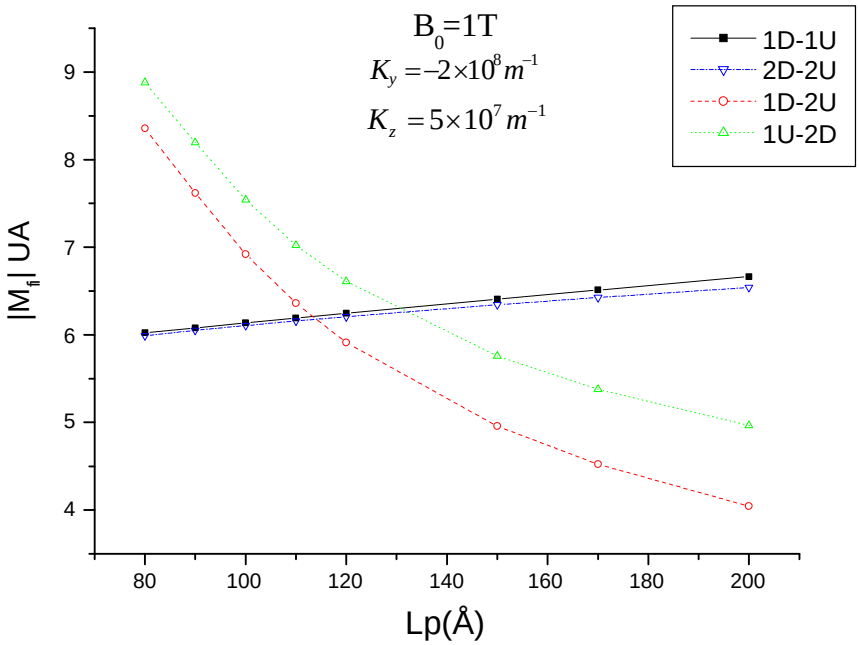


Fig. 4.13 *Variation de l'élément de matrice (IV.52) en fonction de la largeur du puits, sous un champ magnétique de 1T.*

4.9 Spectre d'absorption

4.9.1 Puissance absorbée

Pour obtenir la puissance absorbée P^+, due à ces transitions, on multiplie la probabilité (IV.23) par l'énergie du photon $\hbar\omega$ et on somme sur tous les états possibles $|\Phi_i\rangle$ et $|\Phi_j\rangle$ (les deux états du spin sont inclus). Pour s'assurer que l'état initial de moindre énergie est rempli et l'état final de plus grande énergie est vide, on multiplie respectivement par les facteurs de Fermi $f(E_i)$ et $[1-f(E_f)]$, comme suit :

$$P^+ = \frac{2\pi}{\omega}(eE_0)^2 \sum_{i,f} \delta(E_f - E_i - \hbar\omega)\delta_{k_y^i,k_y^f}\delta_{k_z^i,k_z^f} |M_{fi}|^2 f(E_i)[1-f(E_f)] \quad \text{(IV.53)}$$

Rappelons que :

$$f(E) = \frac{1}{1+e^{\frac{E-E_f}{K_B T}}} \quad \text{(IV.54)}$$

La puissance rayonnée P^-, due au terme $e^{i\omega t}$ de l'onde (IV.16) et permettant la transition de l'état $|\Phi_j\rangle$ à l'état $|\Phi_i\rangle$ de moindre énergie, est obtenue en inversant le signe de ω dans P^+, et en inter-changeant les indices i et f dans les fonctions de Fermi, comme suit :

$$P^- = -\frac{2\pi}{\omega}(eE_0)^2 \sum_{i,f} \delta(E_f - E_i + \hbar\omega)\delta_{k_y^i,k_y^f}\delta_{k_z^i,k_z^f} |M_{fi}|^2 f(E_i)[1-f(E_f)] \quad \text{(IV.55)}$$

La fonction δ a la même forme que celle de P^+ avec une simple inversion d'indices. Une simple sommation de P^+ et de P^- permet, par la suite, de retrouver la puissance totale absorbée:

$$P = \frac{2\pi}{\omega}\left(eE_0\right)^2 \sum_{i,f} \delta(E_f - E_i - \hbar\omega)\delta_{k_y^i,k_y^f}\delta_{k_z^i,k_z^f} \left|M_{fi}\right|^2 \left(f(E_i) - f(E_f)\right) \text{(IV.56)}$$

En utilisant la forme (IV.32) de l'élément de matrice M_{fi} , on trouve :

$$P = \frac{2\pi}{\omega}\left(eE_0\right)^2 \sum_{i,f} \delta(E_f - E_i - \hbar\omega)\delta_{k_y^i,k_y^f}\delta_{k_z^i,k_z^f} \left|\frac{E_i - E_f}{\hbar}\left\langle \Phi_f \middle| x \middle| \Phi_i \right\rangle\right|^2 \left(f(E_i) - f(E_f)\right) \text{ (IV.57)}$$

En prenant le facteur égal à l'unité, on aboutit finalement à la grandeur suivante qui désigne le taux d'absorption :

$$\alpha = \sum_{i,f} \delta(E_f - E_i - \hbar\omega)\delta_{k_y^i,k_y^f}\delta_{k_z^i,k_z^f} \left|\frac{E_i - E_f}{\hbar}\left\langle \Phi_f \middle| x \middle| \Phi_i \right\rangle\right|^2 \left(f(E_i) - f(E_f)\right) \text{ (IV.58)}$$

4.9.2 Niveau de Fermi

Le niveau de Fermi, est par définition, le plus haut niveau d'énergie occupé par les électrons à une température proche de 0°K. À l'intérieur des puits quantiques, les électrons ont seulement deux degrés de libertés, la courbe de dispersion est par conséquent représentée en deux dimensions dans l'espace réciproque. Les électrons occupent les états d'énergie, et les sousbandes, suivant l'ordre croissant de leurs énergies.

Pour obtenir la densité des électrons par unité de surface de la bande de conduction, on intègre la densité d'états à deux dimensions $\rho_{2D}(E)$, entre le plus bas niveau du puits quantique, pris égal à E1, jusqu'à l'infini, comme suit :

$$n_s = \int_{E_1}^{+\infty} \rho_{2D}(E) f(E) dE \text{ (IV.59)}$$

La densité d'états, est une fonction en escalier, représentant la somme des densités d'états à deux dimensions de chaque sousbande :

$$\rho_{2D}(E) = \frac{m^*}{2\pi\hbar^2}\sum_{i=1}^{n}\Theta(E - E_i) \quad \text{(IV.60)}$$

La densité d'électrons (IV.59) devient

$$n_s = \frac{m^*}{2\pi\hbar^2}\sum_{i=1}^{n}\int_0^{+\infty}\Theta(E - E_i)\, f(E)dE \quad \text{(IV.61)}$$

Où $\Theta(E - E_i)$ représente la fonction de Heaviside, prenant la valeur 0 pour les $(E - E_i)$ strictement négatifs, et la valeur 1 partout ailleurs. Autrement :

$$n_s = \frac{m^*}{2\pi\hbar^2}\left[\int_{E_1}^{+\infty} f(E)dE + \int_{E_2}^{+\infty} f(E)dE + \int_{E_3}^{+\infty} f(E)dE + \ldots\right] \quad \text{(IV.62)}$$

Pour intégrer la fonction de Fermi-Dirac f(E), on fait le changement de variable suivant :

$$X = e^{\left(\frac{E-E_f}{K_BT}\right)} \quad \text{(IV.63)}$$

On trouve ainsi :

$$\int_{E_i}^{+\infty}\frac{dE}{1+e^{\left(\frac{E-E_f}{K_BT}\right)}} = K_BT\int_0^{e^{\left(\frac{E_f-E_i}{K_BT}\right)}}\frac{dX}{1+X} = K_BT\ln\left(1+e^{\left(\frac{E_f-E_i}{K_BT}\right)}\right) \quad \text{(IV.64)}$$

La densité surfacique d'électrons (IV.62), s'écrit finalement sous la forme

$$n_s = \frac{m^*K_BT}{2\pi\hbar^2}\left[\ln\left(\left(1+e^{\left(\frac{E_f-E_1}{K_BT}\right)}\right)\times\left(1+e^{\left(\frac{E_f-E_2}{K_BT}\right)}\right)\times\left(1+e^{\left(\frac{E_f-E_4}{K_BT}\right)}\right)\times\ldots\right)\right] \quad \text{(IV.65)}$$

Pour obtenir le niveau de Fermi à partir de ns, un calcul numérique itératif est nécessaire.

4.9.3 Application à l'InAs/AlSb :

Récemment beaucoup d'études ont été menées sur le groupe de semiconducteurs (GaSb, InAs et AlSb), ayant un paramètre de maille proche de 6.1 Å, car ils offrent des systèmes avec une barrière élevée et qui peuvent être utilisés dans les technologies se basant sur les transitions intersousbandes, tel que l'optoélectronique infrarouge [12]. Un de ces systèmes prometteur est l'InAs/AlSb avec une barrière de largeur 2.04eV [13]. Cette hauteur est inadéquate pour des puits de faibles largeurs [14].

Dans ce qui suit nous étudions l'effet de la non-parabolicité, pour cela nous prenons [15] [16] :

$$m^*(E) = m_0^*\left(1+\frac{2E}{E_g}\right) \quad \text{(IV.66)}$$

Dans le cas de l'InAs, le gap est de $E_g = 0.417eV$ et la masse effective à la température de 100°K est de $m_0^* = 0.024$ [23]. En raison de la barrière élevée de l'InAs/AlSb, de la basse température et de la faible concentration électronique, on peut utiliser le modèle du puits quantique infini. Cela nous permet, avec une bonne approximation, de remplacer l'énergie totale E par le niveau de Fermi donné par l'équation (IV.61) [18].

$$m^*(E) = m_0^*\left(1+\frac{2E_f}{E_g}\right) \text{(IV.67)}$$

Ainsi pour chaque largeur du puits quantique, pour chaque densité électronique et pour chaque valeur du champ magnétique appliqué, on introduit une valeur différente de la masse effective.

Pour tester la validité de tous nos calculs, on a comparé nos résultats avec ceux obtenus expérimentalement, voir Figure (4.14). Pour des largeurs des puits quantiques inférieures à 60Å, les résultats de nos calculs sont moins bons qu'aux grandes largeurs à cause de l'effet avéré de la non-parabolicité.

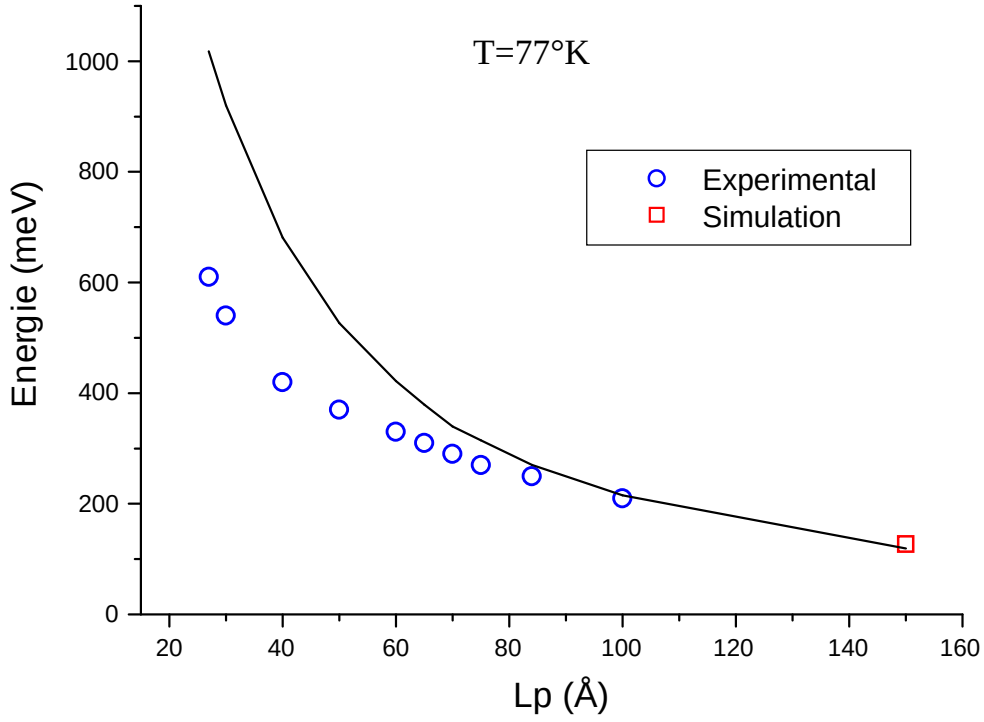


Fig. 4.14 *Position du Pic d'absorption de la transition (1-2) en fonction de la largeur du puits. Les densités électroniques varient entre 10^{14} et $2.46\times10^{15} m^{-1}$ suivant les références. Les cercles bleus représentent les résultats expérimentaux obtenus par [19] et [20] et le carré rouge est un résultat obtenu par calcul [21].*

Afin de constater l'effet du champ magnétique, prenons un puits quantique de largeur 150Å. Pour une densité électronique $n_s = 1.1\times10^{14} m^{-2}$, le facteur de Landé vaut alors $g = -14.6$ [22]. Le niveau fondamental à la température 77°K, est le seul qui renferme des électrons, les autres sont presque vides. Par conséquent, l'intensité des transitions du niveau fondamental est beaucoup plus grande que les autres, voir Figure (4.15). Quant aux transitions interdites, elles deviennent légèrement plus importantes au détriment des autres transitions permises, pour des champs magnétiques très élevés, voir Figure (4.15). Mais la transition (1-2) reste de loin la plus importante.

Pour des champs magnétiques au dessus de 5T, l'énergie d'absorption de la transition (1-2) augmente très rapidement, voir Figure (4.16). Cela revient aux états d'énergie, ayant le même spin, qui s'écarte entre eux. L'intensité de la transition, quant à elle, augmente pour les faibles valeurs du champ magnétique et diminue pour les grandes valeurs. Le maximum se trouve pour B_0=4T.

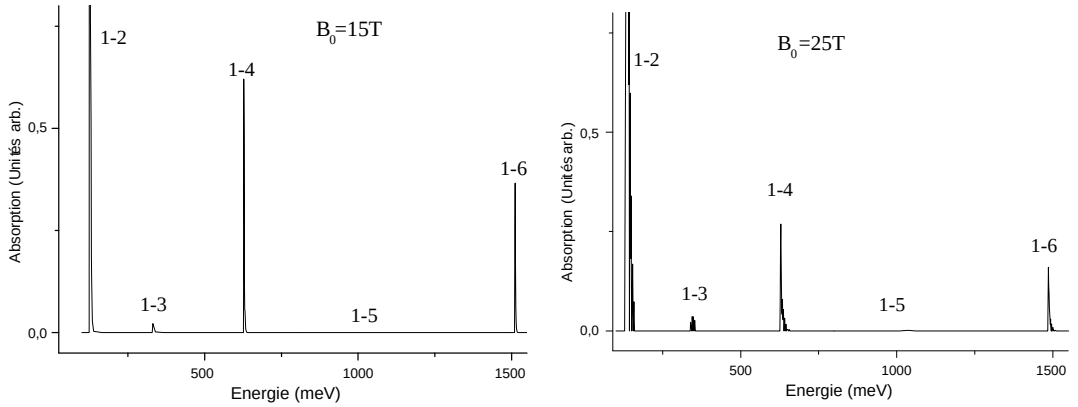


Fig. 4.15 *Spectres d'absorption d'un puits quantique d'InAs/AlSb de 150Å, soumis à champs magnétiques de 15 et de 25T.*

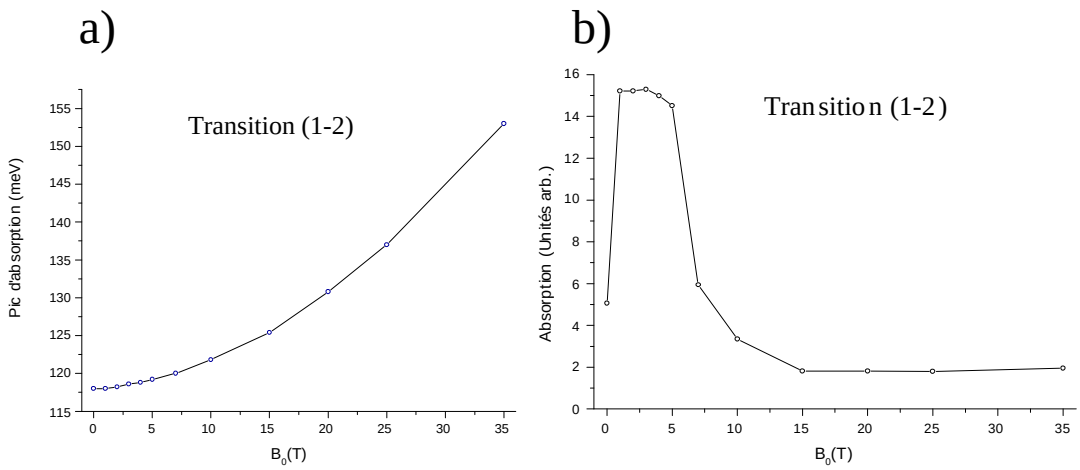


Fig. 4.16 *Evolution de la transition (1-2) en fonction du champ magnétique pour un puits quantique d'InAs/AlSb de 150Å.*

REFERENCES :

[1] Sudha Gopalan, J. K. Furdyna et S. Rodriguez, Inversion asymmetry and magneto-optical rules in n-type zinc-blende semiconductors, Phy. Rev. **B32**, *P 903* (1985).

[2] John H. Davies, The physics of low-dimensional semiconductors (Cambridge university press, Cambridge, 1998).

[3] C.C. Tannoudji, B. Diu et F. Laloe, Mécanique quantique (Herman, Paris, 1977).

[4] Emmanuel I. Rashba, Semiconductor spintronics: Progress and challenges, arxiv:cond-mat/0611194 *(2006).*

[5] J. Li, K. Kolokolov, C. Z. Ning, D. C. Larraber, G. A. Khodaparast, J. Kono, K. Ueda, Y. Nakajima, S. Sasa et M. Inoue, Intersubband transitions in InAs/AlSb quantum wells, Progress in Semiconductors II-Electronic and Optoelectronic Applications, MRS Proceedings Vol. 744, **M9.2.1** *(M.R.S., Boston, Massachusetts, 2003).*

[6] G. Bemski, Spin resonance of conduction electrons in InSb, Phys. Rev. Lett. **4**, *P 62* (1960).

[7] Thibaut WIRTH, Etude du transport d'électrons polarisés en spin dans les hétérostructures métal ferromagnétique / semi-conducteur pour l'obtention de nouveaux composants électroniques, Thèse de Doctorat, École Polytechniques de Palaiseau (2000).

[8] E.I.Rashba, Fiz.Tv.Tela (Leningrad) 2, 1224 (1960) [Sov.Phys.Solid State 2, 1109 (1960)].

[9] G. Dresselhaus, Spin-Orbit coupling effects in zinc blende structure, Phys. Rev. **100**, *P 580* (1955).

[10] E.L. Ivchenko, G.E. Pikus, Superlattices and other heterostructures : symmetry and optical phenomena (Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, 1995).

[11] L. Efros, E. I. Rashba, Theory of Electric Dipole Spin Resonance in a Parabolic Quantum Well, arxiv.org: cond-mat/0602264 (2006).

[12] Herbert Kroemer, The 6.1 Å family (InAs, GaSb, AlSb) and its heterostructures: a selective review, Physica **E 20**, *P 196* (2004).

[13] Vurgaftman, J.R. Meyer, L.R. Ram-Mohan, Band parameters for III-V compound semiconductors and their alloys, J. Appl. Phys. **89**, *P 5815*(2001).

[14] R. G. Dandrea et C. B. Duke , Calculation of InAs/AlSb(001) band offsets: Effect of strain and interfacial atomic structure, Appl. Phys. Lett. **63**, *P 1795* (1993).

[15] R. J. Warburton, C. Gauer, A. Wixforth, J. P. Kotthaus, B. Brar, et H. Kroemer, Collective effects in the intersubband resonance of InAs/AlSb quantum wells, Superlattices and Microstr. **19**, *P 365* (1996).

[16] E. O. Kane, J. Phys. Chem. Solids **1**, *P 249* (1957).

[17] Saadi Lamari, Effective mass theory of the Rashba effect in heterostructures, Phys. Rev. **B75**, *155302* (2007).

[18] S. Brosig and K. Ensslin, A. G. Jansen, C. Nguyen, B. Brar, M. Thomas, and H. Kroemer, InAs-AlSb quantum wells in tilted magnetic fields, Phys. Rev. **B 61**, *P 13045* (2000).

[19] D. C. Larrabee, G. A. Khodaparast, and J. Kono, K. Ueda, Y. Nakajima, M. Nakai, S. Sasa, et M. Inoue, K. I. Kolokolov, J. Li, and C. Z. Ning, Temperature dependence of intersubband transitions in InAs/AlSb quantum wells, Appl. Phys. Lett. **83**, *P 3936* (2003).

[20] S. Sasa, Y. Nakajima, M. Nakai, M. Inoue, D. C. Larrabee, et J. Kono, Near-Infrared Intersubband Transitions in Delta-Doped InAs/AlSb Multi-Quantum Wells, Appl. Phys. Lett. **85**, *P 5553* (2004).

[21] Jianzhong Li et C. Z. Ning, Microscopic theory and simulation of quantum well intersubband absorption: A three-Subband model, Physic and Simulation of optoelectronic device XII **5349**, *P 95* (2004).

[22] V. N. Zverev, M. Muhammad, S. Rahman, P. Debray, M. Saglam, J. Sigmund, H. L. Hartnagel, Magnetotransport properties of two dimensional electron gas in AlSb/InAs quantum well structures designed for device applications, J. Appl. Phys. **96**, *P 6353* (2004).

[23] Sadao Adachi, Physical properties of III-V semiconductor compounds (Wiley, New York, 1992).

Conclusion générale

La résolution analytique de l'équation de Schrödinger d'un puits quantique de forme quelconque, en présence d'un champ magnétique parallèle, n'est pas possible. Pour cette raison on a eu recourt à la méthode des différences finies. Pour atteindre nos buts, plusieurs programmes en Fortran 95 ont été réalisés et testés minutieusement.

Dans le calcul des probabilités de transitions et des spectres d'absorption, le problème est traité à l'aide de :

- Approximation de la fonction enveloppe et de la masse effective.
- Approximation du dipôle électrique.

Le fait d'avoir négligé la non-parabolicité de la bande, limite la validité de nos calculs aux faibles températures et aux faibles densités électronique, de sorte que les électrons occupent le bas de la première sous bande, là où la parabolicité se manifeste le mieux.

Avant d'entamer l'étude des transitions optiques, on a d'abord étudié le comportement des fonctions d'ondes et des énergies de confinement, en variant la masse effective, la hauteur de la barrière, la largeur du puits, ainsi que le champ magnétique. Cela nous a énormément aidé à interpréter les résultats obtenus par la suite.

La force d'oscillateur et les éléments de matrice, introduits dans le dernier chapitre, nous ont permis de suivre le comportement des différentes transitions, en fonction de la largeur du puits, du vecteur d'onde k_y, et du champ magnétique. Cela nous a permis de constater que le maximum des transitions (1-2) et (2-3), passe par une valeur du vecteur d'onde correspondant au minimum de la sousbande.

La résonance de spin dans l'InSb est due à l'interaction spin-orbite de Dresselhaus, et prédomine devant celle induite à travers le terme de Zeeman, comme on l'a constaté. L'intensité des transitions par résonance de spin, due à cette interaction, dépend fortement de la valeur du vecteur d'onde. Le comportement des transitions inter et intrasousbandes est totalement différent, et réagissent différemment à l'application d'un champ magnétique.

Les transitions intrasousbandes l'emportent sur les transitions intersousbandes pour les grandes largeurs du puits

Le calcul du spectre d'absorption est effectué dans le cas d'un puits d'InAs/AlSb. Une comparaison avec les résultats expérimentaux a été faite. Les transitions interdites par les règles de sélections deviennent permises pour des champs magnétiques très intenses. Le pic d'absorption de la transition (1-2) se décale vers les hautes énergies à mesure que le champ magnétique augmente.

خلاصة:

من خلال هذا العمل قمنا بدراسة الخصائص الالكترونية و المغناطيسوبصرية لبئر كوانتيكي خاضع لحقل مغناطيسي موازي لسطحه. لقد تم حل معادلة شرودينقر وفق تقريب الدالة المغطية. عناصر مصفوفة الانتقال ما بين مستويات الطاقة حسبت باستعمال تقريب ثنائي القطب الكهربائي. سمح لنا هذا بمتابعة سلوك مختلف الانتقالات بدلالة شعاع الموجة للالكترون، عرض البئر، و قيمة الحقل المغناطيسي المطبق. و لقد ركزنا بالأخص على تجاوب السبين الناتج عن التفاعل سبين- مدار لدراسلهاوس. لاحظنا أن الحقل المغناطيسي ينتج عنه عدة سلوكات وفق مختلف الانتقالات. و قد قمنا بحساب طيف الامتصاص لبئر InAs/AlSb الخاضع لحقل مغناطيسي شديد القوة، هذا ما سمح لنا بملاحظة اختلال في بعض الانتقالات.

الكلمات المفتاحية: بئر كوانتيكي,الانتقالات ما بين مستويات الطاقة,التفاعل سبين- مدار.

Résumé:

L'objet de notre travail est l'étude des propriétés électroniques et magnéto-optiques des puits quantiques, soumis à un champ magnétique parallèle à son plan. L'équation de Schrödinger est résolue dans le cadre de la fonction enveloppe. Les éléments de matrices des transitions inter- et intra-sousbandes sont calculés grâce à l'approximation dipolaire. Cela nous a permis de suivre le comportement des différentes transitions en fonction du vecteur d'onde de l'électron, de la largeur du puits, et du champ magnétique appliqué. Une attention particulière a été accordée à la résonance de spin due à l'interaction spin-orbite de Dresselhaus. On a remarqué que le champ magnétique produit différents effets suivant les différentes transitions. Le spectre d'absorption est calculé pour un puits d'InAs/AlSb soumis à un champ magnétique fort, ce qui nous a permis de constater les perturbations induites par ce dernier sur certaines transitions.

Mots clés : Puits quantique, Transitions inter-sousbandes, Interaction spin-orbite.

Abstract:

The object of our work is the study of the electronic and magneto-optical properties of quantum wells subjected to a parallel magnetic field. The Schrödinger equation is solved within the framework of the envelope function. The matrix elements for inter and intra-subband transitions are calculated within the electric dipole approximation. This enabled us to follow the behavior of the various transitions as a function of the electron's wave vector, the well width, and the magnetic field. A special attention was given to the spin resonance produced by the spin-orbit interaction of Dresselhaus. It was noticed that the magnetic field produces various effects depending on the transition. The absorption spectrum is also calculated for a well of InAs/AlSb subjected to a strong magnetic field, which enabled us to note some changes induced by the latter on some transitions.

Keywords: Quantum well, inter-subband transitions, spin-orbit interaction.