



Titre: Modélisation de photodétecteurs infrarouges à boîtes quantiques
Title:

Auteur: Philippe Cauchon-Voyer
Author:

Date: 2005

Type: Mémoire ou thèse / Dissertation or Thesis

Référence: Cauchon-Voyer, P. (2005). Modélisation de photodétecteurs infrarouges à boîtes quantiques [Mémoire de maîtrise, École Polytechnique de Montréal]. PolyPublie.
Citation: <https://publications.polymtl.ca/7351/>

 **Document en libre accès dans PolyPublie**
Open Access document in PolyPublie

URL de PolyPublie: <https://publications.polymtl.ca/7351/>
PolyPublie URL:

Directeurs de recherche: Rémo A. Masut, & Patrick Desjardins
Advisors:

Programme: Non spécifié
Program:

UNIVERSITÉ DE MONTRÉAL

MODÉLISATION DE PHOTODÉTECTEURS
INFRAROUGES À BOÎTES QUANTIQUES

PHILIPPE CAUCHON-VOYER
DÉPARTEMENT DE GÉNIE PHYSIQUE
ÉCOLE POLYTECHNIQUE DE MONTRÉAL

MÉMOIRE PRÉSENTÉ EN VUE DE L'OBTENTION
DU DIPLÔME DE MAÎTRISE ÈS SCIENCES APPLIQUÉES
(GÉNIE PHYSIQUE)
JANVIER 2005

© Philippe Cauchon-Voyer, 2005.



Library and
Archives Canada

Bibliothèque et
Archives Canada

Published Heritage
Branch

Direction du
Patrimoine de l'édition

395 Wellington Street
Ottawa ON K1A 0N4
Canada

395, rue Wellington
Ottawa ON K1A 0N4
Canada

Your file Votre référence

ISBN: 0-494-01295-1

Our file Notre référence

ISBN: 0-494-01295-1

NOTICE:

The author has granted a non-exclusive license allowing Library and Archives Canada to reproduce, publish, archive, preserve, conserve, communicate to the public by telecommunication or on the Internet, loan, distribute and sell theses worldwide, for commercial or non-commercial purposes, in microform, paper, electronic and/or any other formats.

The author retains copyright ownership and moral rights in this thesis. Neither the thesis nor substantial extracts from it may be printed or otherwise reproduced without the author's permission.

AVIS:

L'auteur a accordé une licence non exclusive permettant à la Bibliothèque et Archives Canada de reproduire, publier, archiver, sauvegarder, conserver, transmettre au public par télécommunication ou par l'Internet, prêter, distribuer et vendre des thèses partout dans le monde, à des fins commerciales ou autres, sur support microforme, papier, électronique et/ou autres formats.

L'auteur conserve la propriété du droit d'auteur et des droits moraux qui protègent cette thèse. Ni la thèse ni des extraits substantiels de celle-ci ne doivent être imprimés ou autrement reproduits sans son autorisation.

In compliance with the Canadian Privacy Act some supporting forms may have been removed from this thesis.

Conformément à la loi canadienne sur la protection de la vie privée, quelques formulaires secondaires ont été enlevés de cette thèse.

While these forms may be included in the document page count, their removal does not represent any loss of content from the thesis.

Bien que ces formulaires aient inclus dans la pagination, il n'y aura aucun contenu manquant.


Canada

UNIVERSITÉ DE MONTRÉAL

ÉCOLE POLYTECHNIQUE DE MONTRÉAL

Ce mémoire intitulé :

MODÉLISATION DE PHOTODÉTECTEURS
INFRAROUGES À BOÎTES QUANTIQUES

présenté par : CAUCHON-VOYER Philippe

en vue de l'obtention du diplôme de : Maîtrise ès Sciences Appliquées

a été dûment accepté par le jury d'examen constitué de :

M. YELON Arthur, Ph. D., président

M. MASUT Remo A., Ph. D., membre et directeur de recherche

M. DESJARDINS Patrick, Ph. D., membre et codirecteur de recherche

M. MÉNARD David, Ph. D., membre

Remerciements

Je tiens d'abord à remercier chaleureusement mes deux directeurs de recherche, Remo et Patrick, de m'avoir accordé leur confiance et de m'avoir donné l'opportunité de travailler avec eux. Je les remercie aussi pour le temps qu'ils ont consacré aux nombreuses discussions, scientifiques ou non, qui m'ont permis de progresser dans mon travail de recherche et dans mon cheminement personnel.

Je remercie aussi les étudiants de l'unité de recherche avec qui j'ai travaillé et discuté durant de nombreuses réunions, Dominic, Louis-François et Stéphane, ainsi que le chercheur Nikolay. Je remercie mes anciens collègues de bureau avec qui je partage d'excellents souvenirs dans le bunker du B-619, Alexis, Bruno, Janik, Jean-Philippe, Louis-Philippe, Sophie et Xavier et mes nouveaux collègues qui m'ont accueilli dans le spacieux bureau 4043 du nouveau pavillon, Alexandre, Barnim, Étienne, Jean, Sébastien et Steve.

Je remercie finalement tous ceux qui m'ont encouragé durant ces années d'étude. En particulier, mes parents dont le support a été vital depuis mon enfance et ma sœur que j'encourage à mon tour pour le projet de maîtrise qu'elle entreprend. Merci aussi à mes deux colocataires, Micaël et Yann et à mes amis Étienne, François, Frédéric, Marie-Hélène, Martin, Mathieu, Maxym, Nicolas, Olivier, Sophea, Virginie et Claudiane qui m'ont encouragé tout au long de mon travail de recherche.

Résumé

Au cours de la dernière décennie, la communauté scientifique a manifesté un intérêt grandissant pour la modélisation et la fabrication de photodétecteurs infrarouges à boîtes quantiques. Cet intérêt s'explique par le fait que ces dispositifs possèdent des caractéristiques très intéressantes par rapport aux anciennes générations de photodétecteurs. Par exemple, des mesures expérimentales démontrent que contrairement aux photodétecteurs à puits quantiques, ces dispositifs absorbent significativement le rayonnement infrarouge d'incidence normale. Aussi, il est prévu théoriquement que ces dispositifs permettent la détection du rayonnement infrarouge à plus haute température que la majorité des dispositifs déjà existants. Tous ces avantages font du photodétecteur à boîtes quantiques un candidat très prometteur pour remplacer à moyen ou à long terme les anciennes générations de dispositifs d'imagerie infrarouge.

L'objectif principal de ce travail consiste à développer un modèle pour déterminer les propriétés électriques et optiques de ce type de dispositif. Nous avons choisi de concentrer notre étude sur les photodétecteurs infrarouges à boîtes quantiques construits dans le système InAs/InP, parce que cette classe de dispositifs reste pour l'instant relativement peu étudiée théoriquement. L'originalité de notre approche consiste à séparer le travail de modélisation en trois parties. Cette approche permet de réduire la complexité du problème et de bien marquer les connexions qui existent entre les propriétés quantiques des états électroniques liés aux boîtes et les propriétés macroscopiques des photodétecteurs.

Tout au long de ce travail, nous avons aussi exploité les conséquences physiques

d'avoir des boîtes quantiques très aplaties en imposant la forme cylindrique avec une hauteur beaucoup plus petite que le diamètre. Cette géométrie permet de modéliser simplement les observations expérimentales sur les propriétés de confinement quantique et d'absorption infrarouge des boîtes et simplifie le développement mathématique de nos modèles. En effet, cette géométrie permet d'expliquer de nombreuses observations expérimentales comme la forme du spectre d'absorption infrarouge et de celui des états liés.

La modélisation présentée dans ce travail se sépare en trois parties, dans le souci d'aider à la conception de dispositifs et à l'interprétation des mesures expérimentales. La première partie consiste à effectuer la modélisation des propriétés quantiques des états liés aux boîtes. Ce calcul, tout en restant simple, sert à donner la description la plus fidèle possible des états électroniques liés aux boîtes. À partir de ces résultats, nous établissons un modèle pour évaluer le taux d'émission d'électrons par boîte quantique en fonction du flux de rayonnement infrarouge incident, de la température du dispositif et du champ électrique appliqué à l'intérieur du dispositif. Ces résultats sont ensuite intégrés dans le modèle de dispositif afin d'évaluer les propriétés électriques et optiques de photodétecteurs à boîtes quantiques réalistes. Ce modèle est finalement utilisé pour déterminer trois propriétés fondamentales des photodétecteurs étudiés : le rapport signal sur bruit du dispositif, la sensibilité du dispositif à détecter une variation de température des objets observés et la température maximale à laquelle le dispositif peut fonctionner. Nous démontrons que les photodétecteurs à boîtes quantiques, sans nécessairement résoudre tous les problèmes des autres classes de photodétecteurs, représentent quand même une alternative intéressante à moyen terme aux photodétecteurs infrarouges traditionnels, principalement par leur capacité à fonctionner de façon satisfaisante à plus haute température et à détecter le rayonnement infrarouge d'incidence normale.

Abstract

During the past decade, the scientific community showed a growing interest for the modeling and the construction of quantum dot infrared photodetectors. This interest is justified because these devices show many interesting characteristics compared to the older generations of photodetectors. For example, experimental measurements show that, contrary to the quantum well infrared photodetectors, these devices can absorb significant amount of normally incident infrared radiation. It is also predicted theoretically that these devices will allow the detection of infrared radiation at higher temperature than the majority of existing devices. The combination of these advantages suggests that the quantum dot infrared photodetector is a very promising medium or long term candidate to replace the older generations of infrared imagery devices.

The objective of this work is to develop a model to determine the electric and optical properties of this type of device. We chose to study the quantum dot infrared photodetectors built in the InAs/InP system, because this system has been investigated theoretically relatively little. The novelty of our approach is that we separate the modelling into three parts. This reduces the complexity of the problem and permits us to emphasize connections between the quantum properties of the electronic bound states of the dots and the macroscopic properties of the photodetectors.

Throughout the work, we have exploited, as much as possible, the physical consequences of having thin quantum dots, by assuming a cylindrical shape with a height much smaller than the diameter. This simplified geometry permits us to explain experimental

observations such as the form of the absorption spectrum and of the bound state energies, in a straightforward way. This assumed geometry also simplifies the mathematical development of our models.

We have divided the photodetector model presented in this work into three parts, with the intention of aiding the design of new devices and to facilitate the interpretation of experimental measurements. The first part consists of a quantum model for the bound states of the dots. This calculation, while remaining as simple as possible, is used to give an adequate description of these states. From these results, we establish a model to evaluate the electron emission rate per quantum dot as a function of the flow of incident infrared radiation, of the temperature of the device, and of the applied electric field. These results are then used in the device model, to evaluate the electric and optical properties of realistic quantum dot infrared photodetectors. The model is used to determine three fundamental properties of the photodetector : the signal-to-noise ratio of the device, the sensitivity of the device to a variation in temperature of observed objects, and the maximum temperature at which the device can properly work. We show that the quantum dot infrared photodetectors, without necessarily solving all the problems inherent to the other classes of photodetectors, nevertheless represent an interesting alternative to traditional infrared photodetectors, mainly because of their ability to work satisfactorily at higher temperature than traditional detectors and to detect normally incident infrared radiation.

Table des matières

Remerciements	iv
Résumé	v
Abstract	vii
Table des matières	ix
Liste des figures	xiii
Liste des annexes	xvi
Chapitre 1 Introduction	1
1.1 L'imagerie infrarouge	1
1.1.1 La détection du rayonnement infrarouge terrestre	1
1.1.2 Les photodétecteurs infrarouges classiques	2
1.1.3 Les photodétecteurs infrarouges à puits quantiques	3
1.2 Les photodétecteurs infrarouges à boîtes quantiques	4
1.2.1 Description générale	4
1.2.2 Objectifs du travail présenté	5
1.3 Présentation d'un photodétecteur infrarouge à boîtes quantiques	6
1.3.1 Division en régions	6
1.3.2 La région d'absorption optique	7
1.3.3 Choix des matériaux	8
Chapitre 2 Revue de la littérature	10
2.1 La modélisation des propriétés électroniques des boîtes quantiques	10

2.1.1	Méthode de la fonction enveloppe	10
2.1.2	Méthode $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$	11
2.1.3	Méthode du pseudopotentiel empirique	12
2.1.4	Méthode des liaisons fortes	13
2.2	La simulation des photodétecteurs à boîtes quantiques	14
2.2.1	Les premiers modèles	15
2.2.2	Les simulations de type Monte Carlo	16
2.2.3	L'approche par étages	17
2.3	Démarche et cadre méthodologique	17
2.3.1	Modélisation et hypothèses générales	17
2.3.2	Modèle de simulation	18
Chapitre 3	Propriétés électroniques d'une boîte quantique	20
3.1	Étude des paramètres géométriques	20
3.1.1	Choix de la forme des boîtes quantiques	21
3.1.2	La fonction de forme	21
3.1.3	Principales caractéristiques des boîtes quantiques	22
3.2	Modélisation des propriétés électroniques d'une boîte quantique	23
3.2.1	L'équation de la fonction enveloppe	23
3.2.2	L'effet d'une couche de mouillage	24
3.2.3	Approximation du potentiel séparable	25
3.2.4	Calcul des états électroniques	26
3.3	L'état fondamental d'une boîte quantique	29
3.3.1	Calcul de la fonction enveloppe	29
3.3.2	L'effet de la barrière de Coulomb sur l'état fondamental	30
3.4	Spectre des états liés	33
Chapitre 4	Évaluation de l'émission d'électrons	36

4.1	Émission d'électrons par absorption de rayonnement infrarouge	37
4.1.1	Approximation dipolaire électrique	38
4.1.2	Hamiltonien d'interaction avec l'onde électromagnétique	39
4.1.3	Probabilité de transition entre l'état fondamental et le continuum .	40
4.1.4	Calcul du coefficient d'absorption optique	44
4.1.5	Présentation des résultats	47
4.2	Émission d'électrons par effet tunnel	49
4.2.1	Formalisation du problème	51
4.2.2	Les états métastables dans un puits soumis à un champ électrique	51
4.2.3	Détermination des états métastables d'un hamiltonien	52
4.2.4	Les états métastable d'une boîte quantique soumise à un champ électrique	54
4.2.5	Le calcul de l'énergie des états métastables	57
4.2.6	Présentation des résultats	59
4.3	Émission thermoélectronique	63
4.3.1	Émission à l'interface entre deux semi-conducteurs	63
4.3.2	Application d'un champ électrique	65
4.3.3	Émission par une série de puits quantiques minces	67
4.3.4	Émission par un plan de boîtes quantiques	70
4.4	Émission totale par une boîte quantique	71
4.4.1	Le courant d'obscurité	72
4.4.2	Le photocourant	72
4.4.3	L'émission totale	73
4.4.4	Le rapport caractéristique r	74
Chapitre 5	Simulation des photodétecteurs	75
5.1	Évaluation des propriétés du dispositif	75

5.1.1	Le rapport signal sur bruit	75
5.1.2	Division du dispositif en tranches	76
5.1.3	Évaluation de la probabilité de désexcitation	77
5.1.4	Estimation du rapport signal sur bruit	78
5.2	L'émission par impact	79
5.2.1	Comparaison avec le phénomène d'ionisation par impact	80
5.2.2	Modification apportées au modèle de dispositif	81
5.3	Étude d'un photodétecteur complet	82
5.3.1	Description du système optique	82
5.3.2	Application à un photodétecteur réel	84
Chapitre 6	Conclusion	89
6.1	La géométrie des boîtes quantiques	90
6.1.1	L'effet de la géométrie sur les états électroniques liés	90
6.1.2	L'effet de la géométrie sur l'absorption optique	91
6.2	Perspectives	93
6.2.1	Le travail de modélisation	93
6.2.2	La fabrication de dispositifs	94
Bibliographie	95
Annexes	100

Liste des figures

Figure 1.1	Coefficient de transmission du rayonnement infrarouge	2
Figure 1.2	Représentation schématique d'un photodétecteur infrarouge à boîtes quantiques	6
Figure 1.3	Représentation schématique en coupe des matériaux d'un plan de boîtes quantiques	8
Figure 2.1	Schéma de la méthodologie choisie	18
Figure 3.1	Spectre des états liés à l'intérieur d'une boîte quantique	35
Figure 4.1	L'absorption par une boîte quantique cylindrique	47
Figure 4.2	Dépendance spectrale de l'absorption par une boîte quantique cylin- drique	49
Figure 4.3	Taux d'émission d'électrons par une boîte quantique cylindrique causé par le rayonnement d'un corps noir	49
Figure 4.4	Vue schématique en coupe du potentiel effectif d'une boîte quantique soumise à un champ électrique et de la fonction enveloppe de son état métastable fondamental	50
Figure 4.5	Dispositif soumis à un champ électrique séparé en trois tranches . . .	55
Figure 4.6	La partie réelle et imaginaire de l'énergie complexe du premier état métastable dans une boîte quantique	60
Figure 4.7	La forme de la fonction enveloppe de l'état fondamental pour un champ électrique de 10^5 V/cm	61

Figure 4.8	Émission par effet tunnel pour un électron dans l'état fondamental d'un puits	62
Figure 4.9	Minimum de la bande de conduction dans une hétérojonction sans polarisation	64
Figure 4.10	Minimum de la bande de conduction dans une hétérojonction polarisée	66
Figure 4.11	Vue en coupe du minimum de la bande de conduction dans une série de puits quantiques à l'équilibre avec hypothèse de passage abrupt entre les régions	67
Figure 4.12	Émission d'électrons par l'effet thermoélectronique	71
Figure 5.1	Bilan des courants dans une couche du dispositif	77
Figure 5.2	Dégradation des propriétés du dispositif	80
Figure 5.3	Vue schématique du système optique	83
Figure 5.4	Influence de la température du corps noir observé sur le rapport r . .	85
Figure 5.5	Dégradation des propriétés du dispositif à cause de l'émission par effet tunnel en fonction de sa température	86
Figure 5.6	Dégradation des propriétés du dispositif causé par l'émission par effet tunnel en fonction du champ électrique appliqué	87
Figure A.1	Structure de bande de l'arséniure de gallium (GaAs)	104
Figure A.2	Vue en coupe du minimum de la bande de conduction en fonction de la position dans un puits quantique de largeur $2h$	108
Figure B.1	Largeur effective du puits quantique pour un rapport $\frac{m_B}{m_A} = 2$	115
Figure D.1	Le maillage utilisé pour déterminer l'état fondamental d'une boîte quantique	121
Figure D.2	L'écart énergétique entre le calcul pour le potentiel réel et le potentiel modifié	123
Figure D.3	Comparaison entre les deux méthodes de calcul des états propres . . .	123

Figure E.1 Les deux solutions linéairement indépendantes de l'équation de Airy . 126

Liste des annexes

Annexe A	La méthode de la fonction enveloppe	100
Annexe B	L'approximation d'une masse effective constante	112
Annexe C	Influence de la couche de mouillage	116
Annexe D	Validation de l'hypothèse du potentiel séparable	118
Annexe E	Les fonctions de Airy	124

Chapitre 1

Introduction

1.1 L'imagerie infrarouge

L'imagerie infrarouge représente une activité extrêmement importante pour notre société, en particulier dans les domaines scientifique, industriel et militaire. En effet, il est devenu courant aujourd'hui de se fier à des dispositifs d'imagerie infrarouge pour des applications aussi variées que l'observation de la Terre, l'astronomie, le contrôle de qualité des matériaux, la télédétection et le contrôle aérien.

1.1.1 La détection du rayonnement infrarouge terrestre

Le défi de l'imagerie infrarouge consiste à numériser l'empreinte thermique d'un objet situé à une certaine distance du photodétecteur. Or, l'atmosphère terrestre absorbe considérablement le rayonnement infrarouge et réduit par conséquent le signal infrarouge reçu à une certaine distance de l'objet observé.

Par exemple, la figure 1.1 montre que le coefficient de transmission du signal infrarouge dépend fortement de la longueur d'onde du signal reçu et qu'il n'existe que deux petites fenêtres permettant la transmission du rayonnement infrarouge sur de grandes distances. Ces deux fenêtres correspondent approximativement à des longueurs d'onde entre 3 et 5 μm (*MWIR* d'après son acronyme anglais *mid wavelength infrared*) et entre 8 et 12 μm (*LWIR* d'après son acronyme anglais *long wavelength infrared*).

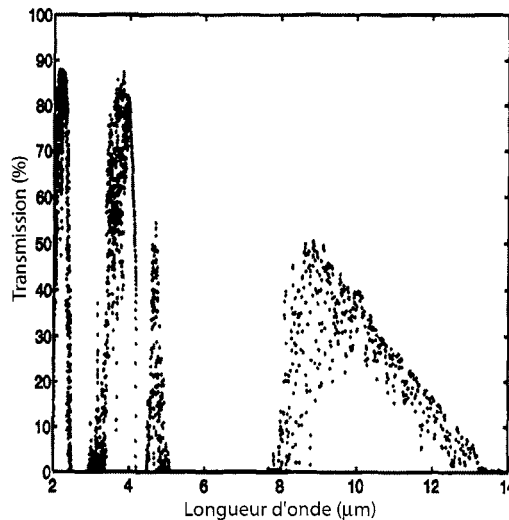


FIG. 1.1 – Coefficient de transmission calculé à travers 5 km d'atmosphère durant l'été, en région agricole et à latitude moyenne [1]

Habituellement, un photodétecteur infrarouge conçu pour effectuer de l'imagerie possède son maximum de détectivité à l'intérieur d'au moins une de ces deux fenêtres, de façon à maximiser la distance à laquelle un objet peut être observé.

1.1.2 Les photodétecteurs infrarouges classiques

Les photodétecteurs infrarouges sont constitués habituellement de trois parties principales. D'abord, un système optique focalise l'image à observer sur un plan. Une matrice de détecteurs sensibles à la radiation infrarouge reçoit ce signal focalisé et le transforme en un signal électronique, qui est à son tour lu par un système électronique d'acquisition de données. Dans ce mémoire, nous travaillons surtout sur la matrice de détecteurs, que nous appellerons par la suite simplement le *photodétecteur* lorsque le contexte est clair.

Dans le marché actuel, il existe une grande variété de types de photodétecteurs infrarouges, la plupart étant construits à partir de semi-conducteurs de type II-VI, par exemple de HgCdTe. La première génération de ces photodétecteurs a été construite vers la fin des

années 1950 [2]. Il s'agit du type de photodétecteur qui historiquement a été le plus utilisé dans les application militaires et civiles [3].

Ces dispositifs possèdent de nombreux avantages. Par exemple, il est possible de choisir l'énergie de la bande interdite du composé ternaire sur une grande plage de valeurs (entre 1,5 eV pour le CdTe et 0,1 eV pour le $\text{Hg}_{0.8}\text{Cd}_{0.2}\text{Te}$), ce qui permet d'ajuster le pic d'absorption pour plusieurs longueurs d'ondes. De plus, il est intéressant de noter que la différence entre le paramètre de maille du CdTe et du HgTe est très faible (de l'ordre de 0,3%), ce qui simplifie relativement la fabrication par épitaxie de ces dispositifs.

Ces dispositifs possèdent par contre quelques inconvénients notables [3]. D'abord, il est difficile d'assurer sur de grandes surfaces l'uniformité de la composition des couches déposées. De plus, les couches déposées sont relativement instables chimiquement et des précautions supplémentaires doivent être prises afin d'éviter qu'elles s'oxydent ou qu'elles réagissent avec des métaux environnants. Les couches déposées sont assez fragiles et doivent aussi être protégées des dommages mécaniques. Toutes ces difficultés font que ce type de dispositif coûte relativement cher à produire. Malgré toutes ces contraintes techniques, ce sont les dispositifs les plus utilisés à l'heure actuelle, en particulier à cause de leur excellente détectivité et sensibilité [3].

1.1.3 Les photodétecteurs infrarouges à puits quantiques

Les premiers photodétecteurs à puits quantiques (*QWIP* d'après l'acronyme anglais *Quantum Well Infrared Photodetector*) ont été proposés dans le but d'offrir un procédé de fabrication plus simple et d'assurer une meilleure uniformité de la région active du photodétecteur. Par contre, à cause de la symétrie dans le plan des puits quantiques, l'absorption du rayonnement d'incidence perpendiculaire au photodétecteur est pratiquement nulle pour des dispositifs dopés n [1]. Cette limitation est surtout problématique dans le cas de photodétecteurs intégrés dans un système optique de focalisation (*FPA*, de l'acro-

nyme anglais *Focal Plane Array*), puisque dans cette situation, la lumière incidente pénètre perpendiculairement au photodétecteur. Une façon astucieuse d'augmenter la probabilité d'interaction du photodétecteur avec un photon est d'inclure un minuscule réseau à l'intérieur de chaque pixel, afin de diffuser la lumière d'incidence normale selon plusieurs directions. Cette opération augmente de façon significative le coût unitaire d'un dispositif [1].

Un deuxième problème lié à ce type de dispositif est que le rapport signal sur bruit diminue très rapidement à mesure que la température est augmentée. Par conséquent, ces dispositifs ne sont avantageux par rapport aux photodétecteurs de type HgCdTe qu'à de très basses températures [4] (environ 70 K ou moins). Comme cette température est plus basse que celle de l'azote liquide, alors ces dispositifs nécessitent un système de refroidissement complexe et coûteux.

1.2 Les photodétecteurs infrarouges à boîtes quantiques

1.2.1 Description générale

Les *photodétecteurs à boîtes quantiques*, ou *QDIP* d'après l'acronyme anglais (*Quantum Dot Infrared Photodetector*), ont été étudiés théoriquement pour la première fois en 1996 par Ryzhii [5, 6]. Cette classe de dispositifs a été proposée afin de résoudre les problèmes inhérents aux photodétecteurs à puits quantiques, soit de réduire à haute température le courant d'obscurité (le courant circulant dans le dispositif lorsqu'il n'est pas soumis à l'illumination infrarouge) et de permettre l'absorption du rayonnement infrarouge d'incidence normale en éliminant les règles de sélection inhérentes à la symétrie plane des photodétecteurs à puits quantiques.

Les résultats expérimentaux les plus récents indiquent que les photodétecteurs à boîtes quantiques sont effectivement beaucoup moins sensibles aux variations de température que ceux à puits quantiques, principalement à cause de la longue durée de vie des porteurs

dans le dispositif et de la faiblesse des interactions entre phonons et électrons [7] et qu'ils ont la capacité d'absorber le rayonnement d'incidence normale [5].

Cependant, le problème majeur demeure le contrôle du courant d'obscurité, qui est encore trop important pour permettre de rivaliser avec les autres types de photodétecteurs [8]. Il est intéressant de noter que de nombreux progrès ont été réalisés dans les dernières années. Récemment, un photodétecteur à boîtes quantiques de type InAs/GaAs présentant un courant d'obscurité de 28 nA/cm^2 pour $T = 78 \text{ K}$ a été présenté [9] ; cette valeur est comparable aux courants d'obscurité mesurés pour des photodétecteurs à puits quantiques à des températures similaires.

1.2.2 Objectifs du travail présenté

Le but de ce travail de recherche consiste à déterminer certaines propriétés électriques et optiques des photodétecteurs infrarouges à boîtes quantiques construits dans le système InAs/InP, c'est-à-dire constitué par des boîtes de InAs déposées sur un substrat de InP. Pour atteindre ce but, nous avons choisi de développer un modèle séparé en trois sections distinctes.

D'abord, la modélisation physique des états électroniques des boîtes quantiques est présentée au chapitre 3. À partir du modèle développé, nous établissons au chapitre 4 une méthode de calcul pour évaluer le nombre d'électrons émis par unité de temps par une boîte quantique de taille moyenne, en fonction de divers paramètres dont le flux de rayonnement infrarouge incident, la température du dispositif et le champ électrique appliqué à l'intérieur du dispositif. Ces résultats sont finalement utilisés au chapitre 5 à l'intérieur d'un modèle de dispositif simple pour évaluer par simulation les propriétés électriques de photodétecteurs à boîtes quantiques réalistes.

Cette division en trois sections nous permet de bien marquer les connexions qui existent entre les propriétés quantiques des états électroniques liés aux boîtes quantiques et les pro-

priétés macroscopiques des photodétecteurs. Tout au long du développement des modèles présentés dans ce travail, nous avons travaillé pour que la description des phénomènes physiques reste la plus simple possible, tout en s'assurant qu'elle soit suffisamment complète pour ne pas masquer de phénomènes physiques importants.

1.3 Présentation d'un photodétecteur infrarouge à boîtes quantiques

1.3.1 Division en régions

Les photodétecteurs infrarouges à boîtes quantiques étudiés dans ce mémoire comprennent trois régions principales, tel que présenté à la figure 1.2 :

- l'électrode d'émission (dopée n^+) ;
- la région d'absorption optique (dopée légèrement n) ;
- l'électrode de collection (dopée n^+).

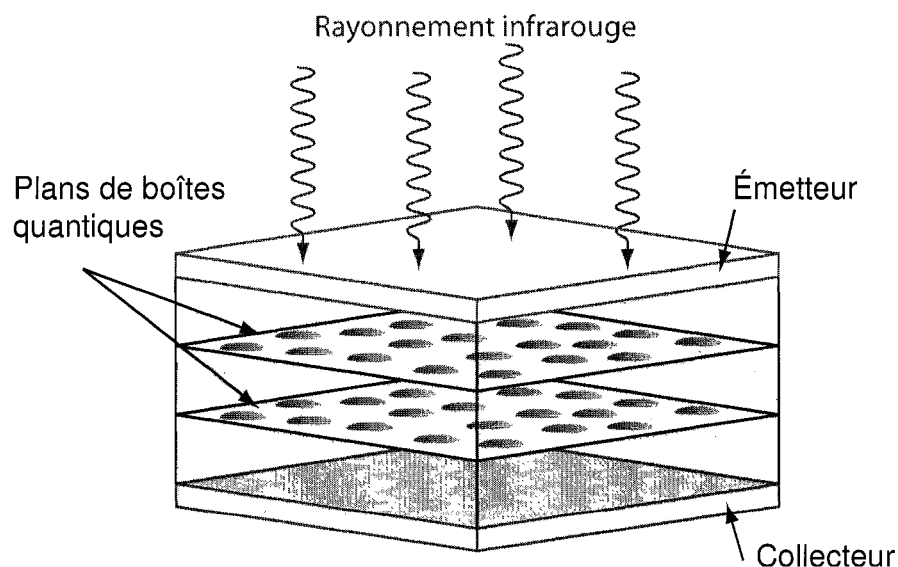


FIG. 1.2 – Représentation schématique d'un photodétecteur infrarouge à boîtes quantiques

Dans ce type de photodétecteur, les deux électrodes sont constituées d'une couche de semi-conducteur fortement dopée. Ces électrodes servent à assurer un bon contact entre la région d'absorption et le circuit électronique externe.

La structure active de détection du rayonnement infrarouge est située dans la région d'absorption optique. Cette région incorpore des successions de plans de boîtes quantiques qui servent à absorber l'énergie du rayonnement infrarouge et qui effectuent sa conversion en photoélectrons.

1.3.2 La région d'absorption optique

Nous traitons dans ce mémoire de boîtes quantiques construites par ce que nous appelons le *mode de croissance Stranski-Krastanov*. Ce mode de croissance est présenté en détails dans divers travaux (voir en particulier [10] pour le système InAs/InP). Nous présentons ici un résumé synthétique simplifié.

La fabrication de la zone d'absorption optique du dispositif s'effectue par la croissance successive de couches comprenant chacune un plan de boîtes quantiques. Pour construire un plan de boîtes quantiques, nous choisissons deux matériaux (notés A et B) de façon à ce que leurs paramètres de maille soient assez différents. Une mince couche du matériau A est déposée sur la couche précédente, formée du matériau B . Une fois une certaine épaisseur critique atteinte, les déformations mécaniques dans la couche déposée deviennent si importantes que la couche se réorganise en un archipel de petites boîtes déposées sur une *couche de mouillage*. Cette réorganisation entraîne une relaxation des contraintes par un réarrangement de la structure du matériau et minimise l'énergie de déformation dans le matériau. Ces plans sont finalement séparés par une *couche d'encapsulation*, formée du matériau B , tel qu'illustré à la figure 1.3. L'épaisseur totale de la couche d'encapsulation est ajustée afin de laisser une distance prédéfinie entre deux plans successifs de boîtes quantiques. Ce dépôt est répété pour chacune des couches formant la région d'absorption

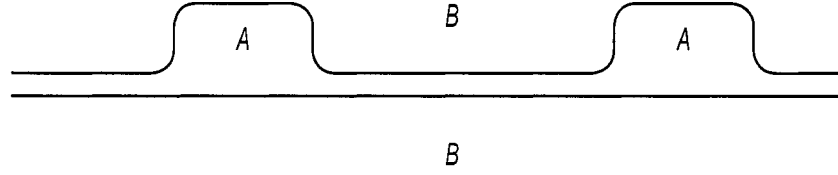


FIG. 1.3 – Représentation schématique en coupe des matériaux d'un plan de boîtes quantiques (A), présentant aussi la couche de mouillage (A) et la couche d'encapsulation (B)

optique.

Tout au long de la construction de cette région, nous dopons les matériaux A et B pour qu'en moyenne nous trouvions deux électrons dans l'état fondamental de chaque point quantique, soit un électron par état de spin. Si la densité de boîtes quantiques dans un plan est de l'ordre de 10^{10} cm^{-2} et que l'épaisseur d'une couche est de l'ordre de 100 nm , alors le dopage requis est de l'ordre de $2 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$. Comme un tel dopage est beaucoup plus faible que le nombre d'états de conduction $N_c = 4 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ pour l'InP à 50 K [11], nous pouvons considérer que le semi-conducteur n'est pas dégénéré.

Enfin, pour que le dispositif ait des propriétés électroniques intéressantes, nous supposons que nous avons la relation $E_{BV0} < E_{A0} < E_{B0}$, où E_{n0} et E_{nV0} représentent respectivement le minimum de la bande de conduction et le maximum de la bande de valence du matériau n . Nous appelons finalement $E_{B0} - E_{A0}$ la *profondeur du puits de potentiel*.

1.3.3 Choix des matériaux

Nous avons choisi pour ce mémoire d'étudier le système InAs/InP parce que les boîtes quantiques construites par auto-assemblage dans ce système possèdent un pic d'absorption pour un rayonnement de l'ordre de $10 \text{ } \mu\text{m}$ à $20 \text{ } \mu\text{m}$ [12, 13]. Cette propriété représente clairement un intérêt pour la fabrication de photodétecteurs infrarouges puisque l'atmosphère est relativement transparente pour ces longueurs d'ondes.

La principale difficulté liée à ce choix de matériaux semble être la caractérisation de la forme des boîtes quantiques construites par auto-assemblage Stranski-Krastanov. Les travaux expérimentaux indiquent que ces boîtes quantiques possèdent une géométrie très aplatie [14], à l'image d'un ensemble de biscuits sur une tôle et donc que leur hauteur est beaucoup plus petite que leurs dimensions latérales.

Or, la majorité des simulations de photodétecteurs à boîtes quantiques traitent du système InAs/GaAs. Dans ce système, les dimensions des boîtes quantiques selon chaque axe sont approximativement les mêmes. Ce type de simulation ne permettra pas de décrire de façon satisfaisante les photodétecteurs construits dans le système InAs/InP et seule une étude tenant en compte de l'effet de l'aplatissement des boîtes quantiques sur les propriétés électriques des photodétecteurs permettra d'obtenir des résultats physiquement acceptables.

Chapitre 2

Revue de la littérature

2.1 La modélisation des propriétés électroniques des boîtes quantiques

La compréhension du fonctionnement d'un photodétecteur à boîtes quantiques nécessite d'abord la connaissance de son élément actif, la boîte quantique auto-assemblée. Il est donc raisonnable de réaliser la modélisation et la simulation des propriétés électroniques des boîtes quantiques avant la simulation du dispositif entier.

Diverses méthodes de modélisation ayant toutes leurs avantages et leurs limites ont été employées dans le passé pour modéliser et simuler les propriétés des boîtes quantiques. Nous allons brièvement présenter les méthodes les plus souvent utilisées pour modéliser les propriétés des boîtes quantiques, et nous allons expliquer pourquoi nous avons choisi d'utiliser la méthode de la fonction enveloppe dans le cadre de ce mémoire.

2.1.1 Méthode de la fonction enveloppe

La méthode de la fonction enveloppe avec l'approximation de la masse effective est sans contredit la méthode de calcul la plus simple présentée dans ce chapitre, autant par son formalisme que par sa légèreté de calcul [15]. Avec cette méthode, la fonction d'onde d'un électron au voisinage d'une boîte quantique s'écrit comme le produit de la partie périodique de la fonction de Bloch de l'état d'énergie minimale de la bande de conduction

par une fonction qui varie lentement à l'échelle atomique, la fonction enveloppe. Cette méthode est présentée en détails à l'annexe A.

Cette méthode présente l'avantage de donner une interprétation physique simple des propriétés des électrons de la bande de conduction d'un semi-conducteur. Par contre, comme cette méthode n'inclut pas de traitement particulier des états de valence, alors elle ne permet pas de décrire adéquatement les états électroniques de la bande de valence. De plus, elle échoue à décrire les états liés de haute énergie situés dans la bande de conduction.

Néanmoins, cette méthode a été employée à quelques reprises pour décrire les propriétés électroniques des états liés de la bande de conduction d'une boîte quantique. Cette méthode a été utilisée en particulier pour l'étude des boîtes quantiques construites dans le système InAs/GaAs [16] et est adaptée à l'étude de dispositifs à hétérostructure semi-conductrice utilisant des transitions à l'intérieur de la bande de conduction.

2.1.2 Méthode $k \cdot p$

La méthode $k \cdot p$ est une généralisation de la méthode de la fonction enveloppe pour un nombre de bandes supérieur à 1. Habituellement, ce modèle est développé en prenant compte de l'effet au premier ordre des contraintes sur les propriétés du semi-conducteur et en utilisant 8 bandes, soit 2 bandes de conduction et 6 bandes de valence [17]. Cette méthode a été utilisée dans le passé pour décrire les propriétés électroniques et optiques des boîtes quantiques obtenues en particulier avec le système InAs/GaAs [18] et avec le système InAs/InP [19].

Les résultats de ces travaux nous indiquent que la méthode $k \cdot p$, lorsqu'elle est utilisée pour décrire le premier état de la bande de conduction lié à une boîte quantique, s'approche beaucoup de la méthode de la fonction enveloppe dans le cadre de l'approximation de la masse effective. Ce résultat n'est pas surprenant, puisque nous observons avec la méthode $k \cdot p$ que les états de la bande de conduction ne se mélangent pas de façon significative avec

les états de la bande de valence. Un calcul incluant l'effet des déformations mécaniques montre en effet que la fonction d'onde de l'état électronique fondamental est constituée à environ 89% par l'état de conduction original [20].

Il est aussi intéressant de noter qu'un calcul comparant la méthode de la fonction enveloppe avec la méthode $k \cdot p$ comprenant quatre, six et huit bandes et tenant compte des déformations mécaniques dans une boîte quantique indique que l'état fondamental de conduction calculé avec les quatre modèles ne diffèrent principalement que par l'énergie de confinement calculée des états liés [21]. Ces différences sont relativement importantes et peuvent atteindre quelques dizaines de meV . Ce paramètre étant *a priori* une donnée physique ajustable à partir des paramètres du modèle, nous en concluons que cette méthode n'apporte pas de contenu physique supplémentaire lors de la description des états de conduction.

2.1.3 Méthode du pseudopotentiel empirique

La méthode du pseudopotentiel empirique a été utilisée principalement pour étudier les propriétés électriques des boîtes quantiques construites dans le système InAs/GaAs [22]. Le calcul est habituellement basé sur des pseudopotentiels empiriques non-locaux tenant compte du couplage spin-orbite et est développé à partir d'une description atomistique du système étudié, contrairement aux deux méthodes précédentes. L'avantage principal de cette méthode est donc de donner une description atomistique plutôt que continue de la fonction d'onde, des déformations et du potentiel. Il est intéressant de noter qu'une comparaison entre les résultats obtenus à l'aide de cette approche et ceux trouvés par la méthode $k \cdot p$ montre certaines différences qui permettent d'identifier certaines forces et limites de la méthode $k \cdot p$ [23].

Plus précisément, la méthode du pseudopotentiel empirique confirme que les états de la bande de conduction peuvent être décrits essentiellement par le formalisme des fonctions

enveloppes [22] parce que le couplage entre les états de la bande de conduction et des bandes de valence reste relativement faible. Par contre, à cause du fort couplage entre les bandes de valence (en particulier entre la bande de trous lourds et la bande de trous légers), il a été démontré que les états de valence calculés ne correspondent pas à ceux obtenus à l'aide de la méthode $k \cdot p$. En particulier, les états de valence obtenus à l'aide de la méthode du pseudopotentiel empirique ne possèdent pas de nœuds, ce qui contraste énormément avec les résultats obtenus avec la méthode $k \cdot p$. Par conséquent, nous concluons que la description des états de valence par la méthode $k \cdot p$ n'est probablement pas appropriée dans cette situation.

La principale limitation liée à l'utilisation de la méthode du pseudopotentiel empirique est que le temps de calcul croît très rapidement avec la taille du système étudié. Cette limitation peut devenir problématique surtout lors de l'étude des structures qui ne sont pas périodiques dans l'espace, par exemple les boîtes quantiques.

2.1.4 Méthode des liaisons fortes

La méthode empirique des liaisons fortes est une autre méthode d'origine atomistique proposée pour évaluer les propriétés électroniques des boîtes quantiques. Cette méthode a été employée en particulier pour décrire les propriétés électroniques et mécaniques des boîtes quantiques dans le système InAs/GaAs avec la base sp^3s^* [24]. Cette méthode se présente comme une alternative à la méthode du pseudopotentiel empirique, principalement parce que le temps de calcul pour des systèmes de tailles similaires est plus petit. Par contre, une des limites de cette méthode est que le choix des orbitales atomiques utilisées lors du calcul pour évaluer les interactions entre plus proches voisins est jusqu'à un certain point arbitraire et doit être ajusté sur les paramètres des semi-conducteurs massiques.

Le calcul par cette méthode des propriétés de boîtes de InAs/GaAs incluant l'effet des contraintes a été comparé à celui obtenu par la méthode du pseudopotentiel pour le système

InAs/GaAs avec les interactions jusqu'au deuxième voisin et le couplage spin-orbite [25]. D'abord, les énergies calculées pour les états liés sont relativement semblables dans les deux modèles. De plus, les états de valence obtenus à l'aide de la méthode des liaisons fortes ne possèdent pas de nœuds, ce qui est en accord avec les résultats de la méthode du pseudopotentiel empirique mais qui contraste avec les résultats obtenus à partir de la méthode $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$.

L'accord entre ces deux méthodes montre bien que la méthode des liaisons fortes représente une alternative viable et moins coûteuse en temps de calcul à la méthode du pseudopotentiel empirique pour décrire les états électroniques de valence liés aux boîtes quantiques. Cependant, comme dans le cas des autres méthodes présentées dans cette section, nous observons que le premier état de conduction est déjà décrit de façon satisfaisante par une fonction enveloppe et donc que cette approche ne donne pas d'avantage significatif par rapport aux autres méthodes.

2.2 La simulation des photodétecteurs à boîtes quantiques

L'objectif de la simulation des dispositifs est double. D'abord, les outils de simulations développés doivent permettre de prévoir le comportement d'un dispositif imaginaire et ainsi justifier théoriquement l'effort expérimental nécessaire à sa fabrication. De plus, la modélisation et la simulation des photodétecteurs doit permettre d'expliquer le comportement observé de dispositifs réels et ainsi nous aider à comprendre quels paramètres doivent être corrigés afin d'améliorer leurs caractéristiques.

Dans les faits, les modèles et les simulations ont effectivement servi à faire mûrir l'idée des photodétecteurs à boîtes quantiques vers le milieu des années 1990 [5, 6]. Cependant, nous constatons que le travail de simulation est ardu et n'est réalisable pratiquement qu'au prix d'approximations et de choix plus ou moins arbitraires. Il n'est pas

inhabituel que les résultats de simulation ne parviennent qu'à décrire partiellement les observations expérimentales ou qu'à expliciter des évidences générales, par exemple sur la nécessité d'avoir le moins de défauts possibles dans un dispositif ou encore d'effectuer la croissance de boîtes quantiques de tailles les plus uniformes possibles. Il convient donc de bien cerner les limites des différents modèles avant de choisir lequel utiliser.

2.2.1 Les premiers modèles

Les premiers modèles proposés pour simuler les photodétecteurs à boîtes quantiques s'inspiraient principalement des modèles de photodétecteurs à puits quantiques [5, 6]. Dans ce type de modèle, le dispositif est séparé en tranches et les propriétés du dispositif sont évaluées localement pour chaque tranche. Ces résultats servent finalement à déterminer les paramètres généraux du dispositif, par exemple le rapport signal sur bruit à une température donnée. Ce type de modèle a l'avantage d'être relativement simple à développer car il consiste en une extension naturelle des modèles déjà définis pour les photodétecteurs à puits quantiques.

Les premières simulations laissaient croire avec un optimisme excessif que les propriétés des photodétecteurs à boîtes quantiques seraient très intéressantes. Cependant, les limites de ce type de modèle apparaissent rapidement lors de la comparaison avec les résultats expérimentaux. En particulier, il a été démontré pour un photodétecteur de type InAs/GaAs que les premiers modèles de photodétecteurs sous-estiment significativement le courant d'obscurité dès la température de 40 K [26].

Il a été proposé pour expliquer le désaccord entre les premières simulations et les résultats expérimentaux que le mécanisme de conduction dans la zone active dépend significativement de la densité de boîtes quantiques dans le plan parallèle au substrat [27, 28]. De cette façon, la majorité du courant d'obscurité passe par les espaces autour des boîtes quantiques, ce qui explique le fait que le courant d'obscurité simulé n'était pas réaliste

dans les premiers modèles proposés. L'introduction de ce mécanisme de conduction a permis d'ajuster de façon plus adéquate les résultats expérimentaux aux simulations à basse température (environ 40 K). Le contrôle de la densité des boîtes quantiques dans la région active du photodétecteur semble donc avoir un effet très important sur la mesure du courant d'obscurité.

2.2.2 Les simulations de type Monte Carlo

Une autre raison avancée pour expliquer l'erreur d'évaluation du courant d'obscurité est que la recombinaison des électrons à haute température ne se distribue pas uniformément dans le dispositif mais se localise plutôt principalement dans les régions du dispositif où le champ électrique varie rapidement [29]. Pour un photodétecteur à boîtes quantiques, ces régions correspondent surtout aux voisinages immédiats des boîtes quantiques.

Une simulation pour les dispositifs construits dans les systèmes InAs/GaAs et InGaAs/GaAs tenant en compte de ce type de recombinaison avec une approche Monte Carlo [30] pour simuler le transport électronique explique en partie la détérioration à haute température des propriétés du dispositif, en particulier du rapport signal sur bruit, causée principalement par l'augmentation de l'importance de l'émission thermoélectronique. Une deuxième conclusion de ce travail montre que les propriétés d'un dispositif simulé se dégradent aussi lorsque que le champ électrique devient irrégulier dans la région active. Cette situation peut être causée par la présence de boîtes quantiques de taille non uniforme ou à haute température par des fluctuations du nombre d'électrons lié aux boîtes.

Ces résultats indiquent que pour réduire ces effets indésirables, des précautions doivent être prises lors de la construction du dispositif afin d'assurer l'uniformité des tailles et de la densité des boîtes dans chaque plan. De cette façon, les variations du champ électrique local dans la région active du dispositif sont minimisées.

2.2.3 L'approche par étages

Une autre approche utilisée pour rendre les simulations de photodétecteurs plus réalistes a été proposée récemment pour le système InAs/GaAs [7]. Il s'agit d'une méthode incluant plusieurs niveaux de modèles physiques qui s'emboîtent les uns dans les autres. Par exemple, la simulation du photodétecteur dans ce modèle inclut une description par la méthode $k \cdot p$ à huit bandes des propriétés électroniques et optiques des boîtes quantiques et un traitement Monte Carlo hors équilibre du transport d'électrons dans le dispositif.

L'intérêt de cette approche par étages est qu'elle permet de simplifier chacune des parties de la modélisation physique du dispositif et de ses composantes, tout en conservant un traitement particulier pour chaque étage du modèle. Il s'agit d'une voie prometteuse qui demande cependant beaucoup de travail de modélisation et de validation à chaque étape.

2.3 Démarche et cadre méthodologique

2.3.1 Modélisation et hypothèses générales

Nous simplifions dans le cadre de ce travail l'analyse des propriétés électroniques des boîtes quantiques en ne considérant que les hétérostructures semi-conductrices de type n , c'est-à-dire celles qui sont dopées par une majorité d'atomes donneurs d'électrons. Pour ces dispositifs, nous faisons l'hypothèse que les seuls électrons ayant une influence importante sur les propriétés des boîtes quantiques sont ceux qui sont situées dans la bande de conduction. Par conséquent, nous pouvons négliger la contribution des bandes de valence.

Nous justifions cette hypothèse par l'observation qu'une majorité d'atomes donneurs s'ionisent et que la densité moyenne d'électrons de conduction est approximativement égale à la densité d'atomes donneurs. Nous considérons aussi que la densité de trous dans la bande de valence du matériau est beaucoup plus faible que la densité d'électrons dans la bande de conduction et que les bandes de valence sont à toutes fins utiles remplies.

Cette hypothèse de travail justifie le choix de traiter les interactions entre le solide

cristallin et les électrons à l'aide de la méthode de la fonction enveloppe, en utilisant l'approximation de la masse effective. Cette méthode et les approximations qui y sont reliées sont présentées en détails à l'annexe A.

2.3.2 Modèle de simulation

Nous avons choisi dans ce travail de séparer la simulation des photodétecteurs en trois parties, tel qu'illustré schématiquement à la figure 2.1. Cette approche réduit la complexité du problème initial en le ramenant à trois problèmes distincts de modélisation et de simulation.

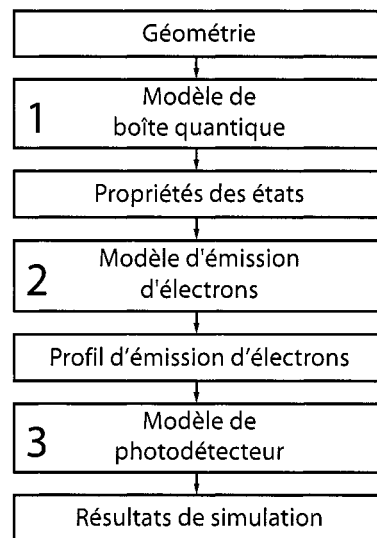


FIG. 2.1 – Schéma de la méthodologie choisie

D'abord, nous développons le *modèle de boîtes quantiques* afin de déterminer les propriétés des états électroniques liés. Ce modèle est construit à partir de la méthode de la fonction enveloppe et de l'approximation de la masse effective de façon à rester le plus simple possible tout en reproduisant les résultats généralement acceptés dans la littérature.

Le *modèle d'émission d'électrons* est ensuite développé à partir des fonctions enveloppes obtenues du modèle de boîtes quantiques. Ce modèle sert à évaluer le taux d'émis-

sion d'électrons par une boîte quantique de taille moyenne en fonction de divers paramètres comme l'intensité de rayonnement reçu, le champ électrique appliqué à l'intérieur du dispositif ou encore la température du dispositif. Ce modèle tient compte de l'émission par absorption de rayonnement infrarouge, de l'émission par effet tunnel et de l'émission thermoélectronique.

Finalement, à partir des résultats du modèle d'émission d'électrons, nous développons un *modèle de photodétecteur* simple. Ce modèle permet de déterminer à partir des résultats précédents trois propriétés fondamentales de photodétecteurs, soient le rapport signal sur bruit du dispositif, la sensibilité du dispositif à détecter une variation de température des objets observés et la température maximale à laquelle le dispositif peut fonctionner.

Chapitre 3

Propriétés électroniques d'une boîte quantique

3.1 Étude des paramètres géométriques

Comme nous avons vu dans l'introduction, il n'existe pas de consensus dans la littérature scientifique sur la forme exacte des boîtes quantiques obtenues par croissance de type Stranski-Krastanov avec le système InAs/InP, malgré tous les efforts investis pour caractériser ces structures. Les seules observations qui semblent être généralement acceptées sont que les boîtes quantiques ont un aspect plutôt aplati et que leur surface parallèle au substrat est généralement une dimension caractéristique beaucoup plus grande que leur hauteur. De façon imagée, une boîte quantique typique ressemble plutôt à une galette qu'à une hémisphère ou un cube.

Nous allons donc retenir que nous ne savons pas quelle est la forme exacte des boîtes quantiques, mais qu'au moins nous savons qu'elles ont un aspect aplati. Cette remarque permet de simplifier l'analyse des propriétés des boîtes quantiques, tout en conservant un caractère essentiel : leur rapport hauteur sur diamètre. Nous allons établir un modèle qui permet d'évaluer certaines propriétés des boîtes en tenant compte de ce rapport de forme.

3.1.1 Choix de la forme des boîtes quantiques

Dans le cadre de ce travail, nous avons choisi de modéliser la forme des boîtes quantiques par un cylindre aplati pour deux raisons :

- permettre le découplage d'un problème tridimensionnel complexe en deux problèmes simples (bidimensionnel et unidimensionnel) et ainsi de décrire analytiquement les états liés ;
- permettre l'ajustement des paramètres importants des boîtes quantiques, soient leur superficie dans le plan parallèle au substrat et leur épaisseur dans la direction de croissance épitaxiale, en fonction des données expérimentales disponibles.

Il est probable que les états liés à une boîte quantique de forme non cylindrique aient des états d'énergie légèrement différente de ceux liés à une boîte cylindrique. Néanmoins, il sera toujours possible d'ajuster les paramètres géométriques d'une boîte cylindrique (surface et hauteur) pour que l'énergie des états fondamentaux calculés avec chaque géométrie soient les mêmes. De toute façon, nous ne connaissons pas avec précision ces paramètres car ils sont difficilement mesurables de façon directe et il est plus simple de les laisser flottants et de ne les ajuster qu'à partir de mesures expérimentales.

L'objectif de ce mémoire étant de déterminer les propriétés d'un photodétecteur à boîtes quantiques, l'approximation de traiter les boîtes quantiques comme des cylindres simplifie la description de leurs propriétés électriques et optiques tout en conservant les paramètres pertinents à notre analyse et la possibilité de décrire simplement le dispositif.

3.1.2 La fonction de forme

À chaque boîte quantique correspond une surface frontière. Il s'agit de la frontière entre le matériau de la boîte et le matériau du substrat. Il est difficile de définir de façon absolue cette frontière, principalement parce que les atomes diffusent près de l'interface entre les deux matériaux. Pour notre modèle de boîtes quantiques, cette subtilité n'est

pas importante, puisque la géométrie est imposée d'avance et que la taille de la boîte est ajustée à partir de données expérimentales.

Nous définissons la *fonction de forme* $\Omega(\mathbf{r})$ comme étant la fonction qui vaut 1 à l'intérieur de la surface frontière de la boîte et 0 à l'extérieur. Nous notons \mathcal{V} le volume contenu par cette surface. Le potentiel effectif V_{eff} associé à cette boîte quantique vaut alors

$$V_{eff} = -V_0\Omega(\mathbf{r}) \quad (3.1)$$

où V_0 est appelé la *profondeur du puits de potentiel*. Il est important de noter que dans cette expression, le potentiel effectif V_{eff} ne tient pas compte des interactions entre les boîtes quantiques. Nous justifions cette approximation par une remarque à la section suivante.

3.1.3 Principales caractéristiques des boîtes quantiques

Afin d'uniformiser les résultats présentés dans ce mémoire, nous allons considérer que la profondeur du puits de potentiel associé à une boîte quantique de type InAs/InP vaut $V_0 = 200 \text{ meV}$ et que la masse effective des électrons de la bande de conduction est constante dans tout le matériau et vaut $m^* = 0,07m_e$, où m_e représente la masse de l'électron. Ces données sont tirées de mesures expérimentales documentées dans la littérature [31].

La justification de l'approximation de considérer que la masse effective des électrons est constante dans tout l'espace est donnée à l'annexe B. Nous considérons aussi qu'une boîte quantique cylindrique moyenne a une hauteur d'environ $6,6 \text{ nm}$ et un diamètre d'environ 66 nm . Cette boîte possède un rapport d'aspect d'environ 10.

À partir de ces données, nous définissons la longueur caractéristique α comme étant

$$\alpha = \frac{\hbar}{\sqrt{2m^*V_0}} \sim 1,65 \text{ nm}. \quad (3.2)$$

La quantité α est au facteur 2π près égale à la longueur d'onde de de Broglie associée à une particule d'énergie V_0 , de masse m^* , dans un potentiel nul. Par conséquent, la distance

pour laquelle l'état électronique a une influence près de la boîte quantique est de l'ordre de grandeur de $2\pi\alpha$.

Nous justifions finalement l'approximation de négliger l'interaction entre les boîtes quantiques dans l'expression du potentiel effectif de l'équation 3.1. Comme la densité surfacique de boîtes quantiques InAs/InP est de l'ordre de 10^{10} cm^{-2} , alors la distance moyenne entre les centres de deux boîtes quantiques voisines est de l'ordre de 100 nm. Nous savons aussi que le rayon d'une boîte quantique moyenne est de l'ordre de 30 nm. Par conséquent, la distance entre les frontières de deux boîtes quantiques voisines est de l'ordre de quelques dizaines de nm et donc beaucoup plus grande que la longueur d'onde de de Broglie $2\pi\alpha$. Nous pouvons en conclure qu'à toutes fins utiles, le potentiel vu par un électron lié à une boîte quantique n'est pas influencé par les boîtes voisines.

3.2 Modélisation des propriétés électroniques d'une boîte quantique

3.2.1 L'équation de la fonction enveloppe

Dans le formalisme de la méthode de la fonction enveloppe, avec l'approximation de la masse effective, l'équation de la fonction enveloppe s'écrit (voir équation A.24)

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 C_i + V_{eff} C_i = E_i C_i \quad (3.3)$$

où les C_i sont les fonctions enveloppes des états liés et les E_i leurs énergies correspondantes. Le potentiel effectif V_{eff} en coordonnées cylindriques correspondant à une boîte quantique cylindrique de hauteur $2h$ et de diamètre $2a$ centrée à l'origine s'écrit

$$V_{eff}(\rho, z) = \begin{cases} -V_0 & \text{si } \rho < a \text{ et } |z| < h, \\ 0 & \text{sinon.} \end{cases} \quad (3.4)$$

3.2.2 L'effet d'une couche de mouillage

La couche de mouillage est une mince couche qui relie les boîtes quantiques, et qui est composée du même matériau que les boîtes quantiques, comme illustré à la figure 1.3. Dans le choix de potentiel présenté à l'équation 3.4, nous négligeons l'effet de la présence de cette couche de mouillage. Nous justifions cette approximation à l'aide de ces deux remarques.

D'abord, un des effets de la présence de la couche de mouillage est de modifier l'énergie et la forme de la fonction enveloppe des états liés. Or, dans le cas où l'épaisseur de la couche de mouillage reste relativement petite par rapport à la hauteur de la boîte quantique, le calcul présenté à l'annexe C montre que cette modification reste faible.

Ensuite, la présence de la couche de mouillage introduit de nouveaux états électroniques étendus dans le dispositif qui pourraient *a priori* interagir avec le rayonnement incident. Cependant, nous assumons que ces états n'apporteront pas de contribution significative lors du calcul du coefficient d'absorption optique. En effet, la couche de mouillage entre les boîtes quantiques est assimilable en première approximation à un puits quantique et à cause des règles de sélection, la lumière d'incidence normale n'interagit pratiquement pas avec une telle structure. Cette hypothèse ne reste acceptable que lorsque la rugosité de l'interface est faible. Dans le cas contraire, les transition dans le puits peuvent devenir importantes [32].

Nous concluons à partir des deux remarques précédentes que l'effet de la couche de mouillage n'est pas significatif lors du calcul du coefficient d'absorption optique d'une structure contenant des boîtes quantiques pour un rayonnement d'incidence normale et donc que nous n'allons pas en tenir compte dans le cadre de la modélisation présentée dans ce mémoire.

3.2.3 Approximation du potentiel séparable

La première difficulté rencontrée lors de la résolution de l'équation 3.3 est que le potentiel $V_{eff}(\rho, z)$ ne se sépare pas en une somme de potentiels ne variant que selon une seule dimension. Il n'est donc pas possible de déterminer les fonctions enveloppes $C_i(\mathbf{r})$ par séparation des variables.

Plusieurs choix sont possibles pour contourner cette difficulté. Certains de ces choix, par exemple une résolution par éléments finis ou avec un potentiel analytique séparable, sont comparés à l'annexe D. Dans le cadre de ce mémoire, nous avons choisi de modifier légèrement le potentiel afin de permettre la résolution analytique de l'équation de Schrödinger. La justification de ce choix est donnée à l'annexe D.

Le potentiel $V'_{eff}(\mathbf{r})$, qui est proche de $V_{eff}(\mathbf{r})$, est défini afin d'être séparable et de permettre la résolution d'un problème semblable à celui de l'équation de la fonction enveloppe 3.3. Dans le cas d'une boîte quantique cylindrique de hauteur $2h$ et de diamètre $2a$, le potentiel approché V'_{eff} est défini comme étant

$$V'_{eff}(\rho, z) = -V_0 (1 - \Lambda(\rho, a) - \Lambda(|z|, h)) \quad (3.5)$$

avec

$$\Lambda(x, y) = \begin{cases} 0 & \text{si } x < y, \\ 1 & \text{sinon.} \end{cases} \quad (3.6)$$

Ce potentiel, même s'il est différent du potentiel réel lorsque $\rho > a$ et $|z| > h$, est quand même une approximation raisonnable. En effet, les fonctions enveloppes et leur niveau d'énergie associé ne sont pas changés de façon significative, comme le montre un calcul par éléments finis présenté à l'annexe D.

À partir de ce potentiel effectif, nous définissons l'hamiltonien

$$\mathcal{H}'_{eff} = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 + V'_{eff} \quad (3.7)$$

avec m^* la masse effective des électrons de la bande de conduction. La masse effective est

considérée comme étant constante partout dans le matériau, dans l'esprit de l'approximation présentée à l'annexe B.

Cet hamiltonien est ensuite utilisé dans l'équation de la fonction enveloppe

$$\mathcal{H}'_{eff} C_i = E_i C_i \quad (3.8)$$

avec C_i et E_i respectivement la fonction enveloppe et l'énergie du i ème état lié.

Il est intéressant d'introduire à ce point deux dimensions caractéristiques dans notre problème, soient la *longueur caractéristique* α et l'*énergie caractéristique* V_0 , avec α donné à l'équation 3.2. Nous normalisons les dimensions dans l'équation de la fonction enveloppe 3.8 en divisant toutes les longueurs par α et toutes les énergies par V_0 :

$$\left(-\nabla^2 + \frac{V'_{eff}}{V_0} \right) \bar{C}_i = \left(\frac{E_i}{V_0} \right) \bar{C}_i. \quad (3.9)$$

Dans cette équation, le laplacien ∇^2 et la fonction enveloppe \bar{C}_i sont donnés dans les coordonnées spatiales normalisées. La variable d'espace normalisée est notée $\bar{\mathbf{r}}$ et est donnée par

$$\bar{\mathbf{r}} = \frac{\mathbf{r}}{\alpha}. \quad (3.10)$$

3.2.4 Calcul des états électroniques

Si nous séparons la fonction enveloppe $\bar{C}_i(\bar{\mathbf{r}})$ en un produit de trois fonctions

$$\bar{C}_i(\bar{\mathbf{r}}) = \bar{R}_i(\bar{\rho}) \bar{\Theta}_i(\theta) \bar{Z}_i(\bar{z}) \quad (3.11)$$

et que nous l'insérons dans l'équation 3.9, nous retrouvons

$$\left(-\frac{1}{\bar{\rho}} \frac{\partial}{\partial \bar{\rho}} \left(\bar{\rho} \frac{\partial}{\partial \bar{\rho}} \right) - \frac{1}{\bar{\rho}^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} - \frac{\partial^2}{\partial \bar{z}^2} + \frac{V'_{eff}}{V_0} \right) \bar{R}_i \bar{\Theta}_i \bar{Z}_i = \left(\frac{E_i}{V_0} \right) \bar{R}_i \bar{\Theta}_i \bar{Z}_i \quad (3.12)$$

et après quelques manipulations supplémentaires

$$\frac{1}{\bar{R}_i \bar{\rho}} \frac{\partial}{\partial \bar{\rho}} \left(\bar{\rho} \frac{\partial}{\partial \bar{\rho}} \right) \bar{R}_i + \frac{1}{\bar{\rho}^2 \bar{\Theta}_i} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \bar{\Theta}_i + \left\{ 1 - \Lambda(\bar{\rho}, \bar{a}) + \frac{E_i}{V_0} \right\} = -\frac{1}{\bar{Z}_i} \frac{\partial^2}{\partial \bar{z}^2} \bar{Z}_i + \Lambda(|\bar{z}|, \bar{h}). \quad (3.13)$$

Le membre de droite de cette équation ne dépend que de \bar{z} , tandis que le membre de gauche ne dépend que de $\bar{\rho}$ et de θ . Nous pouvons donc poser que chaque membre de l'équation est égal à la même constante $\bar{\zeta}_p^2$ et que

$$-\frac{1}{\bar{Z}_p} \frac{\partial^2}{\partial \bar{z}^2} \bar{Z}_p + \Lambda(|\bar{z}|, \bar{h}) = \bar{\zeta}_p^2. \quad (3.14)$$

Si nous imposons que les solutions de cette équation doivent rester bornées, alors nous avons pour $p = 1, 2, 3, \dots$ que

$$\bar{Z}_p(z) = \begin{cases} A_p^{(1)} \exp(\bar{\eta}_p \bar{z}) & \text{si } \bar{z} < -\bar{h}, \\ A_p^{(2)} \sin(\bar{\zeta}_p \bar{z} + \frac{p}{2}\pi) & \text{si } |\bar{z}| < \bar{h}, \\ (-1)^{p+1} A_p^{(1)} \exp(-\bar{\eta}_p \bar{z}) & \text{si } \bar{z} > \bar{h}, \end{cases} \quad (3.15)$$

$$\bar{\eta}_p^2 = 1 - \bar{\zeta}_p^2, \quad (3.16)$$

avec les constantes $A_p^{(1)}$, $A_p^{(2)}$ et $\bar{\zeta}_p$ ajustées pour respecter les conditions

$$\lim_{\bar{z} \rightarrow \bar{h}^-} \bar{Z}_p(\bar{z}) = \lim_{\bar{z} \rightarrow \bar{h}^+} \bar{Z}_p(\bar{z}), \quad (3.17)$$

$$\lim_{\bar{z} \rightarrow \bar{h}^-} \frac{\partial}{\partial \bar{z}} \bar{Z}_p(\bar{z}) = \lim_{\bar{z} \rightarrow \bar{h}^+} \frac{\partial}{\partial \bar{z}} \bar{Z}_p(\bar{z}), \quad (3.18)$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\bar{Z}_p(\bar{z})|^2 d\bar{z} = 1. \quad (3.19)$$

Les deux premières conditions assurent que la fonction enveloppe et sa dérivée sont continues à la frontière de la boîte quantique. La troisième condition garantit que la fonction \bar{Z}_p est normée.

Nous pouvons donc réécrire l'équation 3.13 comme

$$\frac{\bar{\rho}}{\bar{R}_i} \frac{\partial}{\partial \bar{\rho}} \left(\bar{\rho} \frac{\partial}{\partial \bar{\rho}} \right) \bar{R}_i + \bar{\rho}^2 \left\{ 1 - \Lambda(\bar{\rho}, \bar{a}) - \bar{\zeta}_p^2 + \frac{E_i}{V_0} \right\} = -\frac{1}{\bar{\Theta}_i} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \bar{\Theta}_i. \quad (3.20)$$

Le membre de droite de cette équation ne dépend que de θ , tandis que le membre de gauche ne dépend plus que de $\bar{\rho}$. Nous pouvons donc encore une fois poser que chaque membre de l'équation est égal à la même constante et en particulier que

$$-\frac{1}{\bar{\Theta}_m} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \bar{\Theta}_m = m^2. \quad (3.21)$$

Il existe plusieurs façons d'exprimer les solutions de cette équation. En particulier, nous pouvons les écrire sous la forme

$$\bar{\Theta}_m(\theta) = \frac{e^{im\theta}}{\sqrt{2\pi}} \quad (3.22)$$

avec m un entier pour avoir la condition $\bar{\Theta}_m(\theta) = \bar{\Theta}_m(\theta + 2\pi)$ et la constante $\frac{1}{\sqrt{2\pi}}$ pour respecter la condition de normalisation $\int_0^{2\pi} |\bar{\Theta}_m(\theta)|^2 d\theta = 1$.

Nous pouvons alors simplifier l'équation 3.20 et trouver

$$\bar{\rho} \frac{\partial}{\partial \bar{\rho}} \left(\bar{\rho} \frac{\partial}{\partial \bar{\rho}} \right) \bar{R}_{mn} + (\bar{\rho}^2 \bar{\kappa}_{mn}^2 - m^2) \bar{R}_{mn} = 0. \quad (3.23)$$

avec

$$\bar{\kappa}_{mn}^2 = 1 - \Lambda(\bar{\rho}, \bar{a}) - \bar{\zeta}_p^2 + \frac{E_i}{V_0}. \quad (3.24)$$

Il s'agit de l'équation de Bessel [33]. Si nous imposons que les solutions de cette équation doivent rester finies, alors nous avons pour $n = 1, 2, 3, \dots$ que

$$\bar{R}_{mn}(\bar{\rho}) = \begin{cases} B_{mn}^{(1)} J_m(\bar{\kappa}_{mn} \bar{\rho}) & \text{si } \bar{\rho} < \bar{a}, \\ B_{mn}^{(2)} K_m(\bar{\tau}_{mn} \bar{\rho}) & \text{si } \bar{\rho} > \bar{a}, \end{cases} \quad (3.25)$$

$$\bar{\tau}_{mn}^2 = 1 - \bar{\kappa}_{mn}^2, \quad (3.26)$$

avec J_m la m ième fonction de Bessel de première espèce et K_m la m ième fonction de Bessel modifiée de deuxième espèce. Les constantes $B_{mn}^{(1)}$, $B_{mn}^{(2)}$ et $\bar{\kappa}_{mn}$ sont ajustées pour respecter les conditions

$$\lim_{\bar{\rho} \rightarrow \bar{a}^-} \bar{R}_{mn}(\bar{\rho}) = \lim_{\bar{\rho} \rightarrow \bar{a}^+} \bar{R}_{mn}(\bar{\rho}), \quad (3.27)$$

$$\lim_{\bar{\rho} \rightarrow \bar{a}^-} \frac{\partial}{\partial \bar{\rho}} \bar{R}_{mn}(\bar{\rho}) = \lim_{\bar{\rho} \rightarrow \bar{a}^+} \frac{\partial}{\partial \bar{\rho}} \bar{R}_{mn}(\bar{\rho}), \quad (3.28)$$

$$\int_0^{+\infty} |\bar{R}_{mn}(\bar{\rho})|^2 \bar{\rho} d\bar{\rho} = 1. \quad (3.29)$$

Ici encore, les deux premières conditions assurent que la fonction enveloppe et sa dérivée sont continues à la frontière de la boîte quantique, alors que la troisième condition garantit que la fonction \bar{R}_{mn} est normée.

Nous pouvons finalement exprimer l'ensemble des solutions comme

$$\bar{C}_{mnp}(\bar{\mathbf{r}}) = (2\pi)^{-\frac{1}{2}} \bar{Z}_p(\bar{z}) \bar{R}_{mn}(\bar{\rho}) e^{im\theta} \quad (3.30)$$

avec l'énergie (négative) de l'état lié mnp valant

$$E_{mnp} = -V_0 (1 - \bar{\zeta}_p^2 - \bar{\kappa}_{mn}^2). \quad (3.31)$$

Nous rappelons que ces fonctions sont exprimées pour des variables normalisées par la constante α . Nous pouvons aussi les exprimer en fonction des variables de position non normalisées comme

$$Z_p(z) = \frac{1}{\sqrt{\alpha}} \bar{Z}_p\left(\frac{z}{\alpha}\right), \quad (3.32)$$

$$R_{mn}(\rho) = \frac{1}{\alpha} \bar{R}_{mn}\left(\frac{\rho}{\alpha}\right). \quad (3.33)$$

3.3 L'état fondamental d'une boîte quantique

3.3.1 Calcul de la fonction enveloppe

Pour l'état de plus faible énergie lié à la boîte quantique, la fonction enveloppe s'écrit simplement

$$\bar{C}(\bar{\rho}, \bar{z}) = \bar{C}_{011}(\bar{\mathbf{r}}) = (2\pi)^{-\frac{1}{2}} \bar{Z}(\bar{z}) \bar{R}(\bar{\rho}) \quad (3.34)$$

avec

$$\bar{Z}(\bar{z}) = A^{(1)} \begin{cases} \exp(-\bar{\eta}\bar{h}) \cos(\bar{\zeta}\bar{z}) & \text{si } |\bar{z}| < \bar{h}, \\ \cos(\bar{\zeta}\bar{h}) \exp(-\bar{\eta}|\bar{z}|) & \text{si } |\bar{z}| > \bar{h} \end{cases} \quad (3.35)$$

et

$$\bar{R}(\bar{\rho}) = B^{(1)} \begin{cases} K_0(\bar{\tau}\bar{a}) J_0(\bar{\kappa}\bar{\rho}) & \text{si } \bar{\rho} < \bar{a}, \\ J_0(\bar{\kappa}\bar{a}) K_0(\bar{\tau}\bar{\rho}) & \text{si } \bar{\rho} > \bar{a}. \end{cases} \quad (3.36)$$

Les constantes $\bar{\zeta}$ et $\bar{\kappa}$ sont les plus petites valeurs respectant les conditions 3.18 et 3.28. Les constantes $A^{(1)}$ et $B^{(1)}$ servent à normaliser selon les relations 3.19 et 3.29. L'énergie de liaison de l'électron est donnée par

$$E = -V_0 (1 - \bar{\zeta}^2 - \bar{\kappa}^2). \quad (3.37)$$

Cette énergie est négative et sa valeur absolue correspond à l'énergie minimale nécessaire pour exciter l'électron lié dans un état du continuum.

3.3.2 L'effet de la barrière de Coulomb sur l'état fondamental

Dans le développement présenté à la section 3.3.1, nous avons déterminé la fonction enveloppe et l'énergie correspondant à l'état électronique fondamental de la boîte quantique. Mais une fois qu'un électron occupe cet état, il modifie légèrement le potentiel électrostatique vu de l'extérieur. Cette modification a pour effet de changer légèrement le potentiel de confinement vu par un éventuel second électron et ainsi l'énergie de confinement de ce second électron. Il est intéressant d'évaluer l'importance de ce décalage en fonction de la géométrie de la boîte quantique afin de déterminer s'il s'agit d'un phénomène pertinent ou non de notre analyse.

Lorsqu'un électron occupe l'état fondamental d'une boîte quantique, sa charge se répartit à l'intérieur de la boîte en première approximation comme le carré de sa fonction enveloppe. D'une façon simplifiée, si un second électron s'approche de la boîte alors le potentiel qu'il verra ne sera pas égal au potentiel effectif de la boîte mais plutôt à la somme du potentiel effectif original et de l'effet du potentiel d'interaction coulombienne entre les deux électrons. L'effet de ce potentiel d'interaction peut donc être assimilé à une réduction de la profondeur du potentiel effectif et, par conséquent, de l'énergie de confinement vue par le second électron. Cette hypothèse simplificatrice ne prend évidemment pas en compte du caractère antisymétrique de la fonction d'onde des deux électrons mais elle nous permet au moins d'estimer l'ordre de grandeur de l'interaction entre les deux électrons.

Pour réduire la complexité de l'évaluation de cet effet, nous assumerons que la densité de charge du premier électron est fixée dans le temps et qu'elle n'est pas modifiée par l'approche du second électron. Prenons le cas simple où la boîte quantique est bornée par

un ellipsoïde de demi-axes a , b et c centré à l'origine. L'équation de la surface frontière de la boîte est donnée par

$$\frac{x^2}{a^2} + \frac{y^2}{b^2} + \frac{z^2}{c^2} = 1 \quad (3.38)$$

et le volume \mathcal{V} à l'intérieur est

$$\mathcal{V} = \frac{4}{3}\pi abc. \quad (3.39)$$

L'équation de Poisson pour le potentiel électrostatique $\psi(\mathbf{r})$ est donnée par

$$\nabla^2 \psi(\mathbf{r}) = -\frac{\rho(\mathbf{r})}{\epsilon} \quad (3.40)$$

où $\rho(\mathbf{r})$ est la densité de charge au point \mathbf{r} et où ϵ est la permittivité du semi-conducteur.

Pour simplifier l'analyse, supposons le potentiel électrostatique à l'infini est nul et que l'électron se répartit uniformément à l'intérieur de l'ellipsoïde, c'est-à-dire que sa fonction enveloppe est constante à l'intérieur de la boîte et nulle à l'extérieur. Comme la charge est concentrée à l'intérieur de l'ellipsoïde alors, d'après l'équation de Poisson, le potentiel créé par la charge est nul partout sauf à l'intérieur de l'ellipsoïde. À cet endroit, l'équation de Poisson s'écrit

$$\nabla^2 \psi = -\frac{e}{\epsilon \mathcal{V}} \quad (3.41)$$

avec $\psi = 0$ sur la surface de l'ellipsoïde.

La solution de cette équation à l'intérieur de l'ellipsoïde est donnée par

$$\psi(x, y, z) = C \left(1 - \frac{x^2}{a^2} - \frac{y^2}{b^2} - \frac{z^2}{c^2} \right) \quad (3.42)$$

où C est une constante à évaluer. Si nous définissons la distance β par

$$\frac{1}{\beta^2} = \frac{1}{a^2} + \frac{1}{b^2} + \frac{1}{c^2} \quad (3.43)$$

alors l'expression du laplacien à l'intérieur de l'ellipsoïde devient

$$\nabla^2 \psi = -2C \left(\frac{1}{a^2} + \frac{1}{b^2} + \frac{1}{c^2} \right) = -\frac{2C}{\beta^2}. \quad (3.44)$$

En comparant cette expression avec l'équation 3.41, nous obtenons la valeur de C :

$$C = -\frac{e\beta^2}{2\epsilon\mathcal{V}}. \quad (3.45)$$

Nous trouvons donc que l'énergie d'interaction E_{int} entre un électron lié et un second électron est égale à l'intérieur de la boîte à

$$E_{int}(x, y, z) = -e\psi(x, y, z) = \frac{e^2\beta^2}{2\epsilon\mathcal{V}} \left(1 - \frac{x^2}{a^2} - \frac{y^2}{b^2} - \frac{z^2}{c^2}\right) \quad (3.46)$$

et cette énergie est nulle à l'extérieur de la boîte. L'énergie d'interaction E_{int} entre les deux électrons dépend donc de la position (x, y, z) du second électron par rapport à l'origine du système.

Or, nous avons choisi comme hypothèse de modéliser l'effet de la présence d'un électron sur le second par un changement de profondeur du potentiel effectif, c'est-à-dire par l'ajout d'une constante d'interaction entre les deux électrons sur tout le volume de la boîte. Pour simplifier notre analyse, nous posons que cette constante d'interaction est égale à la valeur moyenne de l'énergie d'interaction entre les deux électrons sur tout le volume de la boîte. Nous appelons cette contribution la *barrière de Coulomb* et nous la notons $\langle E_{int} \rangle$. La valeur de cette énergie est donnée par

$$\langle E_{int} \rangle = -B \frac{e^2\beta^2}{2\epsilon\mathcal{V}} \quad (3.47)$$

avec

$$B = \frac{1}{\mathcal{V}} \int_{\mathcal{V}} \left(1 - \frac{x^2}{a^2} - \frac{y^2}{b^2} - \frac{z^2}{c^2}\right) d\mathcal{V} = \frac{2}{5} \quad (3.48)$$

pour tous les ellipsoïdes.

Dans le cas d'une sphère, $r = a = b = c$ et $\beta^2 = \frac{r^2}{3}$. L'expression de la barrière de Coulomb se simplifie et prend la forme de

$$\langle E_{int} \rangle = \frac{e^2}{20\pi\epsilon r}. \quad (3.49)$$

Si $\epsilon \sim 10\epsilon_0$, le rayon de la sphère présentant une barrière de Coulomb de l'ordre de 10 meV vaut environ $2,8 \text{ nm}$, ce qui est beaucoup plus petit que la taille moyenne d'une boîte quantique construite par la méthode Stranski-Krastanov. Nous constatons aussi que la hauteur de la barrière de Coulomb est inversement proportionnelle au rayon de la sphère.

Dans le cas où nous avons un ellipsoïde très aplati ($a \ll b, c$), nous avons que $\beta \sim a$ et par conséquent l'expression de la barrière de Coulomb prend la forme

$$\langle E_{int} \rangle = \frac{3e^2 a}{20\pi\epsilon b c}. \quad (3.50)$$

Pour cette géométrie, nous définissons un rayon équivalent r_{eq} tel que

$$r_{eq} = \frac{bc}{3a}. \quad (3.51)$$

Le rayon équivalent r_{eq} est égal au rayon d'une sphère ayant la même barrière de Coulomb que l'ellipsoïde aplati. Dans le cas où les axes de l'ellipsoïde ont comme longueur $2a = 6,6 \text{ nm}$, $2b = 66 \text{ nm}$ et $2c = 66 \text{ nm}$, alors le diamètre équivalent est $2r_{eq} = 110 \text{ nm}$. La barrière de Coulomb pour une telle sphère ne vaut alors plus que $0,5 \text{ meV}$, ce qui est beaucoup trop petit pour être considéré comme étant un effet important dans la boîte. Nous voyons donc que le fait d'aplatir la boîte *diminue* la hauteur de la barrière de Coulomb. Autrement dit, à volume égaux, un disque aura une barrière de Coulomb beaucoup plus petite qu'une sphère.

Nous concluons donc que l'effet de la barrière de Coulomb, dans le cadre des boîtes quantiques étudiées dans ce mémoire, n'est pas significatif et nous n'en tiendrons pas compte dans la suite de ce travail.

3.4 Spectre des états liés

Dans cette section, nous allons établir l'aspect général du spectre des états liés aux boîtes quantiques, afin de comprendre les propriétés d'absorption optique d'une boîte quantique.

Nous allons d'abord estimer l'espacement entre deux états confinés successifs. Cet espacement peut être estimée à partir de l'expression de l'énergie d'un état lié, tel que défini à la section 3.2.4 :

$$E_{mnp} = -V_0 (1 - \bar{\zeta}_p^2 - \bar{\kappa}_{mn}^2). \quad (3.52)$$

Si le potentiel de confinement est presque infini ou si l'état fondamental est presque au fond du puits de potentiel, alors la distance entre les deux premiers états de confinement selon l'axe \hat{z} est approximativement donnée par

$$V_0 (\bar{\zeta}_2^2 - \bar{\zeta}_1^2) \sim (2^2 - 1^2) \frac{\pi^2 V_0}{(2\bar{h})^2} \sim 7,40 \frac{V_0}{\bar{h}^2} \quad (3.53)$$

où $2\bar{h}$ est la hauteur normalisée de la boîte.

Dans le plan $\hat{x}\hat{y}$, le problème est un peu plus complexe. Le premier zéro de la fonction de Bessel J_0 est situé à environ 2,40, tandis que le premier zéro de la fonction de Bessel J_1 est situé à environ 3,83. La distance entre les deux premiers états de confinement dans le plan $\hat{x}\hat{y}$ est donc approximativement donnée pour un potentiel de confinement infini par

$$V_0 (\bar{\kappa}_{11}^2 - \bar{\kappa}_{01}^2) \sim (3,83^2 - 2,40^2) \frac{V_0}{\bar{a}^2} \sim 8,90 \frac{V_0}{\bar{a}^2} \quad (3.54)$$

où $2\bar{a}$ est le diamètre normalisé de la boîte.

Il est important de noter que ces approximations surestiment légèrement l'écart énergétique entre deux états successifs. En effet, comme le potentiel réel n'est pas infini, la fonction enveloppe pénètre légèrement dans la barrière, ce qui a comme résultat de réduire l'énergie de confinement de chaque état. De plus, cette réduction augmente avec l'énergie de l'état lié. Malgré cette erreur systématique, nous pouvons au moins estimer l'ordre de grandeur des écarts énergétiques entre deux états.

Pour une boîte quantique ayant un rapport d'aspect de l'ordre de $\frac{\bar{a}}{\bar{h}} \sim 10$, nous pouvons conclure que le confinement selon l'axe \hat{z} est beaucoup plus important que dans le plan $\hat{x}\hat{y}$. En effet, nous avons

$$\frac{\bar{\zeta}_2^2 - \bar{\zeta}_1^2}{\bar{\kappa}_{11}^2 - \bar{\kappa}_{01}^2} \sim 1,2 \frac{\bar{a}^2}{\bar{h}^2} \sim 120. \quad (3.55)$$

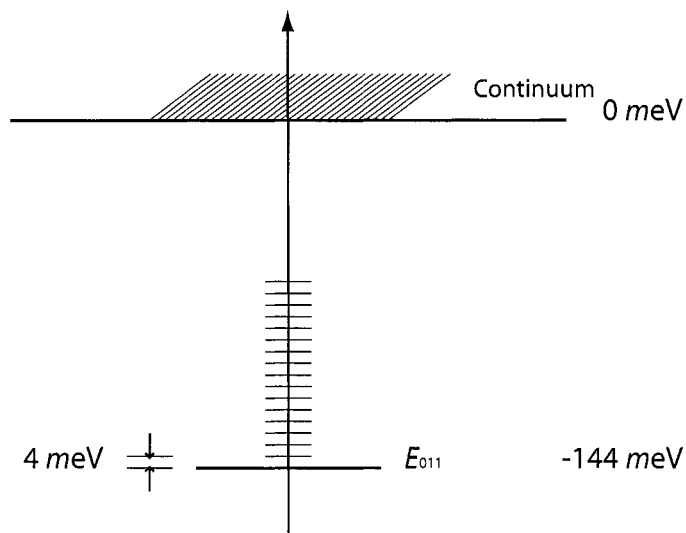


FIG. 3.1 – Spectre des états liés à l'intérieur d'une boîte quantique

Nous remarquons que l'écart entre deux états de confinement selon l'axe \hat{z} est beaucoup plus grand qu'entre deux états de confinement dans le plan $\hat{x}\hat{y}$. La figure 3.1 présente le spectre d'états liés pour un potentiel effectif de 200 meV et une taille normalisée de cylindre de $2\bar{h} = 4$ et un diamètre normalisé de $2\bar{a} = 40$. Nous voyons un état principal correspondant à l'état de confinement selon l'axe \hat{z} suivi d'une queue d'états rapprochés, les états de confinement dans le plan $\hat{x}\hat{y}$.

Chapitre 4

Évaluation de l'émission d'électrons

Dans ce chapitre, nous déterminons à partir du modèle de boîte quantique présenté au chapitre 3 le taux d'*émission d'électrons* d'une boîte quantique moyenne, c'est-à-dire le nombre d'électrons liés à une boîte quantique qui sont excités vers un état libre du continuum par unité de temps dans des conditions semblables à celles lors de l'opération d'un photodétecteur. Cette évaluation est utilisée au chapitre 5 pour déterminer les propriétés électriques et optiques d'un photodétecteur à boîtes quantiques.

Nous divisons l'émission d'électrons en trois principales catégories, activées par trois phénomènes physiques de natures différentes. D'abord, l'émission d'électrons par absorption de rayonnement infrarouge, traitée à la section 4.1, dépend essentiellement de l'illumination infrarouge. Ensuite, l'émission d'électrons par effet tunnel, examinée à la section 4.2, dépend surtout du champ électrique appliqué à l'intérieur du dispositif. Finalement, l'émission thermoélectronique, traitée à la section 4.3, dépend principalement de la température du dispositif.

Nous rappelons que pour simplifier l'analyse dans ce travail, nous ne considérerons que les hétérostructures semi-conductrices de type n et nous faisons l'hypothèse que les atomes donneurs s'ionisent tous. De cette façon, la densité d'électrons de conduction moyenne dans le dispositif est approximativement égale à la densité d'atomes donneurs. Nous considérons aussi que la densité de trous dans les bandes de valence est négligeable,

c'est-à-dire qu'elle est beaucoup plus faible que la densité d'électrons dans la bande de conduction.

Nous négligeons aussi les transitions incluant un état intermédiaire en ne considérant que les transition entre l'état fondamental et un état du continuum. Cette approximation ne tient pas compte des transitions assistées thermiquement ou par d'autres processus, mais nous permet quand même d'évaluer l'ordre de grandeur des différentes composantes du taux d'émission.

Ces simplifications nous permettent d'ignorer complètement la présence des bandes pleines ou vides et nous ne considérerons à partir de maintenant que l'unique bande partiellement occupée, c'est-à-dire la bande de conduction.

4.1 Émission d'électrons par absorption de rayonnement infrarouge

Lors d'une expérience de télédétection, le rayonnement électromagnétique reçu par un photodétecteur à boîtes quantiques est généralement équivalent à celui émis par un corps noir de température T . Ce rayonnement peut être représenté en première approximation comme étant une somme d'ondes monochromatiques incohérentes, le flux différentiel d'énergie $\mathcal{I}(\omega, T)$ transporté par chacune de ces ondes monochromatiques étant donné par la loi de Planck

$$\mathcal{I}(\omega, T) d\omega = \frac{2\hbar}{c^2} \frac{\omega^3}{(2\pi)^3} \left(\frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega}{k_B T}} - 1} \right) d\omega \quad (4.1)$$

où \hbar est la constante de Planck, c la vitesse de la lumière, k_B la constante de Boltzmann et ω la fréquence de l'onde. Cette quantité, intégrée sur toutes les valeurs de ω , est égale au flux total d'énergie transporté par le paquet d'ondes.

Si ce rayonnement éclaire une boîte quantique contenant un électron dans l'état fondamental alors cet électron aura une probabilité non nulle d'interagir avec un photon du rayonnement et d'être excité vers un état libre du continuum. Pour évaluer cette proba-

bilité, nous évaluons d'abord la probabilité d'excitation \mathcal{P}_ω associé à une onde monochromatique de fréquence ω . En utilisant l'hypothèse d'incohérence entre les différentes composantes spectrales du rayonnement, nous obtenons que le taux d'émission d'électrons total associé au rayonnement d'un corps noir de température T est égal à l'intégrale de la quantité \mathcal{P}_ω pour toutes les fréquences ω du paquet d'onde. Cette quantité permet d'obtenir le courant d'émission pour une boîte quantique de taille moyenne.

4.1.1 Approximation dipolaire électrique

Considérons d'abord l'onde monochromatique de fréquence $\omega > 0$ et d'amplitude maximale F_0 . Le champ électrique associé à cette onde s'écrit

$$\mathbf{F}(\mathbf{r}, t) = F_0 \cos(\omega t - \mathbf{q} \cdot \mathbf{r}) \quad (4.2)$$

avec \mathbf{q} le vecteur d'onde dirigé selon l'axe de propagation de l'onde et évidemment les relations $\mathbf{F}_0 \cdot \mathbf{q} = 0$ et $|\mathbf{q}| = |\omega| \frac{n_r}{c}$ où n_r est l'indice de réfraction du milieu.

Nous remarquons d'abord que le vecteur d'onde \mathbf{q} d'un photon infrarouge incident correspond à une très grande longueur d'onde (de l'ordre de plusieurs fois la taille caractéristique d'une boîte quantique). Par conséquent, nous négligeons le terme $\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}$ dans l'expression 4.2, car nous avons au premier ordre que

$$\cos(\omega t - \mathbf{q} \cdot \mathbf{r}) \sim \cos(\omega t) + (\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}) \sin(\omega t) \quad (4.3)$$

et $\mathbf{q} \cdot \mathbf{r} \sim \frac{2\pi}{\lambda} \sqrt{S}$, où λ est la longueur d'onde du rayonnement infrarouge et S est la surface moyenne d'une boîte quantique. Lorsque par exemple $\lambda \sim 10 \mu\text{m}$ et $\sqrt{S} \sim 50 \text{ nm}$, nous voyons bien que $\mathbf{q} \cdot \mathbf{r} \sim 0,03 \ll 1$ et donc que $\cos(\omega t - \mathbf{q} \cdot \mathbf{r}) \sim \cos(\omega t)$. Cette approximation porte le nom d'*approximation dipolaire électrique* et revient à considérer que l'électron baigne dans un champ électrique uniforme dans l'espace et périodique dans le temps. L'expression simplifiée du champ électrique devient donc

$$\mathbf{F}(t) = F_0 \cos(\omega t). \quad (4.4)$$

C'est ce champ qui cause l'excitation de l'électron de l'état fondamental vers un état du continuum.

4.1.2 Hamiltonien d'interaction avec l'onde électromagnétique

D'une façon générale, l'hamiltonien d'une charge électrique q de masse m dans le potentiel électrique V et le potentiel vecteur \mathbf{A} peut s'écrire comme $\mathcal{H}_{1q} = \frac{1}{2m} (\mathbf{p} - q\mathbf{A})^2 + V$. Par analogie et dans l'esprit de la méthode de la fonction enveloppe avec l'approximation de la masse effective, nous définissons l'hamiltonien d'un électron soumis au potentiel effectif V'_{eff} comme étant

$$\mathcal{H}'_{eff} = \frac{1}{2m^*} (\mathbf{p} + e\mathbf{A})^2 + V'_{eff} \quad (4.5)$$

où m^* est la masse effective de l'électron et où $-e$ est sa charge.

Nous développons le terme $(\mathbf{p} + e\mathbf{A})^2$ et en négligeant le terme proportionnel à $(e\mathbf{A})^2$, nous obtenons

$$\mathcal{H}'_{eff} = \frac{p^2}{2m^*} + V'_{eff} + \frac{e}{2m^*} (\mathbf{p} \cdot \mathbf{A} + \mathbf{A} \cdot \mathbf{p}). \quad (4.6)$$

Le membre de droite de cette équation se sépare en deux parties. D'abord, la somme des deux premiers termes est égale à l'hamiltonien présenté à l'équation 3.7 et utilisé pour déterminer les états électroniques liés à la boîte quantique. Le reste du membre de droite représente l'hamiltonien d'interaction entre un électron et la radiation infrarouge. Nous le définissons comme étant égal à

$$\mathcal{H}_{\mathbf{A} \cdot \mathbf{p}} = \frac{e}{2m^*} (\mathbf{p} \cdot \mathbf{A} + \mathbf{A} \cdot \mathbf{p}). \quad (4.7)$$

Afin de simplifier l'expression de cet hamiltonien d'interaction, nous nous plaçons dans la jauge de Coulomb. En notant le potentiel électrique Φ et le potentiel vecteur \mathbf{A} , nous avons donc les relations

$$\nabla \Phi = 0, \quad (4.8)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{A} = 0. \quad (4.9)$$

En utilisant l'identité $\mathbf{p} = \frac{\hbar}{i}\nabla$, ce choix de jauge permet d'écrire

$$\mathbf{p} \cdot \mathbf{A} = \mathbf{A} \cdot \frac{\hbar}{i}\nabla + \frac{\hbar}{i}\nabla \cdot \mathbf{A} = \mathbf{A} \cdot \mathbf{p} \quad (4.10)$$

et finalement l'hamiltonien d'interaction donnée à l'expression 4.7 devient

$$\mathcal{H}_{\mathbf{A},\mathbf{p}} = \frac{e}{m^*}\mathbf{A} \cdot \mathbf{p}. \quad (4.11)$$

Le potentiel vecteur \mathbf{A} associé à une onde plane monochromatique peut être déterminé à partir du champ électrique. En effet, dans la jauge de Coulomb, ces deux quantités sont reliées par la relation

$$\mathbf{F} = -\frac{\partial}{\partial t}\mathbf{A}. \quad (4.12)$$

L'expression du potentiel vecteur se détermine à l'aide de l'expression 4.4 du champ électrique d'une onde plane

$$\mathbf{A}(t) = -\frac{\mathbf{F}_0}{\omega}\sin(\omega t) \quad (4.13)$$

et finalement nous obtenons l'expression de l'hamiltonien d'interaction

$$\mathcal{H}_{\mathbf{A},\mathbf{p}}(t) = -\frac{e\sin(\omega t)}{m^*\omega}\mathbf{F}_0 \cdot \mathbf{p}. \quad (4.14)$$

4.1.3 Probabilité de transition entre l'état fondamental et le continuum

La méthode la plus simple pour évaluer la probabilité de transition entre l'état fondamental et le continuum consiste à utiliser la théorie des perturbations au premier ordre. Nous notons $|C\rangle$ l'état fondamental occupé par un électron dans la boîte quantique et $|\mathbf{k}\rangle$ les états du continuum. L'énergie de l'état $|C\rangle$ est notée E et les énergies des états $|\mathbf{k}\rangle$ sont notées $\epsilon_{\mathbf{k}}$. Nous supposons que la fonction enveloppe associée à l'état $|C\rangle$ est la fonction 3.34 et que la fonction enveloppe des états du continuum sont simplement des ondes planes de la forme $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ à normer convenablement.

La probabilité moyenne d'interaction $\mathcal{N}_\omega(\mathbf{k})$ pendant l'intervalle de temps t entre un photon d'énergie $\hbar\omega$ et l'électron est donnée par l'expression [34]

$$\mathcal{N}_\omega(\mathbf{k}) = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_0^t e^{i\omega_{\mathbf{k}}t'} \langle \mathbf{k} | \mathcal{H}_{\mathbf{A} \cdot \mathbf{p}}(t') | C \rangle dt' \right|^2 \quad (4.15)$$

avec

$$\omega_{\mathbf{k}} = \frac{1}{\hbar}(\epsilon_{\mathbf{k}} - E). \quad (4.16)$$

Cette probabilité \mathcal{N}_ω dépend explicitement de la durée t pendant laquelle l'onde électromagnétique illumine l'électron. Si nous remplaçons l'hamiltonien d'interaction par sa forme donnée à l'équation 4.14, nous retrouvons

$$\mathcal{N}_\omega(\mathbf{k}) = \left(\frac{eF_0}{\hbar m^* \omega} \right)^2 \left| \langle \mathbf{k} | \hat{\epsilon}_\lambda \cdot \mathbf{p} | C \rangle \int_0^t e^{i\omega_{\mathbf{k}}t'} \sin(\omega t') dt' \right|^2 \quad (4.17)$$

où $\hat{\epsilon}_\lambda$ est un vecteur unitaire orienté selon la direction de la polarisation de l'onde.

Nous remarquons que l'intégrale dans l'expression 4.17 possède deux maxima, pour $\omega \sim \omega_{\mathbf{k}}$ et pour $\omega \sim -\omega_{\mathbf{k}}$. Le maximum $\omega \sim \omega_{\mathbf{k}}$ correspond au phénomène d'absorption d'un photon et le maximum $\omega \sim -\omega_{\mathbf{k}}$ à l'émission d'un photon. Si le temps d'exposition au signal optique est suffisamment long, c'est-à-dire si $t \gg \omega_{\mathbf{k}}^{-1} = \hbar(\epsilon_{\mathbf{k}} - E)^{-1}$, alors nous pouvons simplifier l'expression du sinus à l'intérieur de l'intégrale

$$\int_0^t e^{i\omega_{\mathbf{k}}t'} \sin(\omega t') dt' \sim \int_0^t e^{i\omega_{\mathbf{k}}t'} \left(\frac{1}{2i} e^{-i\omega t'} \right) dt' \quad (4.18)$$

car nous avons nécessairement d'après l'équation 4.16 que $\omega_{\mathbf{k}} > 0$ pour le phénomène d'absorption. L'autre contribution (celle en $\frac{1}{2i} e^{+i\omega t'}$) n'apporte qu'une correction de l'ordre de $(\omega_{\mathbf{k}} + \omega)^{-1}$ qui peut être négligée en première approximation.

L'intégrale simplifiée se résout alors aisément, et nous avons

$$\frac{1}{2i} \int_0^t e^{i(\omega_{\mathbf{k}} - \omega)t'} dt' = \frac{1}{2i} \frac{\sin((\omega_{\mathbf{k}} - \omega)t/2)}{(\omega_{\mathbf{k}} - \omega)/2} e^{i(\omega_{\mathbf{k}} - \omega)t/2}. \quad (4.19)$$

Nous voyons que le résultat est proportionnel à $(\omega_{\mathbf{k}} - \omega)^{-1}$, ce qui justifie *a posteriori* l'approximation de remplacer l'expression du sinus par l'exponentielle complexe dans l'expression 4.18.

La probabilité moyenne d'interaction 4.17 s'exprime alors comme

$$\mathcal{N}_\omega(\mathbf{k}) = \left(\frac{eF_0}{2\hbar m^* \omega} \frac{\sin((\omega_{\mathbf{k}} - \omega)t/2)}{(\omega_{\mathbf{k}} - \omega)/2} \right)^2 |\langle \mathbf{k} | \hat{\epsilon}_\lambda \cdot \mathbf{p} | C \rangle|^2. \quad (4.20)$$

Cette probabilité croît indéfiniment pour $\omega = \omega_{\mathbf{k}}$ lorsque $t \rightarrow \infty$. Cependant, si nous examinons le nombre d'interactions par unité de temps pour un temps assez long, alors nous pouvons définir la probabilité de transition moyenne par unité de temps comme

$$\mathcal{P}_\omega(\mathbf{k}) = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \mathcal{N}_\omega(\mathbf{k}), \quad (4.21)$$

de façon à ce que

$$\mathcal{P}_\omega(\mathbf{k}) = \left(\frac{eF_0}{2\hbar m^* \omega} \right)^2 |\langle \mathbf{k} | \hat{\epsilon}_\lambda \cdot \mathbf{p} | C \rangle|^2 \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \left(\frac{\sin((\omega_{\mathbf{k}} - \omega)t/2)}{(\omega_{\mathbf{k}} - \omega)/2} \right)^2. \quad (4.22)$$

La limite dans le membre de droite vaut au sens de la théorie des distributions [35]

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \left(\frac{\sin((\omega_{\mathbf{k}} - \omega)t/2)}{(\omega_{\mathbf{k}} - \omega)/2} \right)^2 = 2\pi \delta(\omega_{\mathbf{k}} - \omega) \quad (4.23)$$

où le symbole δ représente la distribution de Dirac. La probabilité 4.22 vaut donc

$$\mathcal{P}_\omega(\mathbf{k}) = 2\pi \left(\frac{eF_0}{2\hbar m^* \omega} \right)^2 |\langle \mathbf{k} | \hat{\epsilon}_\lambda \cdot \mathbf{p} | C \rangle|^2 \delta(\omega_{\mathbf{k}} - \omega). \quad (4.24)$$

Pour évaluer cette probabilité, nous calculons l'élément de matrice $\langle \mathbf{k} | \hat{\epsilon}_\lambda \cdot \mathbf{p} | C \rangle$ en fonction de la forme de la fonction enveloppe associée à l'état $|C\rangle$ pour une boîte quantique de forme cylindrique. Afin d'effectuer ce calcul, nous devons normer la fonction d'onde associée à l'état $|\mathbf{k}\rangle$. Nous avons choisi d'effectuer cette normalisation en utilisant une démarche semblable à celle présentée par Bastard pour l'étude de l'absorption optique dans un puits quantique [36]. Nous considérons que le volume Ω de normalisation correspond approximativement au volume de la région d'absorption optique divisé par le nombre de boîtes quantiques dans le dispositif, c'est-à-dire

$$\Omega = \frac{L}{D}, \quad (4.25)$$

avec L la distance entre deux plans de boîtes quantiques et \mathcal{D} la densité de boîtes quantiques dans un plan. Avec cette notation, la fonction enveloppe des états du continuum correspondent à des ondes planes normées par la constante multiplicative $\Omega^{-\frac{1}{2}}$.

L'intégrale dans l'expression de l'élément de matrice de l'équation 4.24 est effectuée sur un volume de taille Ω qui inclut la boîte quantique et son voisinage. Or, comme la fonction enveloppe correspondant à l'état $|C\rangle$ devient rapidement négligeable à l'extérieur de la boîte quantique, alors nous pouvons considérer que le recouvrement entre les deux fonctions enveloppes loin à l'extérieur de la boîte quantique est négligeable et que l'intégrale sur le domaine Ω est approximativement égale à l'intégrale sur tout l'espace.

Avec cette approximation, l'élément de matrice de l'équation 4.24 se réécrit comme

$$\langle \mathbf{k} | \hat{\epsilon}_\lambda \cdot \mathbf{p} | C \rangle = \frac{\hbar}{i\Omega^{\frac{1}{2}}} \hat{\epsilon}_\lambda \cdot \int e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \nabla C(\mathbf{r}) d\mathbf{v}. \quad (4.26)$$

En utilisant les propriétés de la transformation de Fourier et la fonction enveloppe 3.34, nous pouvons écrire l'intégrale du membre de droite comme

$$\int e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \nabla C d\mathbf{v} = i\mathbf{k} \int e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} C d\mathbf{v}, \quad (4.27)$$

$$= \frac{i\mathbf{k}}{\sqrt{2\pi}} \int e^{-ik_z z} Z(z) dz \iint e^{-i(k_x x + k_y y)} R(\rho) dy dx. \quad (4.28)$$

La première intégrale est simplement au facteur $\sqrt{2\pi}$ près la transformée de Fourier de la fonction $Z(z)$, que nous noterons $\hat{Z}(k_z)$. Notons $\hat{R}(k_\parallel, \theta')$ la transformée de Fourier en coordonnées radiales de R . Cette transformée s'exprime comme

$$\hat{R}(k_\parallel, \theta') = \frac{1}{2\pi} \int_0^\infty \int_0^{2\pi} e^{-ik_\parallel \rho \cos(\theta - \theta')} R(\rho) \rho d\rho d\theta \quad (4.29)$$

avec k_\parallel le module de la projection de \mathbf{k} sur le plan $\hat{x}\hat{y}$ et θ' l'angle azimutal du vecteur \mathbf{k} .

Par symétrie radiale, nous voyons que la fonction \hat{R} ne dépend pas du paramètre θ' . En utilisant l'identité

$$\int_0^{2\pi} e^{\pm i\chi \cos(\theta)} d\theta = 2\pi J_0(\chi) \quad (4.30)$$

et en intégrant le membre de droite de l'équation 4.29 selon θ , nous retrouvons

$$\hat{R}(k_{\parallel}) = \int_0^{\infty} J_0(k_{\parallel}\rho) R(\rho) \rho \, d\rho. \quad (4.31)$$

Cette fonction $\hat{R}(k_{\parallel})$ est appelée *transformée de Hankel d'ordre 0 de la fonction R* et est une sorte d'équivalent de la transformée de Fourier en coordonnées polaires. La transformée de Hankel inverse est formellement identique à la transformée de Hankel.

L'élément de matrice de l'équation 4.24 s'exprime donc comme

$$\langle \mathbf{k} | \hat{\epsilon}_{\lambda} \cdot \mathbf{p} | C \rangle = \frac{2\pi\hbar}{\Omega^{\frac{1}{2}}} \hat{Z}(k_z) \hat{R}(k_{\parallel}) (\hat{\epsilon}_{\lambda} \cdot \mathbf{k}). \quad (4.32)$$

Les deux fonction \hat{Z} et \hat{R} étant des fonctions réelles, nous pouvons réécrire la probabilité de transition entre l'état fondamental lié et un état $|\mathbf{k}\rangle$ du continuum comme

$$\mathcal{P}_{\omega}(k_z, k_{\parallel}) = \frac{(2\pi)^3}{4\Omega} \left(\frac{eF_0}{m^*\omega} \right)^2 (\hat{\epsilon}_{\lambda} \cdot \mathbf{k})^2 \hat{Z}^2(k_z) \hat{R}^2(k_{\parallel}) \delta(\omega_{\mathbf{k}} - \omega). \quad (4.33)$$

4.1.4 Calcul du coefficient d'absorption optique

La probabilité totale \mathcal{P}_{ω} de transition entre l'état fondamental d'une boîte quantique de volume \mathcal{V} et un état électronique quelconque de la bande de conduction causé par l'absorption d'un photon d'énergie $\hbar\omega$ est égale à l'intégrale sur tous les états \mathbf{k} de la zone de Brillouin de l'expression 4.33 multipliée par le volume de la boîte quantique. Comme les fonctions \hat{Z} et \hat{R} sont localisées au centre de la zone de Brillouin, nous pouvons étendre l'intégrale à tout l'espace réciproque sans changer de façon significative le résultat et obtenir

$$\mathcal{P}_{\omega} = \mathcal{V} \int \mathcal{P}_{\omega}(k_z, k_{\parallel}) \, d\mathbf{k} \quad (4.34)$$

c'est-à-dire

$$\mathcal{P}_{\omega} = \frac{(2\pi)^3 m^* \mathcal{V}}{2\hbar\Omega} \left(\frac{eF_0}{m^*\omega} \right)^2 \int (\hat{\epsilon}_{\lambda} \cdot \mathbf{k})^2 \hat{Z}^2 \hat{R}^2 \delta(\mathbf{k}^2 - Q_0^2) \, d\mathbf{k} \quad (4.35)$$

avec $Q_0^2 = \frac{2m^*}{\hbar^2} (E + \hbar\omega)$.

Examinons d'abord l'intégrale dans l'espace réciproque. Lorsque le vecteur $\hat{\epsilon}_\lambda$ est polarisé dans le plan $\hat{x}\hat{y}$, c'est-à-dire lorsque l'onde est d'incidence normale, nous avons $\hat{\epsilon}_\lambda \cdot \mathbf{k} = k_\parallel \cos(\theta)$, où θ représente l'angle azimutal du système de coordonnées cylindriques. En explicitant l'intégrale en coordonnées cylindriques et en intégrant selon θ , nous obtenons

$$\int (\hat{\epsilon}_\lambda \cdot \mathbf{k})^2 \hat{Z}^2 \hat{R}^2 \delta(\mathbf{k}^2 - Q_0^2) d\mathbf{k} = \pi \int_{-\infty}^{+\infty} \int_0^\infty k_\parallel^3 \hat{Z}^2 \hat{R}^2 \delta(k_\parallel^2 + k_z^2 - Q_0^2) dk_\parallel dk_z. \quad (4.36)$$

Dans cette intégrale, le symbole δ se développe comme la somme de deux termes

$$\delta(k_\parallel^2 - (Q_0^2 - k_z^2)) = \frac{1}{2\sqrt{Q_0^2 - k_z^2}} \left[\delta\left(k_\parallel - \sqrt{Q_0^2 - k_z^2}\right) + \delta\left(k_\parallel + \sqrt{Q_0^2 - k_z^2}\right) \right] \quad (4.37)$$

car $k_z^2 \leq Q_0^2$ lors de l'absorption d'un photon.

Or, comme nous n'intégrons selon la variable k_\parallel que de 0 à l'infini, seul le premier terme sera pertinent dans l'évaluation de l'intégrale 4.37. Nous retrouvons donc après intégration selon k_\parallel que

$$\mathcal{P}_\omega = \frac{2\pi^4 m^* \mathcal{V}}{\hbar \Omega} \left(\frac{eF_0}{m^* \omega} \right)^2 \int_{-Q_0}^{+Q_0} (Q_0^2 - k_z^2) \hat{Z}^2(k_z) \hat{R}^2\left(\sqrt{Q_0^2 - k_z^2}\right) dk_z. \quad (4.38)$$

Cette probabilité exprime le taux d'émission d'électrons par boîte quantique pour une onde monochromatique de fréquence ω et se mesure en nombre d'événements par unité de temps. Lorsque le temps d'exposition t est grand, nous pouvons relier le carré du champ électrique maximal F_0^2 de l'onde monochromatique au flux d'énergie \mathcal{I} transporté par l'onde [37]

$$\mathcal{I} = \frac{1}{2} v \epsilon_0 \epsilon_r F_0^2 \quad (4.39)$$

où ϵ_r et v sont respectivement la permittivité relative et la vitesse de la lumière dans le milieu diélectrique, où ϵ_0 est la permittivité du vide. Comme $v = \frac{c}{n_r}$ et que $n_r \sim \sqrt{\epsilon_r}$, nous retrouvons

$$\mathcal{I} = \frac{1}{2} c \epsilon_0 \sqrt{\epsilon_r} F_0^2 \quad (4.40)$$

où c est la vitesse de la lumière.

Pour passer de ce résultat à la probabilité d'excitation pour un paquet d'ondes, nous introduisons le flux différentiel $\mathcal{I}(\omega')$, qui possède des unités de flux par unité de fréquence. Pour une onde monochromatique de fréquence ω et d'intensité maximale F_0 , ce flux différentiel s'exprime comme

$$\mathcal{I}(\omega') = \frac{1}{2} c \epsilon_0 \sqrt{\epsilon_r} F_0^2 \delta(\omega' - \omega) \quad (4.41)$$

de façon à ce que

$$\int \mathcal{I}(\omega') d\omega' = \frac{1}{2} c \epsilon_0 \sqrt{\epsilon_r} F_0^2. \quad (4.42)$$

De façon analogue, nous remplaçons la quantité F_0^2 dans l'équation 4.38, qui a été développée pour une onde plane, par l'intégrale

$$\frac{2}{c \epsilon_0 \sqrt{\epsilon_r}} \int d\omega' \mathcal{I}(\omega') \quad (4.43)$$

avec $\mathcal{I}(\omega')$ le rayonnement associé à un paquet d'onde quelconque. Nous retrouvons

$$\mathcal{P} = \frac{4\pi^4 e^2 \mathcal{V}}{\hbar c \epsilon_0 \sqrt{\epsilon_r} m^* \Omega} \int_{\frac{|E|}{\hbar}}^{\infty} \frac{\mathcal{I}(\omega)}{\omega^2} \int_{-Q_0}^{+Q_0} (Q_0^2 - k_z^2) \hat{Z}^2(k_z) \hat{R}^2 \left(\sqrt{Q_0^2 - k_z^2} \right) dk_z d\omega. \quad (4.44)$$

L'intégrale est effectuée à partir de $\frac{|E|}{\hbar}$ parce qu'il s'agit de la fréquence minimale d'absorption par le système. Lorsque le rayonnement provient d'un corps noir, $\mathcal{I}(\omega)$ est donné par l'équation 4.1 et nous obtenons

$$\mathcal{P} = \frac{\pi e^2 \mathcal{V}}{c^3 \epsilon_0 \sqrt{\epsilon_r} m^* \Omega} \int_{\frac{|E|}{\hbar}}^{\infty} \frac{\omega}{e^{\frac{\hbar \omega}{k_B T}} - 1} \int_{-Q_0}^{+Q_0} (Q_0^2 - k_z^2) \hat{Z}^2(k_z) \hat{R}^2 \left(\sqrt{Q_0^2 - k_z^2} \right) dk_z d\omega. \quad (4.45)$$

Finalement, si nous notons f le facteur d'occupation de l'état fondamental de la boîte quantique, alors le courant d'émission i_ϕ par boîte quantique s'écrit

$$i_\phi = -f e \mathcal{P}. \quad (4.46)$$

4.1.5 Présentation des résultats

Nous utilisons l'équation 4.38 pour calculer l'absorption optique dans le cas où une onde monochromatique éclaire la boîte quantique. Prenons le cas où la masse effective des électrons $m^* = 0,07m_e$ avec la profondeur de puits de potentiel $V_0 = 200 \text{ meV}$. Pour une boîte quantique de hauteur $2h = 6,6 \text{ nm}$ et de diamètre $2a = 66 \text{ nm}$, nous avons que l'énergie de liaison de l'état fondamental est $E \sim -144 \text{ meV}$.

Le graphique d'absorption pour quatre ondes monochromatiques incidentes est donné à la figure 4.1. L'abscisse présente la composante k_z de l'état électronique final et l'or-

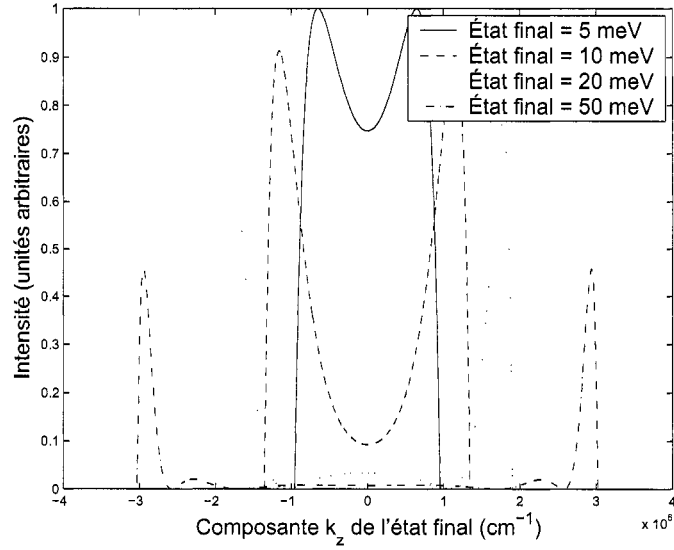


FIG. 4.1 – L'absorption par une boîte quantique cylindrique pour quatre ondes monochromatiques

donnée l'intensité relative de la transition. Nous voyons que l'absorption se fait principalement pour des valeurs de k_z voisines de $\pm Q_0$, soit pour des valeurs de k_{\parallel} voisines de 0, car $k_z^2 + k_{\parallel}^2 = Q_0^2$ par conservation de l'énergie. Cette tendance devient de plus en plus évidente à mesure que l'énergie des états finaux est augmentée.

Cette observation s'explique de façon qualitative par l'argument suivant. Nous savons

que la fonction enveloppe de l'état électronique fondamental lié à la boîte quantique est étalée principalement dans le plan $\hat{x}\hat{y}$ dans l'espace direct à cause de la géométrie aplatie de la boîte quantique et par conséquent que son confinement est plus important selon l'axe \hat{z} que selon les deux autres axes orthogonaux. Nous nous attendons donc à ce que la représentation de la fonction enveloppe de cet état lié dans l'espace réciproque soit beaucoup plus étalée selon l'axe \hat{k}_z que selon les autres axes. Comme l'absorption correspond en gros à l'intégrale de la valeur de cette fonction sur une sphère de rayon proportionnel à l'énergie de l'état final, nous voyons que les états qui apporteront la plus grande contribution sont ceux qui possèdent des valeurs de k_z voisines de Q_0 , ce qui explique le résultat obtenu.

Examinons maintenant l'absorption associé au rayonnement entier d'un corps noir de température T pour une boîte quantique de même forme. Nous utilisons la relation 4.45, sans intégrer selon la fréquence ω , afin de déterminer l'absorption en fonction de la fréquence de l'onde incidente pour différentes températures de corps noir. Le graphique 4.2 présente ces résultats. Nous voyons clairement que les fréquences minimales d'absorption pour les quatre courbes sont identiques et correspondent à l'énergie nécessaire pour extraire l'électron de son état lié ($\sim 1160 \text{ cm}^{-1}$). Nous voyons aussi que l'intensité de l'absorption augmente rapidement avec la température du corps noir observé.

La figure 4.3 présente le taux d'émission d'électrons à partir d'une boîte quantique, mais cette fois intégré selon toutes les fréquences présentes dans le rayonnement du corps noir. Nous voyons que la probabilité d'émission est une fonction qui dépend de la température du corps noir observé et qui varie de façon presque exponentielle. Ce comportement est dû principalement à la contribution de $\exp\left(-\frac{\hbar\omega}{k_B T}\right)$ dans l'expression 4.45.

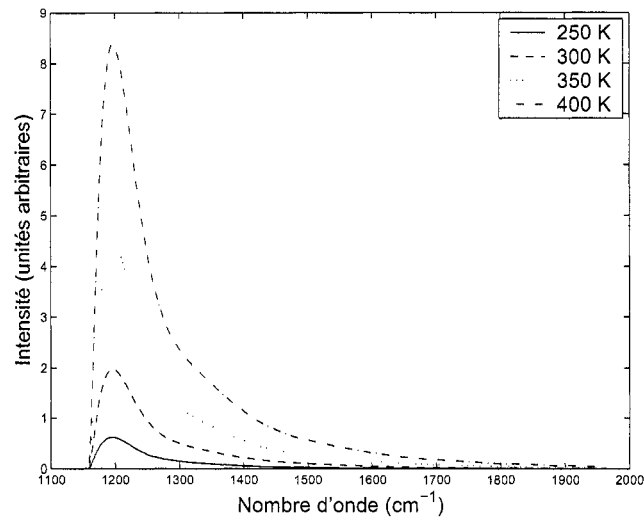


FIG. 4.2 – Dépendance spectrale de l'absorption par une boîte quantique cylindrique pour quatre corps noirs de différentes températures

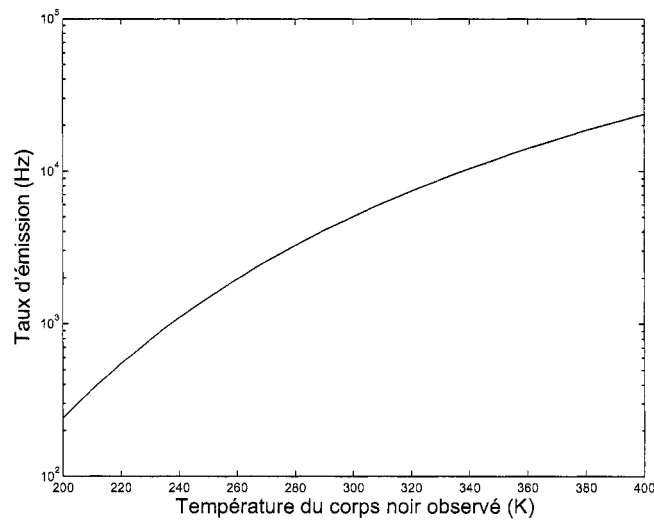


FIG. 4.3 – Taux d'émission d'électrons par une boîte quantique cylindrique causé par le rayonnement d'un corps noir

4.2 Émission d'électrons par effet tunnel

En plus de l'émission d'électrons par absorption de rayonnement infrarouge, il existe dans le contexte d'un photodétecteur d'autres mécanismes d'émission possibles. Prenons

par exemple le cas où un électron lié à une boîte quantique est soumis à un champ électrique. Alors il existe une probabilité que l'électron traverse par effet tunnel la barrière de potentiel et qu'il rejoigne le continuum de la bande de conduction. Ce phénomène est appelé émission par effet tunnel.

Pour évaluer l'importance de ce phénomène, prenons le cas simple où l'électron est lié à une boîte quantique et qu'il occupe son état fondamental. Lorsqu'un champ électrique est appliqué sur la boîte quantique, le potentiel effectif vu par l'électron dans le dispositif s'incline comme à la figure 4.4 et il devient alors possible que l'électron s'en échappe par

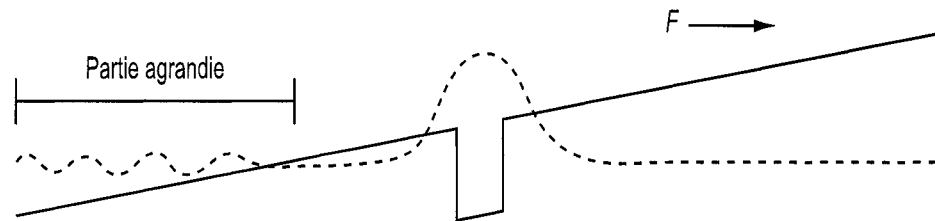


FIG. 4.4 – Vue schématique en coupe du potentiel effectif d'une boîte quantique soumise à un champ électrique (ligne pleine) et de la fonction enveloppe de son état métastable fondamental (ligne hachurée)

effet tunnel pour rejoindre le continuum d'états. Dans cette figure, le champ électrique appliqué ajoute une composante linéaire au potentiel effectif déjà défini à l'équation 3.5 pour une boîte quantique sans champ électrique.

La contribution au courant total due à l'émission d'électrons par effet tunnel dépend de façon importante de l'intensité du champ électrique appliqué, mais reste relativement constante en fonction de la température du dispositif. À titre indicatif, dans un photodétecteur possédant 20 plans de boîtes quantiques séparées par une distance de 100 nm et soumis à un potentiel de 1 V, le champ électrique est de l'ordre de 5×10^3 V/cm.

4.2.1 Formalisation du problème

Dans le formalisme de la fonction enveloppe, l'effet d'un champ électrique uniforme d'intensité F appliqué selon l'axe \hat{z} est représenté par l'ajout d'un potentiel linéaire de la forme

$$V = eFz \quad (4.47)$$

où e est la charge électronique et z est la position selon l'axe \hat{z} .

Ce potentiel s'ajoute à l'hamiltonien effectif défini à l'équation 3.7, pour donner

$$\mathcal{H}'_{eff} = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 + V'_{eff} + eFz. \quad (4.48)$$

Nous remarquons que ce potentiel n'est pas borné par une valeur minimale. Par conséquent, le puits ne contiendra plus d'état stationnaire et les états électroniques auront tous une durée de vie limitée. En d'autres mots, il y aura toujours une probabilité que l'électron traverse la barrière de potentiel de la paroi du puits et fuie vers l'extérieur.

4.2.2 Les états métastables dans un puits soumis à un champ électrique

Quelques solutions possèdent une stabilité dans le temps plus grande que les autres. Nous les appelons les *états métastables*. Dans le cadre de ce mémoire, nous définissons qu'un état est dit métastable si la fonction enveloppe associé à cet état ne possède pas de composante convergente à l'infini. Cette définition a l'avantage dans le cadre de l'approximation de la fonction enveloppe de réduire le travail d'analyse à une manipulation sur les coefficients de normalisation des solutions.

Mathématiquement, nous écrivons qu'une fonction enveloppe $C(z)$ ne possède pas de composante convergente à l'infini si et seulement si les deux conditions suivantes sont

respectées :

$$\lim_{z \rightarrow +\infty} \arg \left(\frac{C(z)}{e^{+ikz}} \right) = \text{constante}, \quad (4.49)$$

$$\lim_{z \rightarrow -\infty} \arg \left(\frac{C(z)}{e^{-ikz}} \right) = \text{constante}, \quad (4.50)$$

avec $k = \frac{\sqrt{2m^*(E-V(z))}}{\hbar}$, E l'énergie de l'état et $V(z)$ le potentiel effectif au point z . Les fonctions solutionnant l'équation de la fonction enveloppe et respectant ces deux conditions correspondront donc aux états métastables.

Ces conditions se simplifient dans le cas où le potentiel effectif est linéaire, comme c'est le cas pour le potentiel de l'équation 4.48. Si nous supposons que le champ électrique $F > 0$, alors nous avons que $k \propto iz^{\frac{1}{2}}$ lorsque $z \rightarrow +\infty$. La condition 4.49 indique donc que la fonction $C(z)$ décroît au moins aussi rapidement que $e^{-z^{\frac{3}{2}}}$, c'est-à-dire que nous avons la condition nécessaire (mais non suffisante)

$$|C(z)| \leq M_1 e^{-z^{\frac{3}{2}}} \quad (4.51)$$

où M_1 est une constante réelle positive. De l'autre côté, lorsque $z \rightarrow -\infty$, nous avons que $k \rightarrow \frac{\sqrt{2m^*eF|z|}}{\hbar}$ et la condition 4.50 se réécrit

$$C(z) \rightarrow M_2(z) \left[\exp \left(-i\sqrt{\beta|z|^3} \right) \right] \quad (4.52)$$

avec $M_2(z)$ une fonction réelle, positive et bornée et avec

$$\beta = \frac{2m^*e}{\hbar^2} F. \quad (4.53)$$

Les deux conditions 4.51 et 4.52 doivent absolument être respectées pour qu'un état métastable puisse exister. Le cas où $F < 0$ se traite de façon analogue.

4.2.3 Détermination des états métastables d'un hamiltonien

Imaginons que nous cherchons à déterminer la fonction enveloppe $\Psi_n(\mathbf{r}, t)$ correspondant au n ième état métastable d'une boîte quantique et que nous utilisons l'équation

de Schrödinger dépendante du temps. L'équation de la fonction enveloppe dépendante du temps s'écrit

$$\mathcal{H}\Psi_n(\mathbf{r}, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi_n(\mathbf{r}, t). \quad (4.54)$$

Comme pour le cas d'un état stable, l'état métastable $\Psi_n(\mathbf{r}, t)$ se décompose en un produit d'une exponentielle complexe dépendant du temps et d'une fonction $C_n(\mathbf{r})$ dépendant de l'espace

$$\Psi_n(\mathbf{r}, t) = e^{-i\frac{E_n t}{\hbar}} C_n(\mathbf{r}) \quad (4.55)$$

mais avec une énergie E_n pouvant être complexe. Si nous posons que $E_n = E_{n0} - i\frac{\Gamma_n}{2}$ avec E_{n0} et Γ_n des quantités réelles, nous retrouvons

$$\Psi_n(\mathbf{r}, t) = e^{-i\frac{E_{n0} t}{\hbar}} e^{-\frac{\Gamma_n t}{2\hbar}} C_n(\mathbf{r}). \quad (4.56)$$

En prenant le module au carré de chaque membre de cette équation, nous retrouvons

$$|\Psi_n(\mathbf{r}, t)|^2 = e^{-\frac{\Gamma_n t}{\hbar}} |C_n(\mathbf{r})|^2. \quad (4.57)$$

La constante Γ_n donne une indication de la probabilité d'émission. Elle est reliée à l'énergie E_n par la relation

$$\Gamma_n = -2\Im(E_n) \quad (4.58)$$

où $\Im(x)$ représente la partie imaginaire de x . Le carré de la fonction enveloppe aura donc une décroissance exponentielle avec

$$\tau_n = \frac{\hbar}{\Gamma_n} = -\frac{\hbar}{2\Im(E_n)} \quad (4.59)$$

comme constante de temps. En d'autres termes, plus la partie imaginaire de l'énergie est près de zéro, plus l'état métastable correspondant est stable. À la limite où la partie imaginaire est nulle, nous retrouvons l'énergie (purement réelle) d'un état stationnaire. Cette constante donne aussi l'ordre de grandeur de l'élargissement du niveau métastable.

Pour un état qui a une durée de vie de 1 ns, cet élargissement est nettement inférieur à 1 meV, et nous le négligeons.

Avec cette notation, l'équation 4.54 est simplifiée par la substitution 4.55 en

$$\mathcal{H}C_n(\mathbf{r}) = E_n C_n(\mathbf{r}). \quad (4.60)$$

Nous voyons donc que le problème revient à déterminer les états propres de l'hamiltonien \mathcal{H} , mais en considérant que le spectre d'énergies E_n est complexe.

4.2.4 Les états métastable d'une boîte quantique soumise à un champ électrique

Une fois les concepts d'état métastable et d'énergie complexe bien définis, nous entreprenons de déterminer quels sont les états métastables présents dans une boîte quantique soumise à un faible champ électrique, ainsi que leur durée de vie et leur énergie.

L'hamiltonien effectif \mathcal{H}'_{eff} pour la boîte quantique soumise à un champ électrique appliqué selon l'axe de croissance \hat{z} est donné par

$$\mathcal{H}'_{eff} = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 + V'_{eff} + eFz \quad (4.61)$$

où V'_{eff} est le potentiel effectif sans champ électrique tel que défini à l'équation 3.5 et où F est l'intensité du champ électrique statique et uniforme appliqué.

Nous appliquons la méthode de la séparation des variables de la même façon que nous l'avons présenté à la section 3.2.3. Selon le plan $\hat{x}\hat{y}$, nous trouvons que le problème est identique à celui de la boîte quantique sans champ appliqué. Les états propres dans ce plan sont donc identiques à ceux trouvés à l'équation 3.25. Il nous reste à résoudre le problème selon l'axe \hat{z} .

La figure 4.5 représente le potentiel effectif total $V'_{eff} + eFz$ et la séparation en trois tranches du dispositif étudié.

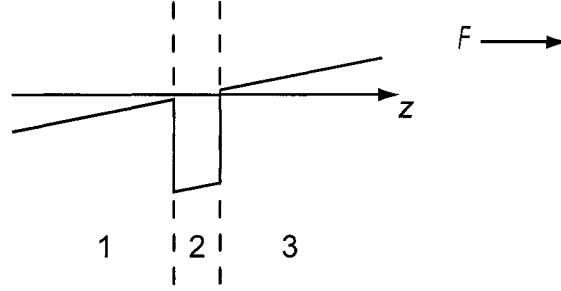


FIG. 4.5 – Dispositif soumis à un champ électrique séparé en trois tranches

Supposons que la boîte quantique est centrée à l'origine et qu'elle a une hauteur $2h$. L'hamiltonien selon l'axe \hat{z} se réécrit comme

$$\mathcal{H}'_{eff\hat{z}} = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + V_0 \Lambda(|z|, h) + eFz \quad (4.62)$$

avec la fonction Λ définie par l'équation 3.6.

Nous cherchons donc à résoudre le problème aux valeurs propres suivant :

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + V_0 (\Lambda(|z|, h) - 1) + eFz \right) Z = EZ \quad (4.63)$$

où Z est la fonction enveloppe selon l'axe \hat{z} et E est la contribution selon l'axe \hat{z} à l'énergie de l'état métastable.

Si nous divisons les deux membres de cette équation par V_0 et que nous effectuons le changement de variable présenté à l'équation 3.2, alors l'équation 4.63 se simplifie en

$$\alpha^2 \left(-\frac{\partial^2}{\partial z^2} + \beta z \right) Z = \left(\frac{E}{V_0} + 1 - \Lambda(|z|, h) \right) Z \quad (4.64)$$

avec α et β respectivement donnés aux équations 3.2 et 4.53. β peut être interprété comme étant une mesure indirecte de l'intensité F du champ électrique.

Dans cette équation, le membre de droite est constant dans chacune des trois tranches du dispositif, soit pour $z < -h$, pour $|z| < h$ et pour $z > h$. Nous résolvons l'équation 4.64 pour chaque tranche et nous relierons les solutions à l'aide des conditions sur les coefficients de la fonction d'onde.

Si nous faisons le changement de variable

$$\eta(z) = \beta^{-\frac{2}{3}} \left(\beta z + \frac{\Lambda(|z|, h) - 1 - \frac{E}{V_0}}{\alpha^2} \right), \quad (4.65)$$

nous retrouvons pour chacune des trois tranches de la boîte quantique l'équation

$$\frac{\partial^2}{\partial \eta^2} Z - \eta Z = 0. \quad (4.66)$$

Ce problème est identique à celui de l'équation différentielle de Airy. Les deux solutions linéairement indépendantes Ai et Bi de cette équation différentielle sont présentées à l'annexe E. Cette équation est résolue pour chacune des trois tranches de la boîte quantique. De façon générale, la solution dans la tranche i , s'exprime comme

$$Z_i(\eta) = C_i \text{Ai}(\eta) + D_i \text{Bi}(\eta). \quad (4.67)$$

Notre problème comprend donc sept inconnues complexes, soient l'énergie complexe E de l'état et les coefficients C_i et D_i pour i variant de 1 à 3. Nous choisissons les coefficients de façon à garantir la continuité de la fonction d'onde et de sa dérivée aux interfaces entre les tranches ($z = \pm h$). Ces conditions permettent de fixer quatre des sept coefficients initiaux.

Ensuite, nous remarquons d'après les propriétés des fonctions de Airy présentées à l'annexe E que le coefficient D_3 doit être nul pour que la fonction enveloppe soit bornée à la limite où $z \rightarrow \infty$. Si le coefficient D_3 n'était pas nul, alors la fonction enveloppe divergerait à cause du caractère divergent de la fonction Bi(z) lorsque $z \rightarrow \infty$. Nous voyons aussi que la fonction Ai(z) respecte automatiquement la condition 4.51. Finalement, comme la fonction enveloppe est normée, alors nous pouvons établir une relation permettant de déterminer le sixième coefficient.

Ces six conditions permettent par exemple de fixer les six coefficients C_i et D_i en fonction de l'énergie complexe E d'un état arbitraire. Nous observons qu'en fait, toutes les

énergies complexes E sont admissibles. Nous avons donc besoin d'une septième condition pour déterminer le spectre des états métastables.

La condition supplémentaire est que la fonction enveloppe à l'infini ne doit pas comprendre de composante convergente. Autrement dit, à la limite où $z \rightarrow -\infty$, la phase de la fonction d'onde doit être équivalente à celle d'une onde plane de la forme e^{-ikz} , avec un vecteur d'onde k dépendant évidemment du potentiel $V(z)$ et par conséquent de z . Nous devons donc chercher une relation entre les coefficients C_1 et D_1 qui respecte cette condition.

Par comparaison des propriétés données à l'annexe E des fonctions Ai et Bi lorsque $z \rightarrow -\infty$ et de la condition 4.52, nous voyons que la relation cherchée est simplement

$$D_1 = -iC_1. \quad (4.68)$$

Cette relation nous permet de réduire le continuum d'énergies E à un simple spectre d'états métastables d'énergie E_n . À la limite où $F \rightarrow 0$, nous nous attendons à ce que ce spectre d'états d'énergie E_n tende vers celui associé aux états liés définis à la section 3.2.3.

4.2.5 Le calcul de l'énergie des états métastables

Nous avons vu à la section précédente qu'il est possible de trouver l'énergie des états métastables à partir de considérations sur la forme de la fonction enveloppe, mais nous n'en avons pas explicité le calcul. Nous allons maintenant définir une méthode de calcul permettant de déterminer l'énergie associée à ces états en fonction des dimensions du système et du champ électrique appliqué.

D'abord, nous remarquons que la condition de normalisation ne changera pas l'énergie complexe associée à un état en particulier. Par conséquent, nous ne considérerons pas cette condition. Il reste donc les quatre conditions de continuité et les conditions sur les coefficients dans les tranches 1 et 3.

Les quatre conditions de continuité à respecter s'écrivent comme

$$\begin{aligned}
\lim_{z \rightarrow -h^-} Z(z) &= \lim_{z \rightarrow -h^+} Z(z), \\
\lim_{z \rightarrow -h^-} \frac{\partial}{\partial z} Z(z) &= \lim_{z \rightarrow -h^+} \frac{\partial}{\partial z} Z(z), \\
\lim_{z \rightarrow +h^-} Z(z) &= \lim_{z \rightarrow +h^+} Z(z), \\
\lim_{z \rightarrow +h^-} \frac{\partial}{\partial z} Z(z) &= \lim_{z \rightarrow +h^+} \frac{\partial}{\partial z} Z(z).
\end{aligned} \tag{4.69}$$

Pour simplifier ces conditions, nous utiliserons à partir de maintenant la notation suivante :

$$\begin{aligned}
\eta_1^d &= \lim_{z \rightarrow -h^-} \eta(z), \\
\eta_2^g &= \lim_{z \rightarrow -h^+} \eta(z), \\
\eta_2^d &= \lim_{z \rightarrow +h^-} \eta(z), \\
\eta_3^g &= \lim_{z \rightarrow +h^+} \eta(z),
\end{aligned} \tag{4.70}$$

où les indices g et d signifient respectivement la limite à gauche et à droite de la tranche de la fonction η . Il est important de se souvenir que dans cette notation, la fonction $\eta(z)$ dépend explicitement de l'énergie complexe E de l'état.

Ensuite, définissons la matrice $\tilde{W}(\eta)$ comme étant

$$\tilde{W}(\eta) = \begin{pmatrix} \text{Ai}(\eta) & \text{Bi}(\eta) \\ \text{Ai}'(\eta) & \text{Bi}'(\eta) \end{pmatrix}. \tag{4.71}$$

Cette matrice contient l'information sur le comportement de la solution générale 4.67 en un point déterminé par la valeur de η . Le déterminant de la matrice \tilde{W} est appelée le *Wronskien* des fonctions de Airy et est toujours égal à π^{-1} [38]. Par conséquent, la matrice $\tilde{W}(\eta)$ est inversible pour toutes les valeurs de η possibles.

Avec cette notation, les conditions de continuité sur la fonction enveloppe et sa dérivée à l'interface entre les tranches 1 et 2 s'écrivent simplement

$$\tilde{W}(\eta_1^d) \begin{pmatrix} C_1 \\ D_1 \end{pmatrix} = \tilde{W}(\eta_2^g) \begin{pmatrix} C_2 \\ D_2 \end{pmatrix}. \tag{4.72}$$

Une expression similaire existe aussi pour les conditions de continuité à l'interface entre les tranches 2 et 3. Avec quelques manipulations, nous pouvons joindre ces deux expressions et éliminer les coefficients C_2 et D_2 :

$$\begin{pmatrix} C_1 \\ D_1 \end{pmatrix} = \tilde{W}^{-1}(\eta_1^d) \tilde{W}(\eta_2^g) \tilde{W}^{-1}(\eta_2^d) \tilde{W}(\eta_3^g) \begin{pmatrix} C_3 \\ D_3 \end{pmatrix}. \quad (4.73)$$

Nous avons aussi déterminé que $D_3 = 0$ et $D_1 = -iC_1$, et donc que

$$C_1 \begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix} = C_3 \tilde{W}^{-1}(\eta_1^d) \tilde{W}(\eta_2^g) \tilde{W}^{-1}(\eta_2^d) \tilde{W}(\eta_3^g) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (4.74)$$

En multipliant par la gauche les deux membres de cette expression par le vecteur ligne $(1 \ -i)$, nous définissons la fonction $U(E)$

$$U(E) = (1 \ -i) \tilde{W}^{-1}(\eta_1^d) \tilde{W}(\eta_2^g) \tilde{W}^{-1}(\eta_2^d) \tilde{W}(\eta_3^g) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (4.75)$$

Les zéros de cette fonction correspondent au spectre d'énergie des états métastables. C'est ce spectre que nous devons déterminer.

4.2.6 Présentation des résultats

Même si la fonction $U(E)$ donnée par la relation 4.75 semble simple, il n'est pas facile d'en trouver ses zéros analytiquement. En effet, cette fonction dépend d'une variable complexe (l'énergie) et contient de longs produits de fonctions de Airy et de leurs dérivées. Nous utiliserons donc une méthode numérique itérative pour trouver les zéros de la fonction $U(E)$ et ainsi les états métastables du système étudié. Au lieu de déterminer directement les zéros de la fonction complexe $U(E)$, nous trouvons les minima de la fonction réelle $|U(E)|$, parce que cette approche est numériquement plus simple.

La figure 4.6 illustre l'énergie du premier état métastable en fonction du champ électrique, calculée pour un puits quantique de largeur $2h = 6,6 \text{ nm}$, avec une masse effective électronique $m^* = 0,07 m_e$ et un puits de potentiel $V_0 = 200 \text{ meV}$.

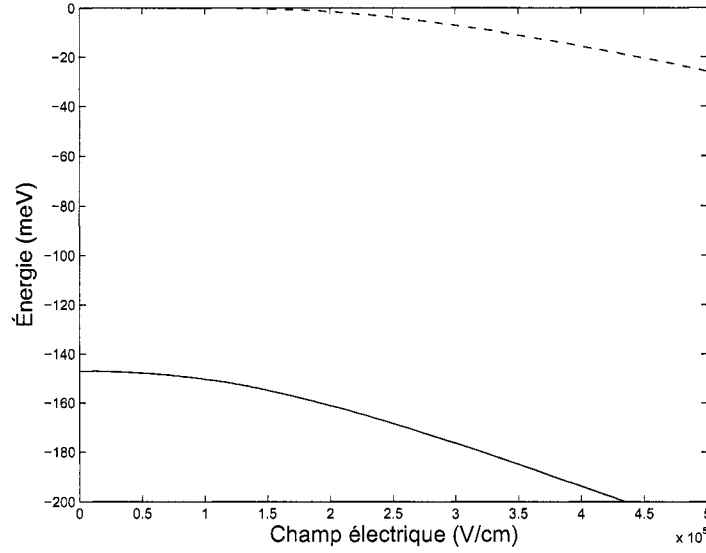


FIG. 4.6 – La partie réelle (ligne pleine) et imaginaire (ligne pointillée) de l'énergie complexe du premier état métastable dans une boîte quantique

Nous observons que la valeur absolue de la partie imaginaire augmente très rapidement à partir du champ critique $E_{crit} = \frac{V_0}{2h} \sim 3 \times 10^5$ V/cm. Ce champ correspond à la condition où le puits est tellement déformé que la hauteur de la barrière de potentiel à la gauche du puits s'approche de l'énergie de l'état fondamental sans champ électrique. L'état métastable n'est alors plus vraiment lié au puits par le potentiel effectif et l'état devient à toutes fins utiles instable. Il s'agit d'une limite de cette méthode pour évaluer le temps de vie d'un état lié au puits quantique.

De plus, comme le formalisme de la fonction enveloppe a été développé pour un semi-conducteur sans champ électrique, il est difficile d'évaluer l'influence du champ électrique sur la partie périodique des fonctions de Bloch. Par conséquent, il est difficile d'interpréter les résultats pour un état métastable dans un champ électrique de l'ordre de E_{crit} et d'évaluer son temps de vie. Cette méthode ne doit donc être utilisée que pour des champs petits par rapport à E_{crit} .

La figure 4.7 illustre l'effet du champ électrique sur la forme de la fonction enveloppe

pour un champ de 10^5 V/cm. Sur cette figure, nous remarquons que la fonction enveloppe

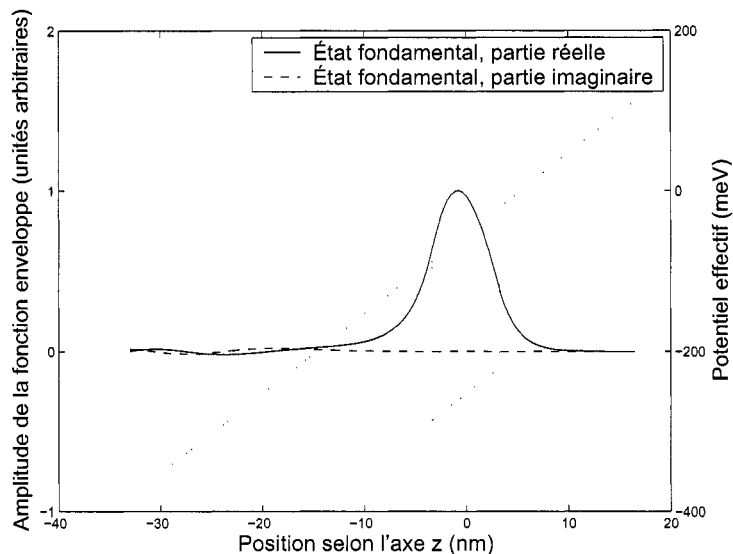


FIG. 4.7 – La forme de la fonction enveloppe de l'état fondamental pour un champ électrique de 10^5 V/cm

possède un caractère oscillant pour les valeurs de z négatives et un caractère amorti pour les valeurs de z positives. Ce type de résultat satisfait bien les critères énoncés à la section 4.2.2 pour définir un état métastable. De plus, nous observons que la position moyenne de l'électron est légèrement décalée vers la gauche par rapport au centre du puits, conformément à ce que nous nous attendions à observer pour une particule liée soumise à un champ électrique.

Les résultats présentés à la figure 4.8 illustrent le fait que le phénomène d'émission par effet tunnel ne devient important que lorsque le champ électrique dans le dispositif dépasse le seuil critique approximatif de 3×10^4 V/cm. Pour ce champ électrique, nous déterminons qu'il y a en moyenne une émission par électron lié par seconde. À mesure que le champ est augmenté à partir de ce seuil critique, nous observons que l'émission croît extrêmement rapidement. Par exemple, pour un champ moyen dans le dispositif d'environ 4×10^4 V/cm, ce qui est tout juste supérieur au champ critique de 3×10^4 V/cm, nous

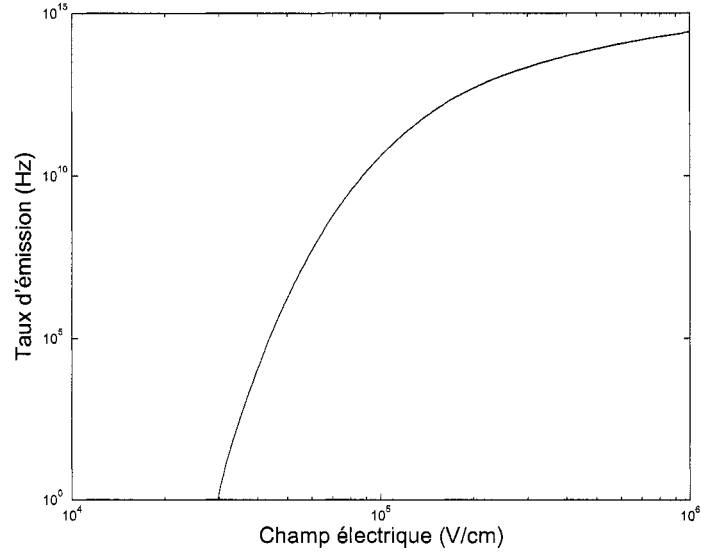


FIG. 4.8 – Émission par effet tunnel pour un électron dans l'état fondamental d'un puits

voyons que le taux d'émission vaut $\tau^{-1} \sim 1.2 \times 10^4$ Hz.

Le courant d'émission total par boîte quantique est approximativement donné par

$$i_{tun} = -\frac{fe}{\tau} = -\frac{fe\Gamma}{\hbar} \quad (4.76)$$

où f représente le facteur d'occupation de l'état fondamental de la boîte quantique. Nous voyons que pour un champ électrique de l'ordre de 4×10^4 V/cm, l'émission par effet tunnel est approximativement aussi importante que l'émission par absorption de rayonnement infrarouge, tel que présenté à la figure 4.3. Pour des champs électriques d'intensité légèrement supérieurs, l'émission par effet tunnel augmente tellement rapidement qu'elle devient le phénomène dominant. Nous en concluons que l'émission par effet tunnel détermine une borne supérieure à l'intensité du champ électrique admissible dans le photodétecteur.

4.3 Émission thermoélectronique

En plus de pouvoir quitter une boîte quantique par effet tunnel ou par absorption d'un photon, il est aussi possible qu'un électron lié à une boîte quantique rejoigne le continuum des états de conduction par émission thermoélectronique, c'est-à-dire en acquérant suffisamment d'énergie thermique pour quitter spontanément la boîte quantique.

Ce phénomène, très important dans l'analyse des propriétés des boîtes quantiques soumises à un champ électrique, représente la principale cause de dégradation des propriétés électroniques du dispositif à haute température. En effet, l'émission thermoélectronique dépend très fortement de la température du dispositif, contrairement à l'émission par effet tunnel ou par absorption infrarouge.

Afin de quantifier ce type d'émission, nous allons d'abord l'examiner pour une hétérojonction formée par deux semi-conducteurs de composition différente. Nous allons ensuite étendre le raisonnement développé à des puits quantiques et finalement tirer de cette analyse une expression du taux d'émission thermoélectronique dans une boîte quantique aplatie soumise à un champ électrique.

4.3.1 Émission à l'interface entre deux semi-conducteurs

Prenons le cas où nous avons deux semi-conducteurs de bande interdite directe. Le semi-conducteur qui possède la bande de conduction la plus basse est noté A et l'autre semi-conducteur B . Nous notons V_0 la différence entre les minima des bandes de conduction des deux matériaux. Nous supposons aussi que le maximum de la bande de valence du semi-conducteur B est plus bas que le minimum de la bande de conduction du semi-conducteur A .

Nous formons une hétérojonction en équilibre à la température T_d avec ces deux matériaux. Afin de simplifier l'analyse du problème, nous supposons que le passage d'un matériau à l'autre se fait de façon abrupte. La bande de conduction se courbe près de

l'interface entre les deux semi-conducteurs, de façon à ce que le potentiel chimique soit constant dans toute l'hétérojonction et à s'assurer que la discontinuité dans la bande de conduction à l'interface soit égale à V_0 . Nous fixons le zéro d'énergie comme étant égal au minimum d'énergie de la bande de conduction du matériau B loin de l'interface. Nous supposons aussi que partout, sauf possiblement dans la région du semi-conducteur A près de l'interface, la distance entre la bande de conduction et le potentiel chimique est beaucoup plus grand que $k_B T_d$, de façon à s'assurer que le semi-conducteur ne soit pas dégénéré. La figure 4.9 présente un tel système simplifié.

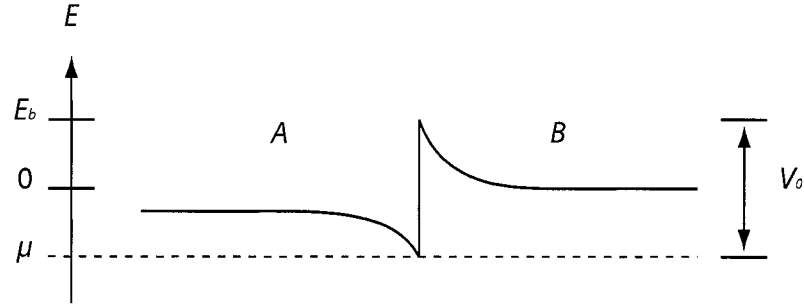


FIG. 4.9 – Minimum de la bande de conduction dans une hétérojonction sans polarisation

Il existe une probabilité non nulle qu'un électron dans le matériau A acquière suffisamment d'énergie et traverse l'interface afin de rejoindre la bande de conduction du matériau B . Cette probabilité est égale à celle d'observer dans le matériau B un électron occupant un état \mathbf{k} tel que la partie parallèle à l'axe \hat{z} de son vecteur d'onde $k_z > 0$. Cette probabilité est donnée par la distribution de Fermi-Dirac approchée par la distribution de Boltzmann

$$f(\mathbf{k}) = \exp \left(-\frac{\epsilon(\mathbf{k}) + E_b - \mu}{k_B T_d} \right) \quad (4.77)$$

avec $\epsilon(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}$ l'énergie d'un électron occupant l'état \mathbf{k} , E_b le minimum de la bande de conduction du matériau B à l'interface et m^* la masse effective de l'électron dans la bande de conduction du milieu B .

La densité de courant thermoélectronique j_{TE}^{eq} émis à l'équilibre par le semi-conducteur A vers le semi-conducteur B est donc donnée par l'intégrale

$$j_{TE}^{eq} = -e \int_{k_z > 0} \frac{d^3 \mathbf{k}}{4\pi^3} v_z f(\mathbf{k}) \quad (4.78)$$

où $v_z = \frac{\hbar k_z}{m^*}$. Une fois intégrée pour tous les $k_z > 0$, la densité de courant thermoélectronique devient

$$j_{TE}^{eq} = -\frac{em^*}{2\pi^2 \hbar^3} (k_B T_d)^2 \exp\left(\frac{\mu - E_b}{k_B T_d}\right). \quad (4.79)$$

En l'absence de polarisation, le courant net dans la jonction est nul puisque j_{TE}^{eq} est contrebalancé par un courant d'émission thermoélectronique identique provenant du semi-conducteur B .

4.3.2 Application d'un champ électrique

Supposons pour simplifier que nous avons le même dopage N_d dans les deux sections de l'hétérojonction, et que le dopage est suffisant pour que le potentiel chimique se situe au voisinage du minimum de la bande de conduction du matériau A près de l'interface. Dans cette situation, le semi-conducteur A possède près de l'interface une mince charge d'accumulation et le semi-conducteur B une large zone de déplétion. Par conséquent, lorsque nous appliquons une différence de potentiel V en inverse sur l'hétérojonction, alors la différence de potentiel se répartit à toutes fins utiles uniquement dans la zone de déplétion du semi-conducteur B . Le minimum de la bande de conduction dans le matériau B loin de l'interface s'abaisse donc de la quantité eV . La figure 4.10 illustre la position du minimum de la bande de conduction dans cette situation.

La barrière de potentiel vue par un électron provenant du semi-conducteur A et se dirigeant vers le matériau B ne change pas beaucoup par rapport à la quantité eV . Le courant d'émission thermoélectronique $j_{TE}^{A \rightarrow B}$ du semi-conducteur A vers le semi-conducteur B reste donc approximativement égal à

$$j_{TE}^{A \rightarrow B} = j_{TE}^{eq}. \quad (4.80)$$

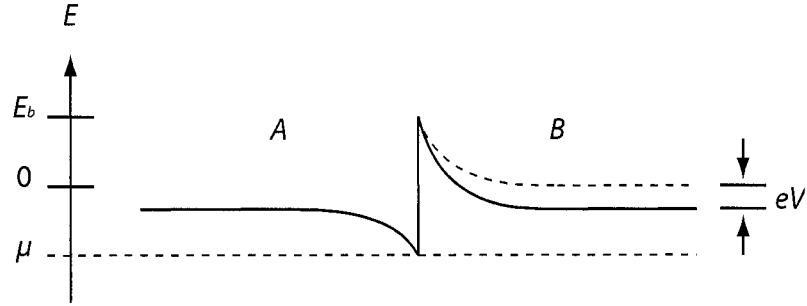


FIG. 4.10 – Minimum de la bande de conduction dans une hétérojonction polarisée

Par contre, la barrière de potentiel pour un électron en chemin inverse est augmentée de la quantité eV . Le courant d'émission thermoélectronique $j_{TE}^{B \rightarrow A}$ en sens inverse devient alors

$$j_{TE}^{B \rightarrow A} = j_{TE}^{eq} \exp\left(\frac{-eV}{k_B T_d}\right). \quad (4.81)$$

Le courant net traversant la jonction vaut donc

$$j_{TE}^{tot} = j_{TE}^{A \rightarrow B} - j_{TE}^{B \rightarrow A} = j_{TE}^{eq} \left(1 - \exp\left(\frac{-eV}{k_B T_d}\right)\right). \quad (4.82)$$

Lorsque le potentiel V appliqué en inverse est de l'ordre de $\frac{1}{e} k_B T_d$, alors la contribution de l'exponentielle dans l'expression 4.82 devient négligeable et l'expression du courant d'émission thermoélectronique total s'écrit simplement

$$j_{TE}^{tot} = j_{TE}^{eq}. \quad (4.83)$$

Ce courant représente le maximum d'émission thermoélectronique possible traversant la jonction lorsqu'un potentiel électrique est appliqué en inverse.

À titre d'exemple, prenons le cas où la température du dispositif vaut approximativement $T_d \sim 100$ K. Dans cette situation, une barrière de potentiel de l'ordre de $eV \sim k_B T_d \sim 8$ meV est suffisante pour réduire de façon significative l'émission thermoélectronique en provenance du semi-conducteur. Le potentiel électrique nécessaire pour obtenir

la saturation du courant en inverse est donc très rapidement atteint et nous considérons dans le cadre de ce mémoire que nous sommes toujours dans cette situation.

Le courant maximal d'émission thermoélectronique j_{TE}^{tot} ne dépend donc que de deux paramètres, c'est-à-dire de la température T_d du dispositif et de la quantité $\mu - E_b$. Ces deux paramètres contiennent donc toute l'information nécessaire à l'évaluation de l'importance de ce phénomène et dépendent des conditions d'utilisation du dispositif, du choix des deux matériaux et de leur dopage.

4.3.3 Émission par une série de puits quantiques minces

Prenons le cas où nous avons un dispositif formé par le dépôt successif selon l'axe \hat{z} de minces puits de matériau A séparés par d'épaisses barrières de matériau B . L'épaisseur totale d'une barrière et d'un puits est notée L . Le dopage est considéré comme étant uniforme dans tout le dispositif. La figure 4.11 présente le minimum de la bande de conduction pour un tel dispositif. Le courant d'émission thermoélectronique se calcule

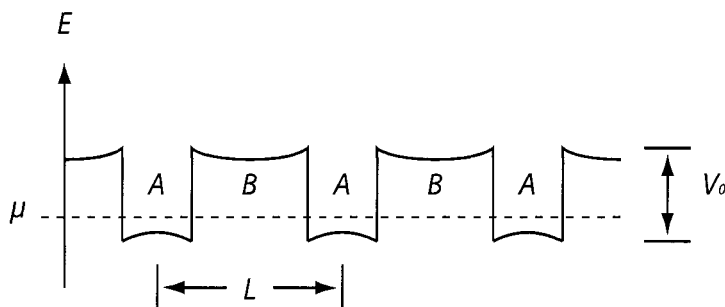


FIG. 4.11 – Vue en coupe du minimum de la bande de conduction dans une série de puits quantiques à l'équilibre avec hypothèse de passage abrupt entre les régions

pour chaque puits de ce dispositif par la méthode présentée à la section 4.3.2.

Les discontinuités visibles sur la figure 4.11 dans le minimum de la bande de conduction correspondent à la hauteur V_0 de la barrière de potentiel effectif entre les matériaux A et B . Près de ces discontinuités, nous observons que la bande de conduction se courbe

près des interfaces entre les matériaux A et B . Il existe donc aussi un courant d'émission par effet tunnel à travers la paroi. Cependant, nous allons négliger ce courant, parce que la longueur caractéristique sur laquelle s'effectue la courbure des bandes est beaucoup plus grande que la longueur d'onde de de Broglie d'un état lié (de l'ordre de $2\pi\alpha \sim 10 \text{ nm}$). En effet, la longueur sur laquelle les bandes sont courbées est donné en première approximation par [39]

$$W = \sqrt{\frac{\epsilon_0 \epsilon_s V_0}{e N_d}} \quad (4.84)$$

où ϵ_0 représente la permittivité du vide, ϵ_s la permittivité relative du semi-conducteur, e la charge de l'électron et N_d la densité de donneurs. Dans le cas où $\epsilon_s = 10$, où $V_0 = 200 \text{ meV}$ et où $N_d = 2 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$, nous avons que $W \sim 240 \text{ nm}$ et nous considérerons que l'effet tunnel à travers les barrières entre les puits quantiques est négligeable.

Pour évaluer le courant d'émission thermoélectronique, nous devons déterminer la position du potentiel chimique dans le dispositif. Pour effectuer ce calcul, nous considérons que les états liés aux puits quantiques sont assimilables à des défauts neutres et profonds qui peuvent capturer et piéger les électrons libres présents dans le dispositif. Comme une grande partie de ces états possèdent une énergie beaucoup plus faible que l'énergie des donneurs d'électrons (de l'ordre de -10 meV), nous nous attendons à ce que le potentiel chimique soit fixé par l'énergie des états les plus profonds du puits. Cette approximation est acceptable si la densité d'états liés aux puits quantiques dépasse l'ordre de grandeur du dopage et nous nous en convainquons à l'aide d'un raisonnement simple.

D'abord, nous considérons que le dopage dans le dispositif est uniforme et constitué uniquement d'atomes donneurs. À l'équilibre, nous supposons que chaque atome donneur s'ionise et que les électrons s'accumulent dans les états de plus basse énergie à l'intérieur des puits. Ces états électroniques sont confinés dans la direction \hat{z} , mais libres dans le plan $\hat{x}\hat{y}$. Nous les identifions par leur état de confinement selon l'axe \hat{z} (n_z) et leurs vecteurs d'ondes dans le plan $\hat{x}\hat{y}$ (k_x et k_y). Pour un état de confinement n_z donné, la densité d'états

$d(k_x, k_y)$ dans le plan est constante et vaut

$$d(k_x, k_y) = 2 \frac{1}{4\pi^2} \quad (4.85)$$

car au total deux électrons (un pour chaque état de spin) peuvent occuper un état (k_x, k_y, n_z) .

Lorsque la densité d'états occupés est relativement faible, nous considérons que seuls les états pour lesquels $n_z = 1$ sont occupés. Nous définissons alors le *vecteur d'onde de Fermi* k_F à l'aide de la relation

$$n_{2D} = \frac{k_F^2}{2\pi} \quad (4.86)$$

où n_{2D} représente la densité d'états électroniques occupés dans le plan.

À faible température, tous les états (k_x, k_y) tels que $\sqrt{k_x^2 + k_y^2} < k_F$ seront occupés par deux électrons (un pour chaque état de spin) et tous les autres états seront inoccupés. La quantité k_F représente donc la norme du vecteur d'onde du dernier état occupé. Le potentiel chimique vaut environ

$$\mu = E_1 + \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m^*} = E_1 + \frac{\pi \hbar^2}{m^*} n_{2D} \quad (4.87)$$

où E_1 est l'énergie de confinement du premier état confiné selon l'axe \hat{z} et où m^* est la masse effective d'un électron. La différence d'énergie à faible température entre le potentiel chimique et E_1 est donnée par

$$\mu - E_1 = \frac{\pi \hbar^2}{m^*} n_{2D}. \quad (4.88)$$

Pour un puits de largeur ℓ , la différence d'énergie entre les deux premiers états liés selon l'axe \hat{z} est donnée en première approximation par

$$E_2 - E_1 = (2^2 - 1^2) \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m^* \ell^2}. \quad (4.89)$$

Dans le cas où nous avons un dopage de $N_d = 2 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ et que l'écart entre deux puits quantiques est égal à 100 nm, alors nous avons $n_{2D} = 2 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2}$. Posons aussi

que $\ell = 6,6 \text{ nm}$. Alors,

$$\frac{\mu - E_1}{E_2 - E_1} = \frac{2}{3\pi} \ell^2 n_{2D} \sim 2 \times 10^{-3} \ll 1, \quad (4.90)$$

ce qui justifie *a posteriori* notre hypothèse selon laquelle seul le premier état de confinement selon l'axe \hat{z} est occupé et nous permet de faire l'approximation que $\mu \sim E_1$. Le potentiel chimique μ dans un tel dispositif est donc fixé près du premier état de confinement selon l'axe \hat{z} lorsque le dopage n'est pas trop important. Une fois le potentiel chimique déterminé, nous pouvons aisément évaluer le courant d'émission thermoélectronique par chaque puits en utilisant les résultats de la section 4.3.2 pour une jonction polarisée en inverse.

Un second courant d'émission thermoélectronique, correspondant aux jonctions polarisées en direct est aussi émis par le dispositif lorsque qu'il est polarisé. Cependant, nous n'allons inclure ce courant que dans le traitement du dispositif présenté à la section 5.

4.3.4 Émission par un plan de boîtes quantiques

Dans le cas où nous avons un plan de boîtes quantiques à la place d'un puits quantique, nous considérons que le courant d'émission thermoélectronique est réduit par un facteur proportionnel à la surface occupée par les boîtes quantiques.

Nous justifions ce choix par la remarque suivante. Nous savons que le comportement selon l'axe \hat{z} des électrons dans une boîte quantique ressemble beaucoup à celui des électrons dans un puits quantique, à cause du faible confinement dans le plan $\hat{x}\hat{y}$ des boîtes quantiques. Comme ce sont les propriétés électroniques selon l'axe \hat{z} qui déterminent l'émission thermoélectronique, nous en concluons que l'émission thermoélectronique i_{TE} d'une boîte moyenne vaut

$$i_{TE} = j_{TE}^{eq} \mathcal{S} \quad (4.91)$$

où j_{TE}^{eq} est donné à l'équation 4.79 et \mathcal{S} est la surface moyenne d'une boîte. Le taux

d'émission τ^{-1} par boîte quantique est donc égal à

$$\tau^{-1} = -\frac{i_{TE}}{e} = \frac{m^* \mathcal{S}}{2\pi^2 \hbar^3} (k_B T_d)^2 \exp\left(\frac{\mu}{k_B T_d}\right). \quad (4.92)$$

Pour une boîte quantique de rayon $a = 66 \text{ nm}$, à la température $T_d = 80 \text{ K}$ et dont le potentiel chimique vaut $\mu \sim E_1 \sim -144 \text{ meV}$, nous obtenons un taux d'émission par boîte quantique de

$$\tau^{-1} = 3 \times 10^4 \text{ Hz}. \quad (4.93)$$

Le graphique du taux d'émission en fonction de la température T_d du dispositif est présenté à la figure 4.12. Nous y voyons que l'émission thermoélectronique augmente très rapidement avec la température T_d du dispositif et que ce phénomène représente la principale limite à l'utilisation du dispositif à haute température.

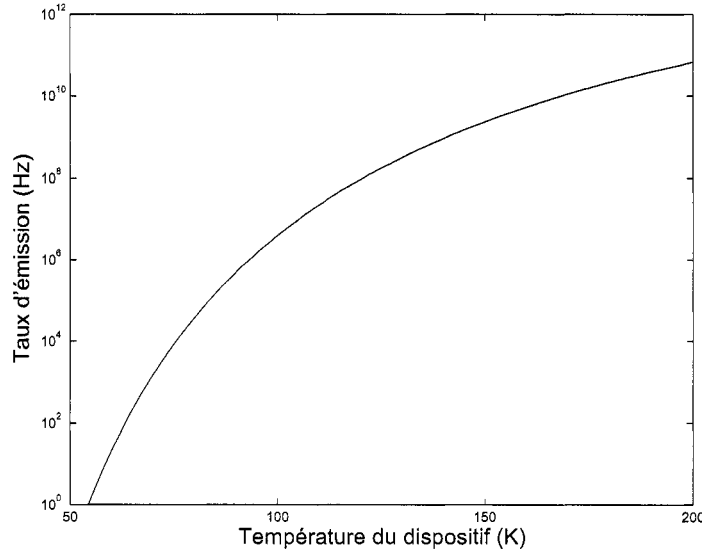


FIG. 4.12 – Émission d'électrons par l'effet thermoélectronique

4.4 Émission totale par une boîte quantique

Après avoir développé le modèle pour les boîtes quantiques et en avoir extrait des relations sur la quantité d'électrons émis pour trois phénomènes distincts, nous entreprenons

l'assemblage de ces résultats dans un modèle quantique complet de boîte quantique. L'objectif de modèle consiste à tirer les propriétés fondamentales des boîtes quantiques afin de les intégrer dans un modèle de photodétecteur.

4.4.1 Le courant d'obscurité

Le courant d'obscurité est constitué principalement de deux composantes, soient de l'émission thermoélectronique et de l'émission par effet tunnel. À partir des résultats présentés aux sections 4.2 et 4.3, nous évaluons que le courant d'obscurité i_0 émis par une boîte quantique s'exprime comme

$$i_0 = i_{tun} + i_{TE} \quad (4.94)$$

où i_{tun} et i_{TE} représentent respectivement le courant émis par effet tunnel et par émission thermoélectronique par boîte quantique. Ce courant est principalement fonction du champ électrique appliqué et de la température du dispositif.

4.4.2 Le photocourant

Nous définissons le photocourant comme étant le courant produit par absorption de rayonnement infrarouge par boîte quantique. De façon simple, nous écrivons le photocourant comme étant égal à Υi_ϕ , avec Υ une constante dépendant du système optique monté sur le photodétecteur et i_ϕ le photocourant pour une intensité lumineuse normalisée tel que calculé à l'équation 4.46. Ce courant dépend donc du système de focalisation optique et de l'intensité du signal infrarouge reçu. Une discussion plus approfondie à propos de l'origine physique de la valeur de Υ est donnée à la section 5.3.1.

Afin de simplifier l'analyse du dispositif, nous supposons que le flux lumineux est uniforme dans le dispositif et par conséquent que le photocourant Υi_ϕ est le même pour toutes les boîtes quantiques à l'intérieur du dispositif. Cette approximation est valable si le coefficient d'absorption optique reste petit par rapport à l'inverse de la profondeur de la

région d'absorption optique du dispositif. À titre d'exemple, prenons le cas d'un dispositif constitué de 10 plans de boîtes quantiques séparées par des couches d'encapsulation de 100 nm d'épaisseur, ce qui donne une région d'absorption optique de l'ordre de 1 μm d'épaisseur. L'ordre de grandeur du coefficient d'absorption maximal admissible est donc d'environ 10^4 cm^{-1} . Or, le coefficient d'absorption optique de l'InP massif pour le rayonnement infrarouge est beaucoup plus petit que cette valeur et nous considérons donc que cette la condition est valide.

4.4.3 L'émission totale

Le courant d'émission total i d'une boîte quantique est défini comme étant la somme du courant d'obscurité et du photocourant :

$$i = i_0 + \Upsilon i_\phi. \quad (4.95)$$

Il est difficile d'évaluer l'intensité de ce courant, parce que l'émission par effet tunnel et l'émission par absorption de rayonnement infrarouge sont en gros proportionnelles au facteur d'occupation de l'état fondamental de la boîte quantique, alors que l'émission thermoélectronique est indépendante de ce facteur.

Pour fixer les idées, nous supposons dans le cadre de ce mémoire que le facteur d'occupation des boîtes quantiques $f = 2$, c'est-à-dire que chacun des deux états de spin de l'état fondamental de la boîte quantique sont occupés par un électron.

Pour une boîte quantique située dans un photodétecteur à la température $T_d = 60 \text{ K}$ observant un corps noir à la température de $T = 300 \text{ K}$ et avec un champ électrique à l'intérieur du dispositif valant $F = 5 \times 10^3 \text{ V/cm}$, nous avons les taux d'émission

$$i_\phi \sim 629 \text{ Hz}, \quad (4.96)$$

$$i_{TE} \sim 17.3 \text{ Hz}. \quad (4.97)$$

Par comparaison, le taux d'émission par effet tunnel pour ce champ électrique est plusieurs

ordres de grandeur plus petit que ces valeurs.

4.4.4 Le rapport caractéristique r

Le rapport caractéristique r est utilisé dans le modèle de dispositif développé au chapitre 5 pour établir un lien entre les propriétés d'émission des boîtes et les propriétés macroscopiques plus complexes du dispositif. Nous le définissons comme étant

$$r = \frac{i}{i_0} = 1 + \frac{\Upsilon i_\phi}{i_{tun} + i_{TE}}. \quad (4.98)$$

À titre d'exemple, pour les données présentées à la sous-section précédente et pour $\Upsilon = \frac{1}{16}$, nous avons $r = 37,4$.

Il est intéressant de noter que le rapport r est également une mesure indirecte de l'intensité du rayonnement infrarouge. En effet, si nous faisons varier l'illumination, alors seul le terme i_ϕ de l'équation 4.98 variera.

Chapitre 5

Simulation des photodétecteurs

5.1 Évaluation des propriétés du dispositif

Pour simplifier l'analyse des propriétés du photodétecteur, nous considérons que le courant circulant dans le dispositif est constitué de deux composantes, soient le *courant d'obscurité* et le *photocourant*. Nous considérons aussi que comme le dispositif est essentiellement dopé n , c'est-à-dire que la contribution au courant total apportée par les trous est négligeable et que le courant n'est constitué que d'électrons. Nous faisons finalement l'approximation que le courant produit par chaque boîte quantique est identique et qu'il est égal au courant produit par une boîte quantique de taille moyenne. Cette hypothèse nous permet de simplifier grandement l'analyse mais par contre nous empêchera d'étudier des effets d'une distribution en tailles des boîtes quantiques.

5.1.1 Le rapport signal sur bruit

Nous avons défini à la section 4.4 le courant total produit par chaque boîte quantique comme étant la somme de deux composantes, soient le courant d'obscurité et le photocourant. De façon analogue, nous notons J_0 le courant total circulant dans le dispositif lorsqu'il n'y a pas d'illumination et J le courant total lorsque le dispositif est sous illumination infrarouge. Il est important ici de noter que ces deux courants comprennent aussi le courant d'émission thermoélectronique des jonction en direct présenté à la section 4.3.3.

Le *rapport signal sur bruit* du dispositif, noté $R(J)$, correspond alors à

$$R(J) = \frac{J - J_0}{J_0}. \quad (5.1)$$

Le rapport R n'est pas proportionnel à $r - 1$, comme nous pourrions nous y attendre. En effet, le courant circulant dans le dispositif n'augmentera pas de façon proportionnelle avec le nombre d'électrons émis par chaque boîte quantique, principalement parce que toute augmentation de la population d'électrons entraînera aussi une augmentation des interactions entre électrons causant des désexcitations. Nous nous attendons donc plutôt à observer que le rapport signal sur bruit R reste toujours strictement plus petit que $r - 1$ lorsque le dispositif est sous illumination.

5.1.2 Division du dispositif en tranches

Le rapport signal sur bruit R pour un photodétecteur peut être estimé si nous examinons la condition de conservation du courant électrique dans le dispositif. D'abord, nous divisons le dispositif en une série de tranches contenant chacune un plan de boîtes quantiques. Comme le courant en régime permanent sortant de chaque tranche du dispositif doit être égal au courant en entrant, nous pouvons conclure que le taux de désexcitation des électrons dans la tranche doit être égal au courant émis à l'intérieur de la tranche.

Par exemple, lorsque le dispositif n'est pas sous illumination, nous avons la relation

$$p_0 J_0 = \mathcal{D} i_0 \quad (5.2)$$

avec p_0 la probabilité de désexcitation d'un électron dans la tranche, \mathcal{D} la densité de boîtes quantiques dans un plan et i_0 le courant défini à l'équation 4.94. La figure 5.1 résume ce bilan.

Nous avons une relation similaire lorsque le dispositif est sous illumination :

$$pJ = \mathcal{D} i \quad (5.3)$$

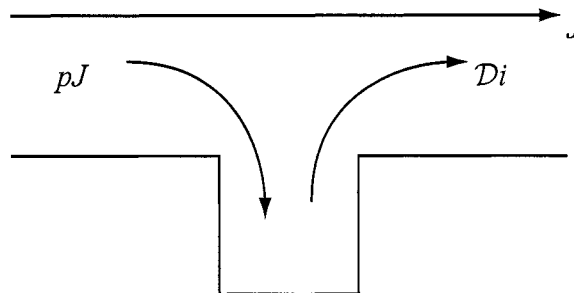


FIG. 5.1 – Bilan des courants dans une couche du dispositif

avec le courant i défini à l'équation 4.95.

Or, la probabilité p n'est pas nécessairement égale à p_0 . En effet, nous nous attendons sous illumination à ce que $p > p_0$, c'est-à-dire que la probabilité de désexcitation augmente avec la densité électronique.

5.1.3 Évaluation de la probabilité de désexcitation

Nous supposons que la probabilité de désexcitation d'un électron de la bande de conduction varie en fonction de la densité d'électrons présents dans le dispositif et donc du courant total J circulant à l'intérieur du dispositif.

Lorsque l'illumination sur le dispositif est nulle, nous mesurons le courant J_0 et la probabilité de désexcitation p_0 . Pour de petites illuminations, c'est-à-dire pour des courants J qui ne sont pas trop différents de J_0 , nous faisons le développement de Taylor au premier ordre autour de J_0 :

$$p(J) = p_0 + B(J - J_0) \quad (5.4)$$

où B est une constante positive qui mesure la probabilité de désexcitation suite à la présence d'une population hors d'équilibre d'électrons. B peut être interprété comme étant une mesure de l'importance de l'interaction électron-électron à l'intérieur d'une population d'électrons hors équilibre. Plus B est grand, alors plus les interactions entre électrons hors d'équilibre causent de désexcitations. Cette expression n'est valide que pour des cou-

rants dans le voisinage de J_0 .

La probabilité $p(J)$ devient donc

$$p(J) = p_0 \left(1 + \frac{J - J_0}{J_{ee}} \right) \quad (5.5)$$

avec $J_{ee} = \frac{p_0}{B}$. Nous avons aussi que $J_{ee} > J_0$ pour respecter les conditions $p(0) > 0$ et $p''(J) \leq 0$.

Nous définissons finalement le facteur D comme étant

$$D = \frac{J_{ee}}{J_0} = \frac{p_0}{B J_0}. \quad (5.6)$$

Ce facteur donne une indication de l'importance relative de la désexcitation spontanée p_0 par rapport aux désexcitations dues à l'interaction entre électrons hors d'équilibre B , normalisée par le courant J_0 . De plus, D est nécessairement plus grand que 1 car $J_{ee} > J_0$. Plus ce facteur est grand, alors plus le rapport R du dispositif aura un comportement linéaire et idéal par rapport à r .

Avec toutes ces définitions, nous pouvons réécrire la probabilité $p(J)$ de désexcitation comme

$$p(J) = p_0 \left(1 + \frac{1}{D} R(J) \right). \quad (5.7)$$

Dans cette expression, nous voyons que la probabilité $p(J)$ dépend explicitement du rapport signal sur bruit, ce qui n'est pas surprenant puisque $p(J)$ et $R(J)$ dépendent tous deux du courant circulant dans le dispositif et ainsi de l'intensité lumineuse.

5.1.4 Estimation du rapport signal sur bruit

En substituant J_0 et J dans l'expression du rapport signal sur bruit donnée à l'équation 5.1 par leurs expressions données aux équation 5.2 et 5.3, nous retrouvons

$$1 + R = \frac{i}{i_0} \frac{p_0}{p} \quad (5.8)$$

et en utilisant la définition 4.98 et la relation 5.7, nous obtenons

$$1 + R = r \frac{D}{D + R}. \quad (5.9)$$

La solution de cette équation du deuxième degré est

$$R(r) = \frac{D + 1}{2} \left(\sqrt{1 + \frac{4D(r - 1)}{(D + 1)^2}} - 1 \right) \quad (5.10)$$

où nous avons conservé la racine positive pour avoir évidemment $R > 0$.

Nous voyons que lorsqu'il n'y a pas d'illumination ($r = 1$), nous retrouvons le résultat attendu $R(1) = 0$. Nous remarquons aussi que

$$\left. \frac{\partial}{\partial r} R(r) \right|_{r=1} = \frac{D}{D + 1}, \quad (5.11)$$

c'est-à-dire que pour de petites illuminations ($r \sim 1$), le rapport signal sur bruit R est approximativement donné par

$$R(r) \sim \frac{D}{D + 1} (r - 1). \quad (5.12)$$

Le facteur $\frac{D}{D+1}$ donne une mesure de la dégradation du rapport signal sur bruit causé par l'interaction entre électrons. À titre d'exemple, le graphique 5.2 présente le rapport signal sur bruit pour $D = 2$.

Nous voyons sur ce graphique que la dérivée près du point $r = 1$ du rapport signal sur bruit du dispositif est inférieure à 1. De plus, au lieu d'avoir une relation linéaire entre le rapport signal sur bruit R et l'illumination (proportionnelle à $r - 1$), nous observons plutôt que le rapport signal sur bruit R se dégrade à mesure que l'illuminations est augmentée.

5.2 L'émission par impact

Lorsqu'un électron occupant un état de la bande de conduction possède une certaine quantité minimale d'énergie cinétique, il devient alors possible qu'il entre en collision

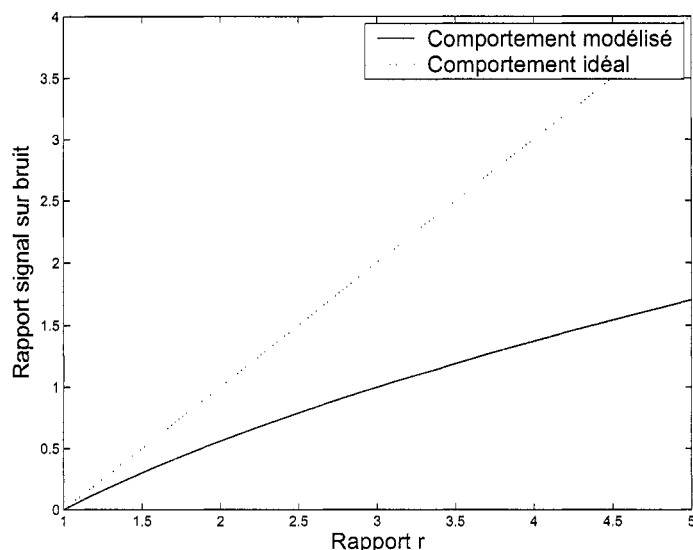


FIG. 5.2 – Dégradation des propriétés du dispositif pour $D = 2$

avec un électron lié à une boîte quantique et qu'il lui transfère suffisamment d'énergie pour l'exciter vers la bande de conduction. Nous appelons ce phénomène l'*émission par impact*, par analogie au phénomène d'ionisation par impact dans un semi-conducteur.

Le phénomène d'émission par impact dépend directement du champ électrique appliqué à l'intérieur du dispositif. À mesure que le champ électrique moyen est augmenté, nous remarquons que l'énergie des électrons s'accroît et par conséquent l'importance de l'émission par impact.

La conséquence de ce phénomène est d'amplifier le courant total J circulant dans le dispositif sans pour autant modifier le rapport caractéristique r des boîtes quantiques. Par conséquent, nous nous attendons à ce que ce phénomène dégrade les propriétés du photodétecteur.

5.2.1 Comparaison avec le phénomène d'ionisation par impact

Malgré les apparences, il existe quelques différences fondamentales entre les processus d'émission par impact dans un photodétecteur à boîtes quantiques et d'ionisation par

impact dans un dispositif classique.

D'abord, l'énergie d'activation du processus d'émission par impact, qui est de l'ordre de l'énergie de liaison du premier état électronique lié dans la boîte quantique, est beaucoup plus faible que l'énergie d'activation du processus d'ionisation par impact, qui est approximativement égale à l'énergie de la bande interdite. Cette observation permet de conclure que dans un photodétecteur à boîtes quantiques, le processus d'émission par impact est beaucoup plus important à faible champ appliqué que le processus d'ionisation par impact.

5.2.2 Modification apportées au modèle de dispositif

En considérant l'effet de l'émission par impact, nous modifions les équation 5.2 et 5.3 de façon à obtenir

$$p(J'_0)J'_0 = \mathcal{D}i_0 + \alpha J'_0, \quad (5.13)$$

$$p(J')J' = \mathcal{D}i + \alpha J', \quad (5.14)$$

avec α la probabilité d'observer le phénomène d'émission par impact pour un électron traversant un plan de boîtes quantiques, \mathcal{D} la densité surfacique de boîtes quantiques dans un plan et J'_0 et J' respectivement les courants sans et avec illumination. Nous remarquons que la probabilité α dépend évidemment du champ électrique appliqué à l'intérieur du dispositif.

Le rapport signal sur bruit R' devient alors

$$1 + R' = \frac{J'}{J'_0} = \frac{i}{i_0} \frac{p(J'_0) - \alpha}{p(J') - \alpha} = r \frac{p_0 + B(J'_0 - J_0) - \alpha}{p_0 + B(J' - J_0) - \alpha} \quad (5.15)$$

d'après la définition de p donnée à l'équation 5.4.

Si nous posons $D' = \frac{p(J'_0) - \alpha}{B J'_0}$, nous pouvons réécrire l'équation 5.15 comme

$$1 + R' = r \frac{D'}{D' + R'}, \quad (5.16)$$

ce qui correspond au cas de la section précédente où nous ne tenons pas compte de l'émission par impact, mais avec une nouvelle constante $D' < D$.

Nous remarquons aussi que nous devons respecter la condition $\alpha < p(J'_0)$ pour avoir un dispositif fonctionnel. Si cette condition n'était pas respectée, alors l'émission par impact serait plus importante que la désexcitation spontanée pour une population d'électrons à l'équilibre et le signal mesuré deviendrait essentiellement une amplification de bruit.

À titre d'exemple, le facteur D' pour $\alpha = \frac{1}{2}p(J'_0)$ et $J'_0 = 2J_0$ devient $D' = \frac{1}{4}(D + 1) < D$, ce qui correspond à une certaine dégradation des propriétés du dispositif. Pour minimiser cet impact, la solution la plus simple consiste simplement à réduire le champ électrique appliqué dans le dispositif afin de diminuer l'importance relative de l'émission par impact. Une telle réduction du champ électrique aurait cependant comme conséquence de diminuer aussi le photocourant effectivement collecté par le dispositif.

5.3 Étude d'un photodétecteur complet

Le dispositif étudié dans le cadre de ce mémoire est constitué de trois principales parties. D'abord, un système optique focalise l'image à observer sur un plan. Ensuite, une matrice de photodétecteurs reçoit ce signal focalisé et le transforme en un signal électronique. Cette matrice porte le nom de *FPA*, de l'acronyme anglais *Focal Plane Array*. Finalement, un système électronique d'acquisition de données permet la lecture des données recueillies par le *FPA*.

5.3.1 Description du système optique

Le système optique est la partie du dispositif servant à focaliser le signal optique incident sur le *FPA*. Afin de simplifier la présentation du système optique, nous allons utiliser un modèle ne comprenant qu'une seule lentille convergente. De cette façon, nous ne tenons pas compte des problèmes potentiels d'aberration chromatique ou sphérique ou encore de

considérations sur la profondeur de champ maximale qu'il soit possible d'atteindre. Malgré ces limites, le modèle simple développé dans le cadre de notre travail permet d'évaluer l'intensité du rayonnement incident sur le photodétecteur.

Le système optique est présenté de façon schématique à la figure 5.3. La distance entre

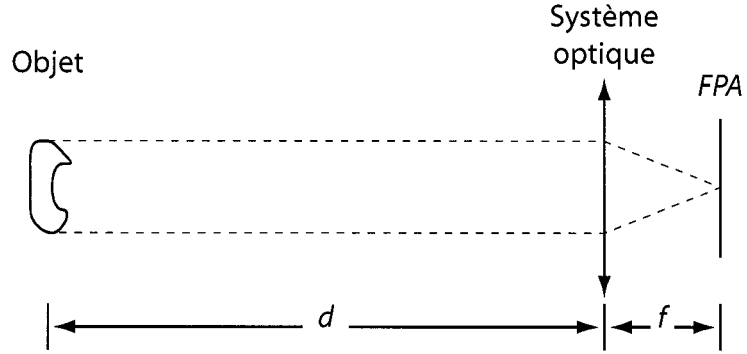


FIG. 5.3 – Vue schématique du système optique lorsque $d \gg f$

l'objet observé et la lentille est notée d et la longueur focale de la lentille est notée f . Dans le cas où l'objet observé est situé loin de la lentille, l'image se forme approximativement au foyer de la lentille et nous avons la relation $d \gg f$. Nous notons aussi \mathcal{S} la surface d'une boîte quantique moyenne.

D'après les lois de l'optique géométrique, la surface \mathcal{S}_O de l'objet observé éclairant une boîte quantique donnée est égale à

$$\mathcal{S}_O = \frac{d^2}{f^2} \mathcal{S}. \quad (5.17)$$

Le flux total \mathcal{F} de lumière émis par la surface \mathcal{S}_O et interceptant la lentille sera donc focalisé sur la boîte quantique. Ce flux est égal à

$$\mathcal{F} = \frac{\mathcal{S}_L \mathcal{S}_O}{4\pi d^2} \mathcal{I}_O \quad (5.18)$$

où \mathcal{I}_O est l'intensité de la radiation émise par l'objet observé et où \mathcal{S}_L est la surface de la lentille. Dans le cas où l'objet observé est un corps noir, la quantité \mathcal{I}_O est donnée par la

loi de Planck (voir l'équation 4.1). Nous retrouvons finalement

$$\mathcal{F} = \frac{S_L \mathcal{S}}{4\pi f^2} \mathcal{I}_O. \quad (5.19)$$

Cette quantité est égale au flux interceptant la boîte quantique. L'intensité du flux \mathcal{I} interceptant la boîte quantique vaut donc

$$\mathcal{I} = \frac{\mathcal{F}}{S} = \frac{S_L}{4\pi f^2} \mathcal{I}_O \quad (5.20)$$

et cette quantité se mesure en unités de puissance par surface par fréquence.

À partir de cette équation, nous voyons que le facteur Υ introduit à l'équation 4.95 s'écrit comme

$$\Upsilon = \frac{\mathcal{I}}{\mathcal{I}_O} = \frac{S_L}{4\pi f^2}. \quad (5.21)$$

Ce facteur dépend essentiellement des caractéristiques de la lentille convergente (ou plutôt du système optique complet). Dans le cas d'une lentille avec une très grande ouverture numérique, nous nous attendons à avoir approximativement que $d_L \sim f$, où d_L est le diamètre de la lentille. En notant $S_L = \frac{\pi}{4} d_L^2$, nous retrouvons

$$\Upsilon \sim \frac{1}{16}. \quad (5.22)$$

Il s'agit de l'ordre de grandeur du meilleur rapport Υ que nous pouvons obtenir avec un système optique classique. Ce facteur Υ multiplie le résultat que nous avons obtenu à l'équation 4.45 pour obtenir l'émission d'un corps noir reçue à travers un système optique.

5.3.2 Application à un photodétecteur réel

Prenons le cas où le photodétecteur est refroidi à la température de $T_d = 60$ K, que nous observons un corps noir à la température de $T = 300$ K et que le champ électrique à l'intérieur du dispositif vaut $F = 5 \times 10^3$ V/cm. Dans cette situation, nous trouvons à partir de la définition 4.98 que le rapport r entre l'émission sous illumination et l'émission sans illumination vaut environ 37.4. Si $D \sim 2$, nous retrouvons à partir de la relation 5.10

que le rapport signal sur bruit vaut environ $R \sim 7.16$, ce qui devrait garantir la détection de l'objet en question. Examinons maintenant plus en détails la dépendance du rapport r selon les trois principales variables qui influencent l'émission d'électrons (T_d , T et F).

La figure 5.4 illustre la dépendance du rapport r en fonction de la température T du corps noir observé. Près de $T \sim 300$ K, nous observons que $\frac{\partial r}{\partial T} \sim 0.746 \text{ K}^{-1}$. En exa-

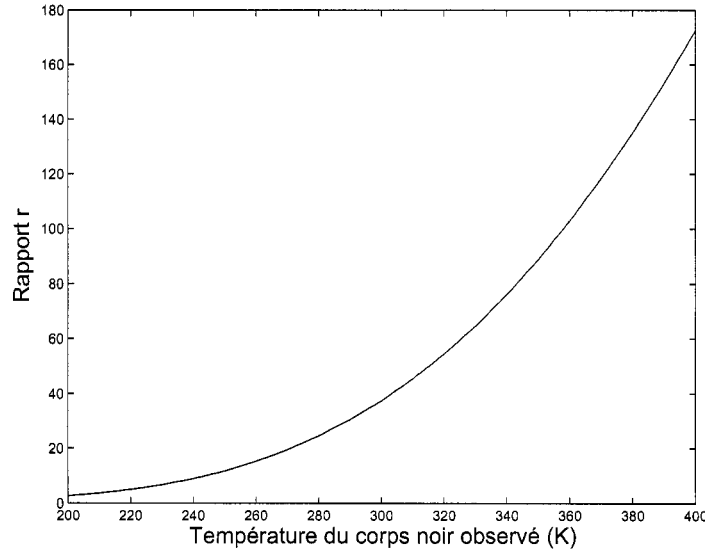


FIG. 5.4 – Influence de la température du corps noir observé sur le rapport r

minant l'équation 5.10, nous retrouvons que $R \sim 7.16$ et $\frac{\partial R}{\partial r} \sim 0.115$, ce qui permet de définir

$$\mathcal{R} = \left. \frac{\partial R}{\partial T} \right|_{T \sim 300\text{K}} \sim 0.086 \text{ K}^{-1}. \quad (5.23)$$

La quantité \mathcal{R} est reliée à la *résolution maximale* du photodétecteur, c'est-à-dire à sa capacité de déterminer une variation de la quantité de rayonnement émis et par conséquent tout changement de température de l'objet observé.

Le plus petit changement de luminosité détectable par le photodétecteur est déterminé en comparant la quantité \mathcal{R} avec la précision du système électronique d'acquisition de données. Si par exemple la précision relative du système d'acquisition est de $\mathcal{R}_{acq} = 0.5\%$,

alors nous pouvons nous attendre à obtenir une précision sur la mesure de la température de l'objet de l'ordre de

$$\frac{\mathcal{R}_{acq}}{\mathcal{R}} = 60 \text{ mK}. \quad (5.24)$$

Un système électronique plus précis permettrait évidemment d'affiner cette mesure.

La température du dispositif influence aussi grandement le rapport r . En effet, nous pouvons voir sur la figure 5.5 que le rapport r diminue très rapidement à mesure que la température du dispositif est augmentée et qu'il devient pratiquement égal à 1 pour des valeurs de $T_d > 80$ K. Ce graphique montre bien que la température du dispositif

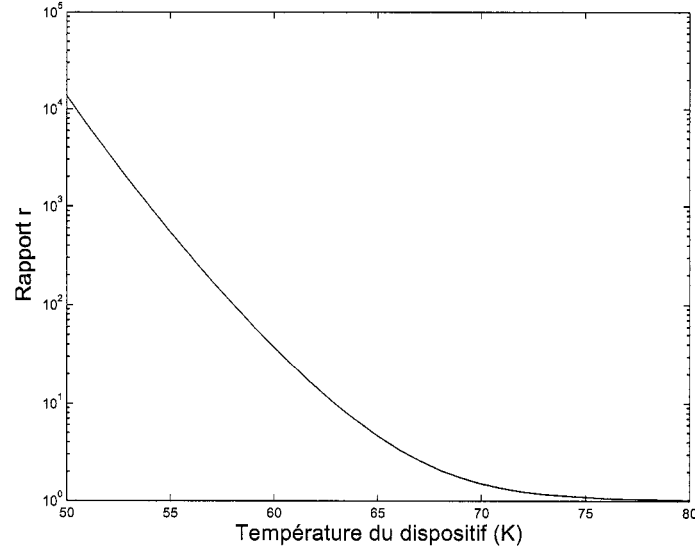


FIG. 5.5 – Dégradation des propriétés du dispositif à cause de l'émission par effet tunnel en fonction de sa température

représente un facteur limitatif extrêmement important.

Cependant, nous devons ici critiquer le modèle que nous avons développé dans le cadre de ce mémoire. En effet, nous avons considéré que l'émission thermoélectronique est à un facteur géométrique près la même pour un plan de boîtes quantiques que pour un puits quantique. Dans notre modèle, nous retrouvons ainsi la température critique de 70 K maintes fois mesurée pour les photodétecteurs à puits quantiques [4].

Or, ces résultats ne sont pas compatibles avec les observations expérimentales pour des photodétecteurs à boîtes quantiques. En effet, il a été démontré expérimentalement que les photodétecteurs à boîtes quantiques peuvent fonctionner à des températures beaucoup plus hautes, par exemple dans certains cas jusqu'à 150 K lorsqu'ils sont optimisés pour réduire le courant d'obscurité [9]. Il est donc fort probable que des phénomènes négligés dans ce travail réduisent grandement l'effet de l'émission thermoélectronique. Notre modèle permet cependant de noter que le facteur le plus important limitant l'utilisation d'un photodétecteur à boîtes quantiques est le taux d'émission thermoélectronique à haute température. Un des objectifs principaux lors de la conception d'un photodétecteur doit être de limiter autant que possible ce courant, par exemple en ajoutant une barrière de potentiel entre les boîtes quantiques [40].

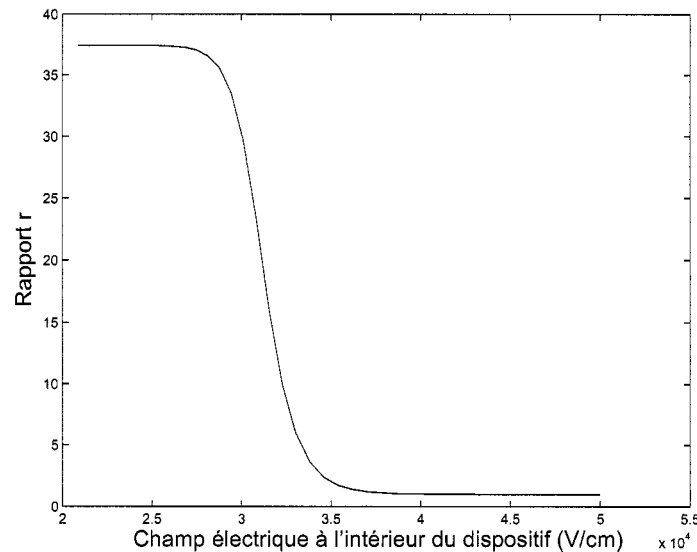


FIG. 5.6 – Dégradation des propriétés du dispositif causé par l'émission par effet tunnel en fonction du champ électrique appliqué

Finalement, pour étudier l'influence de l'application d'une différence de potentiel aux bornes du dispositif sur l'émission par effet tunnel, nous avons tracé sur la figure 5.6 le rapport r en fonction de l'intensité F du champ électrique appliqué dans le dispositif.

Nous observons d'abord sur ce graphique que le rapport r ne varie presque pas jusqu'à une valeur critique du champ électrique. Une fois cette intensité atteinte, le facteur r diminue très rapidement et tend finalement vers 1, cas où le signal devient négligeable devant le bruit.

L'ordre de grandeur du champ critique est d'environ 3×10^4 V/cm pour un photodétecteur à la température de 60 K observant un corps noir à 300 K. Si le photodétecteur comporte 20 plans de boîtes quantiques et que la distance entre deux plans de boîtes quantiques est de l'ordre de 100 nm, alors nous voyons que ce champ électrique correspond à l'application d'une tension de 6 V aux bornes du dispositif. Cette tension est relativement grande pour un photodétecteur de ce type et nous en concluons que nous pouvons donc négliger la contribution de l'émission par effet tunnel dans la grande majorité des cas.

Chapitre 6

Conclusion

L'objectif principal de ce travail consistait à développer un modèle de simulation pour les photodétecteurs infrarouges à boîtes quantiques construits dans le système InAs/InP, afin d'en déterminer le rapport signal sur bruit, la sensibilité à détecter une variation de température des objets observés et la température maximale de fonctionnement. Nous pouvons considérer que cet objectif a été atteint dans la mesure où nous avons obtenu des résultats qui sont en accord avec les données publiées pour la majorité des phénomènes étudiés. De plus, un modèle prédictif permettant d'optimiser le design et les conditions d'opération d'un photodétecteur réaliste a été développé. Nous avons aussi obtenu des résultats spécifiques sur l'ordre de grandeur de la barrière de Coulomb dans une boîte quantique aplatie et sur l'influence de la couche de mouillage sur les états électroniques calculés. Pour obtenir ces résultats, nous avons employé la méthode de la fonction enveloppe avec l'approximation de la masse effective, et nous avons utilisé la géométrie cylindrique pour simplifier notre approche.

Cependant, nous n'avons pas réussi à accorder de façon satisfaisante notre prévision de la température maximale de fonctionnement des photodétecteurs avec mesures expérimentales les plus récentes. Il serait intéressant de revoir cette section du travail, afin de déterminer quels sont les phénomènes physiques négligés qui expliquent cet écart. En particulier, il faudrait vérifier si ce désaccord s'explique en partie parce le fait que notre

prévision de l'émission thermoélectronique est surestimée à haute température dans notre modèle. Il faudrait aussi vérifier quel est l'impact des transitions incluant un état intermédiaire et si ces transitions sont réellement négligeables.

6.1 La géométrie des boîtes quantiques

Pour obtenir les résultats quantitatifs présentés dans ce mémoire, nous avons choisi d'imposer aux boîtes quantiques composant la région d'absorption optique du photodétecteur la forme cylindrique avec la hauteur beaucoup plus petite que le diamètre. Ce choix de géométrie a été fait principalement pour deux raisons :

- pour modéliser simplement l'observation expérimentale selon laquelle les boîtes quantiques étudiées sont beaucoup plus larges que hautes ;
- pour simplifier le développement mathématique de notre modèle de boîtes quantiques.

Cette géométrie, évidemment une construction abstraite, permet d'importantes simplifications lors du développement du formalisme. Beaucoup de résultats qualitatifs et quantitatifs peuvent être obtenus grâce à ce choix et nous devons en saisir les forces et les limites. Par exemple, nous avons déterminé avec cette approche l'apparence qualitative du spectre des états électroniques et nous avons montré que l'effet de la barrière de Coulomb est négligeable. Cependant, cette géométrie ne nous permet pas de déterminer quel est l'effet d'un profil d'interdiffusion aux interfaces entre les boîtes quantiques et le matériau de la barrière.

6.1.1 L'effet de la géométrie sur les états électroniques liés

Nous avons remarqué que le modèle de quasi-atome souvent employé pour décrire les propriétés des états électroniques liés des boîtes quantiques n'est pas adéquat dans certaines situations. Par exemple, ce modèle suppose que l'énergie des états électroniques

sont bien définis et qu'ils sont relativement bien espacés, c'est-à-dire que leur espacement est au moins de l'ordre de $k_B T_d$, où T_d est la température du dispositif.

Or, nous avons montré à la section 3.4 qu'il existe plusieurs états rapprochés au voisinage de l'état fondamental d'une boîte quantique cylindrique de diamètre $2a$ et de hauteur $2h$ (avec $\frac{a}{h} \sim 10$). Nous savons aussi qu'il n'y a que quelques états liés selon l'axe \hat{z} parce que la hauteur des boîtes quantiques est de l'ordre d'une dizaine de nm . La différence d'énergie Δ_z entre les deux premiers états de confinement selon l'axe \hat{z} est donc du même ordre de grandeur que V_0 , la profondeur du potentiel de confinement. Nous en tirons que la différence d'énergie entre les deux premiers états de confinement dans le plan $\hat{x}\hat{y}$ est de l'ordre de $\Delta_{\hat{x}\hat{y}} \sim \Delta_z \frac{h^2}{a^2} \sim 1 \text{ meV}$ pour une boîte quantique typique étudiée dans ce travail. Nous pouvons ainsi affirmer que $\Delta_{\hat{x}\hat{y}} \ll k_B T_d \ll \Delta_z$ avec T_d la température du dispositif.

À toutes fins utiles, seul le premier état de confinement en \hat{z} est occupé à l'équilibre. Par contre, nous pouvons nous attendre qu'une certaine quantité d'états dans le plan $\hat{x}\hat{y}$ soient occupés. Concrètement, cette situation est approximativement équivalente au cas où l'état fondamental possède un étalement caractéristique en énergie de l'ordre de $k_B T_d$. Cet étalement n'est pas pris en compte par l'analogie entre une boîte quantique et un quasi-atome et doit donc être examiné plus en détails pour voir si ses conséquences sur les propriétés d'absorption d'un photodétecteur à boîtes quantiques sont importantes. Cet étalement s'ajoute à celui obtenu lorsque nous tenons compte de la dispersion en tailles de la population de boîtes quantiques.

6.1.2 L'effet de la géométrie sur l'absorption optique

Nous avons remarqué que l'incorporation de boîtes quantiques dans des photodétecteurs infrarouges est très intéressante principalement à cause de leur capacité à briser la symétrie plane des états électroniques. Sans cette brisure de symétrie, la détection du rayon-

nement perpendiculaire à la surface du photodétecteur serait beaucoup moins forte, voire presque inexistante comme dans le cas des photodétecteurs à puits quantiques.

Cette observation s'explique à partir des résultats présentés à la section 3.3.1. Nous constatons que l'étalement spatial de la fonction enveloppe correspondant à l'état fondamental de ce système est approximativement du même ordre de grandeur que l'étalement du potentiel effectif. Une onde infrarouge de longueur d'onde $\lambda_{IR} \sim 10 \mu\text{m}$ pénétrant perpendiculairement à la surface du dispositif possède donc une longueur d'onde beaucoup plus grande que toutes les dimensions caractéristiques de la fonction enveloppe de l'électron occupant l'état fondamental d'une boîte quantique. À toutes fins utiles, nous pouvons donc considérer que l'effet de l'onde incidente sur l'électron est équivalent à celui d'un champ électrique constant dans l'espace, polarisé dans le plan $\hat{x}\hat{y}$, mais oscillant dans le temps. À cause de cette polarisation particulière, le champ électrique oscillant ne pourra interagir qu'avec la composante dans le plan $\hat{x}\hat{y}$ de la fonction enveloppe de l'état électronique. Comme cette composante varie de façon significative dans l'espace pour une boîte quantique, alors la probabilité d'absorption n'est pas nulle. Ce raisonnement permet aussi d'expliquer simplement pourquoi l'absorption est pratiquement nulle pour un photodétecteur à puits quantiques.

Nous déduisons de cette remarque que les caractéristiques dans le plan des boîtes, en particulier leurs dimensions, seront les propriétés importantes pour déterminer la section efficace d'interaction entre un photon infrarouge d'incidence normale et un électron lié à la boîte quantique. Nous pouvons aussi affirmer que plus la surface des boîtes quantiques est petite, plus la fonction enveloppe variera rapidement dans le plan $\hat{x}\hat{y}$ et plus la section efficace de capture d'un photon infrarouge sera importante. L'efficacité d'un photodétecteur dépendra donc énormément de la qualité et de l'uniformité des boîtes quantiques qui le composent.

6.2 Perspectives

6.2.1 Le travail de modélisation

Nous croyons que plusieurs hypothèses présentées dans ce travail devraient être révisées si nous souhaitons améliorer la précision des prévisions quantitatives. D’abord, l’hypothèse selon laquelle deux électrons occupent l’état fondamental des boîtes quantiques en tout temps devrait être validée de façon plus rigoureuse. En effet, même si cette hypothèse est utile pour simplifier les calculs d’émission par absorption optique et par effet tunnel, nous croyons que cette hypothèse masque certains phénomènes complexes dans les boîtes quantiques. Par exemple, cette hypothèse ne prend pas en compte d’une éventuelle variation du taux de recombinaison des électrons dans la bande de conduction en fonction de la température du dispositif.

Ensuite, nous croyons qu’une étude plus fine de l’étalement de l’énergie de l’état fondamental des boîtes quantiques autour de la valeur moyenne serait pertinente dans le cadre de ce travail. Cet effet, décrit à la section 6.1.1, n’a pas été pris en compte dans le cadre de ce mémoire. Il serait donc pertinent d’évaluer quel est son impact sur le spectre d’absorption de rayonnement infrarouge.

Finalement, nous avons démontré que l’énergie de liaison de l’état fondamental d’une boîte quantique dépend surtout de la hauteur de la boîte. Par conséquent, comme les dimensions des boîtes quantiques ne sont pas toutes identiques mais plutôt dispersées autour d’une valeur moyenne, nous nous attendons à ce que le nombre d’électrons par boîte quantique varie d’une boîte à l’autre. Il faudrait donc revoir le modèle développé afin de connaître l’impact de cette distribution sur les propriétés d’absorption infrarouge. La méthode la plus simple pour traiter cet effet consisterait à établir un profil de la distribution des tailles des boîtes quantiques et de s’en servir afin d’évaluer les propriétés électriques du dispositif en pondérant les contributions de chaque taille de boîte quantique.

6.2.2 La fabrication de dispositifs

Il serait très intéressant de construire des échantillons de boîtes possédant différentes dimensions caractéristiques (hauteur, diamètre et densité surfacique), afin de mesurer l'influence de ces paramètres sur le taux d'émission d'électrons. Il serait aussi pertinent de travailler à la construction d'un photodétecteur complet et de mesurer ses caractéristiques électriques afin de vérifier nos hypothèses de travail et nos résultats de simulation. Ces études permettraient de vérifier expérimentalement comment la forme des boîtes quantiques modifie les propriétés du dispositif et pourraient permettre de valider les modèles développés dans ce mémoire.

Bibliographie

- [1] J.L. Pan, C.G. Fonstad Jr. Theory, fabrication and characterization of quantum well infrared photodetectors. *Materials Science and Engineering*, 28 : 65–147, 2000.
- [2] W.D. Lawson, S. Nielson, E.H. Putley, A.S. Young. Preparation and properties of HgTe and mixed crystals of HgTe-CdTe. *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, 9 : 325–329, 1959.
- [3] A. Rogalski. Infrared detectors : status and trends. *Progress in Quantum Electronics*, 27 : 59–210, 2003.
- [4] A. Rogalski. Quantum well photoconductors in infrared detector technology. *Journal of Applied Physics*, 93 : 4355–4391, 2003.
- [5] V. Ryzhii. Multiple quantum-dot infrared phototransistors. *Semiconductor Science and Technology*, 11 : 759–765, 1996.
- [6] V. Ryzhii, M. Ershov, I. Khmyrova, M. Ryzhii, T. Iizuka. Multiple quantum-dot infrared phototransistors. *Physica B*, 227 : 17–20, 1996.
- [7] B. Kochman, A.D. Stiff-Roberts, S. Chakrabarti, J.D. Phillips, S. Krishna, J. Singh, P. Bhattacharya. Absorption, carrier lifetime, and gain in InAs-GaAs quantum-dot infrared photodetectors. *IEEE Journal of Quantum Electronics*, 39 : 459–467, 2003.
- [8] H.C. Liu, J.Y. Duboz, R. Dudek, Z.R. Wasilewski, S. Fafard, P. Finnie. Quantum dot infrared photodetectors. *Physica E*, 17 : 631–633, 2003.

- [9] S. Chakrabarti, A.D. Stiff-Roberts, P. Bhattacharya, S. Gunapala, S. Bandara, S.B. Rafol, S.W. Kennerly. High-temperature operation of InAs-GaAs quantum-dot infrared photodetectors with large responsivity and detectivity. *IEEE Photonics Technology Letters*, 16 : 1361–1363, 2004.
- [10] H. Marchand. Épitaxie en phase vapeur aux organométalliques et caractérisation de nanostructures auto-organisées à base de InAs/InP. Mémoire de M. Sc. A, École Polytechnique de Montréal, 1996.
- [11] H. Mathieu. *Physique des semiconducteurs et des composants électroniques, cinquième édition*, pages 51–53. Dunod, 2001.
- [12] H. Hwang, K. Park, J.-H. Kang, E. Ahn, H.M. Cheong, E. Yoon. Optical properties of InAs/InP quantum dot stack grown by metalorganic chemical vapor deposition. *Physica Status Solidi C*, 0 : 1347–1350, 2003.
- [13] A. Weber, O. Gauthier-Lafaye, F.H. Julien, J. Brault, M. Gendry, Y. Desieres, T. Benyattou. Strong normal-incidence infrared absorption in self-organized InAs/InAlAs quantum dots grown on InP(001). *Applied Physics Letters*, 74 : 413–415, 1999.
- [14] S. Yoon, Y. Moon, T.-W. Lee, H. Hwang, E. Yoon, Y. Dong Kim. Shape change of InAs self-assembled quantum dots induced by As/P exchange reaction. *Thin Solid Films*, 357 : 81–84, 1999.
- [15] P.Y. Yu, M. Cardona. *Fundamentals of Semiconductors, Third Edition*, pages 162–166. Springer, 2001.
- [16] J.-Y. Marzin, G. Bastard. Calculation of the energy levels in InAs/GaAs quantum dots. *Solid State Communications*, 92 : 437–442, 1994.
- [17] T.B. Bahder. Eight-band $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ model of strained zinc-blende crystals. *Physical Review B*, 41 : 11992–12002, 1990.

- [18] H. Jiang, J. Singh. Strain distribution and electronic spectra of InAs/GaAs self-assembled dots : an eight-band study. *Physical Review B*, 56 : 4696–4701, 1997.
- [19] M. Holm, M.-E. Pistol, C. Pryor. Calculations of the electronic structure of strained InAs quantum dots in InP. *Journal of Applied Physics*, 92 : 932–936, 2002.
- [20] O. Stier, M. Grundmann, D. Bimberg. Electronic and optical properties of strained quantum dots modeled by 8-band $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ theory. *Physical Review B*, 59 : 5688–5701, 1999.
- [21] C. Pryor. Eight-band calculations of strained InAs/GaAs quantum dots compared with one-, four-, and six-band approximations. *Physical Review B*, 57 : 7190–7195, 1998.
- [22] L.W. Wang, K. Jeongnim, A. Zunger. Electronic structures of [110]-faceted self-assembled pyramidal InAs/GaAs quantum dots. *Physical Review B*, 59 : 5678–5687, 1999.
- [23] H. Fu, L.W. Wang, A. Zunger. Applicability of the $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ method to the electronic structure of quantum dots. *Physical Review B*, 57 : 9971–9987, 1998.
- [24] T. Saito, J.N. Schulman, Y. Arakawa. Strain-energy distribution and electronic structure of InAs pyramidal quantum dots with uncovered surfaces : Tight-binding analysis. *Physical Review B*, 57 : 13016–13019, 1998.
- [25] R. Santoprete, B. Koiller, R.B. Capaz, P. Kratzer, Q.K.K. Liu, M. Scheffler. Tight-binding study of the influence of the strain on the electronic properties of InAs/GaAs quantum dots. *Physical Review B*, 68 : 235311/1–9, 2003.
- [26] J. Phillips, P. Bhattacharya, S.W. Kennerly, D.W. Beekman, M. Dutta. Self-Assembled InAs-GaAs Quantum-Dot Intersubband Detectors. *IEEE Journal of Quantum Electronics*, 35 : 936–943, 1999.

- [27] V. Ryzhii. Analysis of the photocurrent in quantum dot infrared photodetectors. *Japanese Journal of Applied Physics, Part 2*, 40 : L148–L150, 2001.
- [28] V. Ryzhii, I. Khmyrova, V. Pipa, V. Mitin, M. Willander. Device model for quantum dot infrared photodetectors and their dark-current characteristics. *Semiconductor Science and Technology*, 16 : 331–338, 2001.
- [29] A. Sergeev, V. Mitin, M. Strosio. Quantum-dot photodetector operating at room temperatures : diffusion-limited capture. *Physica B*, 316–317 : 369–372, 2002.
- [30] M. Ryzhii, V. Ryzhiia, V. Mitina. Electric-field and space-charge distributions in InAs/GaAs quantum-dot infrared photodetectors : ensemble Monte Carlo particle modeling. *Microelectronics Journal*, 34 : 411–414, 2003.
- [31] P.Y. Yu, M. Cardona. *Fundamentals of Semiconductors, Third Edition*, pages 69–71. Springer, 2001.
- [32] N. Shtinkov, P. Desjardins, R.A. Masut, S.J. Vlaev. Lateral confinement and band mixing in ultrathin semiconductor quantum wells with steplike interfaces. *Physical Review B*, 70 : 155302/1–11, 2004.
- [33] G.B. Arfken, H.J. Weber. *Mathematical Methods for Physicists, Fifth Edition*, pages 673–674. Harcourt/Academic Press, 1992.
- [34] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, F. Laloë. *Mécanique Quantique*, page 1282. Hermann, 1992.
- [35] J.L. Basdevant, J. Dalibard. *Mécanique quantique*, pages 69–71. Éditions de l'École polytechnique, 2000.
- [36] G. Bastard. *Wave Mechanics Applied to Semiconductor Heterostructures*, pages 237–243. Les Éditions de Physique, 1992.
- [37] D.J. Griffiths. *Introduction to Electrodynamics, Third Edition*, pages 380–382. Prentice Hall, 1999.

- [38] M. Abramowitz, I.A. Stegun. *Handbook of mathematical functions, Tenth Printing*, pages 446–451. National Bureau of Standards, 1972.
- [39] H. Mathieu. *Physique des semiconducteurs et des composants électroniques, cinquième édition*, pages 309–313. Dunod, 2001.
- [40] A.D. Stiff-Roberts, S. Krishna, P. Bhattacharyaa, S. Kennerly. Low-bias, high-temperature performance of a normal-incidence InAs/GaAs vertical quantum-dot infrared photodetector with a current-blocking barrier. *Journal of Vacuum Science and Technology B*, 20 : 1185–1187, 2002.
- [41] H.P. Hjalmarson, J.D. Dow. A semi-empirical tight-binding theory of the electronic structure of semiconductors. *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, 44 : 365–378, 1983.
- [42] J.-M. Jancu, R. Scholz, F. Beltram, F. Bassani. Empirical *spds** tight-binding calculation for cubic semiconductors : General method and material parameters. *Physical Review B*, 57 : 6493–6507, 1998.
- [43] Y. Li, O. Voskoboynikov, C.P. Lee and S.M. Sze. Computer simulation of electron energy levels for different shape InAs/GaAs semiconductor quantum dots. *Computer Physics Communications*, 141 : 66–72, 2001.
- [44] G. Bastard. Superlattice band structure in the envelope-function approximation. *Physical Review B*, 24 : 5693–5697, 1981.

Annexe A

La méthode de la fonction enveloppe

Les dispositifs à hétérostructures semi-conductrices possèdent des propriétés électroniques et optiques très différentes des matériaux massiques. En effet, l'intégration de puits, de fils ou de boîtes quantiques dans un dispositif introduit des changements majeurs des propriétés des états électroniques. Un des grands défis actuels de la physique des dispositifs est d'établir une méthode systématique qui, sans être trop lourde en calculs, permet de déterminer avec suffisamment de précision les propriétés électroniques qui nous intéressent pour différentes géométries et types d'hétérostructures.

Il existe actuellement plusieurs approches reconnues pour aborder ce problème. Nous avons choisi dans le cadre de ce mémoire d'utiliser la méthode de la fonction enveloppe avec l'approximation de la masse effective. Il s'agit d'une méthode de calcul permettant de décrire avec une relative simplicité certains états électroniques d'une hétérostructure et qui permet de faire des prévisions des propriétés de conduction électrique ou d'absorption optique de dispositifs simples.

A.1 La détermination des états électroniques dans le semi-conducteur homogène

A.1.1 Définition du problème

Nous définissons d'abord le *semi-conducteur homogène* comme étant parfaitement cristallin, infini et sans défaut. Nous cherchons une méthode pour déterminer les propriétés macroscopiques de ce semi-conducteur, par exemple sa conductivité ou son spectre d'absorption optique. Pour parvenir à ce but, nous devons déterminer les propriétés des électrons du semi-conducteur.

Une méthode de résolution de ce problème consiste à poser l'hamiltonien total du cristal, qui comprend toutes les interactions entre noyaux et électrons, pour en trouver les états propres. Malheureusement, cet hamiltonien est très complexe et contient une quantité importante de termes. Il faudra trouver une façon de simplifier son analyse.

La première approximation consiste à séparer les électrons présents dans ce cristal en deux classes : les *électrons de cœur* et les *électrons de valence*. Les électrons de cœur sont ceux qui proviennent des orbitales atomiques remplies et les électrons de valence sont ceux correspondant à la dernière orbitale atomique. Nous faisons l'hypothèse que les électrons de cœur restent localisés près de leur noyau atomique correspondant et qu'ils forment avec celui-ci un ensemble statique que nous appellerons les *noyaux ioniques*. Les dimensions d'un noyau ionique sont beaucoup plus grandes que les dimensions d'un noyau atomique, mais elles restent quand même beaucoup plus petites que le paramètre de maille du réseau cristallin.

La seconde approximation que nous faisons est de considérer que la fonction d'onde des électrons de valence s'ajuste instantanément en fonction de la position des noyaux ioniques. Nous justifions cette approximation par le fait que les noyaux ioniques sont beaucoup plus massifs que les électrons de valence et que leur temps de réponse à une perturbation est par conséquent beaucoup plus long. Nous considérons donc que les noyaux io-

riques ne voient qu'un potentiel électronique moyenné dans le temps. Cette approximation porte le nom d'*approximation de Born-Oppenheimer* ou d'*approximation adiabatique*.

À l'aide de ces deux approximations, l'hamiltonien \mathcal{H} décrivant le semi-conducteur s'écrit

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{ions} + \mathcal{H}_e + \mathcal{H}_{e-ions} \quad (\text{A.1})$$

où \mathcal{H}_{ions} représente l'hamiltonien du réseau ionique sous l'influence du potentiel ionique et du potentiel électronique adiabatique moyen, \mathcal{H}_e est l'hamiltonien des électrons de valence avec le potentiel produit par les ions gelés à leur position d'équilibre et \mathcal{H}_{e-ions} est l'hamiltonien d'interaction entre les électrons et les vibrations du réseau cristallin.

Comme nous nous intéressons aux propriétés électroniques du semi-conducteur, nous allons principalement examiner le terme \mathcal{H}_e . Cet hamiltonien peut s'écrire sous la forme

$$\mathcal{H}_e = \sum_i \frac{p_i^2}{2m} + \frac{1}{2} \sum_{i,i' \neq i} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_{i'}|} - \sum_{i,j} \frac{Z_j e^2}{4\pi\epsilon_0 |\mathbf{r}_i - \mathbf{R}_{j0}|} \quad (\text{A.2})$$

où \mathbf{p}_i et \mathbf{r}_i sont respectivement l'opérateur quantité de mouvement et la position du i ème électron et où m et e sont la masse et la charge d'un électron. Z_j et \mathbf{R}_{j0} sont respectivement le nombre atomique et la position moyenne du j ème noyau du cristal et ϵ_0 est la permittivité du vide.

A.1.2 L'hypothèse des électrons indépendants

Cet hamiltonien est encore trop complexe pour pouvoir être résolu de façon analytique. Trouver les états propres de cet hamiltonien nécessite de prendre en compte de toutes les interactions entre électrons, ce qui n'est pas une tâche aisée. Pour simplifier ce problème, nous faisons l'hypothèse que le potentiel vu par un électron de valence ne dépend que de sa position dans l'espace et que tous les autres électrons n'apportent qu'une contribution moyenne dans le temps au potentiel. Cette hypothèse n'est valide que si la densité d'électrons reste faible dans le semi-conducteur et porte le nom d'*hypothèse du potentiel*

électronique moyen. L'hamiltonien pour chaque électron devient unique et s'écrit simplement comme

$$\mathcal{H}_{1e} = \frac{p^2}{2m} + V(\mathbf{r}) \quad (\text{A.3})$$

où $V(\mathbf{r})$ est le potentiel électronique moyen, contenant les contributions moyennées sur le temps du potentiel électrostatique du réseau des cœurs ioniques et des électrons de valence. Il s'agit de l'*hamiltonien à un électron*. L'équation de Schrödinger indépendante du temps pour cet hamiltonien s'écrit

$$\mathcal{H}_{1e}\psi_n = E_n\psi_n \quad (\text{A.4})$$

où ψ_n représente la n ième fonction d'onde de l'électron et E_n son énergie. D'après le théorème de Bloch, puisque le potentiel $V(\mathbf{r})$ est périodique, alors les solutions de cette équation sont les fonctions de Bloch $\psi_{n\mathbf{k}}$. Ces fonctions s'écrivent sous la forme

$$\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (\text{A.5})$$

où les $u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ sont des fonctions de périodicité identique à celle du cristal.

A.1.3 Développement en ondes planes

Nous pouvons faire un développement de Taylor de l'expression A.5 autour du point Γ et obtenir

$$\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} [u_{n\mathbf{k}'}(\mathbf{r}) + \mathbf{k} \cdot \nabla_{\mathbf{k}'} (u_{n\mathbf{k}'}(\mathbf{r})) + \dots]_{\mathbf{k}'=0}. \quad (\text{A.6})$$

En négligeant dans l'équation A.6 les termes d'ordre supérieur au terme constant, nous retrouvons une expression simple et approchée des fonctions de Bloch

$$\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_{n0}(\mathbf{r}). \quad (\text{A.7})$$

Dans cette approximation, les états électroniques de conduction près du point Γ sont approximativement décrits par le produit de deux fonctions :

- l'onde plane $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ qui varie très lentement à l'échelle atomique (le vecteur d'onde \mathbf{k} est beaucoup plus petit par hypothèse que l'inverse du paramètre de maille) ;
- la fonction $u_{n0}(\mathbf{r})$ qui est de périodicité identique à celle du cristal et qui varie très rapidement dans l'espace.

De cette façon, nous découplons le comportement local d'un état électronique (modélisé par la fonction u_{n0}) de son comportement étendu (modélisé par l'onde plane).

A.1.4 La structure de bandes d'un semi-conducteur homogène

Nous appelons la *structure de bandes* d'un semi-conducteur la représentation graphique des $E_n(\mathbf{k})$ en fonction de \mathbf{k} pour toute la zone de Brillouin. Cette structure est obtenue à la suite des approximations présentées aux sections précédentes. En particulier, la température du semi-conducteur doit être suffisamment faible pour que la densité de porteurs libres reste petite. À titre d'exemple, la figure A.1 présente la structure de bandes

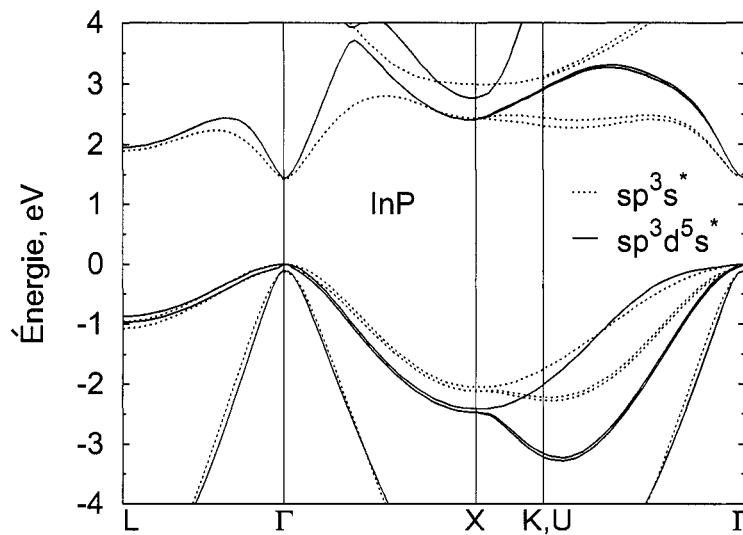


FIG. A.1 – Structure de bande de l'arséniure de gallium (GaAs)

de l'InP calculée par la méthode empirique des liaisons fortes pour les bases sp^3s^* [41] et $sp^3d^5s^*$ [42].

L'intérêt de définir la structure de bande d'un semi-conducteur apparaît lors de l'analyse et de l'interprétation des mesures des propriétés électroniques et optiques. En effet, ces propriétés sont beaucoup influencées par les électrons occupant les bandes de conduction et par les trous qu'ils laissent dans les bandes de valence. Par exemple, dans le cas d'un semi-conducteur dopé par des atomes donneurs d'électrons, les propriétés électroniques du semi-conducteur sont principalement influencées par les électrons de la bande de conduction, puisque leur densité dépassera de beaucoup celle des trous.

Certains endroits dans la structure de bande possèdent des propriétés importantes. Un de ces points particuliers, le *point* Γ , est situé au centre de la zone de Brillouin, soit pour $k = 0$. Lorsque la distance entre la bande de conduction et la bande de valence d'un semi-conducteur est minimale au point Γ , alors nous disons que le semi-conducteur possède une bande interdite *directe*. Ce type de semi-conducteur est très utilisé dans les applications optoélectroniques, puisque les transitions directes provoquées par l'absorption d'un photon sont très importantes. Dans le cas contraire, nous disons que le semi-conducteur possède une bande interdite *indirecte*. La distance entre le minimum de la bande de conduction et le maximum de la bande de valence porte le nom d'*énergie de la bande interdite* du semi-conducteur.

A.1.5 Approximation de la masse effective

Malgré la complexité apparente de la structure de bande d'un semi-conducteur, seulement une toute petite région de la structure de bande influence de façon importante les propriétés électroniques du solide. Nous l'expliquerons à l'aide de la remarque suivante.

À une température nulle, seuls les états d'énergie inférieure à l'*énergie de Fermi* (notée E_F) sont occupés. Pour un semi-conducteur intrinsèque, l'énergie de Fermi est égale à peu près à l'énergie au milieu de la bande interdite. À mesure que la température est augmentée, nous observons que les états qui étaient inoccupés auront une probabilité d'être

peuplés et que cette probabilité sera donnée par la distribution de Fermi-Dirac. Nous en concluons que les états de la bande de conduction qui auront la plus grande probabilité d'être occupés sont ceux qui sont situés le plus près du minimum de la bande.

Nous examinerons donc en détail la structure des bandes de conduction près de leur minimum énergétique et la structure des bandes de valence dans la région située près de leur maximum. Nous remarquons que dans le voisinage de ces endroits, les bandes ont une allure parabolique.

L'approximation de la masse effective consiste à faire l'approximation que les bandes sont parfaitement paraboliques. Nous définissons l'énergie $E_n(\mathbf{k})$ de l'état \mathbf{k} de la n ième bande comme étant

$$E_n(\mathbf{k}) = E_{n0} + \frac{\hbar^2}{2} (\mathbf{k} - \mathbf{k}_{n0}) \cdot \left(\frac{1}{m_n^*} \right)_{\mathbf{k}_{n0}} \cdot (\mathbf{k} - \mathbf{k}_{n0}) \quad (\text{A.8})$$

où E_{n0} est l'énergie et \mathbf{k}_{n0} la valeur du vecteur d'onde à l'extrémum de la n ième bande, où $\left(\frac{1}{m_n^*} \right)_{\mathbf{k}_0}$ est le tenseur de la masse effective de la n ième bande au point \mathbf{k}_0 et où le symbole \cdot signifie le produit contracté. Le tenseur de la masse effective peut donc être interprété comme étant une mesure de la courbure des bandes au point \mathbf{k}_0 .

Plus précisément, les composantes du tenseur de la masse effective pour la n ième bande sont définies par la relation

$$\left(\frac{1}{m_n^*} \right)_{ij} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2}{\partial k_i \partial k_j} E_n(\mathbf{k}) \Big|_{\mathbf{k}=\mathbf{k}_0} \hat{k}_i \otimes \hat{k}_j \quad (\text{A.9})$$

où le symbole \otimes représente le produit tensoriel.

Dans le cas d'un semi-conducteur à bande interdite directe, le minimum de la bande de conduction est donné pour $\mathbf{k}_0 = \mathbf{0}$. De plus, le tenseur de la masse effective est diagonal et isotrope. Pour ces matériaux, nous définissons la *masse effective* m_n^* comme étant la quantité scalaire

$$\frac{1}{m_n^*} = \frac{1}{3} \text{Trace} \left(\frac{1}{m_n^*} \right) \quad (\text{A.10})$$

et la relation entre le vecteur d'onde \mathbf{k} d'un état électronique et son énergie devient alors simplement

$$E_n(\mathbf{k}) = E_{n0} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_n^*}. \quad (\text{A.11})$$

L'hamiltonien correspondant à ce spectre dans le cadre de l'approximation de la masse effective devient alors simplement

$$\mathcal{H}'_{1e} = E_{n0} - \frac{\hbar^2}{2m_n^*} \nabla^2. \quad (\text{A.12})$$

Cette approximation permet de grandement simplifier l'analyse des propriétés électroniques d'un semi-conducteur volumique. En effet, au lieu d'étudier une figure très complexe (la structure de bandes complète), nous nous limitons à une relation très simple et ne comprenant qu'un seul paramètre par bande, soit la masse effective d'un porteur. Évidemment, cette relation ne reste valable que lorsque le porteur n'est pas trop éloigné du point Γ .

De plus, nous savons d'après les résultats d'une investigation par la méthode du pseudopotentiel [22] que les états liés de la bande de conduction se décrivent très bien comme des superpositions d'états électroniques au point Γ . Par conséquent, nous concluons qu'il est raisonnable d'utiliser l'approximation de la masse effective lors de l'étude des propriétés des électrons liés aux boîtes quantiques.

A.2 La détermination des états électroniques de conduction dans des hétérostructures semi-conductrices

A.2.1 Définition du problème

Dans la section A.1, nous avons énoncé les hypothèses qui permettent la simplification du problème de la détermination des états électroniques d'un semi-conducteur homogène. Nous cherchons maintenant à réutiliser certaines de ces hypothèses afin de déterminer les

états électroniques résultant du confinement quantique des électrons dans les hétérostructures semi-conductrices.

Nous cherchons à évaluer la densité d'états induits par des variations de la composition du semi-conducteur, par exemple à l'intérieur d'une hétérostructure. Pour faire l'étude de ces états électroniques, nous allons introduire le concept de *potentiel effectif* et définir le formalisme de la *méthode de la fonction enveloppe*.

A.2.2 Le potentiel effectif

Pour aider à comprendre le problème de la détermination des propriétés électroniques et optiques dans une hétérostructure, prenons l'exemple simple d'un puits quantique formé par le dépôt d'une mince couche d'épaisseur $2h$ du matériau A entre deux épaisses couches d'un matériau B . Les deux matériaux A et B peuvent rester quelconques, la seule contrainte que nous posons est que le minimum de la bande de conduction du matériau A doit être plus bas que celui du matériau B . Nous notons V_0 la différence entre ces deux minima.

La figure A.2 présente la vue en coupe du minimum de la bande de conduction en fonction de la position dans le dispositif avec l'approximation de passage abrupt entre les deux matériaux.

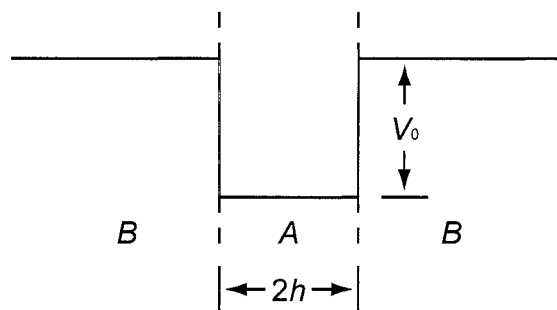


FIG. A.2 – Vue en coupe du minimum de la bande de conduction en fonction de la position dans un puits quantique de largeur $2h$

Nous notons les hamiltoniens à un électron pour les matériaux A et B comme étant

respectivement \mathcal{H}_A et \mathcal{H}_B . Les fonctions d'onde associées à l'état d'un électron au point Γ de la bande de conduction des matériaux A et B sont notées respectivement $u_{A0}(\mathbf{r})$ et $u_{B0}(\mathbf{r})$. Pour simplifier l'analyse, nous assumons explicitement que ces deux fonctions d'onde sont les mêmes et qu'elles sont égales à $u_0(\mathbf{r})$.

Avec ces notations, l'énergie du bas de la bande de conduction du matériau A est définie comme étant

$$E_{A0} = \int_{\Omega_A} u_0^*(\mathbf{r}) \mathcal{H}_A u_0(\mathbf{r}) d\Omega \quad (\text{A.13})$$

et l'énergie E_{B0} du bas de la bande de conduction du matériau B est définie de façon similaire.

Si nous fixons le zéro d'énergie comme étant le minimum de la bande de conduction du matériau B , alors la courbe de la figure A.2 porte le nom de *potentiel effectif* du puits et est notée $V_{eff}(\mathbf{r})$. Ce potentiel n'est pas physiquement mesurable avec des électrodes, mais est plutôt le potentiel de confinement résultant de l'alignement différent des bandes entre les deux matériaux.

L'hamiltonien du système est donc obtenu par l'ajout du potentiel effectif à l'expression de l'hamiltonien à un électron de l'équation A.3. L'hamiltonien effectif d'un électron de conduction à l'intérieur du dispositif prend alors la forme de

$$\mathcal{H}_{eff} = \mathcal{H}'_{1e} + V_{eff}(\mathbf{r}). \quad (\text{A.14})$$

Par exemple, dans le cas d'un puits quantique d'épaisseur $2h$, le potentiel effectif s'écrit sous la forme

$$V_{eff}(x, y, z) = \begin{cases} -V_0 & \text{si } |z| < h, \\ 0 & \text{sinon.} \end{cases} \quad (\text{A.15})$$

Dans le cas d'une boîte quantique cylindrique de hauteur $2h$ et de diamètre $2a$, le potentiel effectif en coordonnées cylindriques s'écrit :

$$V_{eff}(\rho, \theta, z) = \begin{cases} -V_0 & \text{si } |z| < h \text{ et } \rho < a, \\ 0 & \text{sinon.} \end{cases} \quad (\text{A.16})$$

A.2.3 L'approximation de la fonction enveloppe

Nous posons comme hypothèse simplificatrice que les états liés à une perturbation du réseau cristallin peuvent se décrire par une approche similaire à celle présentée à la section A.1.3, c'est-à-dire que nous posons que la fonction d'onde d'un électron lié à la perturbation s'écrit comme le produit de la partie périodique de la fonction de Bloch de l'état d'énergie minimale de la bande de conduction par une fonction qui varie lentement à l'échelle atomique, la fonction enveloppe. Avec cette approximation, la fonction d'onde ψ_n du n ième état lié s'écrit sous la forme

$$\psi_n(\mathbf{r}) = C_n(\mathbf{r})u_0(\mathbf{r}) \quad (\text{A.17})$$

où u_0 est la partie périodique de la fonction de Bloch d'un électron de la bande de conduction au point Γ et C_n est la fonction enveloppe. Cette simplification permet de séparer la partie de la fonction d'onde qui est périodique (u_0) de celle qui varie lentement (C_n). Évidemment, cette simplification a ses limites et de façon générale, plus le potentiel effectif varie rapidement par rapport à la taille de la maille cristalline, alors moins l'approximation de la fonction enveloppe est bonne.

Pour un matériau à bande interdite directe, avec une masse effective m^* et le potentiel périodique $V(\mathbf{r})$, l'expression A.14 devient

$$\mathcal{H}_{eff} = E_0 - \frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 + V_{eff}(\mathbf{r}). \quad (\text{A.18})$$

Pour simplifier, nous choisissons $E_0 = 0$ et nous prenons les deux masses effectives comme étant les mêmes. Une justification de cette hypothèse est donnée à l'annexe B.

La fonction d'onde $\psi_n(\mathbf{r})$ correspondant au n ième état solution de cet hamiltonien est la solution de l'équation aux valeurs propres

$$\mathcal{H}_{eff}\psi_n(\mathbf{r}) = E_n\psi_n(\mathbf{r}) \quad (\text{A.19})$$

où E_n représentent l'énergie du n ième état.

En remplaçant $\psi_n(\mathbf{r})$ par sa décomposition en produit présentée à l'équation A.17, nous retrouvons

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} [u_0 \nabla^2 C_n + 2(\nabla u_0) \cdot (\nabla C_n) + C_n \nabla^2 u_0] + (V_{eff} - E_n) C_n u_0 = 0. \quad (\text{A.20})$$

Les niveaux d'énergie E_n associés aux états liés sont obtenus en multipliant l'équation A.20 par $\psi_n^*(\mathbf{r})$ et en intégrant sur tout l'espace. Lors de l'intégration, nous faisons l'approximation que chaque intégrale d'un produit d'une fonction $\mathcal{C}(\mathbf{r})$ qui varie lentement par une fonction $\mathcal{U}(\mathbf{r})$ qui possède la périodicité du cristal se sépare en un produit de deux intégrales selon la relation

$$\int \mathcal{C}(\mathbf{r}) \mathcal{U}(\mathbf{r}) d^3r = \int \mathcal{C}(\mathbf{r}) d^3r \int_{WS} \mathcal{U}(\mathbf{r}) d^3r. \quad (\text{A.21})$$

Dans cette équation, $\int_{WS} d^3r$ signifie l'intégrale sur une cellule de Wigner-Seitz. En utilisant les relations de normalisation ($\int C_n^* C_n d^3r = 1$ et $\int_{WS} u_0^* u_0 d^3r = 1$) et le fait que $\int_{WS} u_0^* \nabla u_0 d\Omega = 0$, nous retrouvons l'équation

$$\int C_n^* \left(-\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 + V_{eff} \right) C_n d^3r + \int_{WS} u_0^* \left(-\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 \right) u_0 d^3r = E_n. \quad (\text{A.22})$$

Dans cette équation, l'intégrale sur la cellule de Wigner-Seitz représente l'énergie d'un électron dans l'état d'énergie la plus basse de la bande de conduction du matériau. Or, nous avons fixé cette valeur comme référence pour l'énergie nulle. L'équation A.22 se réécrit alors simplement comme

$$\int C_n^* \left(-\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 + V_{eff} \right) C_n d^3r = E_n. \quad (\text{A.23})$$

Les fonctions C_n qui minimisent la valeur de l'intégrale A.23 représentent les états propres du système. Ce problème est équivalent à trouver les états propres de l'équation de la fonction enveloppe :

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 + V_{eff} \right) C_n = E_n C_n. \quad (\text{A.24})$$

Annexe B

L'approximation d'une masse effective constante

Dans le cadre de ce mémoire, nous ne tenons pas compte des variations locales de la masse effective des électrons de la bande de conduction afin de simplifier le formalisme et les développements mathématiques. Pour se convaincre du bien fondé de cette approximation, nous examinons ses conséquences sur les états liés dans un puits quantique pour un calcul utilisant le formalisme de la fonction enveloppe. Ce calcul permet de constater que l'effet principal de prendre en compte la variation de la masse effective est de légèrement modifier l'énergie calculée des états liés. De plus, nous remarquons que la forme de la fonction enveloppe n'est pas modifiée de façon significative.

Une façon de traiter de façon approchée ce changement de masse effective sans en expliciter le calcul est de considérer que la hauteur moyenne des boîtes quantiques est différente de leur hauteur moyenne réelle. Un calcul semblable pour une boîte quantique de faible volume utilisant la méthode de la fonction enveloppe a déjà été présenté [43]. Cependant, nous étudions dans ce travail des boîtes quantiques possédant un rapport d'aspect près de 10 et les conclusions de cet article ne sont pas applicables dans notre situation. Dans notre cas, la plus petite dimension (celle dans le sens de croissance épitaxiale) a l'effet le plus important sur le confinement des états électroniques et nous préférons donc comparer cet effet avec le cas d'un puits quantique.

B.1 L'approximation d'une masse effective constante dans un puits quantique

Pour simplifier notre analyse, nous allons étudier un puits quantique simple et étendre le résultat pour les boîtes quantiques. Prenons le cas d'un puits quantique de largeur $2h$ et de profondeur V_0 . Nous posons que l'hamiltonien \mathcal{H} de l'équation de la fonction enveloppe est donné par

$$\mathcal{H} = -\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{1}{m^*(z)} \frac{\partial}{\partial z} \right) + V(z) \quad (\text{B.1})$$

avec $m^*(z)$ la masse effective du matériau au point z , de façon à ce que $m^*(z) = m_A^*$ pour $|z| < h$ et $m^*(z) = m_B^*$ pour $|z| > h$. Nous supposons aussi que la barrière de potentiel est abrupte, c'est-à-dire que $V(z) = -V_0$ pour $|z| < h$ et $V(z) = 0$ pour $|z| > h$.

La résolution de l'équation de la fonction enveloppe nous permet d'expliciter la forme de la solution

$$C(z) = \begin{cases} A \cos(\kappa z) & \text{si } |z| < h, \\ B \exp(-\tau|z|) & \text{si } |z| > h, \end{cases} \quad (\text{B.2})$$

où A et B sont des constantes de normalisation. κ et τ des constantes dépendant de l'énergie de l'état lié. La condition sur κ et τ pour avoir un état propre est

$$\tau = \sqrt{\frac{m_B^*}{m_A^*} \left(\frac{2m_A^* V_0}{\hbar^2} - \kappa^2 \right)^{\frac{1}{2}}}. \quad (\text{B.3})$$

Avec les conditions de continuité de $C(z)$ pour $z = h$ et la condition de continuité du courant de probabilité sur la dérivée de la fonction d'onde [44]

$$\lim_{z \rightarrow h^-} \frac{1}{m_A^*} \frac{\partial}{\partial z} C(z) = \lim_{z \rightarrow h^+} \frac{1}{m_B^*} \frac{\partial}{\partial z} C(z), \quad (\text{B.4})$$

nous trouvons que

$$\frac{\kappa \tan(\kappa h)}{m_A^*} = \frac{\tau}{m_B^*}. \quad (\text{B.5})$$

En posant $b = \sqrt{\frac{m_B^*}{m_A^*}}$, nous réécrivons cette condition comme

$$b \tan(\kappa h) = \frac{1}{\kappa} \left(\frac{2m_A^* V_0}{\hbar^2} - \kappa^2 \right)^{\frac{1}{2}}. \quad (\text{B.6})$$

Comme le second membre de l'équation ne dépend plus de m_B^* , alors nous considérons qu'il représente une caractéristique fondamentale du puits étudié et non de la barrière qui l'entoure. Nous posons que h_e est la largeur effective du puits possédant un état fondamental de même énergie et pour lequel $m_B^* = m_A^*$. Nous avons alors que

$$b \tan(\kappa h) = \tan(\kappa h_e) \quad (\text{B.7})$$

et $\frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m_A^*}$ est l'énergie de l'état fondamental du puits. Le paramètre h_e se réécrit

$$h_e = \frac{1}{\kappa} \tan^{-1}(b \tan(\kappa h)). \quad (\text{B.8})$$

B.2 Cas où $m_B^* > m_A^*$

Supposons pour simplifier l'analyse que $b > 1$, c'est-à-dire que $m_B^* > m_A^*$. Sachant que dans ce cas nous avons la relation $\tan^{-1}(y) \leq \tan^{-1}(by) \leq b \tan^{-1}(y)$, nous trouvons que

$$h \leq h_e \leq bh \quad (\text{B.9})$$

et donc que h_e est compris entre h et bh . Un examen plus minutieux nous permet de constater que la fonction $h_e(\kappa)$ est strictement décroissante et a comme maximum bh lorsque $\kappa \rightarrow 0$, c'est-à-dire pour $h \rightarrow 0$ ou pour $V_0 \rightarrow 0$. À mesure que nous nous éloignons de cette condition, nous remarquons que le rapport entre h_e et h diminue. Pour la limite $h \rightarrow \left(\frac{\pi}{2\kappa}\right)^-$, nous trouvons $\frac{h_e}{h} \rightarrow 1$. La figure B.1 présente cette décroissance pour un rapport de masses effectives $\frac{m_B^*}{m_A^*} = 2$.

Pour le cas particulier où $m_B^* = 2m_A^*$, $m_A^* = 0,07m_e$, $V_0 = 200 \text{ meV}$ et $2h = 6,6 \text{ nm}$, nous trouvons que $h_e \sim 1,17h$, soit que la taille effective du puits n'est que légèrement plus grande que la taille réelle.

Le cas où $b < 1$ se traite de façon similaire. Nous en concluons que le traitement complet du changement de masse effective d'un matériau à l'autre n'est pas pertinent dans le cadre d'un calcul pour un puits quantique.

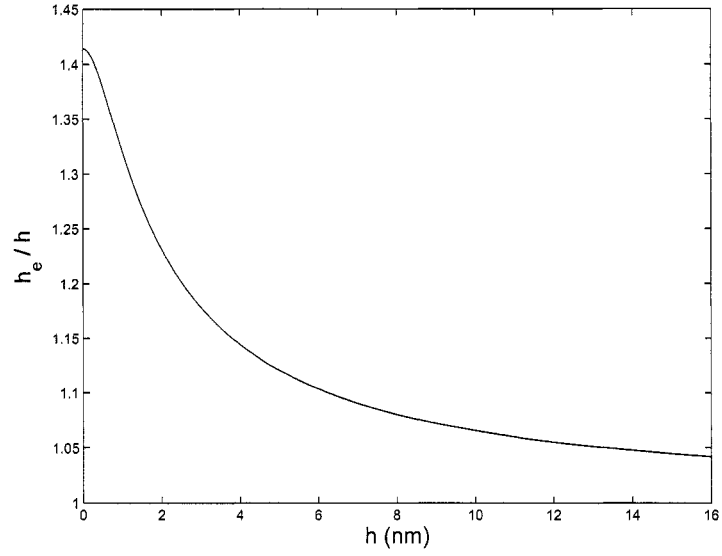


FIG. B.1 – Largeur effective du puits quantique pour un rapport $\frac{m_B}{m_A} = 2$

Dans le cadre de ce travail, les boîtes quantiques que nous étudions ressemblent beaucoup à des puits quantiques, puisque leur largeur est beaucoup plus grande que leur hauteur. Il est donc raisonnable d'affirmer que l'argument présenté cette annexe s'applique aussi à ce cas. De plus, la taille des boîtes quantiques est un paramètre difficilement mesurable avec précision en pratique. Nous préférons donc traiter ce paramètre comme étant variable et de ne l'ajuster qu'à partir de mesures expérimentales, qui de toute façon tiendront compte du rapport des masses effectives et d'autres paramètres que nous négligeons dans le calcul.

Annexe C

Influence de la couche de mouillage

Dans cette annexe, nous allons démontrer que la présence d'une couche de mouillage autour d'une boîte quantique ne change pas de façon significative les propriétés des états électroniques liés et que par conséquent nous pouvons négliger l'effet de sa présence.

Nous notons d'abord \mathcal{H}'_{eff} l'hamiltonien de la fonction enveloppe correspondant à une boîte quantique de forme cylindrique sans couche de mouillage, tel que défini par la relation 3.7. La fonction enveloppe $C(\mathbf{r})$ et l'énergie E correspondant à l'état fondamental de cet hamiltonien ont été déterminées approximativement à la section 3.3.1. Nous avons donc la relation

$$E = \int C(\mathbf{r})^* \mathcal{H}'_{eff} C(\mathbf{r}) d\mathbf{r}. \quad (\text{C.1})$$

C.1 Le potentiel effectif associé à une couche de mouillage

Prenons le cas où nous avons une couche de mouillage d'épaisseur t située partout autour d'une boîte quantique de diamètre $2a$ et de hauteur $2h$. Dans cette situation, le potentiel effectif V associé à la couche de mouillage peut s'écrire en coordonnées cylindriques comme

$$V(\rho, \theta, z) = \begin{cases} -V_{cm} & \text{si } \rho > a \text{ et } -h < z < -h + t, \\ 0 & \text{ailleurs,} \end{cases} \quad (\text{C.2})$$

avec V_{cm} la profondeur du puits de potentiel dans la couche de mouillage. Si nous considérons que le recouvrement entre ce potentiel effectif et le carré de la fonction enveloppe $|C(\mathbf{r})|^2$ est faible, alors le changement d'énergie ΔE associé à l'addition de ce potentiel effectif s'écrit en première approximation comme

$$\Delta E \sim \int C(\mathbf{r})^* V(\mathbf{r}) C(\mathbf{r}) d\mathbf{r}. \quad (\text{C.3})$$

C.2 Application numérique

Examinons le cas où la masse effective électronique $m^* = 0,07 m_e$ et où le puits de potentiel $V_0 = V_{cm} = 200 \text{ meV}$. Dans cette situation, le facteur α défini à l'équation 3.2 vaut $1,65 \text{ nm}$. Dans le cas où la boîte cylindrique est de hauteur $2h = 4\alpha = 6,6 \text{ nm}$ et de diamètre $2a = 40\alpha = 66 \text{ nm}$, nous déterminons d'après les conditions 3.18 et 3.28 que l'énergie de confinement de l'état fondamental vaut $E = -144 \text{ meV}$.

Supposons aussi que l'épaisseur de la couche de mouillage vaut $t = \alpha = 1,65 \text{ nm}$. Le calcul par intégration numérique du changement d'énergie ΔE associé donne

$$\Delta E \sim \int C(\mathbf{r})^* V(\mathbf{r}) C(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \sim 10^{-4} V_{cm}, \quad (\text{C.4})$$

d'où $\Delta E \sim 0,02 \text{ meV}$.

Nous voyons clairement que ce changement d'énergie est insignifiant par rapport à l'énergie de confinement de l'état électronique et par conséquent, nous ne le traiterons pas à l'intérieur de ce travail.

Annexe D

Validation de l'hypothèse du potentiel séparable

D.1 Présentation du problème

Dans le cadre de la méthode de la fonction enveloppe avec l'approximation de la masse effective, la fonction enveloppe de l'état électronique fondamental lié à une boîte quantique est la solution C de plus basse énergie E de l'équation

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*}\nabla^2 C + V_{eff}C = EC. \quad (D.1)$$

Dans cette équation, m^* est la masse effective des électrons de la boîte quantique. Le potentiel effectif V_{eff} associé à la boîte quantique est défini comme étant égal à

$$V_{eff}(\mathbf{r}) = -V_0\Omega(\mathbf{r}) \quad (D.2)$$

avec V_0 la profondeur du puits de potentiel et $\Omega(\mathbf{r})$ la fonction de forme telle que définie à la section 3.1.2.

Pour simplifier l'équation D.1, nous divisons les deux membres de l'équation par V_0 et toutes les longueurs par le facteur α défini à l'équation 3.2. Nous retrouvons ainsi la forme simplifiée de l'équation de la fonction enveloppe

$$-\nabla^2 C(\mathbf{r}) - \Omega(\mathbf{r})C(\mathbf{r}) = \epsilon C(\mathbf{r}) \quad (D.3)$$

où l'énergie E de l'état fondamental est donné par $E = \epsilon V_0$.

Pour simplifier notre analyse, nous n'étudierons que les boîtes quantiques de forme cylindrique. La solution C pour le niveau fondamental possède donc la symétrie radiale et se sépare en un produit de deux fonctions

$$C(\rho, \theta, z) = F(\rho, z)\Theta(\theta) \quad (\text{D.4})$$

avec $\Theta(\theta) = (2\pi)^{-\frac{1}{2}}$ pour s'assurer que la condition de normalisation sur $F(\rho, z)$ s'écrive comme

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \int_0^{+\infty} \rho |F(\rho, z)|^2 d\rho dz = 1. \quad (\text{D.5})$$

L'équation D.3 pour l'état fondamental se réécrit donc comme

$$-\nabla_{\rho z}^2 F(\rho, z) - \Omega(\rho, z)F(\rho, z) = \epsilon F(\rho, z) \quad (\text{D.6})$$

avec $\nabla_{\rho z}^2 = \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$.

Si nous multiplions chaque membre de cette équation par ρ , nous retrouvons l'expression

$$-\left[\frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\rho \frac{\partial}{\partial z} \right) \right] F(\rho, z) - \rho \Omega(\rho, z)F(\rho, z) = \rho \epsilon F(\rho, z) \quad (\text{D.7})$$

ou de façon équivalente

$$-\nabla \cdot (\rho \nabla) F(\rho, z) - \rho \Omega(\rho, z)F(\rho, z) = \rho \epsilon F(\rho, z). \quad (\text{D.8})$$

Dans cette équation, le gradient et la divergence s'expriment maintenant en coordonnées cartésiennes (et non cylindriques comme à l'équation D.6).

Comme la fonction $\Omega(\rho, z)$ ne s'exprime pas comme la somme d'une fonction ne dépendant que de ρ et d'une fonction ne dépendant que de z , alors l'équation D.8 ne se résout pas de façon générale par la méthode de séparation des variables. Cependant, il existe d'autres méthodes efficaces pour obtenir une solution approchée. Par exemple, nous

avons présenté à la section 3.2.3 une approximation utilisée pour modifier la fonction de forme $\Omega(\rho, z)$ de façon à ce que l'équation D.8 se résolve par séparation des variables. Nous aurions aussi pu résoudre cette équation par méthode numérique, par exemple par éléments finis, ou encore analytiquement par séries infinies. Cependant, ces deux méthodes sont beaucoup plus lourdes, demandent un développement fastidieux et ne donneraient pas nécessairement d'information pertinente supplémentaire quant au comportement physique de la boîte quantique étudiée.

Afin de s'en convaincre, nous allons présenter la solution obtenue avec une méthode par éléments finis pour une boîte cylindrique et la comparer à la solution présentée dans le mémoire au chapitre 3. Nous résolvons l'équation D.8 pour une boîte cylindrique, de hauteur normalisée $2h = 4$ et de diamètre normalisé $2a = 40$. Pour une masse effective $m^* = 0,07 m_e$ et un puits de potentiel $V_0 = 200 \text{ meV}$, nous avons que le facteur $\alpha = 1,65 \text{ nm}$, ce qui donne approximativement comme hauteur réelle $2h = 6,6 \text{ nm}$ et comme diamètre réel $2a = 66 \text{ nm}$.

D.2 Solution par éléments finis

Comme la fonction de forme $\Omega(\rho, z)$ est symétrique par rapport à l'axe $z = 0$, alors la solution fondamentale $F(\rho, z)$ de l'équation D.8 est aussi symétrique par rapport à cet axe. De plus, la dérivée $\frac{\partial}{\partial z} F(\rho, z)$ est nulle pour $z = 0$. Par conséquent, nous n'avons à déterminer $F(\rho, z)$ que pour le quadrant $[0, 0] \times [\infty, \infty]$, la solution pour les z négatifs étant donnée par $F(\rho, -z) = F(\rho, z)$. Pour ce domaine de résolution, la fonction de forme Ω appropriée vaut 1 sur le rectangle $[0, 0] \times [a, h]$ et 0 ailleurs.

Malheureusement, il est impossible de discrétiser directement ce domaine, puisqu'il est infini. Nous le réduisons donc arbitrairement au rectangle $[0, 0] \times [a + d, h + d]$, avec d suffisamment grand devant la longueur d'onde de de Broglie pour que la fonction enveloppe soit pratiquement nulle aux frontières $z = h + d$ et $\rho = a + d$. Pour notre simulation,

nous avons choisi de fixer $d = 10$.

Nous fixons sur les segments $\rho = a + d$ et $z = h + d$ du domaine de résolution la condition de Dirichlet $F(\rho, z) = 0$. Sur les segments $\rho = 0$ et $z = 0$, nous fixons la condition de Neumann $\nabla F(\rho, z) \cdot \mathbf{n} = 0$, où \mathbf{n} est un vecteur unitaire perpendiculaire à la frontière. Cette réduction correspond au problème d'évaluation des états électroniques dans une boîte quantique entourée d'une couche d'épaisseur d du matériau de la barrière et enfoui dans un potentiel infini. Avec ces conditions aux limites, notre problème est bien posé et ne possède qu'un spectre discret de solutions. Nous cherchons à évaluer celle pour laquelle la valeur propre ϵ est minimale. La figure D.1 présente le maillage utilisé lors de la résolution du problème.

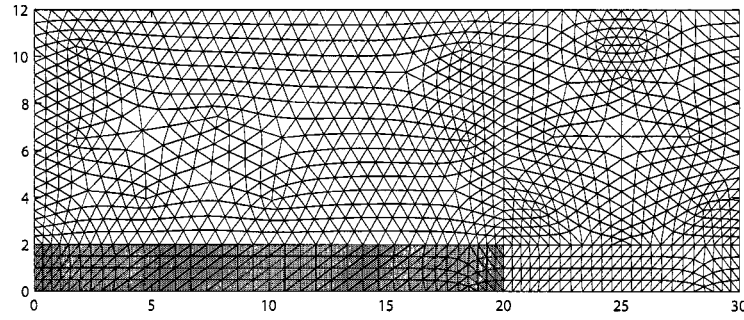


FIG. D.1 – Le maillage utilisé pour déterminer l'état fondamental d'une boîte quantique ; la boîte quantique est située dans la zone ombragée (2304 triangles au total)

Il est pertinent de noter que cette méthode ne permet de trouver que l'état fondamental. Si des états liés d'énergie supérieure sont voulus, alors une analyse tenant compte de la dépendance de la fonction enveloppe en fonction de l'angle azimutal est nécessaire. En effet, nous avons implicitement contraint la fonction d'onde à être symétrique par rapport au plan $z = 0$ et invariant par une rotation autour de l'axe $\rho = 0$, d'abord en posant que la partie radiale $\Theta(\theta)$ est une constante et ensuite par notre choix des conditions aux limites sur le domaine de résolution. Ce choix a été fait dans le but de simplifier le calcul de la fonction enveloppe de l'état fondamental, mais empêche la généralisation de la méthode

de calcul.

Il est aussi intéressant de souligner que la méthode de résolution par éléments finis surestime systématiquement la valeur propre calculée pour l'état fondamental. Ceci s'explique par le fait que la fonction propre est exprimée dans un sous-espace vectoriel plus petit que celui nécessaire pour réellement résoudre le problème aux valeurs propres. La fonction propre évaluée se trouve donc à être contrainte à faire partie de ce sous-espace vectoriel et sa valeur propre sera par conséquent toujours supérieure ou égale à la valeur propre réelle.

D.3 Présentation des résultats

Afin de comparer les résultats obtenus analytiquement avec les résultats obtenus par la méthode des éléments finis, nous avons aussi trouvé le premier état propre pour la fonction de forme

$$\Omega'(\rho, z) = \Lambda(\rho, a) + \Lambda(|z|, h) - 1 \quad (\text{D.9})$$

avec Λ défini à l'équation 3.6.

La différence entre l'énergie calculée $\epsilon_{\Omega'}$ pour le potentiel modifié et l'énergie calculée ϵ_{Ω} le potentiel réel est donnée à la figure D.2. Nous voyons que cette différence d'énergie réelle $V_0(\epsilon_{\Omega'} - \epsilon_{\Omega})$ tend vers 0,017 meV, ce qui est clairement négligeable par rapport à l'énergie de liaison de l'état fondamental. Nous voyons aussi dans ce graphique que la valeur de l'énergie calculée pour la fonction de forme séparable Ω' est toujours plus élevée que celle calculée pour la fonction de forme Ω . En effet, nous avons la relation $\Omega'(\mathbf{r}) \geq \Omega(\mathbf{r})$ partout dans le domaine de résolution D , ce qui justifie cette observation.

Une comparaison entre le calcul analytique et le calcul par éléments finis pour le potentiel réel est donnée à la figure D.3. Nous voyons qu'à peu de choses près, la méthode analytique avec la fonction de forme Ω' séparable donne le même résultat que la méthode numérique par éléments finis lorsque nous considérons un nombre suffisant de triangles

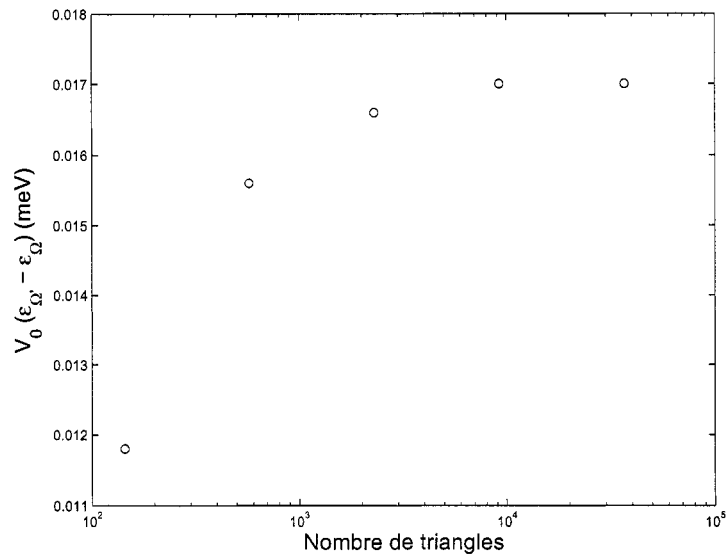


FIG. D.2 – L'écart énergétique entre le calcul pour le potentiel réel et le potentiel modifié

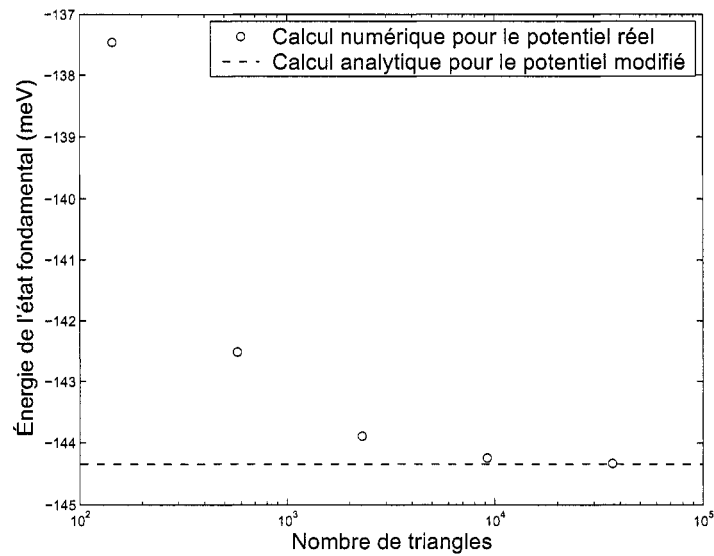


FIG. D.3 – Comparaison entre les deux méthodes de calcul des états propres

($\sim 10^4$). Nous en concluons qu'il est tout à fait raisonnable d'utiliser cette approximation dans le cadre de ce mémoire.

Annexe E

Les fonctions de Airy

E.1 Définition

Les fonctions de Airy sont définies comme étant les deux solutions linéairement indépendantes de l'équation différentielle de Airy [38]

$$y'' - xy = 0. \quad (\text{E.1})$$

E.2 Résolution de l'équation différentielle de Airy

Si nous appliquons la transformation de Fourier à chaque membre de l'équation E.1, nous trouvons

$$-k^2 \hat{y} - i \hat{y}' = 0. \quad (\text{E.2})$$

Cette équation différentielle linéaire d'ordre 1 se résout analytiquement, et nous avons

$$\hat{y}(k) = \hat{y}(0) e^{\frac{ik^3}{3}}. \quad (\text{E.3})$$

En appliquant la transformation inverse de Fourier, nous retrouvons finalement

$$y(x) = \frac{\hat{y}(0)}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\left(kx + \frac{k^3}{3}\right)} dk. \quad (\text{E.4})$$

Si nous choisissons de normer la fonction y de telle façon que $\int_{-\infty}^{+\infty} y \, dx = 1$, alors

nous avons $\hat{y}(0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}$ et

$$\text{Ai}(x) = y(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\left(kx + \frac{k^3}{3}\right)} dk \quad (\text{E.5})$$

où $\text{Ai}(x)$ est la première fonction de Airy.

Lorsque x est réel, nous avons aussi [38]

$$\text{Ai}(x) = \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} \cos\left(kx + \frac{k^3}{3}\right) dk. \quad (\text{E.6})$$

E.3 La deuxième solution linéairement indépendante

La deuxième solution linéairement indépendante, notée $\text{Bi}(x)$, ne s'exprime pas de façon générale sous une forme intégrale. Par contre, pour des valeurs de $x < 0$, nous avons [38]

$$\text{Bi}(x) = \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} \left(\sin\left(kx + \frac{k^3}{3}\right) + \exp\left(kx - \frac{k^3}{3}\right) \right) dk. \quad (\text{E.7})$$

La figure E.1 présente le graphique des fonctions $\text{Ai}(x)$ et $\text{Bi}(x)$.

E.4 Interprétation physique

Lorsque $x \rightarrow +\infty$, la fonction $\text{Bi}(x)$ diverge très rapidement. Si nous cherchons une solution particulière normée pour un domaine incluant le point $x = +\infty$, alors il faut nécessairement exclure la fonction $\text{Bi}(x)$. Par contre, la fonction $\text{Ai}(x)$ décroît environ comme [38]

$$\text{Ai}(x) \sim \frac{1}{2\pi^{\frac{1}{2}}|x|^{\frac{1}{4}}} \exp\left(-\frac{2}{3}|x|^{\frac{3}{2}}\right). \quad (\text{E.8})$$

Lorsque $x \rightarrow -\infty$, le couple de fonctions $\text{Ai}(x)$ et $\text{Bi}(x)$ se comporte un peu comme le couple de fonctions $\cos(x)$ et $\sin(x)$, mais avec une fréquence et une amplitude variant

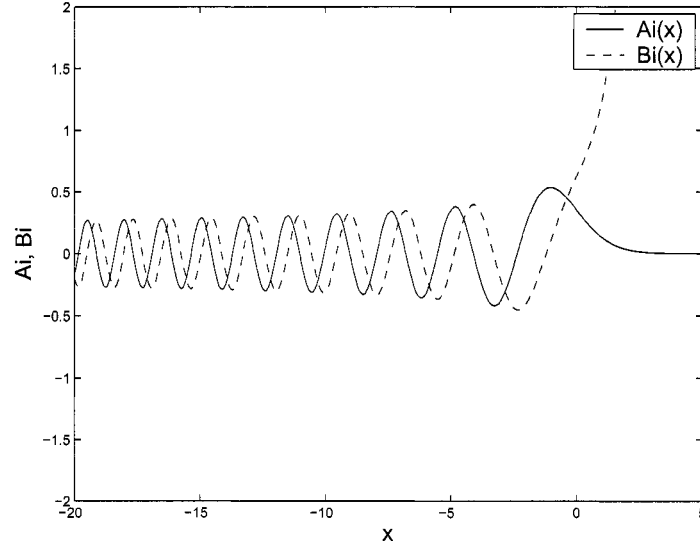


FIG. E.1 – Les deux solutions linéairement indépendantes de l'équation de Airy

en fonction de x . Plus précisément, nous avons lorsque $x < 0$ [38] les relations

$$\text{Ai}(x) \sim \frac{1}{\pi^{\frac{1}{2}}|x|^{\frac{1}{4}}} \cos\left(\frac{\pi}{4} - \frac{2}{3}|x|^{\frac{3}{2}}\right), \quad (\text{E.9})$$

$$\text{Bi}(x) \sim \frac{1}{\pi^{\frac{1}{2}}|x|^{\frac{1}{4}}} \sin\left(\frac{\pi}{4} - \frac{2}{3}|x|^{\frac{3}{2}}\right). \quad (\text{E.10})$$

Dans ce système, l'équivalent à l'onde plane $e^{\pm i\eta} = \cos(\eta) \pm i \sin(\eta)$ est donc donné par

$$\text{Ai}(\eta) \pm i \text{Bi}(\eta). \quad (\text{E.11})$$

Il s'agit à une constante près de l'onde émergente dans un potentiel linéaire proportionnel à η .