



HAL
open science

Caractérisation de puits quantiques GaInAs / InP par spectrométrie magnéto-optique

Nathalie Marreaud

► **To cite this version:**

Nathalie Marreaud. Caractérisation de puits quantiques GaInAs / InP par spectrométrie magnéto-optique. Matière Condensée [cond-mat]. Université Paul Verlaine - Metz, 1997. Français. NNT : 1997METZ055S . tel-01777233

HAL Id: tel-01777233

<https://hal.univ-lorraine.fr/tel-01777233>

Submitted on 24 Apr 2018

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.



AVERTISSEMENT

Ce document est le fruit d'un long travail approuvé par le jury de soutenance et mis à disposition de l'ensemble de la communauté universitaire élargie.

Il est soumis à la propriété intellectuelle de l'auteur. Ceci implique une obligation de citation et de référencement lors de l'utilisation de ce document.

D'autre part, toute contrefaçon, plagiat, reproduction illicite encourt une poursuite pénale.

Contact : ddoc-theses-contact@univ-lorraine.fr

LIENS

Code de la Propriété Intellectuelle. articles L 122. 4

Code de la Propriété Intellectuelle. articles L 335.2- L 335.10

http://www.cfcopies.com/V2/leg/leg_droi.php

<http://www.culture.gouv.fr/culture/infos-pratiques/droits/protection.htm>

130018
ACADEMIE DE NANCY-METZ - UNIVERSITE DE METZ

Ecole doctorale PROMEN

Thèse de doctorat

Spécialité : Physique

BIBLIOTHEQUE UNIVERSITAIRE - METZ	
N° inv.	1997 U4 S
Cote	S/M ₃ 97/55
Loc	Magasin

**CARACTERISATION DE PUIITS
QUANTIQUES GaInAs/InP PAR
SPECTROMETRIE
MAGNETO-OPTIQUE**

Présentée par Nathalie MARREAUD le 19 septembre 1997 devant le jury
composé de :

G. BASTIDE	Professeur à l'Université de Montpellier II	Rapporteur
M. CERTIER	Professeur à l'Université de Metz	
J.P. LAURENTI	Professeur à l'Université de Metz	Directeur de thèse
B. LEPLEY	Professeur à l'Université de Metz	
M. MAY	Professeur à l'Université Pierre et Marie Curie (Paris VI)	Rapporteur

BIBLIOTHEQUE UNIVERSITAIRE DE METZ



022 420644 6

SOMMAIRE

Introduction	pp. 1 - 5
Chapitre I : Modélisation de la structure	pp. 6 - 16
I-Introduction	p. 7
II-Profil d'un puits quantique idéal- interfaces abruptes	p. 8
III-Prise en compte du désaccord de maille	p. 9
IV-Propriétés physiques d'un alliage	p. 11
V-Puits à profil graduel	p. 13
Références	p. 16
Chapitre II : Energies de confinement d'un puits quantique quelconque dans l'approximation des bandes paraboliques	pp. 17 - 27
I-Introduction	p. 18
II-Puits quantique rectangulaire	p. 18
III-Puits à profil graduel-Technique des matrices de transfert	p. 23
IV-Remarques sur les approximations de ce calcul	p. 26
Références	p. 27
Chapitre III : Structure électronique des puits quantiques-Théorie $k.p$	pp. 28 - 49
A-Introduction	p. 29
B-Généralités sur la théorie $k.p$	p. 29
C-Théorie $k.p$ au premier ordre-Bande de conduction	p. 30
I-Détermination de l'Hamiltonien de la bande de conduction	p. 30
D- Théorie $k.p$ au deuxième ordre-Bande de valence	p. 37
I-Introduction	p. 37
II-Hamiltonien sans déformation- Hamiltonien de Luttinger	p. 38
III-Prise en compte des effets de déformation-Hamiltonien de Bir Pikus	p. 39

IV-Forme générale de l'Hamiltonien dans une hétérostructure	p. 40
V-Détermination de la structure de bande-conditions de continuité-TMT	p. 41
Références	p. 48
Chapitre IV : Transitions optiques dans les puits quantiques - excitons	pp. 50 - 63
I-Transitions interbande (ou bande à bande)	p. 51
II-Règles de sélection	p. 51
III-Effet d'interaction coulombienne	p. 54
IV-Excitons en approximation de bandes paraboliques	p. 56
V- Excitons dans une structure de bande non parabolique	p. 60
VI-Forces d'oscillateur	p. 61
Références	p. 63
Chapitre V : Transitions magnéto-optiques dans les puits quantiques - magnéto-excitons	pp. 64 - 75
I-Introduction	p. 65
II-Effet d'un champ magnétique sur un porteur confiné dans un puits quantique - niveaux de Landau	p. 66
III-Glisement diamagnétique de l'exciton	p. 70
IV-Force d'oscillateur	p. 73
Références	p. 74
Chapitre VI : Détails expérimentaux	pp. 76 - 91
I-Techniques spectrométriques	p. 78
II-Dispositifs expérimentaux	p. 78
III-Conduite des mesures et traitement des spectres	p. 82
IV-Echantillons	p. 84
Références	p. 90
Chapitre VII : Spectrométrie d'absorption sous champ magnétique - Résultats et discussion	pp. 92 - 117
I-Rappel sur les conditions expérimentales	p. 93

Echantillons à puits larges	p. 93
Echantillons à puits étroits	p. 110
Références	p. 117

Conclusion	pp. 118 - 119
-------------------	----------------------

Annexe I : Paramètres physiques adoptés dans les calculs	pp. 120 - 127
---	----------------------

Annexe II	pp. 128 - 131
------------------	----------------------

Annexe III : Intensité diffractée par une hétérostructure périodique en théorie cinématique	pp. 132 - 136
--	----------------------

INTRODUCTION

Depuis plusieurs années, le système GaInAs/InP tient une place importante dans la technologie des semi-conducteurs en raison, notamment de sa compatibilité avec le domaine spectral des télécommunications optiques^[1]. En effet, les longueurs d'onde les mieux adaptées à la transmission par fibre optique se situent autour de 1,3 et 1,5 μm (soit 0,95 et 0,8 eV respectivement). Les énergies des transitions optoélectroniques dans les puits quantiques de $\text{Ga}_{0,47}\text{In}_{0,53}\text{As}/\text{InP}$ (Fig. 1), où l'alliage $\text{Ga}_{0,47}\text{In}_{0,53}\text{As}$ est en accord de maille avec le substrat InP, peuvent être ajustées par effet de confinement quantique en jouant sur la largeur des puits, dans la limite des gaps tridimensionnels de $\text{Ga}_{0,47}\text{In}_{0,53}\text{As}$ (0,74 eV à 300K) et de InP (1,27eV à 300K).

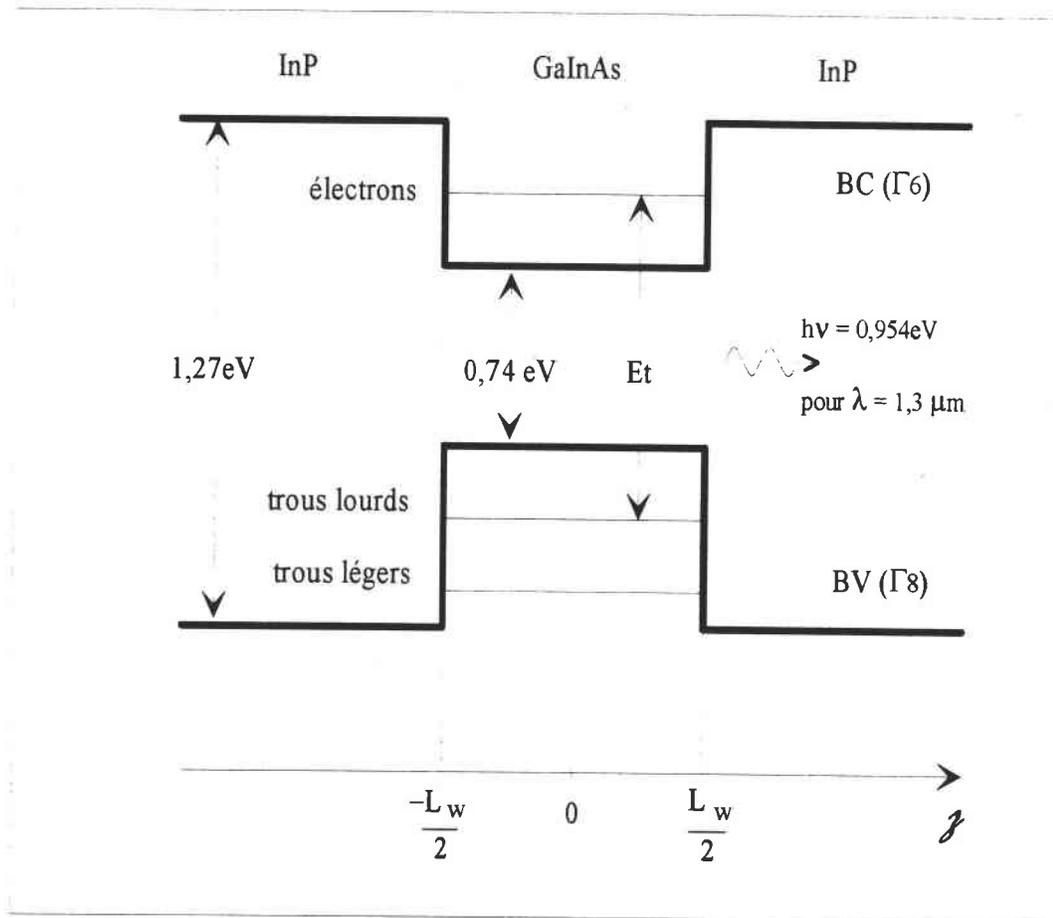


Figure 1 : Profil des bords de bandes en centre de zone de Brillouin dans un puits quantique de GaInAs/InP.

Toutefois, la réalisation de composants optoélectroniques au niveau industriel exige une parfaite maîtrise de la largeur des puits, de la composition de l'alliage, de la qualité des interfaces et de la périodicité du système dans le cas de structures multi-puits. Les techniques d'excitation spectrométriques (absorption, réflectivité, excitation de luminescence) constituent un moyen puissant et non destructif de contrôle quantitatif de ces paramètres de structure^[2]. La méthode consiste à comparer les énergies de transitions optoélectroniques obtenues à partir des spectres expérimentaux avec celles calculées par la méthode de la fonction enveloppe^[3].

Cette technique spectrométrique de caractérisation a été d'abord appliquée au cas de puits assez larges (50 à 200 Å) pour que la présence de couches interfaciales ou les défaillances de périodicité n'aient que des effets mineurs sur les propriétés optiques des structures^[2]. La

méthode donne accès à la largeur réelle des puits et à la composition réelle de l'alliage en traitant ces deux paramètres structuraux comme paramètres ajustables.

Cette technique a ensuite été étendue au cas de puits étroits (au plus quelques monocouches atomiques MCs) dans lesquels les effets d'interface influent sensiblement sur les propriétés optiques^[4-6]. Il a, en particulier, été mis en évidence :

- à l'interface InP/ GaInAs, la formation d'une couche interfaciale graduelle par substitution d'arsenic au phosphore dans les dernières MCs d'InP déposées, suivie d'un phénomène d'interdiffusion ; cette couche interfaciale participe au confinement des porteurs ;
- à l'interface GaInAs/InP, une importante rugosité, ± 2 MCs due au fait que la croissance de l'alliage n'est pas strictement bidimensionnelle.

Toutefois, un certain nombre d'ambiguïtés peuvent demeurer dans la détermination quantitative du profil réel de la structure. Dans le cas des puits larges, la multiplicité des niveaux de confinement peut rendre incertaine l'identification des transitions électroniques impliquées dans chaque structure spectrale. Dans le cas des puits étroits, plusieurs profils structuraux différents peuvent parfois être à l'origine d'une même forme spectrale. Or, l'application d'un champ magnétique enrichit considérablement les spectres et augmente la quantité d'informations accessibles^[7-13]. Le champ magnétique a essentiellement pour effets :

- d'augmenter l'écart énergétique entre les états d'un même exciton, ce qui permet la résolution d'états excités, généralement impossible en spectrométrie conventionnelle ;
- d'intensifier les transitions excitoniques par augmentation du degré de confinement, ce qui permet l'émergence de structures spectrales qui ne sont pas décelées sans champ magnétique.

Ainsi, certaines ambiguïtés sur l'identification des transitions ou sur le profil structural responsables de la forme des spectres, peuvent être levées par analyse de "l'éclatement" des structures spectrales sous l'effet du champ magnétique.

Le but du travail présenté dans ce mémoire a été de se doter de moyens d'investigations magnéto-optiques pour la caractérisation des structures à puits quantiques, puis de les tester sur deux séries de puits quantiques Ga_{0,47}In_{0,53}As/InP dans lesquels la composition nominale de l'alliage est prévue pour assurer l'accord de maille avec le substrat et les barrières d'InP : une série de puits larges dans lesquels le comportement spectral est gouverné essentiellement par la largeur du puits et la composition réelle de l'alliage ; une série de puits étroits (au plus quelques MCs) dans lesquels les effets d'interfaces jouent un rôle majeur dans les propriétés optiques.

Au delà de la mise au point du dispositif spectrométrique avec champ magnétique, notre travail a consisté à se doter de moyens d'analyse quantitative des spectres permettant d'en assurer une exploitation optimale. Pour cela, nous nous sommes appuyés sur l'approximation de la fonction enveloppe^[3]. Malgré ses limites de validité bien connues dans le domaine de la structure électronique des matériaux cristallins, ce modèle a fait ses preuves dans l'interprétation des phénomènes tels que les transitions optoélectroniques impliquant des états assez voisins du centre de zone de Brillouin. Toutefois, le mouvement des porteurs en interaction coulombienne dans le plan du puits, accru par le mouvement cyclotron imposé par le champ magnétique, exclut la version simpliste de l'approximation des bandes paraboliques. Les effets d'interactions entre bandes et la non-parabolicité qui en résulte ont dû être pris en compte à l'aide de la théorie **k.p.** L'effet du champ magnétique a été introduit simultanément avec celui de l'interaction coulombienne dans l'Hamiltonien de la particule réduite. Ce formalisme de traitement de l'exciton sous champ magnétique (magnéto-exciton) est valable quelle que soit la valeur du champ et n'impose pas d'ordre de grandeur de l'énergie cyclotron par rapport à celui de l'interaction coulombienne.

Cette modélisation des magnéto-excitons a été utilisée avec succès par les auteurs des références 12 et 13 qui ont pu ainsi interpréter de façon cohérente l'ensemble de leurs résultats

spectrométriques sur des puits quantiques GaInAs/InP avec diverses compositions d'alliages. Toutefois, ces travaux n'ont porté que sur les transitions magnéto-optiques impliquant les premiers niveaux de confinement d'électrons et de trous. Nous avons étendu ici l'étude aux transitions impliquant les niveaux de confinement supérieurs qui présentent une sensibilité accrue au profil réel de la structure. En outre, par rapport aux travaux des références 12 et 13, nous avons adopté une méthode de détermination des états de magnéto-excitons prenant en compte le mouvement des porteurs dans la direction de quantification (perpendiculaire au plan du puits).

Le Chap. I sera consacré à la description détaillée des hétérostructures à puits quantiques abrupts, puis avec effets d'interfaces. Après un rappel sur la détermination des états électroniques en approximation des bandes paraboliques (Chap. II), le formalisme de la théorie $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ sera développé au Chap. III. La méthode de détermination des états excitoniques sans, puis avec champ magnétique sera exposée aux Chaps. IV et V, respectivement. Les détails expérimentaux feront l'objet du Chap. VI. Enfin, les résultats obtenus sur les séries d'échantillons étudiées seront présentés, analysés et discutés au Chap. VII.

REFERENCES :

- [1] M. Razeghi, The MOCVD Challenge, Vol.1 : A Survey of GaInAsP-InP for Photonic and Electronic Applications, Adam Hilder ed., Bristol-Philadelphia (1989)
- [2] J.P. Laurenti, J. Camassel, B. Reynes, D. Grützmacher, K. Wolter and H Kurtz, *Semicond. Sci. Technol.* **5**, 222 (1990)
- [3] G. Bastard, 'Wave Mechanics Applied to Semiconductor Heterostructures', les Editions de Physique (Paris 1989).
- [4] J. Camassel, J.P. Laurenti, S. Juillaguet, F. Reinhardt, K. Wolter, H. Kurz and D. Grützmacher, *J. Crystal Growth* **107**, 543 (1991)
- [5] S. Juillaguet, R. Schwedler, A. Kohl, F.H. Baumann, B. Fraisse, J. Camassel, K. Wolter, K. Leo, B. Gallmann, M. Stollenwerck and J.P. Laurenti, Proc. 5th 'InP and Related Materials', IEEE cat 93CH3276-3, Paris (1993), p301
- [6] J. Camassel, S. Juillaguet, R. Schwedler, K. Wolter, F.H. Baumann, K. Leo et J.P. Laurenti, *J. de Phys.IV C5(3)*, 99 (1993).
- [7] E.D. Jones, H. Ackermann, J.E. Schirber, T.J. Drummond, L.R. Dawson and I.J. Fritz, *Solid State Comm.* **55**, 525 (1985)
- [8] H.Q. Hou, Y. Segawa, Y. Aoyagi, S. Namba and J.M. Zhou, *Solid State Comm.* **74**, 159 (1990)
- [9] W. Stolz, J.C. Maan, M. Altarelli, L. Tapfer and K. Ploog, *Phys. Rev.* **B36**, 4301 (1987)
- [10] D.C. Reynolds, D.C. Look, B. Jogai, C.E. Stutz, R. Jones and K.K. Bajaj, *Phys. Rev.* **B50**, 11710 (1994)
- [11] M. Sugawara, *Phys. Rev.* **B45**, 11423 (1992)
- [12] M. Sugawara, N. Okazaki, T. Fujii and S. Yamazaki, *Phys. Rev.* **B48**, 8848 (1993)
- [13] M. Sugawara, N. Okazaki, T. Fujii and S. Yamazaki, *Phys. Rev.* **B48**, 8102 (1993)

CHAPITRE I

MODELISATION DE LA STRUCTURE

I-Introduction:

Les échantillons à puits quantiques (PQs) étudiés dans ce mémoire ont été élaborés à l'Institut d'Electronique des Semiconducteurs de l'Université d'Aix la Chapelle (Allemagne) par croissance épitaxiale en phase vapeur à partir de composés organo-métalliques sous basse pression (LP-MOVPE). Il s'agit de matériaux III-V à gap direct et plus précisément de multi-puits quantiques de $\text{InP}/\text{Ga}_{0,47}\text{In}_{0,53}\text{As}/\text{InP}$. Leur structure est représentée sur la Fig. I-1. La composition $x = 0,47$ est celle pour laquelle on obtient l'accord de maille de $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}$ sur InP . Toutefois, ces puits, surtout lorsqu'il s'agit de puits minces, ne peuvent être considérés *stricto sensu* comme en accord de maille ou/et rectangulaires. En effet, lors de la croissance, des effets d'interfaces suivis d'effets de diffusion interviennent^[1]. Les couches interfaciales sont créées lors des séquences de changement des réactifs. La diffusion des différentes espèces chimiques se produit elle, au sein de la structure du fait de la température élevée (650°C) régnant dans l'enceinte du réacteur tout au long de la croissance. Ces deux phénomènes donnent lieu à un profil graduel de composition dans la structure remettant ainsi en question le caractère abrupt des interfaces et les conditions initiales d'accord de maille entre les différentes couches épitaxiées : en effet, les régions interfaciales de la structure sont alors constituées d'un empilement de monocouches (MCs) quaternaires $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}$ dont la composition n'implique pas nécessairement l'accord de maille avec InP ; dans ce cas, le dépôt épitaxial exigera une déformation compensant ce désaccord.

Dès lors, on distinguera deux types d'échantillons ; les échantillons à puits minces (de l'ordre de quelques dizaines d'angströms) pour lesquels nous serons tenus de prendre en compte ces effets de substitution et de diffusion^[2] et les échantillons à puits larges (50-200 angströms) pour lesquels l'étendue des régions interfaciales concernées par ces effets sera, au moins en première approximation, considérée comme faible devant la largeur des puits. Une variation de largeur de puits de quelques angströms n'a en effet que peu de conséquences sur les énergies de confinement d'un puits large, alors que sur un puits mince cela peut entraîner des erreurs considérables. Tous les calculs de ce mémoire sont développés pour le cas le plus général d'un profil quelconque de potentiel.

Dans ce chapitre, nous partirons de la forme la plus simple d'un profil de puits rectangulaire en accord de maille (§II), puis avec déformation (§III) en explicitant le cas d'un alliage (§IV) puis nous présenterons le profil graduel d'un PQ réel (§V).

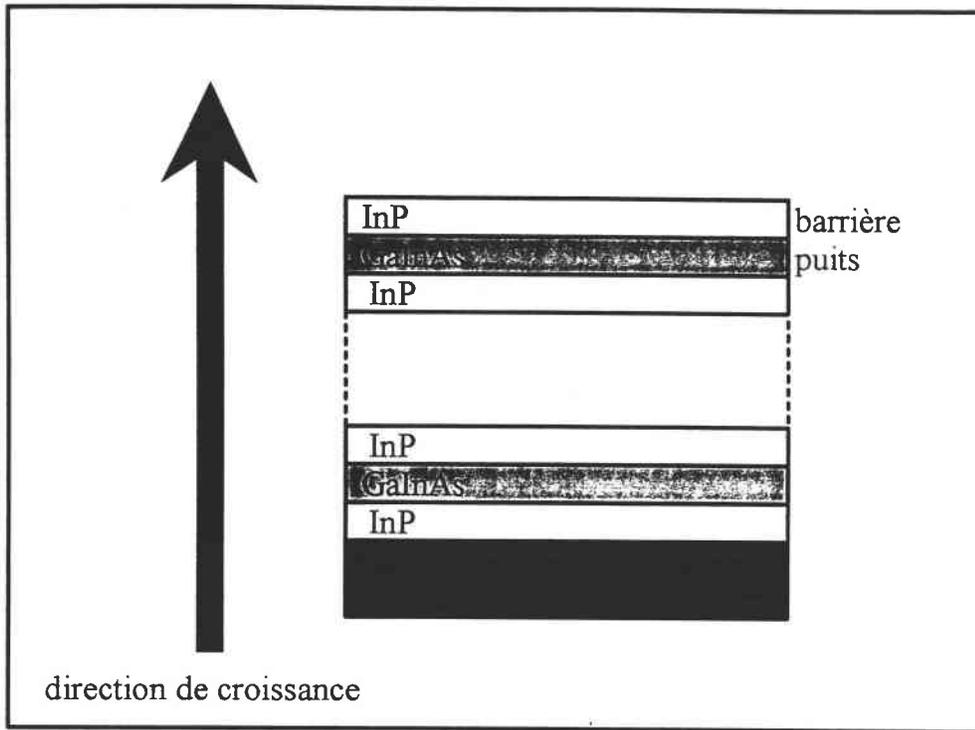


Figure I-1 : Représentation de la structure à multi-puits quantiques GaInAs/InP réalisée par LP-MOVPE.

II-Profil d'un puits quantique idéal - Interfaces abruptes :

Le profil dit idéal d'un PQ est représenté Fig. I-2. Les énergies délimitant le profil du puits, souvent et abusivement appelées potentiels, sont en fait les énergies des extrema de bandes du matériau tridimensionnel (3D) prises en centre de zone de Brillouin ($k = 0$) : le minimum E_c de la bande de conduction (BC) et le sommet E_v de la bande de valence (BV). Le matériau puits ($Ga_{0,47}In_{0,53}As$ dans notre cas, gap 3D $E_g = E_v - E_c = 0,74$ eV à température ambiante) est encadré par deux barrières (InP, $E_g = 1,27$ eV). La différence de gap ΔE_g entre les deux matériaux se répartit entre les bandes de conduction et de valence proportionnellement aux offsets chimiques ΔE_c et ΔE_v et, d'une façon générale, on peut écrire :

$$\Delta E_g = \Delta E_c + \Delta E_v \quad \text{Eq.(I-1)}$$

Ces offsets de bandes ΔE_c et ΔE_v déterminent le profil du puits. Les valeurs adoptées sont détaillées et discutées dans l'annexe I.

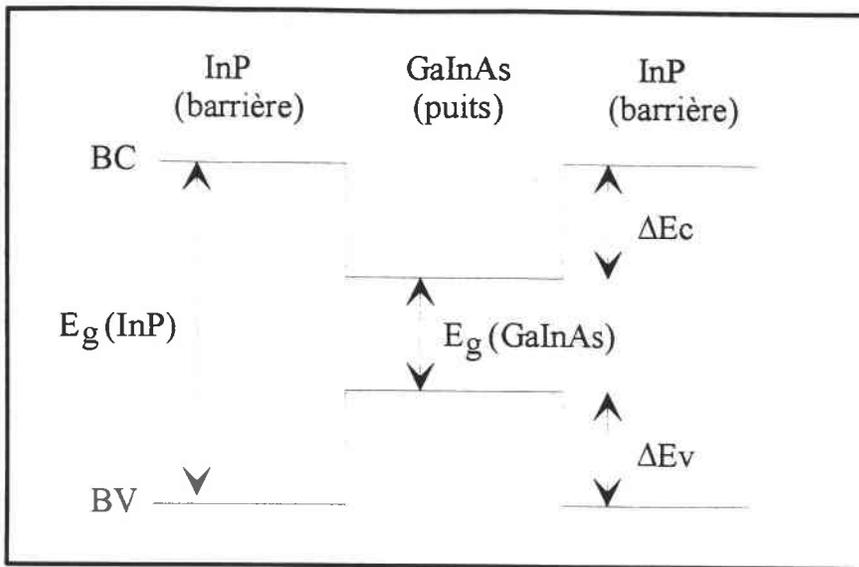


Figure I-2 : Représentation énergétique d'un PQ idéal de GaInAs/InP.

III-Prise en compte du désaccord de maille:

III.1-Déformation :

On établit d'abord un bilan des déformations en restant dans le cadre de la théorie élastique des matériaux ^[3]. Lors de l'épitaxie, il se produit un réajustage de la maille de la couche épitaxiée par rapport à celle du substrat. Considérons la maille cubique d'un substrat de paramètre a_{0s} (Fig.I-3). Elle est repérée par un système d'axes x , y et z correspondant aux directions $[100]$, $[010]$ et $[001]$, respectivement. Dans ce schéma, la direction $[001]$ est la direction de croissance. Déposons une couche de paramètre de maille a_0 et supposons que le paramètre a_{0s} reste inchangé. Une déformation élastique va diminuer (ou augmenter) le paramètre de maille (a_{\perp}) de la couche dans les directions x et y et augmenter (ou diminuer) celui ($a_{//}$) dans la direction z . La déformation correspondante est tétraogonale. Dans le cas a (b) de la figure I-3 où $a_0 < a_{0s}$ ($a_0 > a_{0s}$), on aura une dilatation (compression) dans le plan des couches et une compression (dilatation) dans la direction de croissance.

Ce type de déformation s'exprime facilement en fonction des paramètres de maille initiaux :

-i) dans le plan de l'interface, i.e. (x,y) :

$$\epsilon_{xx} = \epsilon_{yy} = \frac{(a_{\perp} - a_0)}{a_0} = \epsilon_{\perp}, \quad \text{Eq.(I-2)}$$

où ϵ_{\perp} est directement fonction des espèces chimiques (longueur de liaison tétraédrique) en présence.

-ii) au contraire, dans la direction de croissance, i.e. la direction z :

$$\epsilon_{zz} = \frac{(a_{//} - a_0)}{a_0} = \epsilon_{//}. \quad \text{Eq.(I-3)}$$

Cette déformation est proportionnelle à ϵ_{\perp} mais de signe opposé. Le facteur de proportionnalité est fonction du rapport des coefficients d'élasticité C_{11} et C_{12} du matériau et s'exprime de façon classique par ^[3]:

$$\epsilon_{//} = -2\epsilon_{\perp} \left(\frac{C_{12}}{C_{11}} \right) \quad \text{Eq.(I-4)}$$

Etant donné que les angles dans la maille tétragonale restent des angles droits, il n'y a pas de déformations de cisaillement :

$$\epsilon_{xy} = \epsilon_{xz} = \epsilon_{yz} = 0 \quad \text{Eq.(I-5)}$$

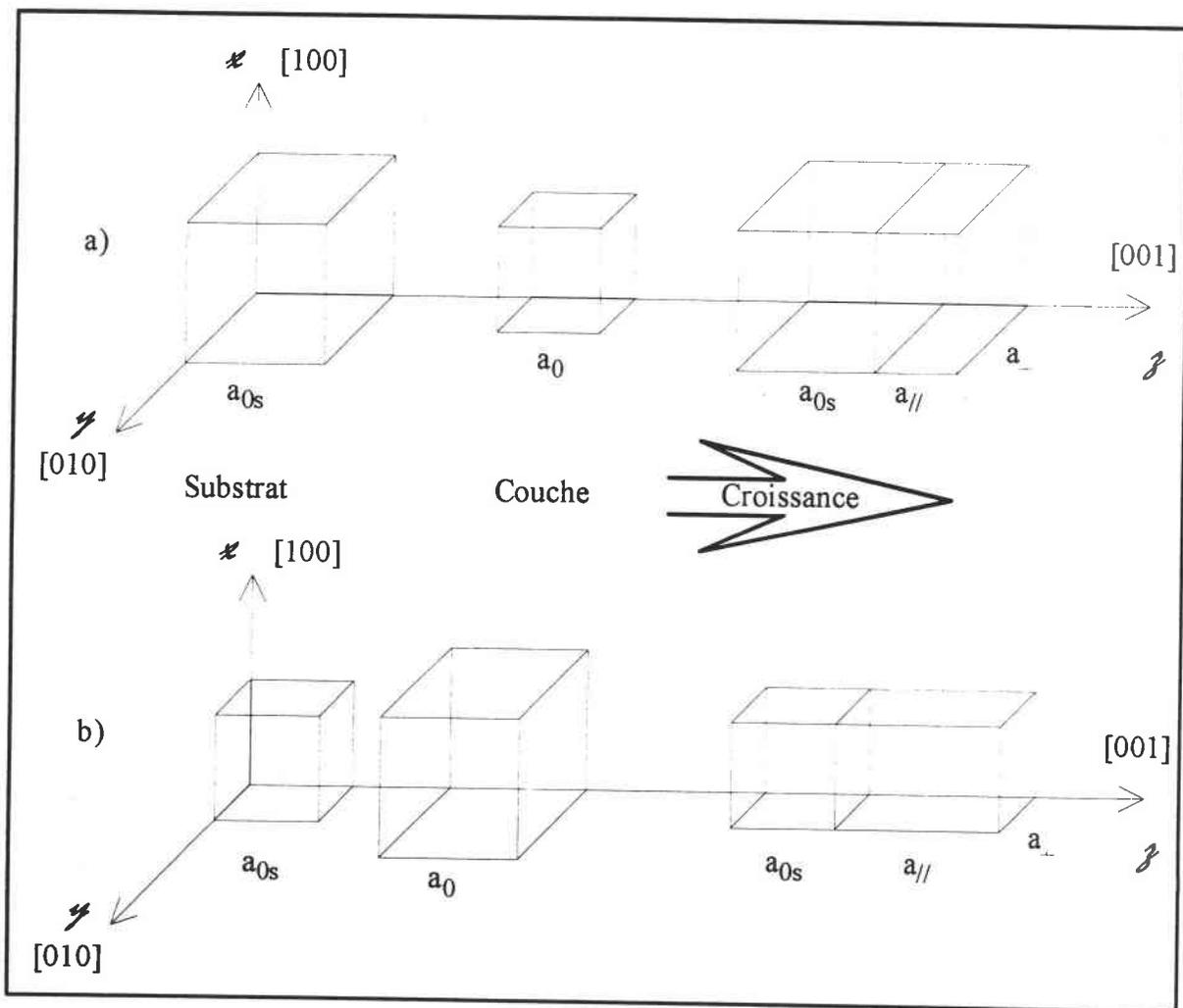


Figure I-3 : Déformation de la maille cubique d'une couche épitaxiée dans le cas ; (a) d'une dilatation et (b) d'une compression.

III.2-Effet de la déformation sur les extrema de bandes :

Sur la Fig. I-4 est représentée la structure de bande d'un composé III-V au voisinage du centre de la première zone de Brillouin. Cette figure illustre l'effet des déformations sur les niveaux d'énergie dans le cas d'une déformation en tension (a) et en compression (c) dans le plan xy. Toute déformation entraîne une modification de la position énergétique des extrema

de bandes. Dans le cadre du formalisme phénoménologique du potentiel de déformation, on peut exprimer simplement ces glissements. On observe également une levée de dégénérescence de la bande Γ_8 pour toute valeur non nulle de la déformation. Cette levée de dégénérescence devra être prise en compte dans le calcul de l'offset de bande ΔE_v .

On appelle δE_c le glissement du minimum de la bande de conduction et δE_{vhh} (δE_{vlh}) celui du maximum de la bande des trous lourds (trous légers). En fonction des déformations décrites dans le paragraphe précédent, ils s'expriment de la manière suivante ^[4]:

$$\begin{aligned} \delta E_c &= a_c (\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}) \\ \delta E_{vhh} &= -P_\varepsilon - Q_\varepsilon \\ \delta E_{vlh} &= -P_\varepsilon + \frac{1}{2} \left(Q_\varepsilon - \Delta_{SO} + \sqrt{\Delta_{SO}^2 + 2\Delta_{SO}Q_\varepsilon + 9Q_\varepsilon^2} \right) \end{aligned} \quad \text{Eq.(I-6)}$$

Dans ces expressions, obtenues par diagonalisation de l'Hamiltonien de déformation ^[5], Δ_{SO} désigne le dédoublement Γ_8 - Γ_7 introduit dans la bande de valence par l'effet de couplage spin-orbite (Fig I.4) ;

$P_\varepsilon = -a_v (\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz})$ représente le glissement 'moyen' de la bande de valence qui est dû à la composante hydrostatique de la déformation ;

$Q_\varepsilon = \frac{b}{2} (2\varepsilon_{zz} - \varepsilon_{xx} - \varepsilon_{yy})$ chiffre la levée de dégénérescence des états Γ_8 qui est associée à l'anisotropie de la déformation ; enfin, il convient d'ajouter le glissement énergétique de la bande Γ_7 :

$$\delta E_{vso} = -P_\varepsilon + \frac{1}{2} \left(Q_\varepsilon + \Delta_{SO} - \sqrt{\Delta_{SO}^2 + 2\Delta_{SO}Q_\varepsilon + 9Q_\varepsilon^2} \right) \quad \text{Eq.(I-6bis)}$$

Dans ces expressions, a_c et a_v sont les potentiels de déformations hydrostatiques associés aux bandes de conduction et de valence respectivement, b est le potentiel de cisaillement. Ces effets de glissement sont représentés sur la Fig.I-4 dans le cas de GaInAs.

Le profil d'un puits rectangulaire contraint sera donc celui du puits sans contrainte auquel on aura ajouté les glissements propres à chaque bande. Ainsi on aura, pour les états de valence, deux profils de puits ; un pour les trous lourds et un pour les trous légers.

IV-Propriétés physiques d'un alliage :

Considérons le cas général d'un alliage quaternaire quelconque de type $A_x B_{1-x} C_y D_{1-y}$ où x et y sont les concentrations en éléments constitutifs A et C, respectivement. Les propriétés physiques d'un alliage ternaire s'obtiendront immédiatement en posant x ou $y = 1$. A partir des propriétés connues des composés semiconducteurs (binaires) P_{AC} , P_{AD} , P_{BC} , P_{BD} et des effets spécifiques d'alliages des composés ternaires S_{ABC} , S_{ABD} , S_{ACD} , S_{BCD} (éventuellement corrigés des effets spécifiques du composé quaternaire S_{ABCD}), on peut exprimer n'importe quelle propriété physique du composé quaternaire $A_x B_{1-x} C_y D_{1-y}$ par une loi d'interpolation généralisée ^[6] :

$$\begin{aligned} P_{ABCD}(x,y) &= x.y.P_{AC} + x.(1-y).P_{AD} + (1-x).y.P_{BC} + (1-x).(1-y).P_{BD} \\ &+ x.(1-x).y.S_{ABC} + x.(1-x).(1-y).S_{ABD} + x.y.(1-y).S_{ACD} \\ &+ (1-x).y.(1-y).S_{BCD} + x.(1-x).y.(1-y).S_{ABCD}. \end{aligned} \quad \text{Eq.(I-7)}$$

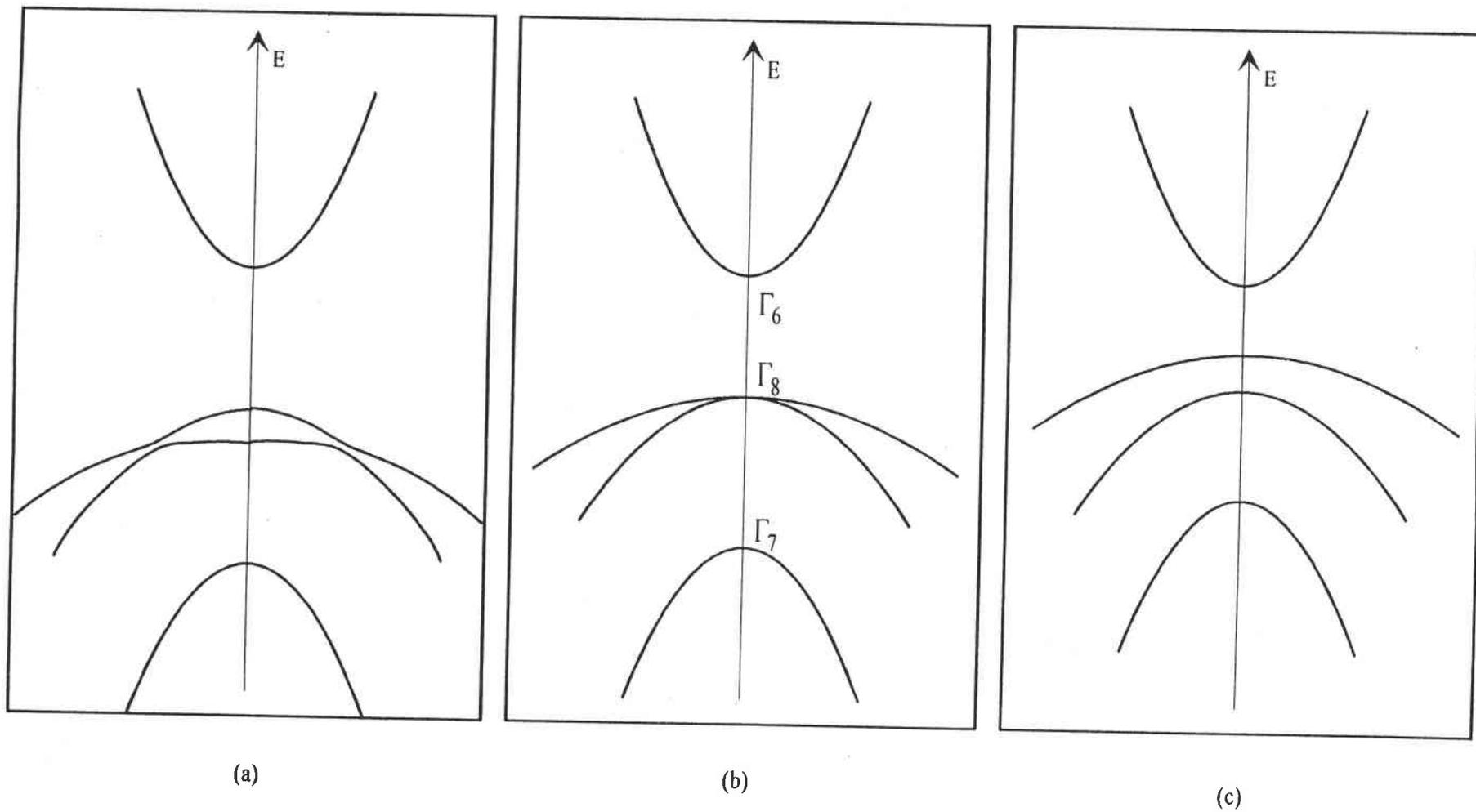


Figure I-4 : Effets de la déformation sur les extréma de bandes (a) dans le cas d'une tension et (c) dans le cas d'une compression dans le plan xy. Le cas (b) représente le cas sans déformation.

D'une façon générale, les effets spécifiques d'alliage résultent des interactions des deuxièmes voisins entre cations (anions) A et B (C et D) en présence des anions C et/ou D (des cations A et/ou B). Ils sont habituellement faibles et très souvent mal connus. Dans la plupart des cas, ils seront négligés. Deux exceptions cependant : le calcul de largeur de bande interdite ou gap et, de façon indirecte, le calcul des masses effectives m_e et m_{lh} au travers de la méthode **k.p**. Dans tous les cas, les valeurs correspondantes sont connues dans la littérature sous le nom de paramètre de bowing.

L'ensemble des propriétés physiques que nous allons être amenés à considérer pour déterminer les profils de potentiel, et par suite les énergies de confinement, comprend :

le paramètre de maille a_0 ;

les masses effectives des électrons (m_e), des trous lourds (m_{lh}) et des trous légers

(m_{lh}) ou, le cas échéant, les paramètres de Luttinger ($\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3$) ;

l'énergie de couplage spin-orbite Δ_{SO} ;

les coefficients d'élasticité C_{11} et C_{12} ;

les potentiels de déformation hydrostatique (a, a_c, a_v) et tétragonale (b) ;

les offsets de bande de conduction ΔE_c et de valence ΔE_v ;

l'énergie de bande interdite E_g ;

le couplage P entre bande de valence et bande de conduction.

Les différentes valeurs que nous avons utilisées pour nos calculs sont détaillées dans l'annexe I.

V-Puits à profil graduel :

Nous savons que les conditions de croissance ne permettent pas d'obtenir un puits rectangulaire. Par conséquent, il est nécessaire de connaître le profil de notre puits afin de pouvoir prévoir ses propriétés optiques. La première chose à faire est de déterminer la composition de notre structure monocouche (MC) par monocouche et de calculer tous les paramètres physiques relatifs à chacune des MCs. Une monocouche d'un matériau est définie comme la couche la plus mince représentative de la structure cristalline de ce matériau. Son épaisseur correspond à la dimension de la maille élémentaire de la structure tétraédrique. Elle est égale à la moitié du paramètre de maille a de la structure cubique. Nous verrons dans le chapitre suivant que la MC est particulièrement adaptée à la technique des matrices de transfert permettant de calculer les niveaux d'énergie propres d'un puits graduel.

V-1-Phénomène de substitution :

Le profil nominal d'un puits est le profil que l'on désire donner au puits pour obtenir les énergies de confinement souhaitées en vue du domaine optique prédéfini (voir Fig. I-5-a). C'est, dans notre cas, un profil rectangulaire dont la largeur est donnée par les conditions de croissance (vitesse de dépôt). Notre puits de départ est donc un puits de N MCs de $\text{Ga}_{0,47}\text{In}_{0,53}\text{As}$ 'sandwiché' entre deux barrières de N MCs d'InP. Le phénomène de substitution se produit lors des séquences d'interruption de croissance (SICs), lorsque l'InP déposé est mis sous pression d'arsine afin de minimiser les effets d'ilôts aux interfaces barrières-puits (voir Chap. VI). L'arsenic gazeux se substitue au phosphore de l'InP déposé sur une certaine profondeur dépendant du temps d'exposition ^[2]. Le passage entre InP et GaInAs n'est donc pas direct et une couche d'InAs(P) s'intercale entre les deux. Tous ces effets ont été discutés dans des précédents travaux effectués sur ces structures ^[1, 2]. D'après les durées des

SICs, on a une idée de l'étendue de la couche substituée à l'interface InP/GaInAs. Ces travaux font apparaître également que, du fait de la faiblesse du taux de substitution de l'arsenic par le phosphore, l'interface GaInAs/InP ne comporte pas de couche de GaInAsP. Notre structure sera dès lors constituée de N'-n MCs de InP, de n MCs d'InAs(P) substituées, de N MCs de GaInAs déposées et de la barrière suivante de InP (voir Fig. I-5-b).

V-2-Modélisation de la diffusion :

Aux phénomènes de substitution s'ajoutent les phénomènes de diffusion intervenant au cours de la croissance du fait de la température de dépôt qui est de 650°C. Ainsi donc, la nouvelle structure que nous venons d'établir après substitution doit encore être modifiée pour tenir compte de la diffusion.

La modélisation de la diffusion se fait grâce aux lois de Fick et aux calculs développés par Homewood et Dunstan ^[7] sous le nom d'approche de la fonction de Green. En choisissant l'instant t=0 en début de diffusion, la condition initiale est donnée par le profil de concentration nominale (avant diffusion) dans la direction de croissance :

$$C(z, t = 0) = \sum_{-\infty}^{+\infty} C(z', t = 0) \delta(z - z') \quad \text{Eq.(I-8)}$$

où $\delta(z-z')$ est la fonction de Dirac centrée sur la MC située en z. La diffusion se décrit par un étalement de chaque pic de Dirac en profils Gaussiens.

Si $G(z-z', t)$ est une Gaussienne centrée en z, le profil de concentration après diffusion devient :

$$C(z, t) = \sum_{-\infty}^{+\infty} C(z') G(z - z', t) \quad \text{Eq.(I-9)}$$

ou, de manière plus explicite, si $C_i(z_j, t)$ est la concentration de l'espèce i au point de coordonnée z_j à l'instant t :

$$C_i(z_j, t) = \sum_{k=-\infty}^{+\infty} \frac{C_i(z_k, 0)}{2\sqrt{\pi Dt}} \exp\left[-\frac{(z_k - z_j)^2}{4Dt}\right] \quad \text{Eq.(I-10)}$$

V-3-Profil graduel du puits:

Les considérations précédentes permettent de déterminer le profil énergétique réel des puits. Un tel profil est représenté Fig I-5 avant et après diffusion. Le profil après diffusion (c) est globalement graduel mais il est obtenu en considérant chaque MC comme une région homogène et donc équipotentielle. Dans chaque MC, le potentiel est calculé selon les Eqs.I-6 et I-7 d'après la concentration C_i déterminée grâce aux résultats des § V-1 et V-2. En outre, toutes les propriétés physiques de l'alliage telles la maille cristalline, les masses effectives, etc... sont calculées MC par MC. On établit de cette manière un tableau rassemblant toutes les propriétés physiques de chaque MC de l'empilement.

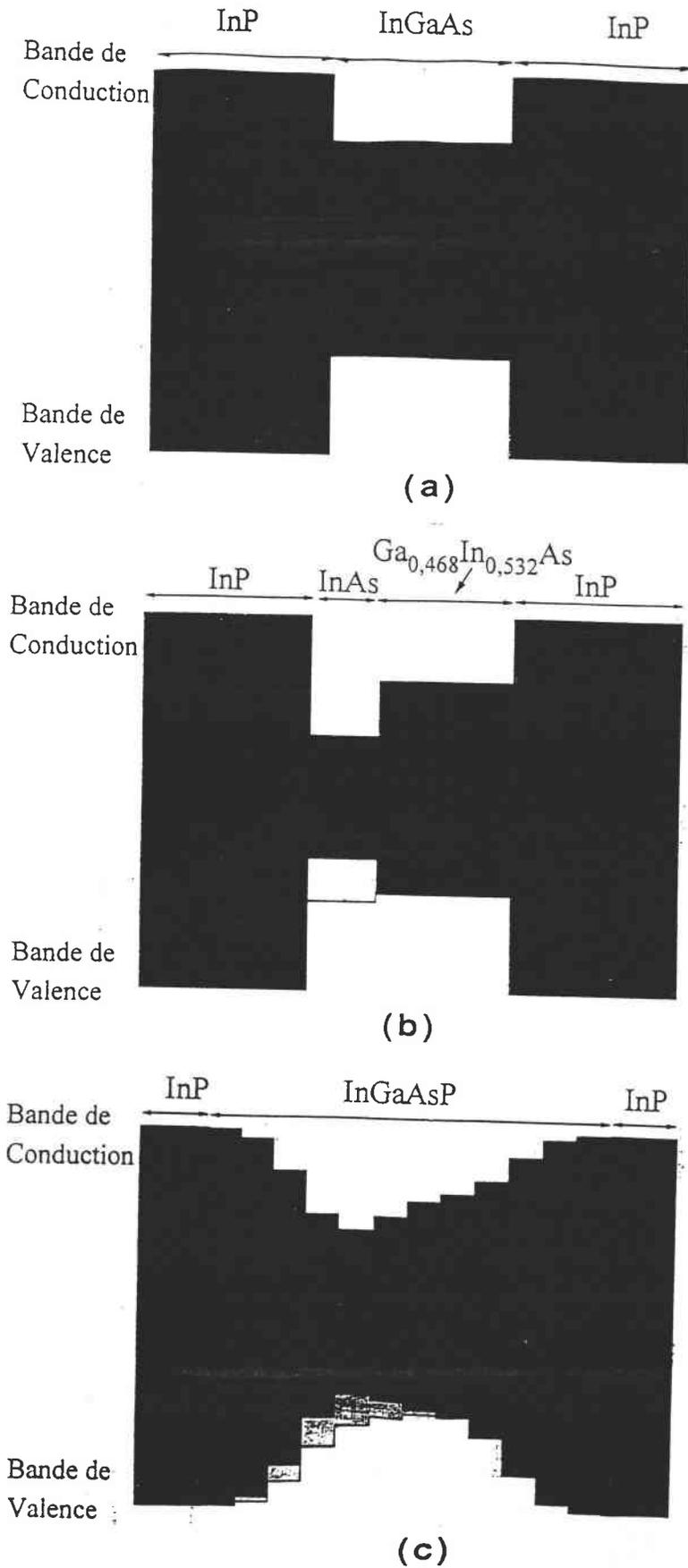


Figure I-5 : Représentation énergétique d'un PQ GaInAs/InP, (a) profil nominal, (b) profil après substitution de l'arsenic au phosphore et (c) profil après diffusion dans la structure des différentes espèces.

REFERENCES :

- [1] J. Camassel, S. Juillaguet, R. Schwedler, K. Wolter, F.H. Baumann, K. Leo et J.P. Laurenti, *J. de Phys.IV C5(3)*, 99 (1993).
- [2] Sandrine Juillaguet, 'Effets d'interruptions de croissance sur les propriétés optiques des puits quantiques ultra-minces GaInAs/InP'. Thèse de doctorat, Montpellier, 1992.
- [3] J.F. Nye, 'Propriétés Physiques des Cristaux', Editions Dunod (Paris 1961).
- [4] C.P. Kuo, S.K. Vong, R.M. Cohen and G.B. Stringfellow, *J. Appl. Phys.* **57**, 5428 (1985).
- [5] G.L. Bir and G.E. Pikus, *Symmetry and Strain-Induced Effects in Semiconductors* (Wiley, N.Y.,1974).
- [6] S. Adachi, *J. Appl. Phys.* **53**, 8775 (1982).
- [7] K.P. Homewood et D.J. Dunstan, *J. Appl. Phys.* **69**, 7581 (1991).

CHAPITRE II

ENERGIES DE CONFINEMENT D'UN PUIITS QUANTIQUE QUELCONQUE DANS L'APPROXIMATION DES BANDES PARABOLIQUES.

I-Introduction:

Le calcul de la structure de bandes de puits quantiques peut se faire avec divers degrés d'approximation selon le contexte (profil du puits, largeur de puits, précision souhaitée, etc...). Par souci de clarté pour la suite de l'exposé, le modèle le plus simple de résolution est d'abord présenté dans ce chapitre. Ce modèle se place dans le cadre de l'approximation de la fonction enveloppe et utilise un modèle de structure de bandes paraboliques^[1]. Nous le résoudrons dans un puits à profil rectangulaire (§II) puis, grâce à la technique des matrices de transfert (TMT), dans le cas d'un profil graduel (§III). Nous concluerons sur les limites d'un tel modèle et, au cours du Chapitre III, nous envisagerons un modèle plus complet.

II- Puits quantique rectangulaire :

II-1- Détermination de l'énergie totale d'un porteur :

Comme nous l'avons vu dans le chapitre I, le diagramme énergétique d'un puits quantique rectangulaire peut être décrit à l'aide des valeurs ΔE_c , ΔE_v des offsets de bandes avec la relation :

$$\Delta E_g = \Delta E_c + \Delta E_v \quad \text{Eq.(II-1)}$$

Dans le cas d'un cristal parfait, les états électroniques sont décrits par les fonctions propres $\Psi_{n,k}(\vec{r})$, solutions de l'équation de Schrödinger :

$$H\Psi_{n,k}(\vec{r}) = E_n(\vec{k})\Psi_{n,k}(\vec{r}) \quad \text{Eq.(II-2)}$$

L'Hamiltonien s'écrit $H = \frac{p^2}{2m_0} + V_c(\vec{r})$, où m_0 est la masse de l'électron libre, \vec{p} l'opérateur quantité de mouvement ($\vec{p} = -i\hbar\vec{\nabla}$), et $V_c(\vec{r})$ le potentiel cristallin périodique associé au cristal.

A chaque valeur du vecteur d'onde \vec{k} correspond une série d'états propres et d'énergies propres $E_n(\vec{k})$ repérées par l'indice n . Pour chaque valeur donnée de n , les valeurs propres $E_n(\vec{k})$ se répartissent, en fonction de \vec{k} , sur une bande d'énergie permise. Dans le cas où la courbure de bande (au voisinage du centre de zone) varie peu, la masse effective m^* suffit pour caractériser la dispersion énergétique $E_n(\vec{k})$ pour chaque type de porteur. On est alors dans l'approximation des bandes paraboliques^[1]. Un schéma type de structure de bandes III-V dans cette approximation est représentée Fig.II-1. Les deux bandes de valence dégénérées en $k = 0$ sont traditionnellement appelées bandes des trous lourds (HH) pour celle ayant la plus grande courbure et bande des trous légers (LH) pour l'autre.

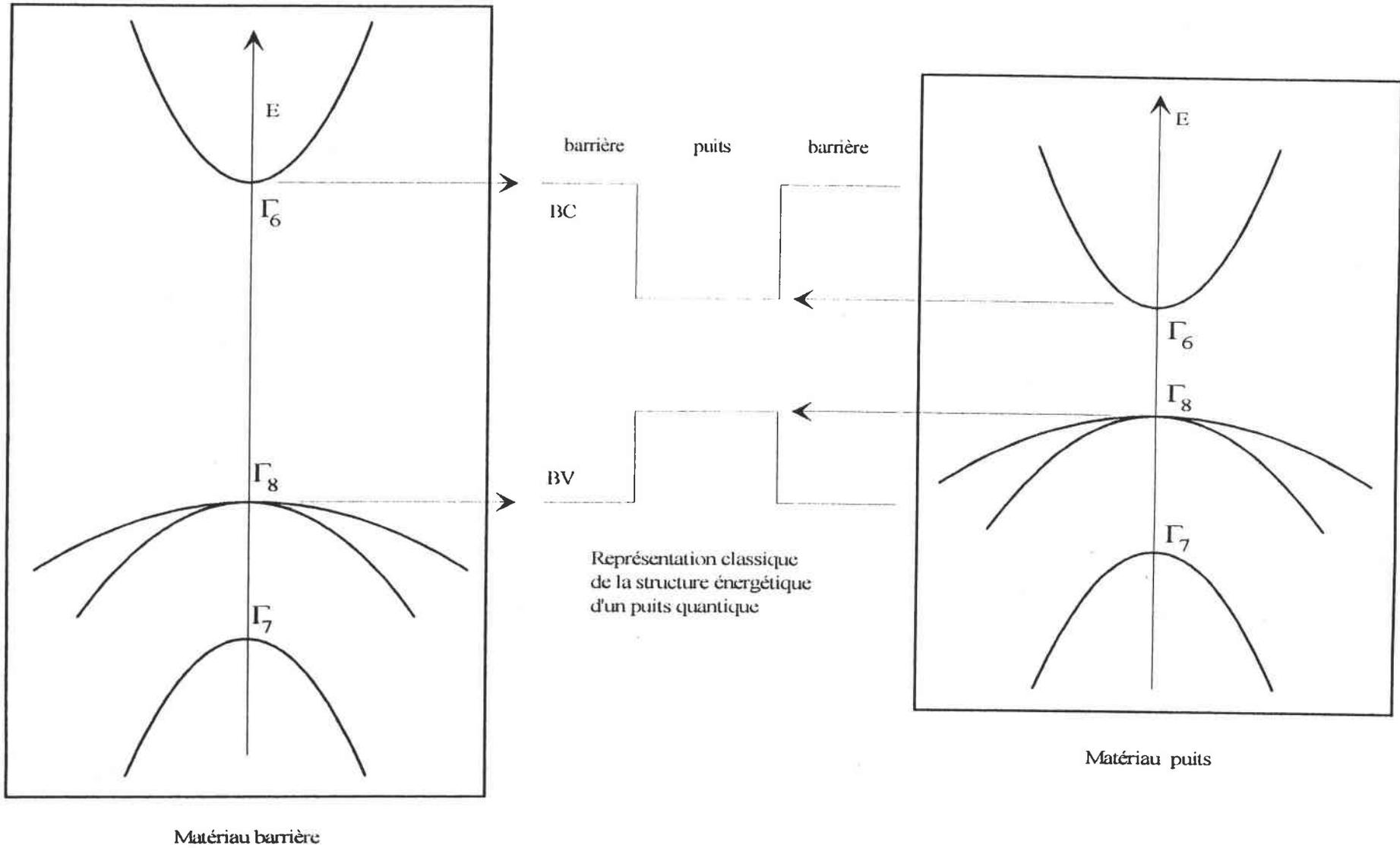


Figure II-1 : Structure de bandes du matériau barrière (à gauche) et du matériau puits (à droite) dans l'approximation des bandes paraboliques. Au centre est représentée la structure énergétique d'un PQ constitué de ces mêmes matériaux puits et barrière.

Enfin, les fonctions propres $\Psi_{n,k}(\vec{r})$ sont des fonctions de Bloch^[2] normées sur tout le volume du cristal. D'une façon générale :

$$\Psi_{n,k}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} U_{n,k}(\vec{r}), \quad \text{Eq.(II-3)}$$

où $U_{n,k}(\vec{r})$ est périodique et ne dépend que de la période \vec{R} du réseau cristallin :

$$U_{n,k}(\vec{r} + \vec{R}) = U_{n,k}(\vec{r}). \quad \text{Eq.(II-4)}$$

Dans un puits quantique, le cristal est perturbé par le potentiel $V(\vec{r})$ de confinement quantique. L'approximation de la fonction enveloppe consiste à considérer les fonctions $U_{n,k}(\vec{r})$ comme identiques dans les deux matériaux. Les solutions de la nouvelle équation de Schrödinger prenant en compte $V(\vec{r})$ s'écrivent:

$$\Psi_{n,k}(\vec{r}) = F_{n,k}(\vec{r}) U_{n,k}(\vec{r}), \quad \text{Eq.(II-5)}$$

où $F_{n,k}(\vec{r})$ est la fonction enveloppe associée au niveau d'énergie $E_n(\vec{k})$, pour des porteurs confinés par le puits de potentiel $V(\vec{r})$.

Si on repère selon z la direction de croissance (perpendiculaire aux plans des MCs) et si on néglige les fluctuations de composition dans le plan de chaque MC, le potentiel $V(\vec{r})$ ne dépend que de z : $V(\vec{r})=V(z)$. Le mouvement des électrons dans le plan (x,y) n'est donc pas affecté. La fonction enveloppe se décompose alors de la façon suivante :

$$F_{n,\vec{k}}(\vec{r}) = F_{n,\vec{k}}(x,y,z) = \Phi_{n,\vec{k}_{//}}(z) e^{i(k_x x + k_y y)}, \quad \text{Eq.(II-6)}$$

où $\vec{k}_{//}$ est la composante du vecteur d'onde \vec{k} dans le plan (x,y) , de coordonnées k_x et k_y .

$\Phi_{n,\vec{k}_{//}}(z)$ décrit le mouvement des porteurs dans la direction z de confinement, tandis que l'onde plane décrit leur mouvement libre dans le plan (x,y) .

En restant dans le cadre de l'approximation des bandes paraboliques, $F_{n,\vec{k}}(\vec{r})$ est solution de l'équation de masse effective :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2} \vec{\nabla} \frac{1}{m^*(z)} \vec{\nabla} + V(z) \right] F_{n,\vec{k}}(\vec{r}) = E_n(\vec{k}_{//}) F_{n,\vec{k}}(\vec{r}) \quad \text{Eq.(II-7)}$$

dans laquelle l'inhomogénéité du milieu dans la direction z se répercute sur la masse effective.

Pour chaque type de porteur (électron, HH ou LH), à chaque valeur du vecteur d'onde $\vec{k}_{//}$ dans le plan correspond une série d'énergies propres $E_n(\vec{k}_{//})$. Pour chaque valeur de n , les valeurs propres définissent une sous-bande.

En considérant le puits quantique comme une juxtaposition de régions homogènes et en reportant l'Eq. II-6 dans II-7, il vient :

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*(z)} \frac{d^2 \Phi_{n,\vec{k}_{//}}(z)}{dz^2} + \left[\frac{\hbar^2 k_{//}^2}{2m^*(z)} + V(z) \right] \Phi_{n,\vec{k}_{//}}(z) = E_n(\vec{k}_{//}) \Phi_{n,\vec{k}_{//}}(z) \quad \text{Eq.(II-8)}$$

Les états propres des porteurs dans le puits quantique sont déterminés par la résolution de cette dernière version de l'équation de la masse effective, pour chaque valeur de $k_{//}$.

En ne considérant le mouvement des porteurs que selon la direction z de quantification ($\vec{k}_{//} = \vec{0}$), les valeurs propres $E_n = E_n(0)$ forment un spectre de niveaux d'énergie discret caractéristique de toutes les structures à confinement quantique.

Finalement, à chaque niveau d'énergie E_n dans la direction z , on associe une sous-bande d'énergie dans le plan (x,y) . Les extrema des sous bandes dans le plan (k_x, k_y) correspondent aux niveaux discrets dans la direction de quantification k_z . Une telle situation est caractéristique de tous les systèmes à un degré de confinement quantique. Cette structure est représentée Fig. II-2.

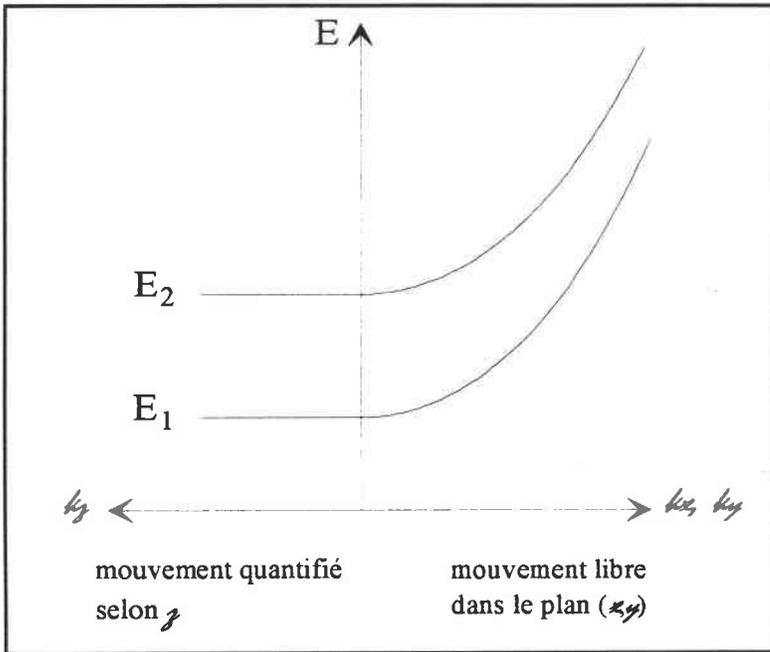


Figure II-2 : Courbes de dispersion de l'énergie d'un PQ dans la direction de croissance (k_z) et dans le plan du puits (k_x, k_y).

II-2- Méthode de résolution de l'équation de la masse effective :

La résolution de l'équation de la masse effective (Eq. II-8 avec $k_{//} = 0$) permet d'obtenir les énergies de confinement. Cette résolution est immédiate (voir par exemple la référence [3]) et ne sera rappelée que pour mémoire.

Considérons le cas d'un minimum Γ_6 et prenons l'origine des potentiels au fond du puits. En raison de la symétrie du profil, nous prendrons l'origine de l'axe z au centre du puits. Les interfaces sont situées aux points d'abscisse $-L/2$ et $L/2$, si L désigne la largeur du matériau puits. V_0 désigne la hauteur de barrière et m_1 et m_2 les masses effectives des matériaux barrière (B) et puits (A) respectivement. Ces conventions sont résumées sur la Fig. II-3.

Si l'on écrit les solutions de l'équation de la masse effective dans chacune des trois régions, on obtient les fonctions d'onde suivantes :

i) Région I :

$$\phi_I(z) = A_1 \exp(K_1 z) + A_2 \exp(-K_1 z)$$

$$\text{avec } K_1 = \sqrt{\frac{2m_1(V_0 - E)}{\hbar^2}}$$

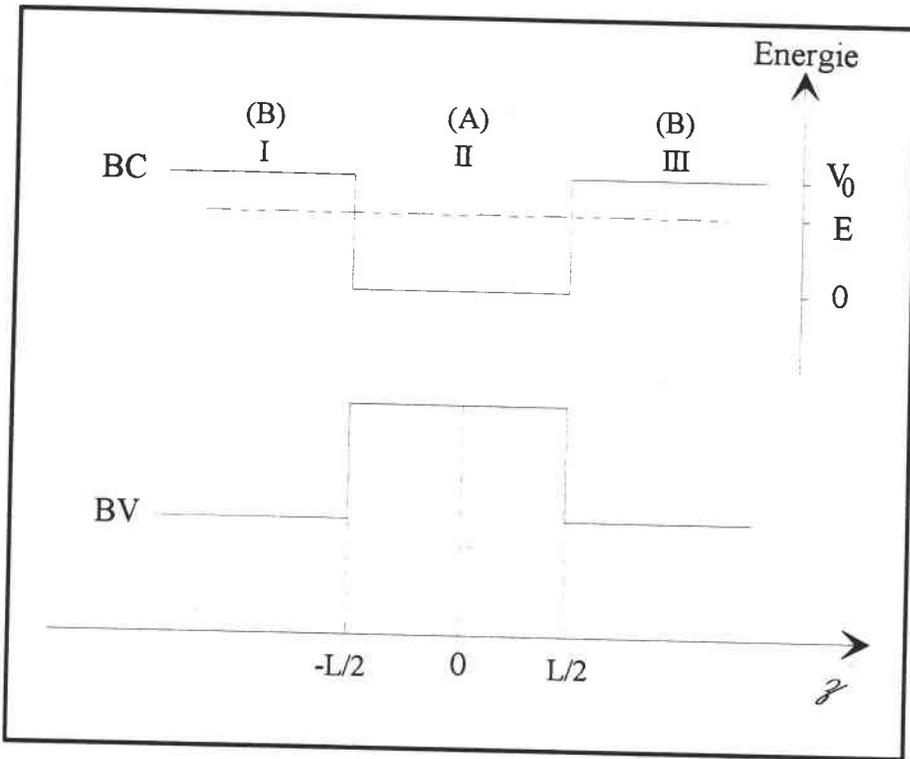


Figure II-3 : Définition des conventions utilisées dans la résolution de l'équation de la masse effective. L'origine des énergies est prise en fond de puits.

Nous sommes dans le cas d'états liés, la densité de probabilité doit donc s'annuler à l'infini (ici $-\infty$ car $\phi_I(z)$ est définie pour $z < 0$), par conséquent $A_2 = 0$ et $\phi_I(z)$ s'écrit :

$$\phi_I(z) = A_1 \exp(K_1 z) \quad \text{Eq. (II-9-a)}$$

ii) Région II :

$$\phi_{II}(z) = B_1 \exp(iK_2 z) + B_2 \exp(-iK_2 z) \quad \text{Eq. (II-9-b)}$$

$$\text{avec } K_2 = \sqrt{\frac{2m_2 E}{\hbar^2}}$$

iii) Région III :

$$\phi_{III}(z) = C_1 \exp(K_1 z) + C_2 \exp(-K_1 z)$$

Comme pour la région I, la densité de probabilité doit s'annuler en $+\infty$, donc C_1 doit être nul et la nouvelle expression de $\phi_{III}(z)$ est :

$$\phi_{III}(z) = C_2 \exp(-K_1 z) \quad \text{Eq. (II-9-c)}$$

La densité de probabilité de présence $|\phi(z)|^2$ et la densité de courant $\frac{1}{m^*(z)} \frac{d\phi}{dz}$ sont des fonctions continues en z . Cette continuité doit être assurée aux interfaces en $-L/2$ et $L/2$:

$$\begin{cases} \phi_I\left(-\frac{L}{2}\right) = \phi_{II}\left(-\frac{L}{2}\right) \\ \phi_{II}\left(\frac{L}{2}\right) = \phi_{III}\left(\frac{L}{2}\right) \end{cases} \quad \text{Eq.(II-10)}$$

$$\begin{aligned} \left[\frac{1}{m_1^*} \frac{d\phi_I(z)}{dz} \right]_{-\frac{L}{2}} &= \left[\frac{1}{m_2^*} \frac{d\phi_{II}(z)}{dz} \right]_{-\frac{L}{2}} \\ \left[\frac{1}{m_2^*} \frac{d\phi_{II}(z)}{dz} \right]_{\frac{L}{2}} &= \left[\frac{1}{m_1^*} \frac{d\phi_{III}(z)}{dz} \right]_{\frac{L}{2}} \end{aligned} \quad \text{Eq.(II-11)}$$

Ces quatre équations aboutissent à un système de deux équations linéaires, sans second membre reliant les coefficients B_1 et B_2 :

$$\begin{cases} \left(\frac{K_2}{m_2} - \frac{iK_1}{m_1} \right) B_1 + \left(\frac{K_2}{m_2} + \frac{iK_1}{m_1} \right) B_2 = 0 \\ \left(\frac{K_2}{m_2} - \frac{iK_1}{m_1} \right) B_1 \exp(iK_1L) + \left(\frac{K_2}{m_2} + \frac{iK_1}{m_1} \right) B_2 \exp(-iK_1L) = 0 \end{cases} \quad \text{Eq.(II-12)}$$

La condition d'existence de la particule exige B_1 et $B_2 \neq 0$. Le déterminant du système II-12 doit donc être nul. L'équation finale s'écrit :

$$\cos(K_1L) - \frac{1}{2} \left(\sqrt{Q} - \frac{1}{\sqrt{Q}} \right) \sin(K_1L) = 0 \quad \text{Eq.(II-13)}$$

où $Q = \frac{m_1}{m_2} \frac{E}{(E - V_0)}$.

Dans ce cas simple, la résolution numérique de II-13 conduit aux énergies de confinement cherchées.

Les sous-bandes $E_n(\bar{k}_{//})$ seront obtenues en répétant cette démarche pour diverses valeurs de $k_{//}$.

III-Puits à profil graduel - Technique des matrices de transfert:

Dans tout ce qui précède, nous avons supposé que le potentiel perturbateur $V(\bar{r})$ variait de façon discontinue en $-L/2$ et $L/2$ mais restait uniforme dans chaque région (puits ou

barrière). En d'autres termes, nous avons supposé que la composition, homogène dans chaque région, variait de façon discontinue aux interfaces. Ce traitement peut être étendu au cas des échantillons où les effets d'interdiffusion modifient graduellement les profils de composition initiaux. La structure est alors constituée d'un empilement de MCs (voir Chap.I) constituant chacune une région équipotentielle. Toutefois, la recherche des états propres exige l'écriture d'autant de couples d'équations de continuité qu'il y a d'"interfaces". Cette tâche fastidieuse est facilitée par le recours à une technique de matrices de transfert (TMT).

Plaçons nous dans le cas d'un profil de potentiel quelconque que l'on divise en N-1 régions finies de largeur respective d_j ($1 \leq j \leq N-1$), comprises entre deux barrières semi-infinies numérotées 0 et N, respectivement (Figure II-4).

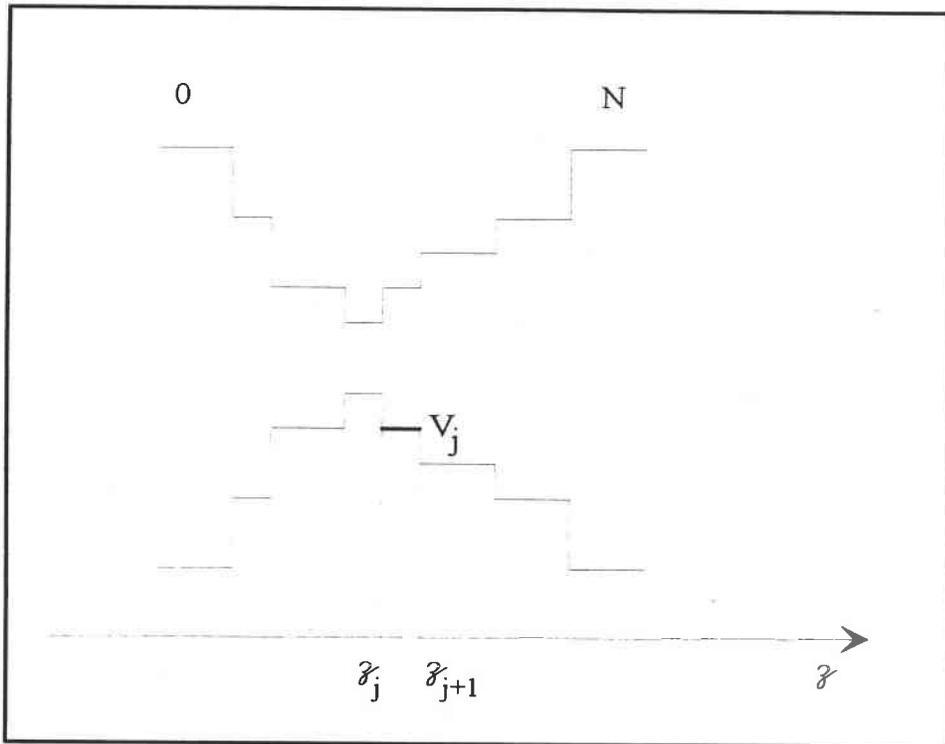


Figure II-4 : Puits à profil de potentiel quelconque, divisé en N-1 régions et compris entre deux barrières numérotées respectivement 0 et N.

Dans chacune de ces régions, le potentiel V_j et la masse m_j sont considérés comme uniformes. Dans la couche j , la fonction d'onde solution de l'équation de la masse effective s'écrit ^[4]:

$$\Psi_j(z) = A_j \exp[ik_j(z - z_j)] + B_j \exp[-ik_j(z - z_j)], \quad \text{Eq.(II-14)}$$

où z_j est l'abscisse de 'l'interface' entre la région $j-1$ et la région j .

A_j et B_j sont des constantes complexes et k_j est relié à l'énergie par :

$$k_j = \sqrt{\frac{2m_j}{\hbar^2} (E - V_j)}. \quad \text{Eq.(II-15)}$$

A priori, k_j peut être réel ou imaginaire. En effet, dans le cas de régions classiquement permises ($E > V_j$) k_j est réel et $\Psi_j(z)$ est une combinaison linéaire d'ondes planes se propageant le long de l'axe de croissance z . Au contraire, dans le cas où la région est classiquement interdite ($E < V_j$), k_j est imaginaire et $\Psi_j(z)$ est décrite par un état évanescent correspondant à des fonctions exponentielles dont l'argument est strictement réel.

Toutes les constantes complexes A_j et B_j sont reliées par les conditions aux limites, à 'l'interface' entre deux couches consécutives. Comme dans le cas d'un simple puits quantique, on applique la continuité de $\Psi(z)$ et $\frac{1}{m^*(z)} \frac{d\Psi(z)}{dz}$.

L'écriture de cette continuité en z_j conduit à la relation matricielle entre les coefficients de $\Psi_{j-1}(z)$ et de $\Psi_j(z)$:

$$\begin{pmatrix} A_j \\ B_j \end{pmatrix} = M_j \begin{pmatrix} A_{j-1} \\ B_{j-1} \end{pmatrix}, \quad \text{Eq.(II-16)}$$

où M_j est la matrice de transfert de la région $j-1$ vers la région j . On a :

$$M_j = \frac{1}{2k'_j} \begin{pmatrix} k'_j + k'_{j-1} & k'_j - k'_{j-1} \\ k'_j - k'_{j-1} & k'_j + k'_{j-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \exp(ik_{j-1}d_{j-1}) & 0 \\ 0 & \exp(-ik_{j-1}d_{j-1}) \end{pmatrix} \quad \text{Eq.(II-17)}$$

avec $k'_j = \frac{k_j}{m_j}$.

En exprimant la multiplication des matrices de transfert à chaque interface, on débouche (pour la totalité de la microstructure) sur une relation entre les coefficients des régions extrêmes :

$$\begin{pmatrix} A_N \\ B_N \end{pmatrix} = M_N \cdot M_{N-1} \cdot \dots \cdot M_2 \cdot M_1 \begin{pmatrix} A_0 \\ B_0 \end{pmatrix} \quad \text{Eq.(II-18)}$$

$$= \begin{pmatrix} \alpha_{11} & \alpha_{12} \\ \alpha_{21} & \alpha_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_0 \\ B_0 \end{pmatrix}$$

Puisque nous nous limitons à l'étude des états liés, les fonctions d'onde, solutions de l'équation de la masse effective, doivent s'annuler en plus et moins l'infini. Nous devons donc avoir $B_0 = 0$ et $A_N = 0$. Cette condition est satisfaite si l'élément α_{11} de la matrice de transfert de la structure est nul. Ainsi, les énergies de confinement seront solutions de l'équation :

$$\alpha_{11}(E) = 0 \quad \text{Eq.(II-19)}$$

Ici encore, les sous-bandes $E_n(\vec{k}_{//})$ seront obtenues en répétant cette démarche pour diverses valeurs de $k_{//}$.

IV-Remarques sur les approximations de ce calcul :

La première approximation faite est celle de la fonction enveloppe. Cette approximation a été récemment remise en cause ^[5-7] et une approche plus précise a été développée sous le nom de théorie de la fonction enveloppe exacte. Toutefois, le formalisme de cette nouvelle approche reste sensiblement plus lourd que celui de l'approximation conventionnelle, malgré des tentatives pour le rendre aisément exploitable ^[8,9]. Par ailleurs, les résultats expérimentaux les plus récents sont encore interprétés ou modélisés avec succès dans le cadre de l'approximation conventionnelle ^[10-12]. Nous resterons donc dans ce cadre pour l'analyse des résultats de spectrométrie magnéto-optique.

La deuxième approximation faite dans ce chapitre est l'approximation des bandes paraboliques. Largement répandue comme approche simple et rapide dans des cas adaptés tels que les propriétés optiques mettant en jeu les premiers niveaux de confinement de conduction et valence ^[13], elle conduit à des résultats erronés dès que les phénomènes étudiés impliquent des états à vecteur d'onde plus éloigné du centre de zone. C'est le cas des transitions magnéto-excitoniques dans lesquelles le mouvement relatif de la paire électron-trou en interaction coulombienne est accru par l'application du champ magnétique ^[14].

Nous adopterons donc, en accord avec les auteurs des Réfs. [10] et [11], l'approche plus précise donnée par la théorie $\vec{k} \cdot \vec{p}$ dont les aspects indispensables à notre étude font l'objet du chapitre III.

REFERENCES:

- [1] G. Bastard, 'Wave Mechanics Applied to Semiconductor Heterostructures', les Editions de Physique (Paris 1989).
- [2] C Kittel, 'Physique de l'Etat Solide', Dunod Universités (5ème édition 1983).
- [3] C. Cohen Tanoudji B. Diu, F. Laloë 'Mécanique Quantique', Editions Hermann.
- [4] S. Juillaguet, J.P. Laurenti, R. Schwedler, K. Wolter, J. Camassel and H. Kurz, Non-stoichiometry in semiconductors, p 155, Elsevier (1992).
- [5] M.G. Burt, J. Phys. Condens. Matter **4**, 6651 (1992).
- [6] M.G. Burt, Phys. Rev. **B 50**, 7518 (1994).
- [7] T.L. Li and K.J. Kuhn, Phys. Rev. **B 50**, 8589 (1994).
- [8] B.A. Foreman, Phys. Rev. **B 48**, 4964 (1993).
- [9] B.A. Foreman, Phys. Rev. **B 49**, 1757 (1994).
- [10] M. Sugawara, N. Okazaki, T. Fujii and S. Yamazaki, Phys. Rev. **B 48**, 8102 (1993).
- [11] M. Sugawara, N. Okazaki, T. Fujii and S. Yamazaki, Phys. Rev. **B 48**, 8848 (1993).
- [12] C.S. Chang and S.L. Chuang, IEEE J. of Selected Topics in Quantum Electronics, **1**, 218 (1995).
- [13] J. Camassel S. Juillaguet, R. Schwedler, K. Wolter, F.H. Baumann, K. Leo et J.P. Laurenti, J. de Phys. IV **C5(3)**, 99(1993).
- [14] M. Sugawara, Phys. Rev. **B 45**, 11423 (1992).

CHAPITRE III

STRUCTURE ELECTRONIQUE DES PUIITS QUANTIQUES : THEORIE k.p

A-INTRODUCTION :

Dans le puits rectangulaire comme dans le puits graduel, nous nous étions placés dans le cadre de l'approximation des bandes paraboliques. Toutefois, quand on confronte cette approximation aux résultats expérimentaux, on ne peut que constater ses limites (voir par ex. [1,2,3]). Il faut donc adopter un modèle prenant en compte la non parabolicité des bandes. Les effets de non parabolicité proviennent de l'interaction des différentes bandes de valence entre elles ou des interactions bande de conduction-bande de valence. Dans la littérature^[4-6], la prise en compte de la non parabolicité se fait généralement grâce à la théorie $k.p$ à divers degrés de développement. Pour la description de la bande de conduction, nous utiliserons la théorie $k.p$ au premier ordre (modèle de Kane à 8 bandes^[7,8]) qui ne prend en compte que les interactions entre la bande de conduction et chaque composante de la bande de valence. Pour la bande de valence, nous utiliserons la théorie $k.p$ au deuxième ordre (théorie de Luttinger^[9]) prenant en compte les interactions entre composantes de la bande de valence ainsi que les effets de bandes plus éloignées.

B-GENERALITES SUR LA THEORIE kp :

La théorie kp a été, à l'origine, développée pour étudier les propriétés optiques des semiconducteurs à proximité d'un extremum de bande, en l'occurrence dans les semiconducteurs à gap direct, à proximité du centre de zone de Brillouin ($k = 0$) sans pour autant supposer les bandes paraboliques. Cette méthode consiste à considérer qu'un état propre en $k \neq 0$ peut être développé sur la base des états propres en centre de zone. Dès lors, apparaît dans l'Hamiltonien un terme en " $k.p$ " que l'on pourra traiter comme une perturbation pour des valeurs de k petites.

Divers niveaux de calculs sont possibles dans le cadre de cette méthode selon l'ordre de la perturbation et le nombre de bandes prises en compte.

La base que nous utiliserons tout au long de ce chapitre est constituée des parties périodiques u_0^j ($1 \leq j \leq 8$) des fonctions de Bloch décrivant les huit états respectifs en centre de zone^[7,8]:

$$\left. \begin{aligned}
 &|S \uparrow\rangle, |S \downarrow\rangle, \\
 &\left| \begin{smallmatrix} 3 & 3 \\ 2 & 2 \end{smallmatrix} \right\rangle = -\frac{1}{\sqrt{2}} |(X + iY) \uparrow\rangle, \\
 &\left| \begin{smallmatrix} 3 & -3 \\ 2 & -2 \end{smallmatrix} \right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |(X - iY) \downarrow\rangle, \\
 &\left| \begin{smallmatrix} 3 & 1 \\ 2 & 2 \end{smallmatrix} \right\rangle = -\frac{1}{\sqrt{6}} |(X + iY) \downarrow\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}} |Z \uparrow\rangle, \\
 &\left| \begin{smallmatrix} 3 & -1 \\ 2 & -2 \end{smallmatrix} \right\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}} |(X - iY) \uparrow\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}} |Z \downarrow\rangle, \\
 &\left| \begin{smallmatrix} 1 & 1 \\ 2 & 2 \end{smallmatrix} \right\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} |(X + iY) \downarrow\rangle + \frac{1}{\sqrt{3}} |Z \uparrow\rangle, \\
 &\left| \begin{smallmatrix} 1 & -1 \\ 2 & -2 \end{smallmatrix} \right\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} |(X - iY) \uparrow\rangle - \frac{1}{\sqrt{3}} |Z \downarrow\rangle.
 \end{aligned} \right\} \begin{array}{l} \text{pour les états de conduction} \\ \\ \text{pour les états de valence} \end{array} \quad \text{Eq. (III-1)}$$

\uparrow et \downarrow sont les fonctions spin. Les états S , à symétrie d'orbitale atomique s , constituent la majeure partie des états de conduction alors que les états X , Y et Z , à symétrie d'orbitale p (p_x , p_y et p_z) constituent la majeure partie des états de valence. Leur écriture en représentation

$|J, m_J\rangle$ permet de diagonaliser l'interaction spin-orbite. Ainsi, les états $\left|\frac{3}{2}, \pm \frac{3}{2}\right\rangle$ et $\left|\frac{3}{2}, \pm \frac{1}{2}\right\rangle$ correspondent aux composantes dégénérées en Γ_8 (trous lourds et trous légers respectivement) et les états $\left|\frac{1}{2}, \pm \frac{1}{2}\right\rangle$ correspondent à la composante Γ_7 distincte des deux autres par effet du couplage spin-orbite (Fig. I-4-b).

C-THEORIE kp AU PREMIER ORDRE - BANDE DE CONDUCTION:

Pour calculer la structure de bande de conduction de nos échantillons, nous utilisons le modèle de Kane dans la théorie $k.p$ au premier ordre. Kane^[8] a montré grâce à ses calculs de perturbation que, dans le cas de matériaux massifs, la masse effective et la non parabolicité de la bande de conduction provenait des interactions au premier ordre entre les états de valence p et les états de conduction s . Bastard^[1] a diagonalisé la matrice de l'hamiltonien $k.p$ au premier ordre dans des PQs de semiconducteurs à gap direct. Il a montré ainsi que la masse effective de l'électron dans le plan est plus grande que la masse dans le matériau massif 3D, m_{Γ_6} .

I-Détermination de l'Hamiltonien de la bande de conduction :

Pour des puits quantiques III-V ayant un gap fondamental au point Γ , la fonction d'onde dans la base des états (III-1) s'écrit^[1] :

$$\psi = \sqrt{\frac{\Omega}{D}} e^{i\vec{k}_{//} \cdot \vec{r}} \sum_{j=1}^8 \varphi_n^j(z, \vec{k}_{//}) u_0^j \quad \text{Eq.(III-2)}$$

où Ω est le volume de la cellule unité, D est la surface des PQs, $\vec{k}_{//}$ est le vecteur d'onde dans le plan du puits, \vec{r} est le vecteur repérant le porteur dans le plan du puits, z est la coordonnée selon la direction de croissance, et $\varphi_n^j(z, \vec{k}_{//})$ la fonction enveloppe représentant un état confiné de nombre quantique n . En approximation de la fonction enveloppe, on considère que les fonctions de base u_0^j sont les mêmes dans les barrières et dans les puits.

Dans la base (III-1) choisie, l'axe de quantification du moment angulaire est dans la direction de croissance z [001].

Pour prendre en compte les effets de déformation, les auteurs de la référence [10] ont procédé à un changement de base permettant de diagonaliser l'Hamiltonien de déformation pour des PQs épitaxiés selon la direction [001] avec déformation biaxiale. Cette base est la suivante :

$$\begin{aligned} f_s^+ &= |S \uparrow\rangle, \\ f_s^- &= |S \downarrow\rangle, \\ f_{HH}^\pm &= \left| \frac{3}{2}, \pm \frac{3}{2} \right\rangle, \\ f_{LH}^\pm &= \alpha \left| \frac{3}{2}, \pm \frac{1}{2} \right\rangle + \beta \left| \frac{1}{2}, \pm \frac{1}{2} \right\rangle, \\ f_{SO}^\pm &= -\beta \left| \frac{3}{2}, \pm \frac{1}{2} \right\rangle + \alpha \left| \frac{1}{2}, \pm \frac{1}{2} \right\rangle. \end{aligned} \quad \text{Eq.(III-3)}$$

avec

$$\begin{cases} \alpha = \frac{2\sqrt{2}|Q_\varepsilon|}{C} \\ \beta = \frac{(A-B)|Q_\varepsilon|}{CQ_\varepsilon} \end{cases} \quad \text{Eq.(III-4)}$$

et :

$$\begin{cases} A = \Delta_{so} + Q_\varepsilon \\ B = \sqrt{\Delta_{so}^2 + 2Q_\varepsilon\Delta_{so} + 9Q_\varepsilon^2} \\ C = \sqrt{2B(B-A)} \end{cases} \quad \text{Eq.(III-5)}$$

où $Q_\varepsilon = -\frac{1}{2}b(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} - 2\varepsilon_{zz})$ (cf Chap. I) et Δ_{so} représente le dédoublement introduit par le couplage spin-orbite ($\Gamma_8-\Gamma_7$).

α et β représentent le degré de mélange entre les états $\left|\frac{3}{2}, \pm\frac{1}{2}\right\rangle$ et $\left|\frac{1}{2}, \pm\frac{1}{2}\right\rangle$. Quand il n'y a pas de déformation, $\alpha = 1$ et $\beta = 0$. Avec déformation, α décroît et β augmente tout en préservant la normalisation $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$.

L'Hamiltonien \mathbf{k}, \mathbf{p} au premier ordre pour chaque région j est représenté dans la base (III-3) par la matrice 8×8 :

$$H = \begin{pmatrix} H_{11} & H_{12} \\ H_{21} & H_{22} \end{pmatrix} \quad \text{Eq.(III-6)}$$

avec

$$H_{11} = \begin{pmatrix} f_s^+ & f_{HH}^+ & f_{LH}^+ & f_{SO}^+ \\ P_k + V_c^j & P\hbar k_+ & \left(-\sqrt{\frac{2}{3}}\alpha + \frac{1}{\sqrt{3}}\beta\right)P\hbar k_z & \left(\sqrt{\frac{2}{3}}\beta + \frac{1}{\sqrt{3}}\alpha\right)P\hbar k_z \\ P\hbar k_- & P_k + V_{hh}^j & 0 & 0 \\ \left(-\sqrt{\frac{2}{3}}\alpha + \frac{1}{\sqrt{3}}\beta\right)P\hbar k_z & 0 & P_k + V_{lh}^j & 0 \\ \left(\sqrt{\frac{2}{3}}\beta + \frac{1}{\sqrt{3}}\alpha\right)P\hbar k_z & 0 & 0 & P_k + V_{so}^j \end{pmatrix} \begin{matrix} f_s^+ \\ f_{HH}^+ \\ f_{LH}^+ \\ f_{SO}^+ \end{matrix} \quad \text{Eq.(III-7)}$$

$$H_{12} = \begin{pmatrix} f_s^- & f_{HH}^- & f_{LH}^- & f_{SO}^- \\ 0 & 0 \left(\frac{1}{\sqrt{3}}\alpha + \sqrt{\frac{2}{3}}\beta \right) P\hbar k_- & \left(-\frac{1}{\sqrt{3}}\beta + \sqrt{\frac{2}{3}}\alpha \right) P\hbar k_- & \\ \left(\frac{1}{\sqrt{3}}\alpha + \sqrt{\frac{2}{3}}\beta \right) P\hbar k_- & 0 & 0 & 0 \\ \left(-\frac{1}{\sqrt{3}}\beta + \sqrt{\frac{2}{3}}\alpha \right) P\hbar k_- & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} f_s^+ \\ f_{HH}^+ \\ f_{LH}^+ \\ f_{SO}^+ \end{pmatrix}$$

Eq.(III-8)

$$H_{22} = H_{11} \text{ et } H_{21} = H_{12}^*$$

où $k_{\pm} = \frac{(k_x \pm ik_y)}{\sqrt{2}}$. Les termes V_i^j sont, dans la région j, les extrema respectifs des bandes i

en centre de zone : i=c, bande de conduction Γ_6 ; i=hh, bande des trous lourds Γ_8 ; i=lh, bande des trous légers Γ_8 ; i=so, bande Γ_7 . Leur profil respectif à travers la structure représente le potentiel de confinement pour le type de porteur correspondant. Ces profils dépendent des offsets de bande modifiés le cas échéant par les effets de déformations :

$$V_i^j = V_{i,0}^j + \delta V_i^j, \quad \text{Eq.(III-9)}$$

où $V_{i,0}^j$ est l'extremum de bande sans déformation et δV_i^j est le glissement introduit par la déformation.

Ainsi, en prenant comme origine des énergies le sommet Γ_8 de la bande de valence du matériau barrière (supposé non déformé), les potentiels $V_{i,0}^j$ s'expriment dans chaque région j en fonction :

→ des offsets de bande ΔE_{C0}^j (Γ_6) et ΔE_{V0}^j (Γ_8) du matériau non déformé, repérés par rapport aux extrema respectifs Γ_6 et Γ_8 du matériau barrière ;

→ du gap 3D (Γ_6 - Γ_8) du matériau barrière (non déformé) E_g^B ;

→ du dédoublement spin-orbite Δ_{so}^j ($\Gamma_8 - \Gamma_7$) :

$$V_{c,0}^j = E_g^B + \Delta E_{C0}^j$$

$$V_{HH,0}^j = V_{LH,0}^j = \Delta E_{V0}^j$$

$$V_{so,0}^j = \Delta E_{V0}^j - \Delta_{so}^j$$

Les expressions des glissements δV_i^j sont détaillées au Chap.I (Eqs I-6 et I-6bis).

$P_k = \frac{\hbar^2}{2m_0} (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2)$ est un terme énergétique d'électron libre (\hbar est la constante de

Planck réduite $\frac{h}{2\pi}$ et m_0 la masse de l'électron libre).

Enfin P est l'élément de matrice de quantité de mouvement entre états de valence et états de conduction $P = \frac{1}{m_0} \langle S | p_j | j \rangle$ où $j = X, Y, Z$. Sa valeur chiffre le couplage entre BV et BC.

Toutes les quantités définies ci-dessus peuvent être calculées pour chaque région par interpolation (Chap. I). Les effets de déformation se retrouvent dans α et β pour les termes non diagonaux et dans les extrema de bandes pour les termes diagonaux. Pour traiter l'inhomogénéité de la structure selon z , la composante k_z du vecteur d'onde sera remplacée par $-\partial/\partial z$. L'expression de la matrice (Eqs. III-7 et III-8) montre l'interaction entre les états de conduction et les différents états de valence mais ne rend compte d'aucun couplage des états de valence entre eux. Cette constatation permet de réduire la matrice 8×8 à une matrice 2×2 sur une base de deux états $s^{[10]}$:

$$\begin{pmatrix} H_d & H_n \\ H_n^* & H_d \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varphi_s^+ \\ \varphi_s^- \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \varphi_s^+ \\ \varphi_s^- \end{pmatrix} \quad \text{Eq.(III-10)}$$

où φ_s^+ et φ_s^- sont les fonctions enveloppe des états s , et où

$$H_d = \frac{P^2}{3} \left[p_z \left(\frac{(\sqrt{2}\alpha - \beta)^2}{E - V_{lh}^j} + \frac{(\sqrt{2}\beta + \alpha)^2}{E - V_{so}^j} \right) p_z + \frac{\hbar^2 k_{//}^2}{2} \left(\frac{3}{E - V_{hh}^j} + \frac{(\alpha - \sqrt{2}\beta)^2}{E - V_{lh}^j} + \frac{(\beta + \sqrt{2}\alpha)^2}{E - V_{so}^j} \right) \right] + P_k + V_c^j, \quad \text{Eq.(III-11)}$$

$$H_n = \frac{P^2 \hbar}{3} k_{//} \left[\left(\frac{(\sqrt{2}\alpha^2 - \alpha\beta - \sqrt{2}\beta^2)}{E - V_{lh}^j} p_z - p_z \frac{(\sqrt{2}\alpha^2 + \alpha\beta - \sqrt{2}\beta^2)}{E - V_{lh}^j} \right) - \left(\frac{(\sqrt{2}\alpha^2 - \alpha\beta - \sqrt{2}\beta^2)}{E - V_{so}^j} p_z - p_z \frac{(\sqrt{2}\alpha^2 + \alpha\beta - \sqrt{2}\beta^2)}{E - V_{so}^j} \right) \right] \quad \text{Eq.(III-12)}$$

avec $p_z = \hbar k_z$ et $k_{//} = (k_x, k_y)$ est le vecteur d'onde dans le plan du puits. Dans chacune des régions j , la matrice III-10 peut être diagonalisée, conduisant à une énergie propre de conduction (dégénérée d'ordre 2 à cause du spin) pour chaque valeur de (k_x, k_y, k_z) . Pour un mouvement restreint au plan (x, y) , $k_z = 0$ et l'élément non diagonal H_n est nul. L'équation III-13 avec $p_z = 0$ permet alors d'exprimer l'énergie cinétique $E - V_c^j$ en fonction de $k_{//}^2$ et la limite en $k_{//} \rightarrow 0$ de dégager la masse effective de conduction dans le plan (x, y) pour $\vec{k} \cong \vec{0}$:

$$\frac{1}{m_e^{//}} = \frac{P^2}{3} \left[\frac{3}{V_c^j - V_{HH}^j} + \frac{(\alpha - \sqrt{2}\beta)^2}{V_c^j - V_{LH}^j} + \frac{(\beta + \sqrt{2}\alpha)^2}{V_c^j - V_{SO}^j} \right] + \frac{1 + D'}{m_0} \quad \text{Eq.(III-13-a)}$$

En accord avec la référence [10], nous avons ajouté un terme D' de perturbation $\mathbf{k.p}$ au deuxième ordre permettant de prendre en compte l'influence globale des bandes situées à distance. L'inclusion de ce terme a été indispensable aux auteurs de la Réf. [10] pour la description de l'ensemble de leurs résultats de magnéto-optique.

Un traitement analogue pour un mouvement restreint à la direction z ($k_{//} = 0$) conduit à la masse effective m_e^\perp de conduction dans la direction z pour $\vec{k} \cong \vec{0}$:

$$\frac{1}{m_e^\perp} = \frac{2P^2}{3} \left[\frac{(\sqrt{2}\alpha - \beta)^2}{V_c^j - V_{LH}^j} + \frac{(\sqrt{2}\beta + \alpha)^2}{V_c^j - V_{so}^j} \right] + \frac{1 + D'}{m_0} \quad \text{Eq.(III-13-b)}$$

Les masses effectives données par les Eqs. III-13 a et b sont celles pour un échantillon massif et homogène de matériau constituant une région j . Elles ne prennent donc pas en compte les effets de confinement quantique. Il faut noter toutefois l'anisotropie de la masse ($m_e^{//} \neq m_e^\perp$) due aux seules déformations. Dans le cas où le matériau n'est pas déformé ($\alpha = 1$ et $\beta = 0$), la masse devient isotrope et prend la valeur m_e correspondant au minimum Γ_6 de bande de conduction :

$$\frac{1}{m_e} = \frac{2P^2}{3} \left[\frac{2}{V_{c,0}^j - V_{HH,0}^j} + \frac{1}{V_{c,0}^j - V_{so,0}^j} \right] + \frac{1 + D'}{m_0} \quad \text{Eq.(III-13-c)}$$

En introduisant le gap 3D du matériau $E_g^j = V_{c,0}^j - V_{HH,0}^j$, on obtient l'élément de matrice P en l'absence de déformation :

$$P^2 = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{m_e} - \frac{1 + D'}{m_0} \right) \frac{E_G^i (E_G^i + \Delta_{so}^i)}{E_G^i + \frac{2}{3} \Delta_{so}^i} \quad \text{Eq.(III-13-d)}$$

Sur des arguments expérimentaux, les auteurs de la Réf. [10] ont considéré P indépendant de toute déformation. Nous adopterons nous même cette hypothèse. Ainsi, dans chaque région, P pourra être calculé par l'Eq. III-13 d, après interpolation sur les paramètres impliqués.

I-a Expression de la fonction d'onde :

Associée à la diagonalisation d'une matrice 2×2 , elle s'exprimera dans chaque région j sous la forme vectorielle :

$$\begin{aligned} \psi^j(z) = \begin{bmatrix} \varphi_s^+(z) \\ \varphi_s^-(z) \end{bmatrix} = & A_+^j \begin{bmatrix} F_{1+}^j \\ F_{2+}^j \end{bmatrix} \exp(ik_{//}\rho) \exp(ik_{zj}^+(z - z_j)) + B_+^j \begin{bmatrix} F_{1+}^{j-} \\ F_{2+}^{j-} \end{bmatrix} \exp(ik_{//}\rho) \exp(-ik_{zj}^+(z - z_j)) \\ & + A_-^j \begin{bmatrix} F_{1-}^j \\ F_{2-}^j \end{bmatrix} \exp(ik_{//}\rho) \exp(ik_{zj}^-(z - z_j)) + B_-^j \begin{bmatrix} F_{1-}^{j-} \\ F_{2-}^{j-} \end{bmatrix} \exp(ik_{//}\rho) \exp(-ik_{zj}^-(z - z_j)) \end{aligned}$$

$$\text{Eq.(III-14)}$$

Les facteurs $\exp(ik_{//}\rho)$, avec $k_{//} = \sqrt{k_x^2 + k_y^2}$ et $\rho = \sqrt{x^2 + y^2}$, décrivent le mouvement libre des porteurs dans le plan des couches. Il est à noter que, d'après les propriétés d'invariance par translation du plan (x, y) ^[11], $k_{//}$ est uniforme à travers toute la structure.

Les facteurs $\exp\left[\pm ik_{zj}^{\pm}(z - z_j)\right]$ décrivent le mouvement dans la direction de quantification.

Pour une valeur donnée de $k_{//}$ et de l'énergie E , les valeurs de k_{zj}^+ et de k_{zj}^- sont obtenues par diagonalisation de l'Hamiltonien dans la région homogène j :

$$\begin{pmatrix} H_d & H_n \\ H_n^* & H_d \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varphi_s^+ \\ \varphi_s^- \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \varphi_s^+ \\ \varphi_s^- \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{vmatrix} H_d - E & H_n \\ H_n^* & H_d - E \end{vmatrix} = 0 \quad \text{Eq.(III-15)}$$

Pour chacun des quatre termes de l'expression III-14, les constantes vectorielles $\begin{bmatrix} F_{1\pm}^{j(-)} \\ F_{2\pm}^{j(-)} \end{bmatrix}$ devront vérifier l'équation de diagonalisation

$$\begin{bmatrix} H_d - E & H_n \\ H_n^* & H_d - E \end{bmatrix} \begin{bmatrix} F_{1\pm}^{j(-)} \\ F_{2\pm}^{j(-)} \end{bmatrix} = 0 \quad \text{Eq.(III-16)}$$

dans laquelle H_d et H_n sont pris avec la valeur correspondante de $\pm k_{zj}^{\pm}$.

Enfin, les constantes A_{\pm}^j et B_{\pm}^j sont obtenues par l'écriture des conditions de continuité.

I-b Equations de continuité :

Pour résoudre l'équation III-10, il nous faut appliquer les conditions de continuité de la densité de probabilité et de la densité de courant. Ces conditions ^[12] s'expriment respectivement par :

i) la continuité de $\begin{pmatrix} \varphi_s^+ \\ \varphi_s^- \end{pmatrix}$ d'une part et

ii) la continuité de $\begin{pmatrix} -\frac{1}{\mu} \frac{\partial}{\partial z} & i\sqrt{2}\eta k_- \\ -i\sqrt{2}\eta k_+ & -\frac{1}{\mu} \frac{\partial}{\partial z} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varphi_s^+ \\ \varphi_s^- \end{pmatrix}$ d'autre part.

avec

$$\mu^{-1} = \frac{2P^2}{3} \left(\frac{(\sqrt{2}\alpha - \beta)^2}{E - V_{lh}^j} + \frac{(\sqrt{2}\beta + \alpha)^2}{E - V_{so}^j} \right), \quad \text{Eq.(III-17)}$$

et

$$\eta = \frac{\sqrt{2}(\sqrt{2}\alpha^2 + \alpha\beta - \sqrt{2}\beta^2)P^2}{3} \left(\frac{1}{E - V_{lh}^j} - \frac{1}{E - V_{so}^j} \right). \quad \text{Eq.(III-18)}$$

On simplifie ici encore le formalisme avec la technique des matrices de transfert (TMT). Comme il a été précisé au chapitre II, la structure est constituée de N-1 régions homogènes de largeurs d_j finies ($1 \leq j \leq N-1$) insérées entre deux barrières semi-infinies ($j = 0 ; j = N$). Entre la région $j+1$ et la région j , on a :

$$M_j \begin{pmatrix} A_+^j \\ A_-^j \\ B_+^j \\ B_-^j \end{pmatrix} = M_{j+1} P_{j+1} \begin{pmatrix} A_+^{j+1} \\ A_-^{j+1} \\ B_+^{j+1} \\ B_-^{j+1} \end{pmatrix}, \quad \text{Eq.(III-19)}$$

avec

$$M_j = \begin{pmatrix} F_{1+}^j & F_{1-}^j & F_{2+}^j & F_{2-}^j \\ F_{2+}^j & F_{2-}^j & F_{1+}^j & F_{1-}^j \\ -\frac{i}{\mu_j} k_{zj}^+ F_{1+}^j + i\sqrt{2}\eta_j k_- F_{2+}^j & -\frac{i}{\mu_j} k_{zj}^- F_{1-}^j + i\sqrt{2}\eta_j k_- F_{2-}^j & \frac{i}{\mu_j} k_{zj}^+ F_{1+}^j + i\sqrt{2}\eta_j k_- F_{2+}^j & \frac{i}{\mu_j} k_{zj}^- F_{1-}^j + i\sqrt{2}\eta_j k_- F_{2-}^j \\ -i\sqrt{2}\eta_j k_+ F_{1+}^j - \frac{i}{\mu_j} k_{zj}^+ F_{2+}^j & -i\sqrt{2}\eta_j k_+ F_{1-}^j - \frac{i}{\mu_j} k_{zj}^- F_{2-}^j & -i\sqrt{2}\eta_j k_+ F_{1+}^j + \frac{i}{\mu_j} k_{zj}^+ F_{2+}^j & -i\sqrt{2}\eta_j k_+ F_{1-}^j + \frac{i}{\mu_j} k_{zj}^- F_{2-}^j \end{pmatrix}$$

et

$$\text{Eq.(III-20)}$$

$$P_j = \begin{pmatrix} e^{-ik_{zj}^+ d_j} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & e^{-ik_{zj}^- d_j} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{ik_{zj}^+ d_j} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{ik_{zj}^- d_j} \end{pmatrix}. \quad \text{Eq.(III-21)}$$

On peut écrire alors entre la région j et la région $j+1$:

$$\begin{pmatrix} A_+^j \\ A_-^j \\ B_+^j \\ B_-^j \end{pmatrix} = M_j^{-1} M_{j+1} P_{j+1} \begin{pmatrix} A_+^{j+1} \\ A_-^{j+1} \\ B_+^{j+1} \\ B_-^{j+1} \end{pmatrix} \quad \text{Eq.(III-22)}$$

et entre la région 0 et la région N :

$$\begin{pmatrix} A_+^0 \\ A_-^0 \\ B_+^0 \\ B_-^0 \end{pmatrix} = U \begin{pmatrix} A_+^N \\ A_-^N \\ B_+^N \\ B_-^N \end{pmatrix}, \quad \text{Eq.(III-23)}$$

avec

$$U = \prod_{j=0}^{N-1} M_j^{-1} M_{j+1} P_{j+1} \quad \text{Eq.(III-24)}$$

Les états qui nous intéressent ici sont les états liés de la structure. Par conséquent, la fonction d'onde doit tendre vers zéro dans les régions 0 et N qui sont les barrières semi-infinies. On aura donc $A_+^0 = A_-^0 = B_+^N = B_-^N = 0$. D'où la relation :

$$\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ B_+^0 \\ B_-^0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} U_{11} & U_{12} & U_{13} & U_{14} \\ U_{21} & U_{22} & U_{23} & U_{24} \\ U_{31} & U_{32} & U_{33} & U_{34} \\ U_{41} & U_{42} & U_{43} & U_{44} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_+^N \\ A_-^N \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{Eq.(III-25)}$$

Ce système est équivalent au système suivant :

$$\begin{cases} A_+^N U_{11} + A_-^N U_{12} = 0 \\ A_+^N U_{21} + A_-^N U_{22} = 0 \end{cases} \quad \text{Eq.(III-26)}$$

On suppose, bien sur, que A_+^N et A_-^N sont différents de zéro (solution non triviale). Le déterminant de ce système doit donc être nul :

$$\begin{vmatrix} U_{11} & U_{12} \\ U_{21} & U_{22} \end{vmatrix} = 0 \quad \text{Eq.(III-27)}$$

Cette équation nous donnera finalement les valeurs propres des états de conduction pour une valeur donnée de $k_{//}$. La répétition du calcul pour diverses valeurs de $k_{//}$ conduira aux sous-bandes de conduction $E(k_{//})$.

D-THEORIE k_p AU DEUXIEME ORDRE - BANDE DE VALENCE:

I-Introduction:

Une détermination correcte des états de valence nécessite la prise en compte des interactions entre les trois composantes (HH, LH et SO) de la bande de valence. Or, comme nous l'avons vu, cette interaction n'est pas prise en compte par la théorie k_p au premier ordre. En conséquence, pour calculer la structure de bande de nos échantillons, nous utiliserons la théorie k_p au deuxième ordre. Dans le cadre de cette nouvelle approche, les états de valence sont déterminés par diagonalisation d'une matrice 6×6 représentant l'Hamiltonien dans la base $|J, m_J\rangle$ ^[10-15]. Cette représentation de l'Hamiltonien pour les états de valence est couramment appelé Hamiltonien de Luttinger-Kohn. Un grand nombre de travaux antérieurs (voir par exemple les Réfs. [5] et [16-18]) ont utilisé une représentation simplifiée de l'Hamiltonien par une matrice 4×4 dans la base $|J, m_J\rangle$ limitée à $J = 3/2$, négligeant ainsi l'influence de la bande Γ_7 . Toutefois, il a été montré que, dans le cas de déformations importantes ^[13] et/ou dans le cas

de puits minces ^[19], cette influence de la bande Γ_7 ne pouvait être négligée sans erreurs significatives. En conséquence, et afin de préserver à notre étude un champ d'application le plus vaste possible, nous avons adopté systématiquement le formalisme basé sur l'Hamiltonien 6X6. Cet Hamiltonien 6X6 sera complété par l'Hamiltonien de Bir et Pikus^[20] pour la prise en compte des déformations, avant d'être diagonalisé dans chaque région puis soumis aux conditions de continuité aux interfaces grâce à la TMT.

Nous nous placerons encore dans le cas d'une croissance suivant la direction [100]. Les différents Hamiltoniens seront donc donnés dans cette direction privilégiée au niveau symétrie. Pour les autres directions cristallographiques on pourra se référer par exemple à G. Fishman^[5] ou R.H. Henderson et al.^[21] pour l'Hamiltonien 4X4 ou J. Los et al. pour l'Hamiltonien 6X6^[22].

II-Hamiltonien sans déformation - Hamiltonien de Luttinger:

L'Hamiltonien 6X6 de Luttinger Kohn ^[15] H_L est représenté dans la base des états $|j, m\rangle$ du moment angulaire donnée au § A.

Dans cette base l'Hamiltonien s'écrit^[13] :

$$H_{LK} = - \begin{pmatrix} P_k + Q_k & -S_k & R_k & 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}} S_k & \sqrt{2} R_k \\ -S_k^* & P_k - Q_k & 0 & R_k & -\sqrt{2} Q_k & \sqrt{\frac{3}{2}} S_k \\ R_k^* & 0 & P_k - Q_k & S_k & \sqrt{\frac{3}{2}} S_k^* & \sqrt{2} Q_k \\ 0 & R_k^* & S_k^* & P_k + Q_k & -\sqrt{2} R_k^* & -\frac{1}{\sqrt{2}} S_k^* \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} S_k^* & -\sqrt{2} Q_k & \sqrt{\frac{3}{2}} S_k & -\sqrt{2} R_k & P_k + \Delta_{so} & 0 \\ \sqrt{2} R_k^* & \sqrt{\frac{3}{2}} S_k^* & \sqrt{2} Q_k & -\frac{1}{\sqrt{2}} S_k & 0 & P_k + \Delta_{so} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} |3/2, 3/2\rangle \\ |3/2, 1/2\rangle \\ |3/2, -1/2\rangle \\ |3/2, -3/2\rangle \\ |1/2, 1/2\rangle \\ |1/2, -1/2\rangle \end{pmatrix} \quad \text{Eq.(III-28)}$$

avec :

$$\begin{cases} P_k = \frac{\hbar^2}{2m_0} \gamma_1 (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) \\ Q_k = \frac{\hbar^2}{2m_0} \gamma_2 (k_x^2 + k_y^2 - 2k_z^2) \end{cases} \quad \text{et} \quad \begin{cases} R_k = \frac{\hbar^2}{2m_0} \sqrt{3} [-\gamma_2 (k_x^2 - k_y^2) + 2i\gamma_3 k_x k_y] \\ S_k = \frac{\hbar^2}{2m_0} 2\sqrt{3} \gamma_3 (k_x - ik_y) k_z \end{cases}$$

Eq.(III-29)

où m_0 est la masse de l'électron libre, \hbar est la constante de Plank réduite, $\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3$, les paramètres de Luttinger et k_x, k_y, k_z , les composantes du vecteur d'onde selon les directions x [100], y [010] et z [001] respectivement. L'origine des énergies est prise au sommet Γ_8 de la bande de valence sans déformation.

Il est à noter que les états propres de cet Hamiltonien H_{LK} sont des combinaison linéaires des états propres en centre de zone : $|3/2, \pm 3/2\rangle$, dits de trous lourds (HH); $|3/2, \pm 1/2\rangle$, dits de trous légers (LH) et $|1/2, \pm 1/2\rangle$ correspondant à la levée de dégénérescence par interaction spin-orbite (SO). L'appellation HH, LH et SO n'est vrai *stricto sensu* qu'en centre de zone de Brillouin où

les états sont découplés. Néanmoins, nous appellerons par la suite les différentes bandes d'après leur nature en centre de zone.

III-Prise en compte des effets de déformation - Hamiltonien de Bir Pikus:

La déformation introduite par le désaccord de maille modifie également les états de valence de l'hétérostructure^[23]. Sa prise en compte, se fera par adjonction de l'Hamiltonien établi par Bir et Pikus^[20], souvent appelé Hamiltonien de déformation H_ϵ . Dans la base $|j, m_j\rangle$, il s'écrit :

$$H_\epsilon = - \begin{pmatrix} P_\epsilon + Q_\epsilon & -S_\epsilon & R_\epsilon & 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}}S_\epsilon & \sqrt{2}R_\epsilon \\ -S_\epsilon^* & P_\epsilon - Q_\epsilon & 0 & R_\epsilon & -\sqrt{2}Q_\epsilon & \sqrt{\frac{3}{2}}S_\epsilon \\ R_\epsilon^* & 0 & P_\epsilon - Q_\epsilon & S_\epsilon & \sqrt{\frac{3}{2}}S_\epsilon^* & \sqrt{2}Q_\epsilon \\ 0 & R_\epsilon^* & S_\epsilon^* & P_\epsilon + Q_\epsilon & -\sqrt{2}R_\epsilon^* & -\frac{1}{\sqrt{2}}S_\epsilon^* \\ -\frac{1}{\sqrt{2}}S_\epsilon^* & -\sqrt{2}Q_\epsilon & \sqrt{\frac{3}{2}}S_\epsilon & -\sqrt{2}R_\epsilon & P_\epsilon & 0 \\ \sqrt{2}R_\epsilon^* & \sqrt{\frac{3}{2}}S_\epsilon^* & \sqrt{2}Q_\epsilon & -\frac{1}{\sqrt{2}}S_\epsilon & 0 & P_\epsilon \end{pmatrix} \begin{pmatrix} |3/2, 3/2\rangle \\ |2, 2\rangle \\ |3/2, 1/2\rangle \\ |2, 2\rangle \\ |3/2, -1/2\rangle \\ |2, 2\rangle \\ |3/2, -3/2\rangle \\ |2, 2\rangle \\ |1, 1\rangle \\ |2, 2\rangle \\ |1, 1\rangle \\ |2, -1/2\rangle \end{pmatrix} \quad \text{Eq.(III-30)}$$

avec

$$\begin{cases} P_\epsilon = -a_v(\epsilon_{xx} + \epsilon_{yy} + \epsilon_{zz}) \\ Q_\epsilon = -\frac{1}{2}b(\epsilon_{xx} + \epsilon_{yy} - 2\epsilon_{zz}) \end{cases} \quad \text{et} \quad \begin{cases} R_\epsilon = \frac{\sqrt{3}}{2}b(\epsilon_{xx} - \epsilon_{yy}) - id\epsilon_{xy} \\ S_\epsilon = -d(\epsilon_{zx} - i\epsilon_{yz}) \end{cases}, \quad \text{Eq.(III-31)}$$

où a_v est le potentiel de déformation hydrostatique associé à la bande de valence, b est le potentiel de cisaillement, ϵ_{xx} , ϵ_{yy} , ϵ_{zz} , ϵ_{xy} , ϵ_{yz} , ϵ_{xz} sont les composantes du tenseur de déformation.

Comme nous l'avons vu au §III du chapitre I, dans notre cas, la déformation est biaxiale dans le plan des couches. Tous les termes de cisaillement sont donc nuls $\epsilon_{xy} = \epsilon_{yz} = \epsilon_{zx} = 0$ et seuls restent $\epsilon_{xx} = \epsilon_{yy} \neq \epsilon_{zz}$. On a donc $R_\epsilon = S_\epsilon = 0$, ce qui simplifie l'expression de H_ϵ :

$$H_\epsilon = - \begin{pmatrix} P_\epsilon + Q_\epsilon & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & P_\epsilon - Q_\epsilon & 0 & 0 & -\sqrt{2}Q_\epsilon & 0 \\ 0 & 0 & P_\epsilon - Q_\epsilon & 0 & 0 & \sqrt{2}Q_\epsilon \\ 0 & 0 & 0 & P_\epsilon + Q_\epsilon & 0 & 0 \\ 0 & -\sqrt{2}Q_\epsilon & 0 & 0 & P_\epsilon + \Delta & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{2}Q_\epsilon & 0 & 0 & P_\epsilon + \Delta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} |3/2, 3/2\rangle \\ |3/2, 1/2\rangle \\ |3/2, -1/2\rangle \\ |3/2, -3/2\rangle \\ |1/2, 1/2\rangle \\ |1/2, -1/2\rangle \end{pmatrix} \quad \text{Eq.(III-32)}$$

Finalement, l'Hamiltonien total, somme de l'Hamiltonien de Luttinger et de l'Hamiltonien de Bir et Pikus, pourra s'écrire :

$$H_T = - \begin{pmatrix} P+Q & -S & R & 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}}S & \sqrt{2}R \\ -S^* & P-Q & 0 & R & -\sqrt{2}Q & \sqrt{\frac{3}{2}}S \\ R^* & 0 & P-Q & S & \sqrt{\frac{3}{2}}S^* & \sqrt{2}Q \\ 0 & R^* & S^* & P+Q & -\sqrt{2}R^* & -\frac{1}{\sqrt{2}}S^* \\ -\frac{1}{\sqrt{2}}S^* & -\sqrt{2}Q & \sqrt{\frac{3}{2}}S & -\sqrt{2}R & P+\Delta & 0 \\ \sqrt{2}R^* & \sqrt{\frac{3}{2}}S^* & \sqrt{2}Q & -\frac{1}{\sqrt{2}}S & 0 & P+\Delta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \left| \frac{3}{2}, \frac{3}{2} \right\rangle \\ \left| \frac{3}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \\ \left| \frac{3}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \\ \left| \frac{3}{2}, -\frac{3}{2} \right\rangle \\ \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \\ \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \end{pmatrix} \quad \text{Eq.(III-33)}$$

avec :

$$\begin{cases} P = P_k + P_\varepsilon \\ Q = Q_k + Q_\varepsilon \\ R = R_k + R_\varepsilon \\ S = S_k + S_\varepsilon \end{cases} \quad \text{Eq.(III-34)}$$

IV-Forme générale de l'Hamiltonien dans une hétérostructure:

Toutes les expressions des Hamiltoniens données dans les § II et III sont des formes applicables aux matériaux tridimensionnels (3D) homogènes. Pour tenir compte de l'empilement de couches de matériaux différents que constitue une hétérostructure, il suffit d'ajouter à l'Hamiltonien total un potentiel $V_h(z)$ correspondant au profil de la structure. On aboutit alors à l'expression :

$$H_T = - \begin{pmatrix} P+Q-V_h(z) & -S & R & 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}}S & \sqrt{2}R \\ -S^* & P-Q-V_h(z) & 0 & R & -\sqrt{2}Q & \sqrt{\frac{3}{2}}S \\ R^* & 0 & P-Q-V_h(z) & S & \sqrt{\frac{3}{2}}S^* & \sqrt{2}Q \\ 0 & R^* & S^* & P+Q-V_h(z) & -\sqrt{2}R^* & -\frac{1}{\sqrt{2}}S^* \\ -\frac{1}{\sqrt{2}}S^* & -\sqrt{2}Q & \sqrt{\frac{3}{2}}S & -\sqrt{2}R & P+\Delta-V_h(z) & 0 \\ \sqrt{2}R^* & \sqrt{\frac{3}{2}}S^* & \sqrt{2}Q & -\frac{1}{\sqrt{2}}S & 0 & P+\Delta-V_h(z) \end{pmatrix} \quad \text{Eq.(III-35)}$$

Dans l'expression ci-dessus, il faut noter que $V_h(z)$ représente le profil du sommet Γ_8 de la bande de valence du matériau non déformé. La distinction des sommets respectifs des trois composantes HH, LH et SO est faite implicitement par le contenu des autres termes des éléments diagonaux.

V Détermination de la structure de bande - Conditions de continuité - TMT :

Ici encore, la résolution de l'équation de la masse effective n'est pas scalaire mais vectorielle et consiste en une diagonalisation de cet Hamiltonien. Appliquée à chaque région, cette diagonalisation fournira, pour une valeur donnée de $k_{//}$ et une énergie E , une série de valeurs de k_z qui entreront dans la formulation de la fonction d'onde. Cette dernière sera vectorielle à six composantes. La recherche des états propres de la structure nécessitera ici encore l'écriture des équations de continuité.

L'usage de la TMT nécessitera des matrices 12×12 . Nous allons toutefois introduire une approximation permettant une première étape de diagonalisation de notre Hamiltonien par blocs 3×3 . Chacun de ces deux blocs sera ensuite diagonalisé et les conditions de continuité formulées par la TMT avec des matrices 6×6 .

V-1- Simplification de l'Hamiltonien :

V-1-a- Approximation axiale :

Les sous bandes d'énergie et les fonctions d'onde dépendent, non seulement du module de $k_{//}$ mais aussi de l'angle azimutal ϕ dans le plan si $k_{//} = (k_{//}, \phi)$ en coordonnées polaires. A cause de cette dépendance en ϕ , les contours à énergie constante dans le plan (k_x, k_y) ne sont plus isotropes. Cependant, dans notre cas de quantification selon [100], ce "voilage" est assez faible en regard des différences d'énergie entre sous bandes adjacentes pour pouvoir négliger cette anisotropie dans le plan sans pour cela perdre l'essentiel du contenu physique du mélange des bandes^[13,24]. Cette approximation s'appelle communément l'approximation axiale et elle a été largement adoptée pour les calculs de bandes utilisant un Hamiltonien 4×4 ^[25,26] et un Hamiltonien 6×6 ^[13]. Nous appliquerons donc cette approximation et verrons qu'elle permet une diagonalisation par bloc de notre Hamiltonien.

V-1-b- Diagonalisation par bloc :

Nous commencerons par réécrire les éléments de la matrice III-35 de la manière suivante :

$$\begin{aligned}
 P_k &= \left(\frac{\hbar^2}{2m_0} \right) \gamma_1 (k_{//}^2 + k_z^2), \\
 Q_k &= \left(\frac{\hbar^2}{2m_0} \right) \gamma_2 (k_{//}^2 - 2k_z^2), \\
 R_k &= - \left(\frac{\hbar^2}{2m_0} \right) \sqrt{3} \left[\left(\frac{\gamma_2 + \gamma_3}{2} \right) \exp(-2i\phi) + \left(\frac{\gamma_2 - \gamma_3}{2} \right) \exp(2i\phi) \right] k_{//}^2, \\
 S_k &= \left(\frac{\hbar^2}{2m_0} \right) 2\sqrt{3} \gamma_3 k_{//} k_z \exp(-i\phi).
 \end{aligned}$$

Eq.(III-36)

L'approximation axiale consiste ici à remarquer que, si l'élément R_k est approximé par :

$$R_k \approx -\left(\frac{\hbar^2}{2m_0}\right) \sqrt{3} \left(\frac{\gamma_2 + \gamma_3}{2}\right) k_{//}^2 \exp(-2i\phi), \quad \text{Eq.(III-37)}$$

alors toutes les énergies des sous bandes deviennent indépendantes de ϕ . En effet si nous faisons tourner notre système d'axes autour de l'axe z d'un angle ϕ , changeant ainsi les fonctions de base $|j, m\rangle$ en $|j, m\rangle \exp(-im\phi)$, l'Hamiltonien III-35 devient :

$$H' = - \begin{pmatrix} P+Q & -S_\rho & R_\rho & 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}}S_\rho & \sqrt{2}R_\rho \\ -S_\rho^* & P-Q & 0 & R_\rho & -\sqrt{2}Q & \sqrt{\frac{3}{2}}S_\rho \\ R_\rho^* & 0 & P-Q & S_\rho & \sqrt{\frac{3}{2}}S_\rho^* & \sqrt{2}Q \\ 0 & R_\rho^* & S_\rho^* & P+Q & -\sqrt{2}R_\rho^* & -\frac{1}{\sqrt{2}}S_\rho^* \\ -\frac{1}{\sqrt{2}}S_\rho^* & -\sqrt{2}Q & \sqrt{\frac{3}{2}}S_\rho & -\sqrt{2}R_\rho & P+\Delta_{so} & 0 \\ \sqrt{2}R_\rho^* & \sqrt{\frac{3}{2}}S_\rho^* & \sqrt{2}Q & -\frac{1}{\sqrt{2}}S_\rho & 0 & P+\Delta_{so} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \left|\frac{3}{2}, \frac{3}{2}\right\rangle \exp[3/2(-i\phi)] \\ \left|\frac{3}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle \exp[1/2(-i\phi)] \\ \left|\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle \exp[1/2(i\phi)] \\ \left|\frac{3}{2}, -\frac{3}{2}\right\rangle \exp[3/2(i\phi)] \\ \left|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle \exp[1/2(-i\phi)] \\ \left|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle \exp[1/2(i\phi)] \end{pmatrix}$$

$$\text{Eq.(III-38)}$$

où

$$\begin{cases} R_\rho = -\left(\frac{\hbar^2}{2m_0}\right) \sqrt{3} \left(\frac{\gamma_2 + \gamma_3}{2}\right) k_{//}^2 \\ S_\rho = -\left(\frac{\hbar^2}{2m_0}\right) 2\sqrt{3} \gamma_3 k_{//} k_z \end{cases} \quad \text{et} \quad R_\varepsilon = S_\varepsilon = 0 \quad \text{Eq.(III-39)}$$

Tous les éléments de matrice de H' sont indépendants de ϕ . Les sous bandes d'énergie sont donc forcément indépendantes de ϕ , et $E(\mathbf{k}_{//}) = E(k_{//})$. Les composantes de la fonction enveloppe s'écrivent, elles, $F_{(j,m)}(\mathbf{k}_{//}, z) = F_{(j,m)}(k_{//}, z) \exp(-im\phi)$. Grâce à cette approximation, l'Hamiltonien H' peut être diagonalisé par bloc. En effet, en choisissant une nouvelle base :

$$\begin{aligned} |u_1\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\left|\frac{3}{2}, \frac{3}{2}\right\rangle e^{-i(3/2)\phi} - i \left|\frac{3}{2}, -\frac{3}{2}\right\rangle e^{i(3/2)\phi} \right], \\ |u_2\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left[i \left|\frac{3}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle e^{-i(1/2)\phi} - \left|\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle e^{i(1/2)\phi} \right], \\ |u_3\rangle &= -\frac{1}{\sqrt{2}} \left[i \left|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle e^{-i(1/2)\phi} + \left|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle e^{i(1/2)\phi} \right], \\ |u_4\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\left|\frac{3}{2}, \frac{3}{2}\right\rangle e^{-i(3/2)\phi} + i \left|\frac{3}{2}, -\frac{3}{2}\right\rangle e^{i(3/2)\phi} \right], \\ |u_5\rangle &= -\frac{1}{\sqrt{2}} \left[i \left|\frac{3}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle e^{-i(1/2)\phi} + \left|\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle e^{i(1/2)\phi} \right], \\ |u_6\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left[i \left|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle e^{-i(1/2)\phi} - \left|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle e^{i(1/2)\phi} \right], \end{aligned}$$

$$\text{Eq.(III-40)}$$

l'Hamiltonien s'exprime dans cette nouvelle base par :

$$H'' = \begin{pmatrix} H_{3X3} & 0 \\ 0 & H_{3X3}^* \end{pmatrix}, \quad \text{Eq.(III-41)}$$

où

$$H_{3X3} = - \begin{pmatrix} P+Q & -R_{\rho} - iS_{\rho} & -\sqrt{2}R_{\rho} + \frac{i}{\sqrt{2}}S_{\rho} \\ -R_{\rho} + iS_{\rho} & P-Q & \sqrt{2}Q + i\sqrt{\frac{3}{2}}S_{\rho} \\ -\sqrt{2}R_{\rho} - \frac{i}{\sqrt{2}}S_{\rho} & \sqrt{2}Q - i\sqrt{\frac{3}{2}}S_{\rho} & P + \Delta_{so} \end{pmatrix} \begin{matrix} |u_1\rangle \\ |u_2\rangle \\ |u_3\rangle \end{matrix} \quad \text{Eq.(III-42)}$$

et où H_{3X3}^* est la matrice conjuguée de H_{3X3} .

Dans une hétérostructure on aura :

$$H_{3X3} = - \begin{pmatrix} P+Q - V_h(z) & -R_{\rho} - iS_{\rho} & -\sqrt{2}R_{\rho} + \frac{i}{\sqrt{2}}S_{\rho} \\ -R_{\rho} + iS_{\rho} & P-Q - V_h(z) & \sqrt{2}Q + i\sqrt{\frac{3}{2}}S_{\rho} \\ -\sqrt{2}R_{\rho} - \frac{i}{\sqrt{2}}S_{\rho} & \sqrt{2}Q - i\sqrt{\frac{3}{2}}S_{\rho} & P + \Delta - V_h(z) \end{pmatrix} \begin{matrix} |u_1\rangle \\ |u_2\rangle \\ |u_3\rangle \end{matrix} \quad \text{Eq.(III-43)}$$

où $V_h(z)$ désigne toujours le sommet Γ_8 de la bande de valence du matériau 3D non déformé.

Le système original de six équations couplées est ainsi réduit à deux systèmes de trois équations correspondant chacun à $|u_1\rangle, |u_2\rangle, |u_3\rangle$ d'une part et $|u_4\rangle, |u_5\rangle, |u_6\rangle$ d'autre part.

Si le profil $V_h(z)$ de l'hétérostructure est symétrique, c'est à dire si $V_h(-z)=V_h(z)$ (cas d'un puits symétrique), les deux matrices H_{3X3}^* et H_{3X3} ne diffèrent que par le signe de k_z . Leurs diagonalisations respectives donneront donc les mêmes valeurs d'énergies.

La structure de bande de valence $E(k_{\parallel})$ sera alors dégénérée d'ordre 2 et sa détermination reposera sur la seule diagonalisation de la matrice H_{3X3} suivie de l'écriture des conditions de continuité par TMT avec des matrices $6X6$.

Dans le cas où les profils de puits ne sont pas symétriques, la dégénérescence est levée et la diagonalisation des deux blocs est nécessaire. Néanmoins, la méthode de calcul utilisée pour la recherche des niveaux d'énergie reste la même pour les deux blocs matriciels ; elle ne sera donc exposée que dans un cas, en l'occurrence ici celui de H_{3X3} .

V-2- Traitement de l' Hamiltonien H_{3X3} :

Dans chaque région homogène, la diagonalisation de l'Hamiltonien H_{3X3} fournira, pour une valeur donnée de k_{\parallel} et une énergie E , trois valeurs de k_z ainsi que leur opposé.

V-2-a-Expression de la fonction d'onde :

Dans la région j, les trois valeurs de k_z issues de la diagonalisation seront notées k_{jz}^{HH} , k_{jz}^{LH} et k_{jz}^{SO} dans la mesure où elles correspondent aux trois composantes respectives de la bande de valence. Elles interviennent dans l'écriture de chacun des trois termes indicés HH, LH et SO qui composent la fonction d'onde vectorielle :

$$\psi^j(z) = \begin{bmatrix} F_1(z) \\ F_2(z) \\ F_3(z) \end{bmatrix} = \psi_{HH}^j(z) + \psi_{LH}^j(z) + \psi_{SO}^j(z) =$$

$$A_{HH}^j \begin{bmatrix} F_{1HH}^j \\ F_{2HH}^j \\ F_{3HH}^j \end{bmatrix} \exp(ik_{//}\rho) \exp[ik_{jz}^{HH}(z - z_j)] + B_{HH}^j \begin{bmatrix} F_{1HH}^{j-} \\ F_{2HH}^{j-} \\ F_{3HH}^{j-} \end{bmatrix} \exp(ik_{//}\rho) \exp[-ik_{jz}^{HH}(z - z_j)]$$

$$+ A_{LH}^j \begin{bmatrix} F_{1LH}^j \\ F_{2LH}^j \\ F_{3LH}^j \end{bmatrix} \exp(ik_{//}\rho) \exp[ik_{jz}^{LH}(z - z_j)] + B_{LH}^j \begin{bmatrix} F_{1LH}^{j-} \\ F_{2LH}^{j-} \\ F_{3LH}^{j-} \end{bmatrix} \exp(ik_{//}\rho) \exp[-ik_{jz}^{LH}(z - z_j)]$$

$$+ A_{SO}^j \begin{bmatrix} F_{1SO}^j \\ F_{2SO}^j \\ F_{3SO}^j \end{bmatrix} \exp(ik_{//}\rho) \exp[ik_{jz}^{SO}(z - z_j)] + B_{SO}^j \begin{bmatrix} F_{1SO}^{j-} \\ F_{2SO}^{j-} \\ F_{3SO}^{j-} \end{bmatrix} \exp(ik_{//}\rho) \exp[-ik_{jz}^{SO}(z - z_j)].$$

Eq.(III-44)

où $k_{//} = \sqrt{k_x^2 + k_y^2}$, $\rho = \sqrt{x^2 + y^2}$ et z_j représente l'abscisse, dans la direction de croissance, de l'interface entre la région j et la région j+1.

V-2-b- Relations de continuité :

La continuité de la densité de probabilité s'exprime par la continuité de

$$\begin{bmatrix} F_1(z) \\ F_2(z) \\ F_3(z) \end{bmatrix}$$

Celle de la densité de courant s'exprime par la continuité de^[13] :

$$\begin{bmatrix} u \frac{\partial}{\partial z} & v & -\frac{1}{\sqrt{2}} v \\ -v & w \frac{\partial}{\partial z} & -v \sqrt{\frac{3}{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} v & v \sqrt{\frac{3}{2}} & \frac{u+v}{2} \frac{\partial}{\partial z} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} F_1(z) \\ F_2(z) \\ F_3(z) \end{bmatrix}$$

Eq.(III-45)

$$\text{avec } \begin{cases} u = (\gamma_1 - 2\gamma_2) \\ v = \gamma_3 \sqrt{3} k_{//} \\ w = (\gamma_1 + 2\gamma_2) \end{cases} \quad \text{Eq.(III-46)}$$

Les équations de continuité entre la région $j+1$ et la région j peuvent s'écrire sous forme matricielle :

$$M_j \begin{bmatrix} A_{HH}^j \\ A_{LH}^j \\ A_{SO}^j \\ B_{HH}^j \\ B_{LH}^j \\ B_{SO}^j \end{bmatrix} = M_{j+1} P_{j+1} \begin{bmatrix} A_{HH}^{j+1} \\ A_{LH}^{j+1} \\ A_{SO}^{j+1} \\ B_{HH}^{j+1} \\ B_{LH}^{j+1} \\ B_{SO}^{j+1} \end{bmatrix} \quad \text{Eq.(III-47)}$$

avec

$$M_j = \begin{bmatrix} F_{1HH}^j & F_{1LH}^j & F_{1SO}^j & F_{1HH}^{j-} & F_{1LH}^{j-} & F_{1SO}^{j-} \\ F_{2HH}^j & F_{2LH}^j & F_{2SO}^j & F_{2HH}^{j-} & F_{2LH}^{j-} & F_{2SO}^{j-} \\ F_{3HH}^j & F_{3LH}^j & F_{3SO}^j & F_{3HH}^{j-} & F_{3LH}^{j-} & F_{3SO}^{j-} \\ C_{HH}^j & C_{LH}^j & C_{SO}^j & C_{HH}^{j-} & C_{LH}^{j-} & C_{SO}^{j-} \\ D_{HH}^j & D_{LH}^j & D_{SO}^j & D_{HH}^{j-} & D_{LH}^{j-} & D_{SO}^{j-} \\ G_{HH}^j & G_{LH}^j & G_{SO}^j & G_{HH}^{j-} & G_{LH}^{j-} & G_{SO}^{j-} \end{bmatrix} \quad \text{Eq.(III-48)}$$

où

$$\begin{cases} C_m^j = ik_{jz}^m u_j F_{1m}^j + v_j F_{2m}^j - \frac{v_j}{\sqrt{2}} F_{3m}^j \\ C_m^{j-} = -ik_{jz}^m u_j F_{1m}^{j-} + v_j F_{2m}^{j-} - \frac{v_j}{\sqrt{2}} F_{3m}^{j-} \end{cases}, \quad \begin{cases} D_m^j = -v_j F_{1m}^j + ik_{jz}^m w_j F_{2m}^j - v_j \sqrt{\frac{3}{2}} F_{3m}^j \\ D_m^{j-} = -v_j F_{1m}^{j-} - ik_{jz}^m w_j F_{2m}^{j-} - v_j \sqrt{\frac{3}{2}} F_{3m}^{j-} \end{cases}$$

$$\text{et } \begin{cases} G_m^j = \frac{v_j}{\sqrt{2}} F_{1m}^j + v_j \sqrt{\frac{3}{2}} F_{2m}^j + ik_{jz}^m \left(\frac{w_j + u_j}{2} \right) F_{3m}^j \\ G_m^{j-} = \frac{v_j}{\sqrt{2}} F_{1m}^{j-} + v_j \sqrt{\frac{3}{2}} F_{2m}^{j-} - ik_{jz}^m \left(\frac{w_j + u_j}{2} \right) F_{3m}^{j-} \end{cases}$$

et où

$$P_j = \begin{bmatrix} e^{(-ik_{jz}^{HH}d_j)} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & e^{(-ik_{jz}^{LH}d_j)} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{(-ik_{jz}^{SO}d_j)} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{(ik_{jz}^{HH}d_j)} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & e^{(ik_{jz}^{LH}d_j)} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & e^{(ik_{jz}^{SO}d_j)} \end{bmatrix} \quad \text{Eq.(III-49)}$$

On peut écrire alors entre la région j et la région j+1 :

$$\begin{bmatrix} A_{HH}^j \\ A_{LH}^j \\ A_{SO}^j \\ B_{HH}^j \\ B_{LH}^j \\ B_{SO}^j \end{bmatrix} = M_j^{-1} M_{j+1} P_{j+1} \begin{bmatrix} A_{HH}^{j+1} \\ A_{LH}^{j+1} \\ A_{SO}^{j+1} \\ B_{HH}^{j+1} \\ B_{LH}^{j+1} \\ B_{SO}^{j+1} \end{bmatrix} \quad \text{Eq.(III-50)}$$

On suppose encore qu'on a n-1 régions de largeurs finies ($1 \leq j \leq N-1$) insérées entre deux barrières semi-infinies ($j=0$; $j=N$), soit n interfaces.

On peut alors écrire entre la région 1 et la région N :

$$\begin{bmatrix} A_{HH}^0 \\ A_{LH}^0 \\ A_{SO}^0 \\ B_{HH}^0 \\ B_{LH}^0 \\ B_{SO}^0 \end{bmatrix} = U \begin{bmatrix} A_{HH}^N \\ A_{LH}^N \\ A_{SO}^N \\ B_{HH}^N \\ B_{LH}^N \\ B_{SO}^N \end{bmatrix} \quad \text{avec} \quad U = \prod_{j=0}^{N-1} M_j^{-1} M_{j+1} P_{j+1} \quad \text{Eq.(III-51)}$$

Comme pour la bande de conduction, les états qui nous intéressent ici sont les états liés de la structure. Les régions 0 et N sont des barrières. Par conséquent, la fonction d'onde doit tendre vers zéro dans ces deux régions. On aura donc $A_{HH}^0 = A_{LH}^0 = A_{SO}^0 = 0$ et $B_{HH}^N = B_{LH}^N = B_{SO}^N = 0$. D'où la relation :

$$\begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ B_{HH}^0 \\ B_{LH}^0 \\ B_{SO}^0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} U_{11} & U_{12} & U_{13} & U_{14} & U_{15} & U_{16} \\ U_{21} & U_{22} & U_{23} & U_{24} & U_{25} & U_{26} \\ U_{31} & U_{32} & U_{33} & U_{34} & U_{35} & U_{36} \\ U_{41} & U_{42} & U_{43} & U_{44} & U_{45} & U_{46} \\ U_{51} & U_{52} & U_{53} & U_{54} & U_{55} & U_{56} \\ U_{61} & U_{62} & U_{63} & U_{64} & U_{65} & U_{66} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_{HH}^N \\ A_{LH}^N \\ A_{SO}^N \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad \text{Eq. (III-52)}$$

Ce système est équivalent au système suivant :

$$\begin{cases} A_{HH}^N U_{11} + A_{LH}^N U_{12} + A_{SO}^N U_{13} = 0 \\ A_{HH}^N U_{21} + A_{LH}^N U_{22} + A_{SO}^N U_{23} = 0 \\ A_{HH}^N U_{31} + A_{LH}^N U_{32} + A_{SO}^N U_{33} = 0 \end{cases} \quad \text{Eq. (III-53)}$$

On suppose, bien sur, que $A_{HH}^N, A_{LH}^N, A_{SO}^N$ sont différents de zéro (solution non triviale). Le déterminant de ce système doit donc être nul :

$$\begin{vmatrix} U_{11} & U_{12} & U_{13} \\ U_{21} & U_{22} & U_{23} \\ U_{31} & U_{32} & U_{33} \end{vmatrix} = 0 \quad \text{Eq. (III-54)}$$

Cette équation nous donnera finalement les valeurs propres des états de valence pour une valeur donnée de k_{\parallel} . La répétition du calcul pour diverses valeurs de k_{\parallel} conduira aux sous-bandes de valence $E(k_{\parallel})$.

Quelques exemples de résultats concernant la structure de bandes de puits minces avec effets d'interfaces sont détaillés dans la référence 27 et résumés dans l'annexe 2.

REFERENCES:

- [1] G. Bastard, 'Wave Mechanics Applied to Semiconductor Heterostructures', les Editions de Physique (Paris 1989).
- [2] E.O. Reilly, *Semicond. Sci. Technol.* **4**(1989) 121-137
- [3] M. Sugawara, *Phys. Rev.* **B45**, 11423 (1992)
- [4] C.R. Pidgeon et R.N. Brown, *Phys. Rev.* **B146**(2), 575(1966)
- [5] G. Fishman, *Phys. Rev.* **B52**(15), 11132 (1995).
- [6] A. Baliga, D. Trivedi et N.G. Anderson, *Phys. Rev.* **B49**, 10402 (1994)
- [7] E.O. Kane, *Semiconductors and Semimetals*, R.K. Willardson and A.C. Beer Ed.(Academic, New York, 1966)
- [8] E.O. Kane, *J. Phys. Chem. Solids.* **1**, 249 (1957).
- [9] J.M. Luttinger, *Phys. Rev.* **B102**, 1030(1956)
- [10] M Sugawara, N. Okazaki, T. Fujii et S. Yamazaki, *Phys. Rev.* **B48**(11), 8102 (1993).
- [11] S.L. Chuang, *Phys. Rev.* **B40**, 10379 (1989).
- [12] G. Bastard, J.A. Brum and R. Ferreira, *Solid State Physics*, ed. by H. Ehrenreich and D. Turnbull (Academic, N.Y., 1991) vol.44, p229.
- [13] C. Yi Ping Chao et S.L. Chuang, *Phys. Rev.* **B46**, 4110 (1992).
- [14] A.T. Meney, *J. Appl. Phys.* **72**, 5729 (1992)
- [15] J.M. Luttinger and W. Kohn, *Phys. Rev.* **B97**, 869 (1955).
- [16] S.L. Chuang, *Phys. Rev.* **B43**, 9649(1991).
- [17] D. Anh and S.L. Chuang, *IEEE J. of Quantum Electronics* **30**, 350 (1994).
- [18] I. Vurgaftman, J.M. Hinckley and J. Singh, *IEEE J. of Quantum Electronics* **30**, 75(1994).
- [19] F. Dujardin, N. Marréaud et J.P. Laurenti, *Solid State Com.* **98**, 297 (1996).
- [20] G.E. Pikus et G.L. Bir, *Sov. Phys. Solid State* **1**, 1502 (1959).
- [21] R.H. Henderson et E. Towe, *J. Appl. Phys.* **79**, 2029 (1996)
- [22] J. Los, A. Fasolino et A. Catellani, *Phys. Rev.* **B53**, 4630 (1996).

[23] E.O. Reilly et A.R. Adams IEEE J. of Quantum Electron. **30**, 366 (1994).

[24] Z. Ikonic, V. Milanovic and D. Tjapkin Phys. Rev. **B46**, 4285 (1992).

[25] D.A. Broido et L.J. Sham, Phys. Rev. **B31**, 888 (1985).

[26] A.T. Twardowski et C. Herman, Phys. Rev. **B35**, 8144 (1987).

[27] F. Dujardin, N. Marréaud and J.P. Laurenti, Superlattices and Microstructures **22** (1997), à paraître.

CHAPITRE IV

TRANSITIONS OPTIQUES DANS LES PUIITS QUANTIQUES EXCITONS

Nous nous intéresserons aux transitions entre états de valence et états de conduction, c.a.d. aux transitions impliquant des paires électron-trou : génération dans le cas d'une spectrométrie d'excitation ou d'absorption, recombinaison dans le cas d'une spectrométrie d'émission (luminescence).

I-Transitions interbandes (ou bande à bande) :

Nous désignerons sous ce terme les transitions définies ci-dessus et dans lesquelles l'interaction coulombienne entre l'électron et le trou n'est pas prise en compte.

Alors que dans un matériau 3D homogène, les transitions interbandes présentent une énergie de seuil donnée par le gap fondamental du matériau, dans un puits quantique, ces transitions, s'opérant entre sous-bandes de valence et sous-bandes de conduction, présentent autant d'énergies de seuil qu'il peut y avoir de paires de sous-bandes mises en jeu. Cette situation se manifeste par une série de plateaux dans le spectre d'absorption. Ceci est illustré sur la Fig.IV-1 qui représente les spectres de trois échantillons typiques de la série étudiée. Abstraction faite des pics qui seront discutés ultérieurement, la structuration en paliers apparaît nettement dans les trois spectres.

La multiplicité des paires de sous-bandes fait l'objet de règles de sélections que nous allons préciser.

II-Règles de sélection :

Les transitions interbandes dans un puits quantique^[7] sont régies par des règles de sélection de deux origines distinctes : polarisation du rayonnement et symétrie des états confinés.

A-Règles de sélection de polarisation :

Il s'agit des règles régissant les transitions interbandes dans un cristal, basées sur l'élément de matrice dipolaire qui couple les états de valence et de conduction sous l'effet du rayonnement électromagnétique, et aménagées à la géométrie du puits quantique. Dans le cas d'un rayonnement se propageant dans la direction z de quantification, donc polarisé dans le plan des couches, ce qui correspond à la géométrie de notre montage expérimental, les trois types de transitions $HH \rightarrow E$, $LH \rightarrow E$ et $SO \rightarrow E$, entre chaque composante de la BV et de la BC, sont autorisées.

Toutefois, la transition $HH \rightarrow E$ est 3 fois plus intense que la $LH \rightarrow E$ et 1.5 fois plus intense que la $SO \rightarrow E$. Ceci influe sensiblement sur les spectres.

B-Règles de sélection entre états confinés :

Ces règles sont basées sur l'intégrale de recouvrement $\int \varphi_{e,n}^*(z) \varphi_{h,m}(z) dz$ entre fonctions enveloppes $\varphi_{e,n}(z)$ et $\varphi_{h,m}(z)$ décrivant les confinements quantiques respectifs de l'électron sur le niveau n et du trou sur le niveau m . La probabilité de transition est proportionnelle au carré du module de cette intégrale.

Les puits quantiques du système GaInAs/InP sont de type I^[7] ; dans ce cas, les électrons et les trous sont confinés dans la même couche (GaInAs). Il en résulte un recouvrement des fonctions enveloppes plus important que dans le cas des hétérostructures de type II où les porteurs confinés sont spatialement séparés^[7] (voir Fig. IV-2).

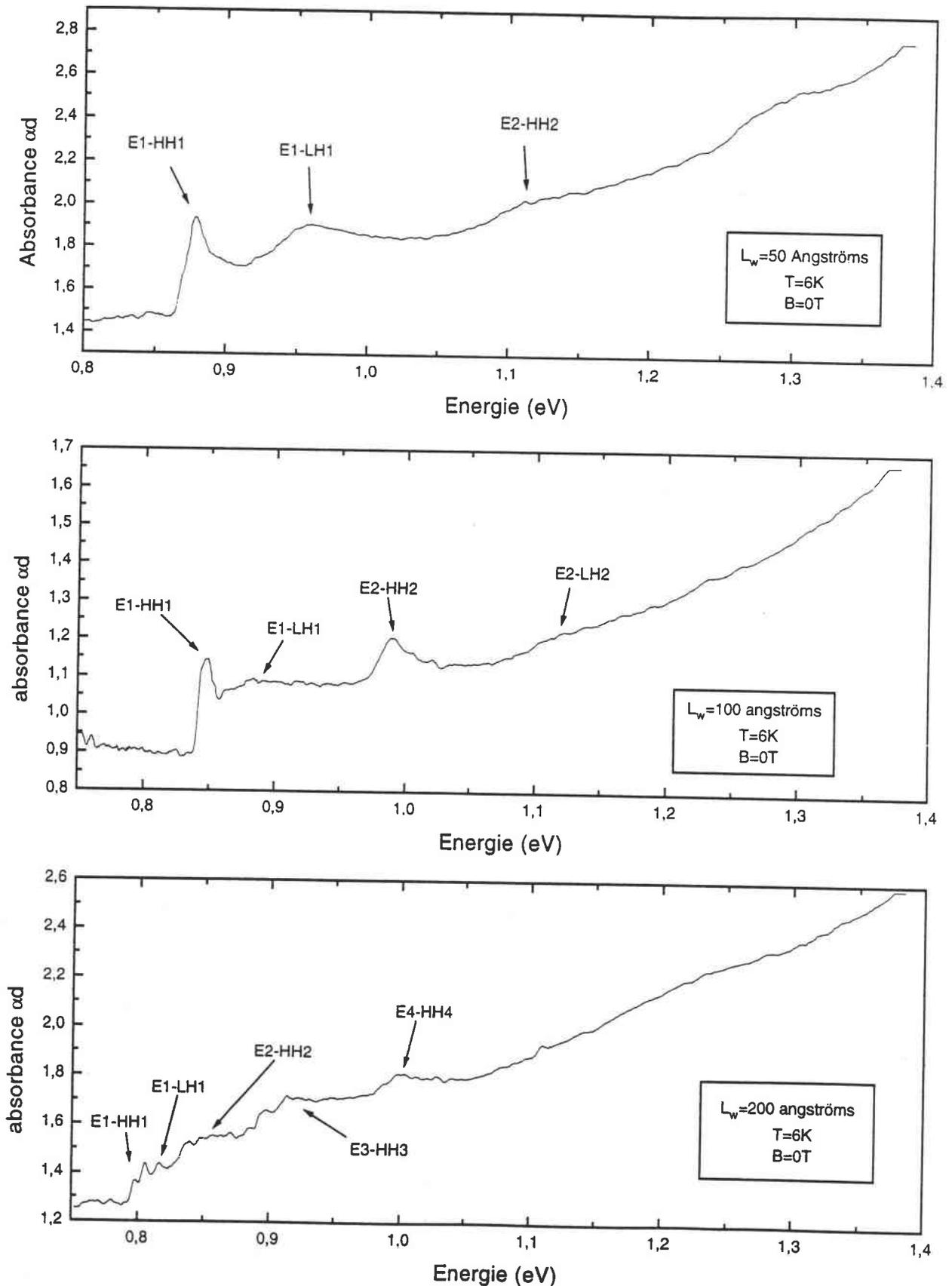


Figure IV-1 : Spectres d'absorption de MPQs GaInAs/InP de largeur (a) 50 Å, (b) 100 Å et (c) 200 Å. Les absorptions entre sous-bandes se manifestent par l'apparition de plateaux successifs dans la structure du spectre. Les transitions impliquées sont indiquées selon la terminologie explicitée au Chap. VII.

Pour les puits quantiques de type I à profil symétrique, la parité des fonctions enveloppes annule systématiquement les intégrales de recouvrement quand $n+m$ est impair, interdisant ainsi toute transition entre niveaux de confinement de numéros différents. En pratique, dans le cas des puits rectangulaires et de hauteur finie (cas de nos échantillons où les effets d'interfaces sont négligés), les valeurs respectives des intégrales de recouvrement ne rendent observables que les transitions où $n=m$ et la transition $HH(m = 3) \rightarrow E(n = 1)$.

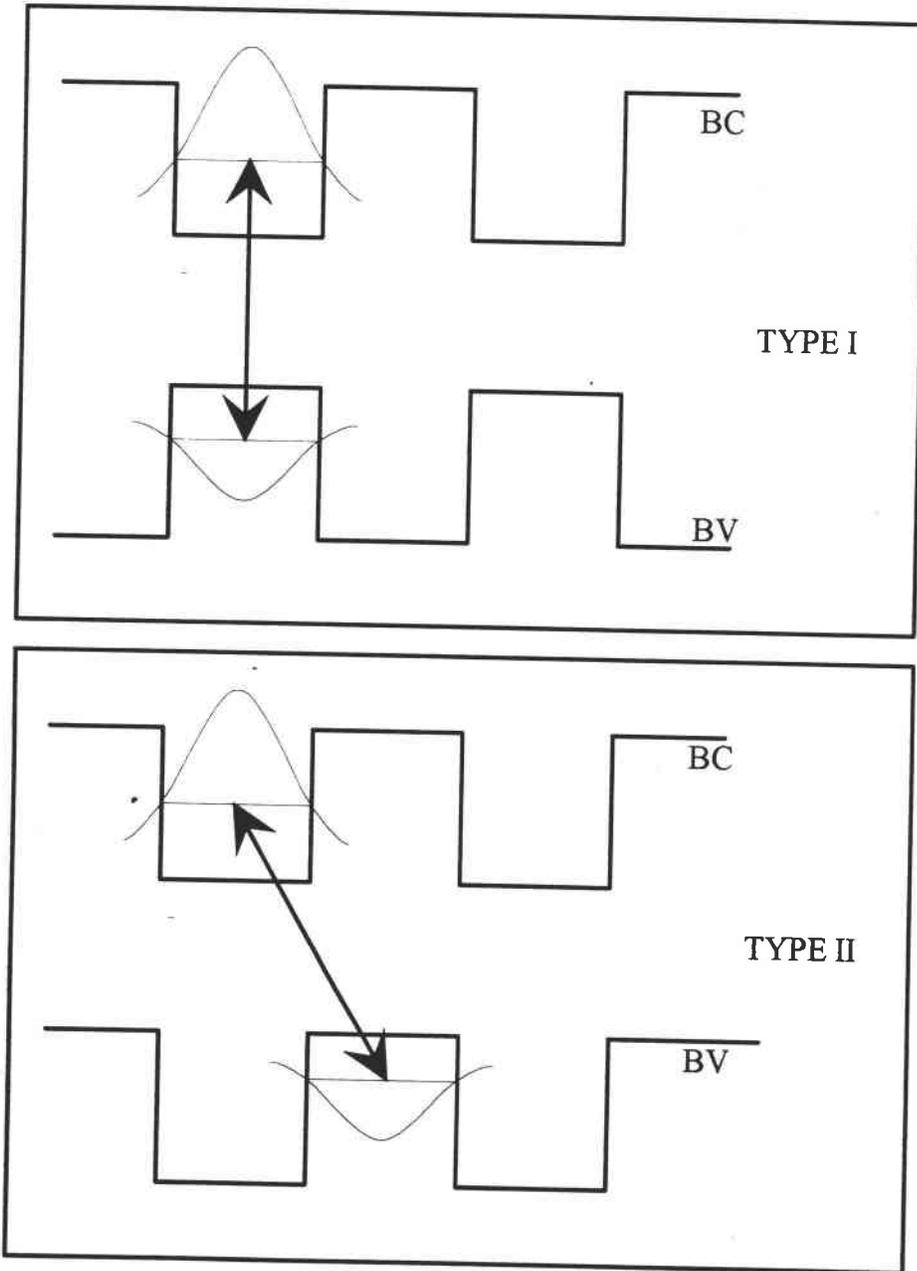


Figure IV-2 : Densités de probabilité de présence d'électrons et de trous dans le cas (a) d'un puits dit de type I et (b) dans le cas d'un puits de type II. On voit clairement que le recouvrement entre fonctions d'ondes est nettement plus important dans le cas (a) que dans le cas (b).

Enfin, la prise en compte du mouvement dans le plan ($k_{//} \neq 0$) (sous-bandes n et m) modifie les fonctions enveloppes décrivant les confinements selon z et donc l'intégrale de recouvrement. Ainsi, certaines transitions interdites entre niveaux de confinements deviennent en principe permises entre états de sous-bandes avec $k_{//} \neq 0$. Toutefois, les valeurs des intégrales sont telles que les spectres restent dominés par les transitions entre sous-bandes ne faisant pas l'objet d'interdiction en $k_{//} = 0$. En conséquence, nous adopterons pour les transitions entre sous-bandes n et m les règles de sélection énoncées ci-dessus pour les transitions entre niveaux de confinement.

III-Effet d'interaction coulombienne :

Dans les matériaux 3D, l'interaction coulombienne entre l'électron et le trou modifie les énergies de transition^[1]. La paire électron trou en interaction est appelée exciton et l'énergie de transition excitonique est légèrement inférieure à celle de la transition bande à bande à laquelle elle est associée. Nos structures à PQ sont de type I^[7] : le puits de potentiel des électrons se trouve 'en face' du puits des trous selon la direction z (voir Fig. IV-3). Dans ces structures, l'électron et le trou restent confinés dans la mince couche constituant le puits. Une telle disposition des porteurs augmente le recouvrement de leurs fonctions d'onde respectives et renforce leur interaction coulombienne par rapport à celle rencontrée dans les matériaux tridimensionnels^[2,3]. Pour cette raison, les transitions excitoniques peuvent s'observer dans les puits quantiques même à température ambiante. L'énergie d'interaction coulombienne ou énergie de liaison E_b va dépendre de la largeur de puits : elle tend vers une situation proche du cas 3D lorsque cette largeur est grande^[4,5,8] (matériau puits 3D) ou bien lorsque cette longueur tend vers zéro (puits inexistant, matériau barrière 3D) ; elle passe par un maximum (en valeur absolue) pour une largeur faible mais finie réalisant un compromis entre la possibilité de mouvement des porteurs selon la direction z de quantification et la probabilité de leur pénétration dans les barrières ; c'est dans ce cas que le caractère de l'exciton se rapproche le plus de celui obtenu dans un système bidimensionnel (2D). Nos mesures spectrométriques ont été effectuées à la température de l'hélium liquide à laquelle les effets thermiques de dissociation des excitons sont minimisés^[6]. Les transitions excitoniques sont donc fortement impliquées dans nos spectres. Elles se manifestent par des pics aux seuils de transitions interbandes (voir Fig. IV-1). Dès lors, un modèle de transitions bande à bande est insuffisant et l'interaction coulombienne doit être prise en compte. D'une façon très générale, dans la mesure où on néglige les mélanges entre bandes, l'Hamiltonien H_{exc} d'un exciton se compose de l'Hamiltonien de l'électron H_e , de celui du trou H_h , et du potentiel d'interaction coulombienne:

$$H_{exc} = H_e + H_h - \frac{e^2}{4\pi\epsilon|\vec{r}_e - \vec{r}_h|} \quad \text{Eq. IV-1}$$

où e est la charge élémentaire, \vec{r}_e (\vec{r}_h) (voir Fig. IV-4) repère la position de l'électron (du trou) dans l'espace (x, y, z), et ϵ est la permittivité diélectrique du matériau, que nous supposons uniforme en première approximation malgré l'inhomogénéité de l'hétérostructure. Notons que H_h n'est autre que l'Hamiltonien des états électroniques de valence changé de signe.

Les valeurs propres de cet Hamiltonien H_{exc} correspondront aux énergies de transitions excitoniques. Les fonctions propres donneront accès aux forces d'oscillateurs qui chiffrent les intensités des transitions. Nous exposerons tout d'abord la méthode de calcul des énergies de

transitions en approximation des bandes paraboliques, puis en tenant compte de la non-parabolicité. Nous résumerons enfin les éléments nécessaires au calcul de la force d'oscillateur.

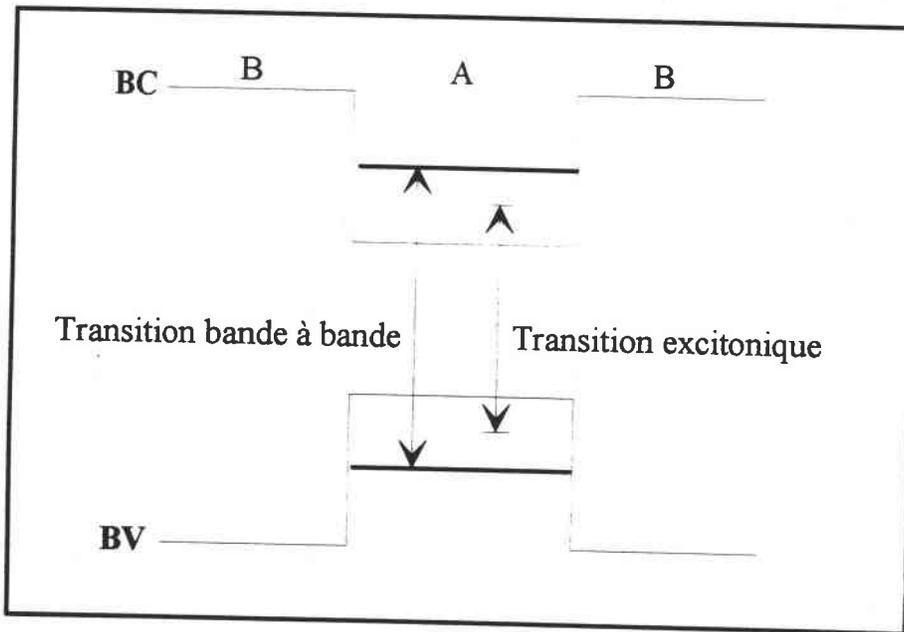
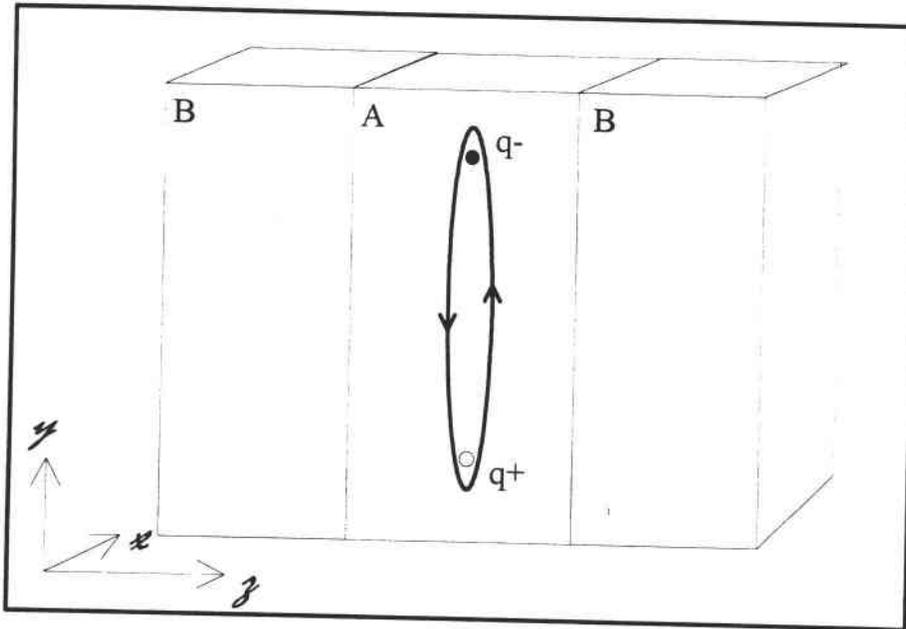


Figure IV-3 : Dans un puits de type I, l'électron et le trou sont confinés dans la même couche (matériau puits). Leur interaction coulombienne s'en trouve ainsi renforcée permettant l'observation de transitions excitoniques à température ambiante.

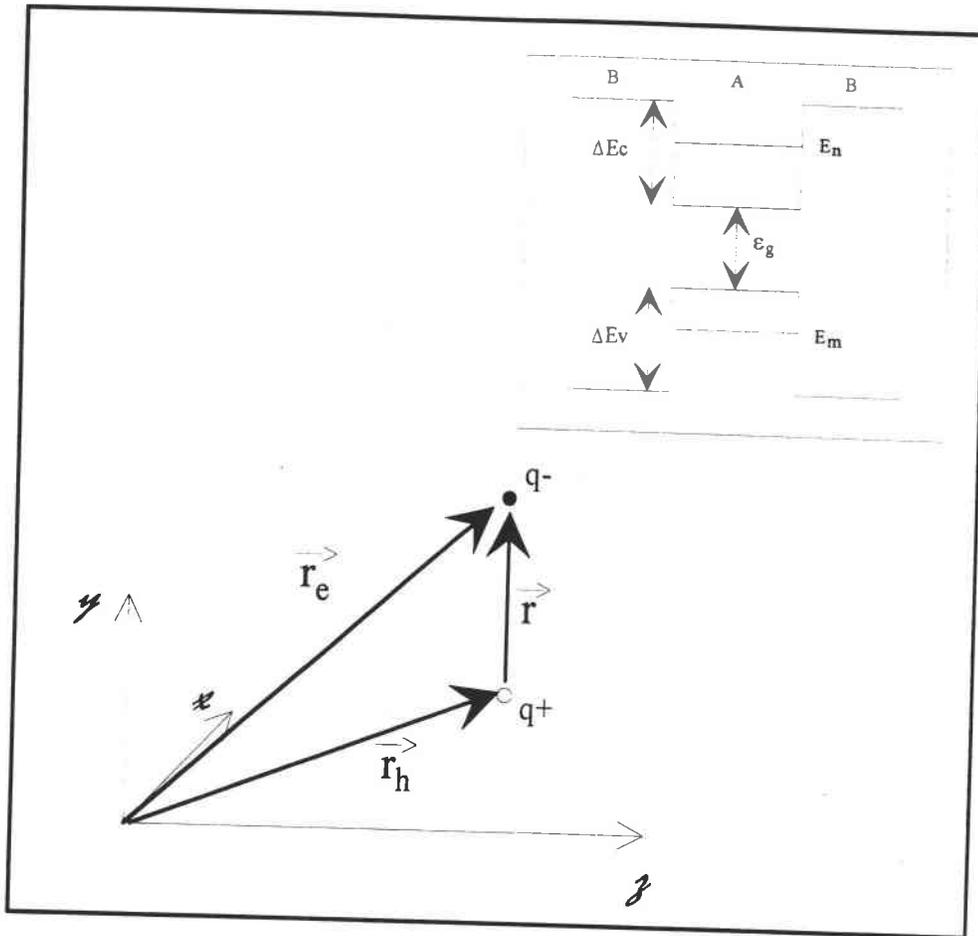


Figure IV-4 : Conventions de notations utilisées dans les calculs d'énergies d'excitons.

IV-Excitons en approximation de bandes paraboliques :

On se place dans le cas d'un puits quantique constitué d'un empilement de couches homogènes dans l'approximation des bandes paraboliques, et on néglige les mélanges entre sous-bandes. L'exciton considéré ici est issu de l'interaction entre un électron se trouvant sur un niveau n et un trou sur un niveau m. L'Hamiltonien de l'exciton s'écrit alors :

$$H_{\text{exc}} = \frac{p_e^2}{2m_e^*(z_e)} + V_e(z_e) + \frac{p_h^2}{2m_h^*(z_h)} - V_h(z_h) - \frac{e^2}{4\pi\epsilon|\bar{r}_e - \bar{r}_h|} \quad \text{Eq.(IV-2)}$$

où V_e et V_h sont les profils d'extrema de BC (Γ_6) et de BV (Γ_8), tels qu'ils ont été définis précédemment et modifiés le cas échéant par des effets de déformations. Le premier (troisième) terme de cette équation est le terme d'énergie cinétique relatif à l'électron (au trou). \bar{p}_e et \bar{p}_h désignent respectivement les opérateurs quantité de mouvement $-i\hbar\vec{\nabla}_{\bar{r}_e}$ et $-i\hbar\vec{\nabla}_{\bar{r}_h}$ de l'électron et du trou. Notons enfin que leur masse effective respective m_e^* et m_h^* est fonction de leur position z_e et z_h selon la direction de quantification.

En décomposant les énergies cinétiques en termes de mouvement selon la direction z d'une part et dans le plan (x, y) d'autre part, il vient :

$$H_{exc} = \frac{p_{ez}^2}{2m_e^*(z_e)} + V_e(z_e) + \frac{p_{hz}^2}{2m_h^*(z_h)} - V_h(z_h) + \frac{p_{e//}^2}{2m_{e//}^*(z_e)} + \frac{p_{h//}^2}{2m_{h//}^*(z_h)} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon|\vec{r}_e - \vec{r}_h|} \quad \text{Eq.(IV-3)}$$

avec $p_{e(h)z}^2 = -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial z^2}$ et $p_{e(h)//}^2 = -\hbar^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right)$.

Dans cette nouvelle décomposition, les quantités :

$$H_{ec} = \frac{p_{ez}^2}{2m_e^*(z_e)} + V_e(z_e) \quad \text{Eq.(IV-4-a)}$$

et

$$H_{hc} = \frac{p_{hz}^2}{2m_h^*(z_h)} - V_h(z_h) \quad \text{Eq.(IV-4-b)}$$

sont les Hamiltoniens de l'électron et du trou confinés dans les puits respectifs $V_e(z_e)$ et $V_h(z_h)$.

Si, de plus, on considère les sous-bandes $E_n(k_{//})$ et $E_m(k_{//})$ sensiblement paraboliques et caractérisées par des masses effectives respectives $m_{e//}^*$ et $m_{h//}^*$, il vient :

$$H_{exc} = H_{ec} + H_{hc} + \frac{p_{e//}^2}{2m_{e//}^*} + \frac{p_{h//}^2}{2m_{h//}^*} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon|\vec{r}_e - \vec{r}_h|} \quad \text{Eq.(IV-5)}$$

Une nouvelle expression de H_{exc} peut être obtenue si l'on distingue, dans le plan (x,y), le mouvement du centre de masse de celui, relatif, de la paire électron-trou.

Si on définit $\vec{\rho}_e = (x_e, y_e)$, $\vec{\rho}_h = (x_h, y_h)$ comme les vecteurs position de l'électron et du trou dans ces plans et $\vec{R}_{//}$ comme le vecteur donnant la position du centre de masse, alors :

$$M_{//}\vec{R}_{//} = m_{e//}^*\vec{\rho}_e + m_{h//}^*\vec{\rho}_h \quad \text{Eq.(IV-6-a)}$$

$$\text{avec } M_{//} = (m_{e//}^* + m_{h//}^*) \quad \text{Eq.(IV-6-b)}$$

l'opérateur quantité de mouvement du centre de masse sera :

$$P_{//} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial R_{//}} \quad \text{Eq.(IV-6-c)}$$

En introduisant la distance électron-trou dans le plan (x, y) :

$$\rho = |\vec{\rho}_e - \vec{\rho}_h|, \quad \text{Eq.(IV-6-d)}$$

l'opérateur quantité de mouvement de la particule réduite :

$$p_{//} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \rho} \quad \text{Eq.(IV-6-e)}$$

et la masse réduite $\mu_{//}$ de la paire électron-trou :

$$\frac{1}{\mu_{//}} = \frac{1}{m_{e//}^*} + \frac{1}{m_{h//}^*}, \quad \text{Eq.(IV-6-f)}$$

l'Hamiltonien de l'exciton s'écrit alors

$$H_{exc} = H_{ec} + H_{hc} + H_M + H_\mu, \quad \text{Eq.(IV-7)}$$

où
$$H_M = \frac{p_{//}^2}{2M_{//}} \quad \text{Eq.(IV-8-a)}$$

est l'Hamiltonien du centre de masse dans le plan des couches

et
$$H_\mu = \frac{p_{//}^2}{2\mu_{//}} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon\sqrt{\rho^2 + (z_e - z_h)^2}} \quad \text{Eq.(IV-8-b)}$$

est l'Hamiltonien de la particule réduite.

La séparation des variables permet donc d'écrire la fonction d'onde sous forme du produit :

$$\psi(\vec{r}_e, \vec{r}_h) = \frac{1}{\sqrt{S}} \exp(i\vec{K}_{//}\vec{R}_{//}) \varphi_{e,n}(z_e) \varphi_{h,m}(z_h) \phi_i(\rho, z_e, z_h) \quad \text{Eq.(IV-9)}$$

où :

• l'onde plane décrit le mouvement libre du centre de masse dans le plan (x, y) (S désigne la surface du puits quantique et $\hbar\vec{K}_{//}$ est la valeur propre de $\vec{P}_{//}$) ;

• $\varphi_{e,n}(z_e)$ et $\varphi_{h,m}(z_h)$ sont les fonctions enveloppes décrivant les confinements quantiques de l'électron sur le niveau n et du trou sur le niveau m, respectivement ;

• $\phi_i(\rho, z_e, z_h)$ décrit le mouvement relatif de la paire électron trou en interaction coulombienne dans l'état i.

Finalement, en appliquant l'Hamiltonien H_{exc} sous la forme IV-7 à la fonction d'onde IV-9, l'énergie de transition excitonique se décompose selon :

$$E_{exc} = E_{c,n} - E_{v,m} + E_b \quad \text{Eq.(IV-10)}$$

où $E_{c,n}$ et $E_{v,m}$ désignent respectivement les positions énergétiques des états électroniques de conduction n°n et de valence n°m, et où E_b est l'énergie de liaison due à l'interaction coulombienne entre l'électron et le trou.

Cette énergie de liaison est valeur propre de l'Hamiltonien H_μ de la particule réduite :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu_{//}} \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \rho \frac{\partial}{\partial \rho} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon\sqrt{\rho^2 + (z_e - z_h)^2}} \right] \Psi(\vec{r}_e, \vec{r}_h) = E_b \Psi(\vec{r}_e, \vec{r}_h) \quad \text{Eq.(IV-11)}$$

Enfin, dans le bilan énergétique IV-10, le terme correspondant au mouvement du centre de masse dans le plan (x, y) a été omis, en vertu des règles de sélection régissant les transitions optiques en approximation dipolaire électrique^[7].

La résolution de l'équation IV-11 avec l'exciton à l'état fondamental (i = 1) peut se faire par méthode variationnelle en choisissant pour $\phi_1(\rho, z_e, z_h)$ une fonction d'essai hydrogénoïde de type 1s. De nombreux auteurs, parmi lesquels ceux des Réfs.[9-11], adoptent la fonction introduite par Bastard^[12] :

$$\phi_1(\rho) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{1}{\lambda} e^{-\frac{\rho}{\lambda}} \quad \text{Eq.(IV-12)}$$

où λ est le paramètre variationnel représentant la distance électron-trou dans le plan des couches.

Il faut noter toutefois que cette fonction, indépendante des positions respectives de l'électron et du trou selon la direction z , ne prend pas en compte la corrélation de leurs mouvements selon cette direction. Des tentatives de prise en compte de cette corrélation ont été proposées^[12] :

$$\phi_1(\rho, z_e, z_h) = N_1 \exp\left(-\frac{\sqrt{\rho^2 + (z_e - z_h)^2}}{\lambda}\right) \quad \text{Eq.(IV-13)}$$

Cependant, la symétrie sphérique de cette fonction d'essai ne répond pas à l'anisotropie de l'hétérostructure. D'autres tentatives ont été proposées dans ce sens^[13] :

$$\phi_1(\rho, z_e, z_h) = N_2 \exp\left(-\frac{\sqrt{\rho^2 + (z_e - z_h)^2} - |z_e - z_h|}{\lambda}\right) \quad \text{Eq.(IV-14)}$$

ou bien ^[8]:

$$\phi_1(\rho, z_e, z_h) = N_3 \exp\left(-\frac{\sqrt{\rho^2 + \alpha^2(z_e - z_h)^2}}{\lambda}\right) \quad \text{Eq.(IV-15)}$$

(dans ce cas, le paramètre α chiffre le degré d'anisotropie du système ; il est compris entre 0 pour un système purement 2D et 1 pour un système purement 3D - isotrope) ou encore ^[14]:

$$\phi_1(\rho, z_e, z_h) = N_4 |z_e - z_h|^n \exp\left(-\frac{\sqrt{\rho^2 + (z_e - z_h)^2}}{\lambda} - \frac{z_e^2}{\lambda_e^2} - \frac{z_h^2}{\lambda_h^2}\right) \quad \text{Eq.(IV-16)}$$

(dans ce cas l'anisotropie du système est chiffrée par les nouveaux paramètres λ_e , λ_h et n). Dans chaque cas, les N_i sont des constantes de normalisation dépendant des paramètres variationnels.

Il faut mentionner que, ces approches plus complètes nécessitant un traitement numérique sensiblement plus lourd, les auteurs des Réfs. [15,16] ont proposé une amélioration de la méthode développée dans la Réf. [13]. Une équation en unités réduites donne l'état de la paire électron-trou en interaction coulombienne, dans lequel l'électron et le trou se déplacent dans les plans respectifs $z = z_e$ et $z = z_h$, tout en tenant compte de l'énergie cinétique de la particule réduite selon z . Une série d'énergies réduites sont alors tabulées en fonction de $(z_e - z_h)$ et une pondération d'après les profils de densité de probabilité $|\varphi_{e,n}(z_e)|^2$ et $|\varphi_{h,m}(z_h)|^2$ des porteurs respectifs à travers le puits quantique fournit l'énergie de liaison E_b . En outre, la résolution numérique de l'équation réduite par méthode des différences finies donne accès aux énergies de liaison de tous les états s ($i \geq 1$) de l'exciton alors que la méthode variationnelle ne donne accès qu'à l'état fondamental $1s$.

Toutefois, cette approche est mal adaptée d'une part à l'étude des forces d'oscillateur qui exige une connaissance précise des fonctions d'onde, et d'autre part à la prise en compte de la non-parabolicité.

En conséquence, nous adopterons la méthode variationnelle dont la bonne adaptation à l'étude des forces d'oscillateur et à la prise en compte de la non-parabolicité a été démontrée dans les Réfs. [9-11]. Nous prendrons comme fonction d'essai la formulation IV-16. Les états excités seront déterminés par la méthode de Runge-Kutta.

On remarquera que, dans cette approche simplifiée des bandes paraboliques, deux types d'excitons totalement découplés coexistent. Le premier est un exciton 'lourd' qui provient de la paire électron-HH et le deuxième un exciton 'léger' qui provient de la paire électron-LH. A chacun des deux correspondent deux valeurs distinctes du Rydberg 3D ;

$$R_{hh} = \frac{\mu_{hh} e^4}{2(4\pi\epsilon)^2 \hbar^2} \text{ et } R_{lh} = \frac{\mu_{lh} e^4}{2(4\pi\epsilon)^2 \hbar^2} \quad \text{Eq.(IV-17)}$$

et du rayon de Bohr 3D ;

$$a_{hh} = \frac{\hbar^2 4\pi\epsilon}{\mu_{hh} e^2} \text{ et } a_{lh} = \frac{\hbar^2 4\pi\epsilon}{\mu_{lh} e^2} \quad \text{Eq.(IV-18)}$$

$$\text{où } \mu_{hh} = \frac{m_{hh} m_e^*}{m_{hh} + m_e^*} \text{ et } \mu_{lh} = \frac{m_{lh} m_e^*}{m_{lh} + m_e^*} \quad \text{Eq.(IV-19)}$$

sont les masses effectives réduites dans le plan du puits.

Dans ce modèle simple, l'exciton léger est moins lié que l'exciton lourd et ceci pour deux raisons :

i) $R_{lh} < R_{hh}$ puisque $m_{lh} < m_{hh}$.

ii) les LHs sont moins confinés que les HHs. Ils sont donc moins localisés; l'interaction électron-trou, et par suite l'énergie de liaison, est donc plus faible dans le cas des LHs.

V-Excitons dans une structure de bande non parabolique :

La prise en compte de la non-parabolicité intervient d'une part sur les énergies propres $E_{c,n}$ et $E_{v,n}$ des états confinés ainsi que leurs fonctions enveloppes $\varphi_{e,n}(z_e)$ et $\varphi_{h,m}(z_h)$, et d'autre part sur la structure de bande $E_n(k_{//})$ et $E_m(k_{//})$ dans le plan du puits, qui gouverne le mouvement de la particule réduite et donc l'énergie de liaison E_b .

Dans la recherche des valeurs propres, E_b s'écrit à l'aide de l'intégrale (Eqs. IV-8-b et IV-11) :

$$E_b = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} |\varphi_{e,n}(z_e)|^2 |\varphi_{h,m}(z_h)|^2 \int_0^{+\infty} \phi_i^*(\rho, z_e, z_h) H_\mu \phi_i(\rho, z_e, z_h) \rho d\rho dz_e dz_h \quad \text{Eq.(IV-20)}$$

L'Hamiltonien H_μ de la particule réduite s'écrit maintenant de façon plus générale :

$$H_\mu = H_{\mu, \text{cin}} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon \sqrt{\rho^2 + (z_e - z_h)^2}} \quad \text{Eq.(IV-21)}$$

où $H_{\mu, \text{cin}}$ désigne l'opérateur énergie cinétique. Ainsi l'énergie cinétique moyenne de la particule réduite s'écrit :

$$\langle E_{\text{cin}} \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} |\varphi_{e,n}(z_e)|^2 |\varphi_{h,m}(z_h)|^2 \int_0^{+\infty} \phi_i^*(\rho, z_e, z_h) H_{\mu,\text{cin}} \phi_i(\rho, z_e, z_h) d\rho dz_e dz_h$$

où l'intégrale :

Eq.(IV-22)

$$I(z_e, z_h) = \int_0^{+\infty} \phi_i^*(\rho, z_e, z_h) H_{\mu,\text{cin}} \phi_i(\rho, z_e, z_h) d\rho$$

Eq.(IV-23)

n'est autre que l'énergie cinétique moyenne de la particule réduite dans le plan. C'est elle qui est directement gouvernée par la structure de bandes $E_{c,n}(k_{//})$ et $E_{v,m}(k_{//})$. Pour pouvoir exploiter ces dispersions en $k_{//}$, on décompose $\phi_i(\rho, z_e, z_h)$ en ondes planes :

$$\phi_i(\rho, z_e, z_h) = N \sum_{k_{//}} A(k_{//}, z_e, z_h) e^{ik_{//}\rho}$$

Eq.(IV-24)

où $A(k_{//}, z_e, z_h)$ est la transformée de Fourier de $\phi_i(\rho, z_e, z_h)$ selon la variable ρ , et N une constante de normalisation. L'énergie cinétique moyenne dans le plan sera donc donnée par la somme des valeurs $E_{c,n}(k_{//}) - E_{c,n}$ et $E_{v,m} - E_{v,m}(k_{//})$ issues de la structure de bandes, et pondérées par $|A(k_{//}, z_e, z_h)|^2$ qui, pour chaque valeur de $k_{//}$, représente la contribution de cette valeur à l'état de la particule réduite :

$$I(z_e, z_h) = \sum_{k_{//}} [E_{c,n}(k_{//}) - E_{c,n}] |A(k_{//}, z_e, z_h)|^2 + \sum_{k_{//}} [E_{v,m} - E_{v,m}(k_{//})] |A(k_{//}, z_e, z_h)|^2$$

Eq.(IV-25)

VI-Force d'oscillateur :

L'intensité intégrée de la bande spectrale (absorption ou luminescence par exemple) associée à une transition excitonique est proportionnelle à la force d'oscillateur de cette transition. La force d'oscillateur est une quantité qui rassemble les divers facteurs nécessaires pour que la transition ait lieu. Elle s'exprime par ^[9-11,17,18].

$$f = \frac{2M_{\text{QW}}M^2}{m_0 E_{\text{ex}}} \left| \int \varphi_{e,n}^*(z) \phi_i(0, z, z) \varphi_{h,m}(z) dz \right|^2$$

Eq.(IV-26)

Dans cette expression :

- le facteur 2 correspond à la dégénérescence due au spin ;
- m_0 désigne la masse de l'électron libre ;
- E_{ex} désigne l'énergie de la transition ;
- M désigne l'élément de matrice de transition entre états de valence et de conduction en centre de zone ; il est relié à l'élément de matrice P (chap. III) par :

$$M^2 = \frac{m_0^2 P^2}{6}$$

Eq.(IV-27)

il est proportionnel à la probabilité de transition entre un état de valence et un état de conduction ;

- M_{QW} est appelé facteur de polarisation ; il est lié à l'anisotropie de la structure et dépend de la direction de vibration du rayonnement ; dans le cas où cette direction est contenue dans le

plan des couches (ce qui est le cas dans notre montage expérimental), ce facteur vaut $3/2$ ($1/2$) pour les transitions impliquant les trous lourds (légers) ;

- $\int \varphi_{e,n}^*(z) \varphi_{h,m}(z) dz$ serait l'intégrale de recouvrement, dont le carré du module représenterait la probabilité d'interaction entre un électron et un trou en état confiné ; par ailleurs, la quantité $|\phi_i(0, z, z)|^2$ serait, sous réserve de normalisation, la probabilité pour qu'un électron et un trou, tout deux dans un même plan z , se retrouvent en un même site ; ainsi, le carré du module de l'intégrale dans l'Eq. IV-26 constitue la probabilité pour qu'un électron et un trou soient sur le même site, compte tenu des profils respectifs des densités de probabilité associées au confinement.

REFERENCES:

- [1] J.D. Dow, in 'Optical Properties of Solids, New Developments', édité par B.O. Seraphin (North Holland, Amsterdam, 1976).
- [2] S. Jorda, U. Rössler et D. Broido Phys. Rev. **B48**, 1669 (1993).
- [3] G. Bastard, E.E. Mendez, L.L. Chang and L. Esaki, Phys. Rev. **B26**, 1974 (1982).
- [4] R.L. Greene, K.K. Bajaj, Solid State Com. **45**, 831 (1983).
- [5] R.L. Greene et K.K. Bajaj and D.E. Phelps, Phys. Rev. **B29**, 1807 (1984).
- [6] M. Shinada et S. Sugano, J. of the Phys. Soc. of Japan **21**, 1936 (1966).
- [7] G. Bastard, 'Wave Mechanics Applied to Semiconductor Heterostructures', les Editions de Physique (Paris 1989).
- [8] M. Grundmann and D. Bimberg, Phys. Rev. **B38**, 13486 (1988).
- [9] M. Sugawara, Phys. Rev. **B45**, 11423 (1992).
- [10] M. Sugawara, N. Okazaki, T. Fujii ans S. Yamazaki, Phys. Rev. **B48**, 8848 (1993).
- [11] M. Sugawara, N. Okazaki, T. Fujii ans S. Yamazaki, Phys. Rev. **B48**, 8102 (1993).
- [12] G. Bastard, E.E. Mendez, L.L. Chang and L.E. Esaki, Phys. Rev. **B26**, 1974 (1982).
- [13] R.P. Leavitt and J.W. Little, Phys. Rev. **B42**, 11774 (1990).
- [14] Y. Kayanuma, Phys. Rev. **B44**, 13085 (1991).
- [15] P. Peyla, Thèse d'Université, Grenoble, 1992.
- [16] P. Peyla, R. Romestain, Y. Merle d'Aubigné, G. Fishman, A. Wasiela and H Mariette, Phys. Rev. **B52**, 12026 (1995).
- [17] M. Sugawara, T. Fujii ans S. Yamazaki and K. Nakajima, Phys. Rev. **B42**, 9587 (1990).
- [18] M. Sugawara, J. Appl. Phys. **71**, 277 (1992).

CHAPITRE V

TRANSITIONS MAGNETO-OPTIQUES DANS LES PUIITS QUANTIQUES MAGNETO-EXCITONS

I-Introduction:

L'application d'un champ magnétique à un système à puits quantique a des effets remarquables et bien connus sur les niveaux d'énergies et les fonctions d'onde. Nous nous plaçons dans le cas d'un champ magnétique appliqué selon la direction de croissance (c'est à dire perpendiculairement au plan des interfaces) (voir Fig. V-1). Dans cette configuration, le champ magnétique n'influe pas sur le mouvement des porteurs dans la direction de croissance, mais quantifie celui dans le plan du puits ^[1]. Le quasi continuum de chaque sous bande se scinde alors en une série de niveaux d'énergie discrets appelés niveaux de Landau (voir Fig. V-2). Le mouvement des porteurs dans le plan du puits n'est plus libre mais de type cyclotron ^[2,3]. Le champ magnétique augmente donc le degré de confinement des porteurs.

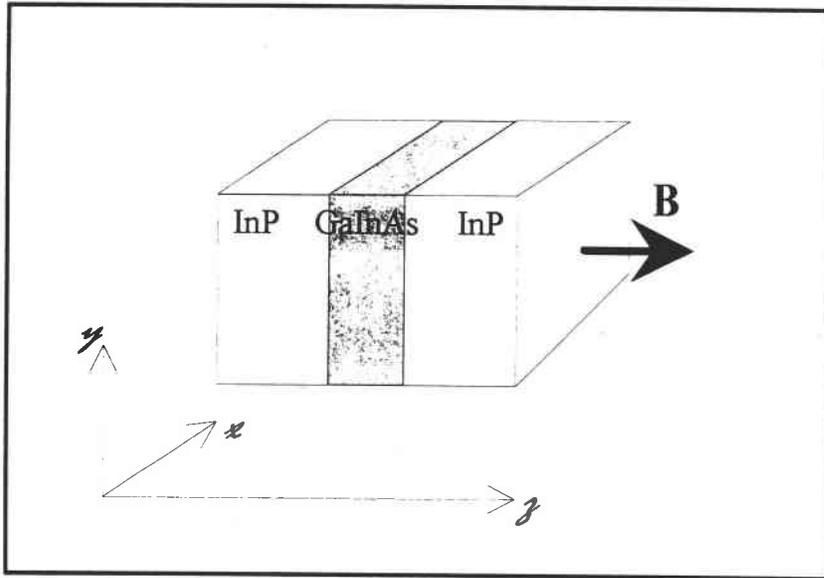


Figure V-1 : Dans notre configuration, le champ magnétique est appliqué selon la direction de croissance z , donc perpendiculairement aux plans des interfaces.

Cette quantification des sous-bandes en niveaux de Landau se manifeste par un "éclatement" du spectre continu de transitions interbandes en une série de maxima correspondant à des transitions entre niveaux de Landau ^[4-7]. Par ailleurs l'augmentation du degré de confinement renforce encore l'interaction coulombienne électron-trou et par conséquent le caractère excitonique des transitions ^[8-10]. Les transitions observées dans les spectres magnéto-optiques seront donc dominées par des effets d'excitons sous champ magnétique appelés magnéto-excitons.

Les états excitoniques étant de type s , aucune levée de dégénérescence (hormis celle de spin que nous serons amenés à négliger) n'est à attendre de l'application du champ magnétique.

Par contre, on assistera à :

- (i) un glissement vers les hautes énergies (glissement diamagnétique) de chaque transition i ($i=1, 2, \text{etc.}$) ; ce glissement est d'autant plus important que i est grand ; il a donc pour effet d'étaler la série excitonique ;
- (ii) une intensification des transitions associée au renforcement de l'interaction coulombienne sous l'effet de l'augmentation du degré de confinement.

Ces deux facteurs permettent l'observation de séries magnéto-excitoniques comportant l'état fondamental $i = 1$ et plusieurs états excités ($i > 1$), alors qu'en l'absence de champ magnétique, la faible distance énergétique entre les transitions, ainsi que la faible force d'oscillateur des états excités, ne permet généralement d'observer que l'état fondamental.

Dans ce chapitre, nous rappellerons d'abord l'essentiel sur la quantification du mouvement cyclotron dans un puits quantique, puis nous détaillerons les modifications à apporter au formalisme des transitions excitoniques pour tenir compte de l'effet du champ magnétique.

II- Effet d'un champ magnétique sur un porteur confiné dans un puits quantique - Niveaux de Landau :

On considère d'abord le cas d'un porteur, dans un puits quantique, de charge q (charge algébrique ; $q = -e$ pour les électrons) et dont la masse effective m_e est indépendante de \vec{r} dans chaque région homogène. On lui applique un champ magnétique d'induction \vec{B} orienté selon z (voir Fig. V-1). \vec{B} est caractérisé par son potentiel vecteur $\vec{A}(\vec{r})$ tel que $\vec{B} = \text{rot } \vec{A}$.

On prendra $\vec{B} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ B \end{pmatrix}$ et $\vec{A} \begin{pmatrix} 0 \\ A \\ 0 \end{pmatrix}$ avec $A = xB$.

L'impulsion de la particule étant $\vec{p} = m\vec{v}$, la grandeur $\vec{\Pi} = \vec{p} + q\vec{A}$ désigne l'impulsion généralisée ^[12]. On remplace \vec{p} par $\vec{\Pi}$ dans l'Hamiltonien H . En prenant $-i\hbar\vec{\nabla}$ comme opérateur d'impulsion généralisée, on obtient, pour une région donnée, dans le cas de l'électron :

$$H = \frac{1}{2m_e} \left[-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right]^2 + \frac{1}{2m_e} \left[-i\hbar \frac{\partial}{\partial y} + exB \right]^2 + \frac{1}{2m_e} \left[-i\hbar \frac{\partial}{\partial z} \right]^2 + V_e(z) + g^* \mu_B \vec{B} \cdot \vec{\sigma},$$

Eq.(V-1)

où $V_e(z)$ est le potentiel de confinement provenant du profil de puits et où le dernier terme est l'Hamiltonien d'interaction du spin de l'électron avec le champ. $\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_0c}$ est le magnéton

de Bohr et g^* le facteur de Landé effectif du porteur. L'opérateur de spin de Pauli $\vec{\sigma}$ a comme valeurs propres $\pm \frac{1}{2}$. On peut montrer ^[11] que l'éclatement dû au spin ne dépend que du

module de B et non de sa direction ; on a donc toujours $g^* \mu_B \vec{\sigma} \cdot \vec{B} = \pm \frac{1}{2} g^* \mu_B B$.

Pour le reste de l'Hamiltonien, on remarque que l'on peut séparer les variables x , y et z . Cette constatation simplifie l'expression de la fonction d'onde que l'on peut alors écrire :

$$\psi(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{L_y}} \exp(ik_y y) \phi_m(z) \phi_n(x)$$

Eq.(V-2)

Avec cette expression de la fonction d'onde; on peut décomposer H sous la forme :

$$H = H_{//} + H_{\perp} + H_{sp}$$

Eq.(V-3)

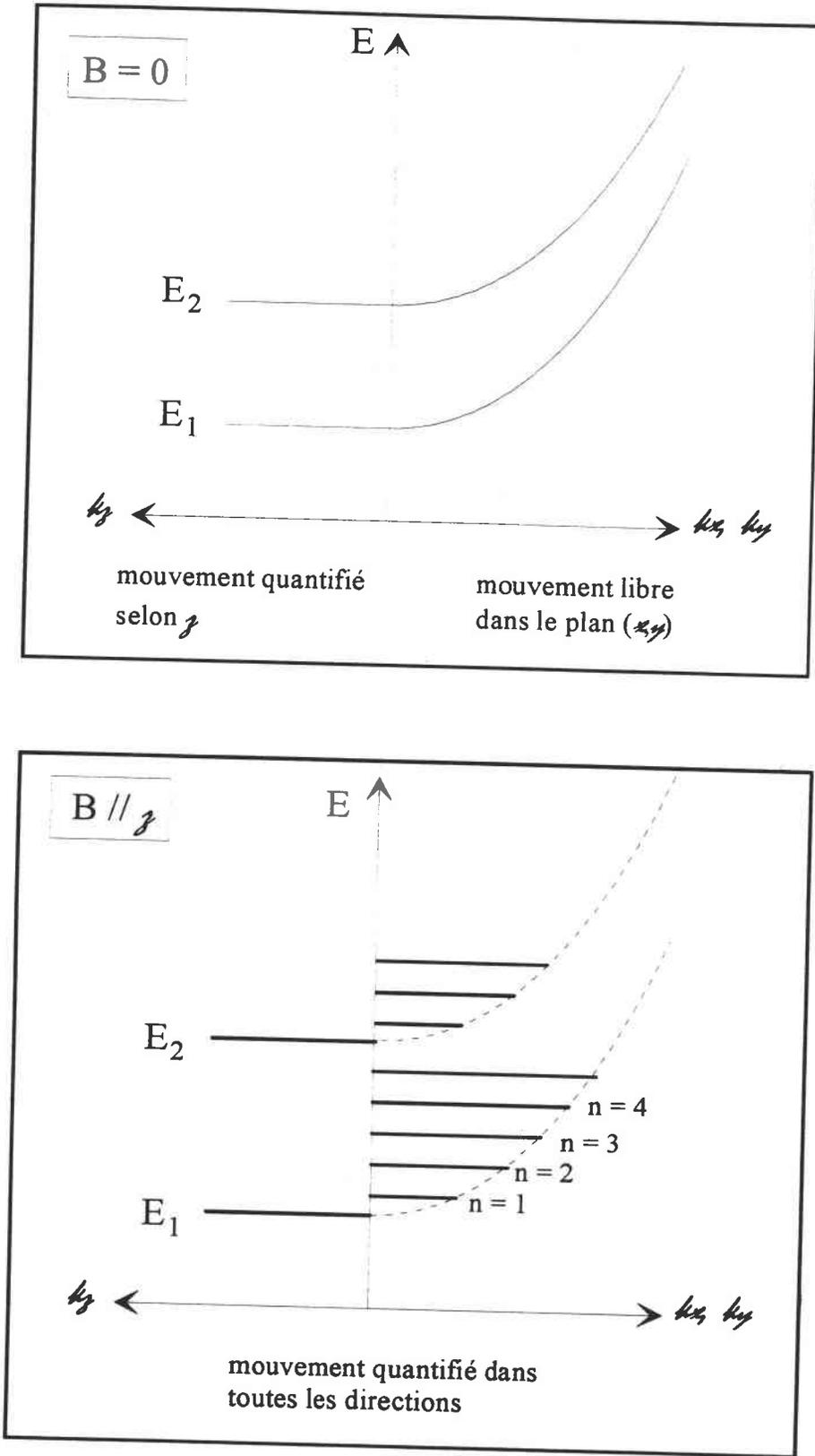


Figure V-2 : Structure énergétique d'un puits dans la direction de croissance et dans le plan des interfaces (a) dans le cas d'un champ magnétique nul, (b) dans le cas d'un champ quelconque non nul. Dans le cas où $B \neq 0$, à chaque niveau d'énergie selon z correspondent n niveaux de Landau dans le plan (x, y) .

avec
$$H_{\perp} = \frac{p_z^2}{2m_e} + V_e(z) \quad \text{Eq.(V-4)}$$

et
$$H_{//} = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2m_e} [\hbar k_y + exB]^2. \quad \text{Eq.(V-5)}$$

$\varphi_m(z)$ est la fonction d'onde du m^{ième} niveau d'énergie E_m de confinement dans la direction z:

$$H_{\perp} \varphi_m(z) = E_m \varphi_m(z). \quad \text{Eq.(V-6)}$$

Les fonctions $\phi_n(x)$ sont les fonctions propres d'un oscillateur harmonique de pulsation

$$\omega_c = \frac{eB}{m_e} \text{ centré en } x_0 = -\lambda^2 k_y \text{ avec } \lambda = \sqrt{\frac{\hbar}{eB}} :$$

$$H_{//} \frac{1}{\sqrt{L_y}} \exp(ik_y y) \phi_n(x) = \varepsilon_n \frac{1}{\sqrt{L_y}} \exp(ik_y y) \phi_n(x) \quad \text{Eq.(V-7)}$$

Les énergies propres de cette dernière équation sont indépendantes de k_y . Elles sont connues sous le nom de niveaux de Landau et s'écrivent :

$$\varepsilon_n = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega_c \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad \text{Eq.(V-8)}$$

En toute rigueur, la masse effective, et par conséquent la série ε_n qui en dépend, peuvent varier d'une région à l'autre et donc être considérées comme fonction de z. Si toutefois nous négligeons cet aspect dans un premier temps, nous pouvons écrire l'énergie propre totale de l'Hamiltonien (V-3) sous la forme :

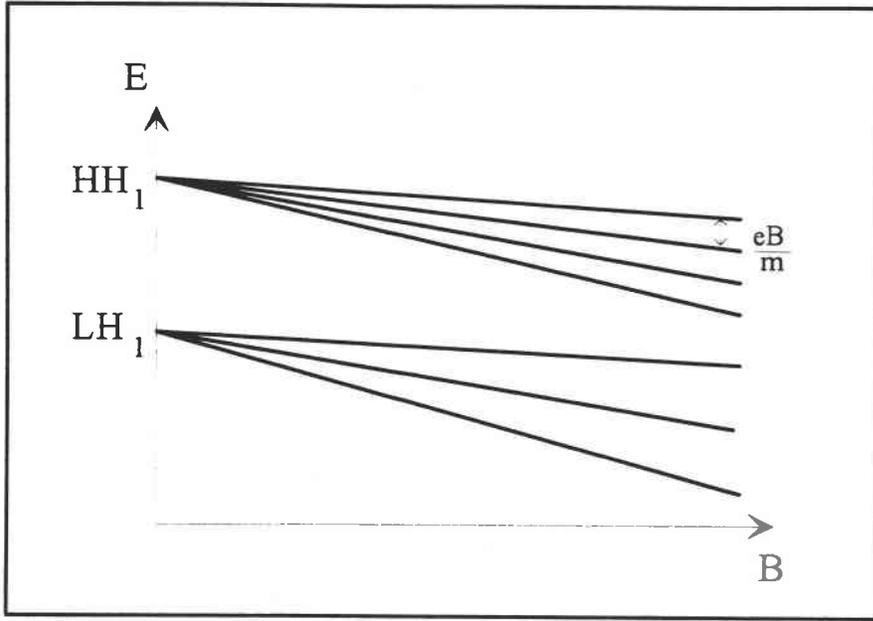
$$\varepsilon_{n,m,\sigma} = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega_c + E_m \pm \frac{1}{2} g^* \mu_B B \quad \text{Eq.(V-9)}$$

L'énergie du porteur est donc intégralement quantifiée ; selon la direction z par le puits lui-même et selon le plan (x, y) par le champ magnétique (voir Fig. V-2). Cette énergie est composée de trois éléments ;

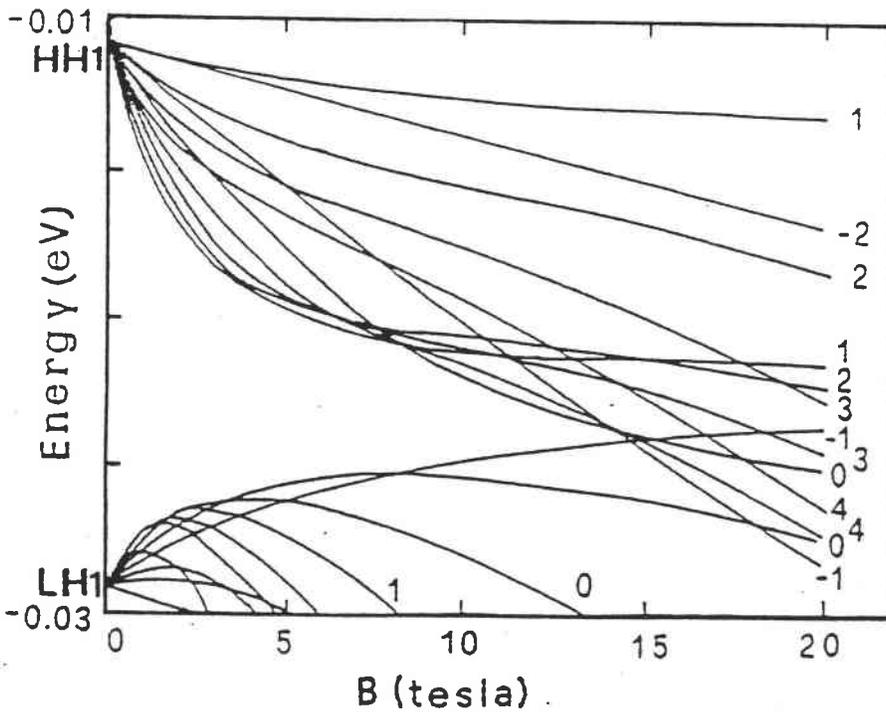
(i) le terme E_m correspondant à la quantification de l'énergie par le profil de potentiel $V_e(z)$ du puits; ce terme n'est pas affecté par l'application d'un champ magnétique orienté selon la direction (z).

(ii) le terme $\left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega_c$ correspondant à la quantification du mouvement cyclotron dans le plan du puits (x, y), perpendiculaire au champ \vec{B} , en niveaux de Landau.

(iii) le terme $\pm \frac{1}{2} g^* \mu_B B$ dû à l'interaction spin-champ magnétique et qui lève la dégénérescence entre les états de spin +1/2 et -1/2. Expérimentalement, il est très rare d'arriver à distinguer deux bandes dédoublées par cette interaction et, comme dans les travaux les plus marquants dans notre domaine^[9,10], nous ne l'avons pas observée. Ce terme sera, par conséquent, négligé.



(a)



(b)

Figure V-3 : Modélisation de l'éclatement en niveaux de Landau des sous-bandes de valence HH_1 et LH_1 (a) dans l'approximation parabolique et (b) sans approximation parabolique (d'après Réf. 17).

En réalité, comme nous l'avons déjà mentionné, la série ϵ_n définie par l'Eq. V-8 peut être fonction de z . Les valeurs propres $\epsilon_n = \epsilon_n(z)$ de $H_{//}$ peuvent alors être introduites dans l'équation de Schrödinger complète :

$$\left[\frac{p_z^2}{2m_e} + V_e(z) + \epsilon_n(z) \right] \psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}) \quad \text{Eq.(V-10)}$$

Par rapport à l'Eq. V-4, le terme ϵ_n , relatif au mouvement cyclotron dans le plan (x, y) , vient s'ajouter au potentiel de confinement $V_e(z)$ et donc affecter le mouvement du porteur selon z . Ceci montre que la dépendance en z de la masse effective induit un couplage entre les mouvements dans le plan (x, y) et selon z . Ce couplage a d'ailleurs lieu également en l'absence de champ magnétique (Eq. II-8) et son origine est bien dans la dépendance en z de la masse.

La recherche des énergies propres se fera par résolution de l'équation V-10 pour chaque valeur de l'induction magnétique et de l'entier n . On obtiendra bien, associée à chaque sous-bande, une série E de niveaux de Landau mais qui, en toute rigueur, ne seront plus équidistants ni accessibles directement par l'Eq V-8.

Cette modélisation de l'action d'un champ magnétique sur les sous-bandes d'énergie reste néanmoins simple. Pour être plus précis, il faudrait introduire les effets de couplage de bandes pris en compte dans le théorie \mathbf{k}, \mathbf{p} . Des calculs très complets ont été ainsi effectués sans approximation parabolique et arrivent à des résultats spectaculaires sur la forme de l'éventail d'éclatement en niveaux de Landau avec l'induction magnétique, en particulier pour les états de valence^[13-17] (voir Fig. V-3).

En réalité, comme nous l'avons mentionné plus haut, du fait de l'interaction coulombienne accrue à la fois par le confinement du puits et par l'effet du champ magnétique, les transitions magnéto-excitoniques ont tendance à dominer les spectres par rapport aux transitions entre niveaux de Landau.

Pour cette raison, nous ne développerons pas ici de théorie plus complexe sur les niveaux de Landau et nous allons exposer à présent la modélisation des transitions excitoniques sous champ magnétique.

III- Glissement diamagnétique de l'exciton :

Les excitons de Wannier sous champ magnétique dans un milieu 2D ont fait pour la première fois l'objet d'une étude théorique complète en 1967^[18]. Les auteurs, Akimoto et Hasegawa, utilisant les équations de la masse effective, ont calculé les glissements diamagnétiques et forces d'oscillateur pour toute valeur du champ magnétique. Plus tard, en 1984, l'effet d'un champ magnétique sur les excitons 2D a été étudié expérimentalement par Miura^[19] et Maan^[20] sur le système $\text{GaAs}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$. Depuis, un très grand nombre de travaux a porté sur le glissement diamagnétique dans les systèmes à PQs GaAs ^[21-30], donnant ainsi de précieux renseignements sur les caractéristiques des excitons 2D comme les énergies de liaison et les masses effectives réduites.

La plupart de ces travaux se basent sur la théorie développée par les auteurs de la Réf. [18]. Toutefois, plusieurs travaux mettent l'accent sur les effets de couplage de bandes et la forte non-parabolicité qui en résulte ainsi que les couplages entre excitons lourds et légers. Les bases théoriques de Akimoto et Hasegawa^[18], établies essentiellement en bandes paraboliques, ne sont pas alors directement exploitables avec leur universalité quant à la valeur du champ. Ceci amène la plupart des auteurs à considérer des cas limites à champ faible et à champ fort dont nous devons préciser la signification.

Limite champ fort-champ faible :

L'influence d'un champ magnétique sur la fonction d'onde d'un exciton est déterminée par le rapport de l'énergie cyclotron des électrons et des trous, $\hbar\omega_c = \frac{e\hbar B}{\mu}$ (où μ est la masse réduite), sur l'énergie de liaison de l'exciton E_b , c'est à dire par le rapport $\xi = \frac{\hbar\omega_c}{2E_b}$. Dans la limite des faibles champs, c'est à dire pour $\xi \ll 1$, le champ magnétique perturbe les états excitoniques sans altérer profondément leur fonction d'onde. Le glissement diamagnétique du niveau fondamental $1s$ présente alors une dépendance quadratique en B , caractéristique du régime à champ faible. Dans le cas des forts champs $\xi \gg 1$, les électrons et les trous sont soumis au mouvement cyclotron qui domine, et l'interaction coulombienne, perturbant ce mouvement, génère des états liés associés à chaque paire de niveaux de Landau ^[18]. Dans $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}/\text{InP}$, si l'on prend $\mu = 0.04 m_0$ et $E_b = -6.6 \text{ meV}$ ^[31], on obtient $\xi = 1$ pour $B = 4.6 \text{ T}$. Notre dispositif expérimental permet d'appliquer des champs magnétiques variant de 0 à 8 T ($\xi = 0 - 1.8$), donc de couvrir un domaine englobant celui pour lequel aucune des deux approximations ci-dessus n'est valable. Pour décrire l'ensemble de nos résultats, il est donc indispensable de faire appel à un formalisme général sans restriction d'ordre de grandeur de champ et dans lequel l'énergie d'interaction coulombienne peut être du même ordre de grandeur que l'énergie cyclotron.

Nous nous inspirerons ici encore du formalisme développé par exemple dans les Réfs.[8-10] et qui consiste à ajouter à l'Hamiltonien H_μ de la particule réduite (Eq. IV-8-b), le terme diamagnétique $\frac{e^2 B^2}{8\mu_{//}} \rho^2$ où $\mu_{//}$ désigne la masse effective réduite dans le plan (Eq. IV-6-f) et ρ la distance électron-trou, également dans le plan (Eq. IV-6-d)

Ainsi l'énergie de transition magnéto-excitonique se décomposera selon :

$$E_{\text{ex}} = E_{c,n} - E_{v,m} + E_r \quad \text{Eq.(V-11)}$$

où $E_{c,n}$ et $E_{v,m}$ ont même signification que dans l'Eq. IV-10 et où E_r est valeur propre de l'Hamiltonien H_μ :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \left(\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \right) - \frac{e^2}{4\pi\epsilon r} + \frac{e^2 B^2}{8\mu_{//}} \rho^2 \right] \psi(\vec{r}_e, \vec{r}_h) = E_r \psi(\vec{r}_e, \vec{r}_h). \quad \text{Eq.(V-12)}$$

Le terme diamagnétique $\frac{e^2 B^2}{8\mu_{//}} \rho^2$ forme un potentiel de confinement parabolique dans le plan, responsable de la quantification des sous-bandes en niveaux de Landau. Ici encore, la fonction enveloppe s'écrit (Eq. IV-9):

$$\psi(\vec{r}_e, \vec{r}_h) = \frac{1}{\sqrt{S}} \phi_i(\rho, z_e, z_h) \phi_{e,n}(z_e) \phi_{h,m}(z_h). \quad \text{Eq.(V-13)}$$

où $\phi_i(\rho, z_e, z_h)$ représente le mouvement relatif de l'électron et du trou dans le plan, $\varphi_{e,n}(z_e)$ ($\varphi_{h,m}(z_h)$) est la fonction d'onde de l'état confiné de l'électron (du trou).

Pour déterminer l'état fondamental ($i = 1$), on résout l'équation V-12, en utilisant encore la méthode variationnelle, avec comme fonction d'essai, une fonction combinant la fonction IV-16 décrivant l'interaction coulombienne et la fonction d'onde d'un oscillateur harmonique décrivant l'action du champ magnétique:

$$\phi_1(\rho, z_e, z_h) = N_5 \left[|z_e - z_h|^n \exp \left(-\frac{\sqrt{\rho^2 + (z_e - z_h)^2}}{\lambda} - \frac{z_e^2}{\lambda_e^2} - \frac{z_h^2}{\lambda_h^2} \right) + \frac{b}{\eta} \exp(-\rho^2 / \eta^2) \right] \quad \text{Eq.(V-14)}$$

η et b sont deux paramètres variationnels supplémentaires et N_5 une constante de normalisation. Au fur et à mesure que le champ augmente, la fonction d'onde de l'oscillateur harmonique prend de plus en plus d'importance sur la fonction qui décrit l'état de l'exciton à champ nul.

Il faut bien noter à présent que le mouvement de type cyclotron imposé par le champ magnétique vient s'ajouter à celui de la paire électron-trou en interaction coulombienne, mettant en jeu des valeurs significatives de $k_{//}$. Dans ces conditions, la non-parabolicité des bandes ne peut être ignorée. Ceci a d'ailleurs été démontré par les auteurs des Réfs. [9] et [10] qui ont pu ainsi interpréter de façon cohérente l'ensemble de leurs résultats de spectrométrie magnéto-optique, alors que les mêmes résultats présentaient des aspects contradictoires lorsqu'ils étaient analysés en approximation des bandes paraboliques^[8].

Ici encore, les valeurs propres E_T sont formulées par l'intégrale IV-20, et la prise en compte de la structure de bandes $E_{c,n}(k_{//})$ et $E_{v,m}(k_{//})$, préalablement déterminée par la théorie $\mathbf{k.p}$, se fera en décomposant $\phi_i(\rho, z_e, z_h)$ en ondes planes de vecteur d'onde $k_{//}$. Le terme d'énergie cinétique IV-22 sera encore traité à l'aide des équations IV-23 à IV-25. Toutefois, l'intégrale IV-20 doit comporter à présent un terme diamagnétique provenant du terme $\frac{e^2 B^2}{8\mu_{//}} \rho^2$ de l'Hamiltonien. Or ce terme a été établi en approximation de bandes paraboliques et l'usage direct de la théorie $\mathbf{k.p}$ exigerait un formalisme nettement plus lourd. En conséquence, nous prendrons en compte la non-parabolicité des sous-bandes en leur affectant une masse réduite $\mu_{//}$ 'moyenne' obtenue par l'identification :

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu_{//}} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} |\varphi_{e,n}(z_e)|^2 |\varphi_{h,m}(z_h)|^2 \int_0^{+\infty} \phi_i^*(\rho, z_e, z_h) \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \rho \frac{\partial}{\partial \rho} \phi_i(\rho, z_e, z_h) d\rho dz_e dz_h = \langle E_{cin} \rangle \quad \text{Eq. V-15}$$

où $\langle E_{cin} \rangle$ est déterminée en structure de bandes non-paraboliques par les Eqs. IV-22 à IV-25.

L'ensemble de cette procédure sera suivi pour chaque valeur de l'induction B et chaque état i du magnéto-exciton. Les états fondamentaux ($i = 1$) seront ainsi déterminés par méthode variationnelle alors que les états excités ($i > 1$) seront déterminés, ici encore, par la méthode de Runge-Kutta.

IV- Force d'oscillateur :

Ici encore, pour chaque valeur de l'induction et chaque état i du magnéto-exciton, la force d'oscillateur sera donnée par l'Eq. IV-26. Notons que l'effet de confinement introduit par le champ se retrouve au niveau de la fonction d'onde qui est nettement moins étalée dans le plan qu'en l'absence de champ. La probabilité pour qu'un électron et un trou soient sur le même site s'en trouve donc accrue, ce qui entraîne une augmentation de la force d'oscillateur.

REFERENCES:

- [1] M. Razeghi, *The MOCVD Challenge, Vol.1 : A Survey of GaInAsP-InP for Photonic and Electronic Applications*, Adam Hilder ed., Bristol-Philadelphia (1989)
- [2] G. Dresselhaus, A.F. Kip, and C. Kittel, *Phys. Rev.* **B98**, 368 (1955)
- [3] J.M. Luttinger *Phys. Rev.* **B102**, 1030 (1956)
- [4] E.D. Jones, H. Ackermann, J.E. Schirber, T.J. Drummond, L.R. Dawson and I.J. Fritz, *Solid State Comm.* **55**, 525 (1985)
- [5] H.Q. Hou, Y. Segawa, Y. Aoyagi, S. Namba and J.M. Zhou, *Solid State Comm.* **74**, 159 (1990)
- [6] W. Stolz, J.C. Maan, M. Altarelli, L. Tapfer and K. Ploog, *Phys. Rev.* **B36**, 4301 (1987)
- [7] D.C. Reynolds, D.C. Look, B. Jogai, C.E. Stutz, R. Jones and K.K. Bajaj, *Phys. Rev.* **B50**, 11710 (1994)
- [8] M. Sugawara, *Phys. Rev.* **B45**, 11423 (1992)
- [9] M. Sugawara, N. Okazaki, T. Fujii and S. Yamazaki, *Phys. Rev.* **B48**, 8848 (1993)
- [10] M. Sugawara, N. Okazaki, T. Fujii and S. Yamazaki, *Phys. Rev.* **B48**, 8102 (1993)
- [11] G. Bastard, 'Wave Mechanics Applied to Semiconductors Heterostructures', les Editions de Physique (Paris 1989).
- [12] Voir par exemple P. Kireev, 'Physique des semiconducteurs', Mir-Moscou, 1975.
- [13] J.C. Maan, A. Fasolino, G. Belle, M. Altarelli and K. Ploog, *Physica* **127B**, 426 (1984)
- [14] A. Fasolino et M. Altarelli *Surf. Science* **142**, 322 (1984)
- [15] A. Fasolino et M. Altarelli in *Two-dimensional Systems, Heterostructures and Superlattices*, G. Bauer, F. Kuchar and H. Heinrich ed.s, (Springer, Berlin, 1984) p.176
- [16] F. Ancilotto and J.C. Maan, *Superlattices and Microstructures* **3**, 187 (1987)
- [17] F. Ancilotto, A. Fasolino and J.C. Maan, *Phys. Rev.* **B38**, 1788 (1988)
- [18] O. Akimoto et H. Hasegawa, *J. Phys. Soc. Jpn.* **22**, 181(1967)
- [19] N. Miura, Y. Iwasa, S. Tarusha and H. Okamoto, in *Proceedings of the 17th International Conference on the Physics of Semiconductors*, Ed. J.D. Chali and W.A. Harrison (Springer, New York, 1984), p.359
- [20] J.C. Maan, G. Belle, A. Fasolino, M. Altarelli and K. Ploog, *Phys. Rev.* **B30**, 2253 (1984)

- [21] S. Tarucha, H. Okamoto, Y. Iwasa, and N. Miura, *Solid State Comm.* **52**, 815 (1984)
- [22] S. Tarucha, H. Iwamura, T. Saku, H. Okamoto, Y. Iwasa, and N. Miura, *Surf. Sci.* **174**, 194 (1986)
- [23] D.C. Rogers, J. Singleton, R.J. Nicholas, C.T. Foxon and K. Woodbridge, *Phys. Rev.* **B34**, 4002 (1986)
- [24] W. Ossau, B. Jakel, E. Bangert, G. Landwehr and G. Weimann, *Surf. Sci.* **174**, 188 (1986)
- [25] D.J. Mowbray, J. Singleton, M.S. Skolnic, N.J. Pulsford, S.J. Bass, L.L. Taylor, R.J. Nicholas and W. Hayes, *Superlatt. Microstruct.* **3**, 471 (1987)
- [26] A.S. Plaut, J. Singleton, R.J. Nicholas, R.T. Harley, S.R. Andrews and C.T.B. Foxon, *Phys. Rev.* **B38**, 1323 (1988)
- [27] G.E.W. Bauer and T. Ando, *Phys. Rev.* **B38**, 6015 (1988)
- [28] D.D. Smith, M. Dutta, X.C. Liu, A.F. Terzis, A. Petrou, M.W. Cole and P.G. Newman, *Surf. Sci.* **228**, 184 (1990)
- [29] R.J. Warburton, G.M. Sundaram, R.J. Nicholas, S.K. Haywood, G.J. Ress, N.J. Mason and P.J. Walker, *Surf. Sci.* **228**, 270 (1990)
- [30] X.L. Zheng, D. Heiman and B. Lax, *Phys. Rev.* **B40**, 10523 (1989)
- [31] M. Sugawara, T. Fujii, S. Yamazaki and K. Nakajima, *Phys. Rev.* **B42**, 9587 (1990)

CHAPITRE VI

DETAILS EXPERIMENTAUX

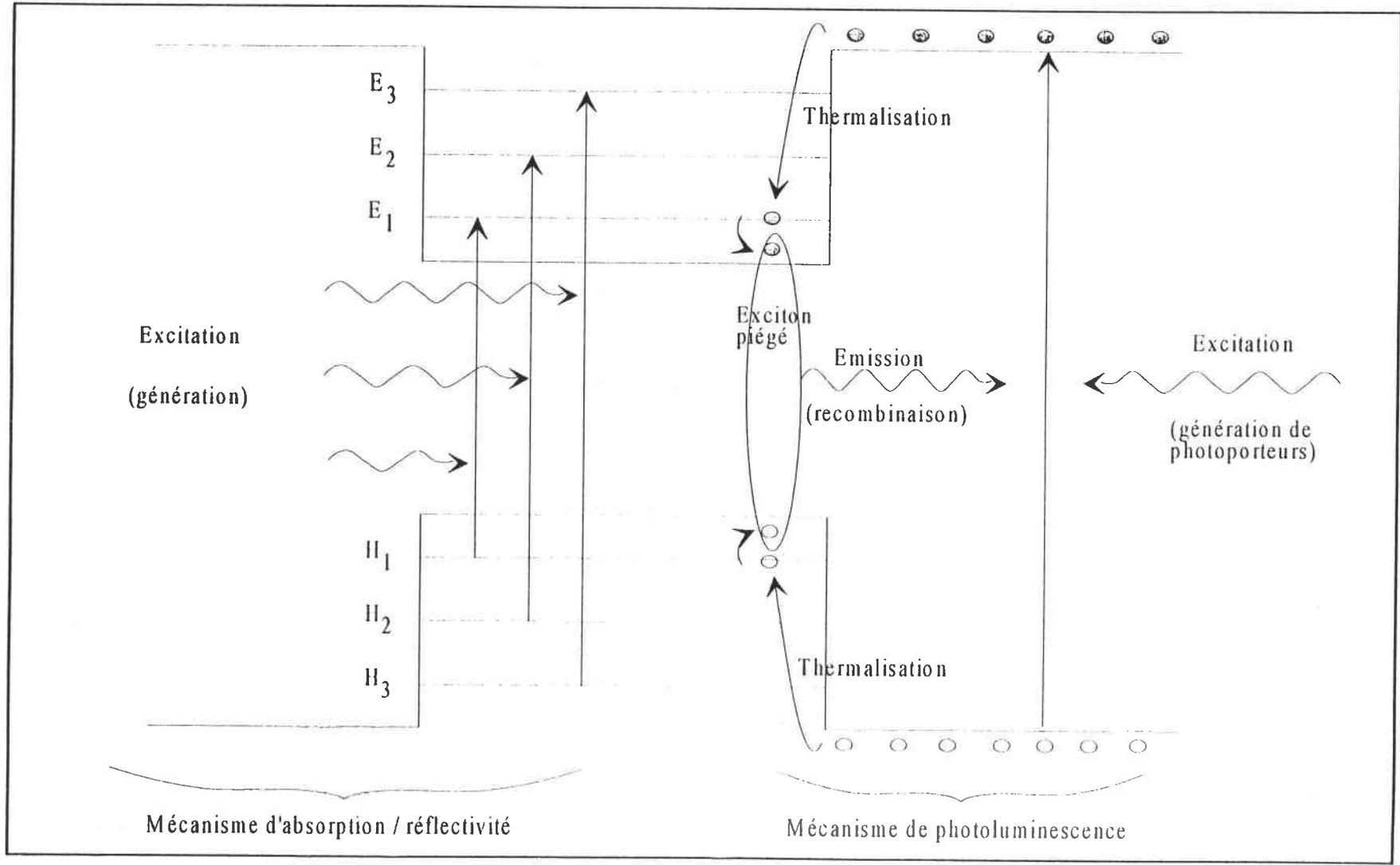


Figure VI-1 : Transitions électroniques impliquées dans un PQ, en spectrométrie d'absorption - réflectivité et en spectrométrie de PL.

I- Techniques spectrométriques:

Les transitions excitoniques avec ou sans champ magnétique peuvent s'observer en spectrométrie d'excitation (absorption, réflectivité, ...) et en spectrométrie d'émission (luminescence). Dans le cas de PQs, la photoluminescence (PL) est couramment utilisée depuis de nombreuses années pour les contrôles routiniers dans la production de structures à grande échelle ou dans les recherches d'optimisation technologique^[1-4]. Elle a été utilisée sous champ magnétique pour estimer les masses effectives des porteurs mis en jeu dans les transitions et rechercher une première approche de la structure de bandes^[5,6]. Toutefois, le processus d'émission ne met en jeu que les états de conduction et de valence de plus faibles énergies de confinement vers lesquels les photoporteurs thermalisent avant de se recombiner (Fig. VI-1). En outre, la thermalisation se poursuit par la formation d'un exciton et de son piégeage sur des imperfections structurales telles que rugosités d'interfaces ou inhomogénéités d'alliage. Finalement la PL ne donne que difficilement accès aux paramètres structuraux du PQ tels que sa largeur, la composition de l'alliage, ou le profil des couches interfaciales.

Nous avons toutefois fait appel à cette technique pour vérification préliminaire de la qualité optique des structures. Une forte intensité du signal de PL témoigne de l'absence de défauts cristallins. En effet, ces défauts génèrent des centres de recombinaisons qui amoindrissent sensiblement le processus d'émission au voisinage de la transition fondamentale. En outre, le décalage énergétique entre le pic de PL et le seuil d'absorption renseigne sur l'importance des imperfections structurales qui piègent les excitons.

En spectrométrie d'absorption ou de réflectivité, on peut générer un grand nombre d'excitons intrinsèques non piégés et capables de se mouvoir librement dans le plan du puits. De plus, on peut (sous réserve des règles de sélection) induire des transitions impliquant tous les niveaux de confinement^[7] (Fig. VI-1). Ce type de spectrométrie est donc porteur de beaucoup plus d'informations sur la structure électronique des PQs. L'analyse quantitative des résultats, à la lumière des bases théoriques développées aux chapitres précédents, donne accès à un certain nombre d'informations sur la constitution réelle de la structure^[7].

Dans le système GaAs/GaAlAs dans lequel le matériau constituant le puits (GaAs) est le même que celui du substrat, les échantillons sont opaques pour les énergies de photons susceptibles d'induire des transitions entre états confinés, ce qui exclut l'usage de la spectrométrie d'absorption. Il faut donc avoir recours à la spectrométrie de réflectivité^[8] ou d'excitation de PL^[9,10].

Dans notre système GaInAs/InP où le matériau du substrat est le même que celui constituant les barrières, l'échantillon reste sensiblement transparent pour le domaine énergétique concernant les transitions entre états confinés. Nous aurons donc recours à la technique d'absorption dont l'efficacité a été clairement démontrée^[7].

II-Dispositifs expérimentaux :

Pour les expériences de spectrométrie d'absorption nous avons utilisé le dispositif expérimental schématisé sur la figure VI-2.

II-A-Détails optiques :

La source excitatrice est une lampe de quartz à filament de tungstène, d'une puissance de 100 Watts émettant dans une atmosphère d'iode gazeux. Riche en infra-rouges (IR), son spectre couvre largement le domaine énergétique étudié (0,8 à 1,4 eV). Sa brillance importante permet la concentration d'une grande quantité de lumière sur une petite surface : $\sim 1 \text{ mm}^2$.

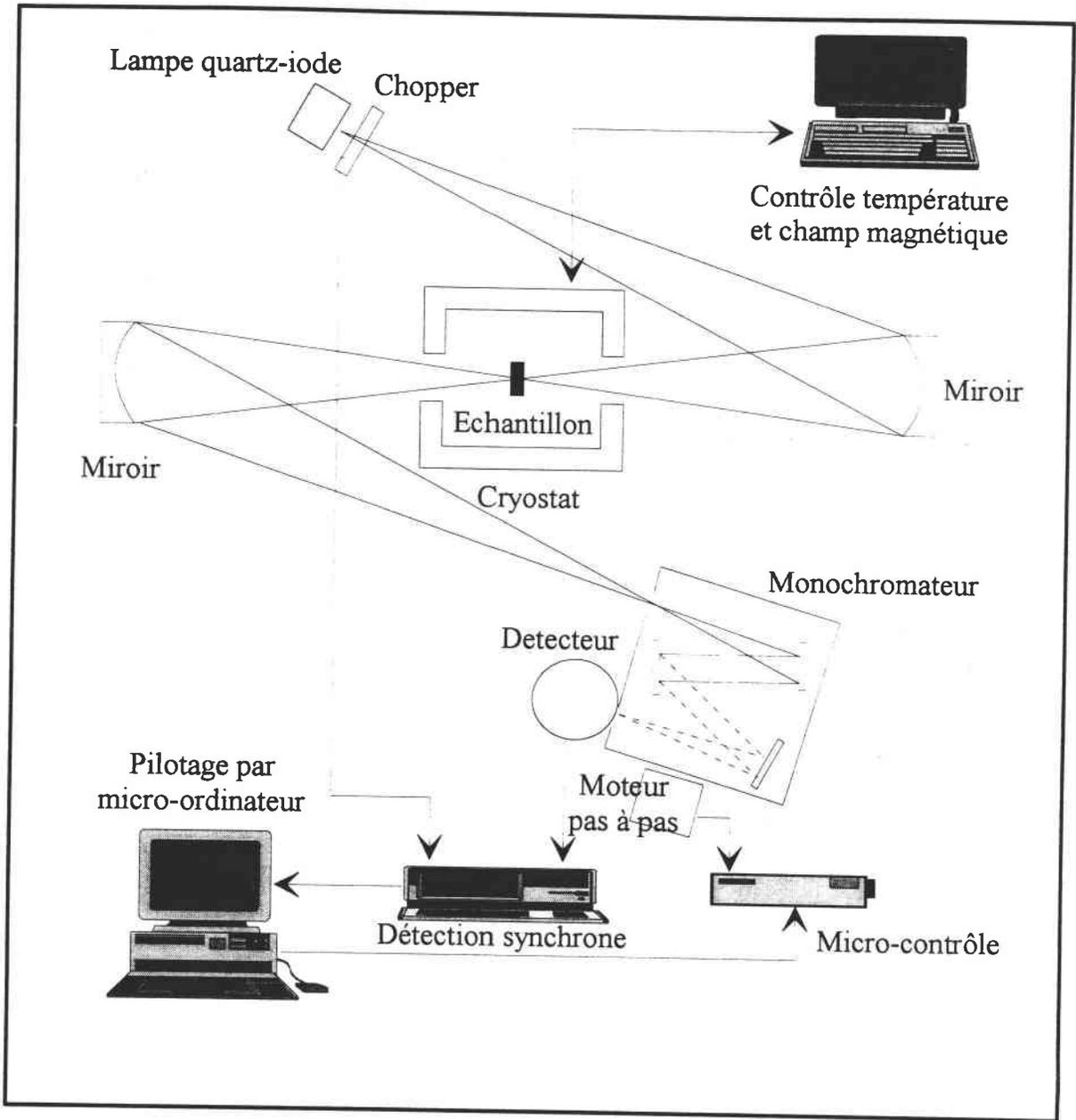


Figure VI-2 : Dispositif expérimental : spectrométrie d'absorption.

Le faisceau lumineux est modulé par un chopper mécanique dont la fréquence est ajustable de quelques Hz à quelques kHz (ici 120 Hz), puis focalisé par un miroir sur l'échantillon. Le faisceau transmis est récupéré par un deuxième miroir qui le focalise sur la fente d'entrée d'un monochromateur de distance focale 600 mm. Le réseau du monochromateur est blasé à $1\mu\text{m}$ et fonctionne au deuxième ordre. Il disperse le rayonnement à raison de $13 \text{ \AA}/\text{mm}$ sur la fente de sortie. La largeur de fente adoptée dans nos mesures, $20\mu\text{m}$, permet une analyse spectrale du rayonnement avec une précision de $0,26 \text{ \AA}$, soit $0,032 \text{ meV}$. En réalité, le moteur pas à pas qui commande le réseau ne permet pas une séparation inférieure à 1 \AA entre deux points consécutifs, soit $0,124 \text{ meV}$. Cette précision est néanmoins suffisante dans nos mesures spectrales où l'ordre de grandeur de largeur de raie n'est jamais inférieur au meV. Le faisceau sortant du monochromateur est focalisé sur un détecteur à photodiode au Germanium refroidie à l'azote liquide.

II-B-Cryostat :

Nous avons utilisé un cryostat à circulation d'Hélium dont une coupe est présentée sur la figure VI-3. L'isolement thermique du vase à Hélium dans lequel est placé l'aimant supraconducteur est assuré par un vide secondaire (typiquement 10^{-6} Torr). Dans la zone du vide, une garde d'azote améliore cet isolement. L'échantillon est placé dans l'anticryostat soumis à un pompage primaire. La différence de pression permet une circulation d'Hélium du vase vers l'anticryostat à travers une micro-vanne. Le réglage et le contrôle de la température de l'échantillon peut être effectué manuellement ou automatiquement à l'aide d'un asservissement P.I.D. (Proportionnel, Intégré, Dérivé) qui commande l'ouverture de la micro-vanne ainsi qu'un jeu de résistances de réchauffement. L'intérêt d'un tel dispositif tient dans la séparation de l'échantillon et de l'aimant supraconducteur plongeant dans l'Hélium liquide : l'échantillon étudié peut être soumis au champ magnétique (jusqu'à 8T) quelle que soit sa température, de 2,17K (Hélium suprafluide dans l'anticryostat) à 300K et même au delà.

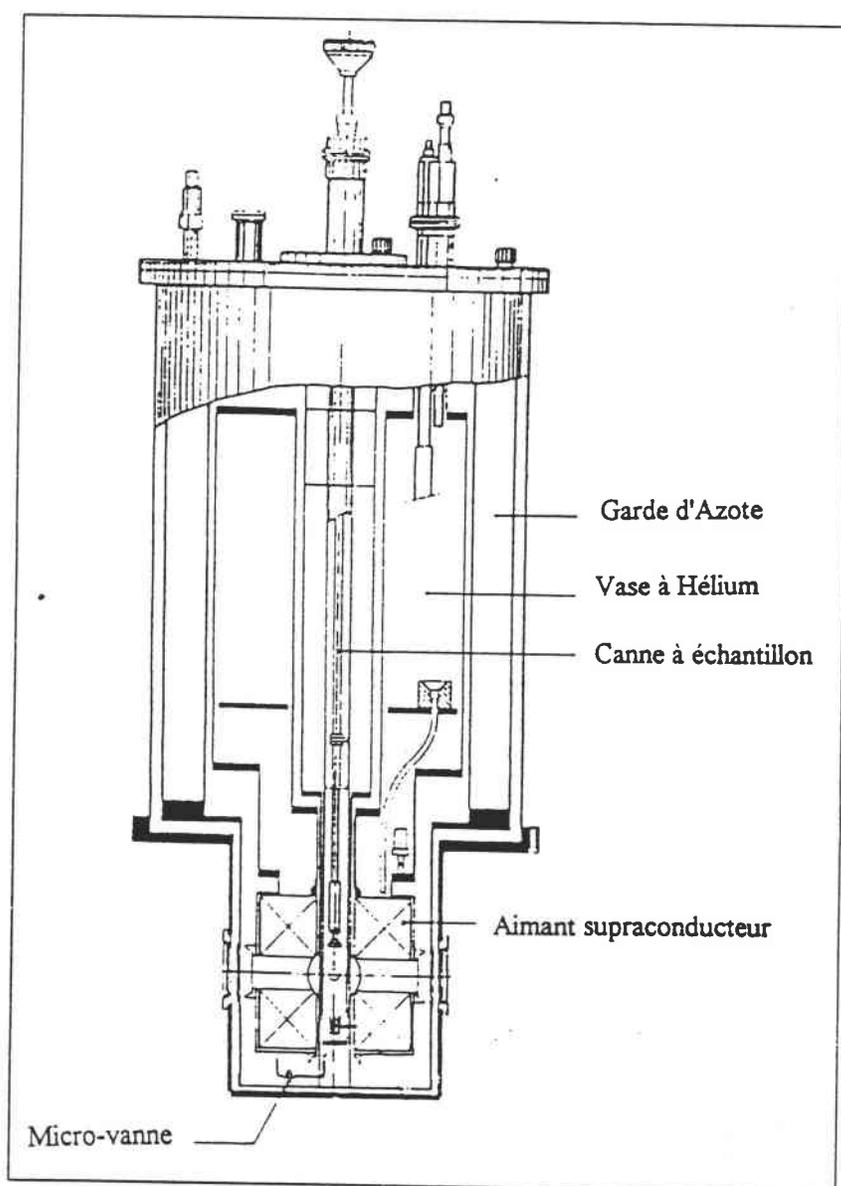


Figure VI-3 : Coupe du cryostat à circulation avec aimant supraconducteur.

II-C-Porte-échantillon :

Les échantillons sont collés sur une plaque de cuivre percée de deux fenêtres, laquelle est vissée sur un support adaptable sur la canne plongeant dans l'anticryostat. Chaque porte-échantillon maintient deux échantillons ce qui limite le nombre de réchauffement de la canne nécessités par les changements d'échantillons (Fig. VI-4).

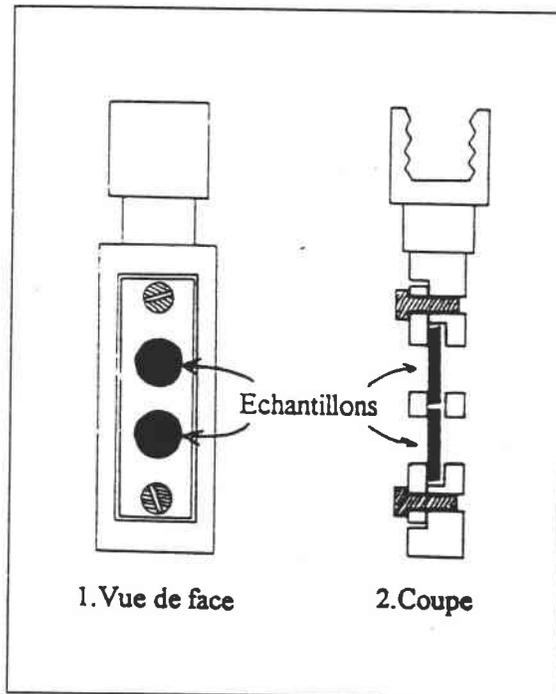


Figure VI-4 : Porte échantillons

II-D-Chaîne de mesure :

Le signal modulé fourni par le détecteur est traité par un amplificateur à détection synchrone et transmis à un ordinateur où il est enregistré. Une fois la valeur stockée, l'ordinateur commande l'action du moteur pas à pas modifiant l'orientation du réseau, sélectionnant une nouvelle longueur d'onde et le processus de mesure est répété.

II-E-Dispositif utilisé pour la PL :

Le dispositif utilisé pour la PL est représenté Fig. VI-5. La différence avec celui réservé à l'absorption tient uniquement dans la partie optique. Cette fois un laser à Argon ionisé ($\lambda = 514,5\text{nm}$) excite l'échantillon. Le rayonnement émis par celui-ci est focalisé par un miroir sur la fente d'entrée du monochromateur.

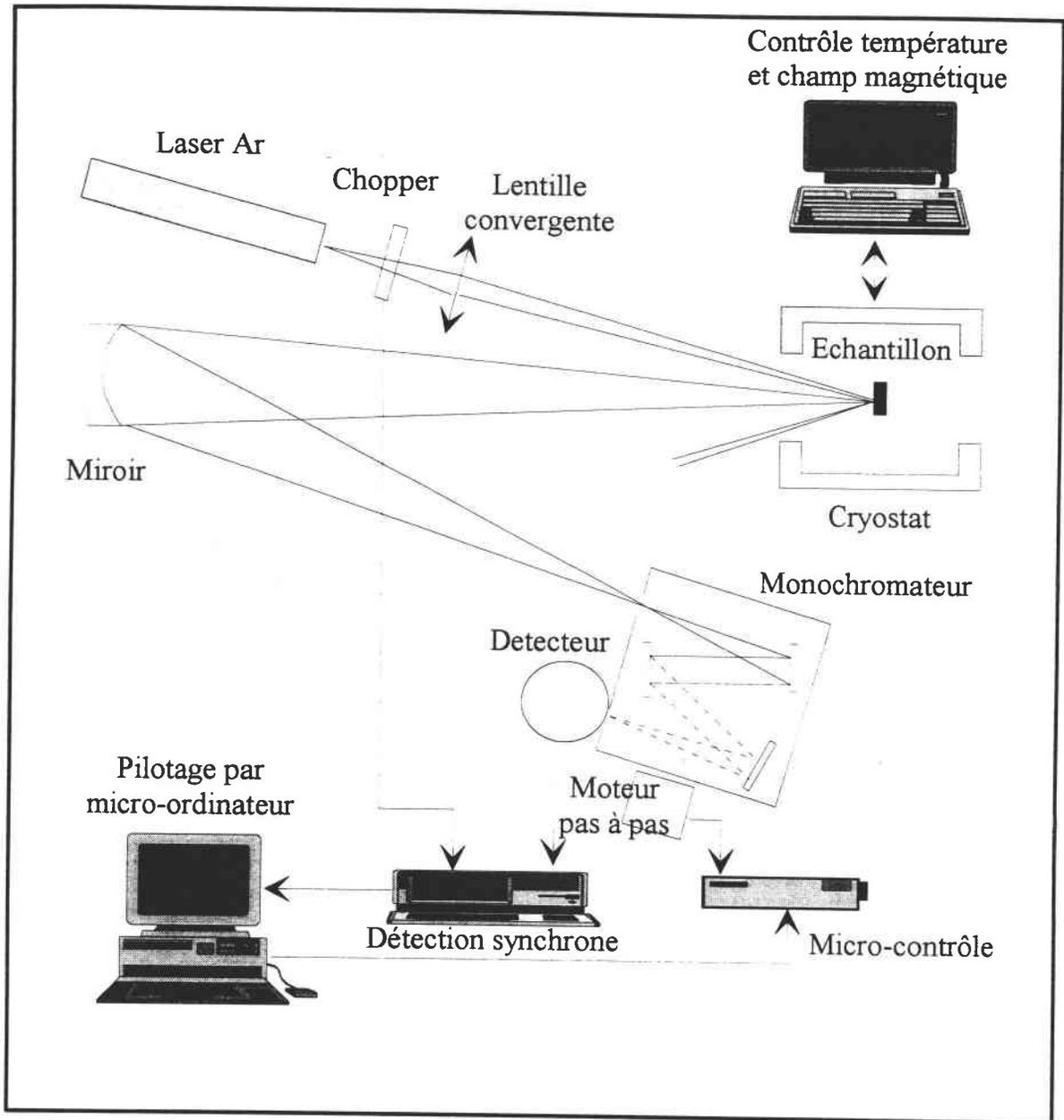


Figure VI-5 : Dispositif expérimental : spectrométrie de photoluminescence

III-Conduite des mesures d'absorption et traitement des spectres :

III-A-Température :

Pour obtenir le maximum d'informations spectroscopiques, les mesures optiques doivent être réalisées à très basse température. On évite ainsi les effets thermiques de dissociation des excitons et d'ionisation des impuretés. De plus, on limite l'élargissement des structures spectrales dû aux effets d'agitation thermique. Les mesures quantitatives d'absorption ont été effectuées à 6K. Cette température proche de celle de l'Hélium liquide (4,2K), permet de travailler dans un flux d'Hélium gazeux et de s'affranchir des problèmes d'ébullition du liquide cryogénique qui exigent, comme dans un cryostat à bain d'Hélium, un pompage jusqu'à l'état suprafluide.

III-B-Champ magnétique :

Dans le but de voir l'évolution des spectres en fonction du champ magnétique, chaque échantillon a été soumis à une série de mesures sous champ incrémenté de 0 à 8T, par intervalles de 1T entre 0 et 5T, puis par intervalles de 0,5T pour les champs plus élevés.

III-C-Obtention du coefficient d'absorption :

Le coefficient d'absorption de l'échantillon en fonction de la longueur d'onde n'est pas mesuré directement. N'est mesurée directement que l'intensité transmise I_t . On sait que cette quantité est reliée au coefficient d'absorption α par la relation $I_t = I_0 \exp(-\alpha d)$ où I_0 est l'intensité du rayonnement incident et d l'épaisseur de l'échantillon. Pour retrouver α en fonction de la longueur d'onde, et plus exactement l'absorbance $\alpha d(\lambda)$ il faut donc déjà avoir I_t/I_0 . Chaque spectre de transmission $I_t(\lambda)$ sera donc accompagné d'un spectre $I_0(\lambda)$ caractéristique de la réponse du système sans échantillon et obtenu dans des conditions rigoureusement identiques à celles du spectre de transmission.

Un traitement informatique nous permet de normaliser les spectres de transmission et d'obtenir ainsi I_t/I_0 en fonction de λ . Un spectre de réponse du système de mesures sans échantillon est reproduit sur la figure VI-6. La forme générale est l'effet combiné du spectre de la source, de la réponse du réseau et du détecteur, et éventuellement du taux de transmission des fenêtres du cryostat. La présence de pics d'absorption très prononcés dans ces spectres est due aux molécules d'eau sur le trajet optique.

L'étape suivante du traitement informatique consiste à lisser les spectres normalisés I_t/I_0 par simulation de filtrage, afin d'éliminer les effets résiduels de vapeur d'eau tout en préservant les structures porteuses d'informations qui apparaissent alors clairement.

Enfin nous calculons $\alpha d = \ln(I_t/I_0)$ et transformons l'échelle des longueurs d'onde en échelle énergétique.

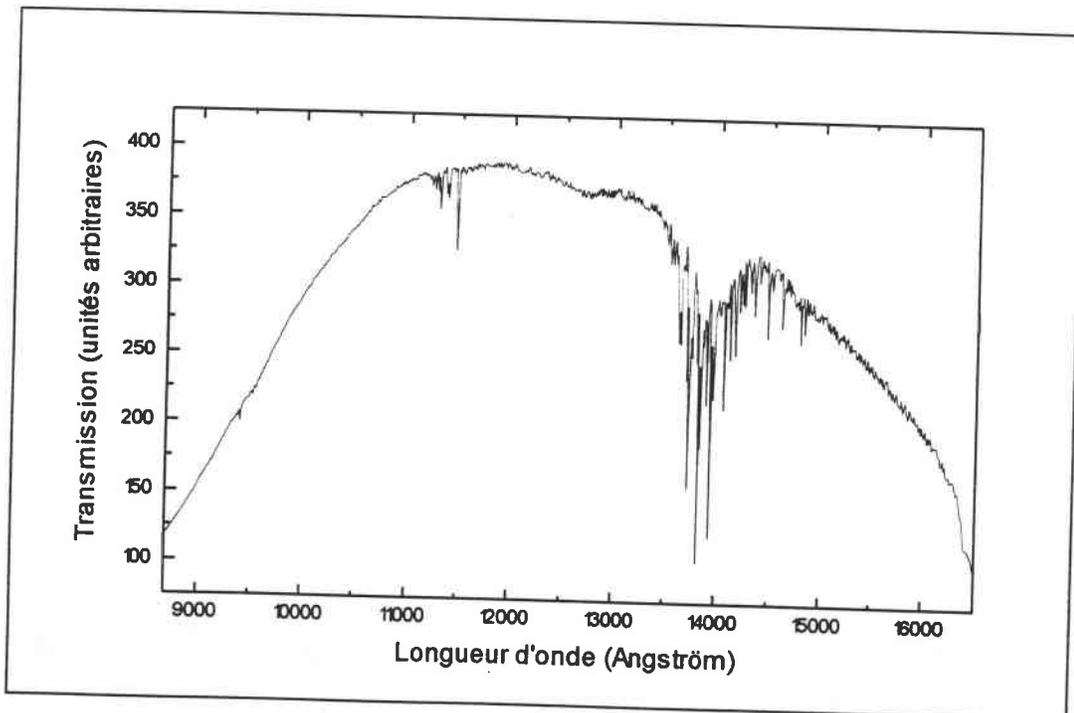


Figure VI-6 : Spectre de réponse du système sans échantillon.

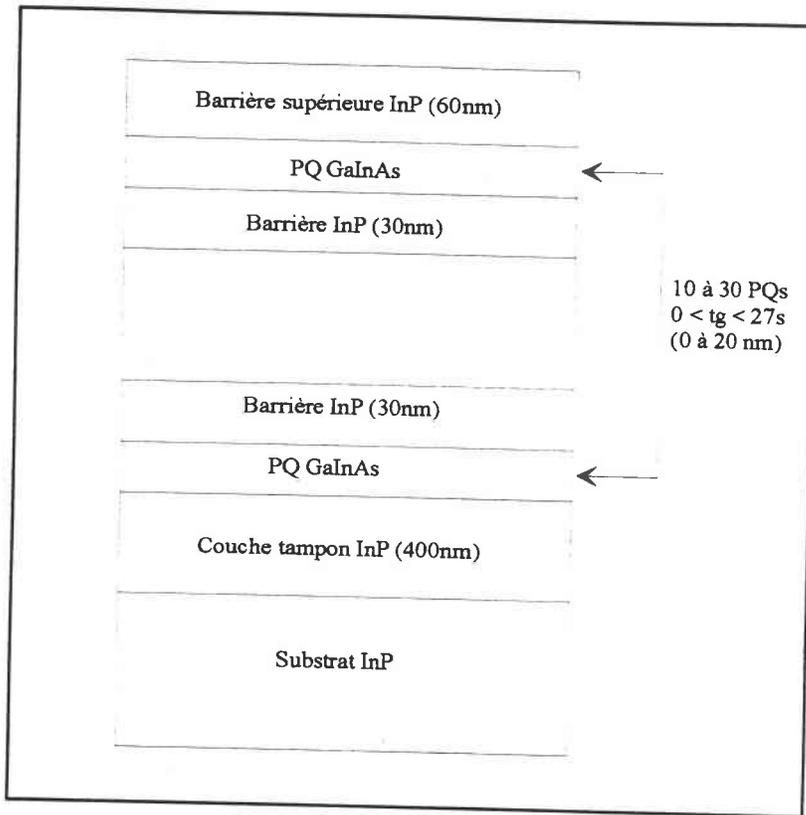


Figure VI-7 : Structure prototype des échantillons à multi-puits quantiques $Ga_{0.468}In_{0.532}As/InP$.

IV-Echantillons :

IV-A-Description des structures et procédé d'élaboration :

Les échantillons que nous avons étudiés sont des multi-puits quantiques $Ga_{0.468}In_{0.532}As/InP$. La composition nominale de l'alliage GaInAs est celle assurant l'accord de maille avec le substrat et les barrières d'InP. Ces échantillons ont été élaborés à l'Institut d'Electronique des Semiconducteurs de l'Université Technique d'Aix la Chapelle (Allemagne) par croissance épitaxiale en phase vapeur à partir de composé organo-métalliques sous basse pression (EPVOM-BP). Largement répandue depuis plusieurs années, cette technique permet de déposer des couches étendues jusqu'à environ 5cm, tout en assurant une bonne homogénéité. Elle constitue donc une méthode attractive pour la réalisation de structures sophistiquées dans la production de composants opto-électroniques ^[1,11].

La structure prototype est représentée sur la figure VI-7.

Chaque échantillon est constitué par :

- un substrat d'InP [100] ;
- une couche tampon d'InP d'épaisseur 400nm ;
- 10 à 30 PQs de GaInAs séparés par des barrières d'InP d'épaisseur 300nm ;
- une barrière supérieure protectrice de 60nm d'InP.

Les conditions de croissance sont ^[2] :

- EPVOM-BP à 20mbar ;
- température de dépôt 650°C ;
- vitesse d'écoulement des gaz 1,3 m/s ;
- vitesse de croissance 2,4 $\mu\text{m/h}$.

Dans le cas des puits les plus étroits, quelques MCs, les défauts de rugosité aux interfaces affectent de façon significative les propriétés optiques des structures ^[12,13]. La formation d'îlots ou de terrasses est alors minimisée par des séquences d'interruption de croissance ^[2-4] (SICs) dont le déroulement est schématisé sur la figure VI-8. A l'interface inférieure InP/GaInAs, la SIC dure 5s :

- 3s pendant lesquelles, après interruption de l'apport d'In (TMI), la pression de phosphine est maintenue dans le but d'optimiser l'étalement du dépôt et de stabiliser sa surface ;
- 1s sous pressions simultanées de phosphine et d'arsine afin de maintenir la stabilité du dépôt lors du changement d'élément anionique ;
- 1s sous pression d'arsine afin d'évacuer la phosphine avant la croissance de GaInAs.

C'est lors de ces 2s sous pression d'arsine sans processus de croissance (absence d'apport cationique), que l'As se substitue au P à caractère plus volatil. Il y a formation, par substitution, d'une couche d'InAs(P). La température de croissance élevée activera ensuite un phénomène d'interdiffusion conduisant à un profil graduel (voir Chap. I et Fig. I-6). Cette situation a été étudiée en détail sur le même type d'échantillons ^[14] par analyse quantitative de résultats de spectrométrie et de microscopie électronique à transmission en haute résolution. A l'interface supérieure GaInAs/InP, la SIC dure 3s et comporte encore trois étapes analogues à celles de la première SIC. Toutefois, les mêmes travaux antérieurs ^[14] n'ont pas révélé de substitution du P à l'As, probablement à cause du caractère plus stable de ce dernier. Il a par contre été mis en évidence une inhomogénéité d'épaisseur de la couche active de GaInAs : ± 2 MCs à l'interface supérieure. Cette irrégularité qui demeure malgré la SIC montre que la croissance de GaInAs n'est pas rigoureusement bidimensionnelle.

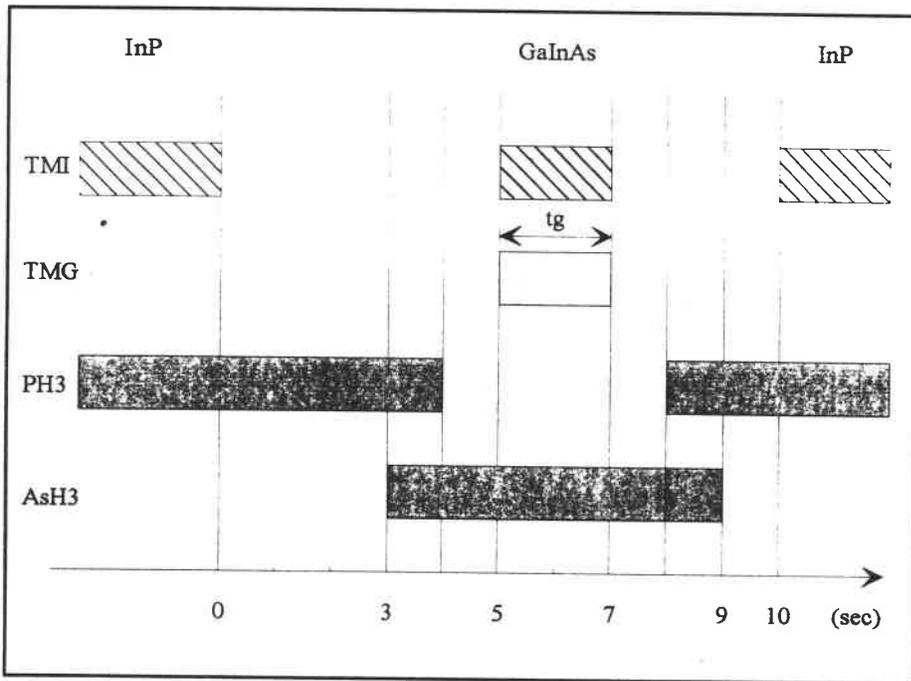


Figure VI-8 : Séquence d'interruption de croissance utilisée pour stabiliser les interfaces des PQs GaInAs/InP.

Apports cationiques : In : triméthyl-indium (TMI) Ga : triméthyl-gallium (TMG)

Apports anioniques : P : phosphine (PH₃) As : arsine (AsH₃)

La croissance de la couche active de GaInAs n'a réellement lieu que pendant le temps t_g .

IV-B-Echantillons étudiés :

Les échantillons étudiés se répartissent en deux catégories :

- ceux à puits de largeur $L_w \geq 5\text{nm}$, soit 17 MCs, pour lesquels les effets d'interfaces peuvent être considérés, au moins a priori, comme n'ayant pas d'incidence sur les propriétés optiques ;
- ceux à puits de largeur ne dépassant pas quelques MCs, pour lesquels les effets d'interfaces doivent être pris en compte dans l'analyse des résultats de spectrométrie magnéto-optique.

La liste complète des échantillons étudiés est rassemblée dans le tableau VI-1 avec, pour chaque structure multi-puits quantique, la largeur et le nombre de puits. Les échantillons à puits étroits sont repérés essentiellement d'après le temps de croissance t_g de la couche active de GaInAs (voir Fig. VI-8). La liste comporte un échantillon de référence à $t_g = 0$. Dans cet échantillon, aucun dépôt de GaInAs n'est réalisé, mais les SICs sont respectées conformément à la figure VI-8 entre les deux dépôts consécutifs d'InP. Dans ce type d'échantillon, il a été mis en évidence ^[14] une couche interfaciale entre les couches d'InP, qui agit comme un PQ avec un effet de confinement nettement marqué.

Les échantillons à puits large, mettant en jeu des nombres de MCs nettement plus grands, sont repérés essentiellement d'après leur largeur nominale de puits approchée en Å. Dans les deux séries, les largeurs sont estimées d'après le temps de croissance, compte tenu de la vitesse de dépôt de $2,4 \mu\text{m/h}$ et de l'épaisseur d'une MC de $2,9344 \text{Å}$.

	Temps de croissance t_g (s)	Largeur de puits L_w		Nombre de puits
		(MCs)	(Å)	
Puits étroits	0	0	0	10
	0,8	2	5,87	10
	1,0	2,5	7,34	10
	1,2	3	8,80	10
	1,4	3,5	10,27	10
	1,6	4	11,74	10
Puits larges		17	50	30
		34	100	15
		51	150	10
		68	200	15

Tableau VI-1 : Séries d'échantillons, multi-puits quantiques de $\text{Ga}_{0,468}\text{In}_{0,532}\text{As}/\text{InP}$, étudiés en spectrométrie magnéto-optique.

IV-C-Characterisations préliminaires :

IV-C-1-Propriétés électriques :

Des mesures de transport, effectuées au laboratoire de fabrication, ont montré un bon degré de pureté des couches cristallines, avec des dopages résiduels homogènes ; inférieurs à 10^{15}cm^{-3} dans les barrières et inférieurs à 10^9cm^{-2} dans les puits.

IV-C-2-Diffractométrie X :

Des mesures de diffraction de rayons X (RX) ont été effectuées pour une réflexion de Bragg [004] avec le rayonnement $K\alpha_1$ du Cu ($\lambda = 1,54051 \text{ \AA}$).

Sur les échantillons à puits minces, le caractère sensiblement graduel du profil de composition a compromis l'obtention de diffractogrammes clairs et quantitativement exploitables.

Par contre, sur les échantillons à puits larges, le caractère sensiblement abrupt des interfaces, par rapport aux largeurs de puits, a permis d'obtenir des diffractogrammes de qualité, témoignant de la qualité structurale des échantillons, de l'homogénéité des couches et de la reproductibilité assurée d'une période à l'autre. Un exemple est montré sur la figure VI-9 pour l'échantillon à puits de largeur nominale 50 \AA .

Au pic de diffraction unique du cristal homogène que constitue le substrat, se superpose une série de pics régulièrement espacés, associée à la diffraction par la superstructure périodique (alternance de puits et de barrières). L'espacement entre ces pics est fonction de la période de la superstructure. L'enveloppe modulant leur intensité est fonction des largeurs respectives des couches (puits et barrières) ainsi que de la composition de l'alliage par l'intermédiaire du paramètre de maille selon la direction de croissance (Chap.I).

Une analyse quantitative de ces diffractogrammes a été faite par simulation à partir de la théorie cinématique ^[15-18]. L'ajustage de la largeur des puits (nombre de MCs) et de la composition de l'alliage en vue du meilleur accord entre résultats de mesure et simulation (Fig. VI-9), donne une indication sur la valeur réelle de ces paramètres structuraux. Les résultats obtenus dans le cas des multi-puits à largeur nominale 50 \AA , 100 \AA et 200 \AA (structure pour lesquelles un bon accord a été obtenu) sont rassemblés dans le tableau VI-2. Certaines valeurs ajustées sont sensiblement différentes des valeurs nominales, en particulier la composition de l'alliage. Il faut toutefois noter que les simulations ont été faites en supposant la présence, par période, de seulement une couche homogène puits et une couche homogène barrière, à l'exclusion de toute couche interfaciale. Nous verrons néanmoins au Chap.VII que les résultats de mesures magnéto-optiques peuvent être interprétés de façon cohérente en introduisant des paramètres structuraux assez proches de ceux utilisés pour simuler les diffractogrammes X.

Les formulations utilisées dans cette simulation sont résumées dans l'annexe III.

Largeur de puits nominale (\AA)	Largeur de puits ajustée (\AA)	Composition x ajustée
50	59	0,400
100	97	0,438
200	203	0,430

Tableau VI-2 : Largeurs de PQs $Ga_xIn_{1-x}As/InP$ et compositions x de l'alliage, ajustées pour simulation de diffractogrammes X, dans le cas de trois échantillons repérés par leur largeur nominale de puits. La composition nominale de l'alliage est celle assurant l'accord de maille sur InP : $x = 0,468$.

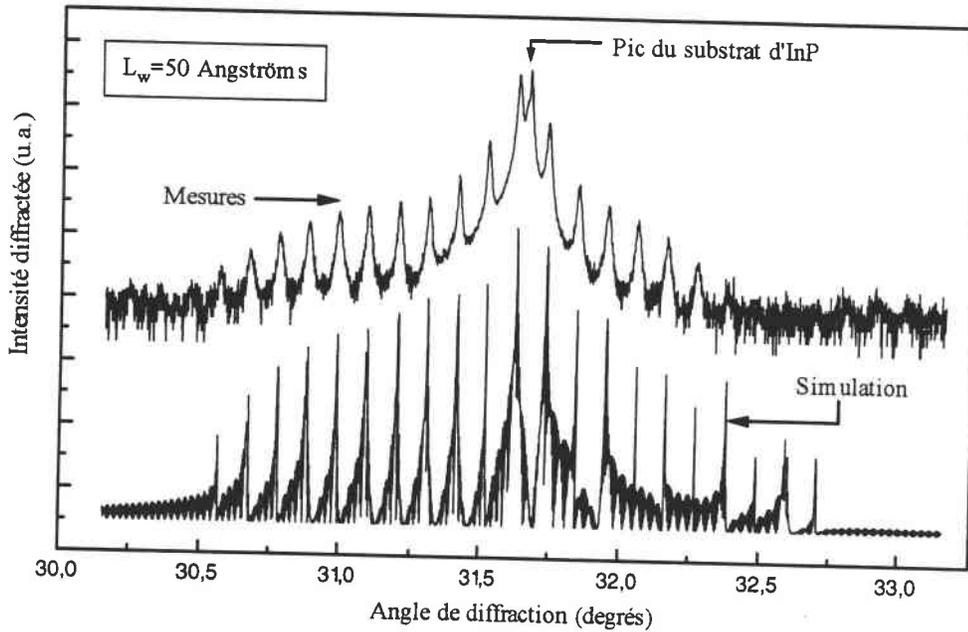


Figure VI-9 : Diffractogramme de RX obtenu pour une réflexion de Bragg [004] sur un multi-puits quantique GaInAs/InP de largeur nominale de puits 50 Å. La simulation est obtenue par la théorie cinématique avec les paramètres structuraux rassemblés dans le tableau VI-2.

IV-C-3-Qualité optique :

Pour vérifier la bonne qualité optique des échantillons, nous avons étudié conjointement leur spectre d'absorption et de photoluminescence à 80K sans champ magnétique.

La figure VI-10 montre un exemple typique de cette étude comparative d'absorption et de PL. Aux hautes énergies, on note l'absorption fondamentale du substrat d'InP. Aux basses énergies, on note les phénomènes d'absorption impliquant les niveaux de confinement successifs. Les transitions impliquant les trous lourds (E_i-HH_i) présentent un caractère nettement excitonique révélé par un pic à leur seuil. Ce caractère excitonique nettement marqué témoigne de la qualité optique des structures étudiées. Le caractère excitonique des transitions impliquant les trous légers (E_i-LH_i) n'apparaît pas directement sur le spectre. Il est donc beaucoup moins marqué que pour les transitions E_i-HH_i. Ceci provient (i) de la délocalisation de la paire électron trou associée à une pénétration accrue dans les barrières, du fait de la masse plus faible des trous ; (ii) de l'énergie de dissociation de l'exciton, plus faible dans le cas des trous légers (voir Chap. IV).

Le faible écart énergétique ("Stokes shift") entre le premier seuil d'absorption et le pic de photoluminescence confirme la haute qualité de ces échantillons. En effet, le "Stokes shift" est associé au piégeage des excitons, lors de la thermalisation, par des imperfections de la structure (voir §I et Fig. VI-1). Sa faible valeur témoigne de l'effet minime de ces imperfections.

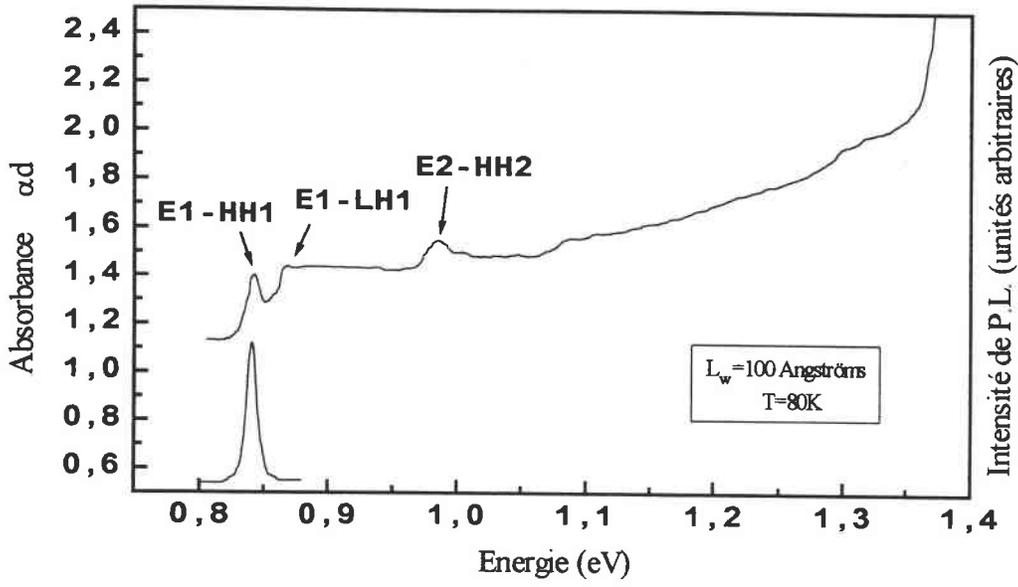


Figure VI-10 : Spectres d'absorption et de photoluminescence de l'échantillon $L_w = 100 \text{ \AA}$.
Le faible Stokes shift témoigne de la très bonne qualité optique des échantillons.

REFERENCES :

- [1] D. Grützmacher, K. Wolter, M. Zachau, H. Jürgensen, H. Kurz and P. Balk, *Inst. Phys. Conf. Ser.* **91**, 613 (1988)
- [2] D. Grützmacher, J. Hegerth, F. Reinhardt, K. Wolter and P. Balk, *J. Electron. Mater.* **19**, 471 (1990)
- [3] D. Grützmacher, *J. Crystal Growth* **107**, 520 (1991)
- [4] J. Hegerth, D. Grützmacher, F. Reinhardt and P. Balk, *J. Crystal Growth* **107**, 537 (1991)
- [5] E.D. Jones, H. Ackermann, J.E. Schirber, T.J. Drummond, L.R. Dawson and I.J. Fritz, *Solid State Commun.* **55**, 545 (1985)
- [6] A. P. Roth, C. Lacelle, D. Morris and M. Longeart, *Superlattices and Microstructures* **8**, 239 (1990)
- [7] J.P. Laurenti, J. Camassel, B. Reynes, D. Grützmacher, K. Wolter and H. Kurtz, *Semicond. Sci. Technol.* **5**, 222 (1990)
- [8] B. Gil, P. Lefebvre, P. Bonnel, H. Mathieu, C. Deparis, J. Massies, G. Neu and Y. Chen, *Phys. Rev.* **B47**, 1954 (1993)
- [9] J.H. Burnett, H.M. Cheong, W. Paul, E.S. Koteles and B. Elman, *Phys. Rev.* **B47**, 1991 (1993)
- [10] D.W. Kim, Y.A. Leem, S.D. Yoo, D.H. Woo, D.H. Lee and J.C. Woo, *Phys. Rev.* **B47**, 2042 (1993)
- [11] M. Razeghi, *The MOCVD Challenge, Vol.1 : A Survey of GaInAsP-InP for Photonic and Electronic Applications*, Adam Hilder ed., Bristol-Philadelphia (1989)
- [12] P.J.A. Thijs, E.A. Montie, H.W. Van Kersteren and G.W. Hoof, *Appl. Phys. Lett.* **53**, 971 (1988)
- [13] M. Engel, R.K. Bauer, D. Bimberg, D. Grützmacher and J. Jürgensen, *J. Crystal Growth* **93**, 359 (1988)
- [14] S. Juillaguet, R. Schwedler, A. Kohl, F.H. Baumann, B. Fraisse, J. Camassel, K. Wolter, K. Leo, B. Gallmann, M. Stollenwerck and J.P. Laurenti, *Proc. 5th 'InP and Related Materials'*, IEEE cat 93CH3276-3, Paris (1993), p301
- [15] A Guinier, *Théorie et technique de la Radiocristallographie*, Dunod, Paris (1964)
- [16] J.P. Eberhart, *Méthodes Physiques d'Etude des Minéraux et des Matériaux Solides*, Doin Editeur (1976)

- [17] D. Schwarzenbach, *Cristallographie*, Presses Polytechniques et Universitaires Romandes (1993)
- [18] M. Quillec, L. Goldstein, G. Leroux, J. Burgeat and J. Primot, *J. Appl. Phys.* **55**, 2904 (1984)

CHAPITRE VII

SPECTROMETRIE D'ABSORPTION SOUS CHAMP MAGNETIQUE RESULTATS ET DISCUSSION

I- Rappel sur les conditions expérimentales :

Les spectres d'absorption présentés, discutés et analysés dans ce chapitre ont été obtenus par mesures spectrométriques en transmission à 6K (voir Chap.VI). Le champ magnétique est appliqué en configuration Faraday, c.a.d. parallèle à la direction du rayonnement, donc perpendiculaire au plan des couches. Les valeurs adoptées sont : 0; 2; 3; 4; 5; 5,5; 6; 6,5; 7; 7,5 et 8 Tesla. Cet échelonnement de valeurs se rapprochant aux plus forts champs est dicté par le comportement des spectres.

II- Echantillons à puits larges :

Quatre échantillons ont été étudiés. Rappelons qu'il s'agit de PQs $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}/\text{InP}$, dans lesquels la composition nominale de l'alliage ($x = 0,468$) assure l'accord de maille avec InP, et dont les largeurs nominales de puits, respectivement 50 Å, 100 Å, 150 Å et 200 Å (Tableau VI-1 du Chap. VI), seront utilisées comme dénomination.

II-A- Présentation des spectres :

Les spectres obtenus sur chacun des quatre échantillons sont représentés respectivement dans les Figs. VII-1 à VII-4. Chaque figure rassemble, pour chaque échantillon, l'ensemble des spectres obtenus pour toutes les valeurs de champ. Les domaines énergétiques respectifs excluent l'absorption fondamentale du substrat et des barrières d'InP (voir pour cela Fig. VI-10 du Chap. VI) et se limitent aux transitions impliquant les états confinés.

II-A-1 Spectres à champ nul :

Les spectres à zéro Tesla montrent la croissance en plateaux du coefficient d'absorption, associée à l'implication des sous-bandes successives au fur et à mesure que l'énergie augmente^[1]. Dans la plupart des cas, chaque nouveau plateau est précédé d'un pic de résonance excitonique plus ou moins prononcé.

Dans le cas de l'échantillon à puits le plus étroit (Fig. VII-1), ces structures spectrales sont peu nombreuses et relativement espacées conformément aux caractéristiques des sous-bandes dans le cas d'un puits étroit. Le pic excitonique de la transition fondamentale est nettement marqué, comme le laisse prévoir l'important recouvrement des fonctions d'onde d'électrons et de trous de premiers niveaux de confinement dans le cas de ce puits. Pour les transitions à énergie supérieure, le caractère excitonique est moins marqué ou même n'apparaît pas à "l'œil nu". Ceci provient essentiellement de l'étalement des fonctions d'ondes des niveaux de confinement supérieurs, avec une probabilité plus importante de pénétration dans les barrières (Fig. VII-5).

Au fur et à mesure que le puits s'élargit, les niveaux de confinement deviennent plus nombreux et se rapprochent, ce qui se répercute sur les spectres de plus en plus riches en structures. Dans le cas de l'échantillon à puits les plus larges (Fig. VII-4), les trois premières transitions sont très rapprochées et leurs trois pics excitoniques respectifs ne laissent qu'à peine entrevoir la montée en plateaux du coefficient d'absorption. Notons que l'intensité de ces pics est faible à cause de la délocalisation relative de l'électron et du trou dans un puits aussi large. Néanmoins, leur résolution, qui ne se limite pas ici à la transition entre premiers niveaux de confinement ($n = m = 1$), est rendue possible car la probabilité de pénétration dans les barrières pour des niveaux n et/ou $m > 1$ demeure faible, ces niveaux restant profonds dans le puits.

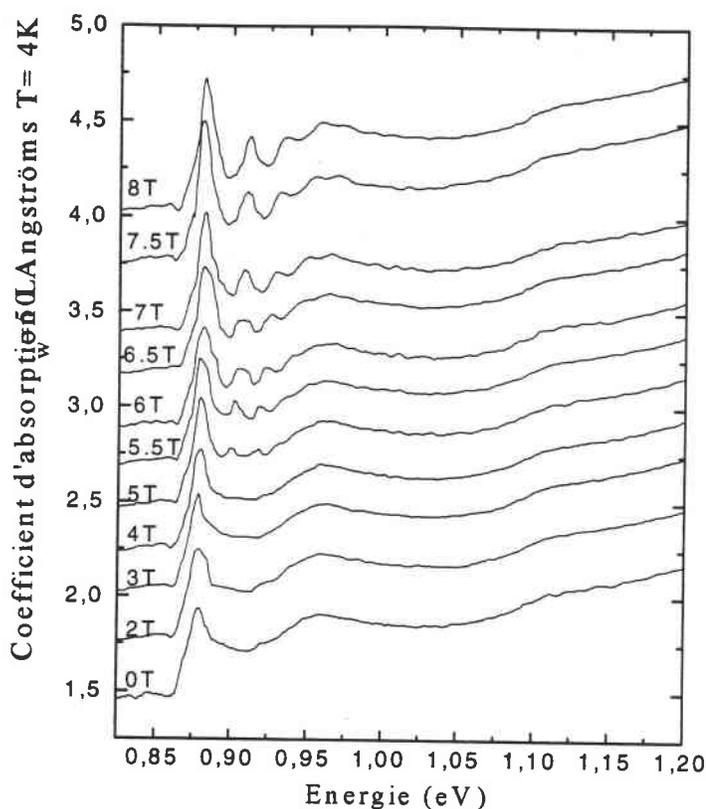


Figure VII-1 : Spectre d'absorption sous champ magnétique variant de 0 à 8 Tesla pour l'échantillon de largeur $L_w = 50 \text{ \AA}$.

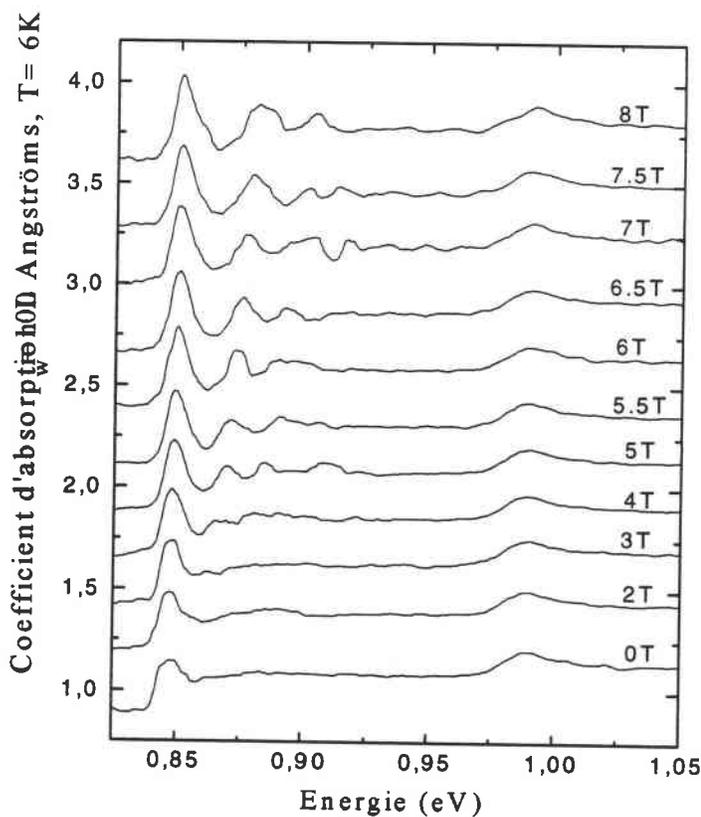


Figure VII-2 : Spectre d'absorption sous champ magnétique variant de 0 à 8 Tesla pour l'échantillon de largeur $L_w = 100 \text{ \AA}$.

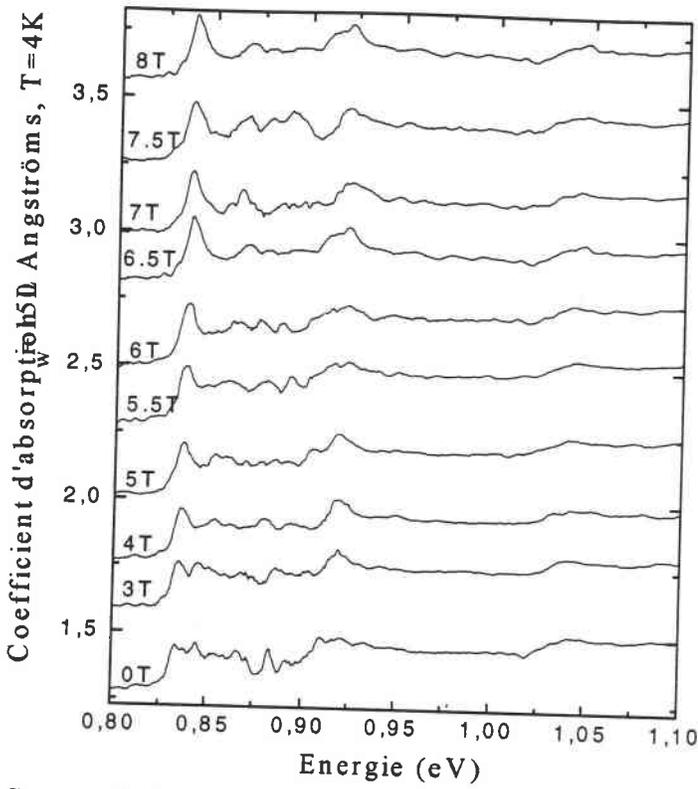


Figure VII-3 : Spectre d'absorption sous champ magnétique variant de 0 à 8 Tesla pour l'échantillon de largeur $L_w = 150 \text{ \AA}$.

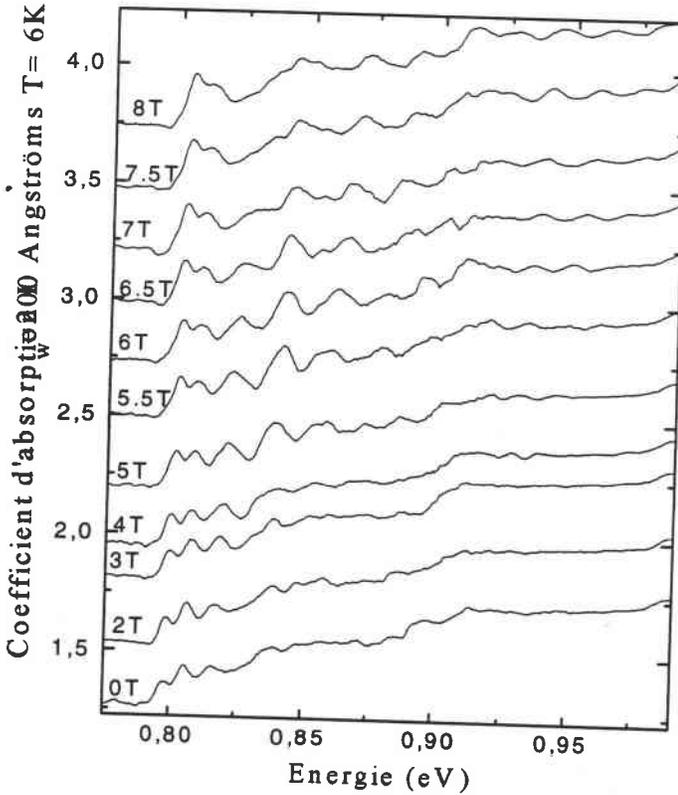


Figure VII-4 : Spectre d'absorption sous champ magnétique variant de 0 à 8 Tesla pour l'échantillon de largeur $L_w = 200 \text{ \AA}$.

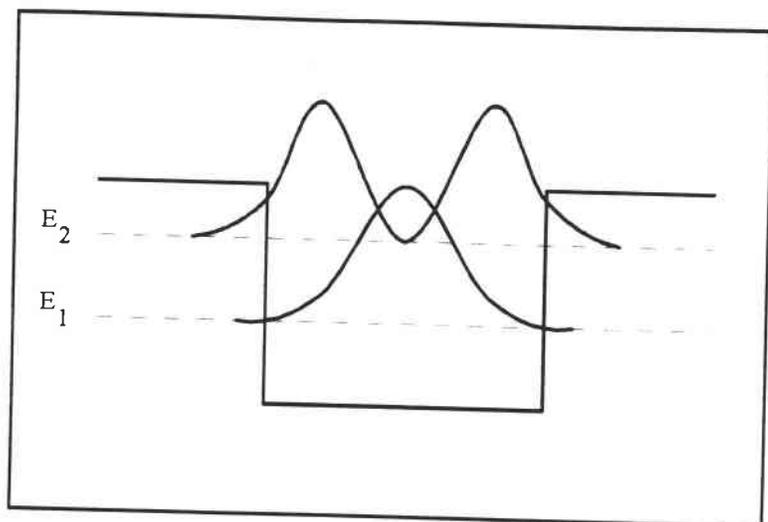


Figure VII-5 : Fonctions d'onde de deux niveaux d'énergie E_1 et E_2 ; la probabilité de pénétration dans les barrières augmente avec l'étalement de la fonction d'onde dans les niveaux de confinement supérieurs.

II-A-2- Spectres sous champ magnétique :

Comme il a été vu au Chap. V, l'application du champ magnétique a pour effet :

- de faire glisser les transitions excitoniques vers les hautes énergies (glissement diamagnétique) ;
- d'augmenter l'écart énergétique entre les états excitoniques 1s, 2s, 3s ... associés à une même paire de sous-bandes ;
- d'augmenter l'intensité des pics excitoniques (forces d'oscillateurs) par un effet de confinement accru.

Ces trois tendances s'observent nettement sur les Fig. VII-1 à VII-4 et sont conformes à des résultats publiés antérieurement [2-5].

Dans le cas de l'échantillon à puits les plus étroits (Fig. VII-1), la transition impliquant les premiers niveaux de confinement "éclate", ce qui permet de résoudre, a priori, jusqu'à au moins 4 états excitoniques : 1s, 2s, 3s et 4s, dont le très faible écart énergétique ne permettrait pas la résolution à champ nul. Ce même éclatement ne semble pas se manifester a priori sur les transitions impliquant les niveaux de confinement supérieurs. Nous verrons en fait, par l'analyse quantitative des spectres (§ II-B), que (i) certaines de ces transitions peuvent contribuer à la forme des spectres d'une façon qui n'est pas décelable à l'œil nu, et que (ii) d'autres transitions ne présentent pas l'éclatement attendu à cause de fortes masses effectives réduites dans le plan du puits.

Les mêmes observations s'appliquent aux cas des puits plus larges (Figs. VII-2 à VII-4). Toutefois, plusieurs transitions peuvent présenter l'éclatement et leur faible distance énergétique peuvent donner lieu à une forme très complexe des spectres due à une superposition des éclatements respectifs. Ceci est particulièrement vrai dans le cas de l'échantillon à puits les plus larges où les spectres à plus forte valeurs de champ comportent un grand nombre d'"oscillations". Leur analyse quantitative permettra d'interpréter leurs formes dans le détail.

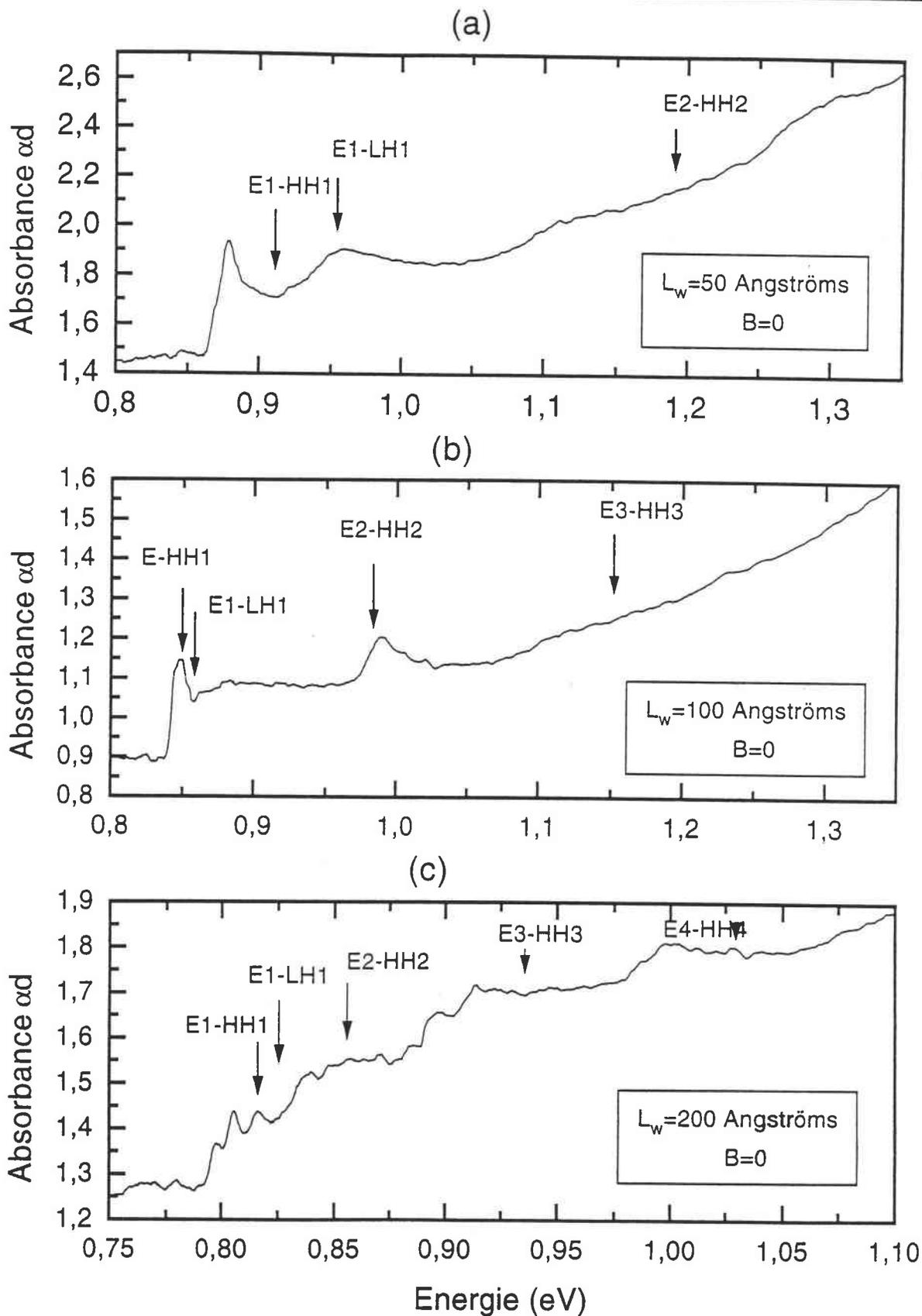


Figure VII-6 : Spectres à 0T des échantillons de largeur (a) 50 Å, (b) 100 Å et (c) 200 Å. Les flèches indiquent la position énergétique des énergies de transitions 1s calculées pour les valeurs nominales de x et L_w .

II-B- Analyse quantitative des spectres :

II-B-1- Procédure d'analyse :

L'analyse quantitative a été faite par un calcul systématique, en fonction de la valeur du champ, des énergies de transitions excitoniques 1s à 4s impliquant les principales paires de sous-bandes autorisées par les règles de sélection : E1-HH1, E1-HH3, E1-LH1, E2-HH2, E2-LH2 et E3-HH3 (E, HH et LH correspondant respectivement aux électrons de conduction, aux trous lourds et aux trous légers ; les symboles sont suivis des numéros de sous-bandes). Nous avons utilisé le modèle développé aux Chaps. III à V. Rappelons que le modèle repose essentiellement sur l'approximation de la fonction enveloppe et que les interactions entre bandes et la non-parabolicité qui en résulte sont pris en compte grâce à la théorie **k.p.** Rappelons également que les excitons sous champ magnétique sont traités sans approximation liée aux ordres de grandeurs de champ, ce qui assure une continuité des résultats, des plus faibles valeurs de champ aux plus fortes. Les paramètres physiques des matériaux adoptés sont détaillés en annexe I.

Dans cette série d'échantillons à puits relativement larges, nous avons négligé les effets d'interfaces et avons donc supposés les puits strictement rectangulaires. Par contre, sur chaque échantillon, nous avons traité la largeur des puits L_w et la composition de l'alliage x comme des paramètres ajustables : partant de leur valeur nominale, nous les avons modifiées en recherchant le couple de valeurs permettant l'identification la plus cohérente de l'ensemble des structures spectrales. En supposant la croissance des couches bidimensionnelles MC par MC, nous n'avons attribué à L_w que des valeurs correspondant à des nombres entiers de MCs.

Notons dès à présent que l'adoption des valeurs nominales de x et L_w conduisait systématiquement pour chaque échantillon à des énergies de transitions nettement supérieures (de 20 à 50 meV) à celles suggérées par les spectres. Ceci est illustré sur la Fig. VII-6 qui rassemble les spectres à 0T des échantillons à 50 Å, 100 Å et 200 Å. Les flèches indiquent la position énergétique des énergies de transitions 1s calculées pour les valeurs nominales de x et L_w . Le désaccord suggérait donc des valeurs de L_w et/ou de x inférieures à leur valeur nominale. Nous allons voir toutefois que la description cohérente de l'ensemble des structures spectrales exige essentiellement une réduction de x , c.a.d la considération d'un alliage GaInAs plus riche en indium que ce que prévoit la composition nominale. Ceci est d'autant plus vrai pour les puits les plus larges dans lesquels une modification de L_w dans les limites raisonnables n'entraîne pas de glissement significatif des énergies de transition. Notons que cette tendance est d'ailleurs conforme aux résultats de diffractométrie RX exposés au Chap. VI.

Notons enfin que nous n'avons pu procéder à une analyse quantitative que sur les échantillons à 50 Å, 100 Å et 200 Å. En effet, l'échantillon à 150 Å (Fig. VII-3) offre des spectres à structures très complexes dont l'évolution avec le champ magnétique ne se manifeste pas de façon claire. Cette situation qui rend les spectres inexploitable est probablement due à une défaillance du caractère périodique de la structure multipuits, qui est à corrélérer avec le diffractogramme RX qui n'a pu, lui non plus, être exploité (voir Chap. VI). Les spectres de la Fig. VII-3 peuvent en fait résulter de la superposition de transitions impliquant des puits à paramètres structuraux différents. En conséquence, nous avons limité notre travail d'analyse aux échantillons à 50 Å, 100 Å et 200 Å dont la clarté des spectres permettait l'exploitation.

II-B-2- Echantillon à 50 Å :

L'interprétation la plus cohérente de l'ensemble des structures spectrales a été obtenue pour $L_w = 59 \text{ \AA}$ et $x = 0,44$. La structure de bande de valence obtenue par la théorie $k.p$ avec ces paramètres structuraux est représentée sur la Fig. VII-7. Les types de trous (HH ou LH) en $k_{//} = 0$, et les numéros correspondant, indiqués pour chaque sous-bande, ont été identifiés d'après le nombre de maxima du profil de densité de probabilité de présence selon l'axe de quantification. Notons dès à présent la situation proche de la dégénérescence accidentelle pour les sous-bandes HH2 et LH1 en $k_{//} = 0$. La forte répulsion qui en résulte donne des inverses de masses effectives (i) fortement négatif pour les trous HH2 et (ii) fortement positif pour les trous LH1.

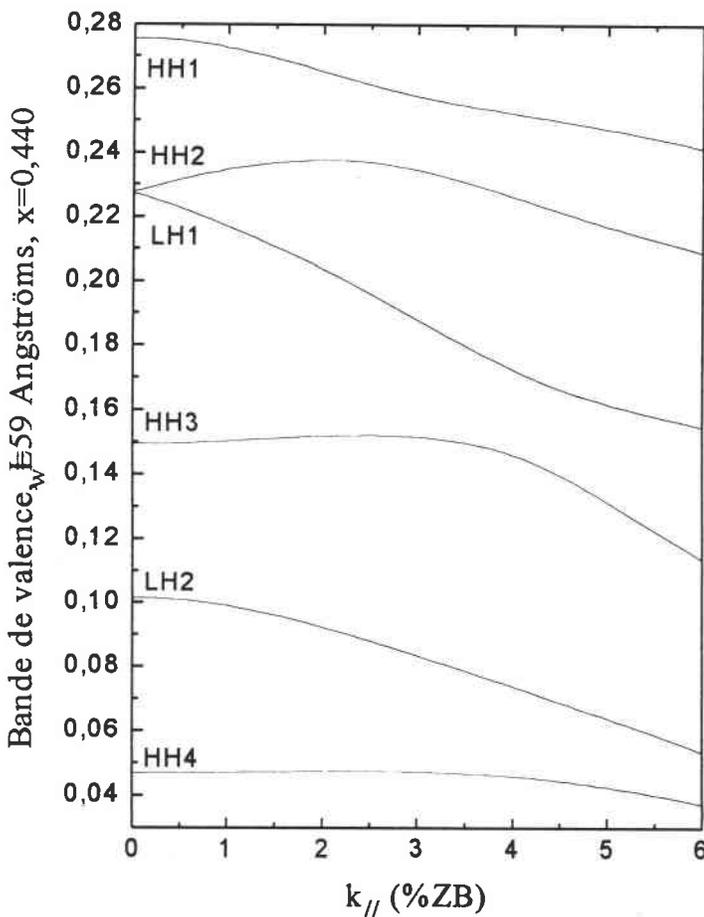


Figure VII-7 : Structure de bande de valence obtenue par la théorie $k.p$ pour une largeur $L_w = 59 \text{ \AA}$ et une concentration $x = 0,44$.

Les Fig. VII-8 et VII-9 représentent, avec deux échelles d'énergies différentes, l'évolution des énergies de transition magnéto-excitoniques en fonction de la valeur du champ. La mise en abscisse de l'échelle des énergies permet de superposer l'ensemble des spectres d'absorption. L'éclatement des transitions E1-HH1 obtenu par le calcul est en grande partie conforme à l'évolution des spectres en fonction du champ. Toutefois, un certain nombre d'épaulements reproductibles sur le coté hautes énergies de certains pics, ne peuvent être interprétés par ce calcul. Nous reviendrons ultérieurement sur ce point.

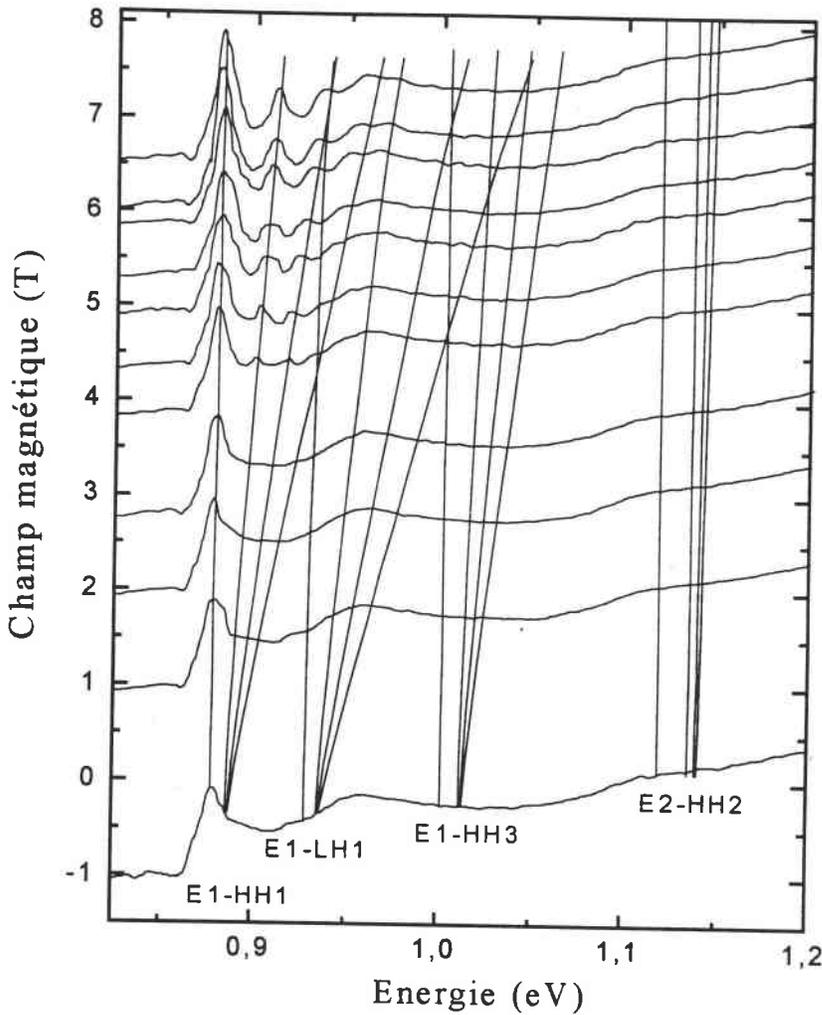


Figure VII-8 : Evolution des énergies de transition magnéto-excitoniques en fonction de la valeur du champ pour l'échantillon de largeur $L_w = 50 \text{ \AA}$.

L'éclatement des transitions E1-LH1 n'apparaît pas sur les spectres à cause des faibles forces d'oscillateur mises en jeu dans les transitions impliquant les trous légers ^[3,4]. Ce groupe de transitions se manifeste par une montée en plateau précédée d'un maximum très large autour de 0,95 eV, et cette tendance se perpétue jusqu'aux plus fortes valeurs de champ, chevauchant alors les effets de transitions E1-HH1. Notons que ce large maximum se situe à une énergie nettement supérieure ($\sim 30 \text{ meV}$) à celle calculée pour la transition 1s. Néanmoins, le manque de précision spectrale pour ce groupe de transitions ne permet pas de chiffrer convenablement ce désaccord et de le cerner suffisamment pour en déterminer l'origine. Notons enfin l'importance de l'éclatement théorique pour ce groupe de transitions. Il est à corréler avec la faible valeur de masse effective réduite dans le plan, associée elle-même (Eq. IV-6-f) à la faible masse (positive) des trous LH1 (Fig. VII-7).

Les transitions E1-HH3 n'ont pas été observées sur les spectres de cet échantillon. Il faut rappeler toutefois que ce type de transitions, permises mais à faibles forces d'oscillateur, ne sont pas systématiquement observées ^[6].

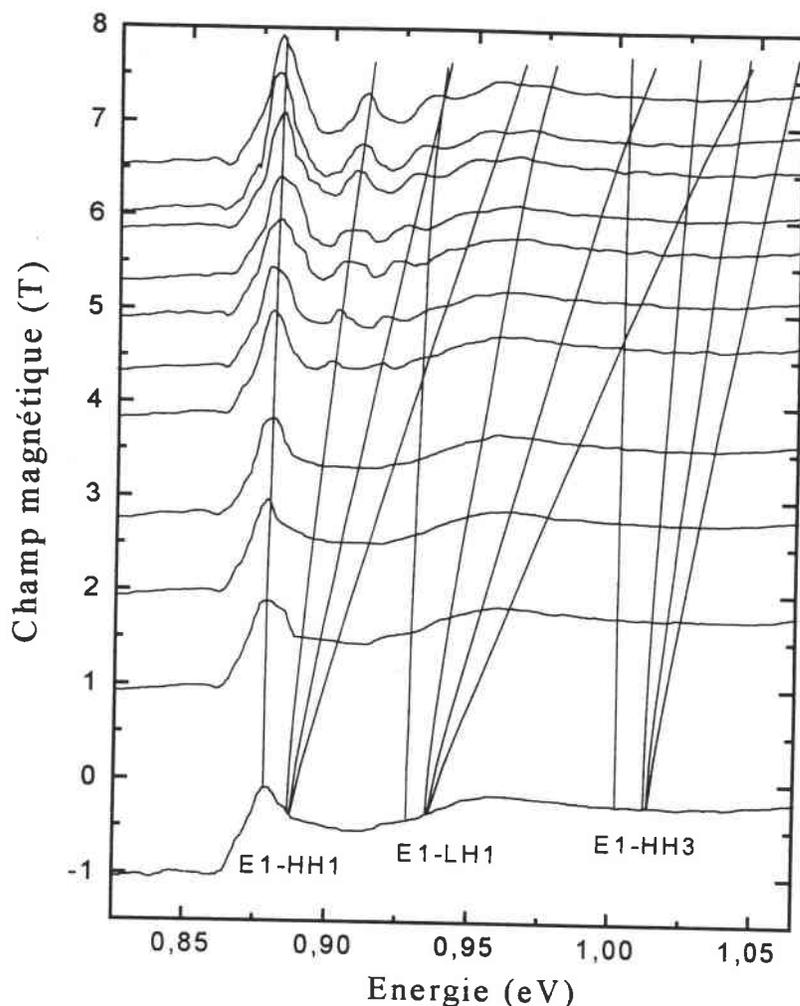


Figure VII-9 : Evolution des énergies de transition magnéto-excitoniques en fonction de la valeur du champ pour l'échantillon de largeur $L_w = 50 \text{ \AA}$. L'interprétation la plus cohérente des spectres est obtenue pour $L_w = 59 \text{ \AA}$ et $x = 0,44$.

Enfin, le groupe de transitions E2-HH2 (Fig. VII-8) se manifeste clairement par une montée en plateau quelle que soit la valeur de champ. L'éclatement quasi inexistant dans les résultats des calculs explique l'absence de toute manifestation magnéto-excitonique. Cette situation est à corréliser avec la forte valeur de masse effective réduite dans le plan, associée elle-même à l'inverse de masse fortement négatif des trous HH2 (Fig. VII-7).

Pour tenter d'expliquer les épaulements se manifestant sur le côté hautes énergies de certains pics 1s et 2s du groupe E1-HH1, nous avons procédé au calcul des énergies de transition avec une largeur réduite d'une MC, soit $L_w = 56 \text{ \AA}$. Le résultat pour les groupes E1-HH1 et E1-LH1 est représenté sur la Fig. VII-10. Ce calcul permet d'interpréter l'ensemble des épaulements observés et même certains élargissements de la transition 3s. Les énergies de transition du groupe E1-LH1 calculées dans cette configuration structurale n'apportent pas de contradiction au comportement général des spectres. Elles semblent même indiquer une participation à leur forme aux fortes valeurs de champ.

Cette analyse quantitative indique donc une majorité de puits de 59 \AA mais également la présence d'au moins un puits de 56 \AA , avec une même composition d'alliage $x = 0,44$.

Pour estimer la proportion de puits altérant la périodicité de la structure, nous avons procédé à une déconvolution des pics manifestant les épaulements, à l'aide de profils Lorentziens centrés sur les énergies calculées. Un exemple est montré en encart sur la Fig. VII-10. Il correspond au pic de la transition 1s du groupe E1-HH1 à 7T. La bande spectrale est convenablement décrite par (i) la contribution dominante des puits de 59 Å, (ii) une contribution significative de puits de 56 Å, mais également une contribution de puits à 53 Å et de puits à 62 Å. Les amplitudes respectives des composantes Lorentziennes permettent d'estimer, parmi les 30 puits de la structure, les nombres de puits ayant les largeurs respectives envisagées : 16 puits de 59 Å, 7 de 56 Å, 4 de 53 Å et 3 de 62 Å. Le nombre de périodes élevé dans cette structure, par rapport à celui des autres structures étudiées (voir Tableau VI-1 du Chap. VI), peut expliquer cette disparité.

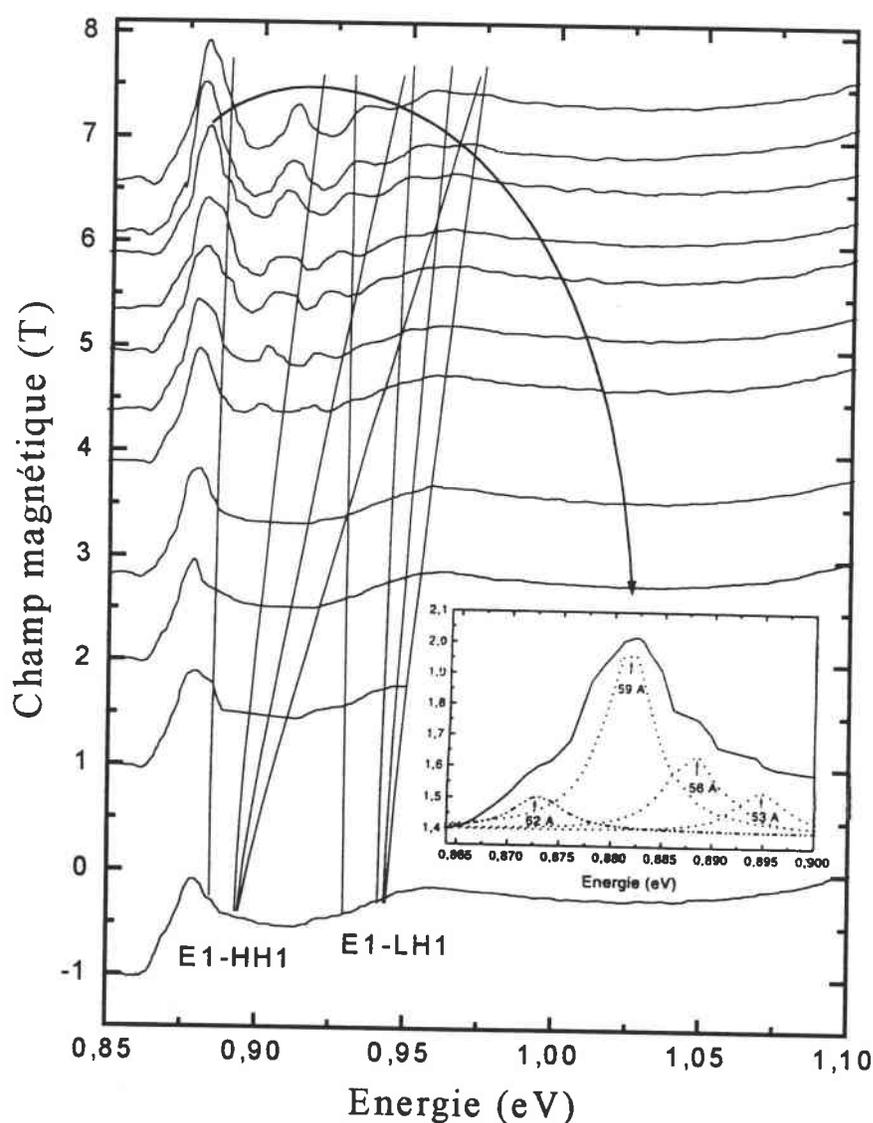


Figure VII-10 : Evolution des énergies de transition magnéto-excitoniques E1-HH1 et E1-LH1 pour l'échantillon de largeur nominale $L_w = 50 \text{ \AA}$. En encart est représentée la déconvolution du pic 1s à 7T. Les contributions d'autres largeurs de puits (53 Å, 56 Å, 62 Å) sont à l'origine d'épaulements reproductibles sur les spectres.

II-B-3- Echantillon à 100 Å :

L'interprétation la plus cohérente de l'ensemble des spectres a été obtenue pour $L_w = 97 \text{ \AA}$ et $x = 0,46$, valeurs des paramètres structuraux assez proches de leur valeur nominale. La structure de bande de valence calculée dans ces conditions est représentée sur la Fig. VII-11. Ici encore, les niveaux HH2 et LH1 sont assez proches en $k_{//} = 0$ avec, pour les éclatements respectifs des groupes de transitions impliquées, des conséquences analogues à celles notées pour l'échantillon à 50 Å.

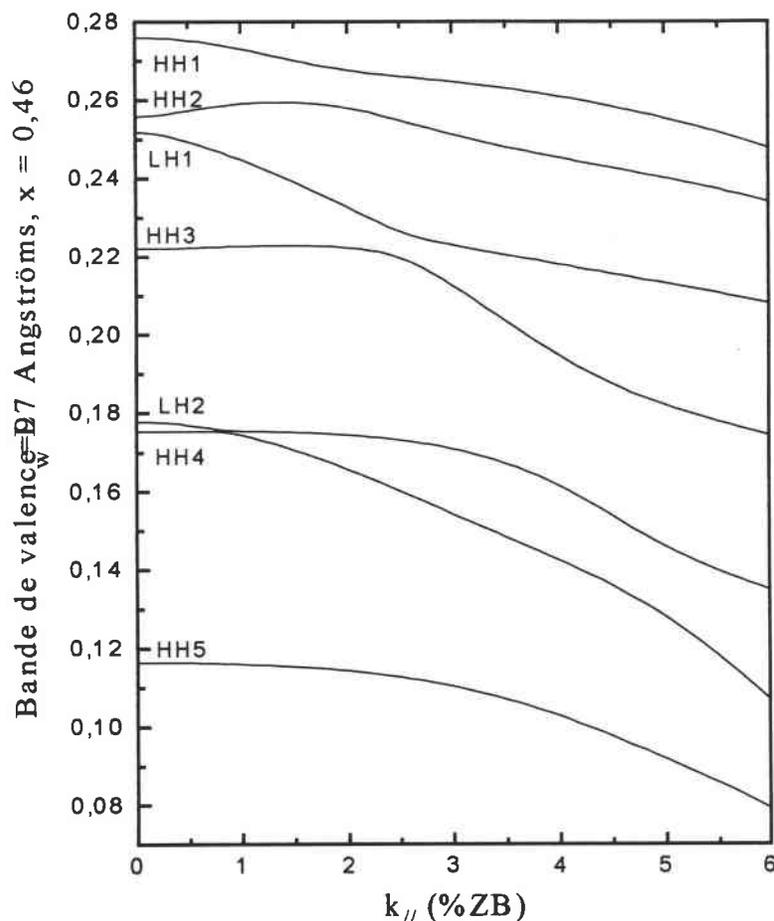


Figure VII-11 : Structure de bande de valence obtenue par la théorie $k.p$ pour une largeur $L_w = 97 \text{ \AA}$ et une concentration $x = 0,46$.

Les Figs. VII-12 et VII-13 représentent l'évolution des énergies de transition magnéto-optiques en fonction de la valeur du champ avec, ici encore, superposition de l'ensemble des spectres d'absorption. Dans le cas de cet échantillon, notons tout d'abord le bon accord, à champ nul, entre les résultats de calcul et les structures spectrales concernant les transitions excitoniques 1s des groupes respectifs E1-HH1 et E2-HH2 (Fig. VII-12). Notons également la différence importante entre les degrés d'éclatement pour les groupes E1-LH1 et E2-HH2, consécutive, comme pour l'échantillon à 50 Å, à la singularité notée sur la structure de bandes.

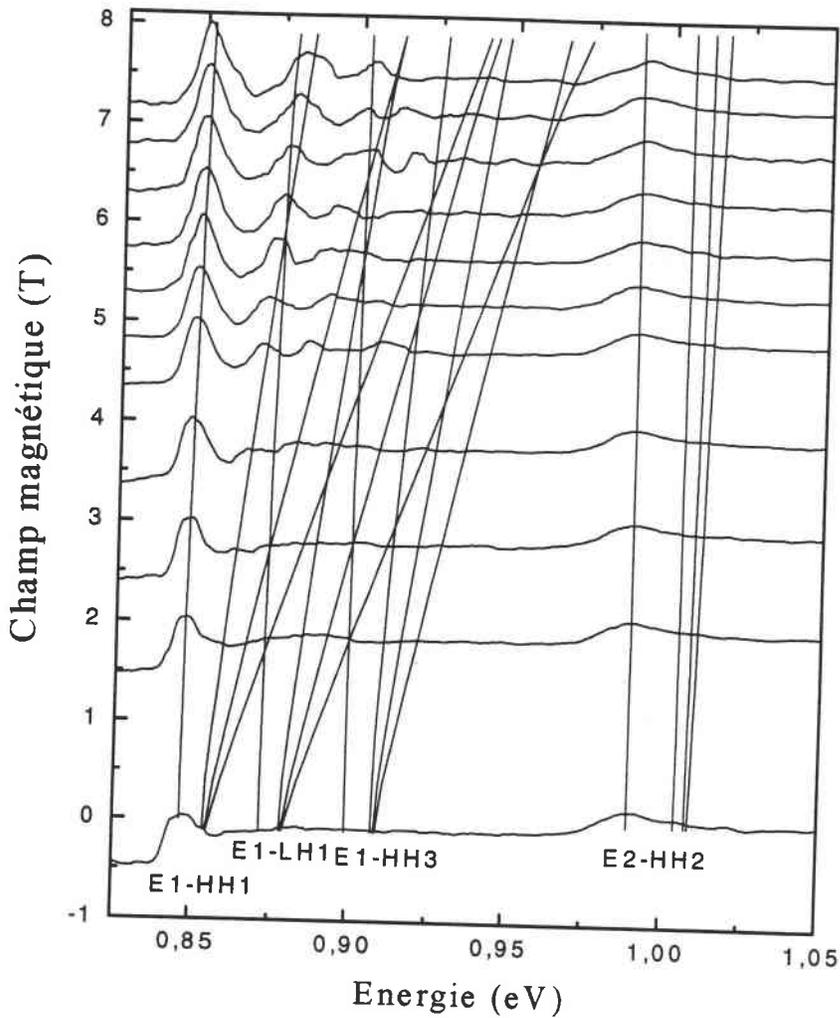


Figure VII-12 : Evolution des énergies de transition magnéto-excitoniques en fonction de la valeur du champ pour l'échantillon de largeur nominale $L_w = 100 \text{ \AA}$. L'interprétation la plus cohérente des spectres est obtenue pour $L_w = 97 \text{ \AA}$ et $x = 0,46$.

Par rapport à l'échantillon précédent, le chevauchement des groupes de transitions E1-HH1, E1-LH1 et E1-HH3 est beaucoup plus important. Il en résulte une interprétation plus complexe de l'évolution des spectres avec la valeur du champ. Si jusqu'à 5T l'éclatement décelable ne semble concerner que le groupe E1-HH1, les trois groupes sont manifestement concernés pour les fortes valeurs de champ. Ainsi, par exemple, la plupart des nombreuses structures spectrales observées au delà de 6T peuvent s'identifier à l'une des douze transitions dont les énergies ont été calculées. Pour certaines valeurs de champ, certaines énergies de transition "se croisent", ce qui conduit à des maxima d'absorption à la fois intenses et élargis ou présentant un épaulement. C'est le cas par exemple des transitions 2s du E1-HH1 et 1s du E1-LH1. A 5 et 5,5T, elles donnent des maxima avec épaulement. A 6T où elles se coupent, elles ne donnent qu'un seul maximum à peu près symétrique. Au delà, elles redonnent un maximum avec épaulement qui s'élargit jusqu'à 8T au fur et à mesure que leurs énergies s'éloignent. Un exemple de déconvolution de la bande 0,87-0,89 eV à 8T est représenté en encart sur la Fig. VII-13. La bande est correctement décrite par la somme de deux composantes Lorentziennes centrées autour des énergies calculées pour les transitions

respectives 1s du groupe E1-LH1 et 2s du groupe E1-HH1. Le rapport des amplitudes indique pour la première une force d'oscillateur 1,5 fois supérieure à celle de la deuxième. Finalement, les trois maxima qui dominent le spectre à 8T, et qui pouvaient être attribués, a priori, aux transitions 1s, 2s et 3s du même groupe E1-HH1, semblent en réalité provenir en grande partie des transitions 1s des groupes respectifs E1-HH1, E1-LH1 et E1-HH3. Cela illustre clairement l'effet de confinement accru par le champ magnétique : il permet l'émergence des résonances 1s des transitions E1-LH1 et E1-HH3 qui n'étaient pas résolues à champ nul.

On note enfin quelques maxima reproductibles qui ne peuvent être identifiés par nos calculs avec les paramètres structuraux adoptés. Nous pensons qu'ils peuvent provenir de l'absorption de certains puits dont les largeurs seraient suffisamment différentes pour provoquer des glissements significatifs des niveaux de trous autres que le niveau HH1. Toutefois, contrairement au cas de l'échantillon à 50 Å, aucune tentative de changement de largeur de puits n'a permis d'interpréter globalement ces structures non identifiées.

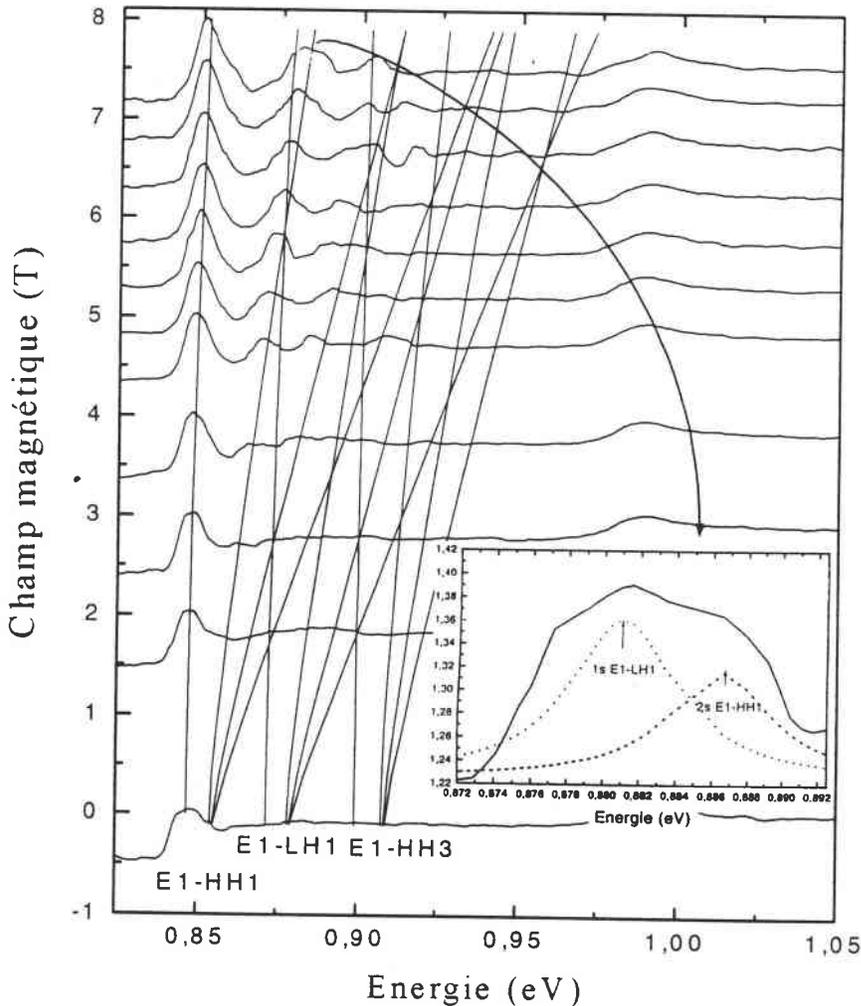


Figure VII-13 : Evolution des énergies de transition magnéto-excitoniques E1-HH1, E1-LH1 et E1-HH3 pour l'échantillon de largeur nominale $L_w = 100$ Å. En encart est représentée la déconvolution du deuxième pic à 8T. Cette déconvolution permet de mettre en évidence la participation du niveau 1s du groupe E1-LH1 et du niveau 2s du groupe E1-HH1 à ce pic.

II-B-4- Echantillon à 200 Å :

L'interprétation la plus cohérente de l'ensemble des spectres a été obtenue pour $L_w = 200 \text{ \AA}$ (valeur nominale) mais pour $x = 0,44$, ce qui, en accord avec les résultats de diffractométrie RX (Chap. VI), suggère, ici encore, un alliage riche en indium. La structure de bande de valence est représentée sur la Fig. VII-14. La largeur de puits a pour conséquences (i) un grand nombre de sous-bandes rapprochées avec les effets bien connus d'anticroisement ^(6,7) et (ii) le passage de la sous-bande HH3 au dessus de la sous-bande LH1, de sorte que l'on doit s'attendre à trouver, si elle est décelable, la transition E1-HH3 entre les transitions E1-HH1 et E1-LH1.

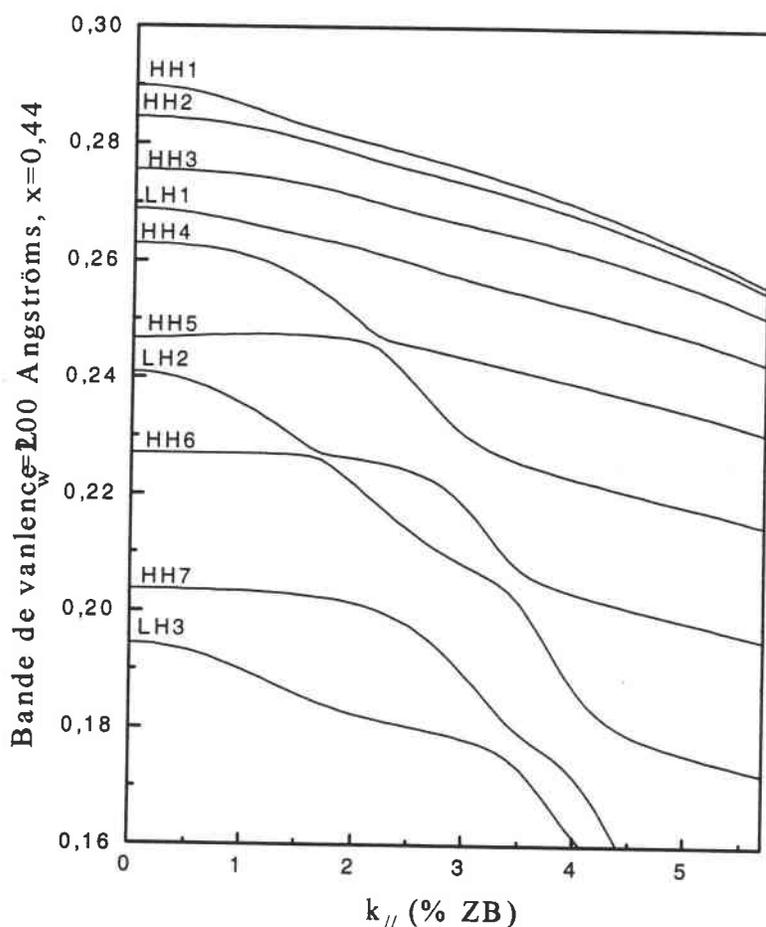


Figure VII-14 : Structure de bande de valence obtenue par la théorie $k.p$ pour une largeur $L_w = 200 \text{ \AA}$ et une concentration $x = 0,44$.

Les Figs. VII-15 et VII-16 représentent l'évolution des énergies de transitions magnéto-optiques en fonction de la valeur du champ avec, là encore, superposition de l'ensemble des spectres d'absorption. La Fig. VII-15 montre les multiples transitions permises pouvant contribuer aux formes très complexes des spectres.

La Fig. VII-16 dilate l'échelle dans la région spectrale concernée par les transitions E1-HH1, E1-HH3, E1-LH1 et E2-HH2. A 0T, les trois premiers pics aux plus basses énergies s'identifient clairement comme étant les transitions 1s des groupes respectifs E1-HH1, E1-HH3 et E1-LH1. Le groupe de transitions E2-HH2 se manifeste nettement entre 0,83 et 0,85 eV par une montée en plateau précédée du maximum associé à la résonance 1s.

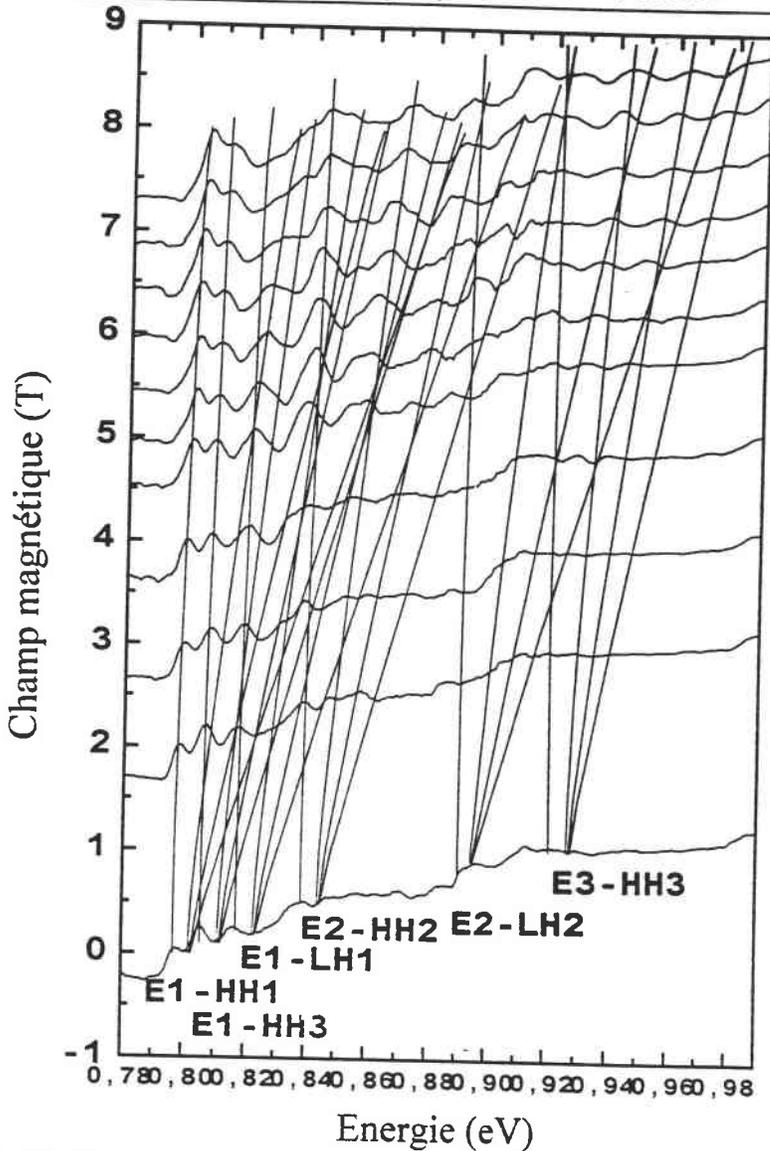


Figure VII-15 : Evolution des énergies de transition magnéto-excitoniques en fonction de la valeur du champ pour l'échantillon de largeur nominale $L_w = 200 \text{ \AA}$. L'interprétation la plus cohérente des spectres est obtenue pour $L_w = 200 \text{ \AA}$ et $x = 0,44$.

Lorsque le champ augmente, les deux principaux effets déjà observés sur les deux autres échantillons se manifestent ici : (i) intensification ou émergence des effets de résonance par accroissement des forces d'oscillateur et (ii) éclatement de chaque groupe de transitions. Les résonances 1s respectives des groupes E1-HH1 et E1-HH3 se détachent nettement. Le pic de la résonance 1s du groupe E1-LH1 semble se décaler exagérément vers les hautes énergies aux fortes valeurs de champ. En réalité, à partir de 4T, ce pic, élargi, résulte de la contribution des résonances 1s du E1-LH1, 2s du E1-HH1 et 2s du E1-HH3. Un exemple de déconvolution de la bande 0,812-0,826 eV à 4T est représenté en encart sur la Fig. VII-16. La bande est correctement décrite par la somme de trois composantes lorentziennes centrées autour des énergies calculées pour les transitions respectives 1s de E1-LH1, 2s de E1-HH1 et 2s de E1-HH3. La première transition domine avec une amplitude deux fois supérieure à celle des deux autres et des forces d'oscillateur dans le même rapport. Ainsi, le chevauchement des groupes de transitions, accru pour cet échantillon à larges puits, conduit pour certains pics à la contribution d'au moins trois résonances appartenant à des groupes de transitions différents.

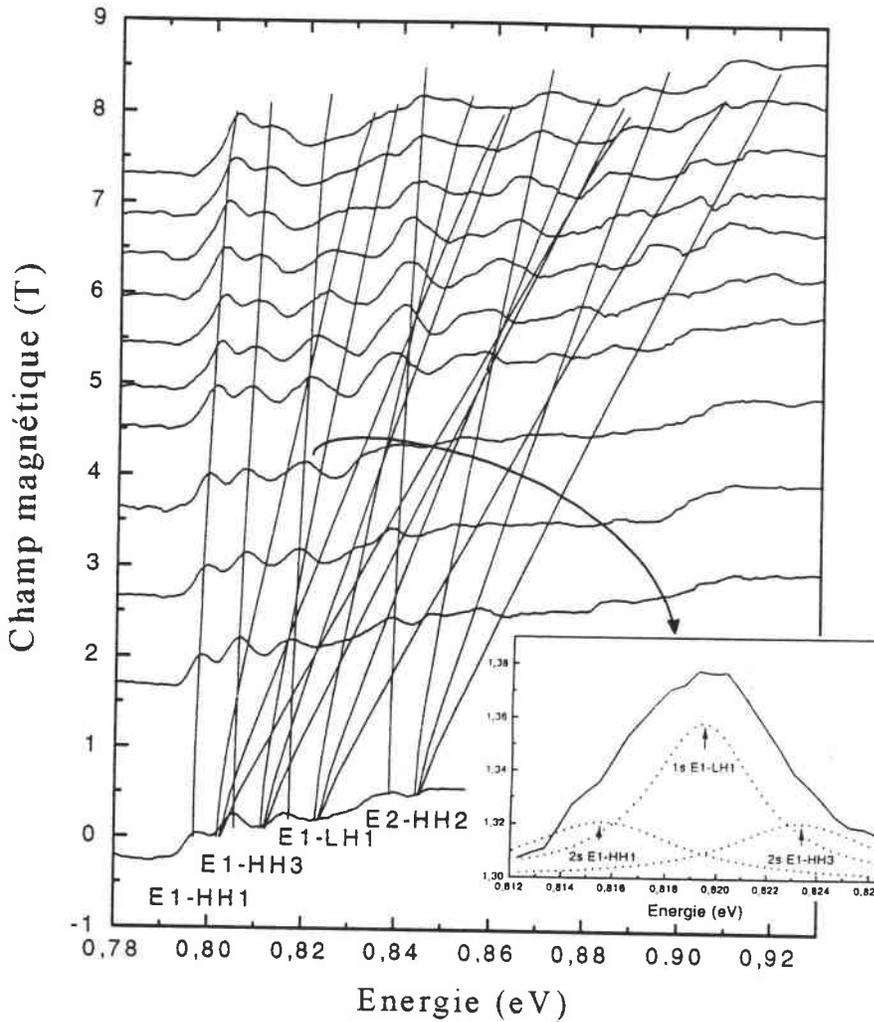


Figure VII-16 : Evolution des énergies de transition magnéto-excitoniques $E1-HH1$, $E1-HH3$, $E1-LH1$ et $E2-HH2$ pour l'échantillon de largeur nominale $L_w = 200 \text{ \AA}$. En encart est représentée la déconvolution du troisième pic à 4T. Cette déconvolution permet de mettre en évidence la participation du niveau 1s du groupe $E1-LH1$, du niveau 2s du groupe $E1-HH1$ et du niveau 2s du groupe $E1-HH3$ à ce pic.

Le pic de la résonance 1s du groupe $E2-HH2$ s'intensifie très nettement sous l'effet du champ. Toutefois, sa forme évolue sensiblement à partir de 4T. Cela est dû à l'effet simultané des transitions 3s du $E1-HH1$, 3s du $E1-HH3$ et 2s du $E1-LH1$. Finalement, dans cette région spectrale, la forme complexe du spectre à 8T résulte au moins des 16 transitions envisagées.

Sur la Fig. VII-15, le groupe de transitions $E2-LH2$ se manifeste à champ nul entre 0,89 et 0,91 eV par une montée en plateau précédée du maximum associé à la résonance 1s. Cette dernière n'apparaît plus aux valeurs de champs faibles mais non nulles. Aucune explication claire n'a pu être dégagée pour ce comportement. Par contre, au delà de 4T, elle émerge à nouveau pour participer de façon significative aux nombreuses oscillations observées à fortes valeurs de champ.

Le groupe de transitions $E3-HH3$ ne se manifeste pas clairement à champ nul, probablement à cause, entre autres, de l'effet de délocalisation des électrons du niveau $n = 3$ avec probabilité significative de pénétration dans les barrières. Par contre, à partir de 4T,

l'éclatement se concrétise par émergence progressive des 4 pics associés aux résonances 1s à 4s. Aux plus fortes valeurs de champ, ces résonances se superposent à celles 2s à 4s du groupe E2-LH2.

Notons enfin, dans le cas de cet échantillon, l'absence de sous-bandes à masse effective négative en $k_{//} = 0$, parmi celles intervenant dans les transitions identifiées. Il en résulte un éclatement systématique pour tous les groupes qui, combiné à leur chevauchement, donne la série de spectres singulièrement complexes qui caractérise cet échantillon.

II-C- Discussion :

L'analyse quantitative de nos spectres d'absorption magnéto-optique a reposé exclusivement sur le calcul des énergies de transition. Or comme il a été vu aux Chaps. IV et V, le modèle théorique utilisé donne accès aux forces d'oscillateur associées à toutes les transitions identifiées^[8-10]. Leur calcul systématique, combiné à celui des énergies de transition, doit permettre, au delà des tentatives de déconvolution dont nous avons fait état, une approche nettement plus complète de la situation, concrétisée par une simulation des spectres. Toutefois, l'intérêt d'un travail aussi quantitatif réside dans une comparaison étroite entre les spectres expérimentaux et les spectres simulés. Or les spectres simulés ne prendront en compte que les effets d'absorption propres aux puits quantiques, c.a.d impliquant les états confinés. Ce n'est pas le cas de nos spectres expérimentaux qui impliquent, en plus des états de confinement quantique, les effets d'absorption résiduelle des couches tridimensionnelles. Si les barrières d'InP, de par leur faible épaisseur et leur haut degré de pureté (voir Chap. VI) peuvent être considérées comme rigoureusement transparentes dans le domaine spectral balayé, il n'en est pas de même pour le substrat dont l'épaisseur est de l'ordre de $300\mu\text{m}$ et qui comporte des impuretés, telles le fer, pour le rendre semi-isolant^[8-11]. Des substrats de cette nature sont en effet couramment adoptés dans la réalisation de composants^[12]. Le substrat de nos échantillons comporte donc un grand nombre de centres profonds qui lui confèrent une absorption résiduelle dispersive et non négligeable dans le domaine spectral étudié. L'obtention de spectres limités aux seuls effets d'états confinés exigerait donc une normalisation des spectres de transmission par des spectres de référence incluant le substrat. C'est la démarche qui a été suivie par les auteurs des Réfs. 8-10 qui disposaient d'un échantillon du substrat sur lequel leurs structures à puits quantiques avaient été réalisées. Se limitant à la seule étude des transitions E1-HH1, ces auteurs n'ont pas fait état de simulations de spectres. Néanmoins, ils ont pu inclure avec succès les calculs de forces d'oscillateur dans l'analyse de leurs résultats expérimentaux. Ne disposant pas nous-même d'échantillons de substrat, nous n'avons pu pratiquer cette démarche. Il y aura donc lieu de reprendre systématiquement ce travail sur une nouvelle série d'échantillons analogues assortie d'un échantillon de substrat en référence. Cette nouvelle étape devrait alors déboucher sur une analyse quantitative complète des résultats de spectrométrie magnéto-optique.

Nous avons évoqué à plusieurs reprises les possibles défaillances dans la périodicité des structures multi-puits. Il est à noter ici qu'une telle défaillance peut engendrer de façon générale des chevauchements des effets de chaque puits, rendant les spectres quasiment inexploitable. A ce titre, la spectrométrie magnéto-optique présente une caractéristique analogue à celle de la diffractométrie RX, à savoir que l'observation même des éclatements sous l'effet du champ magnétique est déjà révélatrice d'une périodicité convenable. Le degré de défaillance peut ensuite être estimé par l'analyse quantitative.

Enfin, dans notre démarche d'analyse quantitative, nous avons systématiquement négligé les effets d'interfaces. Il faut noter toutefois que la prise en compte d'une substitution d'arsenic au phosphore sur 1 ou 2 MCs à l'interface InP/GaInAs (suivi d'un processus

d'interdiffusion) fait intervenir une couche interfaciale riche en arsenic, de faible gap tridimensionnel, et qui participe au confinement quantique (voir Chap. I et annexe II). Il doit en résulter des énergies de transitions inférieures à celles prévues avec les valeurs nominales des paramètres de structures. Ainsi, le fait d'avoir négligé les effets d'interface peut expliquer, au moins en partie, la nécessité d'adopter des compositions d'alliages plus riches en indium que la composition nominale. La même remarque peut s'appliquer à l'analyse des diffractogrammes RX. Ainsi, lors de l'étude de la nouvelle série d'échantillons, la prise en compte d'effets d'interfaces devra être introduite.

III- Echantillons à puits étroits :

Six échantillons ont été étudiés. Rappelons qu'il s'agit de puits quantiques $\text{Ga}_{0,468}\text{In}_{0,532}\text{As}/\text{InP}$ d'au plus quelques MCs dans lesquels les effets d'interface ne peuvent être négligés et dont la dénomination adoptée correspond au temps de croissance t_g de la couche de GaInAs (Tableau VI-1 du Chap. VI). Rappelons également que parmi ces échantillons, il en figure un de référence à $t_g = 0$ dans lequel les effets de confinement sont limités aux seuls effets d'interface.

Les Figs. VII-17 à VII-19 représentent les spectres obtenus à diverses valeurs de champ sur les échantillons à $t_g = 0$, $t_g = 1\text{s}$ et $t_g = 1.2\text{s}$, respectivement. A champ nul, on observe les structures spectrales semblables à celles observées et discutées antérieurement sur le même type d'échantillons ^[13]. Par contre, sur ces échantillons, l'application du champ magnétique n'entraîne ni l'émergence systématique des résonances, ni leurs éclatements escomptés. On note au plus un léger glissement diamagnétique des transitions ainsi qu'une émergence assez nette dans le cas de l'échantillon à $t_g = 1\text{s}$ (Fig. VII-18). Les spectres obtenus sur les autres échantillons de la même série présentent des comportements similaires.

Cette pauvreté en informations compromet l'acuité d'une analyse quantitative analogue à celle pratiquée pour les échantillons à puits larges. Néanmoins, à titre indicatif, nous avons calculé, ici encore, les énergies de résonance 1s à 4s en fonction de la valeur du champ pour les groupes de transitions E1-HH1 et E1-LH1 qui sont les seuls pouvant être impliqués dans le cas de ces puits étroits. Ne disposant pas d'information spectrales assez précises pour procéder à un ajustage rigoureux du taux de substitution d'arsenic et du nombre de MCs de GaInAs réellement déposées, nous avons adopté les configurations proposées antérieurement ^[13] d'après des mesures spectrométriques sans champ magnétique sur des échantillons analogues.

A titre indicatif, les Figs. VII-20 et VII-21 représentent les structures de bandes de valence dans les configuration structurales respectives (i) 85% de taux de substitution d'arsenic et pas de dépôt de GaInAs ($t_g = 0$) et (ii) 100% de taux de substitution sur 1 MC et un dépôt de trois MCs de GaInAs. Dans le premier cas, il s'agit de la configuration à puits réel le plus étroit : 1 MC de $\text{InAs}_{0,85}\text{P}_{0,15}$. L'effet de piégeage des porteurs est faible pour les LHs (7,5 meV) mais significatif pour les HHs (40meV). Dans le deuxième cas, il s'agit de la configuration à puits réel le plus large parmi celles adoptées : 1 MC de InAs suivi de 3 MCs de GaInAs. Le piégeage des porteurs est plus important : 80 meV pour les LHs et 157 meV pour les HHs. La disymétrie de la structure, due au fait que la substitution anionique ne concerne que l'interface InP/GaInAs, entraîne la levée de dégénérescence des sous-bandes à $k_{\parallel} \neq 0$, annoncée au Chap. III et décrite à titre d'exemple en annexe II. Dans tous les cas envisagés ici, le fort effet de confinement associé à l'étroitesse des puits mène à un important écart entre les sous-bandes, ce qui exclut tout effet singulier d'inverse de masse fortement négatif. Les éclatements sous l'effet du champ magnétique doivent donc être significatifs.

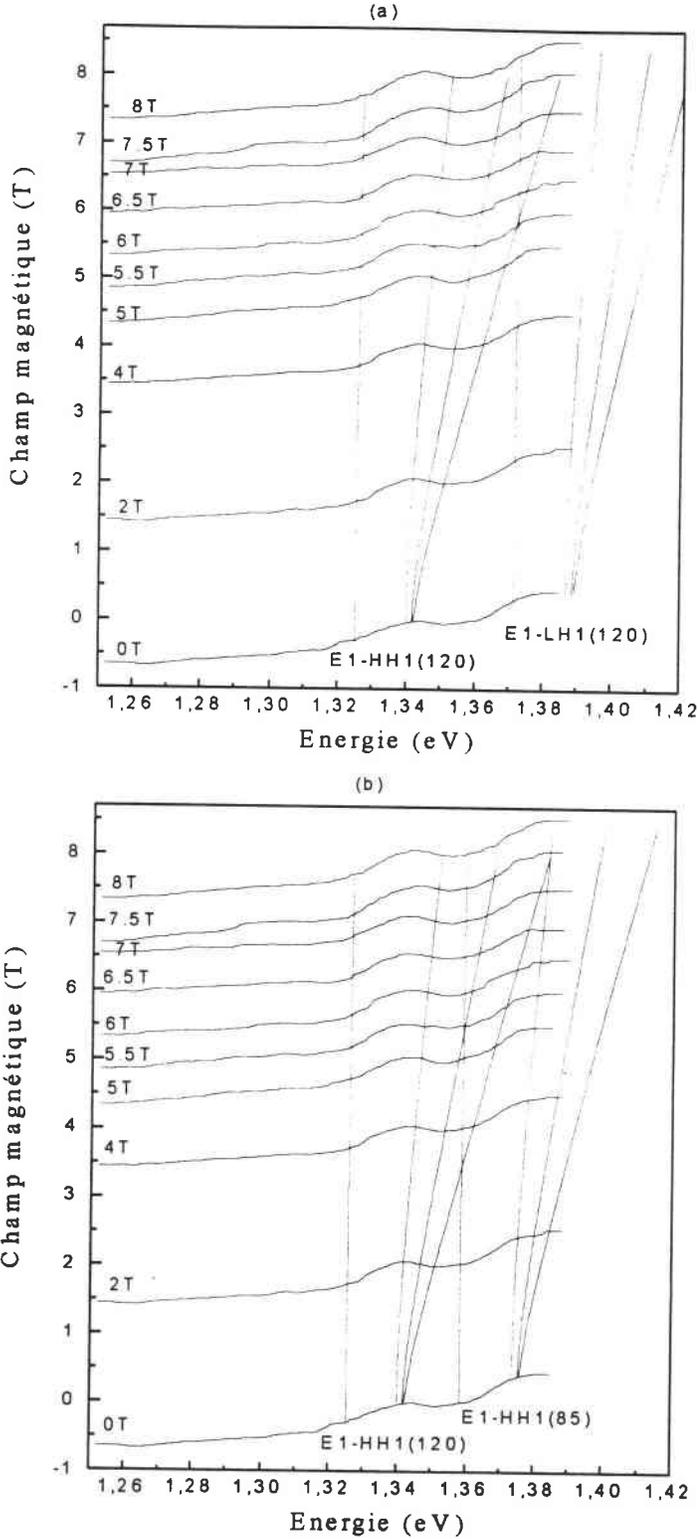


Figure VII-17 : Evolution des transitions magnéto-excitoniques sur l'échantillon $t_g = 0$. Dans la partie (a) figurent les résultats de calculs effectués sur la structure à 1 MC de InAs et 1 MC de $\text{InAs}_{0,2}\text{P}_{0,8}$ (transition E1-HH1 et E1-LH1), alors que dans la partie (b) sont représentés les niveaux : E1-HH1 de la structure à 1 MC de InAs et 1 MC de $\text{InAs}_{0,2}\text{P}_{0,8}$ et E1-HH1 de la structure à 0 MC de InAs et 1 MC de $\text{InAs}_{0,85}\text{P}_{0,15}$.

Sur l'échantillon à $t_g = 0$ (Fig. VII-17), on observe une structure autour de 1,34 eV et une autre autour de 1,38 eV, au pied de l'absorption fondamentale du substrat d'InP. La première s'identifie assez bien au groupe de transitions E1-HH1 avec un taux de substitution de 120%, c.a.d une MC de InAs et une MC de $\text{InAs}_{0,2}\text{P}_{0,8}$. La deuxième structure pourrait correspondre soit aux transitions du groupe E1-LH1 dans la même configuration structurale (partie (a) de la Fig. VII-17), soit aux transitions du groupe E1-HH1 avec un taux de substitution de 85% (partie (b) de la Fig. VII-17). La deuxième hypothèse semble la plus probable mais sa confirmation nécessiterait l'observation des éclatements avec une analyse quantitative précise.

Sur l'échantillon à $t_g = 1\text{s}$ (Fig. VII-18), l'application du champ magnétique fait émerger deux structures, autour de 1,2 eV et de 1,3 eV respectivement, qui étaient pratiquement inobservables à champ nul. D'après le taux de croissance nominal, 1 MC en 0,4s^[13], cet échantillon comporterait des zones à 2 MCs et des zones à 3 MCs. L'application du champ magnétique "étrique" la fonction d'onde de l'exciton, ce qui correspond à un magnéto-exciton confiné dans une région restreinte du plan où la couche de GaInAs peut avoir une largeur unique bien définie : 2 ou 3 MCs. Ces considérations qualitatives pourraient expliquer l'émergence des structures à fort champ. Toutefois cette hypothèse devrait être confirmée par l'identification des deux structures à des transitions E1-HH1 dans les cas respectifs des deux épaisseurs suggérées. Or, les calculs semblent attribuer ces deux structures au groupe E1-HH1 et E1-LH1 respectivement, avec un taux de substitution de 100% (1 MC de InAs) dans le cas de 2 MCs de GaInAs (partie (a) de la Fig. VII-18), avec un taux de substitution de 50% (1 MC de $\text{InAs}_{0,5}\text{P}_{0,5}$) dans le cas de 3 MCs de GaInAs (partie (b) de la Fig. VII-18). Aucun taux de substitution unique ne permet d'attribuer ces structures à des transitions E1-HH1 avec 2 et 3 MCs de GaInAs respectivement. Ici encore, seule l'observation et l'analyse quantitative des effets d'éclatement pourraient apporter des éléments significatifs de clarification.

Sur l'échantillon à $t_g = 1,2\text{s}$ (Fig. VII-19), on observe deux structures autour de 1,2 et 1,3 eV, respectivement. Ici, l'application du champ magnétique ne produit pas d'effet marquant sur les spectres. La largeur nominale de la couche de GaInAs est de 3 MCs. Toutefois, les énergies de transition des groupes respectifs E1-HH1 et E1-LH1 avec un taux de substitution de 100% (1 MC de InAs) et 3 MCs d'alliage sont légèrement inférieures à celles des structures spectrales (partie (a) de la Fig. VII-19). Le calcul avec seulement 2 MCs de GaInAs conduit à des énergies assez proches de la structure à 1,3 eV pour les transitions E1-LH1 (partie (b) de la Fig. VII-19), mais légèrement supérieures à celle de la structure à 1,2 eV. Enfin, le calcul avec seulement une MC de GaInAs (partie (c) de la Fig. VII-19) indiquerait une participation des transitions E1-HH1 à la structure à 1,3 eV dans le cas de cette configuration structurale.

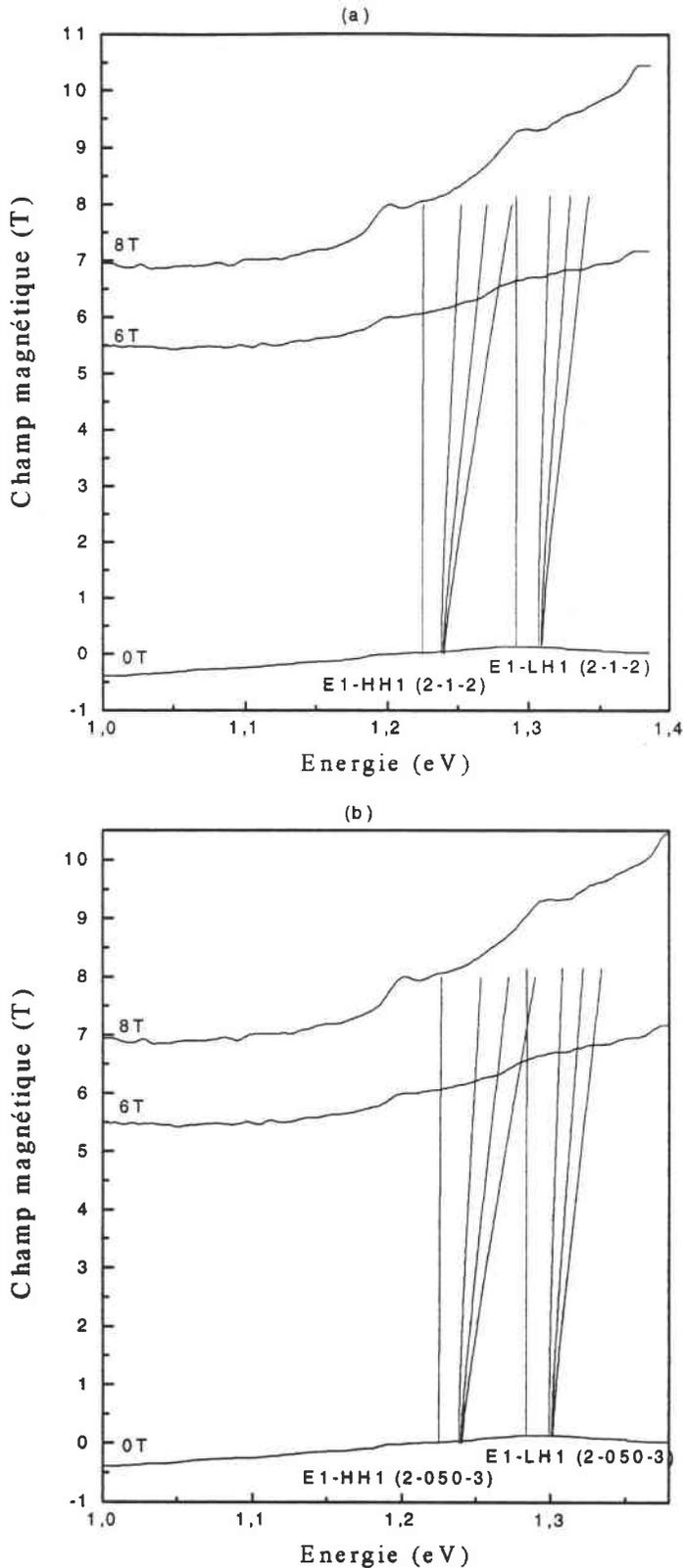


Figure VII-18 : Evolution des transitions magnéto-excitoniques sur l'échantillon $t_g = 1s$. Dans la partie (a) figurent les résultats de calculs effectués sur la structure à 1 MC de InAs et 2MCs de GaInAs (transition E1-HH1 et E1-LH1), alors que dans la partie (b) sont représentés les niveaux : E1-HH1 et E1-LH1 de la structure à 1 MC de InAs_{0,2}P_{0,8} et 3MCs de GaInAs

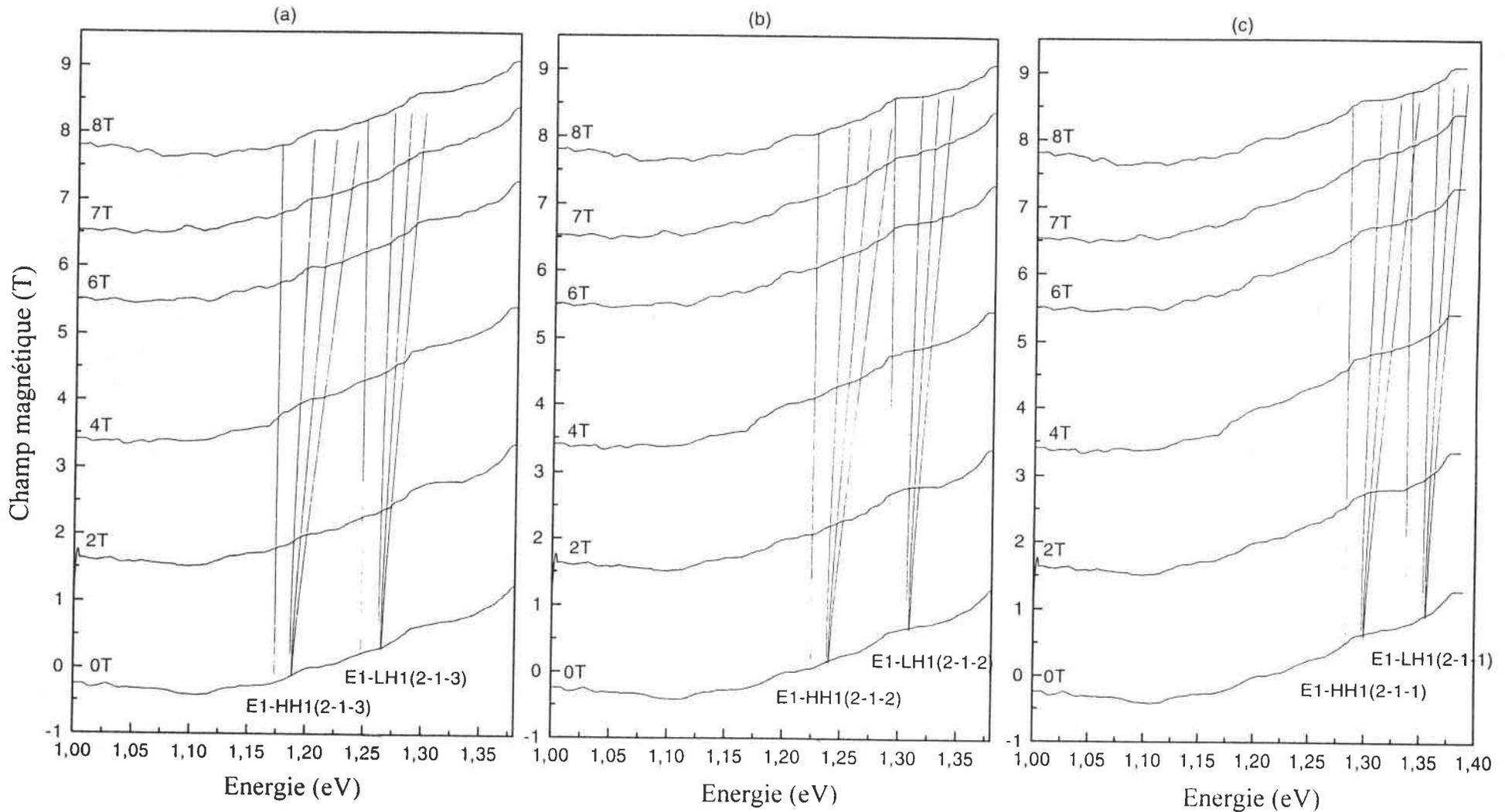


Figure VII-19 : Évolution des transitions magnéto-excitoniques sur l'échantillon $t_g = 1,2s$. Dans la partie (a) figurent les résultats de calculs effectués sur la structure à 1 MC' de InAs et 3MC's de GaInAs (transition E1-HH1 et E1-LH1), alors que dans la partie (b) sont représentés les niveaux : E1-HH1 et E1-LH1 de la structure à 1 MC' de InAs et 2MC's de GaInAs, enfin, dans la partie (c) les niveaux E1-HH1 et E1-LH1 de la structure à 1 MC' de InAs et 1MC de GaInAs

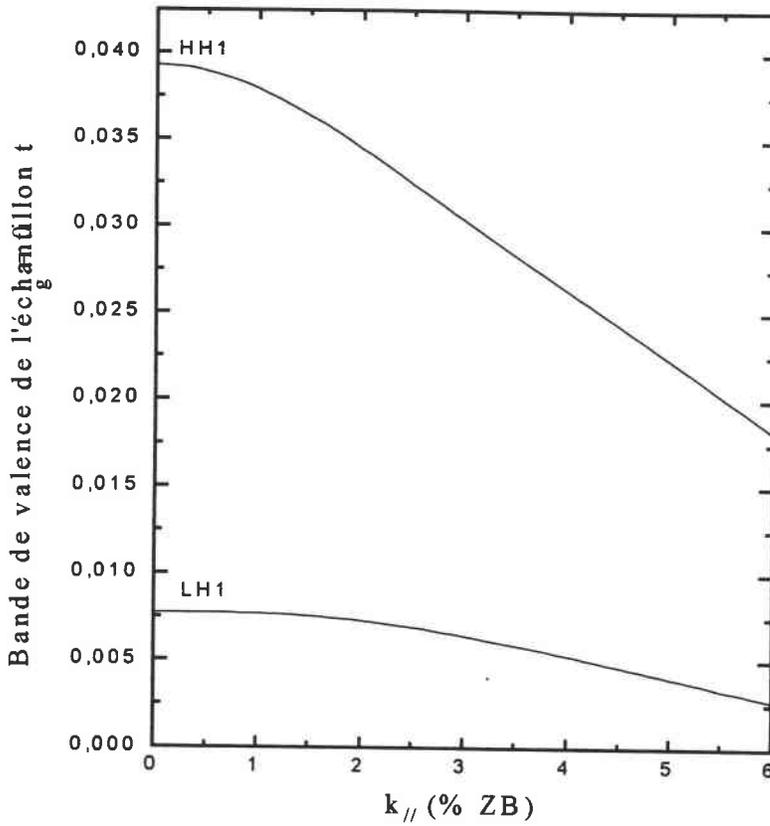


Figure VII-20 : Bande de valence de la structure comportant 1 MC de $\text{InAs}_{0,85}\text{P}_{0,15}$

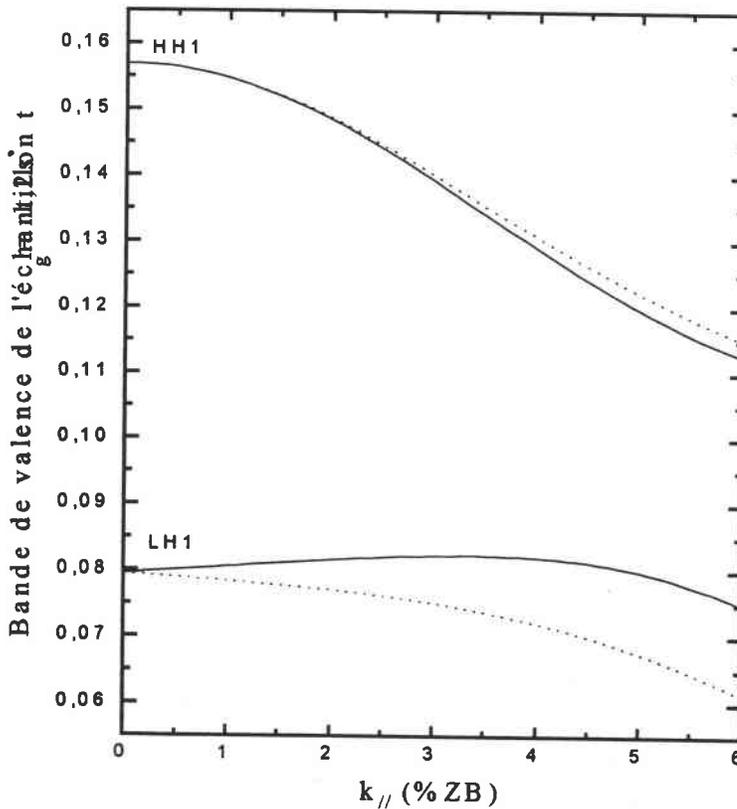


Figure VII-21 : Bande de valence de la structure comportant 1 MC de InAs et 3 MCs de GaInAs . Noter le levée de dégénérescence due à la dissymétrie de la structure.

Finalement, sur cette série d'échantillons, l'application du champ magnétique n'a pas permis, dans nos conditions d'expérimentation, de lever l'ambiguïté qui demeure sur l'identification de certaines structures spectrales, et d'avoir accès avec certitude au profil réel de la structure. La défaillance dans la périodicité des structures est probablement, là encore, en grande partie responsable de cette situation. En effet, une variation d'épaisseur de seulement 1 MC d'un puits à l'autre, ainsi qu'une fluctuation de $\pm 20\%$ du taux de substitution d'arsenic, peuvent conduire à une superposition de transitions sensiblement différentes s'opérant dans chacun des puits. Il peut en résulter un chevauchement dramatique des processus d'éclatement respectifs conduisant à des spectres uniformes exempts de tout effet d'oscillation. Seules les résonances 1s restent visibles mais sans émergence nette du fait de la superposition de transitions à énergies diverses.

Toutefois, un autre élément peut être responsable de cette situation. Il a été établi ^[13] que l'interface GaInAs/InP n'était pas le siège de substitutions anioniques mais pouvait présenter des rugosités allant jusqu'à ± 2 MCs, provenant du fait que la croissance de l'alliage n'est pas rigoureusement bidimensionnelle. Sur les échantillons à puits larges, la fluctuation de largeur associée à ces rugosités peut n'entraîner qu'un élargissement minime des structures spectrales sans altérer la vision d'ensemble de la situation. Par contre, sur les échantillons à puits minces, elle peut entraîner des élargissements dont l'importance compromet la résolution des structures.

Enfin, une inhomogénéité des effets d'interfaces dans le plan du puits peut être également à l'origine des difficultés rencontrées. Une telle inhomogénéité avait été mise en évidence antérieurement ^[14] par mesures de PL pratiquées en divers points d'un même échantillon à $t_g = 0$ et sur divers échantillons découpés dans la même plaquette. Ces mesures faisaient état d'écart énergétique entre les diverses bandes d'émission pouvant aller jusqu'à 50 meV, ce qui est l'ordre de grandeur des éclatements prévus à 8T. Ainsi, malgré l'optimisation de la finesse du spot sur l'échantillon ($\sim 1 \text{ mm}^2$) dans notre montage optique, un effet d'intégration de ces inhomogénéités dans le plan peut contribuer à l'absence des structures spectrales escomptées sous champ magnétique. Les mesures pratiquées sur cette série d'échantillons devront être reprises à l'aide d'un dispositif optique permettant une finesse de spot accrue, afin de s'affranchir au mieux de ces inhomogénéités.

A l'heure actuelle, nous ne disposons pas d'assez d'informations pour estimer dans quelle mesure les hypothèses énoncées ci-dessus sont les causes réelles de l'absence d'effets magnéto-optiques clairs dans cette série d'échantillons.

REFERENCES :

- [1] J.P Laurenti, J. Camassel, B. Reynes, D. Grützmacher, K. Wolter and H Kurtz, *Semicond. Sci. Technol.* **5**, 222 (1990)
- [2] M. Sugawara, *Phys. Rev.* **B45**, 11423 (1992)
- [3] M. Sugawara, N. Okazaki, T. Fujii and S. Yamazaki, *Phys. Rev.* **B48**, 8848 (1993)
- [4] M. Sugawara, N. Okazaki, T. Fujii and S. Yamazaki, *Phys. Rev.* **B48**, 8102 (1993)
- [5] S.L. Wong, R.J. Nicholas, R.W. Martin, J. Thompson, A. Wood, A. Moseley and N. Carr, *J. Appl. Phys.* **79**, 6826 (1996)
- [6] G. Bastard, 'Wave Mechanics Applied to Semiconductor Heterostructures', les Editions de Physique (Paris 1989).
- [7] G. Edwards, E.C. Valadares and F.W. Sheard, *Phys. Rev.* **B50**, 8493 (1994)
- [8] D. Grützmacher, K. Wolter, M. Zachau, H. Jürgensen, H. Kurz and P. Balk, *Inst. Phys. Conf. Ser.* **91**, 613 (1988)
- [9] D. Grützmacher, J. Hegerth, F. Reinhardt, K. Wolter and P. Balk, *J. Electron. Mater.* **19**, 471 (1990)
- [10] D. Grützmacher, *J. Crystal Growth* **107**, 520 (1991)
- [11] J. Hegerth, D. Grützmacher, F. Reinhardt and P. Balk, *J. Crystal Growth* **107**, 537 (1991)
- [12] M. Razeghi, *The MOCVD Challenge, Vol.1 : A Survey of GaInAsP-InP for Photonic and Electronic Applications*, Adam Hilder ed., Bristol-Philadelphia (1989)
- [13] S. Juillaguet, R. Schwedler, A. Kohl, F.H. Baumann, B. Fraisse, J. Camassel, K. Wolter, K. Leo, B. Gallmann, M. Stollenwerck and J.P. Laurenti, *Proc. 5th 'InP and Related Materials'*, IEEE cat 93CH3276-3, Paris (1993), p301
- [14] J. Camassel, J.P. Laurenti, S. Juillaguet, F. Reinhardt, K. Wolter, H. Kurz and D. Grützmacher, *J. Crystal Growth* **107**, 543 (1991)

CONCLUSION

Nous avons procédé à une série de mesures spectrométriques d'absorption sur des hétérostructures à multi-puits quantiques $\text{Ga}_{0,47}\text{In}_{0,53}\text{As}/\text{InP}$, à basse température et avec application d'un champ magnétique de 0 à 8 Tesla en configuration Faraday. Le champ magnétique a pour effets (i) d'augmenter l'écart énergétique entre les transitions excitoniques impliquant une même paire de sous-bandes et (ii) d'intensifier ces transitions par accroissement du degré de confinement quantique. Ces effets, combinés avec la multiplicité des sous-bandes impliquées dans les transitions permises, conduisent à des spectres particulièrement riches en informations sous réserve (i) d'une périodicité régulière de l'hétérostructure et (ii) d'interfaces homogènes dans leur plan.

Nous nous sommes dotés de moyens d'analyse quantitative des spectres, basés sur la méthode de la fonction enveloppe avec prise en compte de la non-parabolicité des bandes par la théorie **k.p.** L'interaction coulombienne de la paire électron-trou et l'action du champ magnétique sont pris en compte simultanément dans l'Hamiltonien de la particule réduite. Ce formalisme n'impose pas de restriction sur l'ordre de grandeur du champ. En outre, le mouvement des porteurs dans la direction de quantification a été pris en compte.

Pour chaque échantillon étudié, nous avons calculé les énergies de transitions magnéto-excitoniques en traitant la largeur des puits, la composition de l'alliage et le taux de substitution anionique à l'origine d'une couche interfaciale, comme paramètres ajustables.

Dans le cas des échantillons à puits assez larges (50 à 200 Å), l'ensemble des structures spectrales a pu être interprété de façon cohérente en négligeant les effets d'interfaces, mais en adoptant une composition d'alliage plus riche en indium que celle nominalement prévue. Des défauts de périodicité de l'hétérostructure ont pu être caractérisés quantitativement. L'opportunité de la prise en compte des effets d'interfaces a été discutée.

Dans le cas des échantillons à puits étroits (au plus quelques MCs), nous n'avons pu obtenir l'enrichissement des spectres que laissait prévoir l'action du champ magnétique. Nous avons attribué ceci à une défaillance dans la périodicité des structures et/ou à une inhomogénéité des couches interfaciales dans leur plan.

Finalement, l'application d'un champ magnétique donne aux mesures spectrométriques d'absorption une sensibilité accrue aux paramètres structuraux de l'échantillon.

Il conviendra à présent de compléter cette approche énergétique de l'interprétation quantitative des spectres par une analyse en terme de forces d'oscillateurs, dont la possibilité est offerte par le modèle théorique adopté. Pour cela, les spectres à analyser devront être normalisés par rapport aux effets d'absorption résiduelle du substrat.

Par ailleurs, il y aura lieu de poursuivre, à l'aide d'un système de focalisation approprié, les investigations entreprises sur les échantillons à puits minces en sondant une section aussi restreinte que possible des structures, afin de minimiser l'effet d'intégration dû aux inhomogénéités d'interfaces et si possible de dresser un bilan topographique de ces inhomogénéités.

Enfin, cette technique magnéto-optique de contrôle du profil réel de la structure pourra être désormais étendue à tout système à confinement quantique, à composés III-V ou II-VI, incluant ainsi le domaine spectral d'application aux lasers bleus.

ANNEXE I

PARAMETRES PHYSIQUES ADOPTES DANS LES CALCULS

Les valeurs numériques adoptées pour les paramètres énumérés au § IV du Chap.I sont rassemblées dans les tableaux A-I-1 et A-I-2 pour les constituants binaires et dans le tableau A-I-3 pour les effets spécifiques d'alliage des composés ternaires. Ces valeurs sont, pour la plupart, communément admises sur la base d'argumentations expérimentales. Nous allons décrire ici l'origine des valeurs adoptées plus particulièrement pour notre travail.

	InP	GaAs	InAs	GaP
$a_0(\text{Å})$	5,8688 ^a	5,6533 ^a	6,0584 ^a	5,4512 ^a
m_e/m	0,079 ^b	0,067 ^b	0,023 ^{ab}	0,130 ^b
γ_1	4,95 ^c	4,2 ^d	10,8 ^d	4,05 ^c
γ_2	1,65 ^c	1,18 ^d	4,2 ^d	0,49 ^c
γ_3	2,35 ^c	1,62 ^d	4,6 ^d	1,25 ^c
$E_c(\text{eV})$	1,424 ^e	1,663 ^e	0,829 ^e	2,603 ^e
$E_v(\text{eV})$	0	0,144 ^f	0,411 ^f	-0,266 ^f
$\Delta_{SO}(\text{eV})$	0,110 ^b	0,340 ^{ab}	0,370 ^b	0,080 ^b
C_{11} ($\times 10^{11}$ dyn/cm)	10,22 ^a	12,11 ^b	8,451 ^b	14,39 ^b
C_{12} ($\times 10^{11}$ dyn/cm)	5,76 ^a	5,48 ^b	4,66 ^b	6,52 ^b
$a(\text{eV})$	-6,6 ^g	-6,7 ^b	-6 ^g	-9,3 ^b
$a_c(\text{eV})$	-5,61 ^h	-5,695 ^h	-5,1 ^h	-7,905 ^h
$a_v(\text{eV})$	0,99 ^h	1,005 ^h	0,9 ^h	1,395 ^h
$b(\text{eV})$	-2 ^a	-1,7 ^{ab}	-1,8 ^{ab}	-1,5 ^a

(a) Réf. 2 ; (b) Réf. 14 ; (c) Réfs. 14-16 ; (d) Réf. 6 ; (e) $E_c = E_v + E_g$ (Tableau A-I-2) ; (f) Voir § A-I ; (g) Réf. 20 ; (h) Voir § A-III.

Tableau A-I-1 : Paramètres à 2K des binaires composant les alliages GaInAsP.

Composés binaires	InAs	InP	GaAs	GaP
$E_g(\text{eV})$	0,418	1,424	1,519	2,869

Tableau A-I-2 : Seuils d'absorption fondamentaux (gaps) à 2K des binaires composant les alliages GaInAsP (d'après Réf. 14).

A-I-Offsets de bandes:

De nombreuses tentatives de détermination des offsets de bandes ont été publiées^[1-4]: mesures, calculs ou déductions d'ajustements numériques. Les résultats sont encore controversés, avec une disparité allant de $\Delta E_c / \Delta E_v = 0,35 / 0,65$ à $0,55 / 0,45$.

Les auteurs des références 5 et 6 ont proposé des valeurs de ΔE_v obtenues par la méthode des liaisons fortes. Ils ont perfectionné la version originale du modèle préconisé par Harrison^[7,8], en incluant les orbitales d des constituants cationiques. Ce perfectionnement a été suscité par le désaccord entre les résultats du modèle conventionnel qui prévoient des offsets de bandes de valence pratiquement nuls pour les systèmes GaAs/GaAlAs et AlInAs/GaInAs, et les observations expérimentales qui montraient, pour les mêmes systèmes, des offsets de 30 à 40 % de la différence totale de gap.

Ainsi la prise en compte des orbitales cationiques d a donné des résultats en accord avec des résultats antérieurs de mesures capacitives. Elle a permis également aux auteurs de la référence 6 d'analyser de façon cohérente les résultats de leurs mesures magnéto-optiques, analogues à celles auxquelles nous avons eu recours. Il nous a donc semblé légitime d'adopter dans notre travail les valeurs d'offsets de bandes issues de ces calculs récents dont nous allons résumer l'essentiel.

Dans chaque composé binaire, l'Hamiltonien est représenté par une matrice 13X13 dans la base des orbitales s , p et d du constituant cationique et des orbitales s et p du constituant anionique. Cet Hamiltonien prend en compte les propriétés d'invariance du cristal par translation et les interactions entre plus proches voisins. Dans la recherche des états propres en centre de zone ($\vec{k} = \vec{0}$), certains états de base sont découplés entre eux et le problème se réduit à la diagonalisation d'une matrice 9X9. On débouche sur l'équation du 3^{ème} degré :

$$\left(\varepsilon_p^a - E\right)\left(\varepsilon_p^c - E\right)\left(\varepsilon_d^c - E\right) - \left(4E_{x,x}\right)^2\left(\varepsilon_d^c - E\right) - \left(4E_{x,yz}\right)^2\left(\varepsilon_p^c - E\right) = 0 \quad \text{Eq.(A-I-1)}$$

dont la résolution donne trois énergies propres E triplement dégénérées.

$\varepsilon_p^{a(c)}$ est l'énergie de l'anion (du cation) dans l'état p ;

ε_d^c est l'énergie du cation dans l'état d .

$E_{x,x}$ et $E_{x,yz}$ sont les éléments de matrice interatomique dans les cristaux à structure blende^[11]:

$$E_{x,x} = \frac{V_{pp\sigma}}{3} + \frac{2V_{pp\pi}}{3} \quad \text{Eq.(A-I-2a)}$$

et

$$E_{x,yz} = \frac{V_{pd\sigma}}{3} - \frac{2\sqrt{3}V_{pd\pi}}{9} \quad \text{Eq.(A-I-2b)}$$

$$\text{avec } V_{pp\sigma} = 3,24 \frac{\hbar^2}{m_0 d^2}, \quad \text{Eq.(A-I-3a)}$$

$$V_{pp\pi} = -0,81 \frac{\hbar^2}{m_0 d^2}, \quad \text{Eq.(A-I-3b)}$$

$$V_{pd\sigma} = -2,95 \frac{\hbar^2 r_d^{3/2}}{m_0 d^{7/2}}, \quad \text{Eq.(A-I-3c)}$$

$$V_{pd\pi} = 1,36 \frac{\hbar^2 r_d^{3/2}}{m_0 d^{7/2}}. \quad \text{Eq.(A-I-3d)}$$

d est la distance interatomique, reliée au paramètre de maille a_0 du réseau cristallin par $d = a_0 \frac{\sqrt{3}}{4}$; r_d est le rayon de l'orbitale d , \hbar la constante de Planck divisée par 2π et m_0 la masse de l'électron.

L'énergie des états p liants c.a.d. le sommet E_v de la bande de valence sera :

- la plus faible des trois solutions si $\epsilon_d^c > \epsilon_p^a$;
- la solution intermédiaire dans le cas contraire.

Si on néglige l'effet des orbitales d , ce qui équivaut à annuler l'élément de matrice $E_{x,yz}$, l'équation A-I-1 se réduit à une équation du deuxième degré dont les solutions sont :

$$E = \frac{\epsilon_p^c + \epsilon_p^a}{2} \pm \left\{ \left[\frac{\epsilon_p^c - \epsilon_p^a}{2} \right]^2 + (4E_{x,x})^2 \right\}^{1/2} \quad \text{Eq.(A-I-4)}$$

Les énergies propres supérieure et inférieure correspondent respectivement aux états p antiliants et aux états p liants (E_v).

Les paramètres utilisés dans les calculs sont rassemblés dans le tableau A-I-4. Pour les quatre matériaux binaires qui nous intéressent, on est dans le cas où $\epsilon_d^c > \epsilon_p^a$.

A titre indicatif, les énergies d'orbitales atomiques ainsi que le niveau E_v donné par l'Eq. A-I-1 sont représentés sur la Fig. I-A-1 pour GaAs et InP. Pour comparaison, le niveau E_v obtenu en négligeant l'effet des orbitales d (Eq. A-I-4) est également indiqué entre parenthèses. Les orbitales d ont pour effet de repousser le niveau E_v d'états p liants vers une plus haute énergie. Ce glissement énergétique varie sensiblement d'un matériau à l'autre (150 meV pour GaAs, 80 meV pour InP). La prise en compte des orbitales d des constituants cationiques a donc une influence significative sur les offsets de bandes.

Finalement, les positions énergétiques d'extrema de bandes E_v et E_c rassemblées dans le tableau A-I-1 sont obtenues par ce calcul prenant en compte les orbitales d des constituants cationiques.

Composés ternaires	GaInAs	GaAsP	GaInP	InAsP
Bowings(eV)	0,475 ^a	0,186 ^b	0,758 ^b	0,091 ^c

(a) Réf. 21 ; (b) Réf. 22 ; (c) Réf. 2

Tableau A-I-3 : Paramètres de non linéarité des alliages ternaires participant à la définition des quaternaires GaInAsP. Ces paramètres interviennent dans l'expression du gap. En accord avec la référence 6, ils sont partagés pour moitié entre les extrema de bande de conduction E_c et de valence E_v .

	Ga	In	As	P
ε_p^a (eV)	—	—	- 7,91 ^(a)	- 8,33 ^(a)
ε_p^c (eV)	- 4,90 ^(a)	- 4,69 ^(a)	—	—
ε_d^c (eV)	- 21,5 ^(b)	- 21,5 ^(b)	—	—
r_d (Å)	1 ^(b)	1 ^(b)	—	—

(a) Réf. 11 ; (b) Réf. 5 et 6.

Tableau A-I-4 : Paramètres utilisés dans le calcul de l'énergie E_v des états p liants pour les matériaux binaires GaAs, InP, InAs et GaP.

A-II-Paramètres de bande de valence :

Il s'agit des paramètres γ_1 , γ_2 et γ_3 dits paramètres de Luttinger-Kohn^[12] qui déterminent les formes des trois composantes de la bande de valence et qui interviennent dans le calcul des états de valence par la théorie $k.p$ au deuxième ordre (Chap. III). Ces paramètres ont été calculés pour divers matériaux III-V et II-VI et les résultats^[13,14] sont couramment utilisés pour déterminer la structure de bande de systèmes à puits quantiques^[15-18]. Toutefois, comme l'ont souligné les auteurs de la Réf. 6, le calcul de ces paramètres nécessite les éléments de matrice interbandes et les séparations énergétiques entre la bande de valence et les bandes à distance. Ces paramètres sont difficilement mesurables, ce qui laisse quelques doutes sur la validité des résultats de calculs. Dans l'analyse détaillée de leurs résultats de mesures magnéto-optiques, les auteurs de la Réf.6 ont traité les paramètres de Luttinger-Kohn comme des paramètres ajustables. Ils ont donné une interprétation cohérente de l'ensemble de leurs résultats en proposant des valeurs sensiblement deux fois plus faibles que celles communément admises. Nous adopterons donc ces nouvelles valeurs qui sont rassemblées dans le tableau A-I-1.

A-I-III-Potentiels de déformations hydrostatiques :

Aucune valeur expérimentale ne donne les potentiels de déformation hydrostatiques de la bande de conduction a_c et de la bande de valence a_v indépendamment l'un de l'autre. Seule la valeur totale $a = a_c - a_v$ est connue dans la littérature^[14]. Dans nos calculs, nous avons donc utilisé systématiquement les rapports $a_c = 0.85a$ et $a_v = -0.15a$ déduits des calculs de Van de Walle et Martin^[19] pour le composé binaire GaAs.

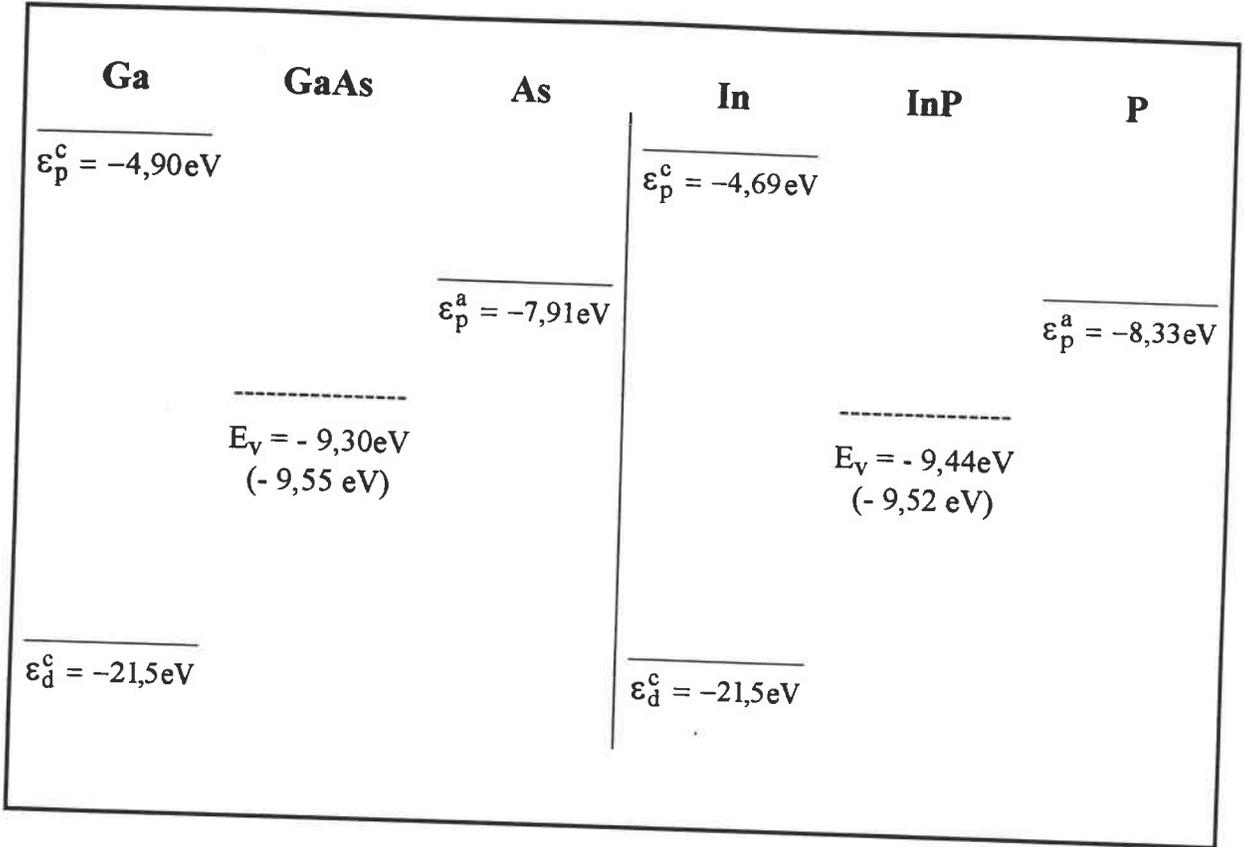


Figure A-I-1 : Positions énergétiques des orbitales atomiques p et d et des états p liants dans GaAs et InP. Les positions des états p liants sans prise en compte des orbitales d sont indiqués entre parenthèses.

REFERENCES :

- [1] D. Gershoni, H. Temkin and M.B. Panish, Phys. Rev. **B 38**, 7870 (1989)
- [2] S. Adachi, J. Appl. Phys. **53**, 8775 (1982)
- [3] D. Gershoni, H. Temkin, M.B. Panish and R.A. Hamm, Phys. Rev. **B 39**, 5531 (1989)
- [4] A. W. Harrison and J. Tersoff, J. Vac. Sci Technol. **B4**, 1068 (1986)
- [5] M. Sugawara, Phys. Rev. **B 47**, 7588 (1993)
- [6] M. Sugawara, N. Okazaki, T. Fujii and S. Yamazaki, Phys. Rev. **B 48**, 8102 (1993)
- [7] A. W. Harrison, J. Vac. Sci Technol. **14**, 1016 (1977)
- [8] A. W. Harrison, J. Vac. Sci Technol. **B3**, 1213 (1985)
- [9] S.R. Forrest, P.H. Schmidt, R.B. Wilson and M.L. Kaplan, Appl. Phys. Lett. **45**, 1199 (1984)
- [10] H. Okumura, S. Misawa, S. Yoshida and S. Gonda, Appl. Phys. Lett. **46**, 377 (1985)
- [11] A. W. Harrison, Electronic Structure and Properties of Solids - The Physics of Chemical bonds, Freeman, San Francisco (1980)
- [12] J.M. Luttinger and W. Kohn, Phys. Rev. **97**, 869 (1955)
- [13] P. Lawaetz, Phys. Rev. **B4**, 3460 (1971)
- [14] Numerical Data and Functional Relationships in Science and Technology, edited by K.H. Hellwege, Landolt-Börnstein, New Series, Groups III-V, Vol. 17a (Springer, Berlin, 1982), Vol. 22a (Springer, Berlin, 1986)
- [15] S.L. Chuang, , Phys. Rev. **B43**, 9649 (1991)
- [16] C.Y.P Chao and S.L. Chuang, , Phys. Rev. **B46**, 4110 (1992)
- [17] C.S. Chang and S.L. Chuang, IEEE, J. of Selected Topics in Quantum Electronics **1**, 218 (1995)
- [18] D. Ahn, S.J. Yoon, S.L. Chuang and C.S. Chang, J. Appl. Phys. **78**, 2489 (1995)
- [19] C. Van de Walle et R.M. Martin, Phys. Rev. Lett. **B39**, 5531 (1989)
- [20] E.P. O'Reilly, Semicond. Sci. Technol. **4**, 121 (1989)

- [21] K.H. Goetz, O. Bimberg, H. Jürgensen, J. Selders, A.V. Solomonov, G.F. Glinskii and R. Rzeghi, J. Appl. Phys. **54**, 4543 (1983)
- [22] M. Bugazjski, A.M. Kontkiewicz and H. Mariette, Phys. Rev. **B28**, 7015 (1983)

ANNEXE II

EXEMPLES DE STRUCTURES DE BANDES DE VALENCE

La Fig. A-II-1 représente la structure de bande de valence pour un PQ abrupt $\text{Ga}_{0.468}\text{In}_{0.532}\text{As}$ / InP de largeur 8 MCs, soit 2.35 nm. La composition de l'alliage assure l'accord de maille avec le substrat et les barrières d'InP. Dans cette structure, dont le profil est représenté sur la Fig. I-6-a, la distance énergétique entre les premiers niveaux de confinement respectifs d'électrons et de trous assure un seuil d'absorption fondamentale d'environ $1,3\mu\text{m}$, compatible avec le domaine spectral des fibres optiques. La largeur de puits permet d'obtenir trois niveaux de confinement : deux de trous lourds (HH1 et HH2) et un de trous légers (LH1). A chacun de ces trois niveaux correspond une sous-bande $E(k_{//})$. L'ensemble des trois sous-bandes apparaît sur la Fig. A-II-1. La symétrie du profil de la structure maintient la dégénérescence d'ordre 2 quel que soit le vecteur d'onde $k_{//}$ dans le plan. L'analyse des sous-bandes au voisinage de $k_{//} = 0$ par une régression polynomiale en $k_{//}^2$ permet d'évaluer les masses effectives des porteurs dans le plan pour $k_{//}$ voisin de zéro. Bien que les sous-bandes ne soient pas, globalement, paraboliques, ces masses influent fortement sur la mobilité des porteurs dans le plan du puits. Elles constituent donc une donnée primordiale dans l'application à l'ingénierie des composants. Sur un plan plus fondamental, ces masses combinées à celles des électrons de conduction, influent de façon significative sur (i) l'énergie de liaison des excitons (Chap.IV) et (ii) les glissements diamagnétiques des énergies de transitions sous l'effet d'un champ magnétique (Chap.V). Notons enfin, dans cette structure, qu'au voisinage de $k_{//} = 0$, la concavité de la sous bande LH1 est dirigée vers les énergies électroniques croissantes, contrairement au cas des sous-bandes HH1 et HH2. Cette situation correspond donc, pour les trous légers, à une masse effective négative. Finalement, les valeurs de masse sont :

$$m_{hh//} = 0,105 m_0 \text{ pour la sous bande HH1 ;}$$

$$m_{lh//} = -0,248 m_0 \text{ pour la sous bande LH1.}$$

La Fig. A-II-2 représente la structure de bande de valence pour le PQ dont le profil est représenté sur la Fig. I-6-c. Cette structure, plus réaliste que celle de la Fig. I-6-a résulte d'une substitution d'arsenic au phosphore sur deux MCs, d'un dépôt de 4 MCs de $\text{Ga}_{0.468}\text{In}_{0.532}\text{As}$ puis du phénomène d'interdiffusion (Chap.I). Son seuil d'absorption fondamentale est sensiblement identique à celui de la structure abrupte idéale présentée auparavant. Ici encore, la largeur de puits permet d'obtenir les trois niveaux de confinement HH1, HH2 et LH1. Toutefois, le caractère dissymétrique du profil de la structure (Fig. I-6-c) entraîne la levée de dégénérescence dès que $k_{//} \neq 0$. Il en résulte deux sous-bandes par niveau de confinement obtenues à partir de chacun des deux blocs 3X3 de l'Hamiltonien 6X6. Les sous-bandes en traits pleins (pointillés) sont obtenues à partir du bloc supérieur (inférieur). Notons, en ce qui concerne les trous légers, que seule la sous-bande obtenue à partir du bloc 3X3 supérieur conduit à une masse effective négative. Finalement, les valeurs de masse sont :

$$m_{hh//} = 0,105 m_0 \text{ et } m_{hh//} = 0,103 m_0 \text{ pour la sous bande HH1 ;}$$

$$m_{lh//} = -0,218 m_0 \text{ et } m_{lh//} = 0,327 m_0 \text{ pour la sous bande LH1.}$$

Ces résultats sont détaillés et discutés dans la référence 27 du Chap. III.

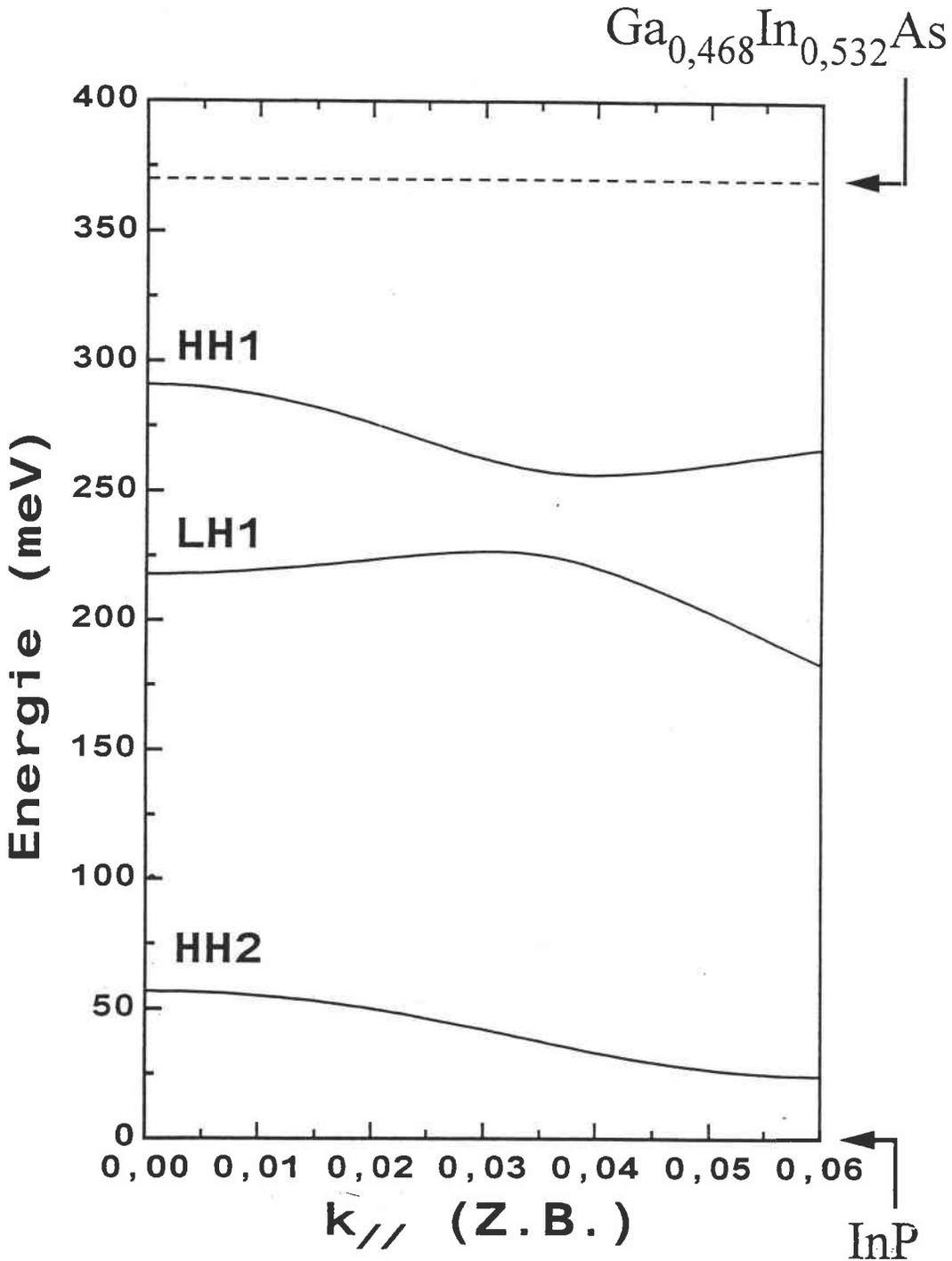


Figure A-II-1 : Structure de bande de valence d'un puits quantique abrupt $\text{Ga}_{0,468}\text{In}_{0,532}\text{As}$ de largeur 8 MCs. Le vecteur d'onde dans le plan du puits $k_{//}$ est exprimé en largeur de zone de Brillouin dans la direction [001]. L'origine des énergies est prise au sommet Γ_8 de la bande de valence des barrières d'InP. Le sommet Γ_8 de la bande de valence de l'alliage sans déformation est fléché à 370 meV.

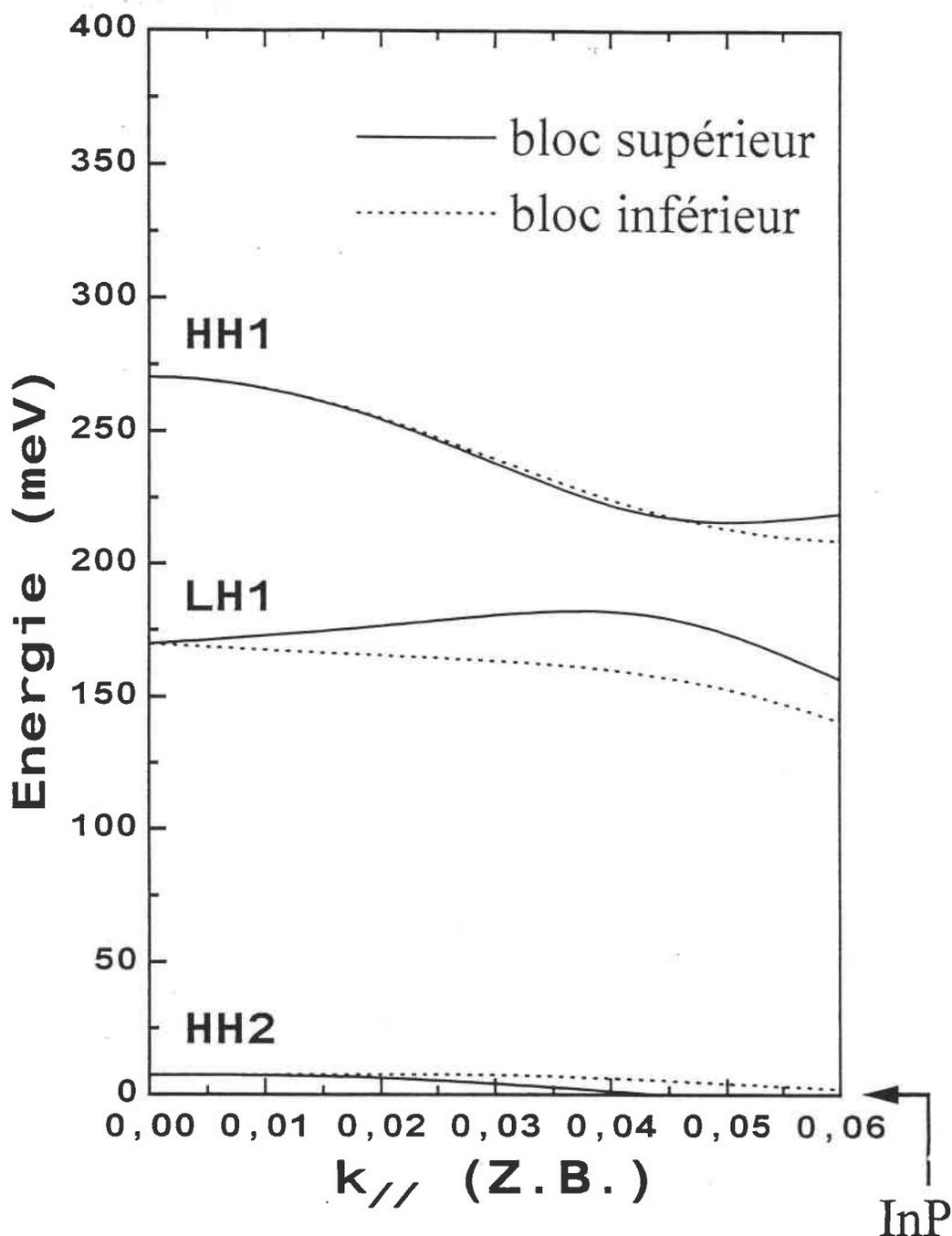


Figure A-II-2 : Structure de bande de valence d'un puits quantique résultant d'une substitution As/P sur 2 MCs, d'un dépôt de 4 MCs de $Ga_{0,468}In_{0,532}As$ puis d'un phénomène d'interdiffusion (profil Fig. I-6-c). Le vecteur d'onde dans le plan du puits $k_{//}$ est exprimé en largeur de zone de Brillouin dans la direction [001]. L'origine des énergies est prise au sommet Γ_8 de la bande de valence des barrières d'InP. Noter la levée de dégénérescence associée à la dissymétrie du profil dès que $k_{//} \neq 0$.

ANNEXE III

INTENSITE DIFFRACTEE PAR UNE HETEROSTRUCTURE PERIODIQUE EN THEORIE CINEMATIQUE

Les notions et les formulations résumées dans cette annexe sont détaillées dans les références 15-18 du Chap. VI.

Dans l'étude de la diffraction des rayons X (RX) par un milieu cristallin, la théorie cinématique consiste à négliger les phénomènes de diffusion secondaire par chacun des atomes. Dans ce cas, on peut considérer que l'intensité du rayonnement reste constante dans tout le volume du cristal.

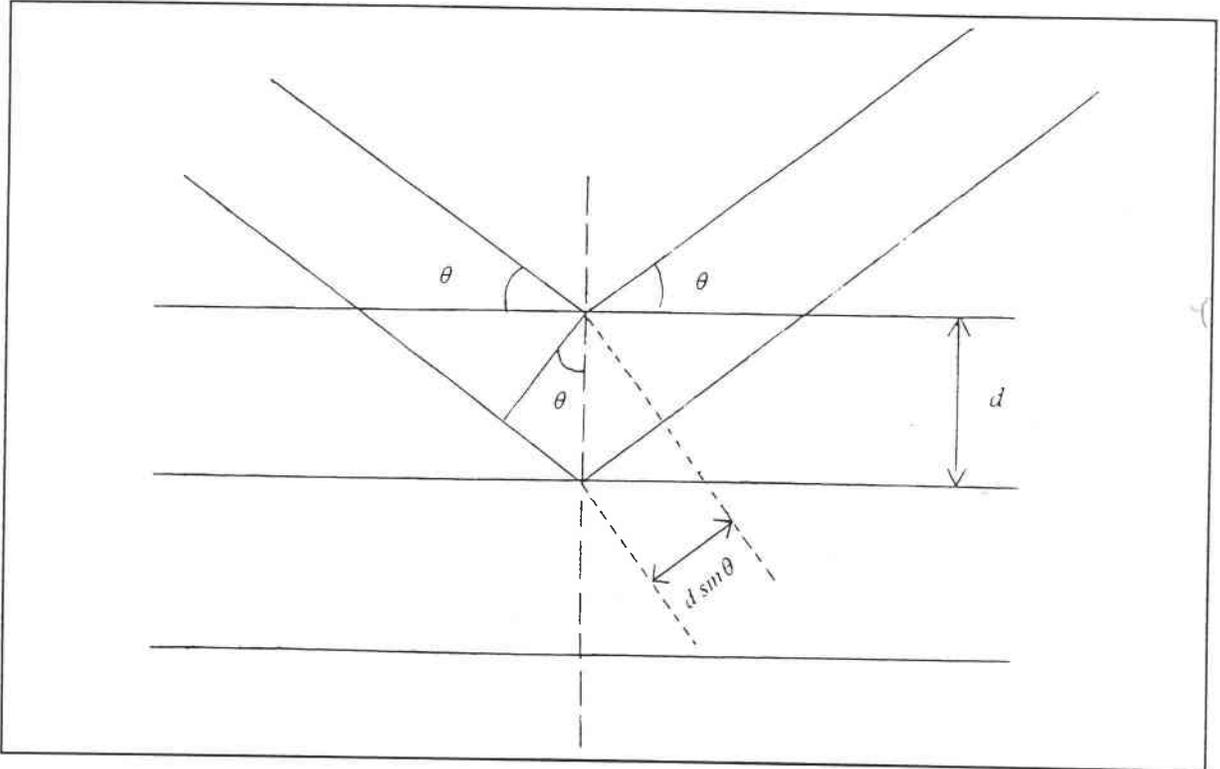


Figure A-III-1 : Réflexion d'un rayonnement X sur une série de plans réticulaires équidistants de d .

C'est dans cette hypothèse que s'établit la loi de Bragg régissant la réflexion d'un rayonnement X sur une série de plans réticulaires équidistants de d . Si θ désigne l'angle du rayonnement incident par rapport aux plans réticulaires (Fig. A-III-1), des maxima d'intensité sont obtenus pour :

$$2d \sin \theta = n\lambda, \quad \text{Eq.(A-III-1)}$$

où n est un entier défini comme l'ordre de diffraction et λ la longueur d'onde du rayonnement.

Dans le cas d'une diffraction sur les plans [100] d'une structure blende, d est égal au paramètre de maille a_0 , soit 5,8688 Å pour InP. Avec le rayonnement $K\alpha_1$ du Cu ($\lambda = 1,54051$ Å), le maximum de diffraction à l'ordre 4 est obtenu pour $\theta = 31^\circ 40'$. C'est l'angle qui correspond au pic du substrat sur la Fig. VI-9 (Chap. VI).

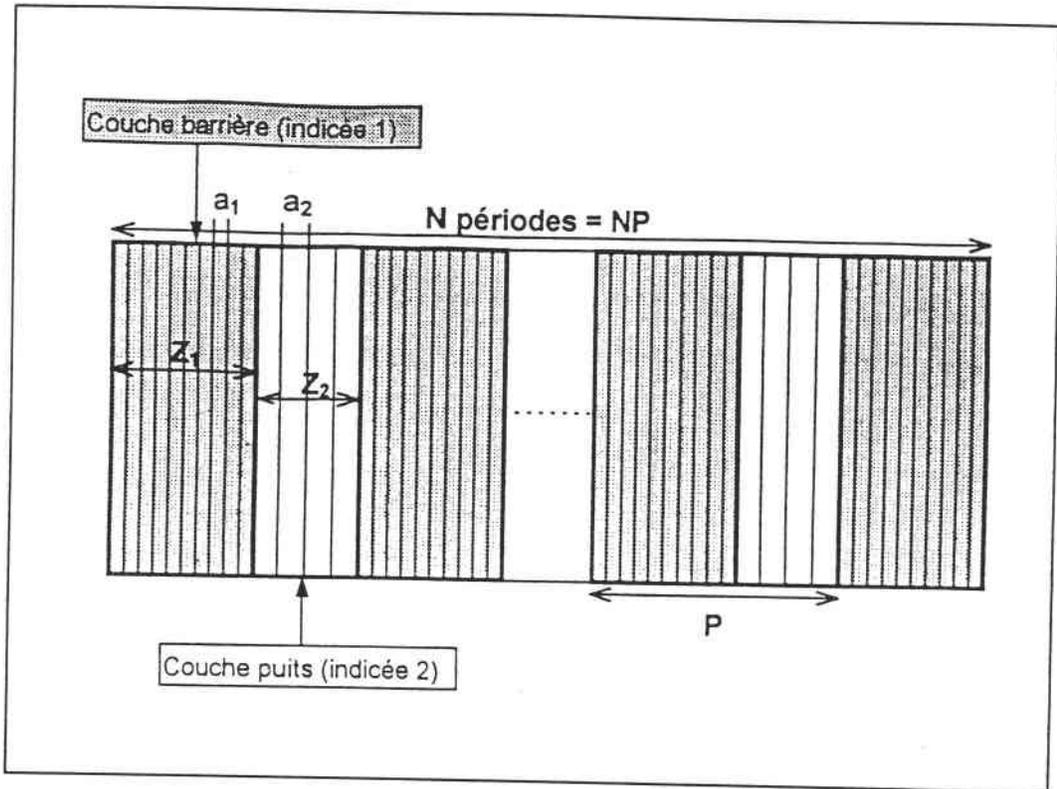


Figure A-III-2 : Profil structural d'un système multi-puits quantiques.

Dans l'étude de la diffraction des RX par une hétérostructure périodique que constitue une structure à multi-puits quantiques, il y aura lieu de tenir compte (Fig. A-III-2) :

- de la périodicité de la structure cristalline de chaque couche, de paramètres de maille respectifs a_1 pour les couches barrières et a_2 pour les couches puits ;
- de la périodicité de l'hétérostructure, de période $P = Z_1 + Z_2$ où Z_1 (Z_2) est l'épaisseur de la couche barrière (puits).

En posant

$$u = \frac{2 \sin \theta}{\lambda}, \quad \text{Eq.(A-III-2)}$$

le calcul de l'intensité diffractée par la structure à multi-puits quantiques, en fonction de θ , conduit à l'expression :

$$I(u) = N^2 \left| \sum_{k=-\infty}^{+\infty} \sin c \left[\pi NP \left(u - \frac{k}{P} \right) \right] \sum_{k'=-\infty}^{+\infty} \left(C_{kk'}^1 + C_{kk'}^2 \right) \right|^2 \quad \text{Eq.(A-III-3-a)}$$

$$\text{avec } C_{kk'}^i = \frac{Z_i}{a_i} \sin c \left[\pi Z_i \left(\frac{k}{P} - \frac{k'}{a_i} \right) \right]. \quad \text{Eq.(A-III-3-b)}$$

N est le nombre de périodes de l'hétérostructure et $\sin c(\alpha) = \frac{\sin \alpha}{\alpha}$.

Dans les équations A-III, k' est l'ordre de diffraction du matériau. Il est associé à la périodicité de la structure cristalline et correspond à l'entier n dans la formulation de la loi de Bragg (Eq. A-III-1). Dans le cas des diffractogrammes obtenus sur nos échantillons (Fig. VI-9

du Chap. VI), sa valeur est 4. Pour l'analyse de tels diffractogrammes, l'équation A-III-3-a se réduit à :

$$I(u) = N^2 \left| \sum_{k=-\infty}^{+\infty} \left(C_{k4}^1 + C_{k4}^2 \right) \operatorname{sinc} \left[\pi NP \left(u - \frac{k}{P} \right) \right] \right|^2 \quad \text{Eq.(A-III-4)}$$

Les fonctions $\operatorname{sinc} \left[\pi NP \left(u - \frac{k}{P} \right) \right]$ correspondent aux pics successifs du diffractogramme. k est l'ordre de diffraction de chacun des pics. Il est associé à la périodicité de l'hétérostructure.

En fonction de u la largeur des pics, $2/NP$, est inversement proportionnelle à l'épaisseur totale de l'hétérostructure. Leur espacement, $1/P$, donne directement accès à sa période réelle. Le diffractogramme est modulé par $\left(C_{k4}^1 + C_{k4}^2 \right)$. Chacun des termes de modulation prend, au sommet de chaque pic (c.a.d avec $k/P = u$), la valeur :

$$C_s^i = \frac{Z_i}{a_i} \operatorname{sinc} \left[\pi Z_i \left(u - \frac{4}{a_i} \right) \right] \quad \text{Eq.(A-III-5)}$$

Ces termes sont maximum pour $u = 4/a_i$ et ont une largeur de $2/Z_i$. Ils dépendent donc de l'épaisseur Z_i et du paramètre de maille a_i réel de la couche i .

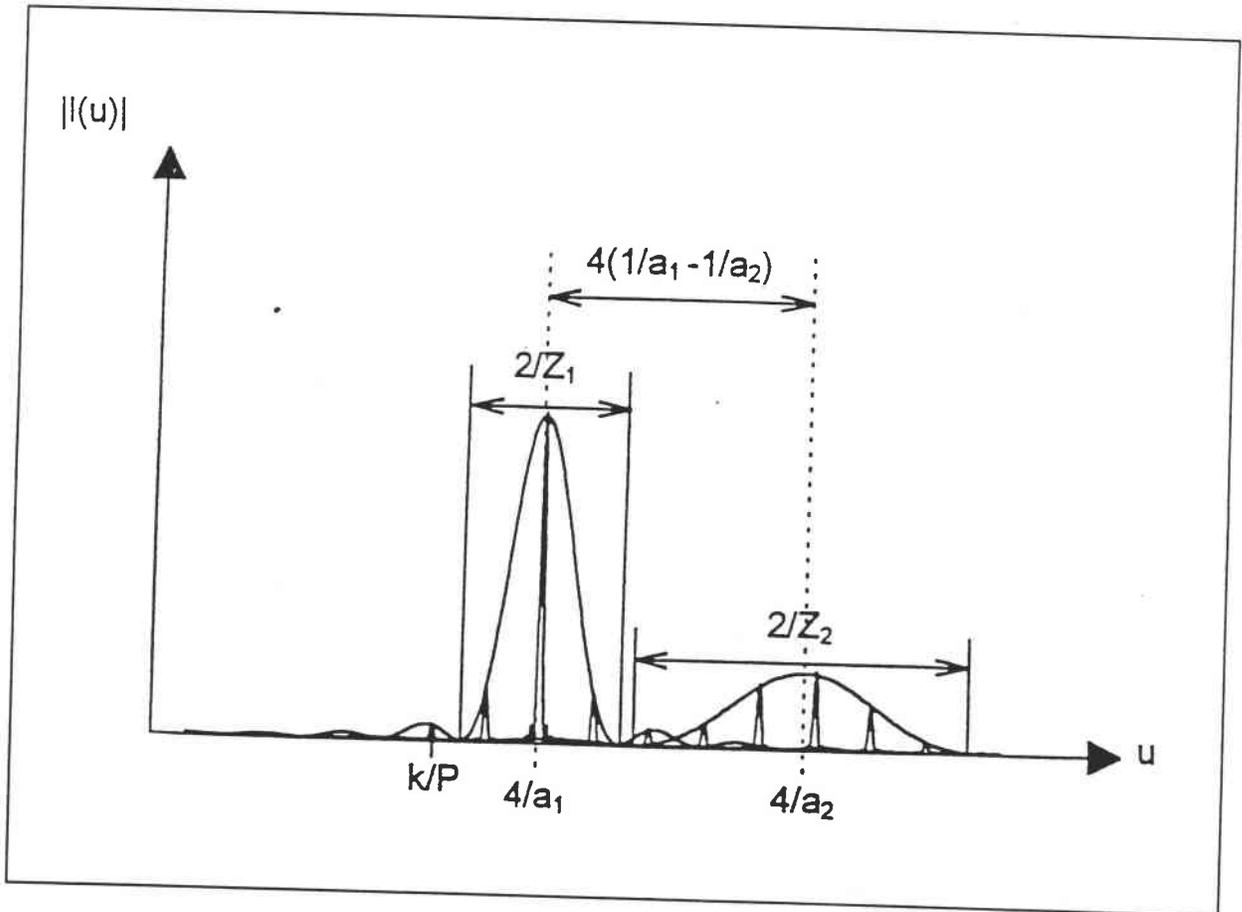


Figure A-III-3 : Diffractogramme à l'ordre 4 d'une hétérostructure périodique comportant une alternance de couches d'épaisseurs respectives z_1 et z_2 et de paramètres de mailles respectifs a_1 et a_2 .

La Fig. A-III-3 montre un exemple de simulation dans le cas où la différence entre les paramètres de maille a_1 et a_2 est suffisamment importante pour séparer clairement les deux enveloppes.

Dans le cas de nos échantillons, nominalement en accord de maille, les diffractogrammes ne comportent pas deux groupes de pics séparés. Néanmoins, la dissymétrie d'ensemble des diagrammes (Fig. VI-9 du Chap. VI) par rapport au pic du substrat indique un désaccord de maille réel, confirmé par la procédure d'ajustage numérique.