

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

Université Ferhat Abbas Sétif-1

THESE

Présentée à la faculté des Sciences

Département de Physique

Pour l'obtention du diplôme

de

Doctorat en Sciences

Option: Physique du Solide

Par

Mohamed Boumaza

Thème

Relaxation dans les semiconducteurs

soutenue le **/ **/ 2016

Devant le jury :

Président: Kamel Bencheikh Professeur, Université Ferhat Abbas Sétif 1

Rapporteur: Saadi Lamari Professeur, Université Ferhat Abbas Sétif 1

Examineur: Samah Madani Professeur, Université A. Mira Bejaia

Examineur: Abdeslam Houari Professeur, Université A. Mira Bejaia

Examineur: Nadjib Baadji Maître de Conférences A, U. de M'Sila, M'Sila

Dédicace

*Je dédie ce travail à mes parents, ma famille, tous mes enseignants , amis
et collègues.*

Remerciements

Je tiens avant tout à remercier du fond du cœur mon encadreur M. Saadi Lamari de m'avoir proposé ce sujet et dirigé tout au long de mon travail. Je lui suis aussi redevable pour sa patience, son encouragement, ses conseils, ainsi que pour les nombreuses discussions fructueuses que nous avons eues ensemble.

Je remercie aussi très vivement Monsieur Kamel Bencheikh, professeur à l'Université Sétif-1, pour l'honneur qu'il me fait en acceptant de présider le jury.

Je tiens aussi à exprimer ici ma gratitude à Monsieur Samah Madani, professeur à l'Université de Bejaia, d'avoir gentiment accepté d'examiner mon travail et faire partie du jury.

Je ne manque pas aussi à adresser mes sincères remerciements à Monsieur Abdeslam Houari, professeur à l'Université de Bejaia, de m'avoir honoré en acceptant de participer au jury en tant qu'examineur.

Un grand merci également à Monsieur Nadjib Baadji, professeur à l'université de M'sila, d'avoir accepté d'examiner le travail contenu dans cette thèse et de faire partie du jury.

Je profite de cette occasion pour remercier également le ministère de l'enseignement supérieur et de la recherche scientifique (MESRS) ainsi que la direction générale de la recherche scientifique et du développement

technologique (DGRSDT) d'avoir financé plusieurs projets CNEPRU et un PNR dont j'ai fait partie.

Liste des Figures

Figure 1.1: Profil d'un puits quantique de profondeur V_0	21
Figure 1.2: Structure de la bande de valence pour un puits quantique de largeur $a = 25 \text{ \AA}$ en ligne continue en incluant la sous bande split-off (sp) et en ligne discontinue où la sous bande split-off (sp) est négligée.....	30
Figure 1.3: Structure de la bande de valence pour un puits quantique de largeur $a = 100 \text{ \AA}$ en ligne continue en incluant la sous bande split-off (sp) et en ligne discontinue où on la néglige	31
Figure 1.4: Densité d'états pour les trous lourds (HH) et légers (LH) pour un puits de largeur 25 \AA	32
Figure 1.5: Fonctions d'ondes des trous lourds en ligne continue, légers en ligne discontinue et split-off en ligne pointillé.....	33
Figure 1.6: Fonctions d'ondes des trous lourds en ligne continue, légers en ligne discontinue et split-off en ligne pointillé.....	33
Figure 1.7: Structure de la bande de valence 3D pour un puits quantique de largeur 25 \AA	35
Figure 1.8: Les contours isoénergétiques des trous lourds en fonction des vecteurs d'ondes k_x et k_y	36
Figure 1.9: Les contours isoénergétiques des trous légers en fonction des vecteurs d'ondes k_x et k_y	37
Figure 1.10: Structure de la bande de valence pour un puits quantique de largeur 25 \AA . En ligne discontinue on tient compte de l'anisotropie et en ligne continue l'anisotropie est négligée.....	38
Figure 1.11: Structure de la bande de valence pour un puits quantique de largeur 100 \AA . En ligne discontinue on tient compte de l'anisotropie et en ligne continue l'anisotropie est négligée.....	39
Figure 1.12: Structure de la bande de valence pour un puits quantique de largeur 150 \AA . En ligne discontinue on tient compte de l'anisotropie et en ligne continue l'anisotropie est négligée	40
Figure 2.1: Relation de dispersion des phonons pour AlAs massif (Réf.[10])	53
Figure 2.2: Relation de dispersion des phonons pour GaAs massif (calculée: ligne pleine, mesurée: points), Réf.[10].....	53
Figure 2.3: Potentiel des phonons confinés pour plusieurs largeurs de puits en fonction de la position le long de la direction de croissance.....	67
Figure 2.4: Potentiel des phonons d'interfaces symétrique pour plusieurs largeurs de puits.....	68
Figure 3.1 (a): Taux de diffusion intra-sous-bandes des trous lourds et légers avec absorption d'un phonon optique polaire. (b) La fonction Γ_{ij} pour les trous lourds et légers.....	79
Figure 3.2: Densité d'états finale des trous lourds et légers avec absorption (émission) d'un phonon optique polaire en ligne continue (discontinue).....	80

Figure 3.3 (a): Taux de diffusion intra-sous-bandes des trous lourds et légers avec émission d'un phonon optique polaire. (b) la Fonction Γ_{ij} pour les trous lourds et légers.....	81
Figure 3.4: Taux de diffusions intra-sous-bandes des trous lourds et légers avec absorption d'un phonon optique polaire en incluant (négligeant) la sous-bande split-off en ligne continue (discontinue)	82
Figure 3.5: Taux de diffusion intra-sous-bandes des trous lourds et légers avec émission d'un phonon optique polaire en incluant (négligeant) la sous-bande split-off en ligne continue (discontinue).....	83
Figure 3.6 (a): Taux de diffusion intra-sous-bandes des trous lourds et légers avec absorption d'un phonon optique transversal. (b) la Fonction Γ_{ij} pour les trous lourds et légers.....	87
Figure 3.7: Densité d'états finale des trous lourds et légers avec absorption (émission) d'un phonon optique transversal en ligne continue (discontinue).....	87
Figure 3.8 (a): Taux de diffusion intra-sous-bandes des trous lourds et légers avec émission d'un phonon optique transversal, (b) la fonction Γ_{ij} pour les trous lourds et légers.....	88
Figure 3.9: Taux des diffusions intra-sous-bandes des trous lourds et légers avec absorption d'un phonon optique transversal en incluant (négligeant) la sous bande split-off en ligne continue (discontinue)	90
Figure 3.10: Taux des diffusions intra-sous-bandes des trous lourds et légers avec émission d'un phonon optique transversal en incluant (négligeant) la sous bande split-off en ligne continue (discontinue).....	90
Figure 3.11: Vecteurs d'ondes maximal et minimal dans le plan (xy) du phonon acoustique absorbé par les trous lourds (légers) en ligne continue (discontinue).....	93
Figure 3.12 : Nombre d'occupation des phonons acoustiques en fonction du module du vecteur d'onde.....	94
Figure 3.13: Les fonctions de recouvrement des trous lourds, légers et split-off respectivement en ligne continue, discontinue et pointillé en fonction de la composante q_z du vecteur d'onde du phonon acoustique.....	95
Figure 3.14 (a): Taux de diffusion intra-sous-bandes respectivement des trous lourds et légers avec les phonons acoustiques. (b) la Fonction Γ_{ij} pour les trous lourds et légers.....	96
Figure 3.14 (c): Densité d'états pour les trous lourds (hh) et légers (lh) pour un puits de largeur 25 Å.....	97
Figure 3.15: Taux de diffusion intra-sous-bandes des trous lourds et légers avec l'intégration sur q_z prise sur un intervalle allant jusqu'à la limite de la zone de Brillouin.....	97
Figure 3.16: Taux de diffusion intra-sous-bandes des trous lourds pour une largeur de puits de 30 Å pour une borne maximale d'intégration sur q_z égale à $0,04 \text{ \AA}^{-1}$ ($2\pi/a$) en ligne continue (discontinue).....	98
Figure 3.17: Taux de diffusion intra-sous-bandes des trous lourds et légers avec absorption d'un phonon acoustique en incluant (négligeant) la sous bande split-off en ligne continue (discontinue)...	99
Figure 3.18: Densité d'états des trous lourds et légers en incluant (négligeant) la sous bande split-off en ligne continue (discontinue).....	100
Figure 3.19: Les fonctions de recouvrement des trous lourds et légers en incluant (négligeant) la sous bande split-off en ligne continue (discontinue).....	100

Figure 3.20: Taux de diffusion intra-sous-bandes des trous lourds pour une largeur de puits de 100 Å pour une borne maximale d'intégration sur q_z égale à $0,04 \text{ \AA}^{-1}$ ($2\pi/a$) en ligne continue (discontinue).....	101
Figure 3.21: Les fonctions de recouvrement paires pour une largeur de puits de 100 Å des trous lourds, légers et split-off respectivement en ligne continue, discontinue et pointillé en fonction de la composante q_z du vecteur d'onde du phonon acoustique.....	102
Figure 3.22: Les fonctions de recouvrement impaires des trous lourds, légers et split-off respectivement en ligne continue, discontinue et pointillé en fonction de la composante q_z du vecteur d'onde du phonon acoustique pour une largeur du puits de 100 Å.....	102
Figure 4.1 (a): Taux de diffusion intra-sous-bandes des trous lourds et légers avec absorption d'un phonon optique confiné. (b) La fonction Γ_{ij} pour les trous lourds et légers.....	112
Figure 4.2: Densité d'états finale des trous lourds et légers avec absorption (émission) d'un phonon optique confiné en ligne continue (discontinue).....	112
Figure 4.3 (a): Taux de diffusion intra-sous-bandes des trous lourds et légers avec émission d'un phonon optique confiné. (b) La Fonction Γ_{ij} pour les trous lourds et légers.....	114
Figure 4.4: Taux de diffusion intra-sous-bandes des trous lourds et légers avec absorption d'un phonon optique confiné en incluant (négligeant) la sous bande split-off en ligne continue (discontinue).....	115
Figure 4.5 (a): Taux de diffusion intra-sous-bandes des trous lourds avec absorption d'un phonon optique confiné (b) La fonction Γ_{ij} pour les trous lourds et légers pour plusieurs largeurs de puits.....	116
Figure 4.6: Densité d'états finale des trous lourds avec absorption d'un phonon optique confiné pour plusieurs largeurs de puits en fonction des énergies des trous.....	117
Figure 4.7 : Les contributions au recouvrement dans l'état propre HH du puits provenant des bandes HH, LH et SP pour des puits de largeurs 30 Å et 15 Å.....	118
Figure 4.8 (a): Taux de diffusion intra-sous-bandes des trous lourds avec absorption d'un phonon optique confiné (b) La fonction Γ_{ij} pour les trous lourds et légers pour plusieurs largeurs de puits.....	119
Figure 4.9 : Les contributions au recouvrement dans l'état propre HH du puits provenant des bandes HH, LH et SP pour des puits de largeurs 50 Å et 100 Å.....	120
Figure 4.10: Effet de l'anisotropie sur le taux de diffusion intra-sous-bande des trous lourds avec absorption d'un phonon optique confiné en fonction du vecteur d'onde initial \mathbf{k} dans le plan k_x - k_y	121
Figure 4.11: Effet de l'anisotropie sur le taux de diffusion intra-sous-bande des trous légers avec absorption d'un phonon optique confiné en fonction du vecteur d'onde initial \mathbf{k} dans le plan k_x - k_y	122
Figure 4.12 (a): Taux de diffusion intra-sous-bandes des trous lourds et légers avec absorption d'un phonon optique d'interface. (b) La fonction Γ_{ij} pour les trous lourds et légers.....	127

Figure 4.13: Densité d'états finale des trous lourds et légers avec absorption (émission) d'un phonon optique d'interface en ligne continue (discontinue).....	127
Figure 4.14 (a): Taux de diffusion intra-sous-bandes des trous lourds et légers avec émission d'un phonon optique d'interface. (b) La fonction Γ_{ij} pour les trous lourds et légers.....	129
Figure 4.15: Taux de diffusion intra-sous-bandes des trous lourds et légers avec absorption d'un phonon optique d'interface en incluant (négligeant) la sous bande split-off en ligne continue (discontinue).....	130
Figure 4.16 (a): Taux de diffusion intra-sous-bandes des trous lourds avec absorption d'un phonon optique d'interface (b) La fonction Γ_{ij} pour les trous lourds et légers pour plusieurs largeurs de puits.....	131
Figure 4.17: Densité d'états finale des trous lourds avec absorption d'un phonon optique d'interface pour plusieurs largeurs de puits en fonction des énergies des trous.....	132
Figure 4.18 : Les contributions au recouvrement dans l'état propre HH du puits provenant des bandes HH, LH et SP pour des puits de largeurs 15 Å et 30 Å.....	132
Figure 4.19 (a): Taux de diffusion intra-sous-bandes des trous lourds avec absorption d'un phonon optique d'interface. (b) La fonction Γ_{ij} pour les trous lourds et légers pour plusieurs largeurs de puits.....	134
Figure 4.20: Densité d'états finale des trous lourds avec absorption d'un phonon optique d'interface pour plusieurs largeurs de puits en fonction des énergies des trous.....	135
Figure 4.21 : Les contributions au recouvrement provenant des sous-bandes HH, LH et SP dans l'état propre HH pour des largeurs de 50 Å et 100 Å respectivement.....	135
Figure 4.22: Effet de l'anisotropie sur le taux de diffusion intra-sous-bande des trous lourds avec absorption d'un phonon optique d'interface en fonction du vecteur d'onde initial \mathbf{k} dans le plan k_x - k_y	136
Figure 4.23 : Effet de l'anisotropie sur le taux de diffusion intra-sous-bande des trous légers avec absorption d'un phonon optique d'interface en fonction du vecteur d'onde initial \mathbf{k} dans le plan k_x - k_y	137
Figure 4.24: Taux de diffusion intra-sous-bandes des trous lourds et légers avec absorption d'un phonon optique en utilisant le modèle des phonons confinés plus d'interfaces (en utilisant le modèle massif des phonons optiques) en lignes continues (discontinues).....	138
Figure 4.25: Taux de diffusion intra-sous-bandes des trous lourds et légers avec émission d'un phonon optique en utilisant le modèle des phonons confinés plus d'interfaces (en utilisant le modèle massif des phonons optiques) en ligne continue (discontinue).....	139
Figure 4.26: Taux de diffusion inter-sous-bandes entre la sous bande des trous lourds et légers avec absorption d'un phonon optique polaire (confiné+interface) en fonction de la température.....	140
Figure 5.1 : Structure de la bande valence des trous lourds pour un puits de largeur 25 Å avec les divers états possible de transition d'un trous vecteur d'onde initial k_i	150

Figure 5.1 : Temps de relaxation intra-sous-bande des trous lourds avec absorption d'un phonon optique confiné.....	151
Figure 5.2: Densité d'états finale des trous lourds avec absorption (émission) d'un phonon optique confiné en ligne continue (discontinue).....	152
Figure 5.3 : Les contributions au recouvrement dans l'état propre HH du puits provenant des bandes HH, LH et SP.....	152
Figure 5.4 : Temps de relaxation intra-sous-bande des trous lourds avec émission d'un phonon optique confiné.....	153
Figure 5.5 : Temps de relaxation intra-sous-bande des trous lourds avec absorption d'un phonon optique d'interface.....	156
Figure 5.6: Densité d'états finale des trous lourds avec absorption (émission) d'un phonon optique d'interface en ligne continue (discontinue).....	157
Figure 5.7 : Les contributions au recouvrement dans l'état propre HH du puits provenant des bandes HH, LH et S.....	158
Figure 5.8 : Temps de relaxation intra-sous-bande des trous lourds avec émission d'un phonon optique d'interface.....	158
Figure 5.9 : Temps de relaxation totale intra-sous-bande des trous lourds avec émission et absorption d'un phonon (confiné + interface).....	159
Figure 5.10 : Temps de relaxation totale intra-sous-bande des trous lourds avec émission et absorption d'un phonon confiné ou interface.....	160

Liste des Tableaux

Tableau 1: Paramètres des matériaux utilisés.....	31
--	-----------

Liste des abréviations

hh	trous lourds
lh	trous légers
sp	trous split-off
Δ	l'éclatement entre la bande des trous légers et celles des trous split-off
H_{LK}	Hamiltonien de Luttinger-Kohn
m_{hh}	masse des trous lourds
m_{lh}	masse des trous légers
m_{sp}	masse des trous split-off
$\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3,$	constantes de Luttinger
U	matrice unitaire
E_g	le gap
LO	phonon optique longitudinal
TO	phonon optique transversal
LA	phonon acoustique longitudinal
TA	phonon acoustique transversal
$\omega_{\lambda Q}$	la pulsation (fréquence angulaire) du phonon
\hbar	la constante de Planck réduite
Γ	centre de la zone de Brillouin
K_B	la constante Boltzmann
e^*	la charge effective dynamique du cation
D_λ	la matrice du couplage de déformation de potentiel
DCM	Le modèle du continuum diélectrique

Ξ	la constante du potentiel de déformation
\mathbf{H}_{e-ph}	Hamiltonien d'interaction électron phonon
\bar{D}	le déplacement du champ électrique
$\phi_s(z)$	potentiel des phonons d'interfaces symétriques
$\phi_a(z)$	potentiel des phonons d'interfaces antisymétriques
$\phi_c(z)$	potentiel des phonons confinés
Γ_{ij}	la fonction de recouvrement
$\gamma_{H \rightarrow H}$	taux de diffusion intra-sous-bande des trous lourds
$\gamma_{L \rightarrow L}$	taux de diffusion intra-sous-bande des trous légers
N_Q	le nombre des phonons
τ	le temps relaxation de l'impulsion des électrons

Tables des matières

<i>Introduction Générale</i>	1
 <i>Chapitre I. Structure électronique et bandes d'énergie</i>	
I. Introduction	4
II. Méthode k.p.	5
II.1 Développement de la méthode	6
II.2 Les fonction d'onde au centre de la zone	7
II.3 Hamiltonien de Dresselhaus–Kip–Kittel	9
II.4 Hamiltonien de Luttinger Kohn 6×6	12
III. Energie au voisinage d'un extremum	14
IV. Effet d'un champ extérieur et théorème de la masse effective	16
V. Formalisme de la fonction enveloppe	17
V.1 Semiconducteur massif	18
V.2 Cas des hétérostructures	18
V.3 Conditions aux limites de Ben-Daniel-Duke et les conditions généralisées	20
V.4 Les énergies d'un électron dans un Puits quantique	21
VI. Block diagonalisation de l'Hamiltonien de Luttinger-Kohn	23
VII. Structure électronique des trous dans un puits quantique	26
VIII. Résultats numériques	29
VIII.1 Spectres et fonctions d'ondes: Effet de la largeur	29
VIII.2 Effet de l'anisotropie sur la structure de bandes	34

IX. Conclusion.....	41
Références.....	42

Chapitre II. Dynamique du réseau

I. Introduction.....	50
II. Dynamique du réseau.....	51
II.1 Amplitudes des modes propres de vibration et nombre d'occupation.....	51
II.2 Relation de dispersion des phonons.....	52
II.3 Relation de normalisation des phonons.....	54
III. Interaction électron-phonon.....	55
III.1 Processus d'absorption et d'émission d'un phonon.....	55
III.2 Phonon optique polaire.....	55
III.2.1 Modèle massif des phonons.....	55
III.2.2 Polarisation et charge effective.....	56
III.2.3 Hamiltonien de Fröhlich.....	57
III.3 Potentiel de déformation induit par les phonons optiques.....	59
III.3.1 Hamiltonien d'interaction.....	59
III.4 Phonon acoustique.....	61
III.4.1 Hamiltonien d'interaction électron phonon.....	61
IV. Les phonons optiques dans les hétérostructures.....	62
IV.1 Les divers modèles de phonons.....	62
IV.2 Le modèle du continuum diélectrique (DCM).....	63

V. Conclusion.....	69
Références.....	70

Chapitre III. Interaction trou-phonon dans le modèle massif des phonons

I. Introduction.....	75
II. Taux de diffusion des trous dus aux phonons optiques polaires.....	76
II.1 Traitement analytique général.....	76
II.2 Résultats numériques.....	78
II.2.a Diffusion avec absorption d'un phonon.....	79
II.2.b Diffusion avec émission d'un phonon.....	80
II.2.c Effet de la sous-bande split-off sur les taux de diffusion.....	81
III. Taux de diffusion dus au potentiel de déformation des modes optiques.....	84
III.1 Traitement analytique général.....	84
III.2 Résultats numériques.....	86
III.2.a Diffusion avec absorption d'un phonon	86
III.2.b Diffusion avec émission d'un phonon.....	88
III.2.c Effet de la sous bande split-off sur le taux de diffusion.....	89
IV. Taux de diffusion des trous dus aux phonons acoustiques.....	91
VI.1 Traitement analytique général.....	91
VI.2 Résultats numériques.....	95
VI.2.a Diffusion avec absorption ou émission d'un phonon.....	95
VI.2.b Effet de la sous bande split-off sur le taux de diffusion.....	98

VI.2.c Effet de la largeur du puits.....	101
VII. Conclusion.....	104
Références.....	105

Chapitre IV. Interaction des trous avec les phonons optiques polaires confinés et d'interfaces

I. Introduction.....	108
II. Taux de diffusion des trous avec les phonons optiques polaires confinés	109
II.1 Traitement analytique général.....	109
II.2 Résultats numériques.....	111
II.2.1 Diffusion avec absorption d'un phonon.....	111
II.2.2 Diffusion avec émission d'un phonon.....	113
II.2.3 Effet de la sous bande split-off.....	114
II.2.4 Effet de la largeur du puits quantique.....	115
II.2.5 Effet de l'anisotropie sur les taux de diffusion.....	121
III. Taux de diffusion des trous avec les phonons optiques polaires d'interfaces.....	123
III.1 Traitement analytique général.....	123
III.2 Résultats numériques.....	125
III.2.1 Diffusion avec absorption d'un phonon.....	126
III.2.2 Diffusion avec émission d'un phonon.....	128
III.2.3 Effet de la sous bande split-off.....	129

III.2.4 Effet de la largeur du puits quantique.....	130
III.2.5 Effet de l'anisotropie sur les taux de diffusion.....	136
IV. Comparaison et discussion.....	138
V. Conclusion.....	141
Références.....	142

Chapitre V. Temps de relaxation de l'impulsion des trous lourds dus aux phonons optiques polaires

I. Introduction.....	146
II. Temps de relaxation de l'impulsion des trous avec les phonons optiques polaires confinés.....	147
II.1 Traitement analytique général.....	147
II.2 Résultats numériques.....	151
II.2.1 Temps de relaxation avec absorption d'un phonon.....	151
II.2.2 Temps de relaxation avec émission d'un phonon.....	153
III. Temps de relaxation de l'impulsion des trous avec les phonons optiques d'interfaces.....	156
III. 1 Traitement analytique général.....	156
III.2 Résultats numériques.....	156
III.2.1 Temps de relaxation avec absorption d'un phonon.....	157
III.2.2 Temps de relaxation avec émission d'un phonon.....	159

IV. Conclusion.....	161
Références.....	162
Conclusion Générale.....	165

Introduction Générale

Introduction Générale

L'interaction électron-phonon présente un intérêt très particulier dans le domaine de la physique du solide [1-10]. En effet, cette dernière détermine un nombre élevé de propriétés physiques notamment dans les processus faisant entrer le transport de charges [11-12] et aussi ceux où il y a un transfert de chaleur entre les porteurs chauds et le réseau, tandis que dans les métaux elle donne naissance comme il est déjà très connu au phénomène spectaculaire de la supraconductivité [13]. D'un autre côté, cette même interaction joue aussi un rôle primordial dans les propriétés optiques des semiconducteurs car elle participe à la relaxation des porteurs de charges et détermine donc certaines caractéristiques telle que la polarisation de la lumière émise lors de la photoluminescence qui suit l'excitation inter-bande par un laser [14]. Elle joue aussi un rôle central dans les lasers à cascades quantiques [15] et aussi en spintronique du fait de son implication dans la relaxation du spin [16].

Par conséquent, beaucoup de travaux ont été consacrés à l'étude de cette interaction aussi bien théoriquement [17-19] qu'expérimentalement [20-22]. Notre but dans ce travail est précisément l'étude de cette interaction dans les puits quantiques.

Notre travail est organisé dans cette thèse comme suit: Dans le premier chapitre, nous exposons la structure de la bande de valence dans un puits quantique dans le système GaAs/Al_xGaAs_{1-x}. En utilisant l'Hamiltonien de Luttinger-Kohn et après block diagonalisation, nous calculons la structure électronique des trous lourds, légers et split-off dans le cadre de l'approximation axiale et semi-axiale en tenant compte de l'anisotropie. Nous étudions aussi l'effet de la largeur du puits sur la structure de la bande de valence.

Dans le chapitre II, nous donnons un compte rendu des divers modes de phonons existant dans les hétérostructures à semiconducteurs. Nous y exposons aussi leurs interactions avec les électrons en discutant les différents modèles utilisés dans le traitement de l'interaction électron-phonon dans ces systèmes.

Pour le chapitre III, dans le cadre du modèle massif des phonons, nous calculons les taux de diffusion intra-sous bandes des trous lourds et légers avec absorption et émission d'un phonon optique polaire en fonction de l'énergie initiale des trous. D'autre part, nous calculons aussi les taux de diffusion dus au potentiel de déformation des modes optiques transversaux et longitudinaux. Nous étudions ensuite l'interaction des trous avec le phonons acoustiques en

Introduction Générale

utilisant l'approximation élastique. Pour ces divers processus d'interaction, *i.e* acoustique et optique, nous montrons l'importance d'inclure la sous bande split-off, et nous comparons nos résultats avec ceux déjà obtenus dans le matériau massif par d'autres auteurs. Nous montrons également la relation qui lie entre eux les taux de diffusion d'une part et la densité d'états finale et les fonctions de recouvrements d'autre part.

Le chapitre IV est consacré à l'étude de l'interaction des trous avec les phonons optiques polaires en utilisant le modèle du continuum diélectrique. En d'autres termes, nous tenons compte du confinement des phonons et la présence des phonons d'interfaces. Tout d'abord, en première partie nous calculons les taux de diffusion intra-sous bandes des trous lourds ainsi que les trous légers accompagnés par l'émission ou l'absorption d'un phonon d'interface en fonction de l'énergie initiale du trou. Nous étudions également l'effet de la largeur du puits sur les taux de diffusion et montrons la dépendance entre les variations des taux de diffusion en fonction de l'énergie initiale des trous et le changement de la densité d'états finale et/ou les fonctions de recouvrements. Nous examinons aussi en particulier l'effet du warping sur les taux de diffusion où nous découvrons une forte anisotropie pour ces derniers dans le cas des trous lourds. Nous étudions également l'importance d'inclure la sous-bande split-off dans le calcul des taux de diffusion.

Dans la deuxième partie de ce même chapitre, et toujours dans le cadre du même modèle, nous calculons les taux de diffusion intra-sous bandes des trous lourds et légers avec émission ou absorption d'un phonon d'interface. Nous étudions ensuite l'effet de la largeur du puits sur les taux de diffusion et nous expliquons leurs comportements grâce à la dépendance en fonction de la largeur de la densité d'états finales et/ou des fonctions de recouvrements. L'effet de l'anisotropie et l'inclusion de la sous-bande split-off sur les taux de diffusion sont aussi traités. Nous comparons les résultats de nos deux modèles : Le modèle massif des phonons utilisant l'Hamiltonien de Fröhlich et le modèle du milieu diélectrique continu. Nous terminons par une comparaison de nos résultats avec ceux obtenus par d'autres auteurs pour le *GaAs* massif.

Dans le chapitre V, partant de l'équation de Boltzmann, nous calculons pour les trous lourds le temps de relaxation intra-sous-bande lié à l'impulsion dû à l'interaction avec les phonons confinés et d'interfaces.

Enfin, nous terminons avec une conclusion générale qui résume notre travail et nos résultats.

CHAPITRE I

Structure

électronique et

bandes d'énergie

*Dans ce chapitre, nous faisons un bref exposé de la méthode **k.p** que nous suivons ensuite par l'introduction de l' Hamiltonien de Luttinger-Kohn. Après des simplifications mathématiques nous calculons la structure de la bande de valence dans le puits quantique $Al_{0.3}Ga_{0.7}As / GaAs / Al_{0.3}Ga_{0.7}As$. L'effet de la largeur du puits sur la structure de la bande est exploré ainsi que l'inclusion de la sous bande split-off et du warping.*

I. Introduction

Les hétérostructures à semiconducteurs, tels que les puits et les multipuits quantiques avec leurs épaisseurs du même ordre de grandeur que la longueur d'onde de de Broglie associée des électrons présentent un vaste potentiel d'applications technologiques à titre d'exemple, les photodétecteurs de rayons infrarouges utilisant un puits quantique à escalier AlGa_xN/GaN [23], les photodétecteurs de rayonnement ultraviolet utilisant les multipuits quantiques Al_xGa_{1-x}N/GaN [24], les cellules photovoltaïques à base de multipuits InGa_xN/GaN [25], le transistor à effet de champ dans le puits Si_{0.3}Ge_{0.7}/Ge avec haute mobilité [26], le laser au puits quantique GaAs/Al_{0.3}Ga_{0.7}As caractérisé par son faible courant de seuil et sa robustesse vis à vis de la température [27].

Ces applications technologiques importantes reposent en premier lieu sur les propriétés physiques de ces systèmes à l'échelle microscopique. En effet, le confinement des porteurs de charge (électrons ou trous) dans une direction conduit à la quantification du spectre d'énergie qui se traduit par l'apparition de sous-bandes modifiant ainsi de façon radicale la structure de bande, la densité d'états et les fonctions d'ondes. [28].

L'avantage de ces systèmes est la flexibilité avec laquelle ces grandeurs physiques essentielles peuvent être modifiées à souhait par exemple, en agissant sur la largeur du puits, en dopant le matériau, en appliquant un champ externe (électrique et/ou magnétique), en choisissant les matériaux des barrières et enfin en soumettant le système à des contraintes mécaniques [29].

L'interprétation des résultats expérimentaux ou bien la prédiction de propriétés physiques mesurables nécessite un apport théorique conséquent : La structure électronique du système qu'on peut obtenir par diverses méthodes. Calculer la structure de bande d'un cristal, revient à déterminer l'évolution de l'énergie en fonction du vecteur d'onde des électrons ou des trous dans la première zone de Brillouin [29].

Dans notre cas, celui des semiconducteurs dont nous sommes concernés ici, la structure de bandes constitue l'élément le plus important dans la compréhension des propriétés électroniques [30-33] et optoélectroniques [34-37].

Plusieurs méthodes pour calculer la structure de bandes existent, parmi celles-ci, on peut citer : La méthode des orbitales atomiques [38], aussi appelée approximation des liaisons fortes (tight binding method), la méthode du pseudopotentiel [39], la méthode de la fonction de Green ou KKR (Kohn Korringa Rostoker) [40] ou encore les méthodes linéaires introduites par Andersen [41] telles que la méthode LMTO et LAPW.

Pour les semiconducteurs, une méthode quasi-empirique toute particulière dite méthode **k.p** [42] est très utilisée à cause de sa grande simplicité et de son efficacité déjà prouvée. Cette méthode, très utilisée pour construire la structure de bande [42-45] dans un cristal, est basée sur la théorie des perturbations et s'effectue généralement autour d'un extremum dans l'espace réciproque ; les états de Bloch de cet extremum étant pris comme base. Dans la plupart des cas, ce dernier se situe au milieu de la zone, c'est-à-dire au point Γ . Ceci est le cas pour une grande majorité de semiconducteurs III-V tels que GaAs, AlAs, InSb, InAs [46].

Dans le cas des hétérostructures, cette méthode a été intelligemment adaptée en imposant la continuité du courant de probabilité à travers les interfaces. Tout notre travail dans cette thèse repose sur cette méthode, c'est pourquoi nous lui consacrons entièrement le présent chapitre.

II. La Méthode **k.p**

Dans sa forme la plus simple, la théorie **k.p** est valable juste au voisinage de l'extremum pour lequel elle est développée. Dans les semiconducteurs, contrairement aux métaux, ce sont les extrema des bandes qui jouent les rôles les plus importants à cause de leur implication dans plusieurs phénomènes physiques, d'où l'intérêt de cette méthode de calcul.

Historiquement, la méthode **k.p** fut utilisée pour la première fois par Bardeen [47] dans son étude sur les métaux. Par la suite, elle a connu un développement élaboré sous Luttinger et Kohn [48] qui l'ont appliqué à la bande de valence des semiconducteurs, pour le cas des semiconducteurs à gap étroit, Kane [49] étudia en détail le couplage **k.p** entre la bande de conduction et les bandes de valence et aboutit à l'Hamiltonien **k.p** qui porte son nom. Allant beaucoup plus loin, Cardona et Pollak [50] montrèrent que cette méthode permet

en fait de décrire la structure électronique à travers toute la zone de Brillouin et ce en utilisant une matrice d'ordre 15.

II.1 Développement de la méthode

Dans un cristal tridimensionnel, l'équation de Schrödinger pour un électron s'écrit [51]

$$H \Psi = E \Psi \quad (1.1)$$

où H est l'Hamiltonien à une particule, Ψ et E étant respectivement la fonction d'onde et l'énergie propre de l'électron. Le théorème de Bloch stipule que la solution s'écrit sous la forme suivante [39]

$$\Psi_{n\vec{k}}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} u_{n\vec{k}}(\vec{r}) \quad (1.2)$$

où $u_{n\vec{k}}(\vec{r})$ est une fonction périodique, n et \vec{k} étant respectivement l'indice de bande et le vecteur d'onde qui sera limité à la première zone de Brillouin. La substitution de (1.2) dans (1.1) donne comme suit une équation pour la partie périodique $u_{n\vec{k}}(\vec{r})$ [39] :

$$\left[\frac{p^2}{2m_0} + \frac{\hbar}{m_0} \vec{k} \cdot \vec{p} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + V(\vec{r}) \right] u_{n\vec{k}}(\vec{r}) = E_n(\vec{k}) u_{n\vec{k}}(\vec{r}) \quad (1.3)$$

Dans l'équation (1.3) $V(\vec{r})$ est un potentiel ayant la périodicité du cristal et \vec{p} est l'impulsion de l'électron avec m_0 représentant la masse à l'état libre de ce dernier. Considérant un semiconducteur dont la bande de conduction et les bandes de valence ont leur extrema au centre de la zone, c'est-à-dire au point $\vec{k} = 0$, l'équation (1.3) devient [39] :

$$\left[\frac{p^2}{2m_0} + V(\vec{r}) \right] u_{n0} = E_n(0) u_{n0} \quad (1.4)$$

L'équation de (1.4) permet de trouver les solutions u_{n0} et les énergies correspondantes $E_n(0)$.

La méthode **k.p** consiste à traiter le terme $\frac{\hbar}{m_0} \vec{k} \cdot \vec{p} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0}$ dans l'équation (1.3) comme une perturbation.

A l'ordre 2, l'application de la théorie des perturbations à l'Eq. (1.4) donne [39]

$$E_n(k) = E_{n0} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + \frac{\hbar^2}{m_0^2} \sum_{m \neq n} \frac{|\langle u_{m0} | \vec{k} \cdot \vec{p} | u_{n0} \rangle|^2}{E_{n0} - E_{m0}} \quad (1.5)$$

Les fonctions de Bloch, quant à elles, sont données par [39]

$$u_{nk} = u_{n0} + \frac{\hbar}{m_0} \sum_{m \neq n} \frac{\langle u_{m0} | \vec{k} \cdot \vec{p} | u_{n0} \rangle}{E_{n0} - E_{m0}} u_{m0} \quad (1.6)$$

Si on tient compte de l'interaction spin-orbit, l'Hamiltonian de couplage suivant [51]

$$H_{SO} = \frac{\hbar}{4m_0^2 c^2} (\vec{\nabla} V \times \vec{p}) \cdot \vec{\sigma} \quad (1.7)$$

s'ajoute à (1.3). Dans la formule (1.7), c est la vitesse de la lumière dans le vide, V est le potentiel périodique du cristal, p est l'impulsion de l'électron et $\vec{\sigma}$ sont les matrices de Pauli.

II.2 Les fonction d'onde au centre de la zone

Les fonctions d'onde de l'atome d'hydrogène, sont de la forme suivante [52] :

$$\Psi_{n,l,m_l}(r, \theta, \varphi) = R(r) \mathcal{Y}_{l,m_l}(\theta, \varphi) \quad (1.8)$$

où $R(r)$ est la partie radiale, tandis que les fonctions $\mathcal{Y}_{l,m_l}(\theta, \varphi)$ sont les harmoniques sphériques. L'indice n est le nombre quantique principal représentant la couche électronique de l'atome, l est le nombre quantique orbital et m_l est le nombre quantique magnétique. En coordonnées cartésiennes, pour $l = 0$, l'orbitale atomique sphériquement symétrique s_a s'écrit [52]

$$s_a = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} e^{-\frac{r}{a_0}} \quad (1.9)$$

où a_0 est le rayon de Bohr. A partir des fonctions propres de la formule (1.8), on peut construire des fonctions d'onde réelles par combinaison linéaire, dans le cas des états 2p, on aboutit aux fonctions d'onde x_a, y_a, z_a données par [52] :

$$x_a = \frac{1}{4\sqrt{2\pi a_0^3}} \frac{x}{a_0} e^{-\frac{r}{2a_0}} \quad (1.10)$$

$$y_a = \frac{1}{4\sqrt{2\pi a_0^3}} \frac{y}{a_0} e^{-\frac{r}{2a_0}} \quad (1.11)$$

$$z_a = \frac{1}{4\sqrt{2\pi a_0^3}} \frac{z}{a_0} e^{-\frac{r}{2a_0}} \quad (1.12)$$

qu'on notera p_x , p_y et p_z . L'introduction du spin et son couplage avec le moment orbital conduit à des états propres de moment cinétique total $J = 3/2$ et $J = 1/2$ respectivement. Faisant usage des coefficients de Clebsch-Gordan les états propres $|J M\rangle_a$ sont donnés par [53]

$$\left| \frac{3}{2} \frac{3}{2} \right\rangle_a = |y_{11} \uparrow\rangle \quad (1.3)$$

$$\left| \frac{3}{2} \frac{1}{2} \right\rangle_a = \left| \sqrt{\frac{2}{3}} y_{10} \uparrow + \frac{1}{\sqrt{3}} y_{11} \downarrow \right\rangle \quad (1.14)$$

$$\left| \frac{3}{2} -\frac{1}{2} \right\rangle_a = \left| \frac{1}{\sqrt{3}} y_{1-1} \uparrow + \sqrt{\frac{2}{3}} y_{10} \downarrow \right\rangle \quad (1.15)$$

$$\left| \frac{3}{2} -\frac{3}{2} \right\rangle_a = |y_{1-1} \downarrow\rangle \quad (1.16)$$

$$\left| \frac{1}{2} \frac{1}{2} \right\rangle_a = \left| \frac{1}{\sqrt{3}} y_{10} \uparrow - \sqrt{\frac{2}{3}} y_{11} \downarrow \right\rangle \quad (1.17)$$

$$\left| \frac{1}{2} -\frac{1}{2} \right\rangle_a = \left| \sqrt{\frac{2}{3}} y_{1-1} \uparrow - \frac{1}{\sqrt{3}} y_{10} \downarrow \right\rangle \quad (1.18)$$

Pour $l=1$, les fonctions y_{lm} satisfont [53]

$$y_{11} = i \frac{x_a + iy_a}{-\sqrt{2}} \quad (1.19)$$

$$y_{10} = iz_a \quad (1.20)$$

$$y_{1-1} = i \frac{x_a - iy_a}{\sqrt{2}} \quad (1.21)$$

Dans les semiconducteurs III-V, le groupe ponctuel est T_d , et au centre de la zone l'équation de Schrödinger (1.4) reste invariante sous l'effet de toute les opérations de ce groupe. Ceci confère aux solutions u_{n0} certaines propriétés particulières de symétrie. Pour la bande de valence, et sous l'effet des opérations de T_d , les parties orbitales des fonctions propres u_{n0} qu'on notera X, Y et Z se transforment de façon analogue à celle des orbitales x_a, y_a, z_a sous l'effet du groupe orthogonale $O(3)$. Par conséquent, on écrit [53] :

$$\left| \frac{3}{2}; \frac{3}{2} \right\rangle = -\frac{1}{\sqrt{2}} |(X + iY) \uparrow\rangle \quad (1.22)$$

$$\left| \frac{3}{2}; \frac{1}{2} \right\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}} |-(X + iY) \downarrow + 2 Z \uparrow\rangle \quad (1.23)$$

$$\left| \frac{3}{2}; -\frac{1}{2} \right\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}} |(X - iY) \uparrow + 2 Z \downarrow\rangle \quad (1.24)$$

$$\left| \frac{3}{2}; -\frac{3}{2} \right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |(X - iY) \downarrow\rangle \quad (1.25)$$

$$\left| \frac{1}{2}; \frac{1}{2} \right\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} |(X + iY) \downarrow + Z \uparrow\rangle \quad (1.26)$$

$$\left| \frac{1}{2}; -\frac{1}{2} \right\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} |(X - iY) \uparrow - Z \downarrow\rangle \quad (1.27)$$

II.3 Hamiltonien de Dresselhaus–Kip–Kittel

L'eq. (1.6), représente la fonction d'onde à l'ordre 1 des perturbations, dans le cas générale, la fonction d'onde s'écrit sous la forme suivante [54]

$$u_{nk} = \sum_m c_m^n(k) u_{m0} \quad (1.28)$$

En substituant l'Eq. (1.28) dans (1.3), et en projetant sur l'état u_{n_0} , on obtient [54] :

$$\sum_m \left[\left(E_n(0) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \right) \delta_{nm} + \frac{\hbar}{m_0} \vec{k} \cdot \vec{p}_{nm} \right] c_m^n(k) = E_n(\vec{k}) c_n^n(k) \quad (1.29)$$

où l'élément de matrice \vec{p}_{nm} est donné par [54]

$$\vec{p}_{nm} = \int_{V_c} u_n \overleftarrow{p} u_m d^3r \quad (1.30)$$

Dans la formule (1.30), V_c est le volume d'une maille élémentaire alors que δ_{nm} est le symbole de Kronecker.

Dans l'Eq. (1.29) traitant le terme $\frac{\hbar}{m_0} \vec{k} \cdot \vec{p}_{nm}$ comme une perturbation, pour l'Hamiltonien $\mathbf{k.p}$, on obtient alors les éléments de matrice suivants [55]

$$H_{ij} = \left(E_v + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \right) \delta_{ij} + \frac{\hbar^2}{m_0^2} \sum_{\alpha} \frac{\vec{k} \cdot \overleftarrow{p}_{i\alpha} \overleftarrow{k} \cdot \overleftarrow{p}_{\alpha j}}{E_v - E_{\alpha}} \quad (1.31)$$

Dans l'Eq. (1.31), E_v est l'énergie du maximum de la bande de valence au point Γ et α désigne toutes les autres bandes non dégénérées avec celle-ci. Dans la base $|X \uparrow\rangle, |Y \uparrow\rangle, |Z \uparrow\rangle$, écrite sous forme matricielle l'Eq.(1.31) porte le nom d'Hamiltonien Dresselhaus–Kip–Kittel et est représentée par [56]

$$H_{3x3} = \begin{pmatrix} E_v + Lk_x^2 + M(k_y^2 + k_z^2) & Nk_x k_y & Nk_x k_z \\ Nk_y k_x & E_v + Lk_y^2 + M(k_z^2 + k_x^2) & Nk_y k_z \\ Nk_z k_x & Nk_z k_y & E_v + Lk_z^2 + M(k_x^2 + k_y^2) \end{pmatrix} \quad (1.32)$$

avec un Hamiltonien similaire pour les états de spin down, c'est-à-dire $|X \downarrow\rangle, |Y \downarrow\rangle, |Z \downarrow\rangle$.

Ecrit de façon compacte pour les deux états de spin, l'Hamiltonien s'écrit alors [56]

$$H_{6x6} = \begin{pmatrix} H_{3x3} & 0 \\ 0 & H_{3x3} \end{pmatrix} \quad (1.33)$$

Dans l'Eq. (1.32) définissant l'Hamiltonien de Dresselhaus–Kip–Kittel les paramètres L , M et N sont donnés respectivement par [56]

$$L = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + \frac{\hbar^2}{m_0^2} \sum_{\alpha} \frac{|\langle X | p_x | \alpha \rangle|^2}{E_v - E_{\alpha}} \quad (1.34)$$

$$M = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + \frac{\hbar^2}{m_0^2} \sum_{\alpha} \frac{|\langle X | p_y | \alpha \rangle|^2}{E_v - E_{\alpha}} \quad (1.35)$$

$$N = \frac{\hbar^2}{m_0^2} \sum_{\alpha} \frac{\langle X | p_x | \alpha \rangle \langle \alpha | p_y | Y \rangle + \langle X | p_y | \alpha \rangle \langle \alpha | p_x | Y \rangle}{E_v - E_{\alpha}} \quad (1.36)$$

Sur la base $|X \uparrow\rangle, |Y \uparrow\rangle, |Z \uparrow\rangle, |X \downarrow\rangle, |Y \downarrow\rangle, |Z \downarrow\rangle$, l'Hamiltonien spin-orbit H_{SO} s'écrit [57]

$$H_{SO} = \frac{\Delta_0}{3} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 & 0 & 0 & 1 \\ i & 0 & 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & 0 & -1 & i & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & i & 0 \\ 0 & 0 & -i & -i & 0 & 0 \\ 1 & i & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (1.37)$$

Incluant l'interaction spin-orbite, l'Hamiltonien total devient

$$H = H_{6 \times 6} + H_{SO} \quad (1.38)$$

Avec l'inclusion de H_{SO} seuls, J et m_J sont de bons nombres quantiques et la base la mieux adaptée est alors celle donnée par les Eqs. (1.22-27).

Dans cette base, H_{SO} est diagonal, explicitement sa matrice est donnée par [51]

$$H_{SO} = \frac{\Delta_0}{3} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -2 \end{pmatrix} \quad (1.93)$$

II.4 Hamiltonien de Luttinger Kohn 6x6

L'Hamiltonien $\mathbf{k.p}$ dans la base (1.22-27), s'obtient à partir de la relation suivante [58]

$$H_{LK} = AHA^{-1} \quad (1.40)$$

où H est l' Hamiltonien de l'Eq. (1.38).

Dans l'Eq. (1.40), A est une matrice unitaire reliant les deux bases qui est explicitement donnée par [58]

$$A = \begin{pmatrix} \frac{-1}{\sqrt{2}} & \frac{-i}{\sqrt{2}} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{\frac{2}{3}} & \frac{-1}{\sqrt{6}} & \frac{-i}{\sqrt{6}} & 0 \\ \frac{1}{\sqrt{6}} & \frac{-i}{\sqrt{6}} & 0 & 0 & 0 & \sqrt{\frac{2}{3}} \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{-i}{\sqrt{2}} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{\sqrt{3}} & \frac{1}{\sqrt{3}} & \frac{i}{\sqrt{3}} & 0 \\ \frac{1}{\sqrt{3}} & \frac{-i}{\sqrt{3}} & 0 & 0 & 0 & \frac{-1}{\sqrt{3}} \end{pmatrix} \quad (1.41)$$

L'Hamiltonien 6x6 H_{LK} résultant porte le nom d'hamiltonien de Luttinger-Kohn et donné par [59-60]

$$H = - \begin{pmatrix} P + Q & -S & R & 0 & -\frac{S}{\sqrt{2}} & \sqrt{2}R \\ -S^+ & P - Q & 0 & R & -\sqrt{2}Q & \sqrt{\frac{3}{2}}S \\ R^+ & 0 & P - Q & S & \sqrt{\frac{3}{2}}S^+ & \sqrt{2}Q \\ 0 & R^+ & S^+ & P + Q & -\sqrt{2}R^+ & -\frac{S^+}{\sqrt{2}} \\ -\frac{S^+}{\sqrt{2}} & -\sqrt{2}Q & \sqrt{\frac{3}{2}}S & -\sqrt{2}R & P + \Delta & 0 \\ \sqrt{2}R^+ & \sqrt{\frac{3}{2}}S^+ & \sqrt{2}Q & -\frac{S}{\sqrt{2}} & 0 & P + \Delta \end{pmatrix} \quad (1.42)$$

où

$$P = \frac{\hbar^2}{2m_0} \gamma_1 (k_z^2 + k^2) \quad (1.43)$$

$$Q = \frac{\hbar^2}{2m_0} \gamma_2 (-2k_z^2 + k^2) \quad (1.44)$$

$$S = \sqrt{3} \frac{\hbar^2}{m_0} \gamma_3 k_z (k_x - ik_y) \quad (1.45)$$

$$R = \sqrt{3} \frac{\hbar^2}{2m_0} (-\gamma_2 (k_x^2 - k_y^2) + 2i\gamma_3 k_x k_y) \quad (1.46)$$

avec

$$k^2 = k_x^2 + k_y^2 \quad (1.47)$$

Dans les Eqs. (1.43-47), les paramètres sans dimensions $\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3$ sont des grandeurs phénoménologiques appelées constantes de Luttinger, m_0 et \hbar étant ici respectivement la masse d'électron au repos et la constante de Planck réduite ($\hbar = h / 2\pi$), quant à Δ , il représente l'éclatement entre les bandes de valence de symétrie Γ_8 et celles de symétrie Γ_7 dû à l'interaction spin-orbite, c'est à dire entre les bandes des trous lourds et légers d'une part et la bande split-off d'autre part, tandis que k_x, k_y, k_z sont respectivement les composantes x, y, z du vecteur d'onde \vec{k} .

Les vecteurs de base des Eqs.(1.22-27) correspondent aux fonctions de Bloch u_{nk} au point $\vec{k} = 0$ et sont explicitement données par

$$u_{10} = -\frac{1}{\sqrt{2}}|(X + iY)\uparrow\rangle \quad (1.48)$$

$$u_{20} = \frac{1}{\sqrt{6}}|-(X + iY)\downarrow + 2Z\uparrow\rangle \quad (1.49)$$

$$u_{30} = \frac{1}{\sqrt{6}}|(X - iY)\downarrow + 2Z\uparrow\rangle \quad (1.50)$$

$$u_{40} = \frac{1}{\sqrt{2}}|(X - iY)\downarrow\rangle \quad (1.51)$$

$$u_{50} = \frac{1}{\sqrt{3}}|(X + iY)\downarrow + Z\uparrow\rangle \quad (1.52)$$

$$u_{60} = -\frac{1}{\sqrt{3}}|(X - iY)\uparrow - Z\downarrow\rangle \quad (1.53)$$

III. Energie au voisinage d'un extremum

Au voisinage d'un extremum situé au point $\vec{k} = \vec{k}_0$, à l'ordre 2, l'énergie s'écrit [61]

$$E_n(\vec{k}) = E_n(\vec{k}_0) + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^3 \left. \frac{\partial^2 E_n}{\partial k_i \partial k_j} \right|_{\vec{k}=\vec{k}_0} (k_i - k_i^0)(k_j - k_j^0) \quad (1.54)$$

On définit les composantes m_{ij}^* du tenseur de la masse effective comme suit [61]

$$\frac{1}{m_{ij}^*} = \frac{1}{\hbar^2} \left. \frac{\partial^2 E_n}{\partial k_i \partial k_j} \right|_{\vec{k}=\vec{k}_0} \quad (1.55)$$

Dans le cas de la bande de valence de GaAs, au centre de la zone de Brillouin, l'Hamiltonien (1.42) de Luttinger-Kohn donne lieu à une double dégénérescence des bandes des trous lourds et légers, la bande split off quant à elle étant séparé de celles-ci par l'interaction spin-orbite Δ .

Pour un vecteur d'onde \vec{k} le long de la direction [001] au sein de la zone de Brillouin, les éléments non diagonaux dans l'Hamiltonien de Luttinger-Kohn (1.42) sont nuls. Les trous lourds, légers, et split off ont alors les énergies suivantes [39]

$$E_{hh} = -\frac{\hbar^2 k_z^2}{2m_{hh}} \quad (1.56)$$

$$E_{lh} = -\frac{\hbar^2 k_z^2}{2m_{lh}} \quad (1.57)$$

$$E_{sp} = -\frac{\hbar^2 k_z^2}{2m_{sp}} - \Delta \quad (1.58)$$

Où on a introduit les masses effectives m_{hh} , m_{lh} et m_{sp} des trous lourds, légers et split-off respectivement données par[55]

$$m_{hh} = \frac{m_0}{\gamma_1 - 2\gamma_2} \quad (1.59)$$

$$m_{lh} = \frac{m_0}{\gamma_1 + 2\gamma_2} \quad (1.60)$$

$$m_{sp} = \frac{m_0}{\gamma_1} \quad (1.61)$$

Au voisinage du point Γ , le couplage entre les bandes étant faible la dispersion des bandes est parabolique. Cependant, à mesure qu'on s'éloigne du centre de la zone le couplage entre les bandes introduit une non-parabolicité importante se traduisant par une dépendance en énergie très marquée de la masse effective.

Si on prend la limite $\Delta \rightarrow \infty$, le couplage à la bande split off s'annule et l'Hamiltonien 6×6 de Luttinger-Kohn se réduit à une matrice 4×4 , les énergies des trous lourds et légers sont alors données respectivement par [55]

$$E_{hh}(\vec{k}) = -P + \sqrt{|Q|^2 + |S|^2 + |R|^2} \quad (1.62)$$

$$E_{lh}(\vec{k}) = -P - \sqrt{|Q|^2 + |S|^2 + |R|^2} \quad (1.63)$$

IV. Effet d'un champ extérieur et théorème de la masse effective

La vitesse de groupe d'un électron dans un cristal occupant la bande n d'énergie $E_n(\vec{k})$ est donnée par [55]

$$\vec{v}_g = \frac{1}{\hbar} \vec{\nabla}_k E_n(\vec{k}) \quad (1.64)$$

Pour une bande isotrope, cette vitesse et le vecteur d'onde sont parallèles on a alors

$$v_g = \frac{1}{\hbar} \frac{dE_n(\vec{k})}{dk} \quad (1.65)$$

Supposons maintenant que ce système est plongé dans un champ électrique extérieur $\vec{\xi}$ suivant l'axe x et examinons de près le mouvement de l'électron. On supposera que l'électron restera dans la même bande, c'est-à-dire qu'on néglige les transitions interbandes dues au champ $\vec{\xi}$ considéré trop faible pour ce genre de processus.

Du fait de sa charge $-e$ l'électron ressent une force $-e\vec{\xi}$, qui effectuera sur ce dernier un travail $-e\xi dx$ quand celui-ci se déplace d'une distance $dx=v_g dt$ pendant le temps dt . Ce travail produit un changement d'énergie dE qui se traduit par un changement $d\vec{k}$ du vecteur d'onde \vec{k} qu'on cherche. On a

$$dE = -e\xi dx = -e\xi \frac{dx}{dt} dt = -e\xi v_g dt \quad (1.66)$$

En remplaçant la vitesse v_g par sa formule dans l'équation (1.66), on obtient :

$$\hbar dk = -e\xi dt \quad (1.67).$$

en notant par a l'accélération de l'électron, prenant la dérivée de (1.65) par rapport à t on obtient

$$a = \frac{1}{\hbar} \frac{d^2 E}{dk^2} \frac{dk}{dt} \quad (1.68)$$

La substitution de l'équation (1.67) dans (1.68) donne :

$$a = -\frac{1}{\hbar^2} \frac{d^2 E}{dk^2} e\xi \quad (1.69)$$

En notant par m^* le terme $\frac{\hbar^2}{\frac{d^2E}{dk^2}}$, l'Eq. (1.69) donne

$$F = m^* a = -e \xi \quad (1.70)$$

dont la forme rappelle bien la loi de Newton de la mécanique classique où la masse réelle m est remplacée par la masse effective m^* . Le traitement aboutissant à l'Eq.(1.70) repose sur l'isotropie de $E_n(\vec{k})$ et sa parabolicité c'est-à-dire

$$E_n(k) = E_{n0} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \quad (1.71)$$

la masse effective m^* étant donnée par [55]

$$\frac{1}{m^*} = \frac{1}{m_0} \left[1 + \frac{2}{m_0} \sum_{m \neq n} \frac{|\langle u_{m0} | p_x | u_{n0} \rangle|^2}{E_{n0} - E_{m0}} \right] \quad (1.72)$$

où les éléments de matrice entrant dans (1.72) vérifient [55]

$$|\langle u_{m0} | p_x | u_{n0} \rangle|^2 = |\langle u_{m0} | p_y | u_{n0} \rangle|^2 = |\langle u_{m0} | p_z | u_{n0} \rangle|^2 \quad (1.73)$$

La masse effective est mesurée expérimentalement par résonance cyclotron [62], spectroscopie optique [63], absorption infrarouge [64], effet Hall [65] ou encore des mesures photovoltaïques [66].

V. Formalisme de la fonction enveloppe

Le formalisme de la fonction enveloppe permet de résoudre l'équation de Schrödinger de façon approchée et très économique quand le système est perturbé par des sollicitations externes, telles que des champs électriques et/ou magnétiques statiques. Elle fut pour la première fois introduite par Luttinger et Kohn [48] dans leur célèbre article traitant du mouvement des électrons et des trous quand le champ cristallin est perturbé par des impuretés ou un champ magnétique externe. Plusieurs auteurs l'ont utilisé par la suite, par exemple, Luttinger a exploité ses résultats pour développer sa théorie de la résonance cyclotron [67], elle fut utilisée aussi dans l'étude de la bande de valence du Germanium et du Silicium dans un champ magnétique par V. Evtuhov [68], Pidgeon et Brown [69] l'utilisèrent dans l'étude

d'expériences d'absorption interbande et rotation Faraday dans le semiconducteur à bande interdite étroite antimoniure d'indium (InSb), d'un autre côté, Graf et Vogl [70] dans le cadre de la méthode des liaisons fortes ont su construire une théorie qui inclut les effet d'un champ électromagnétique et décrit en même temps la réponse diélectrique. Sirenko *et al.* [71] étudièrent dans le même cadre la diffusion des trous et les transitions optiques dans les nitrures aussi bien dans leurs structures wurtzite que blende. Plus récemment, S-H Park et S-L Chuang [72] l'utilisèrent dans l'étude des effets piézoélectrique dans le nitrure de Gallium (GaN) sous les formes Blende et wurtzite.

V.1- Semiconducteur massif

Dans cette méthode, la fonction d'onde recherchée est développée sur la base des fonctions de Bloch $u_{l,\vec{k}_0}(\vec{r})$ où l indique l'indice de bande et \vec{k}_0 le vecteur d'onde de l'extremum dans la zone de Brillouin. Mathématiquement cela est traduit par [54]

$$\psi(r) = \sum_l f_l(r) u_{l,\vec{k}_0}(\vec{r}) \quad (1.74).$$

Dans l'Eq.(1.74), la fonction $f_l(\vec{r})$ est dite fonction enveloppe, ses variations spatiales sont beaucoup plus lentes que celles des fonctions de Bloch. Pour que cette approximation de la fonction $\psi(r)$ soit valable, il faut que la perturbation externe qu'elle décrit ne varie pratiquement pas sur l'étendue d'une maille élémentaire. La perturbation externe doit donc varier très lentement, c'est-à-dire on ne ressent ses variations que sur l'échelle de plusieurs mailles voire plusieurs dizaines ou plus par exemple.

V.2 Cas des hétérostructures

L'application de ce formalisme aux cas des hétérostructures doit se faire avec beaucoup de précautions à cause de la présence d'interfaces où les fonctions de Bloch $u_{l,\vec{k}_0}(\vec{r})$ de l'Eq. (1.74) ne sont plus les mêmes de part et d'autre de chaque interface.

Dans le cas des hétérostructures, on procède comme suit: On considère chaque couche homogène comme un système massif auquel on applique le développement donné par l'Eq.(1.74). Notant par u_{l,\vec{k}_0}^A et u_{l,\vec{k}_0}^B respectivement les fonctions de Bloch des matériaux A et

B donnant par leur juxtaposition lieu à une interface abrupte, on écrit la fonction d'onde ψ dans les matériaux A et B respectivement comme[54]

$$\psi(r) = \sum_l f_l^A(r) u_{l, \vec{k}_0}^A(\vec{r}) \quad (1.75)$$

$$\psi(r) = \sum_l f_l^B(r) u_{l, \vec{k}_0}^B(\vec{r}) \quad (1.76)$$

où $f_l^A(r)$ et $f_l^B(r)$ sont respectivement les fonctions enveloppes dans les matériaux A et B. On note ici que les fonctions enveloppes varient lentement par rapport aux fonctions de Bloch. Dans le cas de l'interface GaAs/Al_{0.3}Ga_{0.7}As, la vaste majorité des auteurs[54] négligent la faible différence qui existerait entre les fonctions de Bloch des deux matériaux en prenant

$$u_{l, \vec{k}_0}^A(\vec{r}) = u_{l, \vec{k}_0}^B(\vec{r}) \quad (1.77)$$

justifiant à posteriori cette supposition par comparaison des résultats obtenus à des données expérimentales. A titre illustratif, passons en revue quelques travaux ayant fait usage de cette approche.

Dans leurs études des niveaux de Landau des trous dans le puits quantique GaAs/Al_{0.5}Ga_{0.5}As, U. Ekenberg et M. Altarelli [73] trouvent un bon accord avec les résultats expérimentaux de la résonance cyclotron [74]. Mentionnons aussi les travaux de M. Altarelli *et al.* [75] qui ont calculé la structure de bande des trous dans les puits quantiques et super-réseaux à base de GaA et Al_{1-x}Ga_xAs respectivement pour x = 0,51 et 0,21. D'autre part, A. Twardowski et C Hermann [76] menèrent une étude théorique de la photoluminescence dans le puits quantique GaAs/Al_{0.21}Ga_{0.79}As et trouvèrent un bon accord avec l'expérience. D'un autre côté, les résultats sur l'effet tunnel résonant de R. Wessel et M. Altarelli [77] comparent favorablement avec l'expérience.

V.3 Conditions aux limites de Ben-Daniel-Duke et les conditions généralisées

A partir des équations (1.75-77), on tire la continuité de l'enveloppe qu'on exprime comme

$$f_w(z) = f_B(z) \quad (1.78)$$

En plus, si on intègre l'équation de Schrödinger à travers l'interface, on obtient

$$\frac{1}{m_w^*} \frac{df_w(z)}{dz} = \frac{1}{m_B^*} \frac{df_B(z)}{dz} \quad (1.79)$$

à partir des Eqs. (1.78) et (1.79), il est facile de montrer la continuité du courant de probabilité suivant

$$J_z = -i \frac{\hbar}{2m^*} \left(f^* \frac{df}{dz} - f \frac{df^*}{dz} \right) \quad (1.80)$$

les Eq. (1.78) et (1.79) sont dites conditions de Ben-Daniel-Duke [78].

L'approximation de la fonction enveloppe dans certains systèmes a été modifiée par nécessité dans des hétérostructures telles que GaSb/InAs où les conditions de Ben-Daniel-Duke ne sont plus valables[79].

Ce genre de problème fut traité pour la première fois par Ando et Mori [80] qui utilisèrent une matrice de transfert pour la détermination du spectre d'énergie dans un super-réseau GaSb/InAs. Quant à Altarelli [81], il opta pour la symétrisation de l'Hamiltonien de Kane pour calculer la structure de bande d'un super-réseaux InAs/GaSb.

En revanche, Foreman [82] a montré que la symétrisation de l'Hamiltonien conduit à des résultats non physiques, particulièrement pour les trous lourds et légers aussi bien dans un puits quantique qu'un super-réseau.

M. G. Burt [83] développa une méthode avec un traitement rigoureux pour les hétérostructures abruptes pour connecter les fonctions d'ondes des deux matériaux en justifiant l'approximation de l'Eq. (1.77) qui estima l'erreur sur l'énergie des électrons de l'ordre 0.25 % si la différence entre les fonctions de Bloch de part et d'autre de l'interface est de l'ordre de 5%.

Foreman [82] exploitant les résultats de Burt alla plus loin trouver les conditions aux limites les plus générales en utilisant dans sa démarche la conservation du courant de probabilité donné par [82,84]

$$\overline{J^{\alpha\beta}}(\vec{r}) = \frac{1}{2}[(\Psi_\alpha, \hat{V}\Psi_\beta) + (\hat{V}\Psi_\alpha, \Psi_\beta)] \quad (1.81)$$

où Ψ_α et Ψ_β sont deux fonctions d'ondes à plusieurs composantes solutions de l'équation de Schrödinger. Dans cette formule, l'opérateur vitesse est donné par [84]

$$\hat{V}^j = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial H^j}{\partial k} \quad (1.82)$$

H^j étant l'Hamiltonien massif de la couche j de l'hétérostructure.

V.4 Les énergies d'un électron dans un Puits quantique

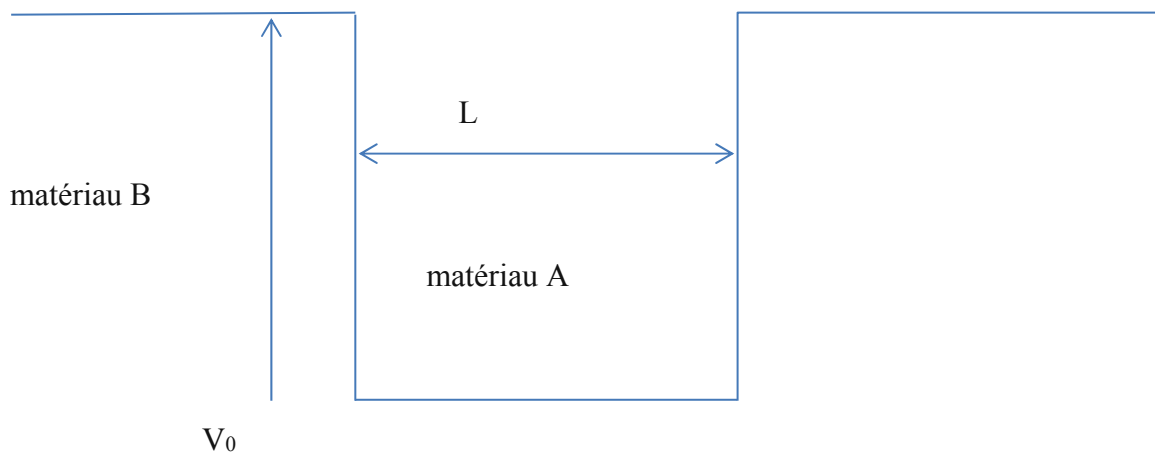


Figure 1.1: Profil d'un puits quantique de profondeur V_0

On considère un puits quantique de largeur L et de profondeur V_0 avec l'axe de croissance pris comme étant la direction z . L'équation de Schrödinger dans le cadre de la masse effective s'écrit alors comme [55]

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2}{dz^2} + V(z) \right] F_n(z) = E F_n(z) \quad (1.83)$$

Le potentiel $V(z)$ prenant la forme suivante

$$V(z) = \begin{cases} 0 & \text{pour } |z| \leq \frac{L}{2} \\ V_0 & \text{pour } |z| > \frac{L}{2} \end{cases} \quad (1.84)$$

Les fonctions enveloppes $F_n(z)$ solutions de l'équation (1.83) sont données par [55]

$$F_n(z) = \begin{cases} A e^{\kappa_n z} & z < -\frac{L}{2} \\ A \cos(k_n z) & -\frac{L}{2} \leq z \leq \frac{L}{2} \\ A e^{-\kappa_n z} & z > \frac{L}{2} \end{cases} \quad (1.85)$$

pour les fonction pairs et par

$$F_n(z) = \begin{cases} -B e^{\kappa_n z} & z < -\frac{L}{2} \\ B \sin(k_n z) & -\frac{L}{2} \leq z \leq \frac{L}{2} \\ B e^{\kappa_n z} & z > \frac{L}{2} \end{cases} \quad (1.86)$$

pour les fonctions impaires. Dans ces équations, A et B sont des constantes de normalisation des fonctions enveloppes correspondant aux états liés [55]. Notons par E_n l'énergie propre, les vecteurs d'ondes k_n et κ_n s'écrivent

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m_A^*} \quad (1.87)$$

$$E_n = V_0 - \frac{\hbar^2 \kappa_n^2}{2m_B^*} \quad (1.88)$$

m_A^* et m_B^* étant respectivement les masses effectives dans les matériaux A et B.

En imposant les conditions de Ben-Daniel-Duke [78] sur la continuité de $F_n(z)$ et $\frac{1}{m^*} \frac{dF_n(z)}{dz}$ résultant de la continuité du courant de probabilité, on obtient les équations suivantes [54]

$$\tan\left(\frac{k_n L}{2}\right) = \frac{m_A^* \kappa_n}{m_B^* k_n} \quad n = 1, 3, 5, \dots \quad (1.89)$$

$$\cot\left(\frac{k_n L}{2}\right) = -\frac{m_A^* \kappa_n}{m_B^* k_n} \quad n = 2, 4, 6, \dots \quad (1.90)$$

pour les états pairs et impairs respectivement.

La résolution numérique des équations (1.89) et (1.90) nous permet d'obtenir les énergies propres des électrons dans un puits quantique.

Le traitement précédent des Eqs. (1.83-90) peut décrire des électrons dans la bande de conduction. Le cas des trous est beaucoup plus complexe car une description adéquate de leurs spectres nécessite l'utilisation de l'Hamiltonien 6×6 de Luttinger-Kohn déjà introduit en Sec. 2.1.3. Les sections suivantes de ce chapitre sont justement consacrées à ce problème pour un puits ayant une direction de croissance suivant [001].

VI. Block diagonalisation de l'Hamiltonian de Luttinger-Kohn

Pour simplifier le calcul, nous utilisons la transformation unitaire U de Broido et Sham [85] dans sa version 6×6 généralisée par les auteurs de la Réf. [60].

Cela consiste à utiliser une nouvelle base sur laquelle l'Hamiltonien devient block diagonal. Mathématiquement, ceci se traduit par

$$H' = U H U^\dagger \quad (1.91).$$

La matrice représentant U est donnée par [60]

$$U = \begin{pmatrix} e^{-i\varnothing} & 0 & 0 & e^{i\varnothing} & 0 & 0 \\ 0 & e^{-i\eta} & e^{i\eta} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -e^{-i\eta} & e^{i\eta} \\ e^{-i\varnothing} & 0 & 0 & -e^{i\varnothing} & 0 & 0 \\ 0 & -e^{-i\eta} & e^{i\eta} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & e^{-i\eta} & e^{i\eta} \end{pmatrix} \quad (1.92)$$

où \varnothing et η sont à déterminer. En utilisant les Eqs. (1.42),(1.91) et (1.92), après un calcul laborieux l'Hamiltonien devient block diagonal en faisant pour \varnothing et η le choix suivant

$$\varnothing = \frac{\pi}{4} - \frac{3\theta}{2} \quad (1.93)$$

$$\eta = \frac{3\pi}{4} - \frac{\theta}{2} \quad (1.94)$$

obtenant alors

$$H' = - \begin{pmatrix} H_U & 0 \\ 0 & H_L \end{pmatrix} \quad (1.95).$$

Où H_L et H_U vérifient la relation

$$H_L = H_U^* \quad (1.96)$$

qu'on peut aussi écrire $H_L = {}^t H_U$. Explicitement H_L est donné par

$$H_U = \begin{pmatrix} P + Q & -R_p |g(\theta)| - iS_p & -\sqrt{2} R_p |g(\theta)| + i \frac{S_p}{\sqrt{2}} \\ -R_p |g(\theta)| + iS_p & P - Q & \sqrt{2} Q + i \sqrt{\frac{3}{2}} S_p \\ -\sqrt{2} R_p |g(\theta)| - i \frac{S_p}{\sqrt{2}} & \sqrt{2} Q - i \sqrt{\frac{3}{2}} S_p & P + \Delta \end{pmatrix} \quad (1.97)$$

où les grandeurs définissant (1.91) sont données par

$$R_p = -\frac{\hbar^2}{2m} \sqrt{3} k^2 \quad (1.98)$$

$$S_p = \frac{\hbar^2}{m} \sqrt{3} \gamma_3 k k_z \quad (1.99)$$

$$g(\theta) = \sqrt{\gamma_2^2 (\cos 2\theta)^2 + \gamma_3^2 (\sin 2\theta)^2} e^{-i2\theta} \quad (1.100)$$

notant par $\vec{k} = k_x \vec{i} + k_y \vec{j}$ le vecteur d'onde parallèle à l'interface, l'angle θ de l'Eq. (1.100) est alors définie par

$$\theta = \tan^{-1} \frac{k_y}{k_x} \quad (1.101)$$

La nouvelle base $|w_i\rangle (i=1,6)$, quant à elle, est donnée par [60]

$$|w_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (e^{-i\frac{3\theta}{2}} \left| \frac{3}{2}; \frac{3}{2} \right\rangle - i e^{i\frac{3\theta}{2}} \left| \frac{3}{2}; -\frac{3}{2} \right\rangle) \quad (1.102.a)$$

$$|w_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (i e^{-i\frac{\theta}{2}} \left| \frac{3}{2}; \frac{1}{2} \right\rangle - e^{i\frac{\theta}{2}} \left| \frac{3}{2}; -\frac{1}{2} \right\rangle) \quad (1.103.b)$$

$$|w_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (-i e^{-i\frac{\theta}{2}} \left| \frac{1}{2}; \frac{1}{2} \right\rangle - e^{i\frac{\theta}{2}} \left| \frac{1}{2}; -\frac{1}{2} \right\rangle) \quad (1.104.c)$$

$$|w_4\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (e^{-i\frac{3\theta}{2}} \left| \frac{3}{2}; \frac{3}{2} \right\rangle + i e^{i\frac{3\theta}{2}} \left| \frac{3}{2}; -\frac{3}{2} \right\rangle) \quad (1.105.d)$$

$$|w_5\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (-i e^{-i\frac{\theta}{2}} \left| \frac{3}{2}; \frac{1}{2} \right\rangle - e^{i\frac{\theta}{2}} \left| \frac{3}{2}; -\frac{1}{2} \right\rangle) \quad (1.106.e)$$

$$|w_6\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(i e^{-i\frac{\theta}{2}} \left| \frac{1}{2}; \frac{1}{2} \right\rangle - e^{i\frac{\theta}{2}} \left| \frac{1}{2}; -\frac{1}{2} \right\rangle \right) \quad (1.107.f)$$

Malgré la block diagonalisation, le problème est encore ardu, une approximation assez répondeuse dite axiale consiste à négliger l'anisotropie ou ‘warping’ en posant

$$|g(\theta)| = \frac{\gamma_2 + \gamma_3}{2} \quad (1.108)$$

Si on néglige la bande split-off, l'Hamiltonien (1.97) se réduit à une matrice de 2x2 donnée par

$$H_U = \begin{pmatrix} P + Q & -R_p |g(\theta)| - iS_p \\ -R_p |g(\theta)| + iS_p & P - Q \end{pmatrix} \quad (1.109)$$

VII. Structure électronique des trous dans un puits quantique

L'objet de notre travail est un puits quantique GaAs/Al_xGa_{1-x}As symétrique, par conséquent on est en présence d'un dispositif constitué de deux hétérojonctions.

Les semiconducteurs GaAs et AlAs, ainsi que leurs alliages ont été particulièrement étudiés [86]. Les paramètres de maille de ces deux semiconducteurs sont très proches, 5,6533 Å pour GaAs contre 5,6611 Å pour AlAs, c'est à dire une différence de 0,14 % environ [86]. Ceci permet une croissance sans accumulation de contraintes de ces deux matériaux l'un sur l'autre ainsi que sur leur alliage Al_xGa_{1-x}As. Afin d'obtenir une barrière importante et garder un gap direct, on prendra $0,25 \leq x \leq 0,35$ pour l'alliage de la barrière.

Nous déterminons la hauteur de cette dernière dans la bande de valence par la règle 60 %-40% [54], c'est à dire dans notre cas pour les trous la barrière sera égale à 40 % de la différence entre les gap des deux matériaux formant l'hétérojonction. A titre illustratif, pour $x = 0,3$ celle-ci vaudra 149,6 meV.

En utilisant la continuité de la fonction d'onde et du courant de probabilité, nous déterminons les niveaux d'énergies pour notre puits quantique à T=300K. La normalisation de la fonction d'onde permet de trouver les fonctions d'ondes respectivement des trous lourds, légers et split-off.

Pour le premier block, c'est à dire H_U , l'équation de Schrödinger du système s'écrit :

$$[H_U + V(z)I]\Psi_k(R) = E\Psi_k(R) \quad (1.110)$$

$V(z)$ étant le potentiel de confinement de l'hétérostructure, I est la matrice unité et $\Psi_k(R)$ est la fonction d'ondes des trous.

Pour résoudre l'Eq. (1.99) on considère d'abord le cas $k = 0$ pour lequel le couplage entre les différentes bandes est nul. Dans ce cas là, $\alpha=h, l, s$ désignant le type de trou, c'est à dire respectivement trou lourd, léger et split off les fonctions d'ondes sont alors données par

$$\psi_{j\alpha}(z) = A_\alpha(j) \cos(k_{zw}^\alpha(j) \frac{a}{2}) e^{k_{zb}^\alpha(j) \frac{a}{2}} \quad z \leq -\frac{a}{2} \quad (1.111)$$

$$\psi_{j\alpha}(z) = A_\alpha(j) \cos(k_{zw}^\alpha(j) z) \quad |z| \leq \frac{a}{2} \quad (1.112)$$

$$\psi_{j\alpha}(z) = A_\alpha(j) \cos(k_{zw}^\alpha(j) \frac{a}{2}) e^{-k_{zb}^\alpha(j) \frac{a}{2}} \quad z \geq \frac{a}{2} \quad (1.113)$$

pour les états pairs et

$$\psi_{j\alpha}(z) = -B_\alpha(j) \sin(k_{zw}^\alpha(j) \frac{a}{2}) e^{k_{zb}^\alpha(j) \frac{a}{2}} \quad z \leq -\frac{a}{2} \quad (1.114)$$

$$\psi_{j\alpha}(z) = B_\alpha(j) \sin(k_{zw}^\alpha(j) z) \quad |z| \leq \frac{a}{2} \quad (1.115)$$

$$\psi_{j\alpha}(z) = B_\alpha(j) \sin(k_{zw}^\alpha(j) \frac{a}{2}) e^{-k_{zb}^\alpha(j) \frac{a}{2}} \quad z \geq \frac{a}{2} \quad (1.116)$$

pour les états impairs.

Dans les Eqs.(1.111-116), l'indice de sous bande est dénoté j , ce dernier prenant les valeurs entières positives suivantes $1,2,3,\dots$, quant à b et w , ils désignent respectivement les barrières et le puits. Les autres grandeurs sont comme suit : a largeur du puits, k_{zw}^α et k_{zb}^α les vecteurs d'onde des trous respectivement dans le puits et les barrières. V_0 étant le potentiel de confinement et $E(j)$ l'énergie propre leurs expressions sont données par

$$k_{zw}^\alpha(j) = \sqrt{\frac{-2m_w^\alpha E(j)}{\hbar^2}} \quad (1.117)$$

$$k_{zb}^\alpha(j) = \sqrt{\frac{2m_b^\alpha (V_0 + E(j))}{\hbar^2}} \quad (1.118)$$

pour les bandes des trous lourds et légers, tandis que pour les trous de la split off on a :

$$k_{zw}^s(j) = \sqrt{\frac{-2m_w^s (E(j) + \Delta)}{\hbar^2}} \quad (1.119)$$

$$k_{zb}^s(j) = \sqrt{\frac{2m_b^s (V_0 + E(j) + \Delta)}{\hbar^2}} \quad (1.120)$$

Les masses des trous lourds et légers dans le puits sont données par :

$$m_w^h = \frac{m}{\gamma_{1w} - 2\gamma_{2w}} \quad (1.121)$$

$$m_w^l = \frac{m}{\gamma_{1w} + 2\gamma_{2w}} \quad (1.122)$$

respectivement, alors que dans les barrières ces dernières sont données par

$$m_b^h = \frac{m}{\gamma_{1b} - 2\gamma_{2b}} \quad (1.123)$$

$$m_b^l = \frac{m}{\gamma_{1b} + 2\gamma_{2b}} \quad (1.124).$$

Dans le cas de split-off, ces mêmes grandeurs sont

$$m_w^s = \frac{m}{\gamma_{1w}} \quad (1.125)$$

$$m_b^s = \frac{m}{\gamma_{1b}} \quad (1.126)$$

respectivement pour le puits et les barrières, dans toutes ces formules, m désigne la masse de l'électron au repos, tandis que γ_{1w}, γ_{2w} , d'une part, et γ_{1b}, γ_{2b} d'autre part, sont respectivement les constantes de Luttinger dans le puits, et les barrières.

Pour le cas $k \neq 0$, le couplage entre les bandes devient important, nous écrivons dans ce cas la fonction d'onde comme

$$|\Psi(R)\rangle = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \sum_{j=1}^{nh} A_{jh}(k) \psi_{jh}(z) |w_1\rangle + e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \sum_{j=1}^{nl} A_{jl}(k) \psi_{jl}(z) |w_2\rangle + e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \sum_{j=1}^{ns} A_{js}(k) \psi_{js}(z) |w_3\rangle \quad (1.127)$$

Dans le développement (1.127), les coefficients $A_{jh}(k), A_{jl}(k), A_{js}(k)$ sont des nombres réels à déterminer. En remplaçant l'expression de $\Psi_k(R)$ dans (1.110) et en projetant sur les états propres $\psi_{jh}(z), \psi_{jl}(z)$ et $\psi_{js}(z)$ déjà trouvés pour $k = 0$ on transforme le problème en un problème matriciel aux valeurs propres pouvant être résolu par des méthodes standards d'algèbre linéaire.

Pour la partie numérique de notre travail, nous avons développé des codes de calcul en langage Fortran que nous avons exploité pour trouver les résultats de la section suivante.

VIII. Résultats numériques

VIII.1 Spectres et fonctions d'ondes: Effet de la largeur

Nous montrons dans la figure 1.2 le spectre d'énergie en fonction du vecteur d'onde k pour un puits de largeur 25 Å où nous trouvons trois sous-bande correspondant respectivement aux trous lourds (HH), légers (LH) et split-off (sp). Du fait de la faible

largeur du puits un seul état lié par type de trou (HH, LH, SP) est présent. Par ailleurs, il faut aussi noter la levée de dégénérescence en $k = 0$ des sous bandes HH et LH qui provient de la différence de leur masses le long de la direction de croissance. Nous avons aussi étudié l'effet de la split-off sur le spectre, les résultats sont montrés en pointillés sur la même figure. Nous constatons un effet appréciable de celle-ci pour les grandes valeurs de k particulièrement pour la sous bande des trous légers.

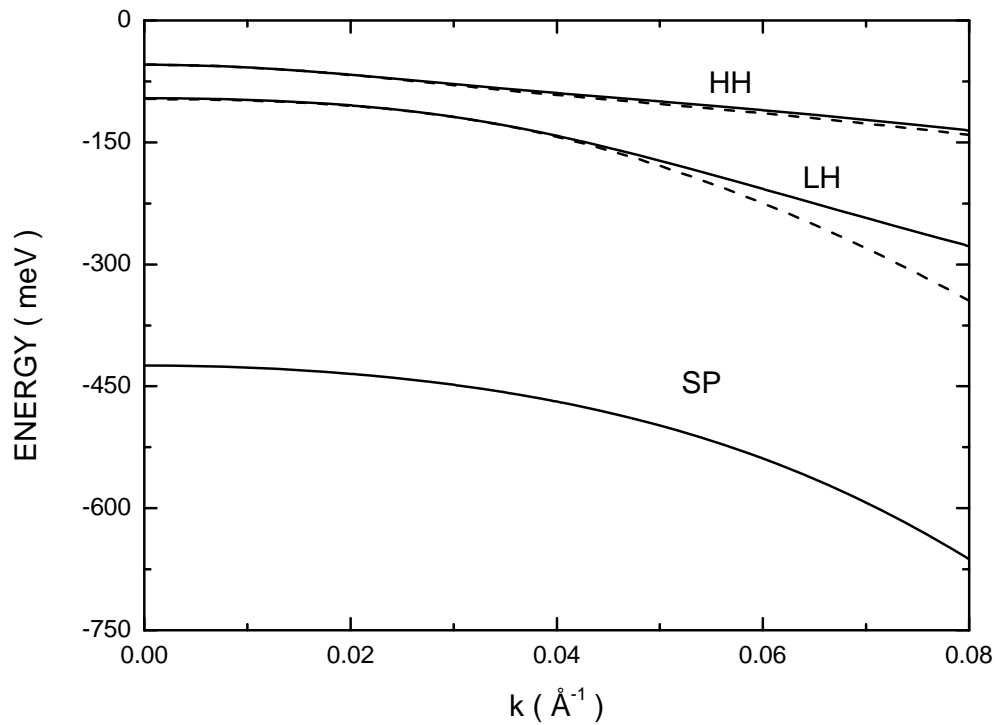


Figure 1.2: Structure de la bande de valence pour un puits quantique de largeur $a= 25 \text{ \AA}$ en ligne continue en incluant la sous bande split-off (sp) et en ligne discontinue où la sous bande split-off (sp) est négligée. Les paramètres utilisés dans nos calculs sont donnés dans le tableau 1 :

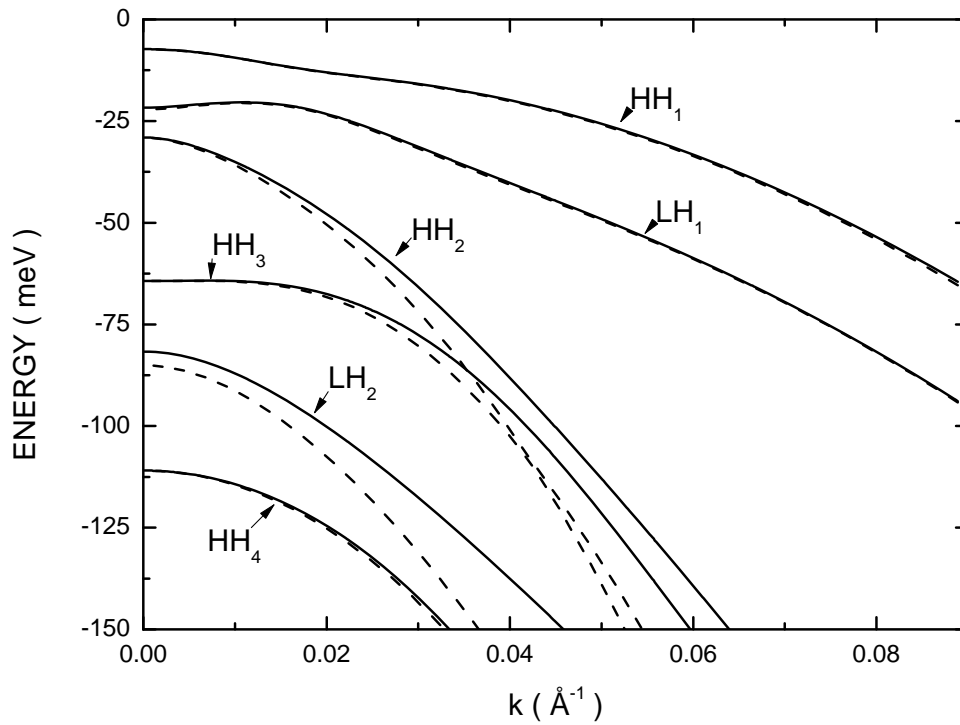


Figure 1.3: Structure de la bande de valence pour un puits quantique de largeur $a = 100 \text{ \AA}$ en ligne continue en incluant la sous bande split-off (sp) et en ligne discontinue où on la néglige.

Tableau 1

Matériau	GaAs (<i>u.a</i>)	$Al_{0,3}Ga_{0,7}As$ (<i>u.a</i>)
m^h	0,377	0,385
m^l	0,09	0,106
m^s	0,146	0,166
γ_1	6,85	6,007
γ_2	2,1	1,704
γ_3	2,9	2,45
E_g	1,424 eV	1,7987 eV

Sur la figure 1.3 nous montrons nos résultats de la structure de la bande pour un puits de largeur 100 \AA . Nous constatons de prime abord l'apparition de plusieurs sous bandes, en l'occurrence quatre sous bandes HH et deux LH et par souci de clarté nous avons omis de

représenter les sous bandes de split-off. Un fait remarquable est le caractère concave de la sous bande LH_1 par rapport au cas précédent, ce qui signifie un changement de signe de la masse effective au centre de la mini zone de Brillouin. Il faut aussi noter l'anti-croisement (anti-crossing) des sous bandes HH_2 et HH_3 par rapport à leur situation quand la split-off est négligée. Notons enfin que l'inclusion de la split-off a un effet plus important sur la sous bande LH_2 que LH_1 .

La figure 1.4 représente la densité d'états des trous lourds et légers en fonction du vecteur d'onde k . On remarque une densité d'états HH supérieure à la même grandeur LH. Un fait qualitatif très important à remarquer est la forte dépendance de ces deux grandeurs en énergie et le caractère croissant (HH) pour l'une et décroissant pour l'autre (LH).

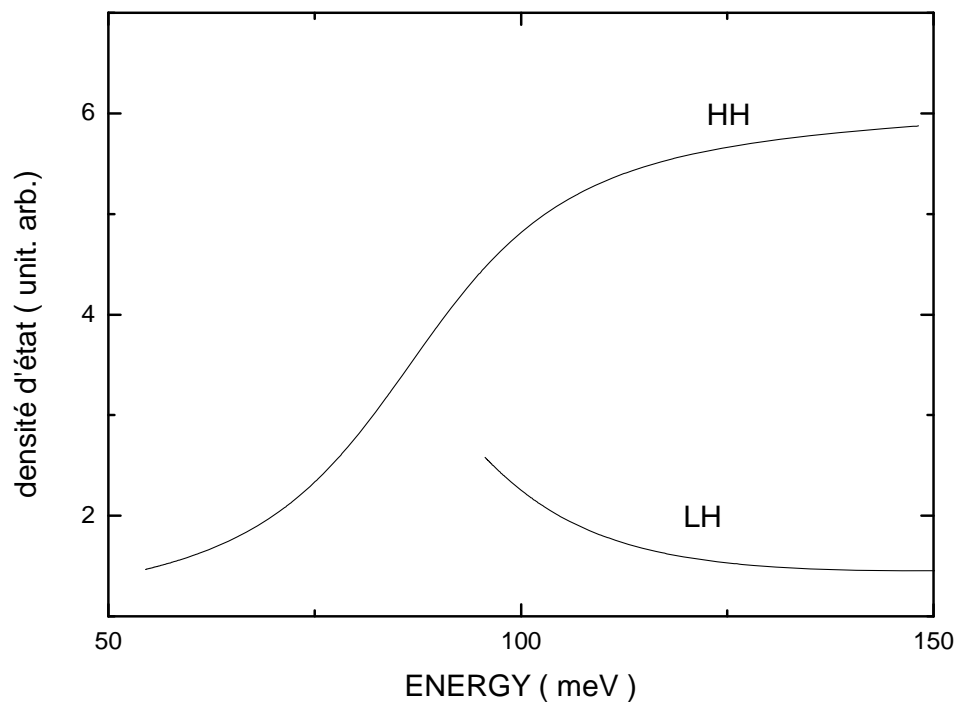


Figure 1.4: Densité d'états pour les trous lourds (HH) et légers (LH) pour un puits de largeur 25 Å

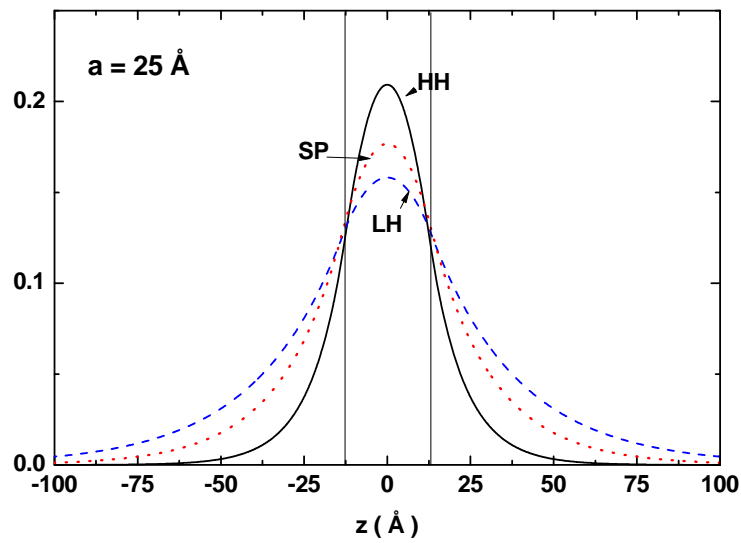


Figure 1.5: Fonctions d'ondes des trous lourds en ligne continue, légers en ligne discontinue et split-off en ligne pointillé

Dans la figure 1.5, nous montrons les fonctions propres des trous lourds, légers et split-off en fonction de z pour un puits de largeur $a=25 \text{ \AA}$.

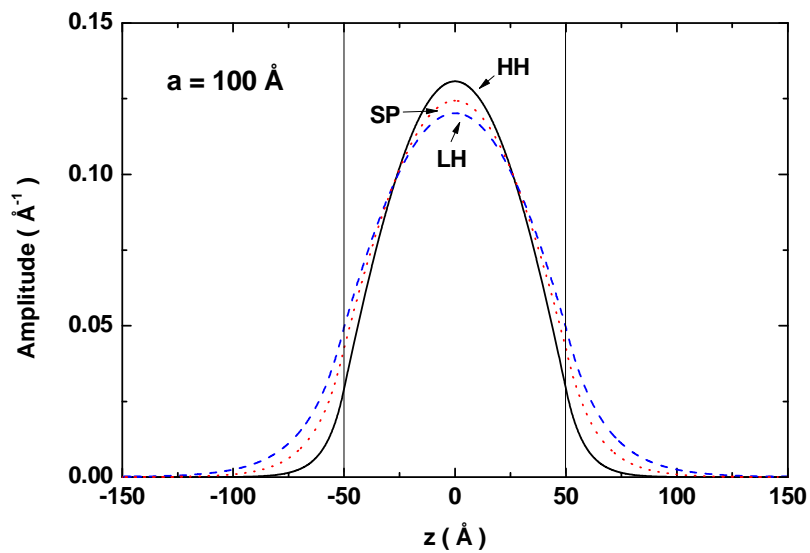


Figure 1.6: Fonctions d'ondes des trous lourds en ligne continue, légers en ligne discontinue et split-off en ligne pointillé

La figure **1.6** représente le même calcul, mais pour un puits de largeur 100 Å, on y remarque que la probabilité de présence des trous dans la barrière est plus faible. Ceci peut être expliqué par le fait que l'énergie propre est beaucoup plus basse que dans le premier cas (elle varie approximativement en $\frac{1}{a^2}$).

VIII.2 Effet de l'anisotropie sur la structure de bandes

Les résultats de la section précédente reposent sur l'approximation (1.108) qui suppose $\gamma_2 = \gamma_3$ dans la fonction $g(\theta)$. Dans ce paragraphe, nous ignorons cette approximation et traitons le problème de façon exacte, dans ce cas l'Hamiltonien H_U est fonction de l'angle θ . Prenant θ comme paramètre et utilisant le développement (1.127) pour la fonction d'onde, nous avons recalculé la structure de bande à nouveau pour un puits de largeur 25 Å et nos résultats sont montrés sur les figures **(1.7)-(1.9)**.

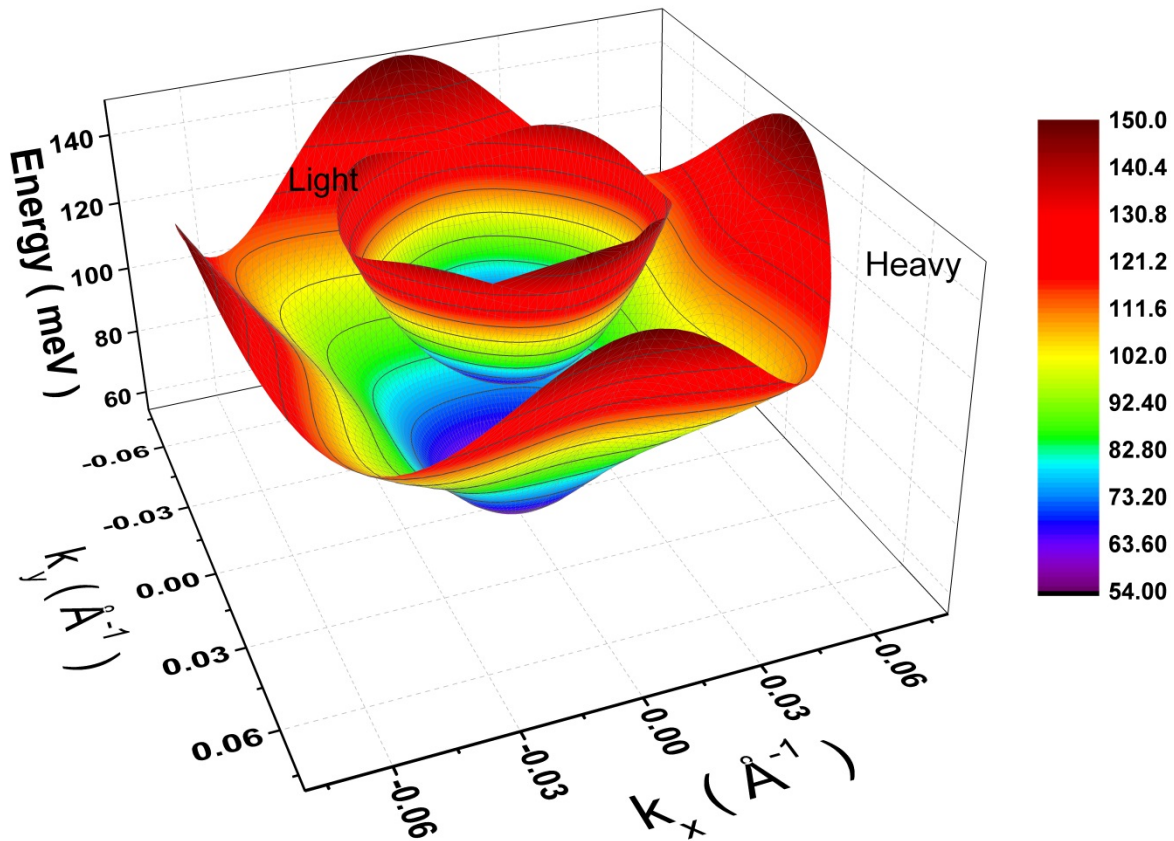


Figure 1.7: Structure de la bande de valence 3D pour un puits quantique de largeur 25 Å

La figure 1.7 ci-dessus illustre à trois dimensions la structure de la bande de valence respectivement des trous lourds et légers. Pour montrer clairement la variation des énergies en fonction du vecteur d'onde k , nous avons délibérément omis de montrer la sous bande split-off. On constate aisément le caractère anisotrope de la structure de bande et ceci est particulièrement vrai pour la bande HH pour les grandes valeurs de k , pour la bande LH l'effet est présent mais il est de moindre importance.

Dans la figure 1.8, nous montrons les courbes HH d'énergie constante dans le plan k_x - k_y où il est clair de remarquer la symétrie d'ordre 4. Au centre du graphe, les courbes sont presque circulaires mais à mesure que k augmente les courbes prennent un aspect plus au moins "carré". L'anisotropie est de toute évidence très marquée entre les direction $[1\ 0]$ et $[1\ 1]$.

Pour le cas des sous bandes LH, nous constatons un comportement qualitativement analogue mais bien que moins prononcé.

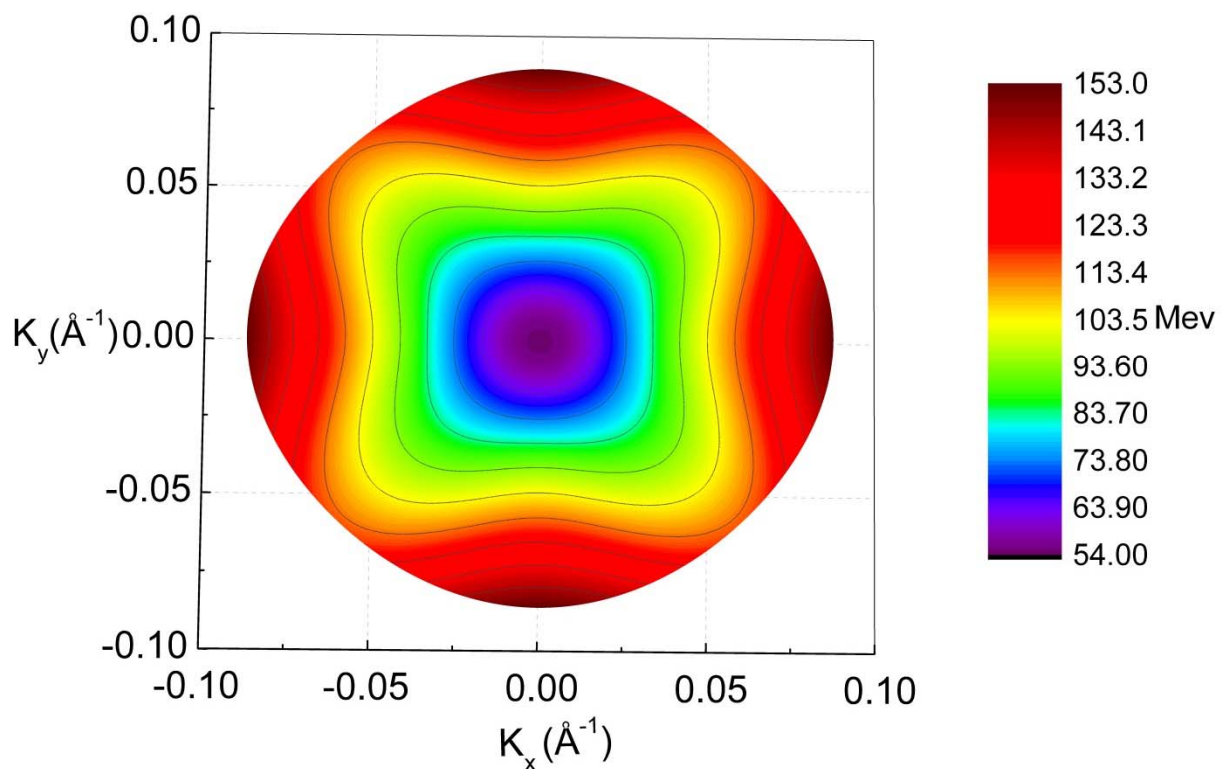


Figure1.8: Les contours isoénergétiques des trous lourds en fonction des vecteurs d'ondes k_x et k_y

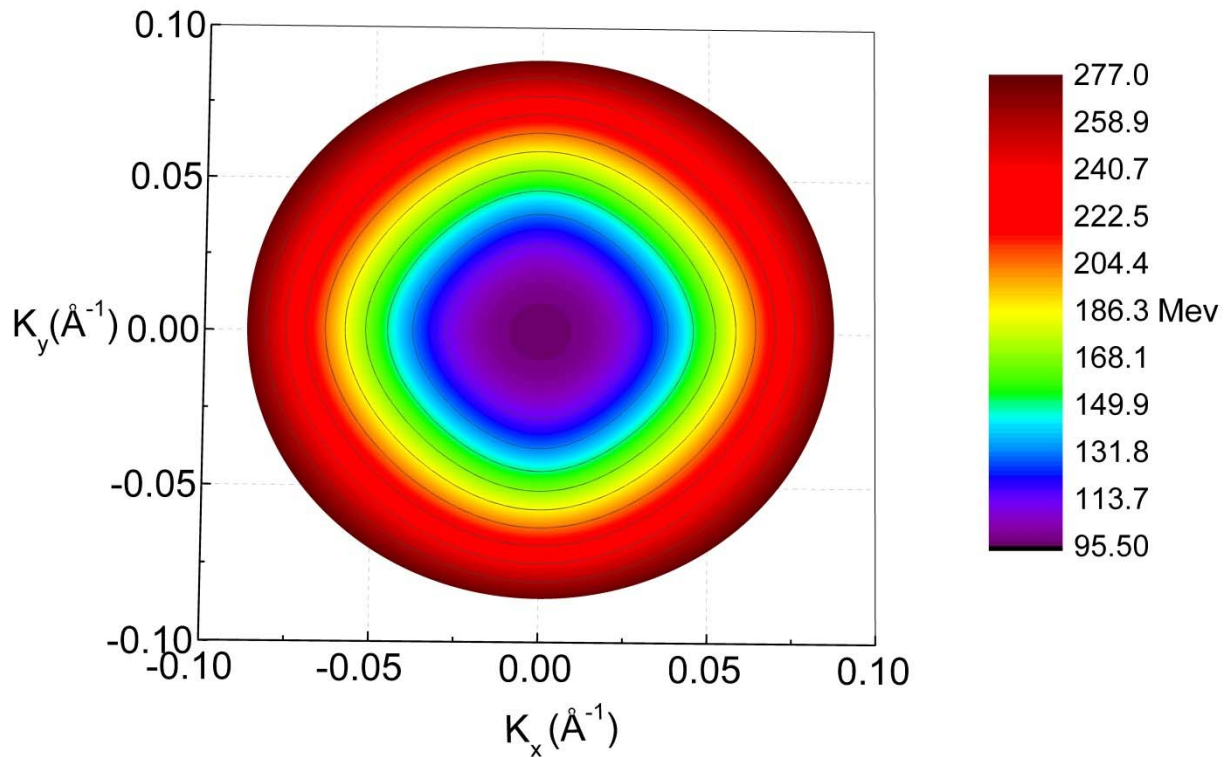


Figure 1.9: Les contours isoénergétiques des trous légers en fonction des vecteurs d'ondes k_x et k_y

Dans les figures 1.10-1.12, nous montrons pour trois valeurs de la largeur a du puits le spectre d'énergie pour deux directions du vecteur k , [10] et [11]. On constate que l'anisotropie est plus importante pour les deux premières sous bandes HH_1 et LH_1 , que cette anisotropie est plus marquée pour les grandes valeurs de k et est d'autant plus importante que la largeur a est grande.

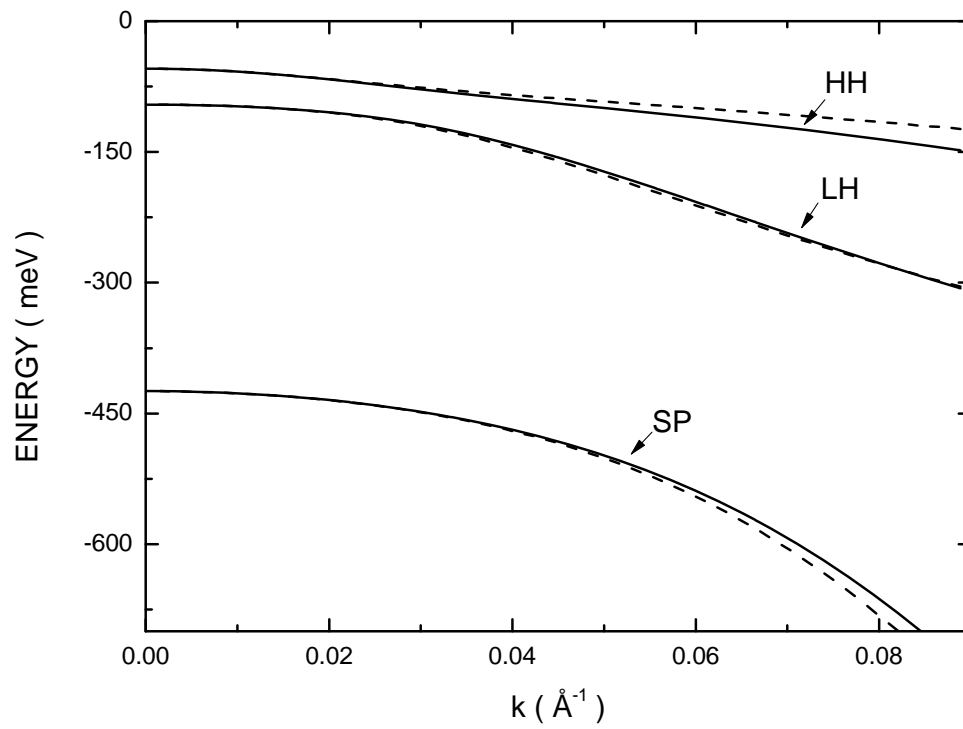


Figure 1.10: Structure de la bande de valence pour un puits quantique de largeur 25 Å. En ligne discontinue on tient compte de l'anisotropie et en ligne continue l'anisotropie est négligée

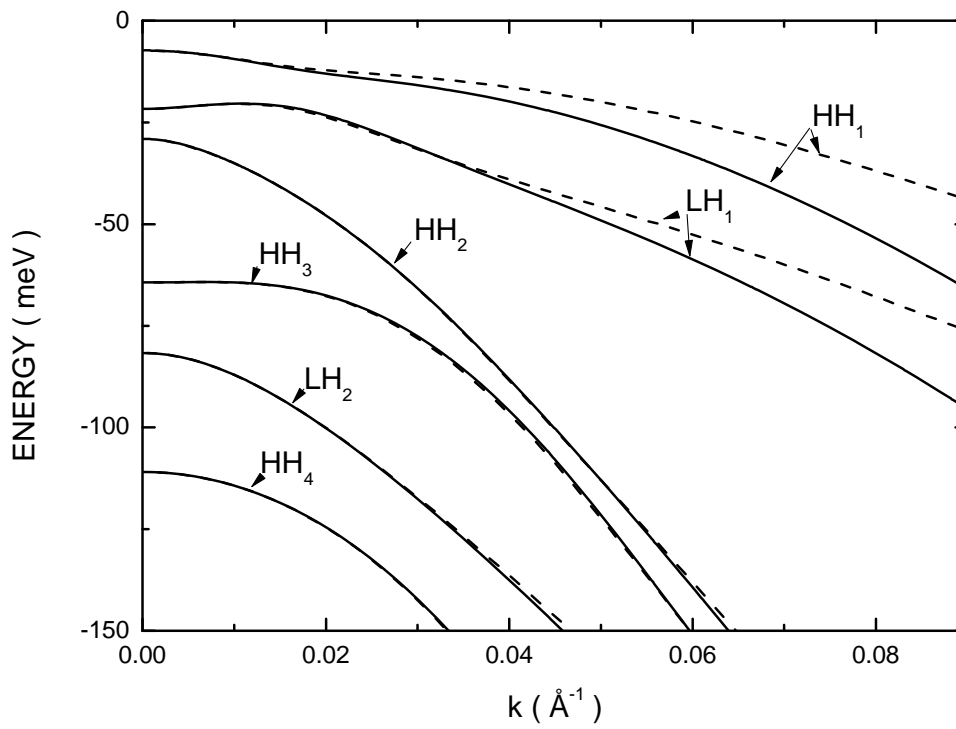


Figure 1.11: Structure de la bande de valence pour un puits quantique de largeur 100 Å. En ligne discontinue on tient compte de l'anisotropie et en ligne continue l'anisotropie est négligée.

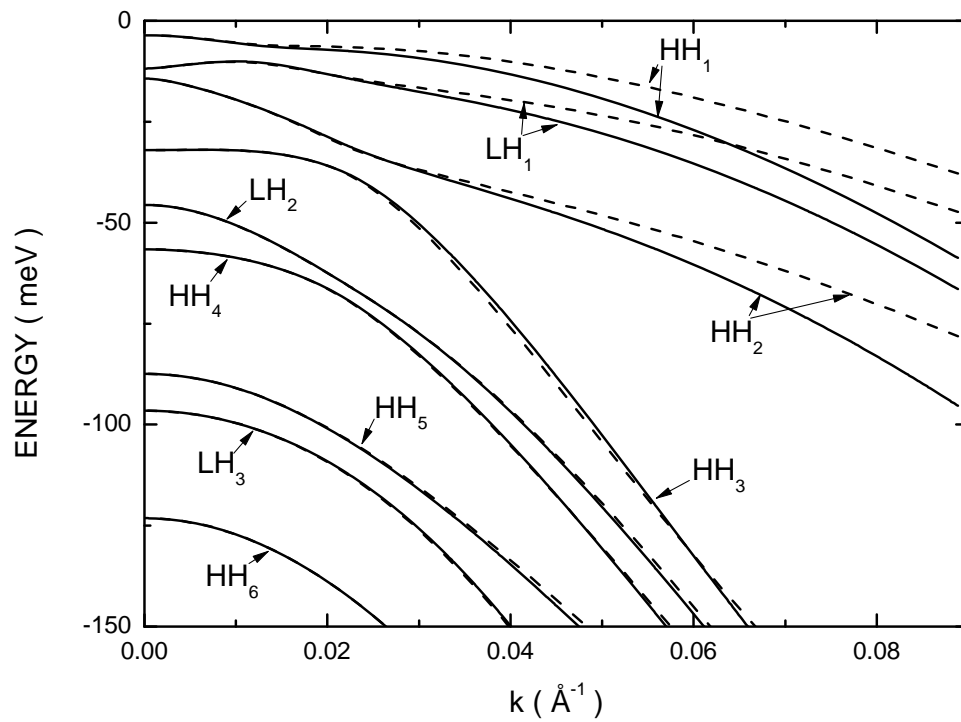


Figure 1.12: Structure de la bande de valence pour un puits quantique de largeur 150 Å. En ligne discontinue on tient compte de l'anisotropie et en ligne continue l'anisotropie est négligée.

IX. Conclusion

Après avoir passé en revue brièvement l'histoire de la méthode **k.p.**, et expliqué son mode d'utilisation, nous avons présenté les différents Hamiltoniens de ce type introduits par différents auteurs. La relation existant entre ces différents Hamiltoniens ainsi que celle entre leurs bases respectives sont explicitement détaillées. Une attention particulière est consacrée au rôle de l'interaction spin-orbite qui donne lieu à une nouvelle bande dite split-off.

L'utilisation de cette méthode accompagnée de l'approximation de la fonction enveloppe au cas des hétérostructures et les difficultés rencontrées par différents auteurs du fait de la présence d'interfaces sont présentées en détails.

Dans le cadre de l'approximation de la masse effective, et à l'aide du formalisme de la fonction enveloppe, nous avons ensuite calculé la structure électronique de la bande de valence d'un puits $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}/\text{GaAs}/\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$ de largeur 25 Å en incluant les sous-bandes des trous lourd, légers et split-off. La structure de la bande de valence présente une forte non-parabolicité et une grande anisotropie pour la sous-bande des trous lourds. D'autre part, nous avons aussi étudié l'effet de la split-off sur le spectre et nos résultats montrent son importance d'où la nécessité de son inclusion. En outre, l'augmentation de la largeur du puits en plus d'augmenter le nombre de sous-bandes met aussi en évidence le caractère fortement non parabolique de la dispersion.

Références

- [1] Bhardwaj, S., Rajan, S., & Volakis, J. L. (2016). Analysis of plasma-modes of a gated bilayer system in high electron mobility transistors. *Journal of Applied Physics*, 119(19), 193102.
- [2] Lü, X., Schrottke, L., & Grahn, H. T. (2016). Fourier-transform-based model for carrier transport in semiconductor heterostructures: Longitudinal optical phonon scattering. *Journal of Applied Physics*, 119(21), 214302.
- [3] Ullah, S., Gusev, G. M., Bakarov, A. K., & Hernandez, F. G. G. (2016). Long-lived nanosecond spin coherence in high-mobility 2DEGs confined in double and triple quantum wells. *Journal of Applied Physics*, 119(21), 215701.
- [4] Chang, P., Liu, X., Zeng, L., & Du, G. (2015). Hole mobility in InSb-based devices: Dependence on surface orientation, body thickness, and strain. *Solid-State Electronics*, 113, 68-72.
- [5] Gonzalez-Medina, J. M., Ruiz, F. G., Marin, E. G., Godoy, A., & Gámiz, F. (2015). Simulation study of the electron mobility in few-layer MoS₂ metal-insulator-semiconductor field-effect transistors. *Solid-State Electronics*, 114, 30-34.
- [6] Atmaca, G., Ardali, S., Narin, P., Kutlu, E., Lisesivdin, S. B., Malin, T., ... & Tiras, E. (2016). Energy relaxation of hot electrons by LO phonon emission in AlGa_N/Al_N/Ga_N heterostructure with in situ Si₃N₄ passivation. *Journal of Alloys and Compounds*, 659, 90-94.
- [7] Nag, S., Basu, A., Das, B., Midya, T. R., & Bhattacharya, D. P. (2015). Piezoelectric scattering limited mobility as controlled by the transverse component of the phonon wave vector in quantum layers at low temperatures. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, 72, 77-83.
- [8] Tanimura, H., Kanasaki, J. I., Tanimura, K., Sjakste, J., Vast, N., Calandra, M., & Mauri, F. (2016). Formation of hot-electron ensembles quasiequilibrated in momentum space by ultrafast momentum scattering of highly excited hot electrons photoinjected into the Γ valley of GaAs. *Physical Review B*, 93(16), 161203.
- [9] Jin, Z., Mullen, J. T., & Kim, K. W. (2016). Highly anisotropic electronic transport properties of monolayer and bilayer phosphorene from first principles. *Applied Physics Letters* 109, 053108.
- [10] Yang, M., Lv, Y., Feng, Z., Lin, W., Cui, P., Liu, Y., ... & Lin, Z. (2016). Study of source access resistance at direct current quiescent points for AlGa_N/Ga_N heterostructure field-effect transistors. *Journal of Applied Physics*, 119(22), 224501.
- [11] Ghosh, K., & Singiseti, U. (2015). Rode's iterative calculation of surface optical phonon scattering limited electron mobility in N-polar Ga_N devices. *Journal of Applied Physics*, 117(6), 065703.

- [12] Jeckelmann, B., & Jeanneret, B. (2001). The quantum Hall effect as an electrical resistance standard. *Reports on Progress in Physics*, 64(12), 1603.
- [13] Ekimov, E. A., Sidorov, V. A., Zoteev, A. V., Lebed, J. B., Thompson, J. D., & Stishov, S. M. (2016). Structure and superconductivity of isotope-enriched boron-doped diamond. *Science and Technology of Advanced Materials*.
- [14] Caram, J. R., Zheng, H., Dahlberg, P. D., Rolczynski, B. S., Griffin, G. B., Dolzhenkov, D. S., ... & Engel, G. S. (2014). Exploring size and state dynamics in CdSe quantum dots using two-dimensional electronic spectroscopy. *The Journal of chemical physics*, 140(8), 084701.
- [15] Friart, G., Van der Sande, G., Verschaffelt, G., & Erneux, T. (2016). Analytical stability boundaries for quantum cascade lasers subject to optical feedback. *Physical Review E*, 93(5), 052201.
- [16] Wei, H., Guo, G. C., & He, L. (2014). Tuning of the hole spin relaxation time in single self-assembled $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}/\text{GaAs}$ quantum dots by electric field. *Journal of Applied Physics*, 116(20), 204304.
- [17] Wang, Z. W., Liu, L., & Li, S. S. (2013). Spin-flip relaxation via optical phonon scattering in quantum dots. *Journal of Applied Physics*, 114(22), 224305.
- [18] Kang, N. L. (2014). Calculation of the electron spin relaxation times in InSb and InAs by the projection-reduction method. *Journal of Applied Physics*, 116(21), 213905.
- [19] Wang, Z. W., Liu, L., & Li, S. S. (2014). Relaxation times of the two-phonon processes with spin-flip and spin-conserving in quantum dots. *Applied Physics Letters*, 104(14), 142404.
- [20] Nainani, A., Bennett, B. R., Boos, J. B., Ancona, M. G., & Saraswat, K. C. (2012). Enhancing hole mobility in III-V semiconductors. *Journal of Applied Physics*, 111(10), 103706.
- [21] Tiras, E., & Ardali, S. (2013). Electron and hole energy relaxation rates in $\text{GaInNAs}/\text{GaAs}$ quantum wells via deformation potential and piezoelectric scattering. *physica status solidi (b)*, 250(1), 134-146.
- [22] Schmult, S., Gerl, C., Wurstbauer, U., Mitzkus, C., & Wegscheider, W. (2005). Carbon-doped high mobility two-dimensional hole gases on (110) faced GaAs. *arXiv preprint cond-mat/0503323*.
- [23] Rong, X., Wang, X. Q., Chen, G., Zheng, X. T., Wang, P., Xu, F. J., ... & Sumiya, M. (2015). Mid-infrared Photoconductive Response in AlGaIn/GaN Step Quantum Wells. *Scientific reports*, 5.
- [24] Asgari, A., Ahmadi, E., & Kalafi, M. (2009). $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ multi-quantum-well ultraviolet detector based on pin heterostructures. *Microelectronics Journal*, 40(1), 104-107.

- [25] Dahal, R., Li, J., Aryal, K., Lin, J. Y., & Jiang, H. X. (2010). InGaN/GaN multiple quantum well concentrator solar cells. *Appl. Phys. Lett*, 97(7), 073115.
- [26] Pillarisetty, R., Chu-Kung, B., Corcoran, S., Dewey, G., Kavalieros, J., Kennel, H., ... & Mukherjee, N. (2010, December). High mobility strained germanium quantum well field effect transistor as the p-channel device option for low power ($V_{cc}=0.5$ V) III–V CMOS architecture. In *Electron Devices Meeting (IEDM), 2010 IEEE International* (pp. 6-7). IEEE.
- [27] Zory, P. S. (1993). *Quantum well lasers*. Academic Press.
- [28] Ngô, C., & Ngo, H. (1998). *Introduction à la physique des semi-conducteurs: Cours et exercices corrigés*. Dunod.
- [29] Bandyopadhyay, Supriyo. (2012). *Physics of Nanostructured Solid State Devices*. Springer Science & Business Media
- [30] Nayak, R. K., Das, S., Panda, A. K., & Sahu, T. (2016). Structural asymmetry induced size quantized nonmonotonous electron mobility in GaAs/Al_xGa_{1-x}As double quantum well structure. *Superlattices and Microstructures*, 89, 75-82.
- [31] Das, S., Nayak, R. K., Sahu, T., & Panda, A. K. (2015). Enhancement of multisubband electron mobility in asymmetrically doped coupled double quantum well structure. *Physica B: Condensed Matter*, 476, 91-95.
- [32] Palo, S., Sahoo, N., & Sahu, T. (2014). Effect of doping profile on multisubband electron mobility in AlGaAs parabolic quantum well structures. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, 64, 33-38.
- [33] Shi, Q., Zudov, M. A., Pfeiffer, L. N., West, K. W., Watson, J. D., & Manfra, M. J. (2016). Resistively detected high-order magnetoplasmons in a high-quality two-dimensional electron gas. *Physical Review B*, 93(16), 165438.
- [34] Daničić, A., Radovanović, J., Milanović, V., Indjin, D., & Ikonić, Z. (2016). Magnetic field effects on THz quantum cascade laser: A comparative analysis of three and four quantum well based active region design. *Physica E: Low-Dimensional Systems and Nanostructures*, 81, 275-280.
- [35] Bejan, D., & Niculescu, E. C. (2016). The effects of the intense laser and magnetic fields on the group velocity of light in GaAs/Al 0.3 Ga 0.7 As near-surface quantum well. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, 75, 149-155.
- [36] Jirauschek, C., & Kubis, T. (2014). Modeling techniques for quantum cascade lasers. *Applied Physics Reviews*, 1(1), 011307.
- [37] Koudinov, A. V., Dzhioev, R. I., Korenev, V. L., Sapega, V. F., & Kusrayev, Y. G. (2015). Optical spin orientation of minority holes in a modulation-doped GaAs/(Ga, Al) As quantum well. *arXiv preprint arXiv:1512.06057*.

- [38] Quinn, John J., and Kyung-Soo Yi. *Solid State Physics: Principles and Modern Applications*. Springer, (2009) page 112.
- [39] Cardona, M., & Peter, Y. *Fundamentals of semiconductors*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg . (2010). page 58.
- [40] G. Grosso, and G. Parravicini *Solid State Physics* Academic Press. (2000).
- [41] Andersen, O. K. (1975). Linear methods in band theory. *Physical Review B*, 12(8), 3060.
- [42] Kajikawa, Y. (2012). Analytical and numerical studies on strain and crystal-orientation effects on the valence bands in hexagonal semiconductor layers and quantum wells. *Superlattices and Microstructures*, 51(1), 16-52.
- [43] Kojima, K., Funato, M., Kawakami, Y., & Noda, S. (2010). Valence band effective mass of non-c-plane nitride heterostructures.
- [44] Lee, T. Y., Chang, J., Hickey, M. C., Koo, H. C., Kim, H. J., Han, S. H., & Moodera, J. S. (2011). Quantum well thickness dependence of Rashba spin-orbit coupling in the InAs/InGaAs heterostructure. *Applied Physics Letters*, 98(20), 202504.
- [45] Kojima, K., Funato, M., Kawakami, Y., & Noda, S. (2010). Valence band effective mass of non-c-plane nitride heterostructures. *Journal of Applied Physics*, 107(12), 123105-123105.
- [46] Madelung, O. (Ed.). *Semiconductors: data handbook*. Springer. (2004).
- [47] Bardeen, J. (1938). An improved calculation of the energies of metallic Li and Na. *The Journal of Chemical Physics*, 6(7), 367-371.
- [48] Luttinger, J. M., & Kohn, W. (1955). Motion of electrons and holes in perturbed periodic fields. *Physical Review*, 97(4), 869.
- [49] Kane, E. O. (1957). Band structure of indium antimonide. *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, 1(4), 249-261.
- [50] Cardona, M., & Pollak, F. H. (1966). Energy-band structure of germanium and silicon: The $k \cdot p$ method. *Physical Review*, 142(2), 530.
- [51] Voon, L. C. L. Y., & Willatzen, M. (2009) *The kp method: electronic properties of semiconductors*. Springer.
- [52] GUYMONT, Michel. (2003). *Structure de la matière*. Edition Belin.
- [53] Guy Fishman (2010). *semi-conducteurs les bases de la théorie $k.p$* Les Editions de l'Ecole Polytechnique
- [54] BASTARD, Gerald. (CNRS, Paris, 1988). *Wave mechanics applied to semiconductors. Les éditions de Physique*

- [55] Sun, Y., Thompson, S. E., & Nishida, T. (2009). *Strain effect in semiconductors: theory and device applications*. Springer Science & Business Media.
- [56] Dresselhaus, G., Kip, A. F., & Kittel, C. (1955). Cyclotron resonance of electrons and holes in silicon and germanium crystals. *Physical Review*, 98(2), 368.
- [57] Hinckley, J. M., & Singh, J. (1994). Monte Carlo studies of ohmic hole mobility in silicon and germanium: Examination of the optical phonon deformation potential. *Journal of applied physics*, 76(7), 4192-4200.
- [58] Hong, S. M., Pham, A. T., & Jungemann, C. (2011). *Deterministic solvers for the Boltzmann transport equation*. Springer Science & Business Media.
- [59] Rodriguez, S., López-Villanueva, J. A., Melchor, I., & Carceller, J. E. (1999). Hole confinement and energy subbands in a silicon inversion layer using the effective mass theory. *Journal of applied physics*, 86(1), 438-444.
- [60] Chao, C. Y. P., & Chuang, S. L. (1992). Spin-orbit-coupling effects on the valence-band structure of strained semiconductor quantum wells. *Physical Review B*, 46(7), 4110.
- [61] KIREEV, Petr (1978). Semenovich. *Semiconductor physics*. Moscow : Mir Publishers.
- [62] Oshikiri, M., Imanaka, Y., Aryasetiawan, F., & Kido, G. (2001). Comparison of the electron effective mass of the n-type ZnO in the wurtzite structure measured by cyclotron resonance and calculated from first principle theory. *Physica B: Condensed Matter*, 298(1), 472-476.
- [63] MOLENKAMP, L. W., EPPENGA, R., HOOFT, GW't, *et al.* (1988). Determination of valence-band effective-mass anisotropy in GaAs quantum wells by optical spectroscopy *Physical Review B*, vol. 38, no 6, p. 4314
- [64] Spitzer, W. G., & Whelan, J. M. (1959). Infrared absorption and electron effective mass in n-type gallium arsenide. *Physical Review*, 114(1), 59.
- [65] Perlin, P., Litwin-Staszewska, E., Suchanek, B., Knap, W., Camassel, J., Suski, T., ... & Chervin, J. C. (1996). Determination of the effective mass of GaN from infrared reflectivity and Hall effect. *Applied physics letters*, 68(8), 1114-1116.
- [66] Pan, Z., Li, L. H., Lin, Y. W., Sun, B. Q., Jiang, D. S., & Ge, W. K. (2001). Conduction band offset and electron effective mass in GaInNAs/GaAs quantum-well structures with low nitrogen concentration. *Applied physics letters*, 78, 2217.
- [67] Luttinger, J. M. (1956). Quantum theory of cyclotron resonance in semiconductors: General theory. *Physical Review*, 102(4), 1030.
- [68] Evtuhov, V. (1962). Valence Bands of Germanium and Silicon in an External Magnetic Field. *Physical Review*, 125(6), 1869.

- [69] Pidgeon, C. R., & Brown, R. N. (1966). Interband magneto-absorption and Faraday rotation in InSb. *Physical Review*, 146(2), 575.
- [70] Graf, M., & Vogl, P. (1995). Electromagnetic fields and dielectric response in empirical tight-binding theory. *Physical Review B*, 51(8), 4940.
- [71] Sirenko, Y. M., Jeon, J. B., Lee, B. C., Kim, K. W., Littlejohn, M. A., Stroscio, M. A., & Iafate, G. J. (1997). Hole scattering and optical transitions in wide-band-gap nitrides: Wurtzite and zinc-blende structures. *Physical Review B*, 55(7), 4360.
- [72] Park, S. H., & Chuang, S. L. (2000). Comparison of zinc-blende and wurtzite GaN semiconductors with spontaneous polarization and piezoelectric field effects. *Journal of Applied Physics*, 87(1), 353-364.
- [73] Ekenberg, U., & Altarelli, M. (1985). Subbands and Landau levels in the two-dimensional hole gas at the GaAs-Al_xGa_{1-x}As interface. *Physical Review B*, 32(6), 3712.
- [74] Stormer, H. L., Schlesinger, Z., Chang, A., Tsui, D. C., Gossard, A. C., & Wiegmann, W. (1983). Energy structure and quantized Hall effect of two-dimensional holes. *Physical review letters*, 51(2), 126.
- [75] Altarelli, M., Ekenberg, U., & Fasolino, A. (1985). Calculations of hole subbands in semiconductor quantum wells and superlattices. *Physical Review B*, 32(8), 5138.
- [76] Twardowski, A., & Hermann, C. (1987). Variational calculation of polarization of quantum-well photoluminescence. *Physical Review B*, 35(15), 8144.
- [77] Wessel, R., & Altarelli, M. (1989). Resonant tunneling of holes in double-barrier heterostructures in the envelope-function approximation. *Physical Review B*, 39(17), 12802.
- [78] BenDaniel, D. J., & Duke, C. B. (1966). Space-charge effects on electron tunneling. *Physical review*, 152(2), 683.
- [79] Tokatly, I. V., Tsibizov, A. G., & Gorbatsevich, A. A. (2002). Interface electronic states and boundary conditions for envelope functions. *Physical Review B*, 65(16), 165328.
- [80] Ando, T., & Mori, S. (1982). Effective-mass theory of semiconductor heterojunctions and superlattices. *Surface Science*, 113(1-3), 124-130.
- [81] Altarelli, M. (1983). Electronic structure and semiconductor-semimetal transition in InAs-GaSb superlattices. *Physical review B*, 28(2), 842.
- [82] Foreman, B. A. (1993). Effective-mass Hamiltonian and boundary conditions for the valence bands of semiconductor microstructures. *Physical Review B*, 48(7), 4964.
- [83] Burt, M. G. (1992). The justification for applying the effective-mass approximation to microstructures. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 4(32), 6651.

[84] Rodina, A. V., Alekseev, A. Y., Efros, A. L., Rosen, M., & Meyer, B. K. (2002). General boundary conditions for the envelope function in the multiband $k \cdot p$ model. *Physical Review B*, 65(12), 125302.

[85] Yang, S. R. E., Broido, D. A., & Sham, L. J. (1985). Holes at GaAs-Al_xGa_{1-x}As heterojunctions in magnetic fields. *Physical Review B*, 32(10), 6630.

[86] Vurgaftman, I., Meyer, J. R., & Ram-Mohan, L. R. (2001). Band parameters for III-V compound semiconductors and their alloys. *Journal of applied physics*, 89(11), 5815-5875.

CHAPITRE III

Dynamique du Réseau

Dans ce chapitre, nous présentons les divers modes de vibrations du réseau existant dans les hétérostructures et prenons soin d'exposer leurs caractéristiques ainsi que leurs relations de dispersions. Nous discutons aussi comment les électrons interagissent avec les modes acoustiques et optiques aussi bien longitudinaux que transversaux. Pour les divers types de modes en suivant les traitements déjà établis, nous déduisons les potentiels d'interaction dans le cadre de la seconde quantification. Ensuite, nous expliquons divers modèles utilisés dans le traitement des phonons et leurs interactions avec les électrons dans les hétérostructures et comparons leurs résultats entre eux.

I. Introduction

Sous l'effet de l'agitation thermique, les atomes dans un solide cristallin vibrent autour de leurs positions d'équilibre. Le nombre d'atomes qui oscillent ainsi que leurs amplitudes d'oscillations dépend principalement de la température. Par analogie avec les photons, l'énergie de ces vibrations est quantifiée et se manifeste sous forme de quanta appelés phonons à partir de 1932 après le physicien Russe Igor Tamm[1]. Un phonon est une quasi-particule de vecteur d'onde Q et de pulsation $\omega(Q)$. Les phonons ont la possibilité d'entrer en interaction avec d'autres particules ou quasi-particules tels que les électrons et les photons et sont responsables de phénomènes aussi spectaculaires que la supraconductivité et variés, tels que la conductibilité thermique, la relaxation des porteurs de charges après excitation etc..

Les phonons sont classés dans deux grandes catégories [2]:

- 1) Les phonons acoustiques qui ont comme caractéristique principale le fait que les atomes vibrent en phase dans la limite des grandes longueurs d'ondes ($Q \rightarrow 0$). En plus, notons que pour les systèmes à symétrie cubique tels que les semiconducteurs *III-V* ayant la structure Blende (*GaAs*, *InAs*, *AlAs* ...), les modes sont soit acoustique longitudinaux ou transversaux et seront notés respectivement *LA* et *TA* de l'Anglais *longitudinal acoustic* et *transversal acoustic phonons*.
- 2) Les phonons optiques existent seulement dans les solides qui contiennent plus d'un atome par maille primitive. Dans les cristaux ioniques, tel que le chlorure de sodium une onde électromagnétique peut exciter ces modes. De la même façon, ces vibrations seront dites optiques longitudinales (*LO*) ou optiques transversales (*TO*).

II. Dynamique du réseau

II.1 Amplitudes des modes propres de vibration et nombre d'occupation

L'état vibratoire d'un solide sera caractérisé de façon unique en donnant le nombre d'occupation de chaque mode, mathématiquement ceci s'exprime comme suit [3]

$$|\dots, n_{\lambda Q}, \dots\rangle \quad (2.1)$$

$n_{\lambda Q}$ étant le nombre de phonons de vecteur d'onde Q dans la branche λ (LA, TA, LO, TO).

Introduisons les opérateurs création et annihilation $a_{\lambda Q}^\dagger$ et $a_{\lambda Q}$ dont l'effet est de créer et détruire respectivement un phonon du mode $|\lambda Q\rangle$, on a alors [3] :

$$a_{\lambda Q}^\dagger |\dots, n_{\lambda Q}, \dots\rangle = \sqrt{n_{\lambda Q} + 1} |\dots, n_{\lambda Q} + 1, \dots\rangle \quad (2.2)$$

$$a_{\lambda Q} |\dots, n_{\lambda Q}, \dots\rangle = \sqrt{n_{\lambda Q}} |\dots, n_{\lambda Q} - 1, \dots\rangle \quad (2.3)$$

$$a_{\lambda Q}^\dagger a_{\lambda Q} |\dots, n_{\lambda Q}, \dots\rangle = n_{\lambda Q} |\dots, n_{\lambda Q}, \dots\rangle \quad (2.4)$$

A l'équilibre thermique, les phonons étant des bosons et obéissant donc aux statistiques de Bose-Einstein auront la distribution suivante

$$n_{\lambda Q} = \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega_{\lambda Q}}{k_B T}} - 1} \quad (2.5)$$

où T est la température absolue, k_B la constante Boltzmann, $\omega_{\lambda Q}$ la pulsation (fréquence angulaire) du phonon et \hbar la constante de Planck réduite ($\frac{h}{2\pi}$).

L'Hamiltonien décrivant les phonons du mode $|\lambda Q\rangle$ est donné par [3]

$$H_{\lambda Q} = \frac{P_{\lambda Q}^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega_{\lambda Q}^2 u_{\lambda Q}^2 \quad (2.6)$$

où m est la masse de l'oscillateur, $u_{\lambda Q}$ est le déplacement associé, $p_{\lambda Q}$ est l'impulsion du phonon ainsi les opérateurs de création et d'annihilation s'écrivent comme suit [3]

$$a_{\lambda Q} = \sqrt{\frac{m\omega_{\lambda Q}}{2\hbar}} u_{\lambda Q} + i \sqrt{\frac{1}{2\hbar m\omega_{\lambda Q}}} p_{\lambda Q} \quad (2.7)$$

$$a_{\lambda Q}^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega_{\lambda Q}}{2\hbar}} u_{\lambda Q} - i \sqrt{\frac{1}{2\hbar m\omega_{\lambda Q}}} p_{\lambda Q} \quad (2.8)$$

ceci entraîne

$$a_{\lambda Q} a_{\lambda Q}^\dagger = \frac{m\omega_{\lambda Q}}{2\hbar} u_{\lambda Q}^2 + \frac{1}{2\hbar m\omega_{\lambda Q}} p_{\lambda Q}^2 + \frac{i}{2\hbar} [u_{\lambda Q}, p_{\lambda Q}] \quad (2.9)$$

Le déplacement $u_{\lambda Q}$ et son moment $p_{\lambda Q}$ satisfont la relation de commutation canonique suivante [3]

$$[u_{\lambda Q}, p_{\lambda Q}] = i\hbar \quad (2.10)$$

En substituant l'Eq. (2.10) dans (2.9), on obtient [3]

$$\frac{p_{\lambda Q}^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega_{\lambda Q}^2 u_{\lambda Q}^2 = \hbar\omega_{\lambda Q} (a_{\lambda Q}^\dagger a_{\lambda Q} + \frac{1}{2}) \quad (2.11)$$

l'énergie de l'ensemble des phonons occupant le mode $|\lambda Q\rangle$ est donnée par [3]

$$E_n = \hbar\omega_{\lambda Q} (n_{\lambda Q} + \frac{1}{2}) \quad (2.12)$$

Ce qui correspond à l'énergie d'un oscillateur harmonique de fréquence $\omega_{\lambda Q}$.

II.2 Relation de dispersion des phonons

La relation entre la fréquence des phonons et le vecteur d'onde donne la relation de dispersion. Expérimentalement, cette dispersion s'obtient par des expériences de diffusion de neutrons [4] ou par diffusion Raman [5]. Théoriquement, cette dispersion peut être obtenue par des méthodes spéciales telles que les méthodes ab initio [6], ou phénoménologiques [7] (shell model). A titre d'illustration, nous montrons sur les figures (2.1) et (2.2) les courbes de

dispersion des modes de vibrations dans *AlAs* et *GaAs* massifs calculées par la méthode ab-initio [8-10]

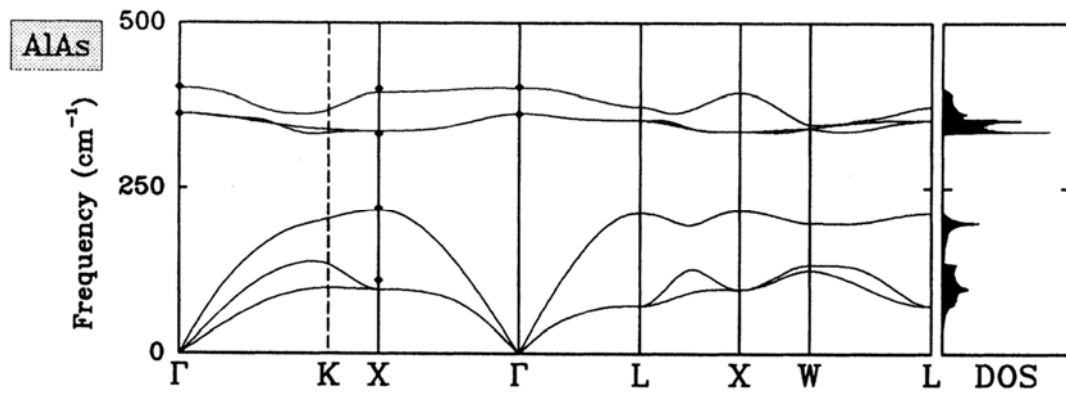


Figure 2.1: Relation de dispersion des phonons pour *AlAs* massif (Réf.[10])

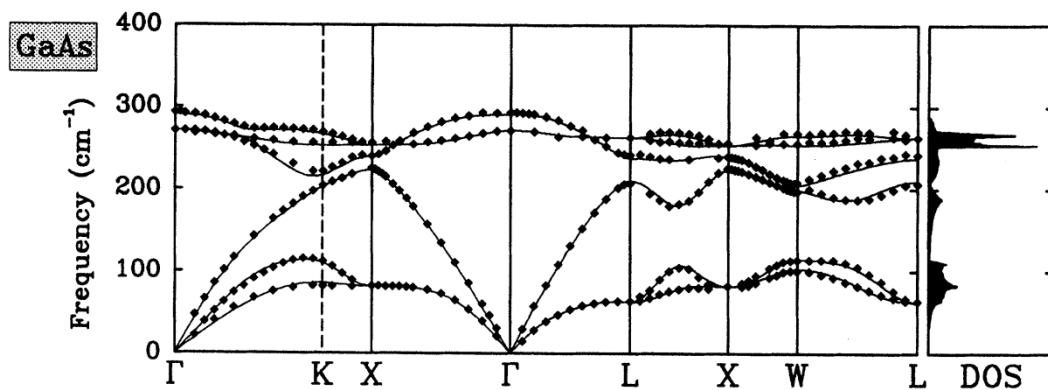


Figure 2.2: Relation de dispersion des phonons pour *GaAs* massif (calculée: ligne pleine, mesurée: points), Réf.[10].

Au centre de la zone de Brillouin, les modes TA et LA sont dégénérés et leurs fréquences respective sont nulles. Au voisinage du point Γ (centre de la zone), les fréquences des modes acoustiques dépendent linéairement du vecteur d'onde Q . Par contre, la fréquence des modes optiques est presque constante à travers toute la zone (voir figure 2.2).

II.3 Relation de normalisation des phonons

Dans un cristal dont la maille élémentaire contient deux atomes, pour les modes optiques le déplacement relatif $u(\vec{R})$ des atomes peut s'écrire à partir des Eqs.(2.7) et (2.8) sous la forme suivante[11]

$$u(\vec{R}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\lambda Q} \sqrt{\frac{\hbar}{2M\omega_{\lambda Q}}} \vec{e}_{\lambda Q} (a_{\lambda Q} + a_{-\lambda Q}^\dagger) e^{i\vec{Q}\cdot\vec{R}} \quad (2.13)$$

où N est nombre de mailles élémentaires, $\vec{e}_{\lambda Q}$ est le vecteur de polarisation du déplacement, M est la masse réduite des deux atomes de la maille. Pour les besoins de nos calculs ultérieurs calculons l'intégrale suivante [3]

$$\int u(\vec{R}) u(\vec{R})^* d^3r \quad (2.14)$$

En substituant (2.13) dans (2.14) on obtient

$$\int u(\vec{R}) u(\vec{R})^* d^3R = \sum_{\lambda Q} \sum_{\lambda' Q'} \frac{\hbar}{2NM} \frac{1}{\sqrt{\omega_{\lambda Q} \omega_{\lambda' Q'}}} \vec{e}_{\lambda Q} \vec{e}_{\lambda' Q'} \int e^{-i(\vec{Q}' - \vec{Q})\cdot\vec{R}} d^3R \quad (2.15)$$

avec

$$\int e^{-i(\vec{Q}' - \vec{Q})\cdot\vec{R}} d^3R = V \delta_{\vec{Q}, \vec{Q}'} \quad (2.16)$$

où V est le volume du solide, tandis que $\delta_{\vec{Q}, \vec{Q}'}$ est le symbole de Kronecker. En remplaçant (2.16) dans (2.15) on obtient [3]

$$\int u(\vec{R}) u(\vec{R})^* d^3R = \frac{1}{nM} \sum_{\lambda Q} \frac{\hbar}{2\omega_{\lambda Q}} \quad (2.17)$$

La relation (2.15) est dite relation de normalisation des phonons, où on a introduit $n = \frac{N}{V}$ représentant le nombre de mailles élémentaires par unité de volume. De par sa définition,

$\frac{1}{n}$ représente le volume de la maille primitive.

III. Interaction électron phonon

III.1 Processus d'absorption et d'émission d'un phonon

Les électrons en mouvement dans un solide entrent en collision avec les phonons, ainsi un électron peut absorber ou émettre un phonon de vecteur d'onde Q et d'énergie $\hbar\omega_{\lambda Q}$. Cette interaction permet aux électrons d'effectuer divers processus de transitions dans la bande de conduction ou dans la bande de valence. Dans le cas d'un puits quantique, au sein de la même bande (conduction ou valence) du fait de la quantification du mouvement le long de la direction de croissance de laquelle découle la formation de sous-bandes il faut distinguer les processus intra-sous-bandes et inter-sous-bandes. Tous ces processus ont lieu tout en respectant la conservation de l'énergie et l'impulsion totales [2] qu'on exprime comme

$$E_f = E_i \pm \hbar\omega_{\lambda Q} \quad (2.18)$$

$$\hbar\vec{K}_f = \hbar\vec{K}_i \pm \hbar\vec{Q} \quad (2.19)$$

Dans les Eqs. (2.18, 2.19) ci-dessus, E_i et E_f représentent respectivement l'énergie initiale et finale de l'électron, tandis que K_i et K_f sont respectivement les vecteurs initial et final. Il est évident que le signe plus concerne l'absorption, alors que le signe moins l'émission.

III.2 Phonon optique polaire

III.2.1 Modèle massif des phonons

Une hétérostructure tel qu'un puits quantique par exemple est un système inhomogène du fait de la présence d'interfaces séparant des couches très minces de semiconducteurs différents. Cette configuration physique modifie non seulement les propriétés électroniques (spectres et fonctions d'ondes), mais aussi les modes de vibration du système. Du fait de sa simplicité, le modèle massif des phonons est d'usage courant [11-12]. Ce modèle consiste à considérer l'hétérostructure comme un semiconducteur homogène et utilise les modes propres de vibration de ce dernier. Du fait de la localisation des porteurs de charge dans le puits, les modes propres du semiconducteurs formant ce dernier sont utilisés. La validité de cette approximation devrait être limitée à des puits suffisamment larges ou à des modes de

vibration qui se propagent dans toute l'hétérostructure, tels que les modes acoustiques qui pourraient en principe être traités de cette façon.

Dans les semiconducteurs III-V, le phonon optique polaire occupe une place très particulière et joue un rôle de premier plan dans des phénomènes tels que la relaxation et la formation du polaron[13-14].

Dans les semiconducteurs III-V et II-VI, l'interaction des électrons avec les modes optiques polaires est dominante à température ambiante [15-16].

III.2.2 Polarisation et charge effective

Notant par e^* la charge effective dynamique du cation, la polarisation au point \vec{R} s'écrit [17]

$$\vec{P}(\vec{R}) = \frac{e^* \vec{u}(\vec{R})}{V_0} \quad (2.20)$$

où $\vec{u}(\vec{R})$ représente le déplacement relative des deux atomes en position \vec{R} , V_0 est le volume la maille élémentaire. Le déplacement $\vec{u}(\vec{R})$, obéissant à la loi de Newton, satisfait l'équation suivante[17]

$$M \left(\frac{\partial^2 \vec{u}}{\partial t^2} + \omega_0^2 \vec{u} \right) = \vec{F} \quad (2.21)$$

M étant la masse réduite des atomes, ω_0 la fréquence du phonon optique polaire, \vec{F} la résultante des forces externes, due au champ électrique macroscopique associé à la polarisation \vec{P} . Les Eqs. (2.20) et (2.21) entraînent

$$\frac{MV_0}{e^*} \left(\frac{\partial^2 \vec{P}}{\partial t^2} + \omega_0^2 \vec{P} \right) = \frac{e^* \vec{D}}{\epsilon_0} \quad (2.22)$$

où \vec{D} est le champ de déplacement et ϵ_0 la permittivité du vide. Dans le cas statique,

on a
$$\frac{\partial^2 \vec{P}}{\partial t^2} = 0 \quad (2.23)$$

de l'Eq. (2.22) et (2.23) on obtient donc [17]

$$\vec{P} = \frac{(e^*)^2 \vec{D}}{\omega_0^2 M V_0 \varepsilon_0} \quad (2.24)$$

La polarisation $\vec{P}_{tot}(0)$ dans le cas d'un champ électrique statique est donnée par [17]

$$\vec{P}_{tot}(0) = \vec{D} - \varepsilon_0 \vec{E} = \left(1 - \frac{1}{\varepsilon(0)}\right) \vec{D} \quad (2.25)$$

avec \vec{E} est le champ électrique statique et $\varepsilon(0)$ la permittivité électrique à basse fréquence.

Dans le cas des hautes fréquences, la polarisation s'écrit comme suit [17]

$$\vec{P}_{tot}(\infty) = \left(1 - \frac{1}{\varepsilon(\infty)}\right) \vec{D} \quad (2.26)$$

où $\varepsilon(\infty)$ est permittivité pour les hautes fréquences. Ainsi de l'Eq. (2.24) et (2.25), on déduit la polarisation induite par le mouvement des ions qu'on écrit comme suit [17]

$$\vec{P} = \vec{P}_{tot}(0) - \vec{P}_{tot}(\infty) = \left(\frac{1}{\varepsilon(\infty)} - \frac{1}{\varepsilon(0)}\right) \vec{D} \quad (2.27)$$

En comparant les Eqs. (2.24) et (2.27), on déduit la formule de la charge effective [17-18]

$$e^{*2} = M V_0 \omega_0^2 \varepsilon_0 \left(\frac{1}{\varepsilon(\infty)} - \frac{1}{\varepsilon(0)}\right) \quad (2.28)$$

III.2.3 Hamiltonien de Fröhlich

En l'absence d'un champ électrique externe et en présence d'un semiconducteur où la charge électrique est nulle le champ de déplacement s'écrit comme suit [17]

$$\vec{D} = \vec{P} + \varepsilon_0 \vec{E} = \vec{0} \quad (2.29).$$

A partir des Eqs. (2.20) et (2.29), on tire le champ électrique \vec{E}

$$\vec{E} = -\frac{\vec{P}(\vec{R})}{\varepsilon_0} = -\frac{e^* \vec{u}(\vec{R})}{\varepsilon_0 V_0} \quad (2.30)$$

qu'on peut encore écrire comme

$$\vec{E} = -\vec{\nabla}\phi \quad (2.31)$$

où ϕ est le potentiel électrique. En remplaçant l'Eq. (2.31) dans (2.30), on obtient

$$\vec{\nabla}\phi = \frac{e^* \vec{u}(\vec{R})}{\epsilon_0 V_0} \quad (2.32).$$

L'intégration de l'Eq. (2.32) conduit à

$$\phi(Q, \vec{R}) = -i \frac{e^* \vec{u}(\vec{R}) \cdot \vec{Q}}{\epsilon_0 V_0 Q^2} \quad (2.33)$$

L'énergie d'interaction de l'électron avec le champ électrique produit par les vibrations s'écrit

$$H_{e-ph} = -e \phi(Q, \vec{R}) \quad (2.34)$$

En remplaçant la formule de $\vec{u}(\vec{R})$ dans l'Eq. (2.33) on obtient [19]

$$H_{e-ph} = \sum_Q i e \sqrt{\frac{\hbar \omega_0}{2 \epsilon_0 N V_0}} \frac{1}{Q^2} \left(\frac{1}{\epsilon(\infty)} - \frac{1}{\epsilon(0)} \right)^{1/2} \vec{Q} \cdot \vec{e}_Q (a_Q + a_{-Q}^\dagger) e^{i\vec{Q} \cdot \vec{R}} \quad (2.35)$$

qui porte le nom d'Hamiltonien de Frohlich [20] qui fut le premier à l'introduire dans son étude sur le temps de relaxation des électrons dans les cristaux ioniques.

Par la suite, ce modèle a été utilisé par Callen [21] dans son étude les pertes d'énergie au profit du réseau par des électrons chauds dans une série de cristaux ioniques. Beaucoup plus récemment, B. C. Lee *et al.* [22] étudièrent dans GaN l'interaction des électrons avec les phonons optiques longitudinaux et transversaux. Quant à Q. H. Zhong *et al.* [23], ils étudièrent l'interaction électron phonon dans une boîte quantique de GaAs dans une matrice AlAs.

X. Gao *et al.* [24] quant à eux, montrèrent dans leur études sur l'interaction des électrons avec les phonons optique polaire dans un multipuits quantique la validité de

l'approximation des modes massifs des phonons en comparant ses résultats à des modèle plus élaborés.

III.3 Potentiel de déformation induit par les phonons optiques

III.3.1 Hamiltonien d'interaction

Dans un cristal contenant plus d'un atome, les phonons optiques de grande longueur d'onde induisent une déformation microscopique au niveau de la maille élémentaire. Cette déformation fait varier l'énergie des électrons dans la structure de bande. Ce couplage entre les électrons et les phonons par l'intermédiaire de la déformation fut mis en équation pour la première fois par Bardeen et Schokley [25] à travers un potentiel de déformation. Leur étude portait alors sur la mobilité des porteurs de charges dans des cristaux non polaires.

L'Hamiltonien d'interaction entre les électrons et les phonons optiques est donné par [19]

$$H_{e-ph} = \sum_{\lambda} \sum_{\mathbf{Q}} f_{\mathbf{Q}\lambda} (a_{\mathbf{Q}} + a_{-\mathbf{Q}}^+) e^{i\mathbf{Q}\cdot\mathbf{R}} \quad (2.36)$$

où $f_{\mathbf{Q}\lambda}$ est donnée par

$$f_{\mathbf{Q}\lambda} = \left(\frac{\hbar}{2\rho V \omega_{\mathbf{Q}\lambda}} \right)^{1/2} D_{\lambda} \quad (2.37)$$

avec ρ est la densité du matériaux, $\omega_{\mathbf{Q}\lambda}$ la fréquence des phonons optiques,

D_{λ} la matrice du couplage de déformation de potentiel donnée par [19]

$$D_\lambda = \begin{pmatrix} 0 & h & j & 0 & i\sqrt{\frac{1}{2}}h & -i\sqrt{2}j \\ h^* & 0 & 0 & j & 0 & i\sqrt{\frac{3}{2}}h \\ j^* & 0 & 0 & -h & -i\sqrt{\frac{3}{2}}h^* & 0 \\ 0 & j^* & -h^* & 0 & -i\sqrt{2}j^* & -i\sqrt{\frac{1}{2}}h^* \\ -i\sqrt{\frac{1}{2}}h^* & 0 & i\sqrt{\frac{3}{2}}h & i\sqrt{2}j & 0 & 0 \\ i\sqrt{2}j^* & -i\sqrt{\frac{3}{2}}h^* & 0 & i\sqrt{\frac{1}{2}}h & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (2.38)$$

où h et j sont donnés par

$$h = \frac{d_0}{a} (i\delta_{\lambda y} + \delta_{\lambda x}) \quad (2.39)$$

$$j = i\frac{d_0}{a} \delta_{\lambda z} \quad (2.40)$$

L'indice λ parcourant l'ensemble d'indices $\{x, y, z\}$, alors que a est la constante du réseau et d_0 la constante du potentiel de déformation. Pour des semiconducteurs tels que Ge, Si, GaAs etc, cette interaction a un effet négligeable pour des raisons de symétrie [26], par contre dans la bande de valence on doit en tenir en compte. Notons que Scholz [19] a étudié théoriquement cette interaction pour le GaAs massif. D'un autre côté, K. Reimann *et al.* [26] étudièrent l'interaction des trous avec les phonons optiques à travers le potentiel de déformation dans un puits quantique multiple de $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x/\text{Si}$.

A l'aide de cette interaction avec les excitons dans une boîte quantique d'InP, A. G. Rolo *et al.* [27] réussirent à expliquer des résultats expérimentaux de diffusion. En outre, K. Shen et M. W. Wu [28] étudièrent théoriquement à l'aide de cette interaction la relaxation du spin dans le GaAs massif.

III.4 Phonon acoustique

III.4.1 Hamiltonien d'interaction électron phonon

les phonons acoustiques de grande longueur d'onde créent une déformation macroscopique du cristal ΔV , cette dernière induit un potentiel de déformation qui fait varier les énergies des électrons dans les bandes, la variation de l'énergie est donnée par [17]

$$\Delta E = \Xi \frac{\Delta V}{V} \quad (2.41)$$

Ξ étant la constante du potentiel de déformation et $\frac{\Delta V}{V}$ la variation relative du volume du cristal qui peut s'écrire comme suit [29]

$$\frac{\Delta V}{V} = \sum_{\nu} \xi_{\nu\nu} = \vec{\nabla} \cdot \vec{u}(\vec{R}) \quad (2.42)$$

où ξ est le tenseur de déformation et $\vec{u}(\vec{R})$ représente le déplacement des atomes dû aux phonons acoustiques. L'Hamiltonien décrivant cette interaction s'écrit [29-19]

$$H_{e-ph} = \Xi \vec{\nabla} \cdot \vec{u}(\vec{R}) = \Xi i \vec{Q} \cdot \vec{u}(\vec{R}) \quad (2.43)$$

On note ici que seuls les modes longitudinaux contribuent à l'Eq. (2.43). De même que pour les modes optiques, Bardeen et Shokley [25] furent aussi les premiers à l'introduire. Ce potentiel fut utilisé par F. Szmulowicz [30] dans son étude de la mobilité des trous dans le silicium et le germanium. Mentionnons aussi le travail de Scholz [19] qui mena une étude systématique de l'interaction trou-phonon dans le GaAs massif.

Dans le super-réseaux $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x/\text{Si}$, G. Sun *et al.* [31] étudièrent cette interaction avec des trous, alors que S. R. Bolívar *et al.* [32] quant à eux calculèrent l'interaction des trous avec les phonons acoustiques dans le Silicium et le Germanium massifs.

IV Les phonons optiques dans les hétérostructures

IV.1 Les divers modèles de phonons

Les résultats de la diffusion Raman [33-36] montrent l'existence des phonons confinés et d'interfaces dans le super-réseau $GaAs/AlAs$. A la suite de ces résultats expérimentaux, plusieurs modèles ont été proposés pour décrire les phonons optiques dans les hétérostructures. Parmi ces derniers:

1- Le modèle du continuum diélectrique (DCM) de Fuchs and Kliewer [37]. Ce modèle qui utilise la continuité du champ électrique au niveau des interfaces est largement utilisé vu sa simplicité et son efficacité. Parmi les auteurs qui l'ont employé citons N. Mori et Ando [38] dans leur travail concernant l'interaction électron-phonon dans l'hétérostructure $GaAs/AlAs$.

X. ZIANNI *et al.* [39] ont mené une étude théorique dans laquelle les résultats du modèle diélectrique et phonon massif sont comparés conjointement à l'expérience. Dans leur système, $Al_xGa_{1-x}As / GaAs / Al_xGa_{1-x}As$, la différence entre les deux modèles théoriques reste minimale tant que la largeur du puits est au dessus d'un certain seuil.

En plus, pour leur système à trois interfaces $AlAs/GaAs/AlAs/GaAs$ M. V. Kisin *et al.* [40] montrent que le domaine de validité du modèle du phonon massif est en fait limité aux énergies basses en comparaison avec l'énergie du phonon optique polaire. D'un autre côté citons aussi J. P. Sun *et al.* [41] et leurs travaux qui mettent l'accent sur les modes de phonons de surface pour un système où la symétrie de réflexion est absente. Parallèlement, J. Pozela *et al.* [42] aboutissent comme on peut s'y attendre à la conclusion physiquement plausible que pour les puits ultra-minces $AlAs / GaAs / AlAs$ et $GaAs / InAs / GaAs$ le modèle du phonon massif n'est plus adéquat et qu'en plus les modes d'interfaces deviennent très importants. Le modèle du continuum diélectrique (DCM) lui aussi a ses limites, le lecteur intéressé peut consulter la Réf.[43].

2- Le modèle hydrodynamique de Babiker [44], dans sa description des phonons optiques dans un puits quantique de $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$, utilise la continuité des déplacements mécaniques au niveau des interfaces. Ce modèle a été utilisé dès son apparition par Ridley [45] dans son étude de l'interaction électron-phonon optique polaire dans ce système.

Par la suite, en collaboration avec N. C. Constantinou [46] ces auteurs étudièrent la même interaction dans un fil quantique à base du même semiconducteur en l'occurrence *GaAs*.

3- Le modèle hybride est caractérisé par la continuité des déplacements mécaniques et celle des composantes parallèles du champ électrique E ainsi que la composante perpendiculaire du déplacement D . Cette théorie fût introduite par Ridley [47] dans son étude de l'interaction électron-phonon optique dans un puits quantique infini de *GaAs*. Par la suite, Constantinou et Ridley [48] étudièrent l'effet de la dispersion sur l'interaction électron-phonon dans un puits quantique *GaAs/AlAs*. En outre, Bennett *et al.* [49] étudièrent l'effet sur l'interaction électron-phonon d'une monocouche d' *InAs* insérée dans un puits quantique de *GaAs/AlAs* infini. D'un autre côté, utilisant ce même modèle Stavrou *et al.* [50] calculèrent les taux de diffusion et de capture des électrons par émission de phonons optiques.

3- Le modèle microscopique introduit par Huang et Zhu [51] et portant leurs noms a été développé bien avant le modèle hybride de Ridley, introduit en 1993, et fut le premier à vérifier comme il se doit la continuité des déplacements et du champ électrique. Weber *et al.* [52] utilisèrent ce modèle pour calculer l'interaction des électrons avec les phonons confinés dans un puits quantique *GaAs/Al_xGa_{1-x}As*, et selon ces auteurs, leurs résultats montrèrent un bon accord avec les données expérimentales. Dans le but de vérifier expérimentalement la validité des différents modèles de phonons, Tsen et Morcos [53] dans une expérience de diffusion Raman résolu dans le temps étudièrent en fonction de la largeur du puits la population hors équilibre des phonons générés par émission et conclurent que seul le modèle microscopique de Huang et Zhu est capable de rendre compte de façon satisfaisante de leurs résultats expérimentaux.

IV.2 Le modèle du continuum diélectrique (DCM)

Les vibrations atomiques dues aux phonons optiques polaires induisent un champ électrique macroscopique ressenti par les électrons du fait de leurs charges, par conséquent, un couplage est établie et est décrit par un potentiel d'interaction électron-phonon.

Le modèle du milieu diélectrique continu largement utilisé du fait de sa simplicité et son efficacité prouvé[24] sera celui qu'on utilisera dans ce travail.

Dans ce qui suit, nous déduisons d'abord les modes propres de vibration. Soit $\Phi(r)$ le potentiel associé au champ électrique \vec{E} en absence de charges électrostatiques externes on a [39]:

$$\vec{E}(r) = -\vec{\nabla}\Phi(r) \quad (2.44)$$

$$\text{div}\vec{D} = -\varepsilon\vec{\nabla}^2\Phi(r) = 0 \quad (2.45)$$

ε étant la perméabilité du matériau et \vec{D} est le déplacement du champ électrique généré par les phonons. Par symétrie, on écrit $\Phi(r)$ sous la forme [54]

$$\Phi(r) = \frac{1}{\sqrt{A}} e^{i\vec{q}\cdot\vec{\rho}} \phi(z) \quad (2.46)$$

où \vec{q} et $\vec{\rho}$ sont respectivement les vecteurs d'onde du phonon et position dans le plan xy , tandis que A représente l'aire du puits le long de l'interface. Substituant (2.46) dans (2.45), on obtient [24]

$$\varepsilon \left(\frac{\partial^2}{\partial z^2} - q^2 \right) \phi(z) = 0 \quad (2.47)$$

De l'Eq. (2.47) découlent deux possibilités dont la première

$$\varepsilon = 0 \quad (2.48)$$

donne les phonons confinés et demi espace, ces derniers sont généralement négligés[53]. La fréquence de ces modes est égale à celle du matériau massif, sachant que les perméabilités dans le puits et les barrières dépendent différemment de la fréquence, les modes seront confinés dans l'un ou l'autre.

La deuxième solution quant à elle conduit à

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial z^2} - q^2 \right) \phi(z) = 0 \quad (2.49)$$

donnant lieu aux phonons d'interfaces. Si le puits est symétrique, les modes seront soit symétriques ou antisymétriques. Aux interfaces, la continuité du potentiel ϕ et la composante normale du déplacement conduit à

$$-\varepsilon_{i,z} \frac{\partial \phi_i(z)}{\partial z} = -\varepsilon_{i+1,z} \frac{\partial \phi_{i+1}(z)}{\partial z} \quad (2.50)$$

$$\phi_i(z) = \phi_{i+1}(z) \quad (2.51)$$

L'indice i désignant la couche homogène du matériau massif formant l'hétérostructure. Pour le cas du puits quantique $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}/\text{GaAs}/\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$, nous sommes en présence de trois zones homogènes et deux interfaces, dans ce cas, i parcourt l'ensemble des valeurs suivantes : 1, 2.

La solution de l'Eq. (2.49) prendra la forme suivante

$$\phi_i(z) = A_i e^{qz} + B_i e^{-qz} \quad (2.52)$$

Pour un puits quantique symétrique, le potentiel des phonons d'interfaces symétriques s'écrit [38]

$$\phi_s(z) = A_s \begin{cases} e^{q(z+\frac{L}{2})} & z \leq -\frac{L}{2} \\ \frac{\cosh(qz)}{\cosh(q\frac{L}{2})} & |z| \leq \frac{L}{2} \\ e^{-q(z-\frac{L}{2})} & z \geq \frac{L}{2} \end{cases} \quad (2.53)$$

alors que pour les modes antisymétriques, on a [38]

$$\phi_a(z) = A_a \begin{cases} -e^{q(z+\frac{L}{2})} & z \leq -\frac{L}{2} \\ \frac{\sinh(qz)}{\sinh(q\frac{L}{2})} & |z| \leq \frac{L}{2} \\ e^{-q(z-\frac{L}{2})} & z \geq \frac{L}{2} \end{cases} \quad (2.54).$$

Pour les phonons confinés, le potentiel est donné par [38]

$$\phi_c(z) = A_c \cos\left(\frac{n\pi z}{L}\right) \quad (2.55)$$

Dans les Eqs. (2.53-55), les constantes A_s , A_a et A_c sont déterminées à partir de la relation de normalisation suivante [54]

$$\int dr |\nabla\Phi(r)|^2 \beta_i^{-1} = \frac{\hbar\omega}{2\varepsilon_0} \quad (2.56)$$

où $\hbar\omega$ est l'énergie du phonon et β_i^{-1} est donné par :

$$\beta_i^{-1} = \frac{\omega}{2} \frac{\partial \varepsilon_i}{\partial \omega} \quad (2.57)$$

où ε_i est la perméabilité du matériau correspondant à la zone homogène numéro i , pour le GaAs, elle est donné par[24] :

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_\infty \frac{(\omega^2 - \omega_{LO}^2)}{(\omega^2 - \omega_{TO}^2)} \quad (2.58)$$

où ω_{LO} et ω_{TO} sont respectivement les fréquences optiques longitudinale et transversale alors que ε_∞ représente la constante diélectrique haute fréquence.

A partir des Eqs. (2.50-51), on obtient

$$\varepsilon_W \tanh\left(\frac{qL}{2}\right) + \varepsilon_B = 0 \quad (2.59)$$

$$\varepsilon_W \operatorname{cotanh}\left(\frac{qL}{2}\right) + \varepsilon_B = 0 \quad (2.60)$$

ε_W , ε_B étant respectivement les permittivités dans le puits et dans la barrière. La solution des Eqs. (2.59-60) donnent les fréquences des phonons d'interfaces symétriques et antisymétriques.

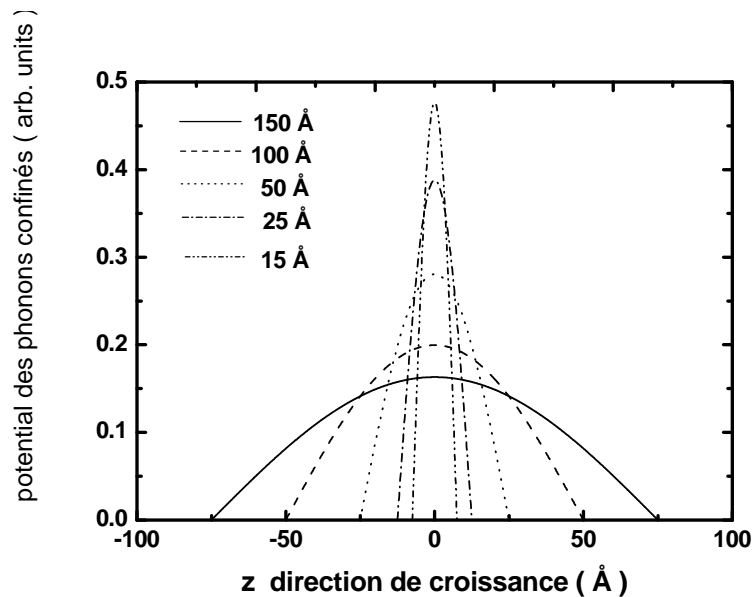


Figure 2.3: Potentiel des phonons confinés pour plusieurs largeurs de puits en fonction de la position le long de la direction de croissance.

La figure 2.3 ci-dessus, représente le potentiel des phonons confinés pour diverses largeurs de puits quantique allant de 15 jusqu'à 150 Å. On remarque que l'amplitude du potentiel devient plus importante à mesure que la largeur du puits diminue.

Sur la figure 2.4 ci-dessous, nous montrons le potentiel des phonons d'interfaces symétriques pour les mêmes largeurs de puits où on remarque aisément que le potentiel des phonons d'interfaces est plus important pour les puits les plus minces.

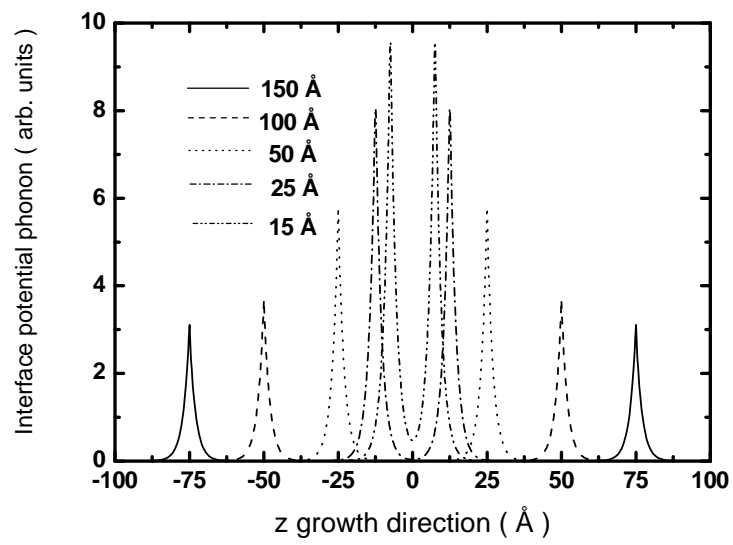


Figure 2.4: Potentiel des phonons d'interfaces symétrique pour plusieurs largeurs de puits

V. Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons présenté les différents modes de phonons dans un solide cristallin : Les modes acoustiques et optiques aussi bien longitudinaux que transversaux. En plus, nous avons déduit les expressions analytiques des potentiels d'interaction des électrons avec les différents modes de phonons. D'autre part, nous avons passé en revue les travaux réalisés dans ce domaine.

Références

- [1] Chaichian, M., Rojas, H. P., & Tureanu, A. (2014). *Basic Concepts in Physics*. Springer.
- [2] Harrison, P. (2005). *Quantum wells, wires and dots: theoretical and computational physics of semiconductor nanostructures*. John Wiley & Sons.
- [3] Stroschio, M. A., & Dutta, M. (2001). *Phonons in nanostructures*. Cambridge University Press.
- [4] Fukazawa, H., Ikeda, S., Oguro, M., Bennington, S. M., & Mae, S. (2003). Phonon dispersion curves in KOD-doped ice observed by neutron scattering. *The Journal of chemical physics*, 118(4), 1577-1580.
- [5] Tenne, D. A., Gaisler, V. A., Moshegov, N. T., Toropov, A. I., & Shebanin, A. P. (1998). Anisotropy of optical phonons in semiconductor superlattices: Raman scattering experiments. *Journal of Experimental and Theoretical Physics Letters*, 68(1), 53-58.
- [6] Srivastava, G. P., Tütüncü, H. M., & Günhan, N. (2004). First-principles studies of structural, electronic, and dynamical properties of Be chalcogenides. *Physical Review B*, 70(8), 085206.
- [7] Kushwaha, A. K. (2010). Phonon spectrum and thermal properties of semiconducting compounds ZnS and ZnSe. *Physica B: Condensed Matter*, 405(6), 1638-1642
- [8] Madelung, Otfried (ed.). *Semiconductors: data handbook*. Springer, 2004.
- [9] Sakagami, N. (1990). Hydrothermal growth and characterization of ZnO single crystals of high purity. *Journal of Crystal Growth*, 99(1-4), 905-909.
- [10] Giannozzi, P., De Gironcoli, S., Pavone, P., & Baroni, S. (1991). Ab initio calculation of phonon dispersions in semiconductors. *Physical Review B*, 43(9), 7231.
- [11] Masale, M. (2008). Scattering of electrons via bulk LO-phonon modes near a cylindrical core under the influence of an external azimuthal magnetic field. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, 41(1), 175-180.
- [12] Stavrou, V. N., & Hu, X. (2005). Charge decoherence in laterally coupled quantum dots due to electron-phonon interactions. *Physical Review B*, 72(7), 075362.
- [13] Sun, Y. Y., Abtey, T. A., Zhang, P., & Zhang, S. B. (2014). Anisotropic polaron localization and spontaneous symmetry breaking: Comparison of cation-site acceptors in GaN and ZnO. *Physical Review B*, 90(16), 165301.
- [14] Burnett, B. A., & Williams, B. S. (2014). Density matrix model for polarons in a terahertz quantum dot cascade laser. *Physical Review B*, 90(15), 155309.
- [15] LI, Sheng S. *Semiconductor physical electronics*. Springer, 2007.

- [16] Požela, J., Jucienė, V., Namajūnas, A., & Požela, K. (1997). Electron mobility and subband population tuning by a phonon wall inserted in a semiconductor quantum well. *Journal of applied physics*, 81(4), 1775-1780.
- [17] Ridley, Brian K. *Quantum processes in semiconductors*. Oxford University Press, 2013.
- [18] Aspnes, D. E. et Moss, T. S. Handbook on semiconductors. Vol. 2 North-Holland, Amsterdam, 1980, p. 109.
- [19] Scholz, R. (1995). Hole–phonon scattering rates in gallium arsenide. *Journal of applied physics*, 77(7), 3219-3231.
- [20] Frölich, H. (1937). Electrical breakdown in solid crystals. In *Proc. Roy. Soc* (Vol. 160, pp. 230-238).
- [21] Callen, H. B. (1949). Electric breakdown in ionic crystals. *Physical Review*, 76(9), 1394.
- [22] Lee, B. C., Kim, K. W., Dutta, M., & Stroscio, M. A. (1997). Electron–optical-phonon scattering in wurtzite crystals. *Physical Review B*, 56(3), 997.
- [23] Zhong, Q. H., Liu, C. H., Zhang, Y. Q., & Sun, H. C. (2008). One-phonon-assisted resonant electron Raman scattering of GaAs quantum dots in an AlAs matrix. *Physics Letters A*, 372(12), 2103-2108.
- [24] Gao, X., Botez, D., & Knezevic, I. (2008). Phonon confinement and electron transport in GaAs-based quantum cascade structures. *Journal of Applied Physics*, 103(7), 073101.
- [25] Bardeen, J., & Shockley, W. (1950). Deformation potentials and mobilities in non-polar crystals. *Physical Review*, 80(1), 72.
- [26] Reimann, K., Kaindl, R. A., & Woerner, M. (2001). Optical deformation-potential scattering of holes in multiple quantum well structures. *Physical Review B*, 65(4), 045302.
- [27] Rolo, A. G., Vasilevskiy, M. I., Hamma, M., & Trallero-Giner, C. (2008). Anomalous first-order Raman scattering in III-V quantum dots: Optical deformation potential interaction. *Physical Review B*, 78(8), 081304.
- [28] Shen, K., & Wu, M. W. (2010). Hole spin relaxation in intrinsic and p-type bulk GaAs. *Physical Review B*, 82(11), 115205.
- [29] Davydov, A. S. *Solid state theory*. 1976.
- [30] Szmulowicz, F. (1983). Calculation of optical-and acoustic-phonon—limited conductivity and Hall mobilities for p-type silicon and germanium. *Physical Review B*, 28(10), 5943.
- [31] Sun, G., Friedman, L., & Soref, R. A. (2000). Light-hole to heavy-hole acoustic phonon scattering rate. *Physical Review B*, 62(12), 8114.

- [32] Rodríguez-Bolívar, S., Gómez-Campos, F. M., Gámiz, F., & Carceller, J. E. (2005). Implications of nonparabolicity, warping, and inelastic phonon scattering on hole transport in pure Si and Ge within the effective mass framework. *Journal of applied physics*, 97(1), 013702.
- [33] Sood, A. K., Menendez, J., Cardona, M., & Ploog, K. (1985). Resonance Raman scattering by confined LO and TO phonons in GaAs-AlAs superlattices. *Physical review letters*, 54(19), 2111.
- [34] Sood, A. K., Menendez, J., Cardona, M., & Ploog, K. (1985). Interface vibrational modes in GaAs-AlAs superlattices. *Physical review letters*, 54(19), 2115.
- [35] Klein, M. V. (1986). Phonons in semiconductor superlattices. *IEEE journal of quantum electronics*, 22(9), 1760-1770.
- [36] Sun, K. W., Wang, C. M., Chang, H. Y., Wang, S. Y., & Lee, C. P. (2000). Optical phonon emission in GaAs/AlAs and GaAs/Al_{0.7}Ga_{0.3}As multiple quantum well structures. *Journal of luminescence*, 92(1), 145-150.
- [37] Fuchs, R., & Kliever, K. L. (1965). Optical modes of vibration in an ionic crystal slab. *Physical Review*, 140(6A), A2076.
- [38] Mori, N., & Ando, T. (1989). Electron-optical-phonon interaction in single and double heterostructures. *Physical Review B*, 40(9), 6175.
- [39] Zianni, X., Simserides, C. D., & Triberis, G. P. (1997). Electron scattering by optical phonons in Al_xGa_{1-x}As/GaAs/Al_xGa_{1-x}As quantum wells. *Physical Review B*, 55(24), 16324.
- [40] Kisin, M. V., Stroschio, M. A., Belenky, G., Gorfinkel, V. B., & Luryi, S. (1998). Effects of interface phonon scattering in three-interface heterostructures. *Journal of applied physics*, 83(9), 4816-4822.
- [41] Sun, J. P., Teng, H. B., Haddad, G. I., & Stroschio, M. A. (1998). Electron-interface phonon interaction in multiple quantum well structures. *Semiconductor science and technology*, 13(8A), A147.
- [42] Požela, J., Požela, K., & Jucienė, V. (2007). Scattering of electrons by confined interface polar optical phonons in a double-barrier heterostructure. *Semiconductors*, 41(9), 1074-1079.
- [43] Ridley, B. K. (2009). *Electrons and phonons in semiconductor multilayers* (Vol. 5). Cambridge University Press.
- [44] Babiker, M. (1986). Longitudinal polar optical modes in semiconductor quantum wells. *Journal of Physics C: Solid State Physics*, 19(5), 683.
- [45] Ridley, B. K. (1989). Electron scattering by confined LO polar phonons in a quantum well. *Physical Review B*, 39(8), 5282.
- [46] Constantinou, N. C., & Ridley, B. K. (1990). Interaction of electrons with the confined LO phonons of a free-standing GaAs quantum wire. *Physical Review B*, 41(15), 10622.

- [47] Ridley, B. K. (1993). Electron-hybridon interaction in a quantum well. *Physical Review B*, 47(8), 4592.
- [48] Constantinou, N. C., & Ridley, B. K. (1994). Effect of bulk dispersion on the electron–optical-phonon interaction in a single quantum well. *Physical Review B*, 49(24), 17065.
- [49] Bennett, C. R., Amato, M. A., Zakhleniuk, N. A., Ridley, B. K., & Babiker, M. (1998). Effects of a monolayer on the electron-phonon scattering rates in a quantum well: Dielectric continuum versus hybrid model. *Journal of applied physics*, 83(3), 1499-1506.
- [50] Stavrou, V. N., Bennett, C. R., Al-Dossary, O. M. M., & Babiker, M. (2001). Electron scattering and capture rates in quantum wells by emission of hybrid optical phonons. *Physical Review B*, 63(20), 205304.
- [51] Huang, K., & Zhu, B. (1988). Dielectric continuum model and Fröhlich interaction in superlattices. *Physical Review B*, 38(18), 13377.
- [52] Weber, G., De Paula, A. M., & Ryan, J. F. (1991). Electron-LO-phonon scattering rates in GaAs-Al_xGa_{1-x}As quantum wells. *Semiconductor Science and Technology*, 6(5), 397.
- [53] Tsen, K. T., Wald, K. R., Ruf, T., Peter, Y. Y., & Morkoc, H. (1991). Electron–optical-phonon interactions in ultrathin GaAs/AlAs multiple quantum wells. *Physical review letters*, 67(18), 2557.
- [54] Wang, X. F., da Cunha Lima, I. C., Troper, A., & Lei, X. L. (1999). Analysis of the scattering of electrons by special vibrational modes in a GaAs quantum well with a thin AlAs middle barrier: Mobility modulated by a transversal electric field. *Journal of applied physics*, 85(9), 6598-6605.

CHAPITRE III

Interaction trou- phonon dans le modèle massif des phonons

Dans ce chapitre, nous calculons les taux de diffusion intra-sous-bandes des trous lourds et légers dus à l'interaction de ces derniers avec les phonons optiques polaires et le potentiel de déformation induit par les modes optiques aussi bien longitudinaux que transversaux. En outre, nous évaluons les taux de diffusion des trous lourds et légers avec les phonons acoustiques dans le cadre de l'approximation élastique en utilisant le modèle massif pour ces derniers. Nous étudions aussi l'effet de la sous bande split-off sur les divers taux de diffusion et nous discutons nos résultats en les comparant avec ceux obtenus par d'autres auteurs dans le cas du GaAs massif.

I. Introduction

L'interaction des électrons avec les phonons optiques polaires dans les semiconducteurs III-V, tels que GaAs, AlAs, InSb, GaN et aussi dans les composants II-VI tels que HgTe, CdTe, ZnO, CdS est une interaction importante qui se distingue par rapport à d'autres interactions par sa longue portée [1-2]. Cette interaction résulte de l'effet du champ électrique macroscopique induit par les modes propres de vibration optiques longitudinaux sur les électrons et dite interaction de Fröhlich [3]. Dans beaucoup de cas, on utilise le modèle massif des phonons pour traiter cette interaction non seulement dans les matériaux massifs mais aussi dans les hétérostructures à semiconducteurs tels que les puits [4], les multi-puits [5] et les fils quantiques [6], à cause d'aussi bien sa simplicité d'une part et son efficacité d'autre part. A titre exemple, Y. Zhang *et al.* [7] utilisent ce modèle pour calculer la mobilité des électrons dans le puits quantique AlSb/InAsSb et trouvent un bon accord avec leurs résultats expérimentaux. J. Z. Zhang *et al.* [8] utilisent aussi le modèle massif des phonons avec le modèle du milieu diélectrique continu en même temps dans le puits InAlN/AlN/GaN pour calculer le temps de relaxation des énergies des électrons, et trouvent que lorsqu'on tient compte de l'effet d'écran le modèle des phonons massif donne des résultats très proches de ceux utilisant le modèle du continuum diélectrique avec une différence de 5 % pour des températures électronique allant de 300 K à 2500 K, en revanche cette différence atteint 9 % dans le cas où on néglige l'effet d'écran.

Il faut noter ici que cette interaction est complètement absente dans les matériaux non-polaires tels que le Si et le Ge. Par contre, l'interaction des électrons avec les phonons dus au potentiel de déformation induit par les modes optiques longitudinaux et transversaux est quant à elle présente dans les matériaux aussi bien polaires que non-polaires. Cette interaction est décrite par un couplage de type potentiel de déformation [9]. A température ambiante, cette interaction est plus importante que celle due aux phonons acoustiques [10]. Cependant, cette dernière l'emporte à basse température [8-9].

En électronique et à ce jour et afin d'améliorer les performances des composants électroniques, beaucoup de travaux ont été consacrés à l'interaction électron-phonon dans le cadre global des phénomènes de transport et ce dans le but de réduire l'effet nuisible de cette interaction qui tend à réduire la mobilité des électrons [10-14]. La réduction de l'importance

de l'interaction électron-phonon passe par la modification des modes de vibration ou phonons et/ou les états électroniques [15].

Notons ici que Tsuchiya et Ando [16] ont montré que pour réduire l'interaction électron-phonon et augmenter la mobilité, on peut par exemple, modifier les fonctions d'ondes dans la direction de croissance du puits en insérant dans ce dernier une monocouche de même nature que le matériau dont sont faites les barrières.

II Taux de diffusion des trous dus aux phonons optiques polaires

II.1 Traitement analytique général

Le potentiel dû aux phonons aux optiques polaires dans le cadre du modèle massif, s'écrit comme suit [16]

$$V(\vec{R}) = \sum_{\vec{Q}} f_Q (a_Q + a_{-Q}^+) e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} \quad (3.1)$$

où

$$\vec{R} = \vec{r} + \vec{z} \quad (3.2)$$

$$\vec{Q} = \vec{q} + \vec{q}_z \quad (3.3)$$

\vec{r} et \vec{z} étant les deux composantes du vecteur position \vec{R} respectivement dans le plan (xy) et la direction z , tandis que \vec{q} et \vec{q}_z représentent la même chose pour le vecteur d'onde \vec{Q} , f_Q quant à elle est une fonction dépendant du mode des phonons considérés. Dans le cas des phonons optiques polaires massifs, celle-ci est donnée par

$$f_Q = \left(\frac{\hbar e^2 \omega_{LO}}{2\varepsilon_0 V_0} \right)^{1/2} \left(\frac{1}{\varepsilon(\infty)} - \frac{1}{\varepsilon(0)} \right)^{1/2} \frac{e^{iq_z z}}{Q} \quad (3.4)$$

où V_0 est le volume du système. Négligeant la dispersion, ω_{LO} représente la fréquence angulaire du phonon optique polaire. Quant à e , $\varepsilon(\infty)$ et $\varepsilon(0)$ ils représentent respectivement la charge de l'électron et les constantes diélectriques haute et basse fréquence, tandis que ε_0 est la permittivité du vide.

L' Hamiltonien d'interaction des électrons avec les phonons dans le cadre de la seconde quantification s'écrit [17]

$$H_{\text{int}} = \iiint \Psi^\dagger V(\vec{R}) \Psi dx dy dz \quad (3.5)$$

où Ψ est l'opérateur champ, donné par [18]

$$\Psi = \sum_n \sum_{\vec{k}} \frac{1}{\sqrt{S}} \hat{b}_{n\vec{k}} |v_{n\vec{k}}\rangle \quad (3.6)$$

où $\hat{b}_{n\vec{k}}$ est l'opérateur d'annihilation d'un électron occupant l'état $|v_{n\vec{k}}\rangle$ d'indice de sous-bande n et de vecteur d'onde parallèle à l'interface \vec{k} , S étant l'aire du puits le long de l'interface.

Le taux de diffusion est le nombre de transitions par seconde qu'un électron effectue entre un état initial et un ensemble d'états finaux. Ces processus de diffusion peuvent s'accompagner d'absorption ou d'émission de phonons et peuvent se produire au sein de la même sous-bande ou entre des sous-bandes différentes, auxquels cas ils sont dits respectivement intra-sous bandes et inter-sous-bandes.

Le taux de diffusion d'un électron de la sous-bande n_i passant d'un état initial $|i \vec{k}_i\rangle$ de vecteur d'onde \vec{k}_i à une sous-bande n_j d'état final $|j \vec{k}_j\rangle$ est donné par la règle d'or de Fermi [19]

$$\gamma_{i \rightarrow j} = \frac{2\pi}{\hbar} \int |M(j,i)|^2 \delta(E_j \mp \hbar\omega - E_i) dN_j \quad (3.7)$$

où E_i représente l'énergie initiale du trou, alors que E_j et dN_j sont respectivement l'énergie et la densité d'états finales après diffusion. Quant à l'élément de matrice $|M(j,i)|$ il caractérise la diffusion entre les deux états de départ et d'arrivée.

Dans l'Eq. (3.7), le signe moins en haut correspond à l'absorption, tandis que le signe plus en bas correspond à l'émission et qui donne

$$\gamma_{i \rightarrow j} = \frac{1}{4\pi^2 \hbar} \frac{k_j}{\frac{\partial E_j}{\partial k}} (N_Q \mp \frac{1}{2} + \frac{1}{2}) \Gamma_{ij} \quad (3.8)$$

Dans l'Eq. (3.8), la fonction Γ_{ij} rend compte du recouvrement et est donnée par

$$\Gamma_{ij} = \iint dq_z d\varphi \left| G_h(q_z) \cos\left(\frac{3\varphi}{2}\right) + G_l(q_z) \cos\left(\frac{\varphi}{2}\right) + G_s(q_z) \cos\left(\frac{\varphi}{2}\right) \right|^2 \quad (3.9)$$

où φ est l'angle entre les deux vecteurs \vec{k}_i et \vec{k}_j et les fonctions $G_h(q_z)$, $G_l(q_z)$, $G_s(q_z)$ sont données par

$$G_h(q_z) = \int_{-\infty}^{+\infty} f_Q \psi_{hi}(z) \psi_{hj}(z) A_{ih}(k_i) A_{jh}(k_j) dz \quad (3.10)$$

$$G_l(q_z) = \int_{-\infty}^{+\infty} f_Q \psi_{li}(z) \psi_{lj}(z) A_{il}(k_i) A_{jl}(k_j) dz \quad (3.11)$$

$$G_s(q_z) = \int_{-\infty}^{+\infty} f_Q \psi_{si}(z) \psi_{sj}(z) A_{is}(k_i) A_{js}(k_j) dz \quad (3.12)$$

L'examen de l'Eq. (3.8) fait sortir un aspect important qui se résume dans le fait que le taux de diffusion est déterminé par le produit de la densité d'états et la fonction Γ_{ij} .

II.2 Résultats numériques

Dans cette partie, nous exposons nos résultats numériques obtenus dans le cadre défini par les Eqs. (3.8)-(3.12). Nous traitons séparément les processus avec absorption et émission de phonons et analysons en détail la dépendance en énergie de ces processus et expliquons les rôles joués par la densité d'états finale et la fonction de recouvrement.

II.2.a Diffusion avec absorption d'un phonon

Nous montrons dans la figure 3.1 nos résultats des taux des diffusions intra-sous-bandes des trous lourds et légers avec absorption d'un phonon optique polaire. On remarque que le taux de diffusion pour les trous lourds diminue rapidement avec l'énergie jusqu'à $E = 75,3 \text{ meV}$ où $\gamma_{H \rightarrow H} = 2,35 \times 10^{12} \text{ s}^{-1}$ puis il augmente lentement avec l'énergie pour atteindre sa valeur maximale $2,8 \times 10^{12} \text{ s}^{-1}$ pour les hautes énergies. Ceci est dû à la diminution du facteur Γ_{hh} pour les faibles énergies, tandis que pour les hautes énergies ceci est dû à l'augmentation de la densité d'états des trous lourds avec l'énergie comme illustrée sur la figure 3.2. Pour le taux de diffusion des trous légers, ce dernier augmente rapidement avec l'énergie en suivant le comportement du facteur Γ_{lh} pour les faibles énergies. Son augmentation devient ensuite quasi-linéaire, à cause de l'augmentation de la densité d'états, atteignant sa valeur maximale $1,8 \times 10^{12} \text{ s}^{-1}$ pour $E = 150 \text{ meV}$.

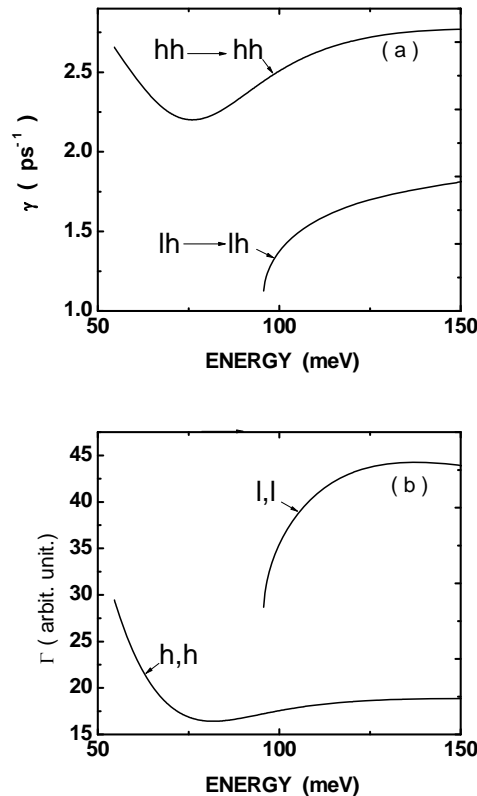


Figure 3.1 (a): Taux de diffusion intra-sous-bandes des trous lourds et légers avec absorption d'un phonon optique polaire. **(b)** La fonction Γ_{ij} pour les trous lourds et légers

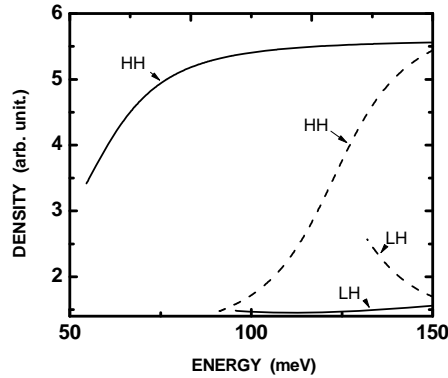


Figure 3.2: Densité d'états finale des trous lourds et légers avec absorption (émission) d'un phonon optique polaire en ligne continue (discontinue).

II.2.b Diffusion avec émission d'un phonon

La figure 3.3 représente les taux de diffusion des trous lourds et légers avec émission d'un phonon optique polaire ainsi que les fonctions Γ_{ij} correspondantes. On remarque que le taux de diffusion des trous lourds diminue rapidement avec l'énergie jusqu'à $E = 101 \text{ meV}$ puis augmente presque linéairement jusqu'à atteindre la valeur $\gamma_{H \rightarrow H} = 1,011 \times 10^{13} \text{ s}^{-1}$ à 150 meV . A cause de la variation rapide de la fonction Γ_{hh} par rapport à la densité d'états finale, pour les faibles énergies, le taux de diffusion suit le comportement de celle-ci, tandis que pour les hautes énergies, il suit le comportement de la densité d'états finale à cause de la faible variation de la fonction de recouvrement Γ_{hh} .

Pour les trous légers, à faible énergie le taux de diffusion est une fonction croissante de l'énergie initiale du trou et ceci jusqu'à $E = 134 \text{ meV}$ où la valeur maximale $\gamma_{L \rightarrow L} = 8,57 \times 10^{12} \text{ s}^{-1}$ est atteinte. Par la suite, ce taux diminue progressivement jusqu'à atteindre son minimum $\gamma_{L \rightarrow L} = 7,63 \times 10^{12} \text{ s}^{-1}$ pour l'énergie $E = 150 \text{ meV}$. L'augmentation très rapide de la fonction de recouvrement Γ_{lh} du côté des faibles énergies et la décroissance rapide de la densité d'états aux hautes énergies peuvent rendre compte de ce comportement.

Il est intéressant de noter qu'aux énergies initiales $E = 132 \text{ meV}$ et $E = 135 \text{ meV}$, les taux de diffusion sont égaux.

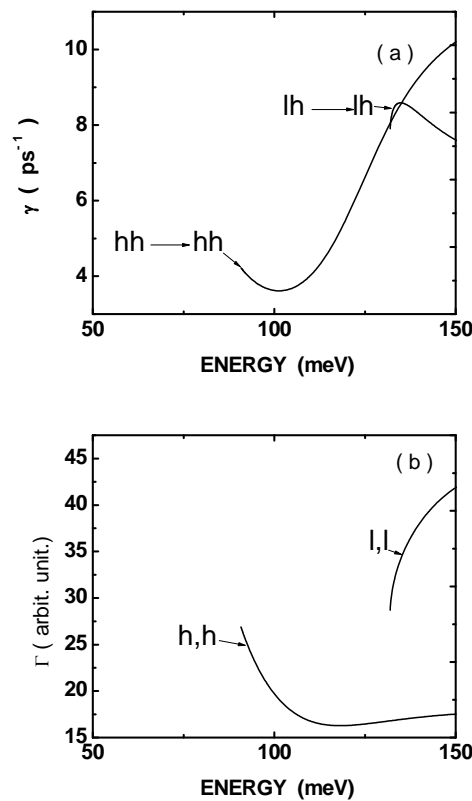


Figure 3.3 (a): Taux de diffusion intra-sous-bandes des trous lourds et légers avec émission d'un phonon optique polaire. **(b)** la Fonction Γ_{ij} pour les trous lourds et légers.

II.2.c Effet de la sous-bande split-off sur les taux de diffusion

La figure 3.4 représente les taux de diffusion intra-sous bandes aussi bien des trous lourds que légers obtenus dans le cadre de deux modèles différents. Notons ici que l'effet de la sous-bande split-off est inclus (Hamiltonien de Luttinger-Kohn 6×6) dans les courbes en trait plein et absent dans les courbes en pointillés (Hamiltonien de Luttinger 4×4). Bien que les deux modèles donnent lieu aux mêmes allures, on remarque immédiatement l'importance de la sous-bande split-off. A titre d'exemple, pour les trous lourds l'erreur relative varie entre 2,5 % et 6,5 %, tandis que pour les trous légers elle est comprise 13,3 % et 15,7 %. Il est intéressant de noter que l'erreur relative augmente de façon significative pour les trous légers, alors qu'elle diminue pour les trous lourds quand l'énergie initiale de ceux-ci augmente.

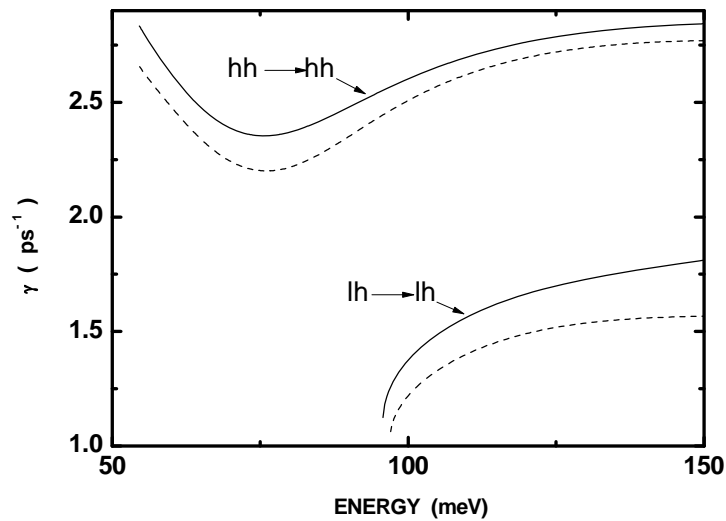


Figure 3.4: Taux de diffusion intra-sous-bandes des trous lourds et légers avec absorption d'un phonon optique polaire en incluant (négligeant) la sous-bande split-off en ligne continue (discontinue).

La figure 3.5 ci-dessous montre les taux de diffusion intra-sous-bandes des trous lourds et légers obtenus dans le cadre des deux modèles déjà définis. Comme dans le cas précédent, dans celui de l'absorption, on constate l'importance de l'effet de la sous-bande split-off. A titre d'exemple, pour les trous lourds l'écart relatif varie de -9,24 % à basse énergie pour atteindre 14,7 % à haute énergie en passant par 0% à 101,4 meV. Pour les trous légers, cette différence passe de -2,9 % à basse énergie jusqu'à -4,2 % à haute énergie.

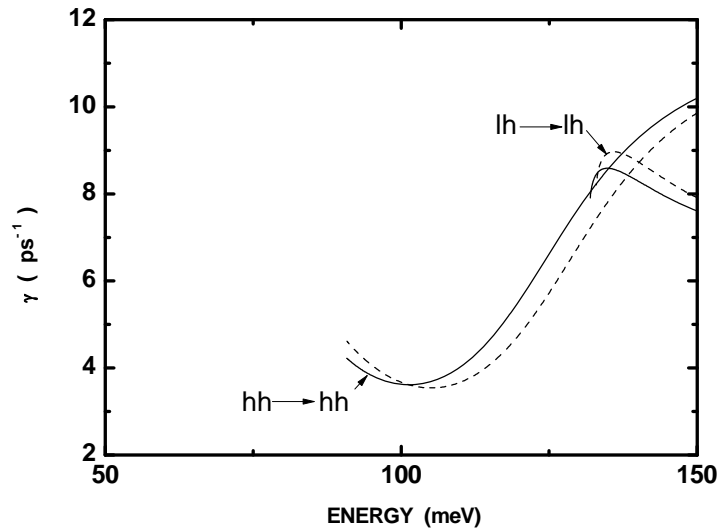


Figure 3.5: Taux de diffusion intra-sous-bandes des trous lourds et légers avec émission d'un phonon optique polaire en incluant (négligeant) la sous-bande split-off en ligne continue (discontinue).

Pour estimer l'effet du confinement, nous avons comparé nos résultats avec ceux de Scholz [21] qui étudia le cas massif. Pour les basses énergies, nos résultats pour les trous

lourds sont comme suit: $\frac{\gamma_{H \rightarrow H}^{Puits}}{\gamma_{H \rightarrow H}^{massif}} = 0,66$ pour l'absorption et $\frac{\gamma_{H \rightarrow H}^{Puits}}{\gamma_{H \rightarrow H}^{massif}} = 0,42$ pour

l'émission, alors que pour les trous légers ils sont $\frac{\gamma_{L \rightarrow L}^{Puits}}{\gamma_{L \rightarrow L}^{massif}} = 0,56$ pour l'absorption et

$\frac{\gamma_{L \rightarrow L}^{Puits}}{\gamma_{L \rightarrow L}^{massif}} = 1,58$ pour l'émission.

Cependant, pour les hautes énergies, à 150 meV tous les rapports sont presque similaires et sont de l'ordre 0,7 pour les divers types de processus de transitions sauf pour

l'intra-sous-bande des trous légers avec émission d'un phonon où le rapport $\frac{\gamma_{L \rightarrow L}^{Puits}}{\gamma_{L \rightarrow L}^{massif}}$ est de

1,27.

III. Taux de diffusion dus au potentiel de déformation des modes optiques

Nous traitons dans ce qui suit l'interaction des trous avec les modes optiques longitudinaux et transversaux dans le cadre du potentiel de déformation. Pour comprendre l'origine de cette interaction, il suffit de raisonner comme suit: Les phonons optiques de grande longueur d'onde induisent une déformation microscopique de la maille élémentaire. Par conséquent, l'énergie des électrons dans la structure de bande sera modifiée [6-7], cette modification est dite potentiel de déformation dû aux phonons optiques. Nous commençons d'abord par un traitement analytique aboutissant à une formule générale du taux de diffusion que nous suivrons par une estimation numérique de ce dernier pour les processus intra-sous-bandes aussi bien pour l'émission que l'absorption.

III.1 Traitement analytique général

Le potentiel dû aux phonons optiques s'écrit comme suit [21]

$$V(\vec{R}) = \sum_{\lambda} \sum_{Q} f_{Q\lambda} C_{\lambda} (a_Q + a_{-Q}^+) e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} \quad (3.13)$$

où $f_{Q\lambda}$ est donné par

$$f_{Q\lambda} = \left(\frac{\hbar}{2\rho V_0 \omega_{Q\lambda}} \right)^{1/2} e^{iq_z z} \quad (3.14)$$

les matrices C_{λ} , où l'indice λ parcourt l'ensemble $\{x, y, z\}$, étant sur la base (1.102-107)

données par

$$C_x = \frac{d_0}{a} \begin{pmatrix} 0 & i \cos(\theta) & \frac{i \sin(\theta)}{\sqrt{2}} \\ -i \cos(\theta) & 0 & \frac{-i\sqrt{3} \sin(\theta)}{\sqrt{2}} \\ \frac{-i \sin(\theta)}{\sqrt{2}} & \frac{i\sqrt{3} \sin(\theta)}{\sqrt{2}} & 0 \end{pmatrix} \quad (3.15)$$

$$C_y = \frac{d_0}{a} \begin{pmatrix} 0 & -i \sin(\theta) & \frac{i \cos(\theta)}{\sqrt{2}} \\ i \sin(\theta) & 0 & \frac{-i\sqrt{3} \cos(\theta)}{\sqrt{2}} \\ \frac{-i \cos(\theta)}{\sqrt{2}} & \frac{i\sqrt{3} \cos(\theta)}{\sqrt{2}} & 0 \end{pmatrix} \quad (3.16)$$

$$C_z = \frac{d_0}{a} \begin{pmatrix} 0 & \sin(2\theta) & -\sqrt{2} \cos(2\theta) \\ \sin(2\theta) & 0 & 0 \\ -\sqrt{2} \cos(2\theta) & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (3.17)$$

où d_0 désigne la constante du potentiel de déformation des phonons optiques, a étant le paramètre du réseau massif.

Le taux de diffusion d'un trou de la sous-bande n_i passant d'un état $|i \vec{k}_i\rangle$ de vecteur d'onde \vec{k}_i à une sous-bande n_j d'état $|j \vec{k}_j\rangle$ est donné par la règle d'or de Fermi

$$\gamma_{i \rightarrow j} = \frac{1}{4\pi^2 \hbar} \frac{k_j}{\frac{\partial E_j}{\partial k}} (N_Q \mp \frac{1}{2} + \frac{1}{2}) \Gamma_{ij} \quad (3.18)$$

Dans l'Eq. (3.18), le signe moins en haut correspond à l'absorption, tandis que le signe plus en bas correspond à l'émission où Γ_{ij} est donné

$$\Gamma_{ij} = \sum_{\lambda} \iint dq_z d\varphi \left| \int_{-\infty}^{+\infty} \langle v_{n_j k_j} | f_{Q\lambda} C_{\lambda} e^{iq_z z} | v_{n_i k_i} \rangle dz \right|^2 \quad (3.19)$$

Pour l'arséniure de gallium, au point Γ de la zone de Brillouin, les fréquences des modes optiques longitudinaux et transversaux sont respectivement égales à 36.2 et 33.3 meV [8,9], c'est à dire une différence de juste 2.9 meV. Cette très légère différence fait que la

densité d'états et le nombre d'occupation N_Q sont presque identiques pour les deux types de modes. Pour cette raison, dans ce qui suit nous prenons la même fréquence pour tous: Celle des modes transversaux. En outre, nous négligeons également la dispersion dans la relation $\omega(Q)$. Cette approximation a été utilisée par Shen et Wu [10] dans leurs calculs de la relaxation du spin des trous dans le GaAs massif et par Dargys [11] dans le même contexte.

III.2 Résultats numériques

Dans cette partie, nous évaluons numériquement les taux de diffusion obtenus à partir des Eqs. (3.18,19). Les processus d'absorption et d'émission sont traités séparément et leurs dépendances en énergie sont analysées.

III.2.a Diffusion avec absorption d'un phonon

La figure 3.6 illustre les taux de diffusion intra-sous-bandes des trous lourds et légers avec absorption d'un phonon optique. On constate que le taux de diffusion des trous lourds augmente linéairement avec l'énergie jusqu'à $E = 85 \text{ meV}$ où la valeur $\gamma_{H \rightarrow H} = 0,16 \times 10^{12} \text{ s}^{-1}$ est atteinte, par la suite ce taux devient presque constant quand l'énergie initiale des trous augmente. Cette constance du taux de diffusion résulte de la compensation entre le caractère croissant de la densité d'états finale et celui décroissant de la fonction de recouvrement Γ_{hh} exhibées respectivement dans les figures 3.7 et 3.6.b.

Pour les taux de diffusion des trous légers, nous notons immédiatement qu'ils sont approximativement un ordre de grandeur plus faibles que ceux des trous lourds. Leur faible variation avec l'énergie initiale du trou est quasiment linéaire, allant d'une valeur minimale $0,01 \times 10^{12} \text{ s}^{-1}$ à $95,94 \text{ meV}$ à une valeur maximale $0,02 \times 10^{12} \text{ s}^{-1}$ à 150 meV . Pour les énergies comprises entre $95,72$ et $110,23 \text{ meV}$, la densité d'états étant presque constante le taux de diffusion suit le comportement croissant de la fonction de recouvrement Γ_{lh} , tandis que pour les valeurs supérieures le comportement résultant est une combinaison de ceux de la densité d'états et de la fonction Γ_{lh} qui sont tous les deux croissants (voir figures 3.6 et 3.7 ci-dessous).

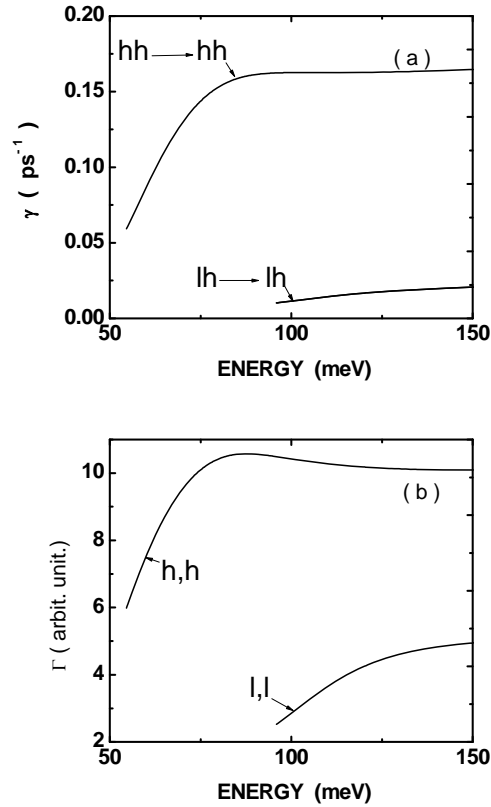


Figure 3.6 (a): Taux de diffusion intra-sous-bandes des trous lourds et légers avec absorption d'un phonon optique transversal. (b) la Fonction Γ_{ij} pour les trous lourds et légers.

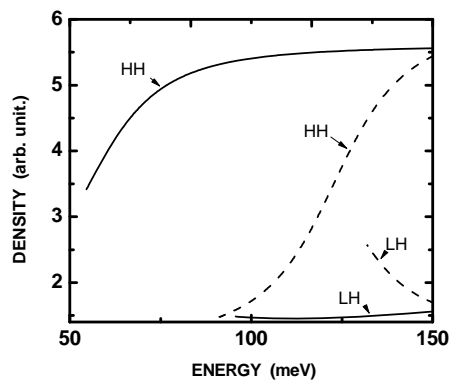


Figure 3.7: Densité d'états finale des trous lourds et légers avec absorption (émission) d'un phonon optique transversal en ligne continue (discontinue).

III.2.b Diffusion avec émission d'un phonon

La figure 3.8 montre les taux de diffusion intra-sous-bandes des trous lourds et légers avec émission d'un phonon. Le taux de diffusion des trous lourds augmente mais de façon non uniforme avec l'augmentation de l'énergie et suit en gros les variations de la densité d'états. Néanmoins, à haute énergie le caractère décroissant de la fonction Γ_{hh} se fait sentir. Numériquement, le taux $\gamma_{H \rightarrow H}$ varie de $0,088 \times 10^{12} \text{ s}^{-1}$ pour $E = 88,3 \text{ meV}$ jusqu'à $0,54 \times 10^{12} \text{ s}^{-1}$ pour $E = 150 \text{ meV}$. Pour les trous légers, le taux de diffusion augmente très faiblement avec l'énergie allant d'une valeur minimale $0,119 \times 10^{12} \text{ s}^{-1}$ à $129,03 \text{ meV}$ à une valeur maximale $0,128 \times 10^{12} \text{ s}^{-1}$ à 150 meV , c'est à dire un changement d'à peine 7,6 %. Ce comportement est facilement expliqué par la décroissance de la densité d'états D_{lh} et l'augmentation plus rapide de la fonction de recouvrement correspondante (voir figures 3.7, 3.8).

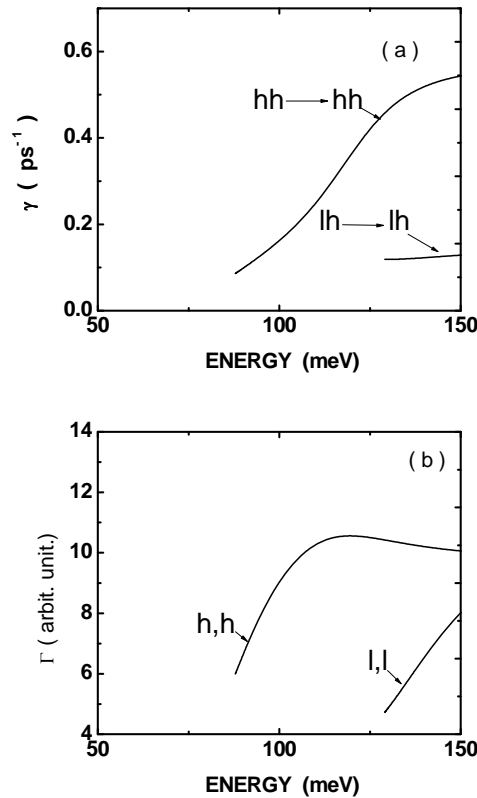


Figure 3.8 (a): Taux de diffusion intra-sous-bandes des trous lourds et légers avec émission d'un phonon optique transversal, **(b)** la fonction Γ_{ij} pour les trous lourds et légers.

Il est très instructif de faire une comparaison avec les résultats obtenus dans le cas d'un semiconducteur *GaAs* massif. Pour cela, nous utilisons le travail théorique de R.Scholz [5]

qui nous permet d'estimer à basse énergie les rapports suivants: $\frac{\gamma_{H \rightarrow H}^{Puits}}{\gamma_{H \rightarrow H}^{massif}} = 0,067$ pour

l'absorption et $\frac{\gamma_{H \rightarrow H}^{Puits}}{\gamma_{H \rightarrow H}^{massif}} = 0,03$ pour l'émission. Pour les trous légers, ils sont

$\frac{\gamma_{L \rightarrow L}^{Puits}}{\gamma_{L \rightarrow L}^{massif}} = 0,067$ pour l'absorption et $\frac{\gamma_{L \rightarrow L}^{Puits}}{\gamma_{L \rightarrow L}^{massif}} = 0,6$ pour l'émission. En revanche, pour

les hautes énergies, tous les rapports sont presque identiques et de l'ordre 0.1 sauf pour l'intra-

sous-bande des trous légers avec émission d'un phonon où le rapport est $\frac{\gamma_{L \rightarrow L}^{Puits}}{\gamma_{L \rightarrow L}^{massif}} = 0,26$.

III.2.c Effet de la sous bande split-off sur le taux de diffusion

La figure 3.9 représente les taux des diffusions intra-sous-bandes aussi bien des trous lourds que légers obtenus dans le cadre de deux modèles différents: Dans le premier, l'effet de la sous-bande split-off est inclus (*Hamiltonien de Luttinger-Kohn* 6×6), alors que dans le second, il est ignoré (*Hamiltonien de Luttinger* 4×4). L'examen de la figure 3.9 fait ressortir les faits suivants: Pour les trous lourds, aux énergies inférieures à environ 90 meV les deux modèles donnent les même allures, bien que leurs différences relatives atteignent parfois 19 %. Au delà de cette énergie, le modèle de Luttinger Kohn donne une allure constante, alors que le modèle simplifié (*Hamiltonien de Luttinger* 4×4) donne lieu à une allure décroissante avec des erreurs relatives allant jusqu'à 20 %. Pour les trous légers, les deux modèles donnent les mêmes allures sur toute la plage d'énergie étudiée, mais avec des erreurs relatives allant jusqu'à 16 % à haute énergie.

La figure 3.10 ci-dessous représente les taux de diffusion intra-sous-bandes avec émission d'un phonon dans le cadre des deux modèles déjà présentés. En examinant cette figure, on remarque que les deux modèles donnent les mêmes allures, l'erreur relative des trous lourds augmentant avec l'augmentation de l'énergie et variant entre 7 % et 12 %. Pour

les trous légers, on a les mêmes allures pour les deux modèles et l'erreur relative diminue avec l'augmentation de l'énergie, allant de 12,8 % à 3,7 % .

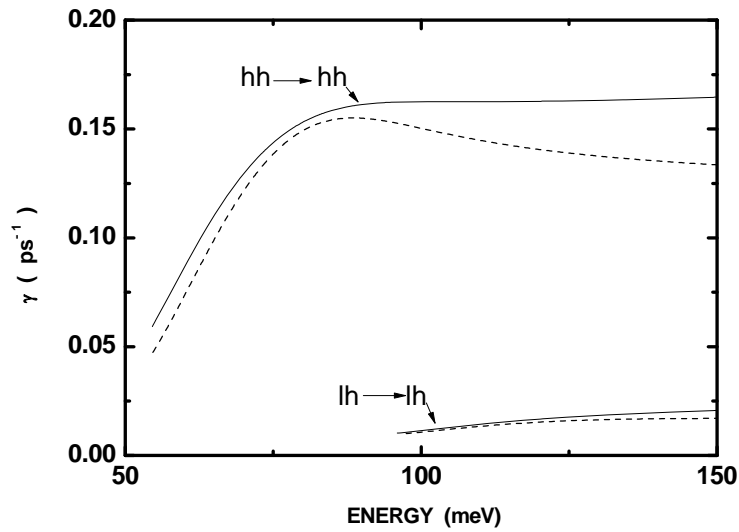


Figure 3.9: Taux de diffusion intra-sous-bandes des trous lourds et légers avec absorption d'un phonon optique transversal en incluant (négligeant) la sous bande split-off en ligne continue (discontinue).

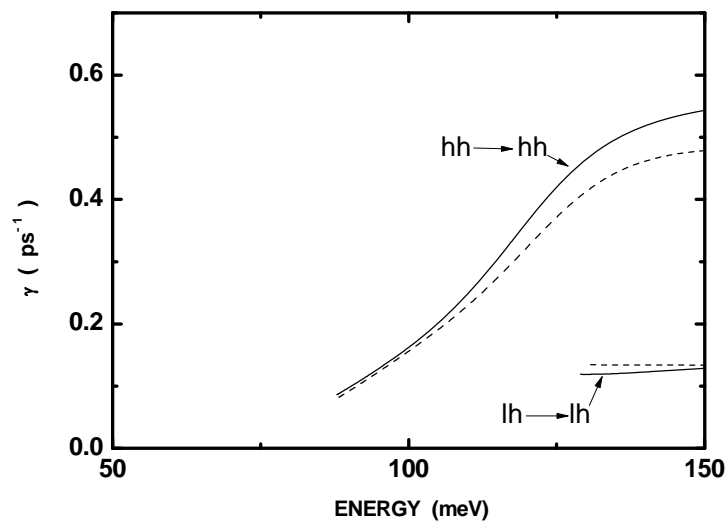


Figure 3.10: Taux de diffusion intra-sous-bandes des trous lourds et légers avec émission d'un phonon optique transversal en incluant (négligeant) la sous bande split-off en ligne continue (discontinue).

IV. Taux de diffusion des trous dus aux phonons acoustiques

VI.1 Traitement analytique général

Le potentiel dû aux phonons acoustiques s'écrit comme suit [5]

$$V(\vec{R}) = \sum_{\mathbf{Q}} f_{\mathbf{Q}} (a_{\mathbf{Q}} + a_{-\mathbf{Q}}^+) e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} \quad (3.20)$$

où $f_{\mathbf{Q}}$ est donné par

$$f_{\mathbf{Q}} = \left(\frac{\hbar}{2\rho V_0 \omega_{\mathbf{Q}}} \right)^{1/2} Q \Xi e^{iq_z z} \quad (3.21)$$

ρ étant la masse volumique, quant à Ξ c'est la constante du potentiel de déformation acoustique et $\omega_{\mathbf{Q}}$ étant la fréquence du phonon acoustique du mode de vecteur d'onde \mathbf{Q} . Dans le cadre du modèle de Debye, cette dernière est donnée par

$$\omega_{\mathbf{Q}} = sQ \quad (3.22)$$

s étant la vitesse du son dans le matériau.

Le taux de diffusion d'un électron de la sous-bande n_i passant d'un état $|i \vec{k}_i\rangle$ de vecteur d'onde \vec{k}_i à une sous-bande n_j d'état $|j \vec{k}_j\rangle$ est donné par la règle d'or de Fermi

$$\gamma_{i \rightarrow j} = \frac{1}{4\pi^2 \hbar} \frac{k_j}{\frac{\partial E_j}{\partial k}} (N_{\mathbf{Q}} \mp \frac{1}{2} + \frac{1}{2}) \Gamma_{ij} \quad (3.23)$$

Dans l'Eq. (3.23), le signe moins en haut correspond à l'absorption, tandis que le signe plus en bas correspond à l'émission avec la fonction Γ_{ij} est donnée par

$$\Gamma_{ij} = \iint dq_z d\varphi \left| G_h(q_z) \cos\left(\frac{3\varphi}{2}\right) + G_l(q_z) \cos\left(\frac{\varphi}{2}\right) + G_s(q_z) \cos\left(\frac{\varphi}{2}\right) \right|^2 \quad (3.24)$$

où φ est l'angle entre les vecteurs d'onde initial \vec{k}_i et final \vec{k}_j . Les fonctions $G_h(q_z)$, $G_l(q_z)$, $G_s(q_z)$ étant respectivement données par

$$G_h(q_z) = A_{ih}(k_i) A_{jh}(k_j) \int_{-\infty}^{+\infty} f_Q \psi_{hi}(z) \psi_{hj}(z) dz \quad (3.25)$$

$$G_l(q_z) = A_{il}(k_i) A_{jl}(k_j) \int_{-\infty}^{+\infty} f_Q \psi_{li}(z) \psi_{lj}(z) dz \quad (3.26)$$

$$G_s(q_z) = A_{is}(k_i) A_{js}(k_j) \int_{-\infty}^{+\infty} f_Q \psi_{si}(z) \psi_{sj}(z) dz \quad (3.27)$$

Pour les phonons acoustiques de grandes longueurs d'onde, le nombre de phonon N_Q devient

$$N_Q \approx \frac{K_B T}{\hbar s Q} \gg 1 \quad (3.28)$$

K_B étant la constante de Boltzmann et T la température absolue. De l'Eq. (3.28), on déduit

$$N_Q + 1 \approx N_Q \quad (3.29)$$

Dans les semiconducteurs, le potentiel de déformation dû aux phonons acoustiques est important pour les grandes longueurs d'onde des phonons [2,6,12]. On note ici que la conservation de l'impulsion et de l'énergie impose que le vecteur d'onde des phonons \mathbf{q} dans le plan (xy) se limite aux niveau du centre de la zone de Brillouin autrement dit aux grandes longueurs d'ondes. En effet, la conservation de l'impulsion et l'énergie s'écrivent comme

$$q^2 = k_i^2 + k_f^2 - 2k_i k_f \cos(\varphi) \quad (3.30)$$

$$E_i - E_f = \pm \hbar s Q \quad (3.31)$$

Dans l'Eq. (3.31), le signe en haut (bas) correspond à l'émission (l'absorption). La résolution numérique de l'Eq. (3.30-31) nous permet de déterminer les valeurs limites des

vecteurs d'ondes du phonon q dans le plan (xy) pour le cas d'absorption illustrés sur la figure 3.11.

On remarque que les valeurs maximales des vecteurs d'onde des phonon pour les trous lourds varient entre $q_{\max} = 0,027 \text{ \AA}^{-1}$ pour les faibles énergie atteignant la valeur $0,19 \text{ \AA}^{-1}$ pour les hautes énergies à 150 meV , tandis que pour les trous légers ils varient entre $0,03 \text{ \AA}^{-1}$ pour les faibles énergies et passe à $0,1 \text{ \AA}^{-1}$ pour les hautes énergies. Cependant, pour les valeurs minimales q_{\min} pour les trous lourds, elles sont de l'ordre $0,02 \text{ \AA}^{-1}$ pour les faibles énergies et atteignant $0,1 \text{ \AA}^{-1}$ pour les hautes énergies. Pour les trous légers, q_{\min} varie de $0,024 \text{ \AA}^{-1}$ jusqu'à $0,006 \text{ \AA}^{-1}$ pour les hautes énergies.

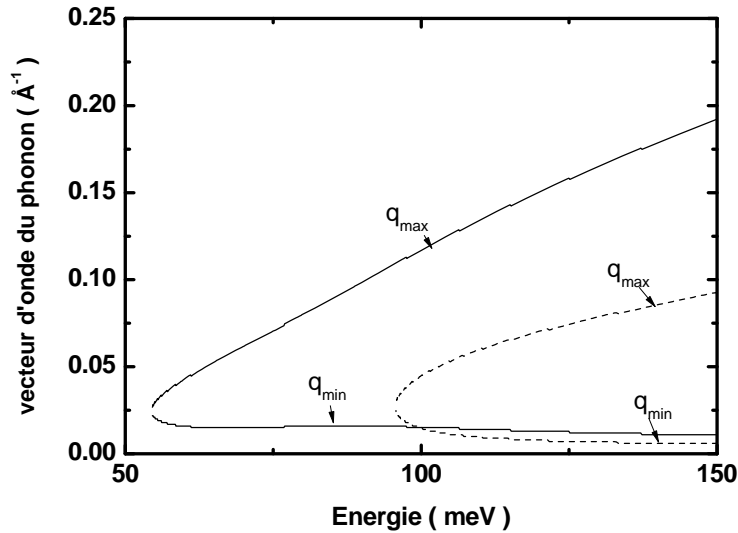


Figure 3.11: Vecteurs d'ondes maximal et minimal dans le plan (xy) du phonon acoustique absorbé par les trous lourds (légers) en ligne continue (discontinue).

Dans le cas du matériau massif, la conservation de l'impulsion et de l'énergie limite le vecteur d'onde total Q au voisinage du centre la zone de Brillouin, et par conséquent, l'interaction peut être considérée comme quasi-élastique [13]. Cependant, dans le cas d'un puits quantique, la conservation de l'impulsion et de l'énergie limite seulement les valeurs q du vecteur d'onde du phonon dans le plan, alors qu'il n'y a aucune restriction sur la valeur de la composante q_z du vecteur d'onde. Par conséquent, nous limitons donc dans l'Eq. (3.24) l'intégration sur q_z à l'intervalle allant de 0 à $0,04 \text{ \AA}^{-1}$, ainsi l'interaction pourra être

considérée comme quasi-élastique. Ceci conduit à des taux de diffusion identiques aussi bien pour l'émission que pour l'absorption.

A température ambiante, le nombre d'occupation des phonons est beaucoup plus important aux grandes longueurs d'ondes qu'ailleurs, en particulier à la limite de la zone de Brillouin comme illustré sur la figure 3.12. A titre d'exemple, on a $N_Q = 1,02 \times 10^2$ pour $Q = 0,01 \text{ \AA}^{-1}$, cette même grandeur vaut $1,019 \times 10^4$ pour $Q = 5,84 \times 10^{-5} \text{ \AA}^{-1}$, c'est à dire elle est 100 fois plus grande. Dans l'approximation de Debye, à la limite de la zone c'est à dire pour $Q = \frac{2\pi}{a}$ l'énergie du phonon vaut $28,24 \text{ meV}$ dans ce cas le nombre d'occupation passe à 0,91 en utilisant les statistiques classique de Maxwell-Boltzmann. Ces grandeurs sont du même ordre de grandeur que les vraies valeurs obtenues en utilisant la valeur expérimentale $27,897 \text{ meV}$ de l'énergie du phonon [14] et la distribution exacte de Bose-Einstein.

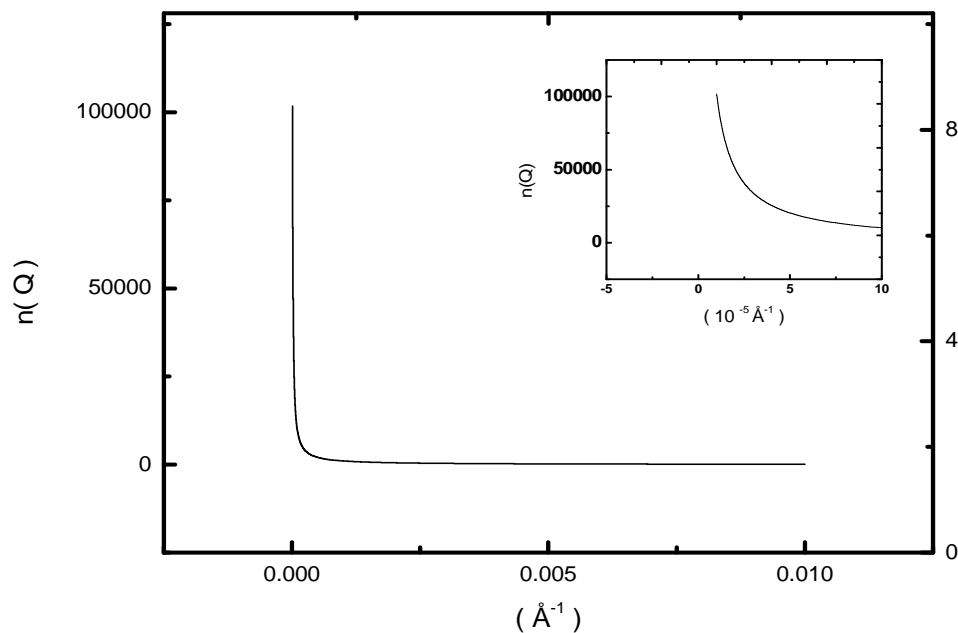


Figure 3.12 : Nombre d'occupation des phonons acoustiques en fonction du module du vecteur d'onde.

La figure 3.13 représente les fonctions $G_h(q_z)$, $G_l(q_z)$ et $G_s(q_z)$ en fonction de la composante q_z du vecteur d'onde du phonon. On remarque clairement que la fonction de recouvrement des trous lourds est plus importante que celles des trous légers et split-off.

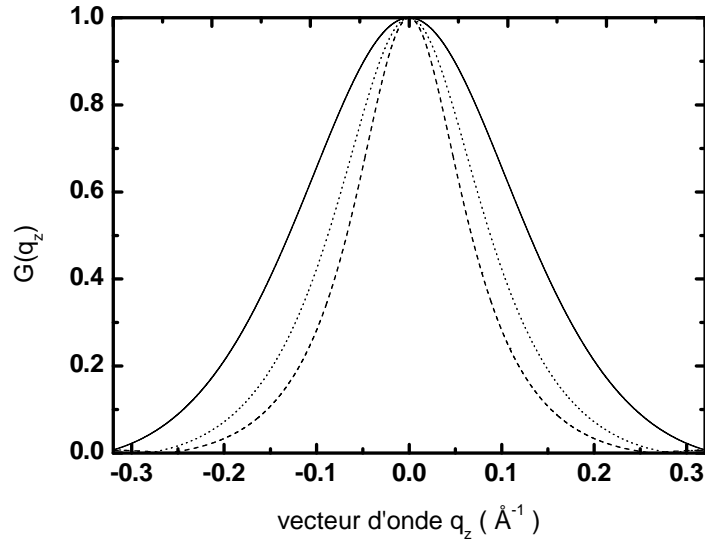


Figure 3.13: Les fonctions de recouvrement des trous lourds, légers et split-off respectivement en ligne continue, discontinue et pointillée en fonction de la composante q_z du vecteur d'onde du phonon acoustique.

VI.2 Résultats numériques

Dans cette partie, nous exposons nos résultats numériques obtenus dans le cadre défini par les Eqs. (3.23)-(27). Les taux de diffusion sont traités dans le cadre de l'approximation élastique déjà mentionnée.

VI.2.a Diffusion avec absorption ou émission d'un phonon

La figure 3.14 illustre les taux de diffusion des trous lourds et légers dus aux phonons acoustiques dans le cadre de l'approximation élastique pour un puits de largeur égale 25 \AA . On remarque que le taux de diffusion des trous lourds $\mathcal{Y}_{H \rightarrow H}$ augmente linéairement avec l'énergie initiale des trous par la suite son augmentation devient faible, atteignant sa valeur maximale $0,4 \times 10^{12} \text{ s}^{-1}$ pour les hautes énergies. Pour les trous légers, à faible énergie le taux

de diffusion diminue rapidement avec l'énergie. sa diminution devient ensuite faible pour les hautes énergies, atteignant sa valeur minimale $0,1 \times 10^{12} \text{ s}^{-1}$ à 150 meV . On remarque également l'intersection des courbes représentant les taux de diffusion des deux types de trous à $E = 96,4 \text{ meV}$. Le taux de diffusion des trous lourds suit en général le comportement de la densité d'états finale illustrée sur la figure 3.14 (c), à cause de sa variation rapide par rapport à la fonction Γ_{lh} . Pour les trous légers, aussi bien la densité d'états que la fonction de recouvrement contribuent au caractère décroissant du taux de diffusion.

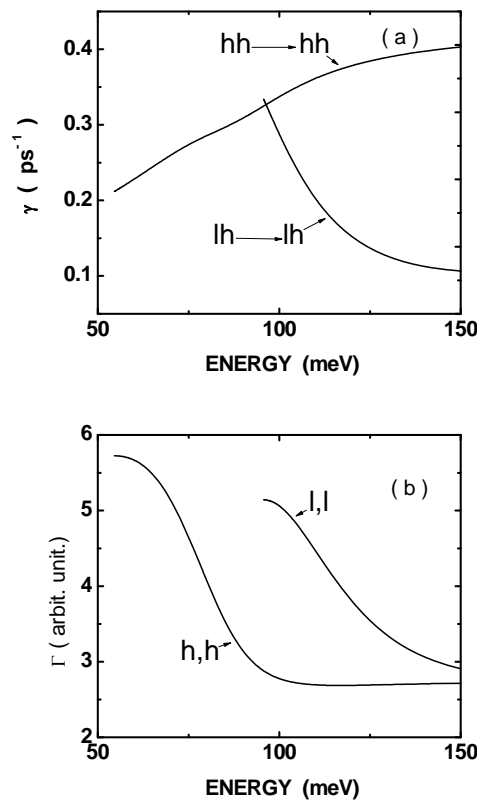


Figure 3.14 (a): Taux de diffusion intra-sous-bandes respectivement des trous lourds et légers avec les phonons acoustiques. **(b)** la Fonction Γ_{ij} pour les trous lourds et légers.

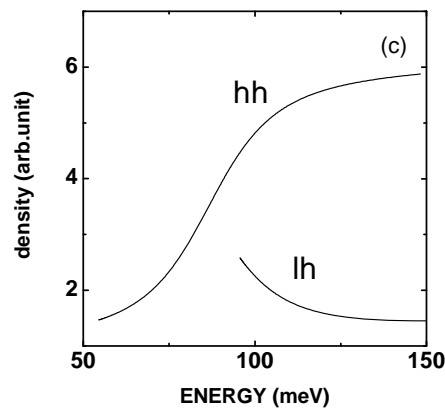


Figure 3.14 (c): Densité d'états pour les trous lourds (hh) et légers (lh) pour un puits de largeur 25 Å

La figure 3.15 représente les taux de diffusion des trous lourds et légers dus aux phonons acoustiques dans le cadre de l'approximation élastique, mais avec l'intégration sur q_z allant jusqu'à la limite de la zone de Brillouin. En comparant ces taux à ceux de la figure 3.14, on trouve que le taux de diffusion pour les trous lourds augmente de 159,8 % aux faibles énergies et de 92,6 % pour les hautes énergies. Cependant, pour les trous légers, on a une augmentation de 53,2 % aux faibles énergies et 76,3 % pour les hautes énergies. Ceci est dû aux fonctions de recouvrement des trous lourds et légers qui reste importante même pour q_z supérieur à $0,04 \text{ \AA}^{-1}$

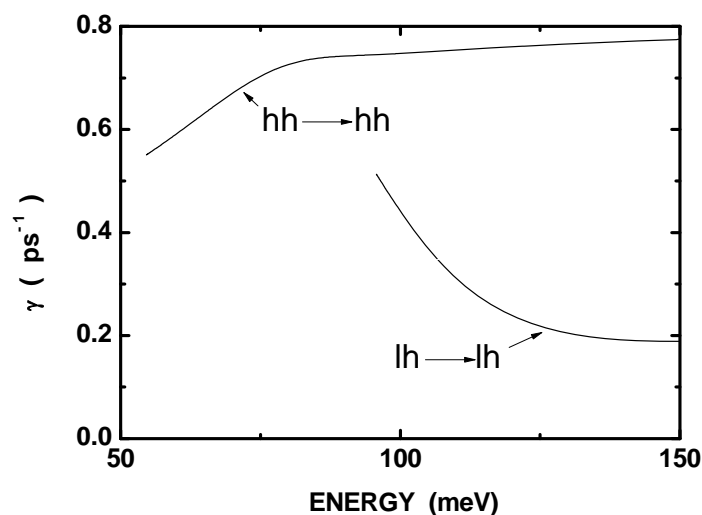


Figure 3.15: Taux de diffusion intra-sous-bandes des trous lourds et légers avec l'intégration sur q_z prise sur un intervalle allant jusqu'à la limite de la zone de Brillouin.

La figure 3.16 représente le taux de diffusion intra-sous bande des trous lourds pour une largeur de puits égale à 30 Å. On remarque que l'effet d'extension des bornes d'intégration de $0,04 \text{ \AA}^{-1}$ vers la limite de la zone de Brillouin est moins importante que celle pour une largeur égale à 25 Å. Ainsi, on trouve que le taux de diffusion augmente de 154 % aux faibles énergies et de 88 % pour les hautes énergies.

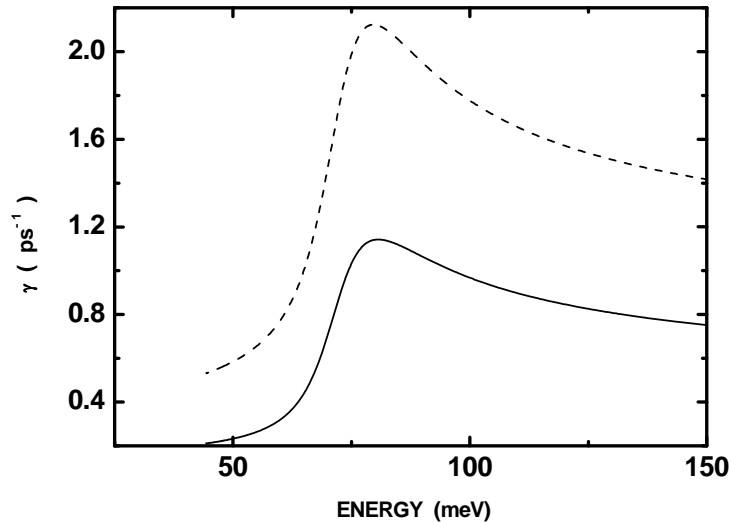


Figure 3.16: Taux de diffusions intra-sous-bandes des trous lourds pour une largeur de de 30 Å pour une borne maximale d'intégration sur q_z égale à $0,04 \text{ \AA}^{-1}$ ($2\pi/a$) en ligne continue (discontinue).

VI.2.a Effet de la sous bande split-off sur le taux de diffusion

La figure 3.17 représente les taux de diffusion intra-sous-bandes aussi bien des trous lourds que légers et ce dans le cadre de deux modèles différents: Dans le premier modèle, l'effet de la bande split-off est inclus alors que dans le second il est négligé.

Pour les trous lourds, la sous bande split-off n'a pas un effet important pour les faibles et les hautes énergies, mais l'effet de son inclusion devient remarquable pour les énergies intermédiaires avec des erreurs relatives pouvant atteindre 12,8 % aux alentours de 89 meV. Pour les trous légers, l'écart relatif varie de -10,8 % à basse énergie et 13,9 % à haute énergie en passant par 0% à 118,3 meV.

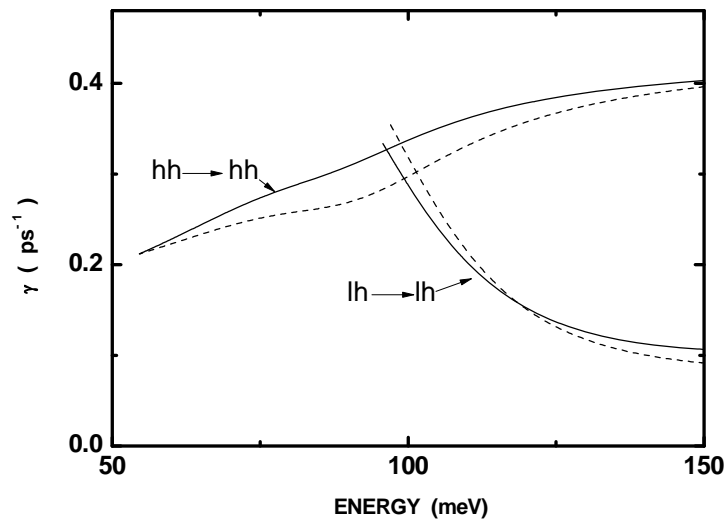


Figure 3.17: Taux de diffusion intra-sous-bandes des trous lourds et légers avec absorption d'un phonon acoustique en incluant (négligeant) la sous bande split-off en ligne continue (discontinue).

Pour expliquer nos résultats nous avons tracé la densité d'états et les fonctions de recouvrement aussi bien en incluant qu'en négligeant la sous-bande split-off comme il est illustré sur les figures 3.18 et 3.19 respectivement. Aux faibles et aux hautes énergies et pour les trous lourds, l'effet de la split-off est négligeable sur le taux de diffusion, alors qu'il est important aux énergies intermédiaires. Ceci peut être facilement expliqué par l'effet de la split-off sur les densités d'états et les fonctions de recouvrements respectives (voir figures 3.18-19).

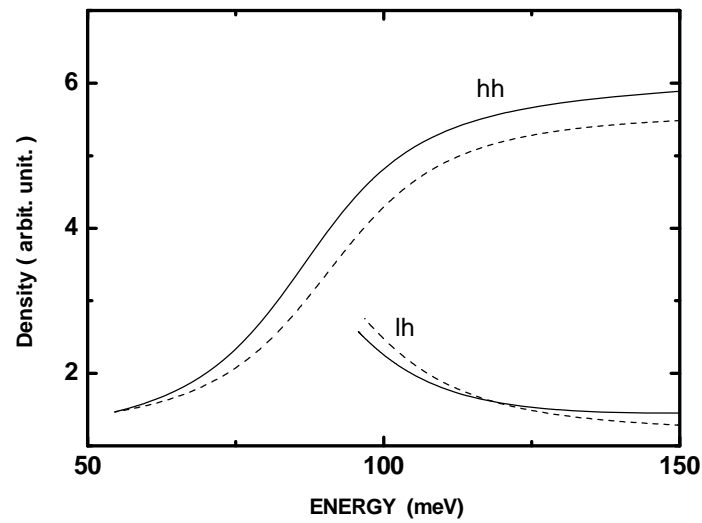


Figure 3.18: Densité d'états des trous lourds et légers en incluant (négligeant) la sous bande split-off en ligne continue (discontinue).

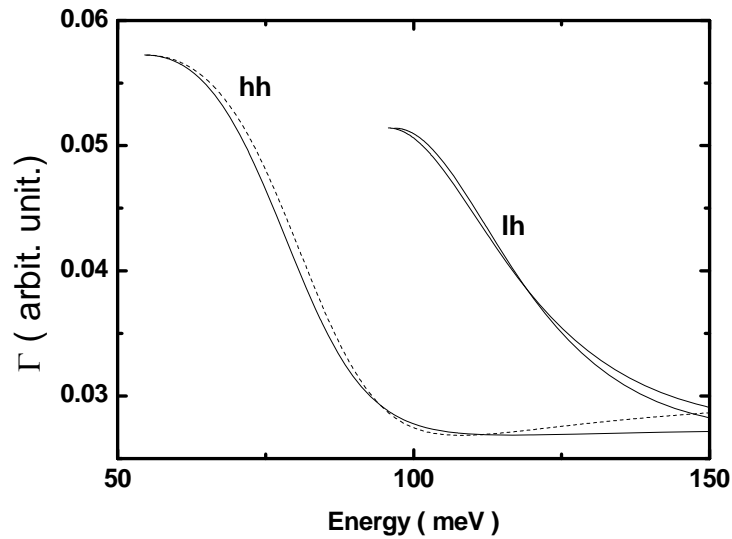


Figure 3.19: Les fonctions de recouvrement des trous lourds et légers en incluant (négligeant) la sous bande split-off en ligne continue (discontinue).

VI.2.c Effet de la largeur du puits

La figure 3.20 représente le taux de diffusion intra-sous bande des trous lourds pour une largeur de puits égale à 100 Å. On remarque que l'effet d'étendre les bornes d'intégration sur q_z de $0,04 \text{ \AA}^{-1}$ vers la limite de la zone de Brillouin sur les taux de diffusion est moins importante que dans le cas d'un puits de largeur égale à 25 Å, mais demeure néanmoins non négligeable, ceci est dû au couplage LH-HH. Ainsi, on trouve dans ce cas que le taux de diffusion augmente en général d'environ 26 % sauf pour les hautes énergies où le changement atteint 30 % environ.

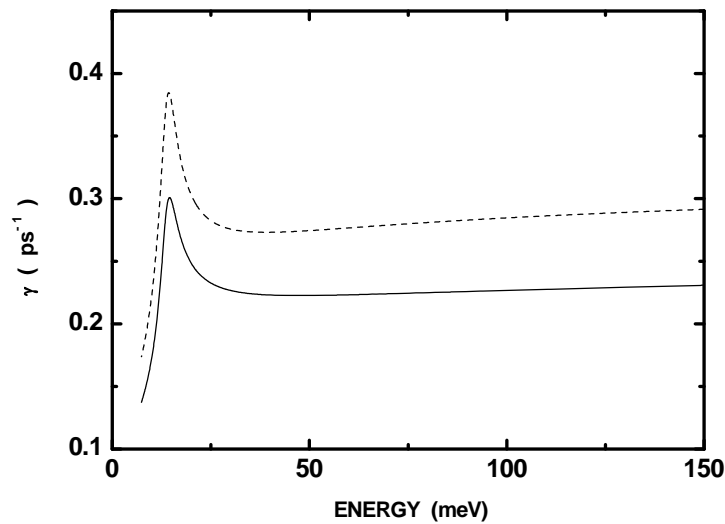


Figure 3.20: Taux de diffusion intra-sous-bande des trous lourds pour une largeur de 100 Å pour une borne maximale d'intégration sur q_z égale à $0,04 \text{ \AA}^{-1}$ ($2\pi/a$) en ligne continue (discontinue).

Il est important de noter ici que la contribution des fonctions de recouvrement paires illustrées sur la figure 3.21 devient de moins en moins importante à mesure que le vecteur d'onde des phonons augmente en module. Cependant, l'effet des fonctions de recouvrement dû aux contributions des fonctions d'ondes impaires qui apparaissent avec l'augmentation de la largeur du puits est important comme on l'a représenté sur la figure 3.22.

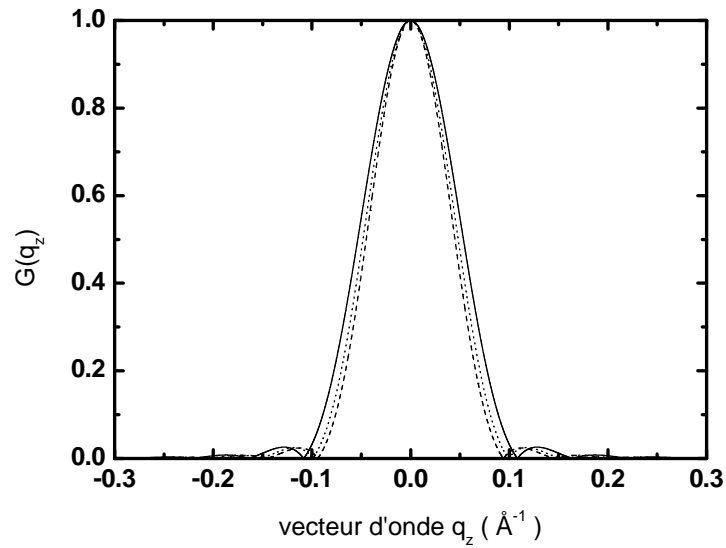


Figure 3.21: Les fonctions de recouvrement paires pour une largeur de 100 Å des trous lourds, légers et split-off respectivement en ligne continue, discontinue et pointillé en fonction de la composante q_z du vecteur d'onde du phonon acoustique.

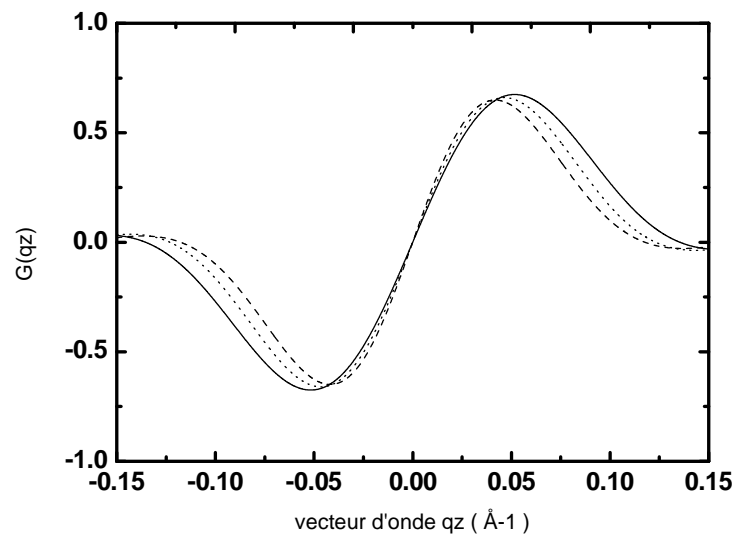


Figure 3.22: Les fonctions de recouvrement impaires des trous lourds, légers et split-off respectivement en ligne continue, discontinue et pointillé en fonction de la composante q_z du vecteur d'onde du phonon pour une largeur de puits égale à 100 Å.

En comparant nos résultats avec ceux du cas massif, pour les phonons acoustiques dans le *GaAs*, nous obtenons à basse énergie les rapports suivants $\frac{\gamma_{H \rightarrow H}^{Puits}}{\gamma_{H \rightarrow H}^{massif}} = 0,168$

, $\frac{\gamma_{L \rightarrow L}^{Puits}}{\gamma_{L \rightarrow L}^{massif}} = 2,64$, tandis qu'aux hautes énergies les rapports sont $\frac{\gamma_{H \rightarrow H}^{Puits}}{\gamma_{H \rightarrow H}^{massif}} = 0,2$,

$\frac{\gamma_{L \rightarrow L}^{Puits}}{\gamma_{L \rightarrow L}^{massif}} = 0,05$.

VII. Conclusion

Dans ce chapitre, en utilisant le modèle massif des phonons, nous avons calculé les taux de diffusion intra-sous-bandes des trous lourds et légers aussi bien avec absorption qu'émission d'un phonon optique polaire. Nous avons également étudié les taux de diffusion intra-sous-bandes des trous lourds et légers dus au potentiel de déformation induit par les modes optiques longitudinaux et transversaux. En outre, nous avons étudié les taux de diffusion intra-sous-bandes des trous lourds et légers avec les phonons acoustiques dans le cadre de l'approximation élastique. Nos résultats montrent que les divers types d'interaction qu'il s'agisse des phonons optiques polaires, potentiel de déformation ou les phonons acoustiques, la variation du taux de diffusion avec l'énergie initiale du trou suit les comportements de la densité d'états finale et/ou la fonction de recouvrement. D'autre part, la comparaison avec les résultats obtenus par d'autres auteurs pour le *GaAs* massif montre l'effet important du confinement des trous.

Références

- [1] Yu, P. Y., & Cardona, M. (2005). *Fundamentals of semiconductors*. Springer.
- [2] Ridley, B. K. (2013). *Quantum processes in semiconductors*. Oxford University Press.
- [3] Stroschio, M. A., & Dutta, M. (2001). *Phonons in nanostructures*. Cambridge University Press.
- [4] Teng, H. B., Sun, J. P., Haddad, G. I., Stroschio, M. A., Yu, S., & Kim, K. W. (1998). Phonon assisted intersubband transitions in step quantum well structures. *Journal of applied physics*, 84(4), 2155-2164.
- [5] Gao, X., Botez, D., & Knezevic, I. (2008). Phonon confinement and electron transport in GaAs-based quantum cascade structures. *Journal of Applied Physics*, 103(7), 073101.
- [6] Masale, M. (2008). Scattering of electrons via bulk LO-phonon modes near a cylindrical core under the influence of an external azimuthal magnetic field. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, 41(1), 175-180.
- [7] Zhang, Y., Zhang, Y., Guan, M., Cui, L., Wang, C., & Zeng, Y. (2013). Theoretical study of transport property in InAsSb quantum well heterostructures. *Journal of Applied Physics*, 114(15), 153707.
- [8] Zhang, J. Z., Dyson, A., & Ridley, B. K. (2015). Hot electron energy relaxation in lattice-matched InAlN/AlN/GaN heterostructures: The sum rules for electron-phonon interactions and hot-phonon effect. *Journal of Applied Physics*, 117(2), 025701.
- [8] Figarova, S. R., Hasiyeva, G. N., & Figarov, V. R. (2016). Negative differential conductivity in quantum well with complex potential profile for electron-phonon scattering. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, 78, 10-13.
- [9] Walukiewicz, W. (1988). Acoustic-phonon scattering in modulation-doped heterostructures. *Physical Review B*, 37(14), 8530.
- [10] Yaremko, A. M., Yukhymchuk, V. O., Dzhagan, V. M., Valakh, M. Y., Azhniuk, Y. M., Baran, J., ... & Drozd, M. (2007). Investigation of electron-phonon interaction in bulk and nanostructured semiconductors. *Semiconductor Physics, Quantum Electronics & Optoelectronics*, 10(2), 1-5.
- [11] Rhyner, R., & Luisier, M. (2013). Phonon-limited low-field mobility in silicon: Quantum transport vs. linearized Boltzmann Transport Equation. *Journal of Applied Physics*, 114(22), 223708.
- [12] Nawaz, M., Leburton, J. P., & Jin, J. (2007). Hole scattering by confined optical phonons in silicon nanowires. *Applied physics letters*, 90(18), 183505.
- [13] Dyson, A., & Ridley, B. K. (2011). The lifetime of optical phonons in a single heterostructure. *Journal of Applied Physics*, 109(5), 054509.

- [14] Liu, D., Cheng, Y., & He, J. (2016). Hot-phonon effect on intersubband absorption in GaN/AlGaIn quantum well structures. *Superlattices and Microstructures*, 89, 362-368.
- [15] Barnham, K., & Vvedensky, D. (2008). *Low-dimensional semiconductor structures: fundamentals and device applications*. Cambridge University Press.
- [16] Tsuchiya, T., & Ando, T. (1994). Effect of electronic-state modulation on mobility in quantum wells. *Surface science*, 305(1), 312-316.
- [17] Fröhlich, Herbert. (1937) Theory of electrical breakdown in ionic crystals. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Mathematical and Physical Sciences*, 1937, vol. 160, no 901, p. 230-241.
- [18] Kittel, Charles. *Quantum theory of solids*. New York : Wiley, 1963.
- [19] Oh, I. K., & Singh, J. (2001). Acoustic phonon generation from quasi-2D hole gas in quantum wells. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 13(48), 10851.
- [20] Ridley, Brian K. *Electrons and phonons in semiconductor multilayers*. Cambridge University Press, (2009).
- [21] Scholz, R. (1995). Hole-phonon scattering rates in gallium arsenide. *Journal of applied physics*, 77(7), 3219-3231.
- [22] Bardeen, J., & Shockley, W. (1950). Deformation potentials and mobilities in non-polar crystals. *Physical Review*, 80(1), 72.
- [23] Ikonić, Z., Harrison, P., & Kelsall, R. W. (2001). Intersubband hole-phonon and alloy disorder scattering in SiGe quantum wells. *Physical Review B*, 64(24), 245311.
- [24] Serie, Landolt-Börnstein New. (1982). Group III, vol 17a, ed O Madelung.
- [25] Blakemore, J. S. (1982). Semiconducting and other major properties of gallium arsenide. *Journal of Applied Physics*, 53(10), R123-R181.
- [26] Shen, K., & Wu, M. W. (2010). Hole spin relaxation in intrinsic and p-type bulk GaAs. *Physical Review B*, 82(11), 115205.
- [27] Dargys, A. (2005). Hole spin relaxation: optical deformation potential scattering. *Semiconductor science and technology*, 20(8), 733.
- [28] Ziman, J. M. (1960). *Electrons and phonons: the theory of transport phenomena in solids*. Oxford University Press.
- [29] Singh, J. (2007). *Electronic and optoelectronic properties of semiconductor structures*. Cambridge University Press.
- [30] Series, Landolt-Börnstein New. (1982) Group III, vol 18a, ed O Madelung.

CHAPITRE IV
Interaction des
trous avec les
phonons optiques
polaïres confinés
et d'interfaces

Chapitre IV Interaction des trous avec les phonons optiques polaires confinés et d'interfaces

Ce chapitre se compose de deux parties, la première partie est consacrée à l'étude de l'interaction des trous avec les phonons optiques confinés. En utilisant le modèle du milieu diélectrique continu, nous calculons les divers taux de diffusion intra-sous-bandes des trous lourds et légers avec absorption et émission d'un phonon, ensuite nous étudions l'effet de la largeur du puits sur ces derniers. En outre, les effets de l'anisotropie et de la sous-bande split-off sur la diffusion sont discutés. En ce qui concerne la deuxième partie, nous présentons la même étude évoquée précédemment, mais le travail sera consacré aux taux de diffusion avec les phonons d'interfaces.

I. Introduction

Dans un puits quantique, les phonons optiques sont modifiés, ainsi la présence d'interfaces conduit à l'apparition de modes confinés et d'interfaces. Cet effet résulte de la différence entre les fréquences des phonons optiques polaires des matériaux constituant l'hétérostructure [1,2]. En effet, expérimentalement la spectroscopie Raman a mis en évidence l'existence des phonons confinés et d'interfaces dans les hétérostructures à semiconducteurs telles que les puits quantiques [3,4], les multi-puits quantiques [5,6], les nanofils [7,8], les points quantiques [9,10] et les superréseaux [11-13]. Dans ce contexte, notons que pour décrire l'interaction électron phonon dans les hétérostructures le modèle massif des phonons polaires décrit dans le chapitre II et utilisé par la suite dans le chapitre III constitue en fait une bonne approximation seulement pour les puits quantiques de grande largeur [14]. Cependant, le modèle massif des phonons optiques semble être moins précis que d'autres modèles plus élaborés dans les puits quantiques étroits [15-18]. Pour cette raison, dans ce chapitre, nous tenons compte de l'effet du confinement des phonons optiques lors de l'étude de l'interaction électron phonon.

II.1 Taux de diffusion des trous dus aux phonons optiques polaires confinés

II.1 Traitement analytique général

Le potentiel dû aux phonons confinés s'écrit comme suit [19-21]

$$V(\vec{R}) = \sum_q \sum_m e\Phi_{q,m}(z) (a_m(q) + a_m^+(-q)) e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} \quad (4.1)$$

\vec{q} et \vec{r} étant respectivement le vecteur d'onde du phonon et la position de l'électron dans le plan (xy). L'indice m de la somme désigne le mode du phonon confiné, alors que e représente la charge électronique. Les grandeurs $a_m^+(-q)$ et $a_m(q)$ quant à elles sont respectivement les opérateurs de création et d'annihilation, tandis que $\Phi_{q,m}(z)$ représente le potentiel dû au phonon confiné. Ce dernier est donné par [22]

$$\Phi_{q,m}(z) = A_C \cos\left(\frac{m\pi z}{L}\right) \quad m=1,3,5,.. \quad (4.2)$$

$$\Phi_{q,m}(z) = A_C \sin\left(\frac{m\pi z}{L}\right) \quad m=2,4,6,.. \quad (4.3)$$

où L est la largeur du puits quantique et A_C la constante de normalisation des phonons confinés [22]

L'Hamiltonien d'interaction des électrons avec les phonons dans le cadre de la seconde quantification s'écrit [23]

$$H_{\text{int}} = \iiint \Psi^\dagger V(\vec{R}) \Psi dx dy dz \quad (4.4)$$

où Ψ est l'opérateur champ donné par l'Eq. (3.6).

Le taux de diffusion du trou de la sous-bande n_i passant d'un état $|i \vec{k}_i\rangle$ de vecteur d'onde \vec{k}_i à une sous-bande n_j d'état $|j \vec{k}_j\rangle$ est donné par la règle d'or de Fermi [1,19]

$$\gamma_{i \rightarrow j} = \frac{2\pi}{\hbar} \int |M(j,i)|^2 \delta(E_j \mp \hbar\omega - E_i) dN_j \quad (4.5)$$

Chapitre IV Interaction des trous avec les phonons optiques polaires confinés et d'interfaces

où E_i représente l'énergie initiale du trou, alors que E_j et dN_j sont respectivement l'énergie et la densité d'états finale après diffusion. Quant à l'élément de matrice $|M(j,i)|$ il caractérise la diffusion entre les deux états de départ et d'arrivée.

Dans l'Eq. (4.5), le signe moins en haut correspond à l'absorption, tandis que le signe plus en bas correspond à l'émission. Après quelques manipulations algébriques on trouve

$$\gamma_{i \rightarrow j} = \frac{1}{2\pi\hbar} \frac{k_j}{\frac{\partial E_j}{\partial k}} (N_{\varrho} \mp \frac{1}{2} + \frac{1}{2}) \Gamma_{ij} \quad (4.6)$$

Dans l'Eq. (4.6), la fonction Γ_{ij} rend compte du recouvrement entre les états initial et final, elle est explicitement donnée par

$$\Gamma_{ij} = \sum_m \int d\varphi \left| G_{h,m}(m) \cos\left(\frac{3\varphi}{2}\right) + G_{l,m}(m) \cos\left(\frac{\varphi}{2}\right) + G_{s,m}(m) \cos\left(\frac{\varphi}{2}\right) \right|^2 \quad (4.7)$$

où φ est l'angle entre les deux vecteurs \vec{k}_i et \vec{k}_j , alors que pour le mode m , les fonctions $G_{h,m}(m)$, $G_{l,m}(m)$, $G_{s,m}(m)$ correspondant respectivement aux sous bandes trous lourds (*heavy*), trous légers (*light*) et trous de split off (*split off*) sont données par

$$G_{h,m}(m) = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{\Phi_{q,m}(z)} \psi_{hi}(z) \psi_{hj}(z) A_{ih}(k_i) A_{jh}(k_j) dz \quad (4.8)$$

$$G_{l,m}(m) = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{\Phi_{q,m}(z)} \psi_{li}(z) \psi_{lj}(z) A_{il}(k_i) A_{jl}(k_j) dz \quad (4.9)$$

$$G_{s,m}(m) = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{\Phi_{q,m}(z)} \psi_{si}(z) \psi_{sj}(z) A_{is}(k_i) A_{js}(k_j) dz \quad (4.10)$$

L'examen de l'Eq. (4.6) fait sortir un aspect important qui se résume dans le fait que le taux de diffusion est déterminé par le produit de la densité d'états et la fonction Γ_{ij} .

II.2 Résultats numériques

Dans cette partie, nous exposons nos résultats numériques obtenus dans le cadre défini par les Eqs. (4.6)-(4.10). Nous traitons séparément les processus avec absorption et ceux avec émission de phonons confinés dont nous discutons et analysons en détail la dépendance en énergie. Dans le but de bien comprendre la dépendance en énergie des taux de diffusion, nous examinons de près les rôles joués respectivement par la densité d'états finale et la fonction de recouvrement Γ_{ij} .

II.2.1 Diffusion avec absorption d'un phonon

La figure 4.1 montre nos résultats des taux de diffusion intra-sous-bandes des trous lourds et légers avec absorption d'un phonon optique polaire confiné. On remarque que pour les trous lourds et à faible énergie, le taux de diffusion diminue presque linéairement avec l'énergie. Partant de sa valeur maximale $\gamma_{H \rightarrow H} = 0,56 \times 10^{12} \text{ s}^{-1}$ à $E = 54,6 \text{ meV}$ il diminue très rapidement pour atteindre la valeur $0,37 \times 10^{12} \text{ s}^{-1}$ à $E = 114,7 \text{ meV}$, au delà de cette énergie, la variation du taux de diffusion devient très faible et la valeur de ce dernier se stabilise presque à $\gamma_{H \rightarrow H} = 0,35 \times 10^{12} \text{ s}^{-1}$. Le comportement du taux de diffusion s'explique comme étant dû à la chute rapide du facteur Γ_{hh} pour les faibles énergies par rapport aux variations de la densité d'états (voir fig. 4.2). Pour les hautes énergies, approximativement à partir de 100 meV , la densité d'états ne varie presque plus alors que Γ_{hh} présente une décroissance faible. L'effet résultant est un taux de diffusion décroissant mais presque constant.

Le taux de diffusion des trous légers varie faiblement avec l'énergie, partant d'une valeur $\gamma_{L \rightarrow L} = 0,095 \times 10^{12} \text{ s}^{-1}$ à $E = 96,16 \text{ meV}$ il diminue faiblement jusqu'à sa valeur minimale $\gamma_{L \rightarrow L} = 0,086 \times 10^{12} \text{ s}^{-1}$ qu'il atteint à $E = 113,5 \text{ meV}$, pour poursuivre ensuite sa faible augmentation qui ne dépasse guère 5%. Ce comportement est dû aux faibles variations de la densité d'états finale et la fonction de recouvrement des trous légers Γ_{lh} clairement montrées sur la figure 4.1 b.

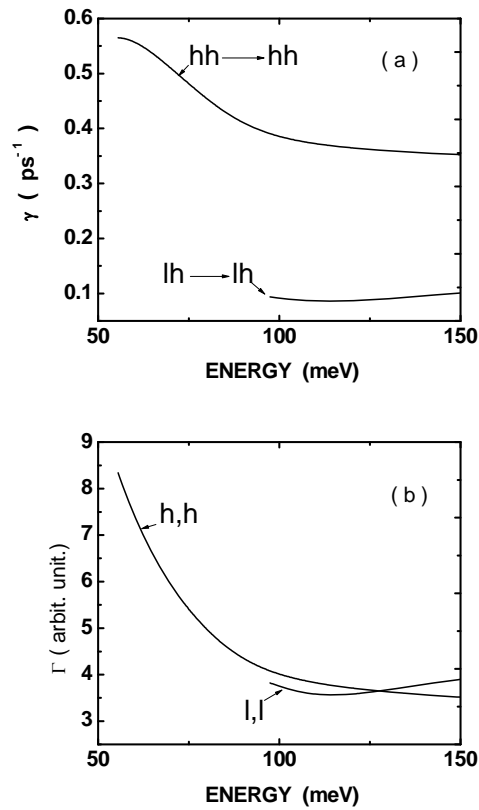


Figure 4.1 (a): Taux de diffusion intra-sous-bandes des trous lourds et légers avec absorption d'un phonon optique confiné. **(b)** La fonction Γ_{ij} pour les trous lourds et légers.

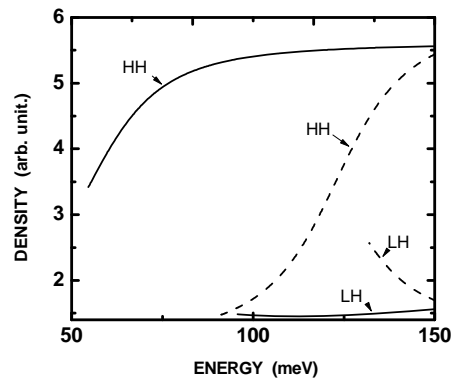


Figure 4.2: Densité d'états finale des trous lourds et légers avec absorption (émission) d'un phonon optique confiné en ligne continue (discontinue).

II.2.2 Diffusion avec émission d'un phonon

La figure 4.3 montre les taux de diffusion intra-sous-bandes aussi bien des trous lourds que légers avec émission d'un phonon optique confiné. On remarque que le taux de diffusion des trous lourds, partant d'une valeur $\gamma_{H \rightarrow H} = 0,83 \times 10^{12} \text{ s}^{-1}$ à une énergie 91,7 meV diminue de façon monotone avec cette dernière jusqu'à une énergie 101,27 meV où il atteint sa valeur minimale de $0,78 \times 10^{12} \text{ s}^{-1}$. Au delà, il augmente presque linéairement jusqu'à 138,3 meV, pour des valeurs supérieures à cette énergie, les variations deviennent moins rapides atteignant la valeur $\gamma_{H \rightarrow H} = 1,38 \times 10^{12} \text{ s}^{-1}$ à 150 meV. A cause de la variation rapide de la fonction Γ_{hh} par rapport à la densité d'états finale, pour les faibles énergies, le taux de diffusion suit le comportement de celle-ci, tandis que pour les hautes énergies il suit celui de la densité d'états finale à cause de la faible variation de la fonction de recouvrement Γ_{hh} . A titre illustratif, dans l'intervalle compris entre 91,67 et 101,27 meV, les pentes de la densité d'états, la fonction de recouvrement et le taux de diffusion sont respectivement égales à 2,904, -18,23 et -0,520. Dans l'intervalle suivant, c'est à dire entre 109,29 et 133,85 meV les pentes de ces mêmes grandeurs prises dans le même ordre sont respectivement égale à 10,02, -0,929 et 7,377. Ceci confirme l'explication que nous venons de donner.

Le taux de diffusion des trous légers présente un caractère décroissant en fonction de l'énergie. Numériquement, il passe d'une valeur maximale $\gamma_{L \rightarrow L} = 0,62 \times 10^{12} \text{ s}^{-1}$ à $E = 133,9 \text{ meV}$ jusqu'à une valeur minimale $0,41 \times 10^{12} \text{ s}^{-1}$ à $E = 150 \text{ meV}$. Ce comportement s'explique par l'effet combiné de la décroissance rapide de la densité d'états accompagnée par la très faible variation de la fonction de recouvrement (voir figs. 4.2, 4.3).

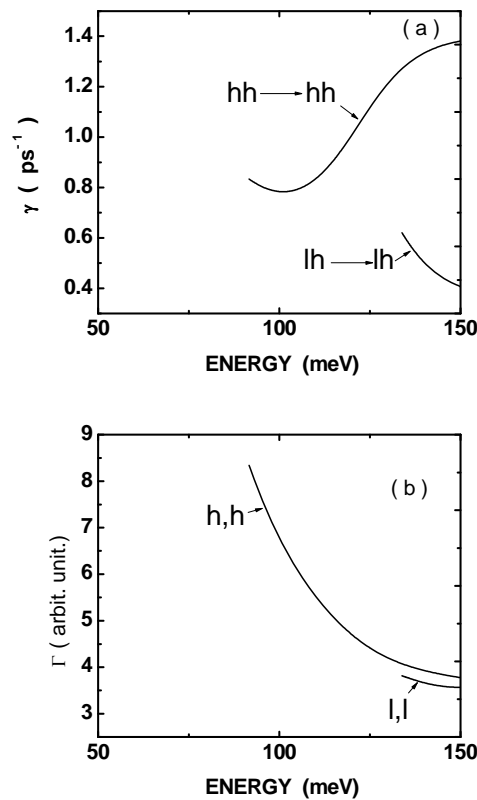


Figure 4.3 (a): Taux de diffusion intra-sous-bandes des trous lourds et légers avec émission d'un phonon optique confiné. **(b)** La Fonction Γ_{ij} pour les trous lourds et légers.

II.2.3 Effet de la sous bande split-off sur les taux de diffusion

La figure 4.4 représente les taux de diffusion intra-sous bandes aussi bien des trous lourds que légers dans le cadre de deux modèles différents: Dans le premier modèle, l'effet de la sous-bande split-off est inclus alors que dans le second il est négligé.

En examinant cette figure de près, on remarque que les deux modèles donnent les mêmes allures. Pour les trous lourds, l'erreur relative est presque constante : Elle est de 11 % aux énergies faibles et passe à 12 % aux énergies supérieures. Pour les trous légers, on a les mêmes allures pour les deux modèles comme dans le cas précédent, cependant l'erreur relative augmente avec l'énergie allant de 7,8 % à 18 % . Ceci montre clairement l'importance d'inclure de la sous bande split-off dans tout calcul des taux de diffusion.

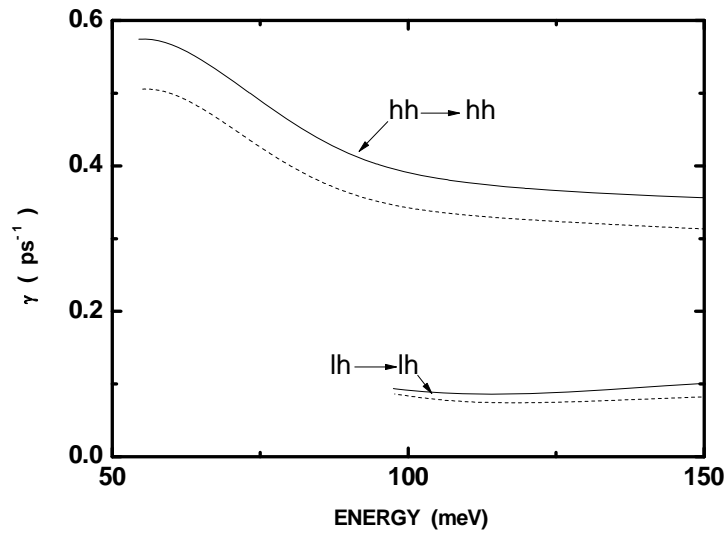


Figure 4.4: Taux de diffusion intra-sous-bandes des trous lourds et légers avec absorption d'un phonon optique confiné en incluant (négligeant) la sous bande split-off en ligne continue (discontinue).

II.2.4 Effet de la largeur du puits quantique sur les taux de diffusions

Jusqu'à présent, tous les taux de diffusion ont été calculés pour des largeurs de puits égale à 25 Å. Dans cette partie, nous allons étudier l'effet de la largeur du puits sur les taux de diffusion, car augmenter ou diminuer la largeur du puits fait varier non seulement la structure électronique des bandes d'énergie, mais aussi le potentiel électrique induits par les phonons (voir fig. 2.3 chapitre 2).

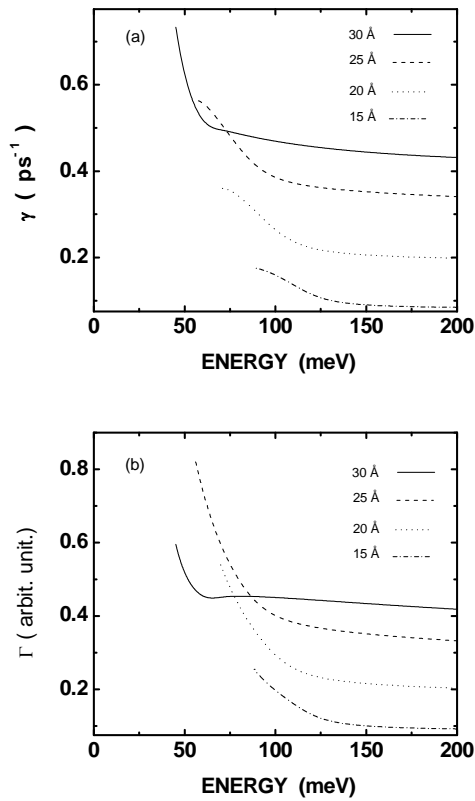


Figure 4.5 (a): Taux de diffusion intra-sous-bandes des trous lourds avec absorption d'un phonon optique confiné. **(b)** La fonction Γ_{ij} pour les trous lourds et légers pour plusieurs largeurs de puits.

La figure 4.5 a montre les taux de diffusion intra-sous-bandes des trous lourds avec absorption d'un phonon optique confiné pour des largeurs du puits quantique allant de 15 à 30 Å. Pour comprendre le comportement de nos résultats, nous avons calculé la fonction de recouvrement Γ_{hh} et les densités d'états finales des trous lourds pour les largeurs de puits correspondantes. Ceux-ci sont bien montrés sur les figures 4.5b et 4.6 respectivement.

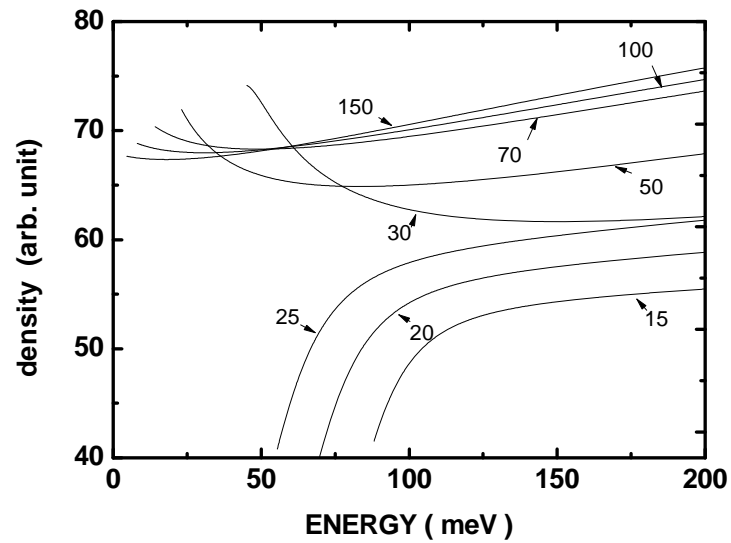


Figure 4.6: Densité d'états finale des trous lourds avec absorption d'un phonon optique confiné pour plusieurs largeurs de puits en fonction des énergies des trous.

Pour les faibles valeurs de puits variant de 15 à 25 Å, les taux de diffusion ont un caractère décroissant jusqu'à une certaine valeur d'énergie qui dépend de la largeur, au delà la variation est moins rapide et le taux tend à se saturer. Il est évident que pour les faibles largeurs étudiées, le taux de diffusion suit le comportement de la fonction de recouvrement Γ_{hh} , la densité d'états ayant un effet mineur. Il est facile de comprendre le comportement de la fonction de recouvrement Γ_{hh} pour les largeurs inférieures à 30 Å, en faisant référence au couplage HH-LH à mesure qu'on s'éloigne du centre de la mini-zone de Brillouin. Dans ce but, on montre sur les figures 4.7. a, b les contributions au recouvrement dans l'état propre HH du puits provenant des bandes HH, LH et SP.

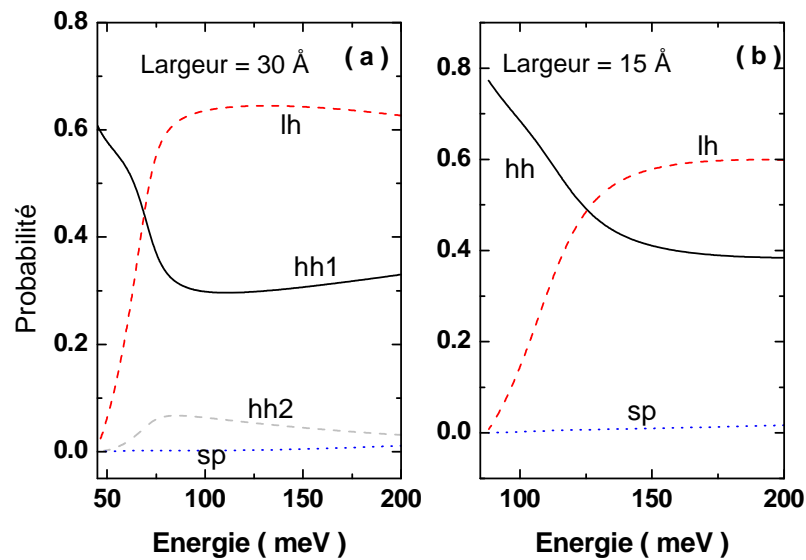


Figure 4.7 : Les contributions au recouvrement dans l'état propre HH du puits provenant des sous-bandes HH, LH et SP pour des puits de largeurs 30 Å et 15 Å.

On remarque qu'au centre de la zone de Brillouin, la plus grande contribution provient de la sous bande HH1, les autres sous bandes LH, SP et HH2 ayant un effet négligeable. Au fur et à mesure qu'on s'éloigne du centre le couplage HH-LH prend plus d'ampleur et l'augmentation de la contribution LH au recouvrement tend à neutraliser la décroissance de la contribution HH à ce même recouvrement. Ce qui explique le ralentissement de la variation du recouvrement HH en fonction de l'énergie qui finit par se saturer comme il est montré sur la figure 4.5. b.

Sur la figure 4.8 a nous avons tracé les taux de diffusion intra-sous-bandes des trous lourds avec absorption d'un phonon optique confiné pour diverses largeurs du puits quantique allant de 50 Å à 150 Å. Pour 50 Å, le taux de diffusion partant d'une valeur $\gamma_{H \rightarrow H} = 0,8 \times 10^{12} \text{ s}^{-1}$ à $E = 23 \text{ meV}$ diminue de façon monotone avec l'augmentation de l'énergie jusqu'à 30,3 meV où il atteint sa valeur minimale de $0,7 \times 10^{12} \text{ s}^{-1}$. Il est très utile de noter que dans cet intervalle d'énergie les trous lourds sont complètement découplés des autres sous bandes. Pour les énergies supérieures, le taux augmente presque linéairement jusqu'à $E = 52 \text{ meV}$ où il atteint son maximum de $\gamma_{H \rightarrow H} = 1,092 \times 10^{12} \text{ s}^{-1}$, ensuite il entame une allure faiblement décroissante avec l'énergie. Pour des puits plus larges, le taux augmente très

Chapitre IV Interaction des trous avec les phonons optiques polaires confinés et d'interfaces

rapidement présentant en effet un véritable aspect 'overshoot' jusqu'à une certaine énergie E_0 dépendant de la largeur, juste après le taux diminue lentement et de façon monotone avec l'énergie. Dans ce cas précis, le taux de diffusion dans sa dépendance de E suit de très près le comportement de la fonction de recouvrement Γ_{hh} comme il est clairement illustrée sur la figure 4.8 b

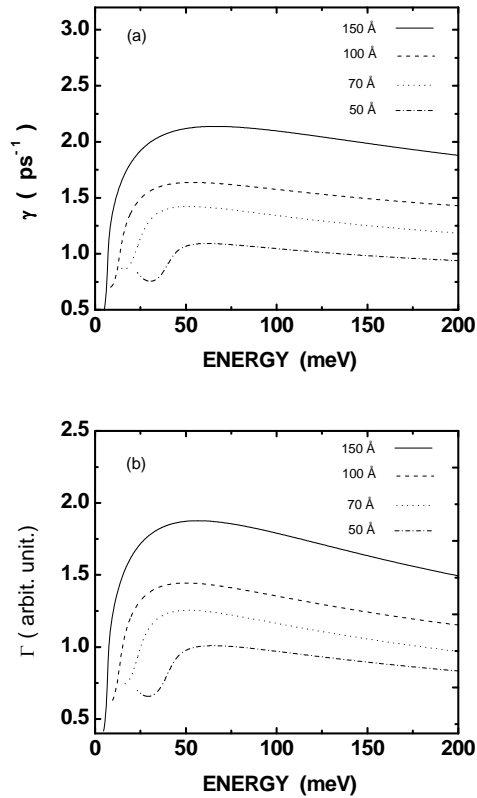


Figure 4.8 (a): Taux de diffusion intra-sous-bandes des trous lourds avec absorption d'un phonon optique confiné. **(b)** La fonction Γ_{ij} pour les trous lourds et légers pour plusieurs largeurs de puits.

Chapitre IV Interaction des trous avec les phonons optiques polaires confinés et d'interfaces

Pour expliquer l'allure de la fonction de recouvrement Γ_{HH} dont la courbe est montrée sur la figure 4.8 b, les contributions à ce dernier dans l'état propre HH du puits provenant des sous-bandes HH, LH et SP sont montrées sur les figures 4.9 a, b pour des puits de largeurs 50 et 100 Å respectivement. Pour un puits de 50 Å de largeur, on remarque que la contribution au recouvrement Γ_{HH} associée à la diffusion intra-sous-bande provenant de la sous-bande des trous lourds hh_1 est importante au centre de la zone de Brillouin. Notons cependant, que cette contribution qui initialement diminue faiblement avec l'énergie entame une décroissance très rapide, accompagné d'une augmentation rapide de la contribution de la sous-bande des trous légers lh_1 et ceux jusqu'à une énergie du trou lourd valant 50 meV où les sens de variation de ces deux contributions s'inversent, l'effet des autres sous-bandes étant négligeable.

Pour une largeur de puits égale à 100 Å, les allures des courbes de la figure 4.9 b sont semblables à celles du cas précédent à l'exception du comportement à basse énergie où on constate une décroissance très rapide de la contribution hh_1 au profit d'une croissance proportionnelle correspondante lh_1 .

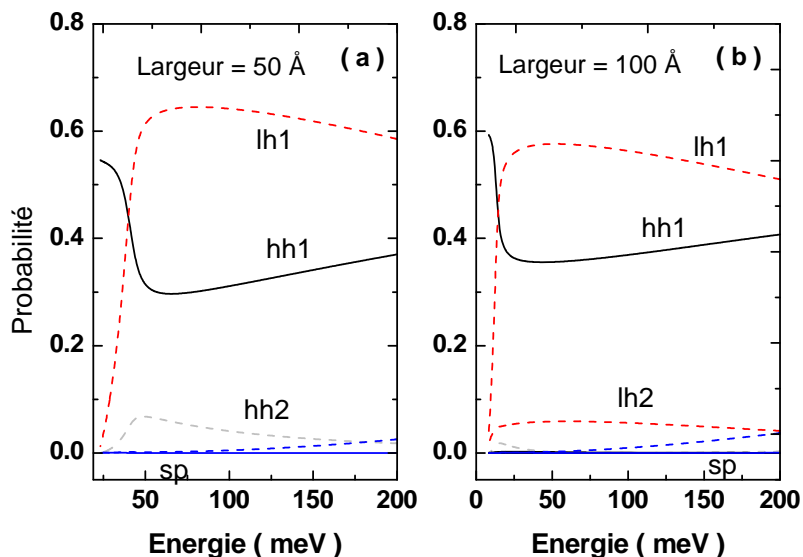


Figure 4.9 : Les contributions au recouvrement dans l'état propre HH du puits provenant des bandes HH, LH et SP pour des puits de largeurs 50 Å et 100 Å.

II.2.5 Effet de l'anisotropie sur les taux de diffusions

La figure 4.10 représente le taux de diffusion intra-sous-bande des trous lourds avec absorption d'un phonon optique confiné en fonction du vecteur d'onde initial des trous en tenant compte du warping de la structure de bande. On voit clairement que le taux de diffusion est caractérisé par une anisotropie plus visible lorsqu'on s'éloigne du centre de la zone de Brillouin, c'est à dire pour les hautes énergies particulièrement entre les directions $[1\ 0]$ et $[1\ 1]$ où il est clair de remarquer une symétrie d'ordre 4. Ce phénomène est directement lié à l'anisotropie de la structure de la bande elle même comme illustrée sur la figure 7.1 du chapitre I.

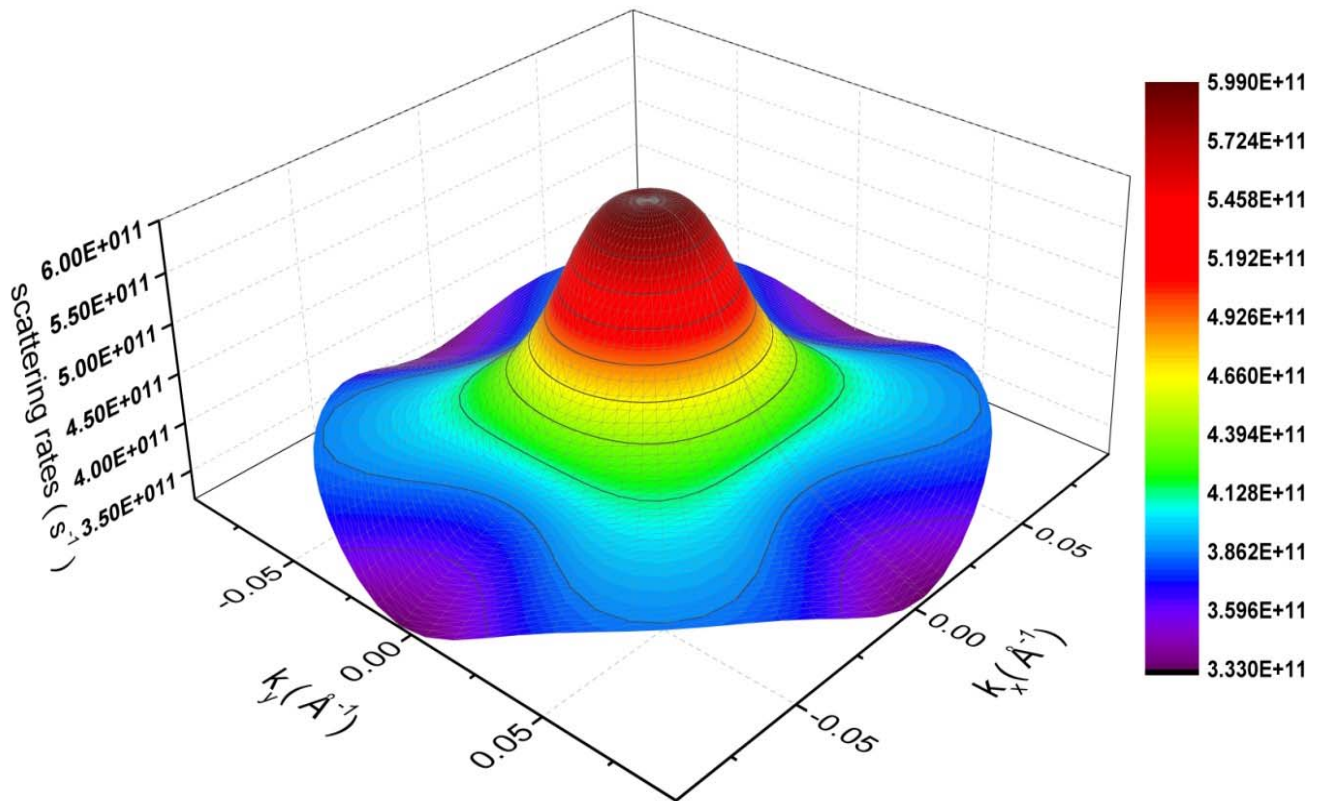


Figure 4.10: Effet de l'anisotropie sur le taux de diffusion intra-sous-bande des trous lourds avec absorption d'un phonon optique confiné en fonction du vecteur d'onde initial k dans le plan k_x - k_y .

Chapitre IV Interaction des trous avec les phonons optiques polaires confinés et d'interfaces

La figure 4.11 montre le taux de diffusion intra-sous-bande des trous légers avec absorption d'un phonon optique confiné en fonction du vecteur d'onde initial du trou. On constate que le taux de diffusion est caractérisé par une faible anisotropie en comparaison avec celle des trous lourds. Cet effet trouve son origine dans la faible anisotropie de la sous-bande des trous légers montré sur la figure 7.1 au chapitre I.

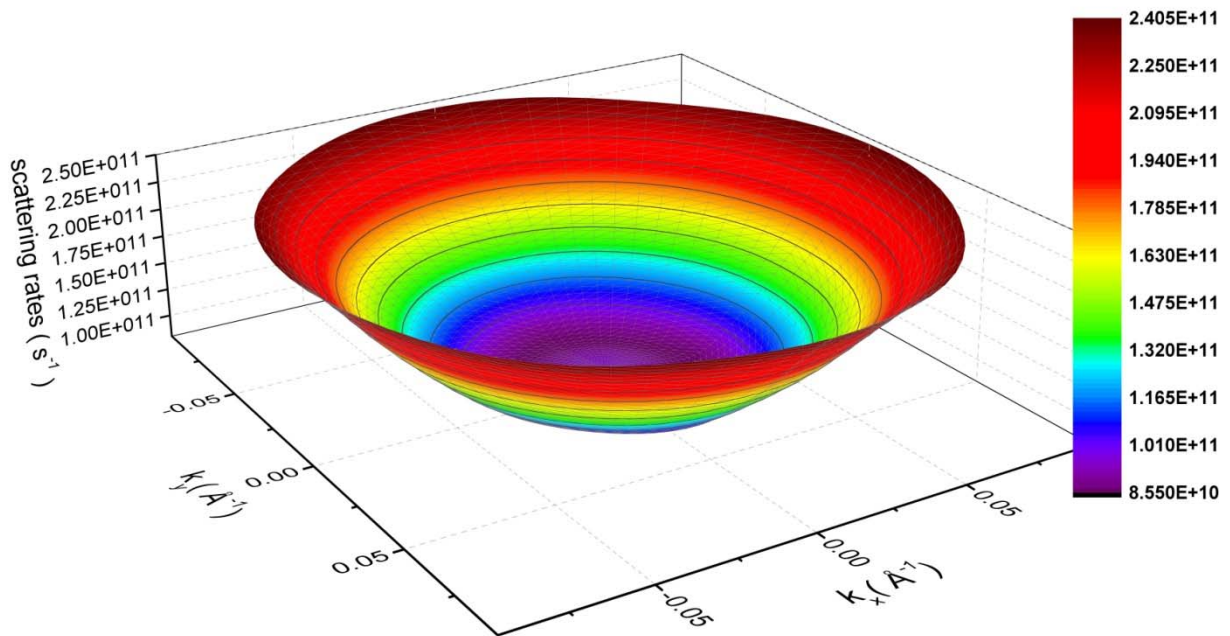


Figure 4.11: Effet de l'anisotropie sur le taux de diffusion intra-sous-bande des trous légers avec absorption d'un phonon optique confiné en fonction du vecteur d'onde initial k dans le plan k_x - k_y .

III. Taux de diffusion des trous avec les phonons optiques polaires d'interfaces

III.1 Traitement analytique général

Le potentiel dû aux phonons d'interfaces s'écrit comme suit [24-26]

$$V(\vec{R}) = \sum_q e\Phi_q(z) (a(q) + a^+(-q)) e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} \quad (4.11)$$

\vec{q} et \vec{r} étant respectivement les vecteurs d'ondes du phonon et position de l'électron dans le plan (xy) , e quant à elle désigne la charge de l'électron, alors que $a^+(-q)$ et $a(q)$ sont respectivement les opérateurs de création et d'annihilation, enfin $\Phi_q(z)$ représentant le potentiel du phonon d'interface. Dans le cas des modes d'interfaces symétriques, le potentiel $\Phi_q(z)$ il s'écrit comme [22]

$$\phi_s(z) = A_s \begin{cases} e^{q(z+\frac{L}{2})} & z \leq -\frac{L}{2} \\ \frac{\cosh(qz)}{\cosh(q\frac{L}{2})} & |z| \leq \frac{L}{2} \\ e^{-q(z-\frac{L}{2})} & z \geq \frac{L}{2} \end{cases} \quad (4.12)$$

alors que, pour les phonons d'interfaces antisymétriques son expression devient [22]

Chapitre IV Interaction des trous avec les phonons optiques polaires confinés et d'interfaces

$$\phi_a(z) = A_a \begin{cases} -e^{q(z+\frac{L}{2})} & z \leq -\frac{L}{2} \\ \frac{\sinh(qz)}{\sinh(q\frac{L}{2})} & |z| \leq \frac{L}{2} \\ e^{-q(z-\frac{L}{2})} & z \geq \frac{L}{2} \end{cases} \quad (4.13).$$

où L est la largeur du puits quantique, tandis que A_s et A_a sont respectivement les constantes de normalisation des modes d'interfaces [22].

Dans le cadre de la seconde quantification, l'Hamiltonien d'interaction électron-phonon s'écrit [23]

$$H_{\text{int}} = \iiint \Psi^\dagger V(\vec{R}) \Psi dx dy dz \quad (4.14)$$

où Ψ est l'opérateur champ donné par l'Eq. (3.6)

Le taux de diffusion d'un trou dans la sous-bande n_i passant d'un état $|i \vec{k}_i\rangle$ de vecteur d'onde \vec{k}_i à une sous-bande n_j d'état $|j \vec{k}_j\rangle$ est donné par la règle d'or de Fermi [24-26]

$$\gamma_{i \rightarrow j} = \frac{2\pi}{\hbar} \int |M(j, i)|^2 \delta(E_j \mp \hbar\omega - E_i) dN_j \quad (4.15)$$

où E_i représente l'énergie initiale du trou, alors que E_j et dN_j sont respectivement l'énergie et la densité d'états finale après diffusion. Quant à l'élément de matrice $|M(j, i)|$ il caractérise la diffusion entre les deux états de départ et d'arrivée.

Chapitre IV Interaction des trous avec les phonons optiques polaires confinés et d'interfaces

En calculant l'intégrale l'Eq. (4.15) donne

$$\gamma_{i \rightarrow j} = \frac{1}{2\pi\hbar} \frac{k_j}{\frac{\partial E_j}{\partial k}} (N_Q \mp \frac{1}{2} + \frac{1}{2}) \Gamma_{ij} \quad (4.16)$$

Dans l'Eq. (4.16), la fonction Γ_{ij} rend compte du recouvrement et est donnée par

$$\Gamma_{ij} = \int d\varphi \left| G_h(q) \cos\left(\frac{3\varphi}{2}\right) + G_l(q) \cos\left(\frac{\varphi}{2}\right) + G_s(q) \cos\left(\frac{\varphi}{2}\right) \right|^2 \quad (4.17)$$

où φ est l'angle entre les deux vecteurs \vec{k}_i et \vec{k}_j et les fonctions $G_h(q)$, $G_l(q)$, $G_s(q)$ sont données respectivement par

$$G_h(q) = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{\Phi_q(z)} \psi_{hi}(z) \psi_{hj}(z) A_{ih}(k_i) A_{jh}(k_j) dz \quad (4.18)$$

$$G_l(q) = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{\Phi_q(z)} \psi_{li}(z) \psi_{lj}(z) A_{il}(k_i) A_{jl}(k_j) dz \quad (4.19)$$

$$G_s(q) = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{\Phi_q(z)} \psi_{si}(z) \psi_{sj}(z) A_{is}(k_i) A_{js}(k_j) dz \quad (4.20)$$

L'examen de l'Eq. (4.16) fait sortir un aspect important qui se résume dans le fait que le taux de diffusion est déterminé par le produit de la densité d'états et la fonction Γ_{ij} .

III.2 Résultats numériques

Dans cette partie, nous exposons nos résultats numériques obtenus dans le cadre défini par les Eqs. (4.16)-(4.20). Nous traitons séparément les processus avec absorption et émission de phonons confinés, discutons et analysons en détail la dépendance en énergie de ces processus et expliquons les rôles joués par la densité d'état finale et la fonction de

recouvrement, ainsi que l'effet de la largeur du puits sur les taux de diffusion, en outre, nous étudions l'effet de l'anisotropie sur cette dernière.

III.2.1 Diffusion avec absorption d'un phonon

Nous montrons dans la figure **4.12** nos résultats des taux des diffusions intra-sous-bandes des trous lourds et légers avec absorption d'un phonon optique d'interface. On remarque que le taux de diffusion pour les trous lourds diminue rapidement avec l'énergie jusqu'à $73,13 \text{ meV}$ où $\gamma_{H \rightarrow H} = 1,6 \times 10^{12} \text{ s}^{-1}$ puis il augmente lentement avec l'énergie pour atteindre sa valeur maximale $2,13 \times 10^{12} \text{ s}^{-1}$ pour les hautes énergies. Ceci est dû à la diminution du facteur Γ_{hh} pour les faibles énergies, tandis que pour les hautes énergies ceci est dû à l'augmentation de la densité d'états des trous lourds avec l'énergie comme illustrée sur la figure **4.13**.

Pour le taux de diffusion des trous légers, ce dernier augmente rapidement avec l'énergie en suivant le comportement du facteur Γ_{lh} pour les faibles énergies. Son augmentation devient ensuite quasi-linéaire, à cause de l'augmentation de la densité d'états, atteignant sa valeur maximale $1,52 \times 10^{12} \text{ s}^{-1}$ pour $E = 150 \text{ meV}$.

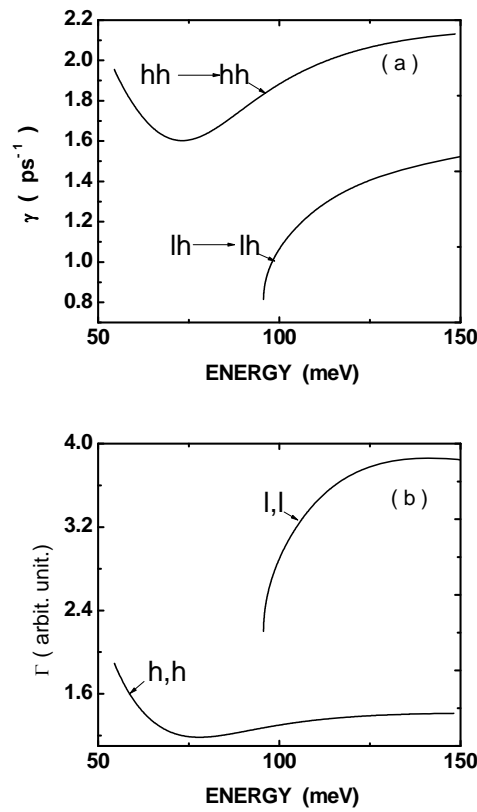


Figure 4.12 (a): Taux de diffusion intra-sous-bandes des trous lourds et légers avec absorption d'un phonon optique d'interface. **(b)** La fonction Γ_{ij} pour les trous lourds et légers.

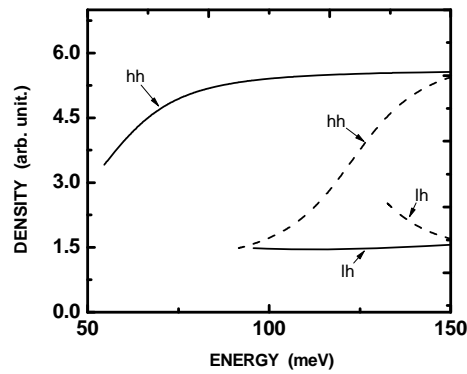


Figure 4.13: Densité d'états finale des trous lourds et légers avec absorption (émission) d'un phonon optique d'interface en ligne continue (discontinue).

III.2.2 Diffusion avec émission d'un phonon

La figure 4.14 représente les taux des diffusions intra-sous-bandes des trous lourds et légers avec émission d'un phonon optique d'interface ainsi que les fonctions de recouvrements Γ_{ij} correspondantes. On remarque que le taux de diffusion des trous lourds diminue rapidement avec l'énergie jusqu'à $E = 102,5 \text{ meV}$ où $\gamma_{H \rightarrow H} = 2,56 \times 10^{12} \text{ s}^{-1}$, puis augmente presque linéairement jusqu'à atteindre la valeur $7,9 \times 10^{12} \text{ s}^{-1}$ à 150 meV . A cause de la variation rapide de la fonction Γ_{hh} par rapport à la densité d'états finale, pour les faibles énergies, le taux de diffusion suit le comportement de celle-ci, tandis que pour les hautes énergies, il suit le comportement de la densité d'états finale à cause de la faible variation de la fonction de recouvrement Γ_{hh} .

Pour les trous légers, à faible énergie le taux de diffusion est une fonction croissante de l'énergie initiale du trou et ceci jusqu'à $E = 137 \text{ meV}$ où la valeur maximale $\gamma_{L \rightarrow L} = 7,1 \times 10^{12} \text{ s}^{-1}$ est atteinte. Par la suite, ce taux diminue progressivement jusqu'à atteindre son minimum $\gamma_{L \rightarrow L} = 6,6 \times 10^{12} \text{ s}^{-1}$ pour l'énergie $E = 150 \text{ meV}$. L'augmentation très rapide de la fonction de recouvrement Γ_{lh} du côté des faibles énergies et la décroissance rapide de la densité d'états aux hautes énergies peuvent rendre compte de ce comportement.

Il est intéressant de noter qu'à $E = 140,4 \text{ meV}$ les taux de diffusion des trous lourds et légers sont égaux et valent $\gamma_{L \rightarrow L} = 7,07 \times 10^{12} \text{ s}^{-1}$.

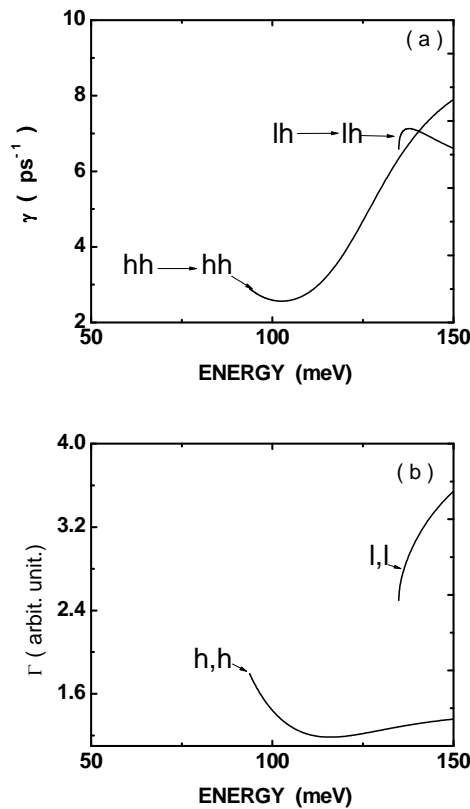


Figure 4.14 (a): Taux de diffusion intra-sous-bandes des trous lourds et légers avec émission d'un phonon optique d'interface. **(b)** La fonction Γ_{ij} pour les trous lourds et légers.

III.2.3 Effet de la sous bande split-off sur le taux de diffusion

La figure 4.15 ci-dessous montre les taux de diffusion intra-sous-bandes des trous lourds et légers obtenus respectivement dans les cadres des Hamiltoniens de Luttinger (4×4) et Luttinger-Kohn (6×6). On constate que pour les trous lourds, l'écart relatif varie de 5 % à basse énergie et 1,2 % à haute énergie. Pour les trous légers, cette différence est comprise entre 20 % à basse énergie et 16 % à haute énergie.

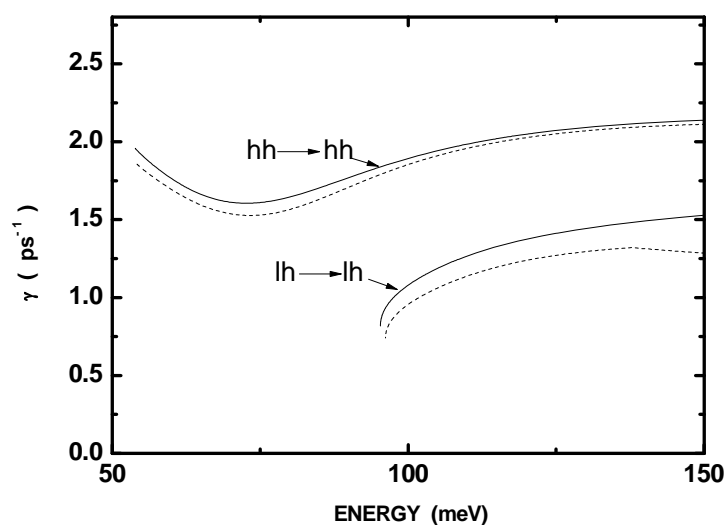


Figure 4.15: Taux de diffusion intra-sous-bandes des trous lourds et légers avec absorption d'un phonon optique d'interface en incluant (négligeant) la sous bande split-off en ligne continue (discontinue).

III.2.4 Effet de la largeur du puits quantique sur les taux de diffusion

La figure 4.16 représente les taux de diffusion intra-sous-bandes des trous lourds avec absorption d'un phonon optique d'interface pour diverses largeurs du puits quantique allant de 15 jusqu'à 30 Å. On remarque que pour une largeur de 30 Å, le taux de diffusion des trous lourds, partant d'une valeur $\gamma_{H \rightarrow H} = 1,19 \times 10^{12} s^{-1}$ à une énergie 55,2 meV diminue de façon monotone avec cette dernière jusqu'à une énergie 55,2 meV où il atteint sa valeur minimale de $0,82 \times 10^{12} s^{-1}$. Au delà, il augmente presque linéairement jusqu'à sa saturation pour les hautes énergie en atteignant $\gamma_{H \rightarrow H} = 2 \times 10^{12} s^{-1}$. Cette variation est due à la diminution de la densité d'états illustrée sur la figure 4.17, ainsi que la fonction de recouvrement Γ_{hh} aux faibles énergies, tandis que pour les hautes énergies le taux de diffusion suit le comportement de la fonction de recouvrement.

Pour des puits de largeurs allant de 15 jusqu'à 25 Å, les taux de diffusion ont un caractère décroissant jusqu'à une certaine valeur d'énergie qui dépend de la largeur, au delà de cette énergie le taux augmente de façon monotone et tend à se saturer pour les hautes énergies.

Chapitre IV Interaction des trous avec les phonons optiques polaires confinés et d'interfaces

Aux faibles énergies, le taux de diffusion suit aussi bien le comportement de la densité d'états finale que la fonction de recouvrement Γ_{hh} , cependant aux hautes énergies, il suivra celui de la fonction de recouvrement Γ_{hh} .

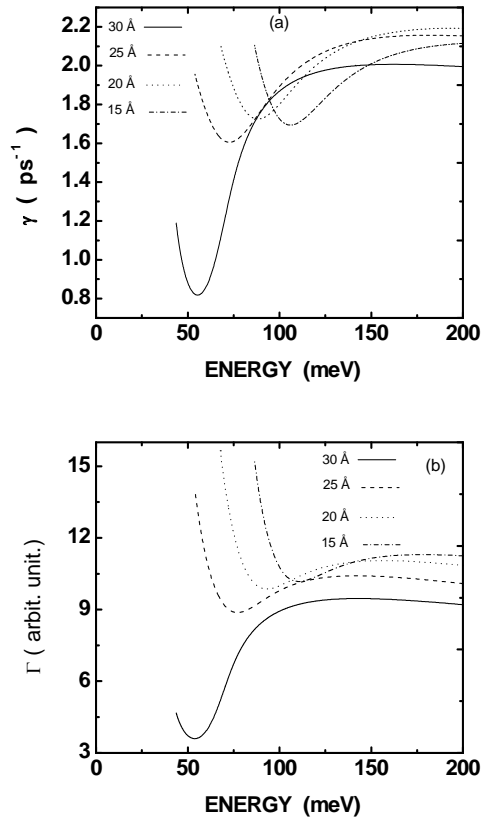


Figure 4.16 (a): Taux de diffusion intra-sous-bandes des trous lourds avec absorption d'un phonon optique d'interface. **(b)** La fonction Γ_{ij} pour les trous lourds et légers pour plusieurs largeurs de puits.

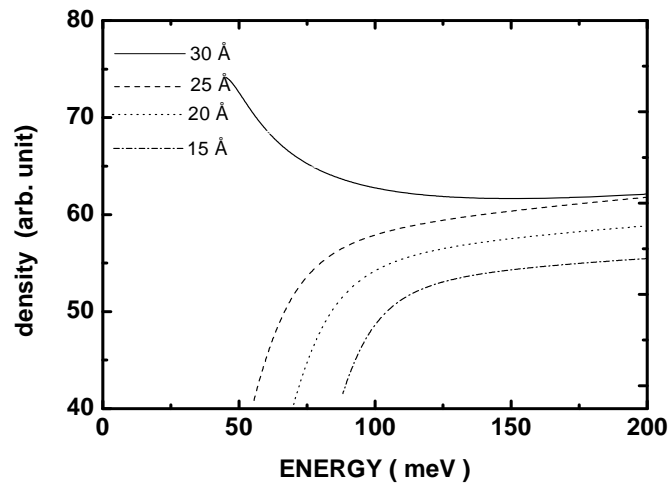


Figure 4.17: Densité d'états finale des trous lourds avec absorption d'un phonon optique d'interface pour plusieurs largeurs de puits en fonction des énergies des trous.

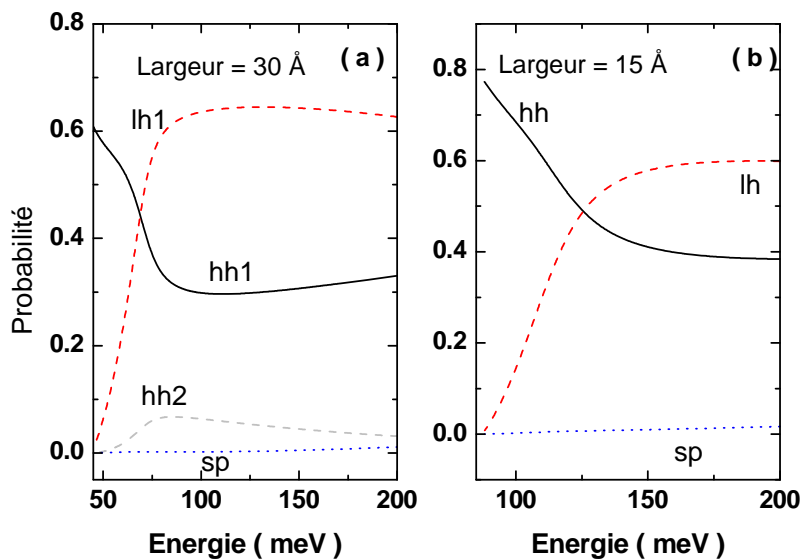


Figure 4.18 : Les contributions au recouvrement dans l'état propre HH du puits provenant des bandes HH, LH et SP pour des puits de largeurs 15 Å et 30 Å.

Pour expliquer la variation de la fonction de recouvrement en fonction de l'énergie, nous avons jugé utile de tracer sur les figures **4.18. a, b**, pour l'état propre HH du puits, les contributions au recouvrement provenant des bandes HH, LH et SP et ce pour des largeurs de puits égales à 15 et 30 Å respectivement.

Chapitre IV Interaction des trous avec les phonons optiques polaires confinés et d'interfaces

Pour une largeur de 30 \AA , on remarque qu'au centre de la mini-zone de Brillouin, la plus grande contribution provient de la sous bande HH1. Cependant, lorsqu'on s'éloigne du centre le couplage HH-LH prend plus d'importance et l'augmentation de la contribution LH au recouvrement s'opposant à la décroissance initiale rapide de la contribution HH tend à 'freiner' cette dernière. Ce qui explique le ralentissement de la variation du recouvrement HH en fonction de l'énergie qui finit par se saturer comme il est montré sur la figure **4.16 b**.

En outre, pour 15 \AA , on voit clairement que la contribution de la sous bande HH diminue avec l'énergie. Cependant, celle de la sous bande LH présente un comportement croissant.

La figure **4.19** montre les taux de diffusion intra-sous-bandes des trous lourds avec absorption d'un phonon pour des largeurs du puits quantique allant de 50 à 150 \AA . On constate que le taux de diffusion suit le comportement de la fonction de recouvrement illustrée sur la figure **4.19 (b)** et ce à cause de la variation rapide de cette dernière par rapport à la densité d'états finale illustrée sur la figure **4.20**.

En outre, pour une même énergie il est intéressant de noter que le taux de diffusion augmente avec la réduction de la largeur du puits. Ceci est dû à l'augmentation du potentiel des phonons d'interfaces quand la largeur du puits décroît comme il est bien montré sur la figure **2.4** du chapitre II.

Chapitre IV Interaction des trous avec les phonons optiques polaires confinés et d'interfaces

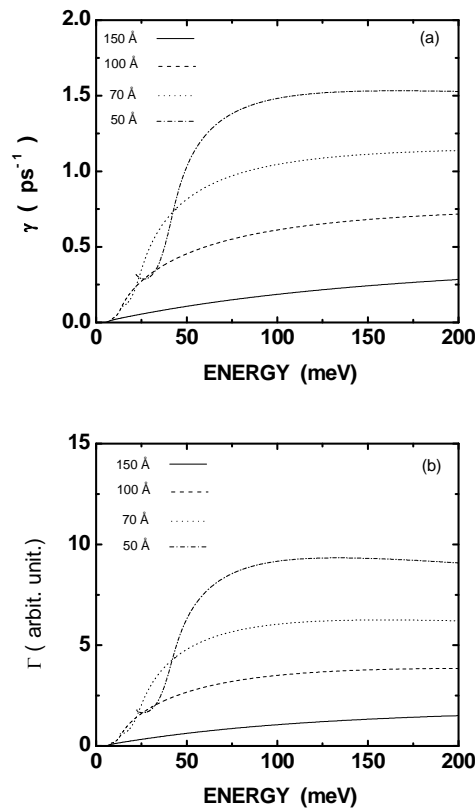


Figure 4.19 (a): Taux des diffusions intra-sous-bandes des trous lourds avec absorption d'un phonon optique d'interface. **(b)** La fonction Γ_{ij} pour les trous lourds et légers pour plusieurs largeurs de puits.

Pour expliquer la variation de la fonction de recouvrement Γ_{HH} pour l'état propre HH du puits, nous avons tracé dans la figure 4.21 les contributions au recouvrement provenant respectivement des sous-bandes HH, LH et SP et ce pour des largeurs de 50 et 100 Å.

Pour 50 Å, la contribution de la sous bande HH est importante au centre de la mini-zone de Brillouin, initialement elle décroît lentement avec l'énergie, ensuite après quelque meV cette contribution diminue très rapidement. En même temps, la contribution de la sous bande LH augmente très rapidement traduisant un fort couplage HH-LH. La saturation de Γ_{HH} à haute énergie provient de la compensation entre le caractère croissant de la contribution HH et celui décroissant de la contribution LH.

Pour les largeurs supérieures, en l'occurrence 100 Å, les mêmes arguments restent valables sauf qu'à très basse énergie la contribution LH présente un comportement 'overshoot' en fonction de l'énergie.

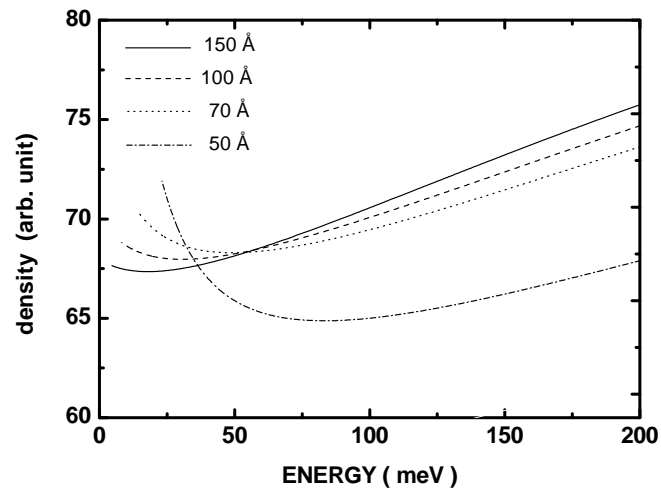


Figure 4.20: Densité d'états finale des trous lourds avec absorption d'un phonon optique d'interface pour plusieurs largeurs de puits en fonction des énergies des trous.

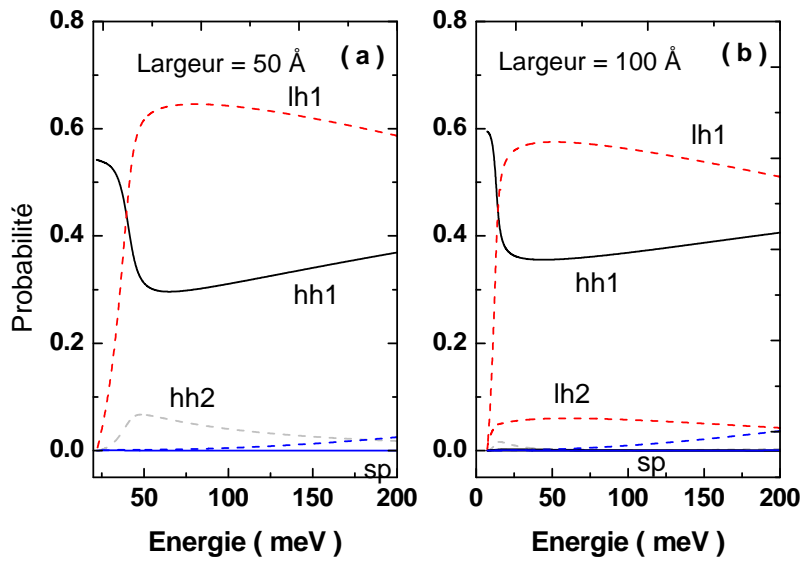


Figure 4.21 : Les contributions au recouvrement provenant des sous-bandes HH, LH et SP dans l'état propre HH pour des largeurs de 50 Å et 100 Å respectivement.

III.2.5 Effet de l'anisotropie sur les taux de diffusions

La figure 4.22 représente le taux de diffusion intra-sous-bande des trous lourds avec absorption d'un phonon optique d'interface en fonction du vecteur d'onde initial des trous, en tenant compte du warping de la structure de bande. On constate que le taux de diffusion présente une anisotropie importante particulièrement entre les directions $[1\ 1]$ et $[1\ 0]$. Cependant, cette anisotropie est plus marquée pour les grandes valeurs de k . Cette anisotropie est caractérisée par une symétrie d'ordre 4, et peut être expliquée par l'anisotropie de la structure de la bande elle-même comme illustrée sur la figure 1.7 du chapitre I.

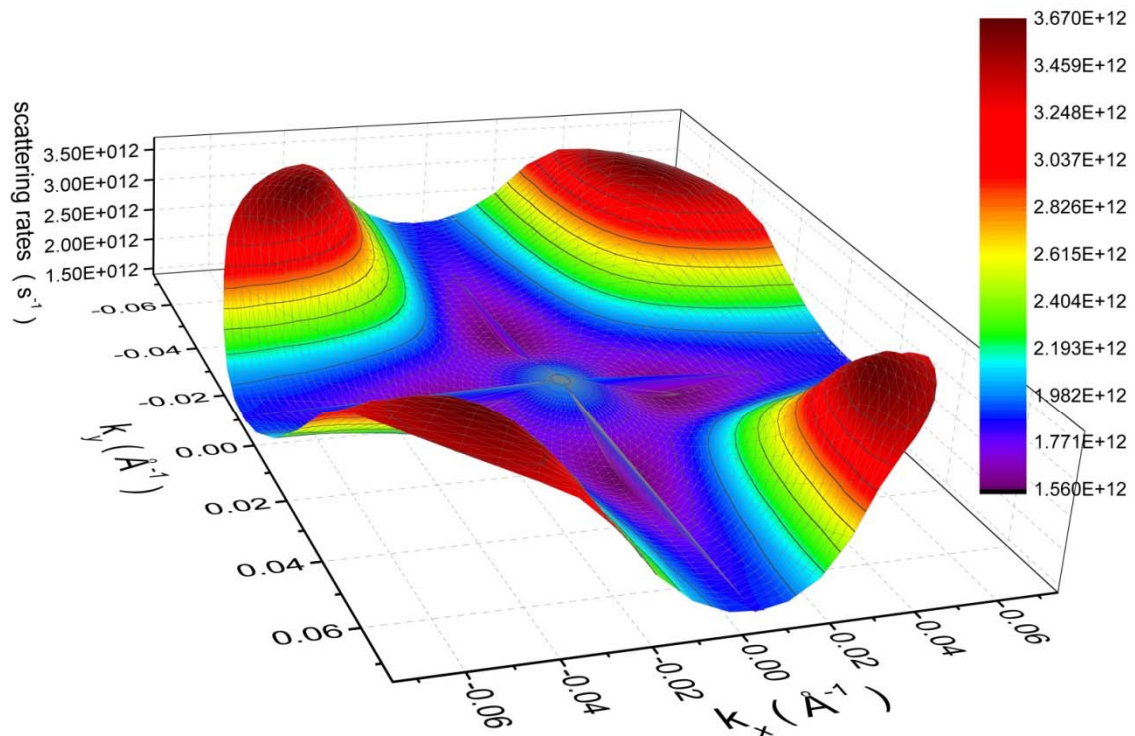


Figure 4.22: Effet de l'anisotropie sur le taux de diffusion intra-sous-bande des trous lourds avec absorption d'un phonon optique d'interface en fonction du vecteur d'onde initial \mathbf{k} dans le plan k_x - k_y

Chapitre IV Interaction des trous avec les phonons optiques polaires confinés et d'interfaces

La figure 4.23 montre le taux de diffusion intra-sous-bande des trous légers avec absorption d'un phonon optique d'interface en fonction du vecteur d'onde initial k dans le plan k_x - k_y . Nous constatons un comportement qualitativement analogue à celui des trous lourds, mais moins prononcé, cet effet est dû à la faible anisotropie de la sous-bande des trous légers comme il est illustré sur la fig. 1.7 du chapitre I.

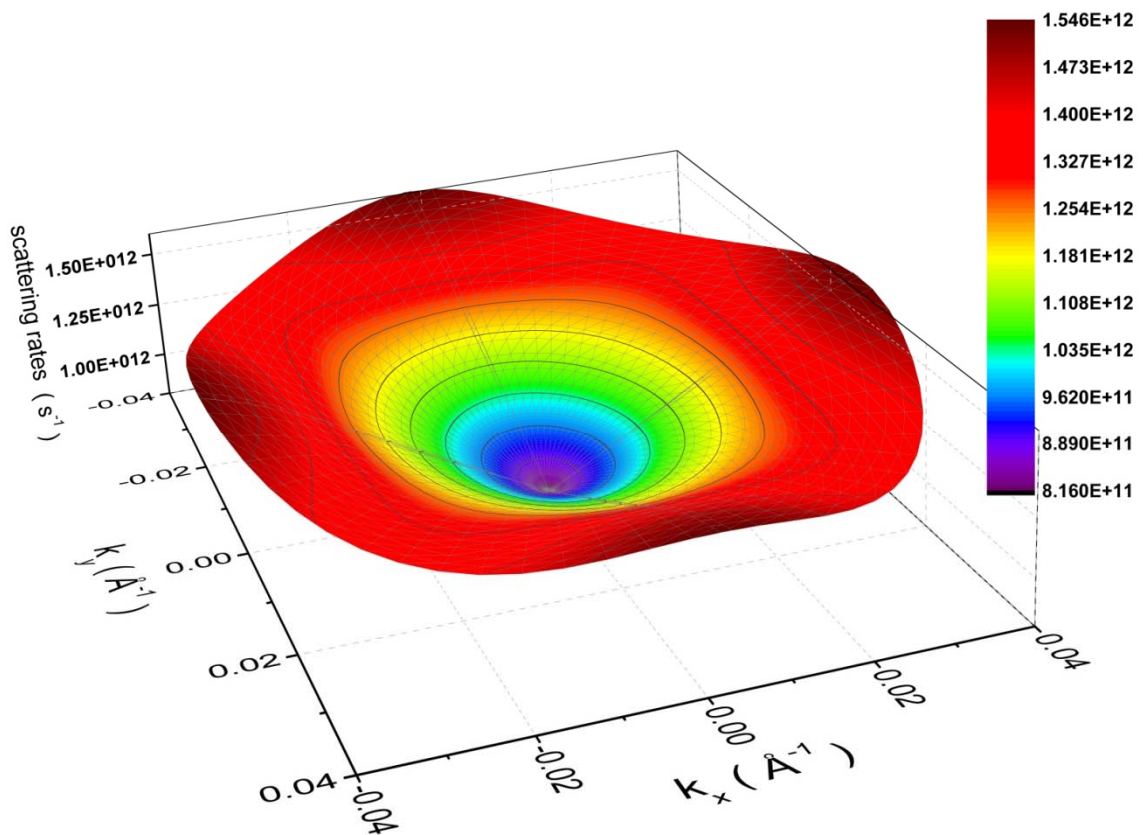


Figure 4.23 : Effet de l'anisotropie sur le taux de diffusion intra-sous-bande des trous légers avec absorption d'un phonon optique d'interface en fonction du vecteur d'onde initial k dans le plan k_x - k_y

IV. comparaison et discussion

La figure 4.24 montre une comparaison entre les taux de diffusion intra-sous-bandes des trous lourds et légers avec absorption d'un phonon optique polaire en utilisant deux modèles différents pour les phonons : 1- Le modèle massif d'une part et le modèle diélectrique du milieu continu. Pour ce dernier, nous tenons compte aussi bien des modes d'interface que confinés.

Nos résultats montrent que les taux de diffusion aussi bien des trous lourds que légers dans le modèle massif sont légèrement supérieurs à ceux du second modèle, la différence entre les deux résultats étant de l'ordre de 12 % .

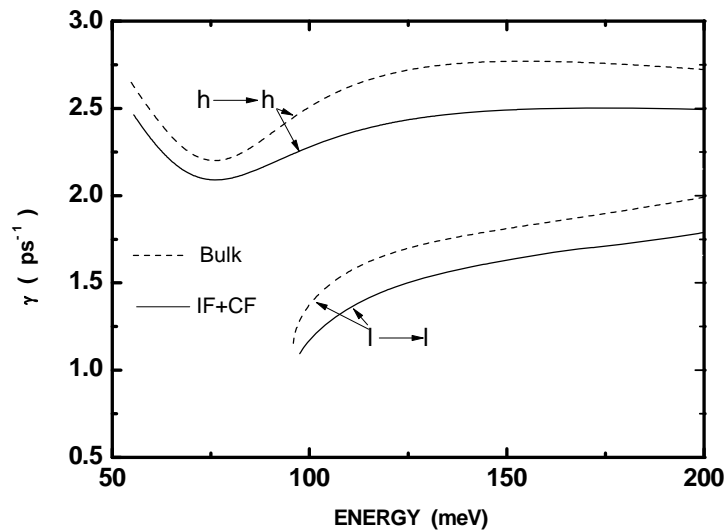


Figure 4.24: Taux de diffusion intra-sous-bandes des trous lourds et légers avec absorption d'un phonon optique en utilisant le modèle des phonons confinés plus d'interfaces (en utilisant le modèle massif des phonons optiques) en lignes continues (discontinues).

La figure 4.25 représente les mêmes taux de diffusions que celle de la figure 4.24, mais pour l'émission. La comparaison montre dans ce cas des différences de l'ordre 7 % pour les trous lourds et 10 % pour les légers.

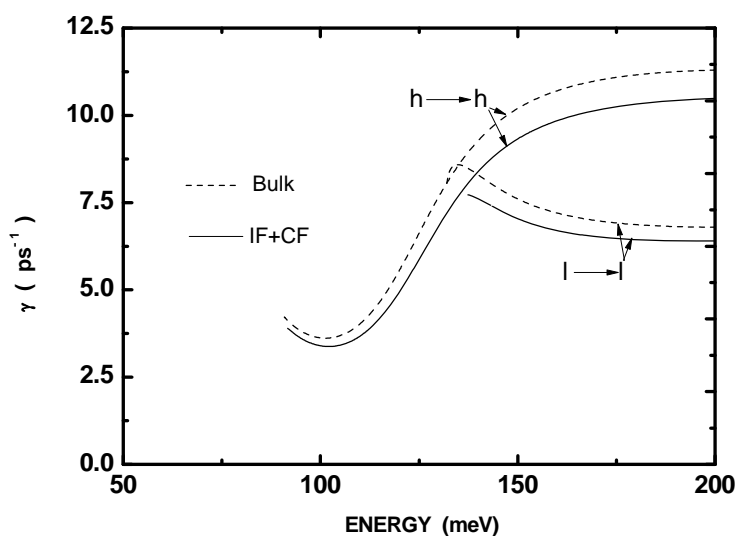


Figure 4.25: Taux de diffusion intra-sous-bandes des trous lourds et légers avec émission d'un phonon optique en utilisant le modèle des phonons confinés plus d'interfaces (en utilisant le modèle massif des phonons optiques) en ligne continue (discontinue).

Notre comparaison montre clairement que le modèle massif des phonons et celui dit diélectrique aboutissent à des résultats comparables mais pas identiques et ce malgré la faible largeur du puits.

Il est instructif de comparer les taux de diffusion dans un puits très mince obtenus dans ce travail à ceux du semiconducteur massif obtenus par Scholz [1] et ce pour se faire une idée de l'effet du confinement. Pour les trous lourds, dans le cas de l'absorption intra-sous bande et à basse énergie on a $\frac{\gamma_{H \rightarrow H}^{QW}}{\gamma_{H \rightarrow H}^{Bulk}} = 0,66$, tandis que pour l'émission ce rapport devient

$$\frac{\gamma_{H \rightarrow H}^{QW}}{\gamma_{H \rightarrow H}^{Bulk}} = 0,42 .$$

Pour les trous légers et toujours aux faibles énergies, dans le cas de l'absorption intra sous bande on a $\frac{\gamma_{L \rightarrow L}^{QW}}{\gamma_{L \rightarrow L}^{Bulk}} = 0,56$, tandis que pour l'émission ce rapport devient $\frac{\gamma_{L \rightarrow L}^{QW}}{\gamma_{L \rightarrow L}^{Bulk}} = 1,58$.

Aux hautes énergies, E de l'ordre 150 meV , pour les trous lourds, aussi bien pour l'émission que l'absorption le rapport est de $0,7$. Cependant, pour les trous légers dans le cas de l'absorption le rapport est toujours $0,7$, tandis que pour l'émission il est de $1,27$.

Chapitre IV Interaction des trous avec les phonons optiques polaires confinés et d'interfaces

En outre, A.M.T. Kim *et al.* [28] à partir des mesures expérimentalement avec la spectroscopie femtoseconde calculèrent les taux de diffusion inter-sous-bande entre la sous bande des trous lourds et celle des trous légers avec absorption d'un phonon optique polaire, dans un multi-puits GaAs/Al_{0.35}Ga_{0.65}As de 65 Å largeur de puits et 200 Å correspond à la largeur de la barrière. Ainsi, leurs résultats donne $\gamma_{HH \rightarrow LH} = 4,3 \times 10^{12} \text{ s}^{-1}$ pour une température T = 300 K, tandis que, pour T = 200 K ils trouvèrent $\gamma_{HH \rightarrow LH} = 2 \times 10^{12} \text{ s}^{-1}$. Afin qu'on puisse comparer avec ces résultats, nous avons calculé le taux de diffusion inter-sous-bande entre la sous bande des trous lourds et celle des trous légers avec absorption d'un phonon optique polaire (confiné+interface), dans un puits GaAs/Al_{0.35}Ga_{0.65}As de 65 Å largeur en fonction de la température et au voisinage de la zone de Brillouin montré sur la figure 4.26. Le taux de diffusion est une fonction croissante linéaire avec la température, partant de sa valeurs minimale $\gamma_{HH \rightarrow LH} = 0,27 \times 10^{12} \text{ s}^{-1}$ à T = 200 K, où il atteint sa valeur maximale $\gamma_{HH \rightarrow LH} = 0,64 \times 10^{12} \text{ s}^{-1}$ à T = 300 K, Cette augmentation est due à la croissance du nombre de phonon. En outre, la différence entre notre taux de diffusion et celui obtenu à partir des résultats expérimentales est due à l'interaction avec les impuretés et les phonons acoustiques, d'autre part la structure de la bande d'un puits quantique est différente de celle d'un multi-puits.

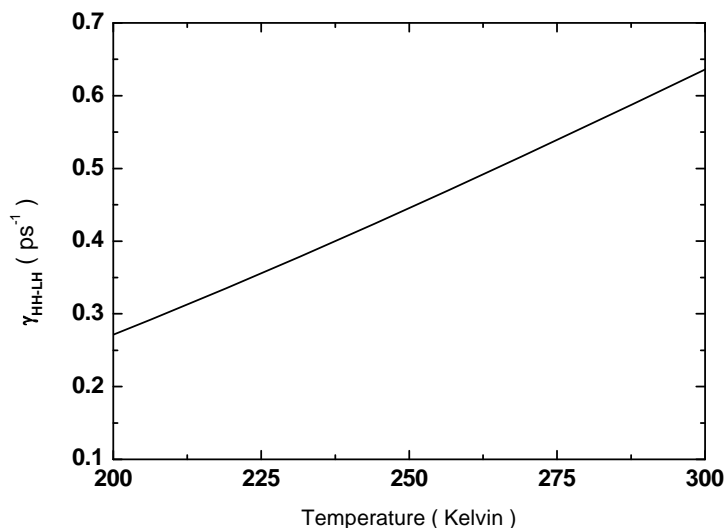


Figure 4.26: Taux de diffusion inter-sous-bandes entre la sous bande des trous lourds et légers avec absorption d'un phonon optique polaire (confiné+interface) en fonction de la température

V. Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons calculé les taux de diffusion intra-sous bandes des trous lourds et légers aussi bien avec absorption qu' émission d'un phonon confiné ou d'interface. Nos résultats montrent clairement que la variation du taux de diffusion avec l'énergie initiale du trou suit selon le cas les comportements de la densité d'états final et/ou la fonction de recouvrement. Nous avons également étudié l'effet de la largeur du puits sur les divers taux de diffusion. La dépendance sur la largeur du puits des taux de diffusion peut être expliquée de façon naturelle en étudiant les comportements de la densité d'états finale et la fonction de recouvrement en fonction de la largeur.

En outre, l'inclusion du warping donne lieu à des taux de diffusion fortement anisotropes et particulièrement pour trous lourds.

Pour les puits ultra-minces, la comparaison avec les résultats obtenus par d'autres auteurs pour le GaAs massif fait ressortir un effet très marqué du confinement.

Références

- [1] Yu, P. Y., & Cardona, M. (2005). *Fundamentals of semiconductors*. Springer.
- [2] Ridley, B. K. (2009). *Electrons and phonons in semiconductor multilayers* (Vol. 5). Cambridge University Press.
- [3] Tatham, M. C., Ryan, J. F., & Foxon, C. T. (1989). Time-resolved Raman measurements of intersubband relaxation in GaAs quantum wells. *Physical review letters*, 63(15), 1637.
- [4] Lin, S. D., Lee, H. C., Sun, K. W., & Lee, C. P. (2001). Investigation of electron–optical phonon interactions in moderate wide In_x Ga_{1-x} As/GaAs strained quantum wells. *Journal of luminescence*, 94, 761-766.
- [5] Sun, K. W., Wang, C. M., Chang, H. Y., Wang, S. Y., & Lee, C. P. (2000). Optical phonon emission in GaAs/AlAs and GaAs/Al_{0.7}Ga_{0.3}As multiple quantum well structures. *Journal of luminescence*, 92(1), 145-150.
- [6] Tsen, K. T. (1992). Picosecond time-resolved Raman studies of electron-optical phonon interactions in ultrathin GaAs-AlAs multiple quantum well structures. *Semiconductor Science and Technology*, 7(3B), B191.
- [7] Núñez, C. G. Braña, A. F., Pau, J. L., Ghita, D., García, B. J., Shen, G. Kung, P. (2014). Surface optical phonons in GaAs nanowires grown by Ga-assisted chemical beam epitaxy. *Journal of Applied Physics*, 115(3), 034307.
- [8] Adu, K. W., Xiong, Q., Gutierrez, H. R., Chen, G., & Eklund, P. C. (2006). Raman scattering as a probe of phonon confinement and surface optical modes in semiconducting nanowires. *Applied Physics A*, 85(3), 287-297.
- [9] Habinshuti, J., Kilian, O., Cristini-Robbe, O., Sashchiuk, A., Addad, A., Turrell, S., ... & Wirtz, L. (2013). Anomalous quantum confinement of the longitudinal optical phonon mode in PbSe quantum dots. *Physical Review B*, 88(11), 115313.
- [10] Tenne, D. A., Milekhin, A. G., Bakarov, A. K., Toropov, A. I., Zanelatto, G., Galzerani, J. C. Zahn, D. R. T. (2005). Interface phonons of quantum dots in InAs/(Al, Ga) As heteroepitaxial system: a Raman study. In *PHYSICS OF SEMICONDUCTORS: 27th International Conference on the Physics of Semiconductors-ICPS-27* (Vol. 772, No. 1, pp. 693-694). AIP Publishing.
- [11] Klein, M. V. (1986). Phonons in semiconductor superlattices. *IEEE journal of quantum electronics*, 22, 1760-1770.
- [12] Sood, A. K., Menendez, J., Cardona, M., & Ploog, K. (1985). Interface vibrational modes in GaAs-AlAs superlattices. *Physical review letters*, 54(19), 2115.
- [13] Sood, A. K., Menendez, J., Cardona, M., & Ploog, K. (1985). Resonance Raman scattering by confined LO and TO phonons in GaAs-AlAs superlattices. *Physical review letters*, 54(19), 2111.

Chapitre IV Interaction des trous avec les phonons optiques polaires confinés et d'interfaces

- [14] Gao, X., Botez, D., & Knezevic, I. (2008). Phonon confinement and electron transport in GaAs-based quantum cascade structures. *Journal of Applied Physics*, 103(7), 073101.
- [15] Lee, H. C., Sun, K. W., & Lee, C. P. (2002). Structure effects on electron-optical phonon interaction in GaAs/Al_xGa_{1-x}As quantum wells. *Journal of applied physics*, 92(1), 268-273.
- [16] Sun, J. P., Teng, H. B., Haddad, G. I., & Stroscio, M. A. (1998). Electron-interface phonon interaction in multiple quantum well structures. *Semiconductor science and technology*, 13(8A), A147.
- [17] Teng, H. B., Sun, J. P., Haddad, G. I., Stroscio, M. A., Yu, S., & Kim, K. W. (1998). Phonon assisted intersubband transitions in step quantum well structures. *Journal of applied physics*, 84(4), 2155-2164.
- [18] Požela, J., Požela, K., & Jucienė, V. (2007). Scattering of electrons by confined interface polar optical phonons in a double-barrier heterostructure. *Semiconductors*, 41(9), 1074-1079.
- [19] Požela, J., Požela, K., Jucienė, V., Sužiedėlis, A., Shkolnik, A. S., Mikhrin, S. S., & Mikhrin, V. S. (2009). Interaction of electrons with optical phonons localized in a quantum well. *Semiconductors*, 43(12), 1590-1596.
- [20] Comas, F., Camps, I., Marques, G. E., & Studart, N. (2007). Confined polar optical phonons in semiconductor double heterostructures: an improved continuum approach. *Semiconductor science and technology*, 22(3), 229.
- [21] Požela, K., Šilėnas, A., Požela, J., Jucienė, V., Galiev, G. B., Vasil'evskii, J. S., & Klimov, E. A. (2012). Effects of phonon confinement on high-electric field electron transport in an InGaAs/InAlAs quantum well with an inserted InAs barrier. *Applied Physics A*, 109(1), 233-237.
- [22] Mori, N., & Ando, T. (1989). Electron–optical-phonon interaction in single and double heterostructures. *Physical Review B*, 40(9), 6175.
- [23] Kittel, C (1963). *Quantum theory of solids* (Vol. 33). New York: Wiley.
- [24] Wu, B. H., Cao, J. C., Xia, G. Q., & Liu, H. C. (2003). Interface phonon assisted transition in double quantum well. *The European Physical Journal B-Condensed Matter and Complex Systems*, 33(1), 9-14.
- [25] Bennett, C. R., Amato, M. A., Zakhleniuk, N. A., Ridley, B. K., & Babiker, M. (1998). Effects of a monolayer on the electron-phonon scattering rates in a quantum well: Dielectric continuum versus hybrid model. *Journal of applied physics*, 83(3), 1499-1506.
- [26] Wang, X. F., da Cunha Lima, I. C., Troper, A., & Lei, X. L. (1999). Analysis of the scattering of electrons by special vibrational modes in a GaAs quantum well with a thin AlAs middle barrier: Mobility modulated by a transversal electric field. *Journal of applied physics*, 85(9), 6598-6605.

Chapitre IV Interaction des trous avec les phonons optiques polaires confinés et d'interfaces

[27] Scholz, R. (1995). Hole–phonon scattering rates in gallium arsenide. *Journal of applied physics*, 77(7), 3219-3231.

[28] Kim, A. M. T., Hunsche, S., Dekorsy, T., Kurz, H., & Kohler, K. (1996, June). Intervalence band thermalization in a GaAs quantum well. In *Quantum Electronics and Laser Science Conference, 1996. QELS'96., Summaries of Papers Presented at the* (pp. 175-176). IEEE.

CHAPITRE V

*Temps de
relaxation de
l'impulsion des
trous lourds dus
aux phonons
optiques polaires*

Chapitre V Temps de relaxation de l'impulsion des trous lourds dus aux phonons optiques polaires

Dans ce chapitre, en utilisant le modèle du milieu diélectrique continu pour les phonons et en résolvant l'équation de Boltzmann, nous calculons le temps de relaxation intra sous bandes lié à l'impulsion des trous lourds et légers avec absorption d'un phonon confiné. Ce même calcul est ensuite refait dans le cas des modes d'interface.

I. Introduction

La relaxation des porteurs de charge est un sujet de recherche important dans le domaine de la physique des semiconducteurs [1-20]. Ceci est dû par exemple à son lien avec la mobilité dans les problèmes de transport électronique ou encore son rôle incontournable dans le fonctionnement des lasers, tels que ceux à cascades quantiques où les temps de relaxation déterminent la dynamique des dispositifs et décident donc s'il seront opérationnel.

Le calcul du temps de relaxation est un problème avec une longue histoire derrière, par exemple Fröhlich [21] dans un article célèbre fût le premier à le calculer pour les électrons en considérant l'interaction de ces derniers avec les phonons optiques polaires dans les cristaux ioniques. Plus récemment, B. K. Ridley [22] calcula pour les électrons le temps de relaxation des impulsions en résolvant l'équation de Boltzmann. Il en déduisit les mobilités électroniques dans le *GaN* massif et ses résultats montrent une augmentation de la mobilité avec l'augmentation de la densité des électrons. D'un autre côté Anderson et *al.* [23] étudièrent à leur tour le temps de relaxation lié à l'impulsion et la mobilité des électrons dans le puits *GaN/AlN* et trouvèrent que le temps de relaxation augmente avec l'augmentation de la largeur du puits, tandis que ce même temps décroît avec l'augmentation de la température. D'autre part, le comportement de la mobilité suit presque la variation du temps de relaxation. R. Rhyner et M. Luisier [24] utilisèrent quant à eux deux méthodes pour calculer ces mêmes temps de relaxation ainsi que les mobilités des électrons et trous dans le *Si* massif. La première méthode est le transport quantique dans le cadre du formalisme de la fonction de Green, tandis que la deuxième méthode consiste à résoudre exactement l'équation de Boltzmann. Les résultats de leur étude montrent clairement que la dernière méthode est plus précise. Enfin, E. G. Marin et *al.* [25] montrèrent dans leurs études du temps de relaxation des impulsions et la mobilité des électrons dans les nanofils *InAs-Al₂O₃* et *Si/SiO₂* que pour trouver un bon accord avec les résultats expérimentaux, la résolution exacte de l'équation de Boltzmann est nécessaire.

II. Temps de relaxation de l'impulsion des trous avec les phonons optiques polaires confinés

II. a Traitement analytique général

Le nombre d'états occupé dans un volume dV_{k_i} et dV_{k_f} dans l'espace réciproque est donné respectivement par [26]

$f(r, k_i) \frac{dV_{k_i}}{(2\pi)^3}$, $f(r, k_f) \frac{dV_{k_f}}{(2\pi)^3}$. Cependant le nombre d'états vide dans ces mêmes volumes s'écrit comme suit

$(1 - f(r, k_i)) \frac{dV_{k_i}}{(2\pi)^3}$, $(1 - f(r, k_f)) \frac{dV_{k_f}}{(2\pi)^3}$ où $f(r, k_i)$ représente la fonction de distribution hors d'équilibre des états occupés.

Ainsi la variation des états occupés dans un volume dV_{k_i} dans un temps dt est donnée par [26]

$$-dt \left\{ w(k_i, k_f) f(r, k_i) \frac{dV_{k_i}}{(2\pi)^3} (1 - f(r, k_f)) \frac{dV_{k_f}}{(2\pi)^3} \right\} + dt \left\{ w(k_f, k_i) f(r, k_f) \frac{dV_{k_f}}{(2\pi)^3} (1 - f(r, k_i)) \frac{dV_{k_i}}{(2\pi)^3} \right\} \quad (5.1)$$

où $w(k_i, k_f)$ est la probabilité par seconde de transition d'un état de vecteur d'onde k_i vers un états final k_f . Dans l'eq. (5.1) le premier terme représente la diminution des états occupés dans le volume dV_{k_i} dus à la transition des électrons de dV_{k_i} vers dV_{k_f} , tandis que le deuxième terme correspond à la transition inverse des électrons de dV_{k_f} vers dV_{k_i} .

Ainsi le nombre total de variation des états dans un intervalle de temps dt dû à l'interaction avec les phonons s'écrit comme suit [26]

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right) \frac{dV_{k_i}}{(2\pi)^3} dt = - \frac{dV_{k_i}}{(2\pi)^3} dt \left\{ w(k_i, k_f) f(r, k_i) (1 - f(r, k_f)) \frac{dV_{k_f}}{(2\pi)^3} \right\} + dt \left\{ w(k_f, k_i) f(r, k_f) \frac{dV_{k_f}}{(2\pi)^3} (1 - f(r, k_i)) \right\} \quad (5.2)$$

La fonction de distribution $f(r, k)$ peut être développée au premier ordre comme suit

$$f(r, k) = f^0(r, k) + f^1(r, k) \quad (5.3)$$

où f^0 est la fonction de distribution à l'équilibre

La condition d'équilibre détaillé s'écrit

Chapitre V Temps de relaxation de l'impulsion des trous lourds dus aux phonons optiques polaires

$$w(k_i, k_f) f(r, k_i) (1 - f(r, k_f)) = w(k_f, k_i) f(r, k_f) (1 - f(r, k_i)) \quad (5.4)$$

En remplaçant les équations (5.3) et (5.4) dans l'équation (5.2) et après des simplifications et intégration sur les états finals on obtient

$$-\frac{f - f_0}{\tau} = \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right) = \int w(k_i, k_f) [f^1(r, k_f) - f^1(r, k_i)] \frac{dV_{k_f}}{(2\pi)^3} \quad (5.5)$$

où τ est le temps relaxation d'impulsion des électrons quant à $f^1(r, k)$ elle peut s'écrire au voisinage de k comme suit [26]

$$f^1(k) = -\frac{df^0(k)}{dE} \vec{v}(k) \cdot \vec{F} \tau(k) \quad (5.6)$$

avec $v(k)$ est la vitesse des électrons et \vec{F} est la force appliquée sur l'électron.

En remplaçant l'Eq. (5.6) dans (5.5) on obtient

$$\frac{1}{\tau(k_i)} = \int w(k_i, k_f) \left(1 - \frac{v(k_f) \tau(k_f) \cos(\varphi)}{v(k_i) \tau(k_i)} \right) \frac{dV_{k_f}}{(2\pi)^3} \quad (5.7)$$

où φ est l'angle entre le vecteur initial k_i et final k_f .

La formule de l'équation (5.5) est valable pour le cas massif, tandis que le cas d'un puits

quantique on remplace $\frac{dV_{k_f}}{(2\pi)^3}$ par $\frac{dS_{k_f}}{(2\pi)^2}$ ainsi on obtient

$$\frac{1}{\tau(k_i)} = \int w(k_i, k_f) \left(1 - \frac{v(k_f) \tau(k_f) \cos(\varphi)}{v(k_i) \tau(k_i)} \right) \frac{dS_{k_f}}{(2\pi)^2} \quad (5.8)$$

Chapitre V Temps de relaxation de l'impulsion des trous lourds dus aux phonons optiques polaires

L'équation (5.8) dans le cadre de l'approximation élastique peut s'écrire comme suit

$$\frac{1}{\tau(k_i)} = \int w(k_i, k_f) (1 - \cos(\varphi)) \frac{dS_{k_f}}{(2\pi)^2} \quad (5.9)$$

L'équation (5.8) dans le cas inélastique peut s'écrire comme suit

$$\frac{1}{\tau(k_i)} = \sum_{k_{f1}} w(k_i, k_{f1}) \left(1 - \frac{v(k_{f1})\tau(k_{f1})\cos(\varphi)}{v(k_i)\tau(k_i)}\right) + \sum_{k_{f2}} w(k_i, k_{f2}) \left(1 - \frac{v(k_{f2})\tau(k_{f2})\cos(\varphi)}{v(k_i)\tau(k_i)}\right) \quad (5.10)$$

Dans l'équation (5.10) la sommation est sur tous les états finals possibles avec absorption ou émission d'un phonon optique ainsi on a deux états possible k_{f1} et k_{f2} comme illustrés sur la figure 5.1 où la différence en énergie entre deux zones consécutives est l'énergie d'un phonon optique. Le premier terme de l'équation (5.10) correspond l'émission d'un phonon pour un trou de vecteur d'onde initial k_i , tandis que le deuxième terme est pour l'absorption d'un phonon. En premier lieu, pour comprendre et expliquer nos résultats, nous allons négliger le premier terme et calculer le deuxième terme qui correspond à l'absorption où on obtient dans ce cas l'équation suivante :

$$\frac{1}{\tau(k_i)} = \sum_{k_{f2}} w(k_i, k_{f2}) \left(1 - \frac{v(k_{f2})\tau(k_{f2})\cos(\varphi)}{v(k_i)\tau(k_i)}\right) \quad (5.11)$$

L'équation (5.11) peut être s'écrire numériquement comme suit :

$$A(k_i, k_f) \tau(k_i) = 1 + B(k_i, k_f) \tau(k_f) \quad (5.12)$$

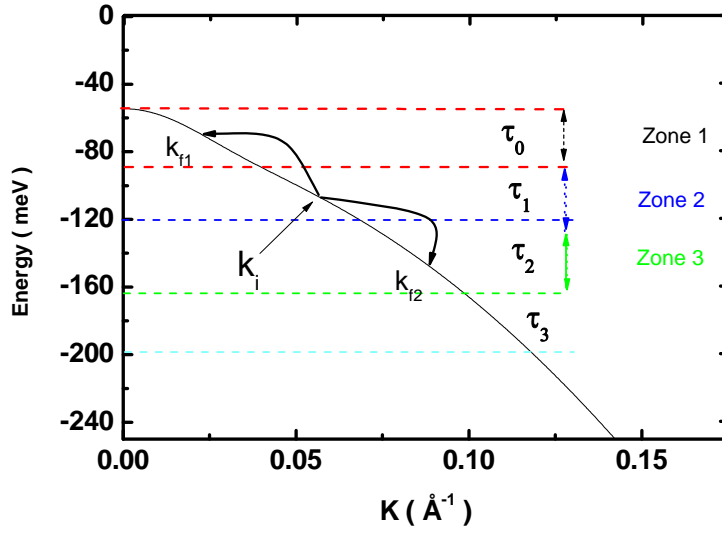


Figure 5.1 : Structure de la bande valence des trous lourds pour un puits de largeur 25 Å avec les divers états possibles de transition d'un trou de vecteur d'onde initial k_i

Pour calculer le taux de relaxation $\tau(k_i)$ à partir de l'équation (5.12) on doit ajouter une autre équation du taux $\tau(k_f)$ ainsi on obtient un système d'équations de n équations avec $n+1$ inconnues [27]

$$\begin{aligned}
 A_1 \tau_1(k_i) &= 1 + B_1 \tau_2(k_f) \\
 A_2 \tau_2(k_i) &= 1 + B_2 \tau_3(k_f) \\
 A_3 \tau_3(k_i) &= 1 + B_3 \tau_4(k_f) \quad (5.13) \\
 &\dots\dots\dots \\
 A_n \tau_n(k_i) &= 1 + B_n \tau_{n+1}(k_f)
 \end{aligned}$$

Pour les hautes énergies à cause de la faible variation de la densité d'états et la fonction de recouvrement avec l'énergie on a $\tau_n(k_i) = \tau_{n+1}(k_f)$ par conséquent on peut calculer $\tau_n(k_i)$ et le remplacer dans l'équation $n-1$ pour calculer $\tau_{n-1}(k_i)$ jusqu'à déterminer $\tau_1(k_i)$ avec récurrence.

II.b Résultats numériques

Dans cette partie, nous exposons nos résultats numériques obtenus dans le cadre de la résolution du système d'équations défini par les Eqs. (5.13). Nous discutons et analysons en détail la dépendance en énergie du temps de relaxation des impulsions dans le cas de l'absorption et l'émission d'un phonon confiné.

II.b.1 Temps de relaxation avec absorption d'un phonon

La figure 5.2 montre nos résultats du temps de relaxation des impulsions intra-sous-bande des trous lourds avec absorption d'un phonon confiné pour un puits de largeur 25 Å. On remarque qu'à faible énergie, le temps de relaxation augmente presque linéairement avec l'énergie. Partant de sa valeur minimale $\tau_{H \rightarrow H} = 4,12 \times 10^{-12} \text{ s}$ à $E = 55,46 \text{ meV}$ il augmente très rapidement pour atteindre la valeur $52,88 \times 10^{-12} \text{ s}$ à $E = 111,32 \text{ meV}$, au delà de cette énergie, la variation du temps de relaxation devient faible et la valeur de ce dernier se stabilise presque à $\tau_{H \rightarrow H} = 45,11 \times 10^{-12} \text{ s}$.

Le comportement du temps de relaxation s'explique comme étant dû à l'augmentation rapide de la densité d'états finale pour les faibles énergies par rapport aux variations des contributions au recouvrement dans l'état propre HH du puits provenant des bandes HH, LH et SP (voir fig. 5.3 et 5.4). D'autre part, au delà de l'énergie $E = 111,32 \text{ meV}$, la diminution s'explique par l'effet combiné de la décroissance de la probabilité de l'état HH accompagnée par la quasi constance de la densité d'états. Pour les hautes énergies ces deux derniers sont presque constants, par conséquent, on a un temps de relaxation pratiquement constant pour ce domaine d'énergie.

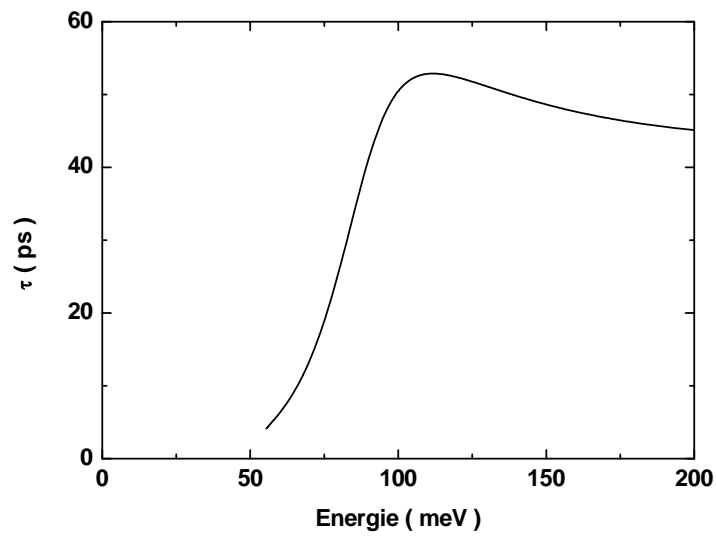


Figure 5.2 : Temps de relaxation intra-sous-bande des trous lourds avec absorption d'un phonon optique confiné

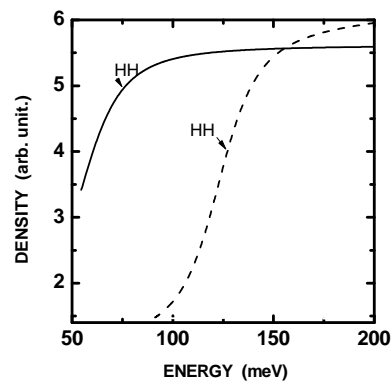


Figure 5.3: Densité d'états finale des trous lourds avec absorption (émission) d'un phonon optique confiné en ligne continue (discontinue).

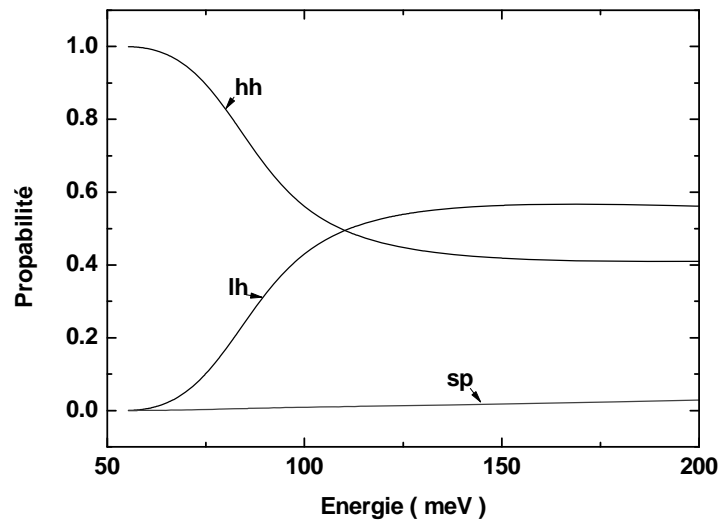


Figure 5.4 : Les contributions au recouvrement dans l'état propre HH du puits provenant des bandes HH, LH et SP.

II.b.2 Temps de relaxation avec émission d'un phonon

Pour le cas d'émission d'un phonon confiné, nous allons négliger le deuxième terme de l'équation (5.10) ainsi on obtient :

$$\frac{1}{\tau(k_i)} = \sum_{k_{f1}} w(k_i, k_{f1}) \left(1 - \frac{v(k_{f1})\tau(k_{f1})\cos(\varphi)}{v(k_i)\tau(k_i)} \right) \quad (5.14)$$

L'équation (5.14) peut s'écrire numériquement

$$A(k_i, k_f) \tau_1(k_i) = 1 + B(k_i, k_f) \tau_0(k_f) \quad (5.15)$$

Les trous qui se trouvent dans la zone 1 possèdent un temps de relaxation avec émission d'un phonon $\tau_0 = 0$ par ce qu'il n'y a pas des états dans le gap pour ces types de transitions (voir Fig. 5.1). Ainsi, on peut obtenir le temps de relaxation de l'impulsion pour les trous existant dans la zone 2 par une seule équation :

Chapitre V Temps de relaxation de l'impulsion des trous lourds dus aux phonons optiques polaires

$$\tau_1(k_i) = \frac{1}{A(k_i, k_f)} \quad (5.16)$$

En outre, si on cherche le temps de relaxation de l'impulsion des trous qui se trouvent dans la zone 3 on a l'équation suivante :

$$A_1(k_i, k_f) \tau_2(k_i) = 1 + B_1(k_i, k_f) \tau_1(k_f) \quad (5.17)$$

donc à partir des équations (5.16-17) on obtient

$$\tau_2(k_i) = \frac{1}{A_1(k_i, k_f)} + \frac{B_1(k_i, k_f)}{A_1(k_i, k_f)} \tau_1(k_f) \quad (5.18)$$

avec le temps de relaxation $\tau_1(k_f)$ est donné par l'équation (5.16) de la même façon on peut obtenir le temps de relaxation dans la quatrième zone et qui s'écrit comme suit

$$\tau_3(k_i) = \frac{1}{A_2(k_i, k_f)} + \frac{B_2(k_i, k_f)}{A_2(k_i, k_f)} \tau_2(k_f) \quad (5.19)$$

La figure 5.5 montre le temps de relaxation intra-sous-bande pour les trous lourds avec émission d'un phonon confiné. On remarque que le temps de relaxation, partant d'une valeur $\tau_{H \rightarrow H} = 1,19 \times 10^{-12}$ s à une énergie 90,97 meV augmente de façon monotone avec cette dernière jusqu'à une énergie 103,22 meV où il atteint sa valeur maximale de $1,3 \times 10^{-12}$ s. Au delà il diminue rapidement jusqu'à 126,76 meV avec un temps $0,87 \times 10^{-12}$ s. Au delà, le temps change brusquement en atteignant la valeur $1,45 \times 10^{-12}$ s où il augmente faiblement jusqu'à l'énergie 139,15 meV, ensuite il diminue rapidement avec l'énergie pour atteindre la valeur $1,26 \times 10^{-12}$ s. En général la courbe est caractérisée par un ensemble de sauts dont l'intervalle des énergies est égale à l'énergie du phonon confiné. En outre, le temps dans chaque domaine d'énergie est caractérisé par une croissance puis une décroissance.

Chapitre V Temps de relaxation de l'impulsion des trous lourds dus aux phonons optiques polaires

Pour les faibles énergies, et dans le premier domaine d'énergie (voir Fig 5.5) c'est à dire dans la deuxième zone (voir Fig 5.1) le temps de relaxation prend une forme simple (voir l'eq.5.16).

Ainsi son comportement peut s'expliquer comme suit : A cause de la variation rapide de la densité d'états finale par rapport aux contributions au recouvrement dans l'état propre HH (voir figs. 5.3, 5.4), pour les faibles énergies, le temps de relaxation suit le comportement de celle-ci, tandis que pour des énergies supérieurs à 103,22 meV et dans le premier domaine, il diminue à cause de la décroissance des contributions au recouvrement dans l'état propre HH.

Cependant, lorsque les énergies des trous augmentent et entrent dans le deuxième domaine d'énergie (voir Fig. 5.5), c'est à dire dans la troisième zone (voir Fig 5.1) . Le temps de relaxation en plus de sa dépendance avec la densité d'états finale et la contribution aux recouvrement, il dépend aussi du premier temps de relaxation (voir l'Eq. 5.18) avec le facteur

$$\frac{B_1(k_i, k_f)}{A_1(k_i, k_f)} > 1 \quad (5.20)$$

Ce qui explique le saut du temps de relaxation lorsqu'on passe de la deuxième zone vers la troisième zone . Par conséquent , ce dernier suit le comportement du premier temps, tandis que, sa croissance ainsi que sa décroissance est moins importante, à cause de la faible augmentation de la densité d'états et la stabilité de la contribution aux recouvrements. Cependant, pour les hautes énergies les temps de relaxation commence à se stabiliser à cause la faible variation de la densité d'états ainsi que la contribution aux recouvrement (voir figs. 5.3,5.4)

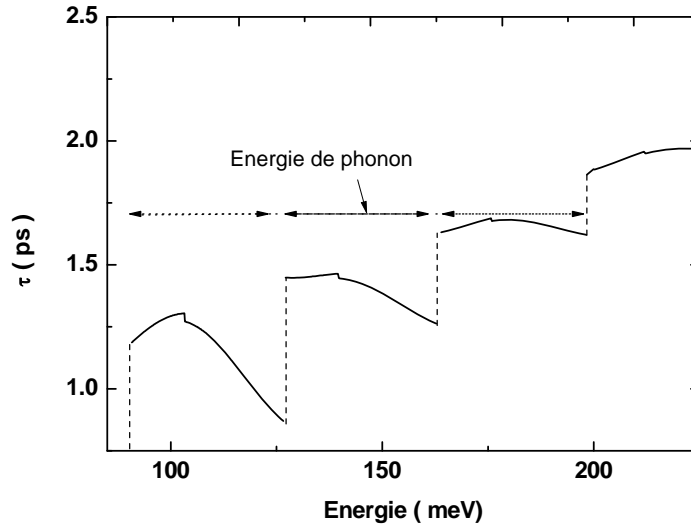


Figure 5.5 : Temps de relaxation intra-sous-bande des trous lourds avec émission d'un phonon optique confiné

III. Temps relaxation de l'impulsion des trous avec les phonons optiques d'interfaces

III. 1 Traitement analytique général

Le temps de relaxation dû à l'interaction avec les phonons optiques d'interface se calcule de la même façon que celui des phonons optiques confinés par l'équation (5.8)

$$\frac{1}{\tau(k_i)} = \int w(k_i, k_f) \left(1 - \frac{v(k_f)\tau(k_f)\cos(\varphi)}{v(k_i)\tau(k_i)} \right) \frac{dS_{k_f}}{(2\pi)^2} \quad (5.21)$$

où $w(k_i, k_f)$ représente la probabilité par seconde de transition d'un état de vecteurs d'onde k_i vers un état final k_f avec absorption ou émission d'un phonon d'interface.

III.2 Résultats numériques

Dans cette partie, nous exposons nos résultats numériques obtenus à partir de la résolution du système d'équations défini par les Eqs. (5.13). Nous analysons en détail la

dépendance en énergie du temps de relaxation des impulsions dans le cas de l'absorption et l'émission d'un phonon d'interface.

III.2.1 Temps de relaxation avec absorption d'un phonon

Nous montrons dans la figure 5.6 nos résultats du temps de relaxation des impulsions intra-sous-bande des trous lourds avec absorption d'un phonon d'interface. On remarque que le temps de relaxation augmente presque linéairement avec l'énergie. Partant de sa valeur minimale $\tau_{H \rightarrow H} = 3,9 \times 10^{-9} s$ à $E = 53,89 meV$ il augmente rapidement pour atteindre la valeur $20,44 \times 10^{-9} s$ à $E = 110,24 meV$, au delà de cette énergie, la variation du temps de relaxation devient très faible et la valeur de ce dernier se stabilise presque à $\tau_{H \rightarrow H} = 20,9 \times 10^{-9} s$.

Le comportement du temps de relaxation s'explique comme étant dû à l'augmentation rapide de la densité d'états finale aux faibles énergies par rapport aux variations de la contribution aux recouvrement (voir figs. 5.7, 5.8). Aux hautes énergies, à cause de la faible variation de la densité et la contribution aux recouvrement, on obtient un temps de relaxation quasiment constant.

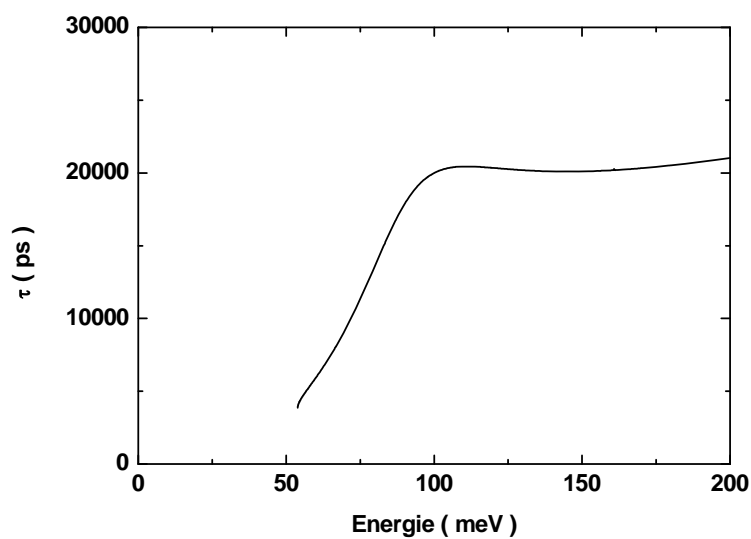


Figure 5.6 : Temps de relaxation intra-sous-bande des trous lourds avec absorption d'un phonon d'interface

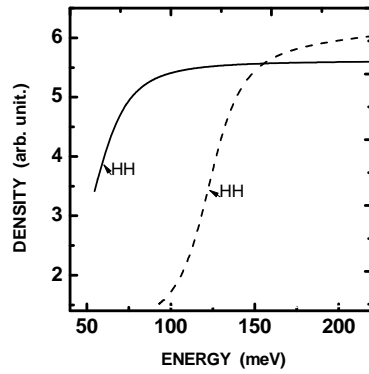


Figure 5.7: Densité d'états finale des trous lourds avec absorption (émission) d'un phonon en ligne continue (discontinue).

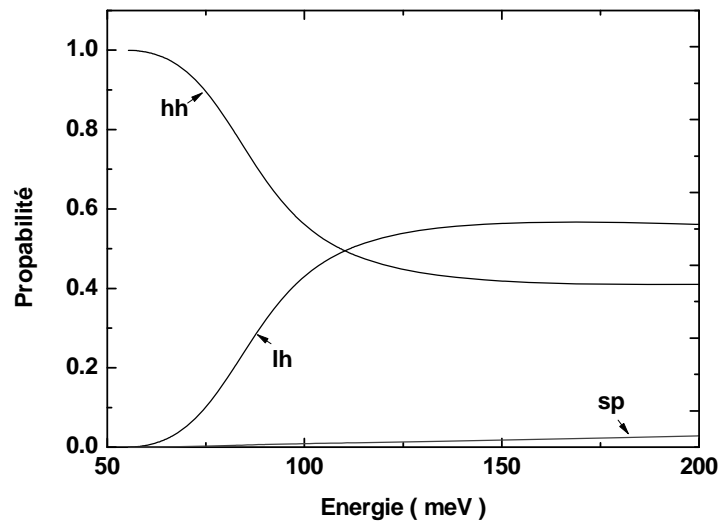


Figure 5.8 : Les contributions au recouvrement dans l'état propre HH du puits provenant des bandes HH, LH et SP.

III.2.2 Temps de relaxation avec émission d'un phonon

La figure 5.9 représente pour les trous lourds le temps de relaxation intra-sous-bande lié à l'impulsion avec émission d'un phonon. On remarque que le temps est une fonction croissante partant de sa valeur minimale $\tau_{H \rightarrow H} = 0,16 \times 10^{-9} s$ à $E = 90,61 meV$ jusqu'à $0,2 \times 10^{-9} s$ à $E = 101,78 meV$. Ceci est dû à l'augmentation rapide de la densité d'états finale par rapport à la contribution aux recouvrement aux faibles énergies (voir figs. 5.7, 5.8), au delà il diminue rapidement pour atteindre sa valeur minimale $0,98 \times 10^{-10} s$ à $E = 127,12 meV$, à cause de la chute rapide de la contribution aux recouvrements. Ensuite, lorsque l'énergie initial du trou augmente et entre dans la troisième zone (voir fig 5.1) le temps change brusquement en atteignant la valeur $2,12 \times 10^{-10} s$. où la variation devient faible, suivie par une diminution rapide à cause de sa dépendance avec le temps précédent de la même manière comme expliqué dans le cas de l'émission d'un phonon confiné (voir l'eq. 5.18) et (voir fig. 5.5)

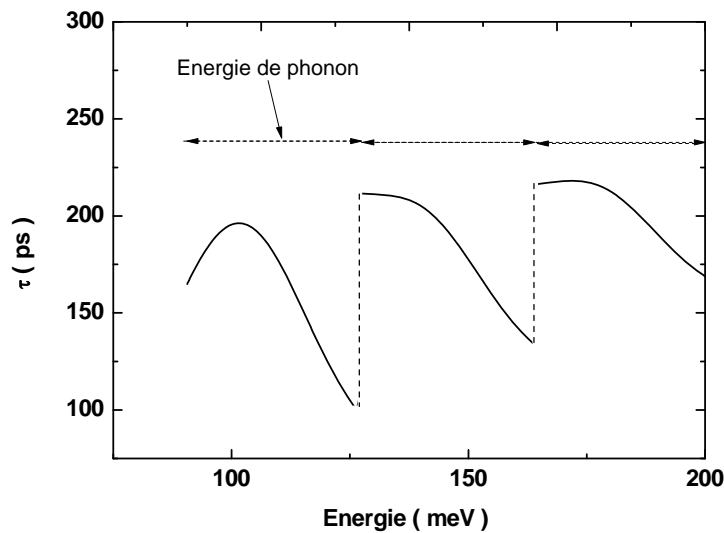


Figure 5.9 : Temps de relaxation intra-sous-bande des trous lourds avec émission d'un phonon d'interface

Chapitre V Temps de relaxation de l'impulsion des trous lourds dus aux phonons optiques polaires

Pour déterminer le temps de relaxation de l'impulsion intra-sous-bande des trous lourds avec émission et absorption d'un phonon confiné ou d'interface, nous utilisons l'équation (5.10), et la sommation se fait sur tous les états possibles finals avec absorption ou émission d'un phonon confiné ou interface. La figure 5.10 représente ce temps de relaxation total. On remarque que le temps de relaxation augmente linéairement jusqu'à $1,27 \times 10^{-12} s$ à $E = 102,14 meV$ qui est dû l'augmentation rapide de la densité d'états ensuite diminue rapidement avec l'énergie pour atteindre sa valeur minimale $0,85 \times 10^{-12} s$ à $E = 126,7 meV$ à cause de la chute de la contribution aux recouvrement dans l'état propre HH. En outre, le temps de relaxation continue son augmentation avec un ensemble de sauts comme déjà expliqué dans les figures (5.5,5.9)

Les valeurs du temps de relaxation varient entre $0,67 ps$ pour les faibles énergies et $1,88 ps$ pour les hautes énergies. En comparant nos résultats avec ceux obtenus expérimentalement par K. Fletcher et P. N. Butcher [28] dans leur étude sur la mobilité et le temps de relaxation des impulsions des électrons dans le *GaAs* massif et qui ont trouvé des valeurs $0,8 ps$ pour les faibles énergies au voisinage du centre de zone de Brillouin et $0,5 ps$ aux hautes énergies on constate que nos valeurs sont du même ordre de grandeur.

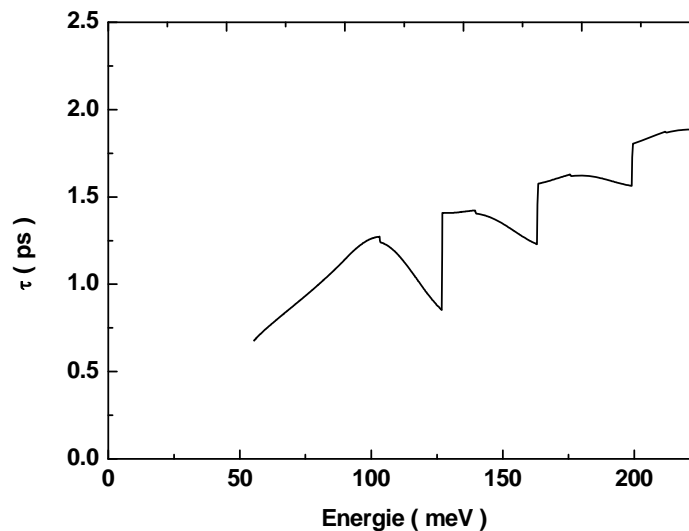


Figure 5.10 : Temps de relaxation totale intra-sous-bande des trous lourds avec émission et absorption d'un phonon confiné ou interface

IV. Conclusion

Dans ce chapitre nous avons calculé numériquement les temps intra-sous bande de relaxation des impulsions des trous lourds avec absorption d'un phonon confiné ou d'interface. Notre calcul consiste à résoudre l'équation de Boltzmann et nos résultats montrent que la variation du temps de relaxation avec l'énergie initiale du trou suit selon le cas les comportements de la densité d'états final et/ou la contribution aux recouvrement. En outre, dans le cas d'émission d'un phonon confiné ou d'interface la courbe du temps de relaxation est caractérisée par un ensemble de sauts dont l'intervalle des énergies est égale à l'énergie du phonon.

Références

- [1] Bhardwaj, S., Rajan, S., & Volakis, J. L. (2016). Analysis of plasma-modes of a gated bilayer system in high electron mobility transistors. *Journal of Applied Physics*, 119(19), 193102.
- [2] Lü, X., Schrottke, L., & Grahn, H. T. (2016). Fourier-transform-based model for carrier transport in semiconductor heterostructures: Longitudinal optical phonon scattering. *Journal of Applied Physics*, 119(21), 214302.
- [3] Ullah, S., Gusev, G. M., Bakarov, A. K., & Hernandez, F. G. G. (2016). Long-lived nanosecond spin coherence in high-mobility 2DEGs confined in double and triple quantum wells. *Journal of Applied Physics*, 119(21), 215701.
- [4] Chang, P., Liu, X., Zeng, L., & Du, G. (2015). Hole mobility in InSb-based devices: Dependence on surface orientation, body thickness, and strain. *Solid-State Electronics*, 113, 68-72.
- [5] Gonzalez-Medina, J. M., Ruiz, F. G., Marin, E. G., Godoy, A., & Gámiz, F. (2015). Simulation study of the electron mobility in few-layer MoS₂ metal–insulator–semiconductor field-effect transistors. *Solid-State Electronics*, 114, 30-34.
- [6] Atmaca, G., Ardali, S., Narin, P., Kutlu, E., Lisesivdin, S. B., Malin, T., ... & Tiras, E. (2016). Energy relaxation of hot electrons by LO phonon emission in AlGa_N/Al_N/Ga_N heterostructure with in situ Si₃N₄ passivation. *Journal of Alloys and Compounds*, 659, 90-94.
- [7] Nag, S., Basu, A., Das, B., Middy, T. R., & Bhattacharya, D. P. (2015). Piezoelectric scattering limited mobility as controlled by the transverse component of the phonon wave vector in quantum layers at low temperatures. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, 72, 77-83.
- [8] Tanimura, H., Kanasaki, J. I., Tanimura, K., Sjakste, J., Vast, N., Calandra, M., & Mauri, F. (2016). Formation of hot-electron ensembles quasiequilibrated in momentum space by ultrafast momentum scattering of highly excited hot electrons photoinjected into the Γ valley of GaAs. *Physical Review B*, 93(16), 161203.
- [9] Jin, Z., Mullen, J. T., & Kim, K. W. (2016). Highly anisotropic electronic transport properties of monolayer and bilayer phosphorene from first principles. *Applied Physics Letters* 109, 053108.
- [10] Yang, M., Lv, Y., Feng, Z., Lin, W., Cui, P., Liu, Y., ... & Lin, Z. (2016). Study of source access resistance at direct current quiescent points for AlGa_N/Ga_N heterostructure field-effect transistors. *Journal of Applied Physics*, 119(22), 224501.

Chapitre V Temps de relaxation de l'impulsion des trous lourds dus aux phonons optiques polaires

- [11] Yu, S., Zhu, H., Eshun, K., Shi, C., Zeng, M., & Li, Q. (2016). Strain-engineering the anisotropic electrical conductance in ReS₂ monolayer. *Applied Physics Letters*, 108(19), 191901.
- [12] Sahoo, S. K. (2016, May). Effect of polarization field on mean free path of phonons in indium nitride. In *INTERNATIONAL CONFERENCE ON CONDENSED MATTER AND APPLIED PHYSICS (ICC 2015): Proceeding of International Conference on Condensed Matter and Applied Physics* (Vol. 1728, No. 1, p. 020133). AIP Publishing.
- [13] Amekpewu, M., Mensah, S. Y., Musah, R., Mensah, N. G., Abukari, S. S., & Dompreeh, K. A. (2016). Hot electrons injection in carbon nanotubes under the influence of quasi-static ac-field. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, 81, 145-149.
- [14] Schmidt, C. B., Priyadarshi, S., Pierz, K., & Bieler, M. (2016). Ultrafast magneto-photocurrents as probe of anisotropy relaxation in GaAs. *Applied Physics Letters*, 108(10), 102104.
- [15] Iglesias, J. M., Martín, M. J., Pascual, E., & Rengel, R. (2016). Hot carrier and hot phonon coupling during ultrafast relaxation of photoexcited electrons in graphene. *Applied Physics Letters*, 108(4), 043105.
- [16] Kawano, M., Santo, K., Ikawa, M., Yamada, S., Kanashima, T., & Hamaya, K. (2016). Spin transport in p-Ge through a vertically stacked Ge/Fe₃Si junction. *Applied Physics Letters*, 109(2), 022406.
- [17] Lafuente-Sampietro, A., Utsumi, H., Boukari, H., Kuroda, S., & Besombes, L. (2016). Spin dynamics of an individual Cr atom in a semiconductor quantum dot under optical excitation. *Applied Physics Letters*, 109(5), 053103.
- [18] Condori, H. O., & Sensale-Rodriguez, B. (2015, August). Effect of electron momentum relaxation time on the terahertz properties of graphene structures. In *2015 40th International Conference on Infrared, Millimeter, and Terahertz waves (IRMMW-THz)* (pp. 1-2). IEEE.
- [19] Koudinov, A. V., Dzhioev, R. I., Korenev, V. L., Sapega, V. F., & Kusrayev, Y. G. (2016). Optical spin orientation of minority holes in a modulation-doped GaAs/(Ga, Al) As quantum well. *Physical Review B*, 93(16), 165301.
- [20] Chen, Q., & Fiete, G. A. (2016). Thermoelectric transport in double-Weyl semimetals. *Physical Review B*, 93(15), 155125.
- [21] Fröhlich, H. (1937). Theory of electrical breakdown in ionic crystals. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Mathematical and Physical Sciences*, 160(901), 230-241.
- [22] Ridley, B. K. (1998). Exact electron momentum-relaxation times in GaN associated with scattering by polar-optical phonons. *Journal of applied physics*, 84(7), 4020-4021.
- [23] Anderson, D. R., Zakhleniuk, N. A., Babiker, M., Ridley, B. K., & Bennett, C. R. (2001). Polar-optical phonon-limited transport in degenerate GaN-based quantum wells. *Physical Review B*, 63(24), 245313.

Chapitre V Temps de relaxation de l'impulsion des trous lourds dus aux phonons optiques polaires

- [24] Rhyner, R., & Luisier, M. (2013). Phonon-limited low-field mobility in silicon: Quantum transport vs. linearized Boltzmann Transport Equation. *Journal of Applied Physics*, 114(22), 223708.
- [25] Marin, E. G., Ruiz, F. G., Godoy, A., Tienda-Luna, I. M., & Gámiz, F. (2015). Implicit versus explicit momentum relaxation time solution for semiconductor nanowires. *Journal of Applied Physics*, 118(2), 024504.
- [26] Kireev, P. S. (1978). *Semiconductor physics*. Mir.
- [27] Anderson, D. R., Zakhleniuk, N. A., Babiker, M., Ridley, B. K., & Bennett, C. R. (2001). Polar-optical phonon-limited transport in degenerate GaN-based quantum wells. *Physical Review B*, 63(24), 245313.
- [28] Fletcher, K., & Butcher, P. N. (1972). An exact solution of the linearized Boltzmann equation with applications to the Hall mobility and Hall factor of n-GaAs. *Journal of Physics C: Solid State Physics*, 5(2), 212.

Conclusion Générale

Conclusion générale

Dans le cadre ce travail, nous avons tout d'abord exposé la méthode **k.p** en expliquant son application dans les matériaux massifs ainsi que dans les hétérostructures à semiconducteurs. Ensuite en utilisant l' Hamiltonien de Luttinger-Kohn, dans le cadre de la masse effective et l'approximation de la fonction enveloppe, nous avons calculé la structure électronique de la bande de valence dans le puits quantique $GaAs/Al_{0.3}GaAs_{0.7}As$.

Nous avons ensuite étudié l'effet de la largeur sur la structure de bande ainsi que l'importance d'inclure la sous bande split-off. En outre, nous avons montré l'importance de l'anisotropie de la bande de valence notamment pour les trous lourds.

Nous avons également fait un tour d'horizon sur les divers types de phonons dont les solides sont le siège et les modèles utilisés pour traiter leurs interactions avec les électrons. Ensuite, nous avons comparé ces divers modèles entre eux, en particulier dans le cas des hétérostructures à semiconducteurs.

Les taux de diffusion intra-sous-bandes des trous lourds et légers dus à l'interaction avec les phonons optiques polaires sont calculés en utilisant le modèle massif des phonons. Toujours dans ce modèle, utilisant l'interaction des trous avec les modes optiques longitudinaux et transversaux dans le cadre du potentiel de déformation nous avons calculé ensuite les mêmes grandeurs. L'interaction des trous avec les modes acoustiques et les taux de diffusion résultants sont traités dans le cadre de l'approximation élastique utilisée par de nombreux auteurs.

Pour ces divers processus d'interaction, aussi bien pour les phonons acoustiques que les phonons optiques, nos résultats montrent clairement que la variation du taux de diffusion avec l'énergie initiale du trou suit selon le cas les comportements de la densité d'états finale et/ou la fonction de recouvrement. Nous avons également étudié l'effet de la sous bande split-off sur les taux de diffusion et son importance notamment pour les trous lourds ne peut pas être négligée.

Nous avons aussi considéré l'interaction trou-phonon dans le modèle plus réaliste dit du continuum diélectrique qui est caractérisé par l'existence de deux types de modes: Ceux dits confinés, car leurs vibrations se limitent à la région du puits et ceux dits d'interface car les amplitudes de leurs vibrations sont nulles au delà des interfaces du puits à partir d'une certaine distance. Pour ce modèle, nous avons calculé les taux de diffusion intra-sous-bande aussi bien dans le cas de l'absorption que l'émission pour les deux types de modes pour les deux types de trous HH et LH. Les taux obtenus présentent un comportement plutôt riche qui s'explique

naturellement par les variations de la densité d'états finale et/ou la fonction de recouvrement en fonction de l'énergie initiale du trou subissant la diffusion.

En outre, nous avons aussi étudié l'effet de la largeur du puits sur les taux de diffusion qui, dans le cas des modes confinés, augmentent à mesure qu'augmente la largeur du puits. Cependant, pour les modes d'interface on a le contraire, c'est à dire que les taux de diffusion diminuent avec l'augmentation de la largeur du puits.

Allant plus loin, nous avons exploré l'effet du warping de la bande de valence et découvert que ce dernier entraîne en fait à son tour une anisotropie des taux de diffusion, particulièrement marquée dans le cas des trous lourds.

Enfin, une comparaison de nos résultats avec ceux du *GaAs* massif montre en général des différences dues d'une part à la différence entre les densités d'états finales respectivement du puits et du massif et d'autre part aussi aux différences qui existent entre les fonctions de recouvrement respectives.