REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE

MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEURE ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE

UNIVERSITE DE MEDEA

FACULTE DES SCIENCES



Mémoire

Présenté pour obtenir le diplôme de **Master**

En Physique

Spécialité : Physique des Matériaux

Par :

BOUDINA Malika

Thème :

Calcul numérique des éléments de la matrice de moment dipolaire d'un super-réseau polarisé à base de GaAs/AlGaAs

Soutenu : 30 /09/2020., Devant le jury composé de :

M. DEHBAOUI	MCA	UYFM	Président
A. BOUKAOUD	MCB	UYFM	Examinateur
M. RADJAI	MCB	UYFM	Examinateur
D. SEBBAR	MCB	UYFM	Encadreur

Année universitaire 2019/2020

Dédicace

Grâce à mon Dieu

Je dédié ce travail

Aux personnes les plus chères dans ma vie Aux deux bougies qui éclairées dans ma vie : **ma mère** et **mon père**, qui m'ont toujours entouré et motivé à sens cesse devenir meilleur.

A Mes frères et Mes sœurs.

A tous les amis qui ont toujours été à ma côté et avec qui j'ai Partagé les meilleurs moments, de ma vie.

A tous les professeurs de l'Université de Médéa Faculté des Sciences et de la Technologie.

mon Encadreur Mr :**Sebbar Djamel.**

A celui qui était avec moi par son encouragement et m'aidé à la réalisation de ce travail.

REMERCIEMENTS

Je remercie Allah le Tout Puissant le Miséricordieux de m’avoir appris ce que j’ignorais, de m’avoir donné la sante et tout ce dont j’avais besoin pour réaliser ce travail.

Je remercie également mon encadreur le Dr. Sebbar Djamel ainsi quelles membres du jury qui m’ont fait l’honneur d’examiner ce travail.

Remercions les personnes qui ont aidé de près ou de loin.

Notation et abréviations :

Abréviations :

Les abréviations utilisées :

SR : Super réseau

BC : Bande de conduction

BV : Bande de valence

SC : Semi-conducteur

SCI : Semi-conducteur Intrinsèque

SCE : Semi-conducteur Extrinsèque

SQW : Simple Puits Quantique

DQW : Double Puits Quantique

MQW : Multi Puits Quantique

MMT : la Méthode de Matrice de Transfert

Notations :

E : énergie de l'électron

V_0 : la hauteur du puits/barrière quantique (énergie potentielle)

F : intensité du champ électrique

m* : la masse effective de l'électron

m_0 : la masse de l'électron dans le vide

$\psi(x)$: La fonction d'onde de l'électron

E_F : Niveau d'énergie de Fermi

E_c : Énergie minimum de la bande de conduction

E_V : Énergie maximum de la bande de valence

N_C : Densité effective d'états dans la bande de conduction

N_V : Densité effective d'états dans la bande de valence

$\varepsilon_s(x)$: la constante diélectrique

ε_0 : lapermittivite du vide

$\varepsilon_r(x)$: lapermittivite du milieu

$\emptyset(x)$:le potentiel électrostatique

$N_D(x)$: la concentration du donneur ionisé

$n(x)$:la distribution de la densité électronique

m : le nombre d'état liés

n_k: L'occupation électrique pour chaque état

E_K: L'énergie propre

K_B:constant d'équilibre

T : température

Table de matière:

Introduction générale 1

Chapitre I : GENERALITES 3

I.1 Introduction 3

I.2 Définition les semi-conducteurs(SC) 3

1.3 Semi-conducteur intrinsèque(SCI) 4

I.3.1 Densité des porteurs 5

I.4 Semi-conducteur extrinsèque (SCE) 6

I.4.1 le dopage de type n 6

I.4.2 le dopage de type p 6

I.4.1.1 Semi-conducteur type n 7

I.4.2.1Semi-conducteur type p 8

I.5 puits quantique 9

I.5.1. Définition 9

I.5.2 Simple puits Quantique« SQW » 10

I.5.2.a Puits quantique de type I 11

I.5.2.b Puits quantique de type II 11

I.5.2.c Puits quantique de type III 12

I.5.3 Double puits quantiques « DQW » 12

I.5.4 Multi puits quantiques « MQW » 13

I.6 Super réseaux 14

I.6.1Historique des super réseaux 14

I.6.2 Définition d'un super réseau (SR) 14

I.6.3 Classes des super réseaux 15

I.6.3.a Super réseau de type I 15

I.6.4.b Super réseau de type II 15

I.6.5.c Super réseau de type III 16

I.7 Généralité Moment dipolaire électrique 16

1.7.1Définition Moment dipolaire électrique 16
I.8 Conclusion 16
Chapite II : Solution de l'équation de Schrödinger 17
II.1 Introduction 17
II.2 l'équation de Schrödinger indépendant de temps 17
II.3 Méthode de calcul les énergies dans les puits quantiques 18
II.3.1 méthode de matrice de transfer 18
II.3.2. Méthode de tir (Schooting méthode) 19
II.3.3 méthode des différences finies 21
II.4 Résolution de l'équation de Schrödinger dans un puits quantique en absence d'un champ électrique extérieur 21
II.5 Résolution de l'équation de Schrödinger dans puits quantique en présente d'un champ électrique 25
II.6 Solutions self-consiste Schrödinger et Équations de Poisson 27
II.7 Conclusion 29
Chapitre III : Résultats et Discutions 30
Conclusion générale 39
Bibliographie 40

Table des tableaux:

Table 1: Conductivité électrique et la résistivité des métaux, des semi-conducteurs et desisolants [6]..... 4
Table 2 :Exemples des semi-condonducteurs. 4
Table 3Niveaux énergiques calculés dans le model de parabolicité de la structure de la fig.5. 37
Table 4 : Représente les énergies de séparation et élément de matrice dipolaire par le model de non parabolicité [43] et le model de parabolicité. 37

Listes des figures :

Figure 1:Position du niveau de Fermi intrinsèque dans un monocristal parfait[10]. 6
Figure 2: Dopage d'un monocristal de silicium par un atome de phosphore. L'électron excédentaire autour de l'atome de phosphore, vis-à-vis de la situation la plus stable qu'est l'octet, quitte l'atome pour rejoindre la bande de conduction et ioniser l'atome positivement. On constitue un dopage donneur de type n[10]..... 7
Figure 3: Dopage d'un monocristal de silicium par un atome de bore. L'électron déficitaire autour de l'atome de phosphore, vis-à-vis de la situation la plus stable qu'est l'octet, sera apporter par le réseau qui créera simultanément un trou. On constitue un dopage accepteur de type p[10]. 8
Figure 4: (a) Puits quantique carré de largeur Lz et de hauteur V0 ; (b) : Couche d'un matériau semi-conducteur A possédant un gap inférieur à celui du matériau semi-conducteur B. 9
Figure 5: Schéma d'une structure de puits quantique. 10
Figure 6:Modélisation Simple puits Quantique. 11
Figure 7: Simple Puits quantique type I. 11
Figure 8: Simple Puits quantique type II. 12
Figure 9: Simple Puits quantique type III. 12
Figure 10: Puits quantiques couplés. 13
Figure 11: Structure à multi puits quantiques. 13
Figure 12: Super réseau AlGaAs/GaAs à puits et à barrières rectangulaire [24]. 15
Figure 13: super réseau (a) de type I, (b) de type II [26]. 15
Figure 14: super réseau (a) à gap nul, (b) à ouverture de fenêtre (Broken gap). 16
Figure 15: Le premier dérivé d'une fonction. 20
Figure 16: un puits quantique simple. 22
Figure 17: Fonction d'onde du premier niveau d'énergie dans une structure à deux puits quantiques; la fonction d'onde est en trait plein, la bande de conduction est en tirets[36]. 25
Figure 18 : structure à barrière avec un champ électrique extérieur 26
Figure 19: Schéma de bande d'une structure à puits quantique parabolique 31
Figure 20: Schéma de bande d'une structure à puits quantique parabolique. 32
Figure 21: Schéma de bande d'une structure à puits quantique parabolique. 33
Figure 22: Schéma de bande d'une structure à puits quantique 34
Figure 23: Schéma de bande d'une structure à puits quantique 35
Figure 24: Schéma de bande d'une structure à puits quantique 36

ملخص

في هذا العمل، درسنا تأثير المجالات الكهربائية المطبقة على الخواص الضوئية لبئر كمي مكافئ ومربع بناءً على $GaAs / Al_xGa_{1-x}As$ يتم حساب مستويات الطاقة الإلكترونية ووظائفها الموجية في تقريب الكتلة الفعالة بالدقة العددية لمعادلة شرود نغر بواسطة طريقة التصوير لتحديد مستويات الطاقة والوظائف الموجات المقابلة.

تظهر النتائج العددية التي تم الحصول عليها أن عنصر مصفوفة العزم ثنائي القطب يعتمد على العديد من المعلمات الفيزيائية والهيكلية للشبكة العلوية مثل شكل وحجم الآبار الكمومية والمجال الكهربائي المطبق. قمنا بإجراء مقارنة مع النتائج النظرية الأخرى التي تم الحصول عليها.

الكلمات المفتاحية: المجال الكهربائي، معادلة شرود نجر، طريقة التصوير (طريقة التصويب) ، الشبكة الفائقة ، العزم ثنائي القطب.

Résume

Dans ce travail, nous avons étudié l'effet des champs électriques appliqué sur les propriétés optiques d'un puits quantique parabolique et carré à base de $GaAs / Al_xGa_{1-x}As$. Les niveaux d'énergie électronique et leurs fonctions d'onde sont calculés dans l'approximation de la masse effective par résolution numérique de l'équation de Schrödinger par la méthode de tir (shooting méthode) pour déterminer les niveaux d'énergies et les fonctions d'ondes correspondantes.
Les résultats numériques obtenus montrent que l'élément de matrice de moment dipolaire dépond de plusieurs paramètres physiques et structuraux de super-réseau comme la forme et la dimension de puits quantique et le champ électrique appliqué. Nous avons fait une comparaison avec des autres résultats théoriques obtenus.

Les mots clé : le champ électrique, Equation de Schrödinger, Méthode de tir (Schooting méthode, Super réseau, moment dipolaire.

Abstract

In this work, we studied the effect of applied electric fields on the optical properties of a parabolic and square quantum well based on $GaAs / Al_xGa_{1-x}As$. The electronic energy levels and their wave functions are calculated in the approximation of the effective mass by numerical resolution of the Schrödinger equation by the shooting method to determine the energy levels and the functions of corresponding waves.

The obtained numerical results show that the dipole moment matrix element depends on several physical and structural super lattice parameters such as the shape and size of quantum wells and the applied electric field. We made a comparison with other theoretical results obtained.

Keywords: electric field, Schrödinger's equation, shooting method (Schooting method, Super lattice, dipole moment.

INTRODUCTION

Introduction générale

Les propriétés optiques et électroniques des nanomatériaux ont été étudiées de manière si intensive en raison de ces propriétés uniques. Pendant de nombreuses années où dans l'année 1970, le premier super-réseau à semi-conducteur a été réalisé par Esaki et Tsu [1]. Il est constitué d'alternance périodique par une fine couche de semi-conducteur A (matériau puits) placée entre deux couches d'un semi-conducteur B (matériau barrière). Le développement rapide des techniques de croissance des semi-conducteurs a permis l'élaboration d'hétéro structuré dites super réseaux (SR).

Il est possible de produire une variété de nanomatériaux tels que les puits quantiques, fils quantiques et points quantiques en contrôlant la taille, la forme, l'environnement chimique et la composition, ce qui fait progresser la recherche sur les propriétés optiques et électroniques des nanomatériaux. Ces dernières années, les propriétés optiques linéaires et non linéaires associées aux transitions électroniques dans les nanomatériaux tels que les puits quantiques (quantum well), les fils quantiques (quantum wire) et les points quantiques (quantum dot) ont été intensivement étudiées. Ces propriétés sont devenues la base physique importante de nombreux dispositifs optoélectroniques tels que les modulateurs électro-optiques à grande vitesse, les photos détectrices infrarouges lointains, les amplificateurs optiques à semi-conducteurs. En raison de l'existence d'un fort effet de confinement quantique, les effets optiques sur les nanomatériaux de faibles dimensions peuvent être améliorés de manière spectrale.

L'élément de matrice dipolaire de la transition optique entre les sous-bandes de telles structures a une très grande valeur. Ainsi, les photons d'énergies égales aux énergies de transition inter-sous-bandes subissent un changement important des constantes diélectriques et autres propriétés optiques.

Dans notre modeste recherche, nous avons élaboré le thème intitulé <<calcule numérique des éléments de la matrice du moment dipolaire d'un super (réseau à base de GaAs/ Al_xGa_{1-x} As) ≫. Les techniques modernes de croissance des matériaux semi-conducteurs sont permises Le développement de nouveaux concepts en utilisant les propriétés des structures quantiques dans ces matériaux.

Introduction générale

Dans ce mémoire nous avons résolu numériquement l'équation de Schrödinger par la méthode de tir (shooting méthode) pour déterminer les valeurs d'énergies et les fonctions d'ondes correspondantes dans un semi-conducteur GaAs / Al_xGa_{1-x} As. des puits quantiques et calcule le moment dipolaire électrique de quelques structure à puits quantiques à base de GaAs / Al_xGa_{1-x} As.

- Dans premier chapitre, nous avons présenté des généralités sur les semi-conducteurs, les puits quantiques et les super réseaux. Premièrement, nous parlons sur les types Semi-conducteur intrinsèque et Semi-conducteur extrinsèque (type N où P).Ensuite, nous définissons les puits quantiques et les types des structures aux puits quantique.
  À la fin de chapitre, nous aborderons le moment dipolaire électrique.

- Le second chapitre est consacré à la solution de l'équation de Schrödinger dans les puits quantiques.
  Nous rappelons ensuite les méthodes de calcul des énergies par la méthode matrice de transfère, la méthode schooting et
  la méthode déférence finie.
  À la fin de ce chapitre, nous présentons les solutions self-consiste Schrödinger et l'équation poisson.

- Dans le troisième chapitre, nous exposons les résultats obtenus par la résolution numérique de l'équation de Schrödinger par la méthode de tir (shooting méthode). Ces résultats sont consacrés à déterminer les niveaux d'énergies et les fonctions d'ondes correspondantes dans un semi-conducteurs GaAs / Al_xGa_{1-x} As .des puits quantiques à potentiel de confinement fini. Par ailleurs, les moments dipolaires de quelques structure à puits quantiques à base de GaAs /Al_xGa_{1-x} As sont aussi calculés par cette méthode.

CHAPITRE I

GENERALITE

Chapitre I

GENERALITES

I.1 Introduction

Dans ce chapitre, nous allons définir les semi-conducteurs et leurs types: les semi-conducteurs intrinsèques et les semi-conducteurs extrinsèque (type N où P). Nous allons aussi définir les puits quantiques et leurs structures ainsi que les supers réseaux et le moment dipolaire électrique.

I.2 Définition les semi-conducteurs(SC)

Les semi-conducteurs sont des corps solides dont la conductivité électrique se situe entre celle des métaux et celle des isolants. Ils sont isolants s'ils sont purs et au zéro absolu, et leurs conductivité électrique augmente avec la température, et elle est sensible aux impuretés ou aux différents types de défauts [2]. Les matériaux ayant la plus faible résistivité à température ambiante, typiquement inférieure à $10^{-5}\Omega m$ sont les métaux (cuivre, argent.. etc.). Entre les métaux et les isolants se trouvent les semi-conducteurs (SC) dont la résistivité varie de$10^{-3}\Omega m$ à $10^{4}\Omega$m, (Ou plus) [3].

La conduction électrique se fait par les électrons et les trous ou, de façon préférentielle, par l'un ou l'autre type de porteurs. Les semi-conducteurs ont en commun avec les isolants d'être eux-mêmes isolants à la température(T = 0K) [4]. et comme isolant à faible bande interdite, les semi-conducteurs est caractérise par plusieurs propriétés physiques [5].

Sa résistivité diminue et elle est comprise entre ($10^{-5}\Omega$cm et $10^{6}\Omega$ cm) quand la température augmente (T ≠0 k), au moins pour une certaine gamme de température, au contraire des métaux.

Les semi-conducteurs sont sensibles à la lumière visible et la majorité d'entre eux possèdent une meilleure transparence aux IRs.

Le Semi-Conducteur est un matériau qui peut être soit un conducteur ou un isolant électrique selon la température et selon tension d'excitation. les dispositifs électroniques

comme la diode, le transistor sont fabriqués à base de semi-conducteur. Parmi les matériaux les plus utilisés dans la fabrication de ses dispositifs, il y'a le Silicium (Si) le germanium(Ge).

Métaux	$\rho \leq 10^{-5} \Omega\, cm$	$\sigma = 10^{-3}$à $10^{4} \Omega^{-1} m^{-1}$
Semi-conducteurs	$10^{-3} \leq \rho \leq 10^{4}\ \Omega\, cm$	$\sigma = 10^{2}$à $10^{-10} \Omega^{-1} m^{-1}$
Isolants	$\rho \leq 10^{8} \Omega\, cm$	$\sigma = 10^{-14}$à$10^{-16} \Omega^{-1} m^{-1}$

Table 1: Conductivité électrique et la résistivité des métaux, des semi-conducteurs et des isolants [6].

Les matériaux qui possèdent ce type de propriétés sont les éléments de la colonne IV de la classification périodique et les composés III-V, des composés II-VI, des alliages ternaires ou quaternaires [7], le tableau (I.2) donne des exemples des matériaux ou des composés [8].

Colonne		Semi-conducteur
IV		Ge, Si
III-V	binaire	GaAs, Gap, GaSb,InAs,Inp,InSb
	ternaire	AlxGa1-xAs ,GaAsyP1-y
	quaternaire	AlxGa1-xAsyP1-y
II-VI	binaire	CdS ,HgTe , CdTe , ZnTe ,ZnS
	ternaire	CdxHg1-xTe

Table 2 :Exemples des semi-condonducteurs.

1.3 Semi-conducteur intrinsèque(SCI)

Ce sont des semi-conducteurs purs et très bien cristallisés présentant un réseau cristallin parfaitement périodique tout en ayant un taux d'impuretés très faible Ils se comportent comme des isolants à très basse température et leur conductivité augmente avec la température, Lorsque le matériau semi-conducteur ne présente aucun défauts chimique

(impuretés) et physique (imperfection structurale), on dit que le semi-conducteur est intrinsèque. donne un résumé global des semi-conducteurs intrinsèques du point de vu structure de bandes et distributions des charges [9].

I.3.1 Densité des porteurs

La densité des électrons dans la BC et celle des trous dans la BV sont données respectivement [10].

$$p = n = n_i \tag{I.1}$$

$$n_i^2 = p\,n \tag{I.2}$$

$$\text{on a } n_{i=}^2 N_c\, N_V \exp\left(-\frac{E_g}{K_B\, T}\right) \tag{I.3}$$

$$\text{on obtient } n_i = \sqrt{N_C}\, N_v \exp\left(-\frac{E_g}{K_B\, T}\right) \tag{I.4}$$

$$\text{avec} E_g = \frac{E_V - E_C}{2} \text{ la largeur de gap} \tag{I.5}$$

p : La densité des trous

n : La densité des électrons.

N_C: appelé densité d'états électroniques dans la bande de conduction.

N_V : appelé densité d'états électroniques dans la bande de valence.

I.3.2 Niveau de Fermi (E_F)

On obtient la position du niveau de Fermi en écrivant que pour un semi-conducteur intrinsèque les densités des électrons et des trous sont égales (n=p) soit alors [10] .

$$n=N_C \exp\left(-\frac{E_{C-}\, E_{Fi}}{K_B\, T}\right) \tag{I.6}$$

$$p=N_V \exp\left(\frac{E_V - E_{Fi}}{K_B\, T}\right) \tag{I.7}$$

$$E_F = \frac{k_B\, T}{2} \ln\frac{N_V}{N_C} + \frac{E_{C+}E_V}{2} \tag{I.8}$$

Ce qui donne

$$\frac{N_V}{N_C} = \left(\frac{m_v^*}{m_c^*}\right)^{3/2} \quad (I.9)$$

$$E_{Fi} = \frac{E_C + E_V}{2} + \frac{3}{4} K_B T \ln\left(\frac{m_v^*}{m_c^*}\right)^{3/2} \quad (I.10)$$

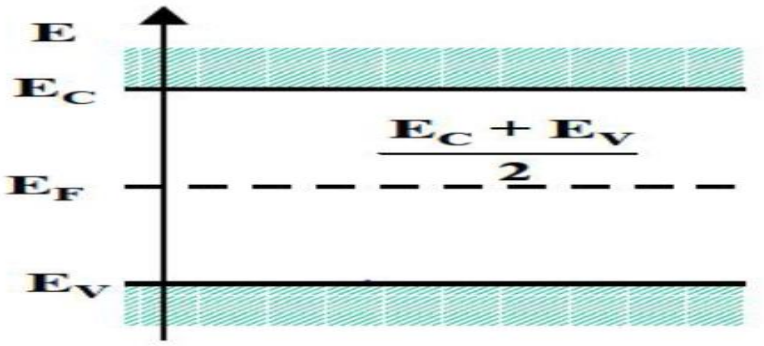


Figure 1:Position du niveau de Fermi intrinsèque dans un monocristal parfait[10].

I.4 Semi-conducteur extrinsèque (SCE)

Un semi-conducteur extrinsèque est un semi-conducteur intrinsèque dopé par des impuretés spécifiques, tout en gardant le degré de pureté initial nettement supérieur au taux du dopage, lui conférant des propriétés électriques adaptées aux applications électroniques (diodes, transistors, etc...) et optoélectroniques (émetteurs et récepteurs de lumière, etc...) [11].

Ce dernier est définit par la substitution d'atomes du cristal semi-conducteur par des atomes contenant un nombre d'électrons de valence immédiatement supérieur ou inférieur.
Il existe deux types de dopage [12].

I.4.1 le dopage de type n

qui consiste à produire un excès d'électrons, qui sont négativement chargés.

I.4.2 le dopage de type p

qui consiste à produire une carence en électrons, donc un excès de trous, considérés comme positivement chargés.

I.4.1.1 Semi-conducteur type n

Dans cette cas d'un atome de la colonne V, par exemple du phosphore. La couche externe de cet atome comporte, a priori, 5 électrons, comme représenté(figure I.2). Inclus dans le réseau cristallin, cet atome va se retrouver avec 9 électrons sur sa couche externe. Dès que l'énergie thermique sera suffisante, cet électron va quitter son orbite pour circuler dans le cristal. il rejoint dans ce cas la bande de conduction du cristal. le noyau de l'atome de phosphore ayant une charge (due à ses protons) qui n'est plus compensée, cet atome va s'ioniser positivement. Cet atome a ainsi un comportement dopant et puisqu'il a fourni un électron au cristal (dans sa bande de conduction), on l'appelle atome donneur [10].

Notons que la charge totale du cristal reste nulle, le cristal étant globalement neutre [10].

Le nombre d'électrons devient très supérieur au nombre de trous où n >p donc les électrons sont les porteurs majoritaires

$$n_{n0} = N_D \qquad \text{(I.11)}$$

Les trous sont les porteurs minoritaires

$$P_{P0}=\frac{n_i}{N_D} \qquad \text{(I.12)}$$

Les dopants sont ionisés positivement [10].

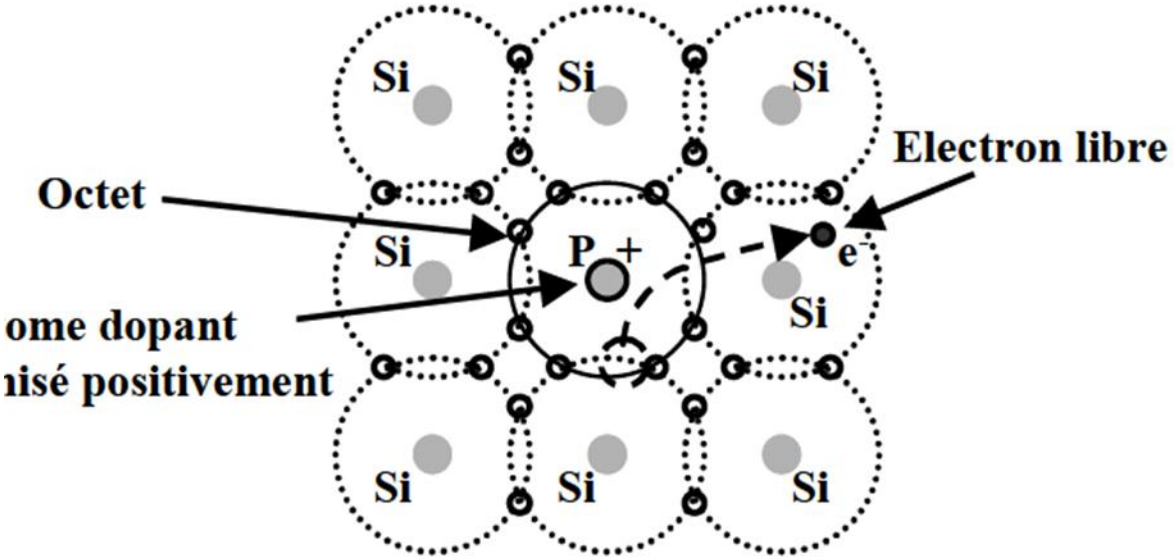


Figure 2: Dopage d'un monocristal de silicium par un atome de phosphore. L'électron excédentaire autour de l'atome de phosphore, vis-à-vis de la situation la plus stable qu'est l'octet, quitte l'atome pour rejoindre la bande de conduction et ioniser l'atome positivement. On constitue un dopage donneur de type n[10].

I.4.2.1Semi-conducteur type p

Dans cette cas d'un atome de la colonne III, par exemple du bore. La couche externe de cet atome comporte, a priori, 3 électrons, comme représenté (figure I.3). Inclus dans le réseau cristallin, cet atome va se retrouver avec 7 électrons sur sa couche externe. Dès que l'énergie thermique sera suffisante, un électron de valence voisin va quitter son orbite pour venir créer un octet autour de l'atome de bore. Il crée dans ce cas une lacune dans la bande de valence du cristal, c'est-à-dire qu'il crée un trou. Le noyau de l'atome de bore ayant une charge due à ses protons insuffisante, cet atome va s'ioniser négativement. Cet atome a ainsi un comporte et dopant et puisqu'il a fourni un trou au cristal (dans sa bande de valence), on l'appelle atome accepteur, puisqu'il accepte un électron. Notons que la charge totale du cristal reste toujours nulle, le cristal étant globalement neutre. [10]

le nombre de trous devient très supérieur à celui des électrons où p > n donc les trous sont les porteurs majoritaires

$$P_{P0}=N_A \qquad (I.13)$$

Les électrons sont les porteurs minoritaires

$$n_{p0}=\frac{n_i}{n_{po}} \qquad (I.14)$$

Les dopants sont ionisés négativement [10]

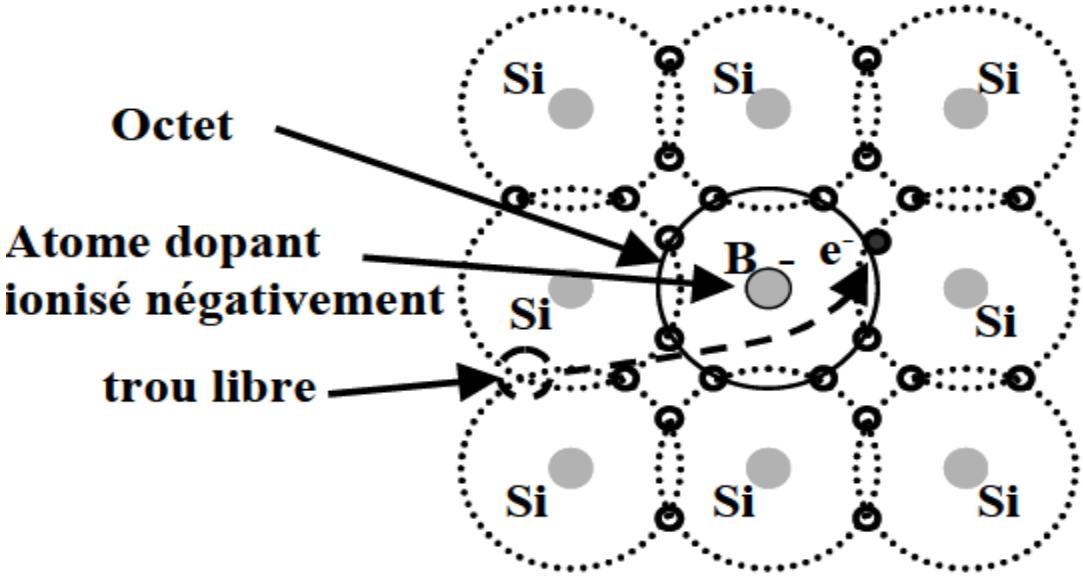


Figure 3: Dopage d'un monocristal de silicium par un atome de bore. L'électron déficitaire autour de l'atome de phosphore, vis-à-vis de la situation la plus stable qu'est l'octet, sera apporter par le réseau qui créera simultanément un trou. On constitue un dopage accepteur de type p[10].

I.5 puits quantique

I.5.1. Définition

Un puits quantique est une zone de l'espace dans laquelle le potentiel ressenti par une particule quantique atteint un minimum. Il s'agit d'un puits de potentiel dont les petites dimensions entraînent une différence entre les prédictions de la mécanique classique et celles de la mécanique quantique [13, 14,15].

On forme un puits de potentiel par la superposition d'une fine couche de matériau semi-conducteurs (quelques nanomètres) de faible gap B entre deux barrière de matériaux semi-conducteurs de plus grand gap A, Cela conduit à une discontinuité des bandes de valence et de conduction à l'origine de la création d'un puits de potentiel aussi bien pour les trous que pour les électrons. Une telle structure confine les porteurs dans la direction croissance. Les états électroniques ne se situent plus ni au sommet de la bande de valence ni au minimum de la bande de conduction mais sont quantifiés en niveaux d'énergie discrets discontinuité de bande interdite à l'interface puits-barrière dans les systèmes à puits quantiques le mouvement de l'électron est libre dans le plane la couche mais n'est pas possible suivant la direction de croissance. nous parlons ainsi d'une structure bidimensionnelle [16,17].

En raison de la faible largeur du puits, les niveaux d'énergie des porteurs sont quantifiés suivant la direction de croissance.

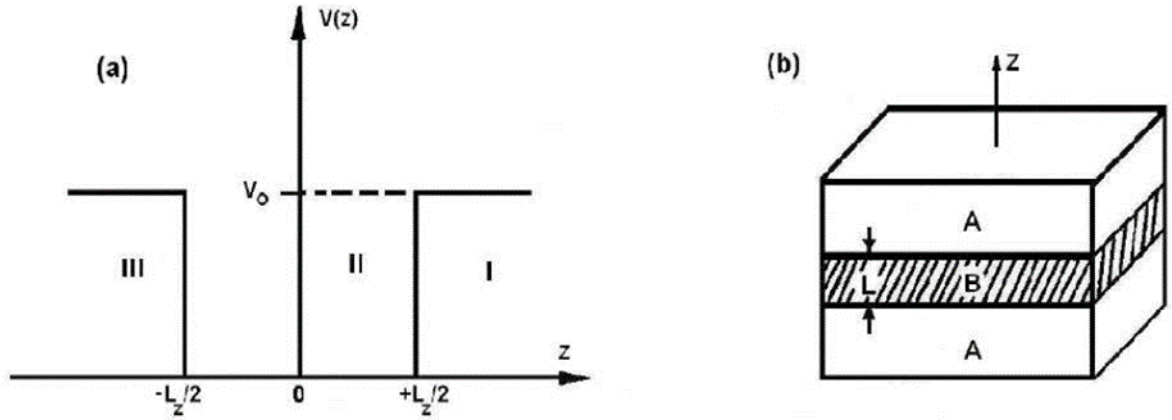


Figure 4: (a) Puits quantique carré de largeur Lz et de hauteur V0 ; (b) : Couche d'un matériau semi-conducteur A possédant un gap inférieur à celui du matériau semi-conducteur B.

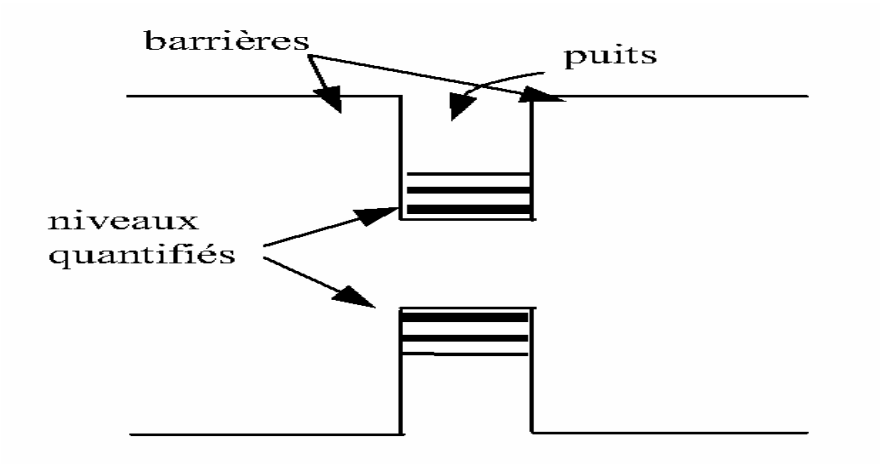


Figure 5: Schéma d'une structure de puits quantique.

I.5.2 Simple puits Quantique« SQW »

Un simple puits quantique est forme par une couche (quelque nm) d'un matériaux Semi-conducteur de faible gap entourée par un matériau de plus grand gap. La différence de gap Eg est distribuée entre les bandes de conduction et de valent ce suivant la différence des affinités électroniques des semi-conducteurs 1 et semi-conducteur 2.

Dans le simple puits quantique il y a trois paramètres principaux qui peuvent modifier l'énergie de confinement sont : la largeur de puits Lz, l'énergie de la bande de conduction ΔEc et l'énergie de la bande de valence ΔEv. On peut modifier ΔEc et ΔEv par la composition d'alliage.

Selon la nature de la discontinuité de la bande interdite a l'interface puits barrière, trois types de puits quantiques existent [16].

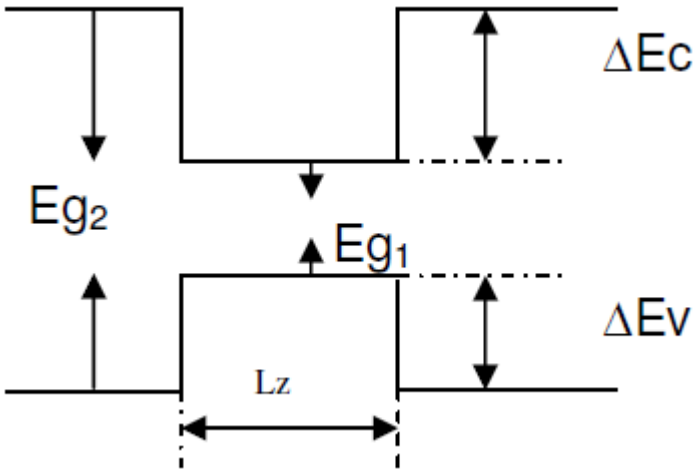


Figure 6:Modélisation Simple puits Quantique.

I.5.2.a Puits quantique de type I

Les électrons et les trous sont confines dans le même matériau constituant le puits. L'énergie du photon dépend des énergies de confinement des porteurs et du gap du matériau puits [18].

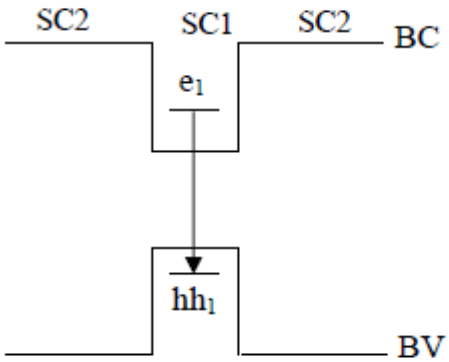


Figure 7: Simple Puits quantique type I.

I.5.2.b Puits quantique de type II

Les porteurs sont confinés dans deux matériaux adjacents. Dans ce cas l'énergie du photon est fonction des énergies de confinement des porteurs mais aussi des gaps des deux matériaux formant l'hétéro structuré [18].

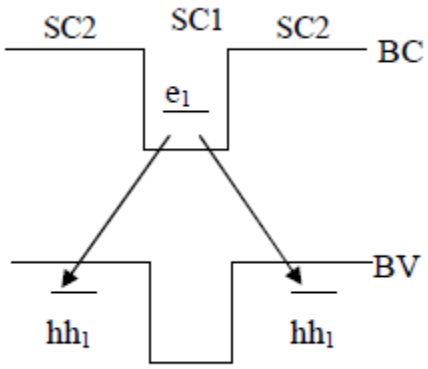


Figure 8: Simple Puits quantique type II.

I.5.2.c Puits quantique de type III

Cas particulier de type II dans lequel le bas de la bande de conduction se trouve en dessous du haut de la bande de valence. La longueur d'onde d'émission ne dépende que des énergies de confinement des électrons et des trous, donc des épaisseurs des couches [18].

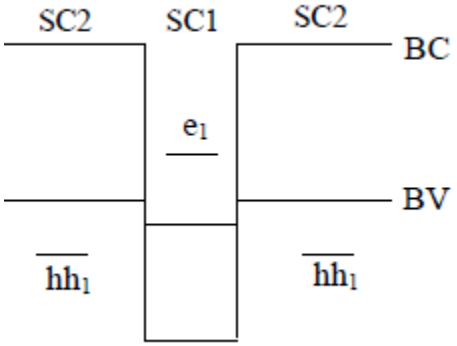


Figure 9: Simple Puits quantique type III.

I.5.3 Double puits quantiques « DQW »

La structure puits quantique couples est un couplage de deux simple puits quantiques [18].

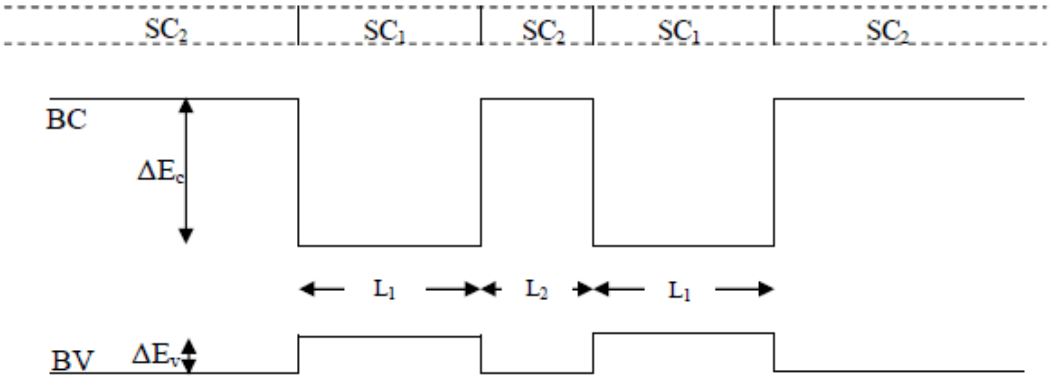


Figure 10: Puits quantiques couplés.

Si l'épaisseur L2 du semi-conducteur 2 est grande par rapport a longueur d'onde de Broglie, les fonctions d'onde associées a chacun des puits, les deux puits sont alors sa dépend dans. Si L2 est faible, les états électroniques du puits 1 et du puits 2 sont couples par effet tunnel.

I.5.4 Multi puits quantiques « MQW »

La structure a multi puits quantiques est une série des semi-conducteurs qui sont obtenus par la croissance épitaxie des couches fines des matériaux ayant un paramètre de maille voisin mais une énergie de bande interdite différentes sur un substrat [19] (voir la Figure I.11).

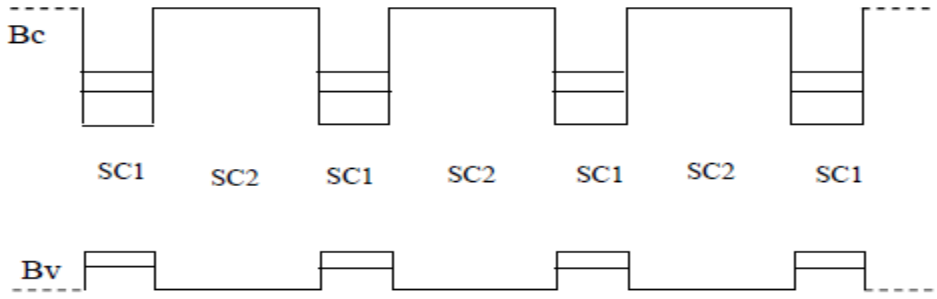


Figure 11: Structure à multi puits quantiques.

I.6 Super réseaux

I.6.1Historique des super réseaux

Les premiers travaux portant sur des couches empilées artificiellement furent produits par DuMond et Yutz (1940) .sur des matériaux métalliques dans le but de produire des structures en couches pour réaliser des réseaux de diffraction des rayons X [20]. Dans le cadre du transport électronique, l'idée d'une structure à basse dimension a été initialement proposée par L. Esaki et al. en 1970 [21] .En juxtaposant deux matériaux semi-conducteurs différents, les discontinuités aux bords des bandes ont permis l'apparition d'états quasi-liés de nature quantique, confinés à l'interface. L'exploitation de ces niveaux d'énergie a suscité un intérêt immense dans la transmission électronique. Depuis l'avènement de la structure double barrière, les propriétés de transmission dans de tels dispositifs électroniques se sont retrouvées nettement améliorées. Les avancées dans les techniques de dépôt ont ensuite permis le développement de matériaux artificiellement empilés présentant des propriétés physiques différentes des matériaux homogènes de départ.

I.6.2 Définition d'un super réseau (SR)

Un super réseau (SR) est un empilement de couches ultrafines de semi-conducteur (quelques dizaines d'Angstrom d'épaisseurs) alternées périodiquement suivant l'axe de croissance (figure I.8). L'idée d'une structure de basse dimension a été proposée pour la première fois en 1969 par Esaki et al. [22]. Son avantage est de présenter une discontinuité de bords de faible gap joue le rôle d'un puits de potentiel pour les électrons et l'autre à grand gap d'une barrière. Ainsi un profil de potentiel périodique résultant d'une succession de puits et de barrières est obtenu. la période d [23] du potentiel permet de faire la différence entre un puits quantique, qui présente des états isolés, et un SR, où se forme une structure de mini bandes. L'ordre de grandeur généralement admis est 200Å.

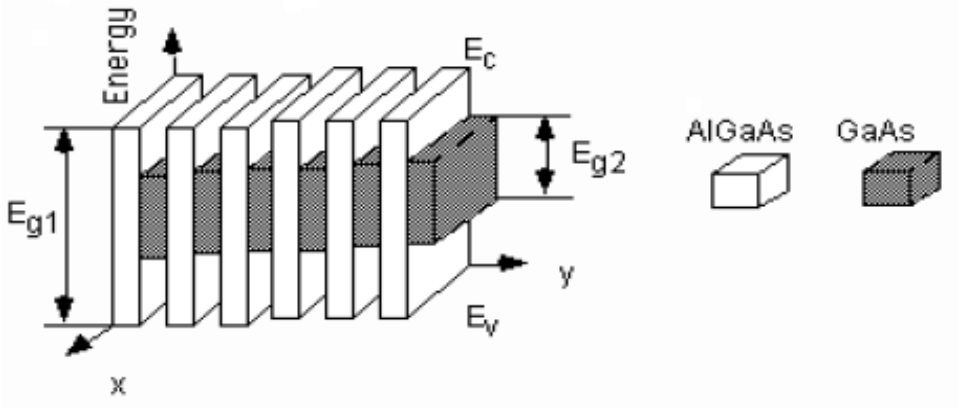


Figure 12: Super réseau AlGaAs/GaAs à puits et à barrières rectangulaire [24].

I.6.3 Classes des super réseaux

L'étude des diagrammes de bande de quelques systèmes a montré que les SR peuvent être classés en trois types [25].

I.6.3.a Super réseau de type I

Dans ce type de SR les électrons et les trous sont confinés, respectivement, dans la bande de conduction et de valence de la même couche. C'est dû au fait que les gaps des matériaux constituant le SR sont directs.

I.6.4.b Super réseau de type II

Dans ce genre de SR, l'extrema des BV et BC sont spatialement séparés, (le gap dans ce cas d'au moins d'un des semi-conducteur est indirect). Les électrons et les trous sont confinés dans deux matériaux semi-conducteurs adjacents (Figure I.13).

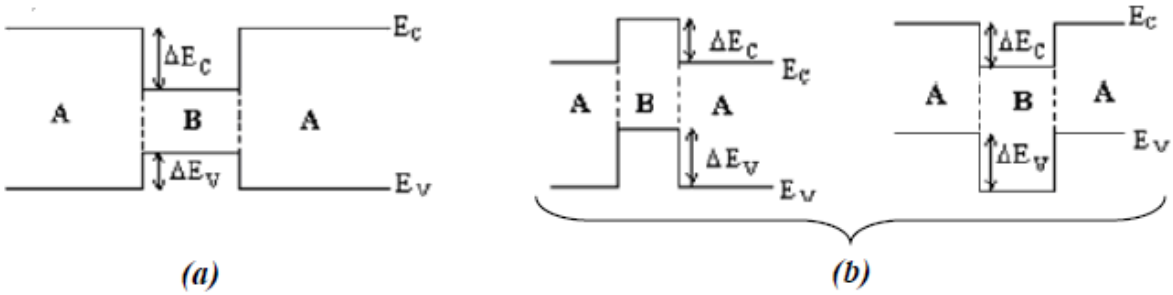


Figure 13: super réseau (a) de type I, (b) de type II [26].

I.6.5.c Super réseau de type III

La différence des bords de bande est négative, permet l'ouverture d'une fenêtre dans le SR [27].il est appelé aussi SR à gap cassé (Brocken gap).

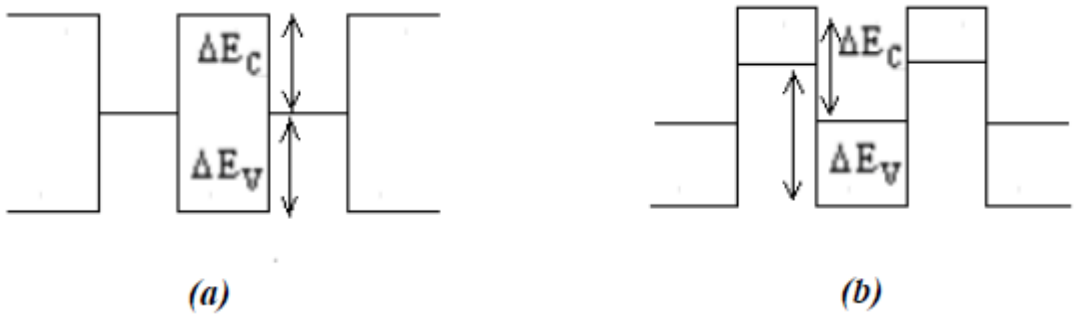


Figure 14: super réseau (a) à gap nul, (b) à ouverture de fenêtre (Broken gap).

I.7 Généralité Moment dipolaire électrique

Le moment dipolaire électrique caractérise la distribution de charges dans une molécule.

La connaissance de cette distribution est fondamentale pour comprendre les propriétés électroniques de la molécule, sa géométrie, les interactions avec d'autres particules…

Cette grandeur physique peut également permettre d'obtenir des informations sur la dynamique et...).

1.7.1Définition Moment dipolaire électrique

Un dipôle électrique est un système de deux charges ponctuelles de même valeur mais de signes opposés, se parées par distance x .

L'importance de ce dipôle est mesurée par son

Moment dipolaire p défini par :

$$P = q\,x$$

$$x = < x > = \int_0^{\infty} |\psi(x)|^2 x\, dx$$

I.8 Conclusion

Nous avons rappelé les semi-conducteurs .Nous allons définir les puits quantique et les super réseaux.

Chapitre II
Solution de l’équation de Schrödinger

Chapite II

Solution de l'équation de Schrödinger

II.1 Introduction

Dans ce chapitre, nous présenterons les solutions de l'équation de Schrödinger dans les puits quantiques sans et sous un champ électrique uniforme.

II.2 l'équation de Schrödinger indépendant de temps

L'équation de Schrödinger est une équation différentielle partielle qui décrit comment l'état quantique d'un système physique a changé au fil du temps. elle a été formulée par le la fin de 1925 et publiée en 1926 .cette équation décrit les états des systèmes quantique dépendants du tempsde la fonction d'onde ψ d'un système physique [28].

Elle prend la forme suivante :

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=H\psi \qquad \text{(II.1)}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*}\Delta\psi(x)+V(x)\,\psi(x)=E\,\psi(x) \qquad \text{(II.2)}$$

Avec :

H : est l'opérateur Hamiltonien (associé l'énergie totale) du système considéré donné par :

$$H(t) = T + V(t) \qquad \text{(II.3)}$$

Δ C'est le Laplacien.

m^* La masse effective

E L'énergie totale de l'électron

Ψ La fonction d'onde

$\hbar=\frac{h}{2\pi}$ Avec h constante de Planck

II.3 Méthode de calcul les énergies dans les puits quantiques

Pour résoudre l'équation de Schrödinger dans de nombreux états de calculs physiques, il existe plusieurs méthodes pour calculer les états et les fonctions d'onde liés dans les gammes d'énergies des structures hétérogènes.

On peut classer les méthodes de calculs qui peuvent être numériques, comme les méthodes des différences finies, schooting ...

Elle peut être semi-analytique comme méthode de matrice de transfert.

II.3.1 méthode de matrice de transfer

La méthode de la matrice de transfert (MMT) [29] est utilisée pour déterminer les amplitudes des fonctions enveloppes dans une structure super-réseau. Cette méthode a été présentée par S.L Chuang et consiste à propager la fonction d'onde à travers chacune des couches de l'hétéro structure [30]. le formalisme de la matrice de transfert est un outil mathématique traduisant l'évolution spatiale de la fonction d'onde et sa dérivée [30] pondérée par la masse effective [31] à travers deux points distincts a et b d'un diffuseur de potentiel V(x) par l'intermédiaire d'une matrice (M_{ab}) de dimension (2×2).

$$\begin{pmatrix} \psi(a) \\ \frac{\psi'(a)}{m_a^*} \end{pmatrix} = M_{ab} \begin{pmatrix} \psi(b) \\ \frac{\psi'(b)}{m_b^*} \end{pmatrix} \quad \text{(II.4)}$$

Définissant la fonction d'onde dans chaque région n par :

$$\psi_n(x) = A_n e^{ikx} + B_n e^{-ikx} \quad \text{(II.5)}$$

Les coefficients A_n, B_n peuvent être reliés par une fonction M_n aux coefficients d'entrée et de sortie à l'émetteur A_0 et B_0 [32].

$$\begin{pmatrix} A_0 \\ B_0 \end{pmatrix} = M_n \begin{pmatrix} A_n \\ B_n \end{pmatrix} \quad \text{(II.6)}$$

On peut définir la relation reliant les amplitudes (A_0 ,B_0) et (A_{2N} ,B_{2N}) par la matrice de transfert totale comme suit :

$$\begin{bmatrix} A_0 \\ B_0 \end{bmatrix} = M_1 M_2 M_3 \dots \dots . M_{2N-1} M_{2N} \begin{bmatrix} A_{2N} \\ B_{2N} \end{bmatrix} \quad \text{(II.7)}$$

$$\begin{Bmatrix} A_0 \\ B_0 \end{Bmatrix} = M \begin{Bmatrix} A_{2N} \\ B_{2N} \end{Bmatrix} \quad \text{(II.8)}$$

La matrice de transfert totale M est donnée par :

$$M = M_1 M_2 M_3 \dots \dots . M_{2N-1} M_{2N} = \prod_{j=1}^{2N} M_j \quad \text{(II.9)}$$

Donc, on peut calculer le coefficient de transmission dans une structure donnée.

II.3.2. Méthode de tir (Schooting méthode)

Comme point de départ, considérez une forme générale, mais simple (masse constante) pour l'équation de Schrödinger indépendante du temps, dont les solutions numériques [33]

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*}\frac{\partial^2\psi(x)}{\partial x^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x) \quad \text{(II.10)}$$

Où le potentiel unidimensionnel restera indéfini V(x) et $\psi(x)$ est la fonction d'onde d'une particule de masse effective m*. L'équation (II.10) peut être écrite comme suit.

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*}\frac{\partial^2\psi(x)}{\partial x^2} + [V(x) - E]\psi(x) = 0 \quad \text{(II.11)}$$

Le problème est maintenant de trouver une méthode numérique pour la résolution des valeurs propres d'énergie E et des fonctions propres $\psi(x)$ pour n'importe quel V(x). le premier dérivé de toute fonction est défini Comme :[33]

$$\lim_{\Delta x \to 0} \frac{\Delta f}{\Delta x} = \frac{df}{dx} \quad \text{(II.12)}$$

Il convient au but ici de conserver la forme approximative, c'est-à-dire :

$$\frac{df}{dx} \approx \frac{\Delta f}{\Delta x} = \frac{f(x+\delta x) - f(x-\delta x)}{2\delta x} \quad \text{(II.13)}$$

En utilisant les formes de différence finie dans l'équation (II.13) pour les premiers dérivés, puis:

$$\frac{d^2 f}{dx^2} \approx \frac{f(x+2\delta x) - 2f(x) + f(x-2\delta x)}{(2\delta x)^2} \quad \text{(II.14)}$$

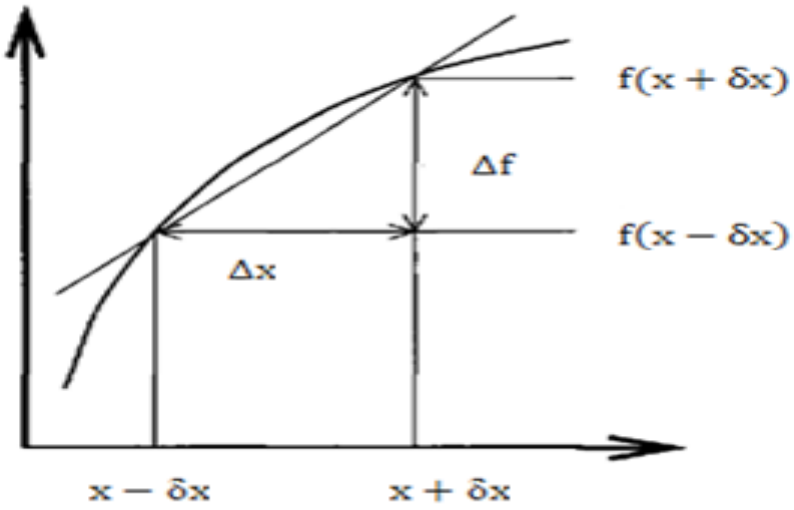


Figure 15: Le premier dérivé d'une fonction.

Comme δx est une longueur, encore, indéfini petit pas le long de l'axe x, et comme il seulement apparaît dans l'équation (II.14) avec le facteur 2, puis cette représentation de différence finie du deuxième dérivé peut être simplifié légèrement en remplaçant δx pour 2δx, c'est-à-dire

$$\frac{d^2f}{dx^2} \approx \frac{f(x+\delta x)-2f(x)+f(x-\delta x)}{(\delta x)^2} \qquad \text{(II.15)}$$

Utilisation de cette forme pour le deuxième dérivé dans l'équation originale de Schrödinger et prendre la longueur de pas δ x comme suffisamment petit que l'approximation est bonne, c'est-à-dire la baisse le 'en faveur de ", alors:

$$\frac{-\hbar^2}{2m^*}\left[\frac{\psi(x+\delta x)-2\psi(x)+\psi(x-\delta x)}{(\delta x)^2}\right] + [V(x) - E]\psi(x) = 0 \qquad \text{(II.16)}$$

Après petite simplification on obtient alors :

$$\psi(x+\delta x) - 2\psi(x) + \psi(x-\delta x) = \frac{2m^*}{\hbar^2}(\delta x)^2[V(x) - E]\psi(x) \qquad \text{(II.17)}$$

qui peut enfin être écrit comme:

$$\psi(x+\delta x) = \left[\frac{2m^*}{\hbar^2}(\delta x)^2(V(x) - E) + 2\right]\psi(x) - \psi(x-\delta x) \qquad \text{(II.18)}$$

En utilisant deux valeurs connues de la fonction d'onde $\psi(x-\delta x)$ et vous $\psi(x+\delta x)$, une troisième valeur, c.-à-d. $(x+\delta x)$, peut être prédit. En utilisant ce nouveau point $\psi(x+\delta x)$ avec $\psi(x+\delta x)$ et en faisant la transformation$x+\delta x \rightarrow x$, un quatrième point, $\psi(x+2\delta x)$, peut être calculé, et ainsi de suite. Par conséquent, la fonction d'onde complète peut être déduite pour toute énergie particulière. Les solutions pour les États fixes ont des fonctions d'ondes qui respecter les conditions de limite standard, alors :

$$\psi(x) \to 0 \text{ et } \frac{\partial}{\partial x}\psi(x) \to 0 \text{ pour } x \to \pm\infty \qquad \text{(II.19)}$$

Les deux premières valeurs de la fonction d'onde nécessaires pour démarrer la procédure peut être déduit en utilisant des arguments simples de symétrie, à savoir que si le potentiel V(x) est symétrique, alors les Eigen states doivent être symétriques (même parité) ou antisymétriques (parité impaire). Si l'état d'intérêt a une parité étrange, par exemple le premier état excité d'un puits quantique symétrique, comme illustré dans (Figer II.1),puis la fonction d'onde à la centre du puits (appelez ceci l'origine x 0 pour l'instant) doit être nul. Conséquence un petit déplacement le long de la direction de croissance (x-) doit produire une valeur limitée pour le fonction d'onde. L'ampleur réelle n'est pas pertinente puisque les l'équation linéaire de Schrödinger est inchangée si la fonction d'onde est numéro donné. Dans ce cas, les conditions de départ suivantes pourraient donc être choisies:$\psi(0) = 0,\ \psi(\delta x) = 1.$

La valeur de E correspondant à un état stationnaire, alors Pour calculer l'énergie des états en effectuant la transformation $E + \delta E \to E$, si la fonction d'onde vérifie la condition $\psi(x) \to 0$ pour $x \to +\infty$ on dit que l'énergie E est une valeur propre de l'équation de Schrödinger.

II.3.3 méthode des différences finies

La méthode des différences finies est une technique courante de recherche de solutions approchées d'équations aux dérivées partielles qui consiste à résoudre un système de relations (schéma numérique) liant les valeurs des fonctions inconnues en certains points suffisamment proches les uns des autres. la méthode des différences finies consiste à remplacer les dérivées dans les équations de physique aux problèmes discrétisés au moyen des développements de Taylor. Il s'agit d'une des plus anciennes techniques numériques de résolution des équations différentielles ou aux dérivées partielles décrite par Euler [34] et commentée par Ames [35].

II.4 Résolution de l'équation de Schrödinger dans un puits quantique en absence d'un champ électrique extérieur

Un puits quantique simple formé par deux semi-conducteurs à gap différence avec le repéré est la direction OX (voire la Figer (II.2)). Et l'énergie potentielle V(X) est donnée par :

$$v(x) = \begin{cases} 0, \leq x \leq x_1 \\ V_0, x < x_0 \ \text{ ou } x > x_1 \end{cases}$$

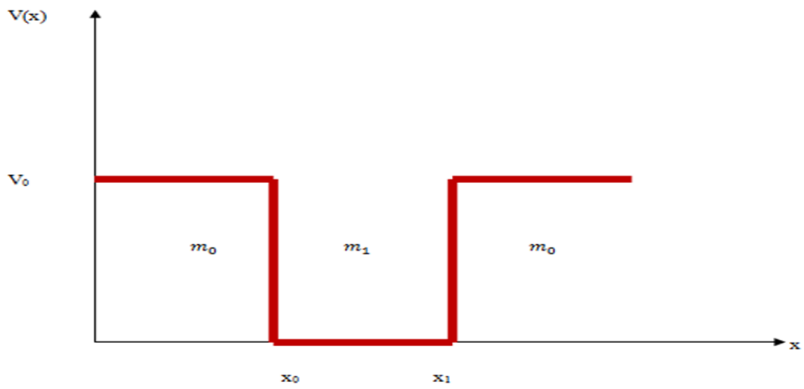


Figure 16: un puits quantique simple.

La méthode des différences finies consiste à remplacer les dérivées dans les équations de la Physique aux problèmes discrétisés au moyen des développements de Taylor.

$$f(x+\Delta x) = f(x) + \Delta x f'(x) + \cdots + \frac{(\Delta x)^n}{n!} f^{(n)}(x) + \frac{(\Delta x)^{n+1}}{(n+1)!} f^{(n+1)} f(\delta) \qquad \text{(II.20)}$$

De même :

$$f(x-\Delta x) = f(x) - \Delta x f'(x) + \frac{(\Delta x)^2}{2!} f''(x) + \cdots \qquad \text{(II.21)}$$

De ces deux relations, on peut déduire trois approximations pour $f'(x)$:

$$f'(x) = \frac{f(x+\Delta x)-f(x)}{\Delta x} + 0(\Delta x) \qquad \text{Décentrée avant} \qquad \text{(II.22)}$$

$$f'(x) = \frac{f(x)-f(x-\Delta x)}{\Delta x} + 0(\Delta x) \qquad \text{Décentrée arrière} \qquad \text{(II.23)}$$

$$f'(x) = \frac{f(x+\Delta x)-f(x-\Delta x)}{2\Delta x} + 0(\Delta x^2) \qquad \text{Dérivée centrée} \qquad \text{(II.24)}$$

Et une approximation pour la dérivée seconde:

$$f''(x) = \frac{f(x+\Delta x)+f(x-\Delta x)-2f(x)}{(\Delta x)^2} + 0(\Delta x^2) \qquad \text{(II.25)}$$

Où 0 (Δx) et 0 (Δx^2) sont les termes d'erreurs.

En utilisant les formes de différences finies dans l'équation (II.25) pour les premières dérivées, et En utilisant cette forme pour la seconde dérivée dans l'équation de Schrödinger originale et en prenant la longueur de pas L comme suffisamment petite pour que l'approximation soit bonne, alors:

$$\frac{-\hbar^2}{2m^*}\left[\frac{\psi(x+\delta x)-2\psi(x)+\psi(x-\delta x)}{(\delta x)^2}\right]+[V(x)-E]\psi(x)=0 \qquad \text{(II.26)}$$

Par développement on obtient :

$$\frac{-\hbar^2}{2m^*}\frac{\psi(x_i+\delta x_i)}{(\delta x_i)^2}+\frac{\hbar^2}{m^*}\frac{\psi(x_i)}{(\delta x_i)^2}+v_0(x_i)\psi(x_i)-\frac{-\hbar^2}{2m^*}\frac{\psi(x_i+\delta x_i)}{(\delta x_i)^2}=E\psi(x_i) \qquad \text{(II.27)}$$

On pos que :

$$a=-\frac{\hbar^2}{2m^*\delta x_i^2} \quad , \quad b=-\frac{\hbar^2}{2m^*\delta x_i^2}+v_0(x_i) \quad , \quad c=-\frac{\hbar^2}{2m^*\delta x_i^2}$$

Les équations obtenues pour i allant de 0 à N peuvent alors se mettre sous la forme matricielle.

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 & & & \\ b & a & & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & a_{N-1} & b_{N-1} & b_{N-1} \\ & & & b_N & b_N \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \psi_0 \\ \psi_1 \\ \vdots \\ \psi_{N-1} \\ \psi_N \end{pmatrix}=E\begin{pmatrix} \psi_0 \\ \psi_1 \\ \vdots \\ \psi_{N-1} \\ \psi_N \end{pmatrix} \qquad \text{(II.28)}$$

On trouve donc un système d'équations du type AX=BX, où A est une matrice tri diagonale, sa résolution fournira l'énergie E et la fonction d'ondeψ.

Pour l'équation de Schrödinger (II.10) (cas des électrons dans la bande de conduction) discrétisé sur un maillage uniforme est comme suit :

$$x = x_i \quad x+\Delta x = x_{i+1} \qquad x-\Delta x = x_{i-1}$$

on a :

$$\frac{1}{m(x_{i\pm1})}+\frac{1}{m(x_i)}=\frac{1}{m(x_{i\pm1/2})} \qquad \text{(II.29)}$$

Avec :

$$A(x)\frac{\partial^2 g}{\partial x^2}|x = x_i \rightarrow \frac{\partial}{\partial x}\left[A(x)\frac{\partial g}{\partial x}\right] \quad \text{(II.30)}$$

Donc on peut écrire :

$$\frac{A(x_{i+1})+A(x_i)}{2(\Delta X_I)^2}g(x_{i+1}) + \frac{A(x_{i-1})+A(x_i)}{2(\Delta X_I)^2}\,g(x_{i-1}) - \frac{A(x_{i+1})+2A(x_i)\ +A(x_{i-1})}{2(\Delta X_I)^2}\,g(x_i) \quad \text{(II.31)}$$

Avec :

$$A(x) = \frac{1}{m(x)} \quad \text{et} \quad g(x) = \frac{\partial \psi}{\partial x} \quad \text{(II.32)}$$

Et

$$\frac{-\hbar^2}{2}\left(\frac{1}{m(x)}\frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2}\right) \rightarrow \frac{-\hbar^2}{2}\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{1}{m(x)}\right)\frac{\partial \psi}{\partial x} \quad \text{(II.33)}$$

Donc on trouve :

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*}\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{1}{m(x_i)}\frac{\partial \psi}{\partial x}\right) + V(x)\psi(x) = E\psi(x) \quad \text{(II.34)}$$

$$\frac{-\hbar^2}{2}\left[\frac{\frac{1}{m(x_{i+1})}+\frac{1}{m(x_i)}}{2(\Delta X_I)^2}\right]\psi(x_{i+1}) + \left[\frac{\hbar^2}{2}\left(\frac{\frac{1}{m(x_{i+1})}+2\frac{1}{m(x_i)}+\frac{1}{m(x_{i-1})}}{2(\Delta X_I)^2}\right) + v_0(x_i)\right]\psi(x_i) -$$
$$\frac{\hbar^2}{2}\left[\frac{\frac{1}{m(x_i)}+\frac{1}{m(x_{i-1})}}{2(\Delta X_I)^2}\right]\psi(x_{i-1}) = E\psi(x_i) \quad \text{(II.35)}$$

On obtient :

$$-\frac{\hbar^2}{2}\left[\frac{1}{m(x_{i+1/2})(\Delta X_I)^2}\right]\psi + \left[\frac{\hbar^2}{2}\left(\frac{1}{m(x_{i+1/2})(\Delta X_I)^2}+\frac{1}{m(x_{i-1/2})(\Delta X_I)^2}\right) + v_0(x_i)\right]\psi(x_i) -$$
$$\frac{\hbar^2}{2}\left[\frac{1}{m(x_{i-1/2})(\Delta X_I)^2}\right]\psi(x_i) = E\psi(x_i) \quad \text{(II.36)}$$

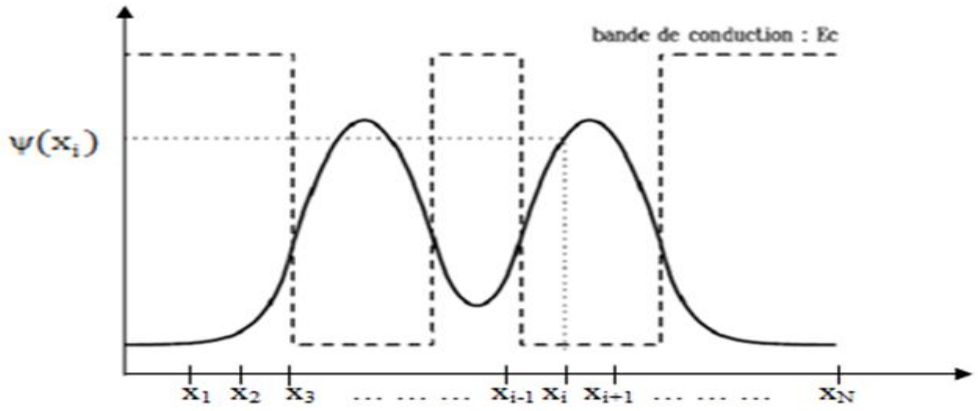


Figure 17: Fonction d'onde du premier niveau d'énergie dans une structure à deux puits quantiques; la fonction d'onde est en trait plein, la bande de conduction est en tirets[36].

On pose :

$$a_1 = -\frac{\hbar^2}{2}\frac{1}{m(x_{i+1/2})(\Delta X_I)^2} \ , \ b_1 = \frac{\hbar^2}{2}\left(\frac{1}{m(x_{i+1/2})(\Delta X_I)^2} + \frac{1}{m(x_{i-1/2})(\Delta X_I)^2}\right) + v_0(x_i)$$

$$c_1 = -\frac{\hbar^2}{2}\frac{1}{m(x_{i-1/2})(\Delta X_I)^2}$$

Les équations obtenues pour i allant de 1à N-1 peuvent alors se mettre sous la forme matricielle.

$$\begin{pmatrix} b_1 & c_1 & & & \\ a_2 & b_2 & c_2 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & a_{N-2} & b_{N-2} & b_{N-2} \\ & & & b_{N-1} & b_{N-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \vdots \\ \psi_{N-2} \\ \psi_{N-1} \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \vdots \\ \psi_{N-2} \\ \psi_{N-1} \end{pmatrix} \qquad \text{(II.37)}$$

On trouve donc un système d'équations du type AX=BX, où A est une matrice tri diagonale, sa résolution fournira l'énergie E et la fonction d'onde ψ.

II.5 Résolution de l'équation de Schrödinger dans puits quantique en présente d'un champ électrique

En présence d'un champ électrique F , chaque électron possédante un charge électrique –e et soumis à la force (-ef) ,nous considérons une structure composée d'une barrière de semi-conducteurs , en appliquant ce champ électrique extérieur F dans de la région (voir la figure II.4).

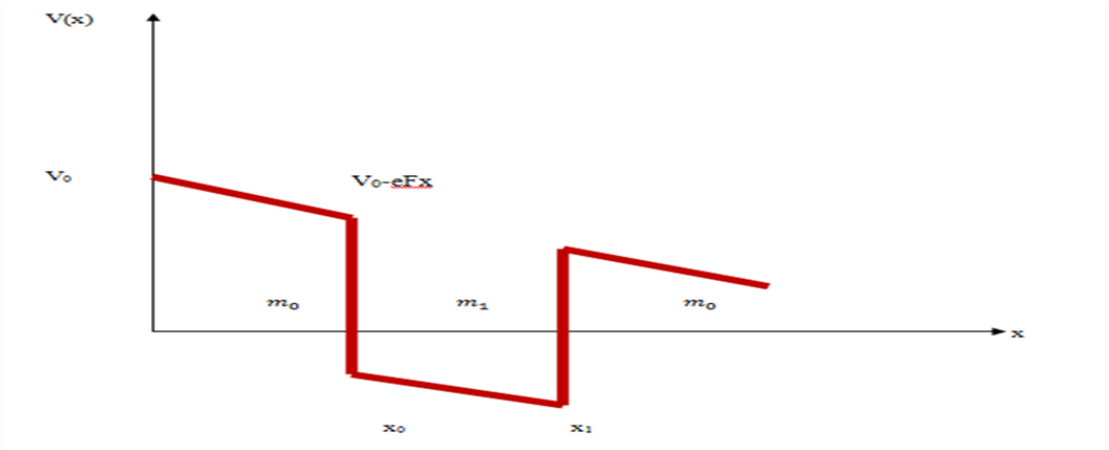


Figure 18 : structure à barrière avec un champ électrique extérieur

L'équation de Schrödinger indépendante du temps, s' écrit :

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e}\frac{\partial^2\psi(x)}{\partial x^2}+v_0(x)=E\psi(x) \qquad \text{(II.38)}$$

Alor :

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e}\left[\frac{\psi(x_i+\delta x_i)-2\psi(x_i)+\psi(x_i-\delta x_i)}{(\delta x_i)^2}\right]+(v_0-ef)(x_i)E\psi(x_i) \qquad \text{(II.39)}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e}\frac{\psi(x_i+\delta x_i)}{\delta x_i^2}+\frac{\hbar^2\psi(x_i)}{m_e\delta x_i^2}+(v_0-ef)(x_i)\psi(x_i)-\frac{\hbar^2\psi(x_i)}{2m_e\delta x_i^2}=E\psi(x_i) \qquad \text{(II.40)}$$

On psoque :

$$a=-\frac{\hbar^2}{2m^*\delta x_i^2}\ ,\quad b=-\frac{\hbar^2}{2m^*\delta x_i^2}+(v_0-ef)(x_i)\ ,\quad c=-\frac{\hbar^2}{2m^*\delta x_i^2}$$

Les équations obtenues pour i allant de 1 à N-1 peuvent alors se mettre sous la forme matricielle.

$$\begin{pmatrix} b_1 & c_1 & & & \\ a_2 & b_2 & c_2 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & a_{N-2} & b_{N-2} & b_{N-2} \\ & & & b_{N-1} & b_{N-1} \end{pmatrix}\begin{pmatrix}\psi_1\\ \psi_2\\ \vdots\\ \psi_{N-2}\\ \psi_{N-1}\end{pmatrix}=E\begin{pmatrix}\psi_1\\ \psi_2\\ \vdots\\ \psi_{N-2}\\ \psi_{N-1}\end{pmatrix} \qquad \text{(II.41)}$$

On trouve donc un système d'équations du type AX=BX, où A est une matrice tri diagonale, sa résolution fournira l'énergie E et la fonction d'onde ψ.

Alor :

$$-\frac{\hbar^2}{2}\left[\frac{1}{m(x_{i+1/2})(\Delta X_I)^2}\right]\psi(x_{i+1})+\left[\frac{\hbar^2}{2}\left(\frac{1}{m(x_{i+1/2})(\Delta X_I)^2}+\frac{1}{m(x_{i-1/2})(\Delta X_I)^2}\right)+(v_0-ef(x_i)\right]\psi(x_i)-\frac{\hbar^2}{2}\left[\frac{1}{m(x_{i-1/2})(\Delta X_I)^2}\right]\psi(x_{i-1})=E\ \psi(x_i) \quad (II.42)$$

$$a=-\frac{\hbar^2}{2}\frac{1}{m(x_{i-1/2})(\Delta X_I)^2}\ ,\ b=\frac{\hbar^2}{2}\left(\frac{1}{m(x_{i+1/2})(\Delta X_I)^2}+\frac{1}{m(x_{i-1/2})(\Delta X_I)^2}\right)+(v_0-ef)(x_i)$$

$$c=-\frac{\hbar^2}{2}\frac{1}{m(x_{i-1/2})(\Delta X_I)^2}$$

II.6 Solutions self-consiste Schrödinger et Équations de Poisson

Nous présentons un modèle auto-coherent qui permet la résolution des équations couplées de Poisson Schrödinger. Cette approche est justifiée par plusieurs résultats présentés dans [37-38-39]. Pour la résolution de l'équation de Schrödinger, il faut connaît le potentiel électrostatique [V(x)] ; et pour résoudre de l'équation de Poisson, il faut connaît les concentration des porteurs ou la densité de charge [ρ(x)]. Il y a donc auto cohérence entre les résolutions de l'équation de Poisson 2D, et l'équation de Schrödinger 1D. On peut illustrer le système auto cohérent par le système suivant (chaque tranche x) [40].

L'équation de Schrödinger est couplée avec l'équation de Poisson, qui cette dernière elle nous donne le potentiel électrostatique :

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*}\frac{\partial^2\psi(x)}{\partial x^2}+V(x)\psi(x)=E\psi(x) \quad (II.43)$$

L'équation de Poisson unidimensionnelle s' écrit comme suit:

$$\frac{d}{dx}\left(\varepsilon_s(x)\ \frac{d}{dx}\right)\emptyset(x)=-\frac{q[N_D(x)-n(x)]}{\varepsilon_0} \quad (II.44)$$

$\varepsilon_s(x)$: la constante diélectrique $\varepsilon_s(x)=\varepsilon_0\varepsilon_r(x)$

ε_0: lapermittivite du vide ,$\varepsilon_r(x)$: lapermittivite du milieu

$\emptyset(x)$:le potentiel électrostatique

$N_D(x)$: la concentration du donneur ionisé

$n(x)$:la distribution de la densité électronique

q :charge électronique e =$\pm 1.6\ 10^{-19}$ c

Pour trouver la distribution d'électrons dans la bande de conduction, on peut mettre l'énergie potentielle V est égal à l'énergie de décalage de la bande de conduction ΔE_C. Dans un puits quantum l'énergie potentielle V est liée au potentiel électrostatique $\emptyset(x)$ comme suit

$$V = \Delta E_c - q\emptyset(x) \qquad (II.45)$$

La fonction d'onde $\psi(x)$ dans l'équation de Schrödinger et la densité électronique n(x) dans l'équation de poisson sont liées par la relation suivante :

$$n = \sum_{k=1}^{m} \psi_k^* \psi_k(x) \qquad (II.46)$$

m : le nombre d'état liés

n_k: L'occupation électrique pour chaque état

La concentration d'électrique pour chaque état peut exprimer par :

$$n_k = \frac{m^*}{\pi\hbar^2} \int_{E_K}^{\infty} \frac{1}{1+e^{\frac{E-E_F}{K_B T}}} \, dE \qquad (II.47)$$

Apres que la simplification d'équation

On obtient :

$$n_k = \frac{m^* K_B T}{\pi\hbar^2} \ln\left[1 + \exp\left(\frac{E_F - E_K}{K_B T}\right)\right] \qquad (II.48)$$

E_F: l'énergie du niveau Fermi

E_K: l'énergie propre

K_B: $1.38\ 10^{-23} \frac{J}{K}$

T : température

Nous utilisons une procédure d'itération pour obtenir une cohérence solutions pour l'équation de Schrödinger. On Commence avec un potentiel d'essai v(x) , les fonctions d'onde, et leurs énergies propres correspondantsE_K sont utilisées pour calculer la distribution de densité électronique n(x) , et la concentration de donneurN_D peut être utilisée pour calculer $\emptyset(x)$dans l'équation (II.44). La nouvelle énergie potentielle v(x) est obtenue à partir de l'équation (II.43). L'itération sera donne les solutions finales auto-cohérentes (self-consiste) pour v(x) et n(x)qui satisfont certains critères d'erreur. Plus de détails sur la méthode de calcul peuvent être trouvés dans la référence [41].

II.7 Conclusion

Dans ce chapitre nous avons étudié les solution de l'équation de Schrödinger pour structures des puits quantiques et dans présence et absence le champ électrique extérieur.

Chapitre III
Résultats et discussions

Chapitre III

Résultats et Discutions

III.1 Introduction

Dans la physique des matériaux plusieurs d'efforts ont utilisé pour d'obtenir des bons et des meilleurs résultats pour la compréhension du comportement des matériaux. Et pour cela, la simulation joue un grand rôle et important dans les ´études des propriétés physiques des matériaux, son intérêt est de minimiser les d´dépenses des expériences couteuses, dangereuses ou même inaccessibles au laboratoire, et elle permet aussi de modéliser les phénomènes difficiles ou impossibles à réaliser expérimentalement.

III.2 L'effet du champ électrique et la nature de structure

Nous avons résolu numériquement l'équation de Schrödinger par la méthode de tir (shooting methode) pour déterminer les niveaux d'énergies et les fonctions d'ondes correspondantes dans un semi-conducteur de puits quantiques à GaAs / Al_xGa_{1-x} As potentiel de confinement fini. En suite dans ce travail on calcule les éléments dipolaire de quelques structure à puits quantique à base de GaAs / Al_xGa_{1-x} As, tel que ces structures ont publiées dans les références [42,43] .

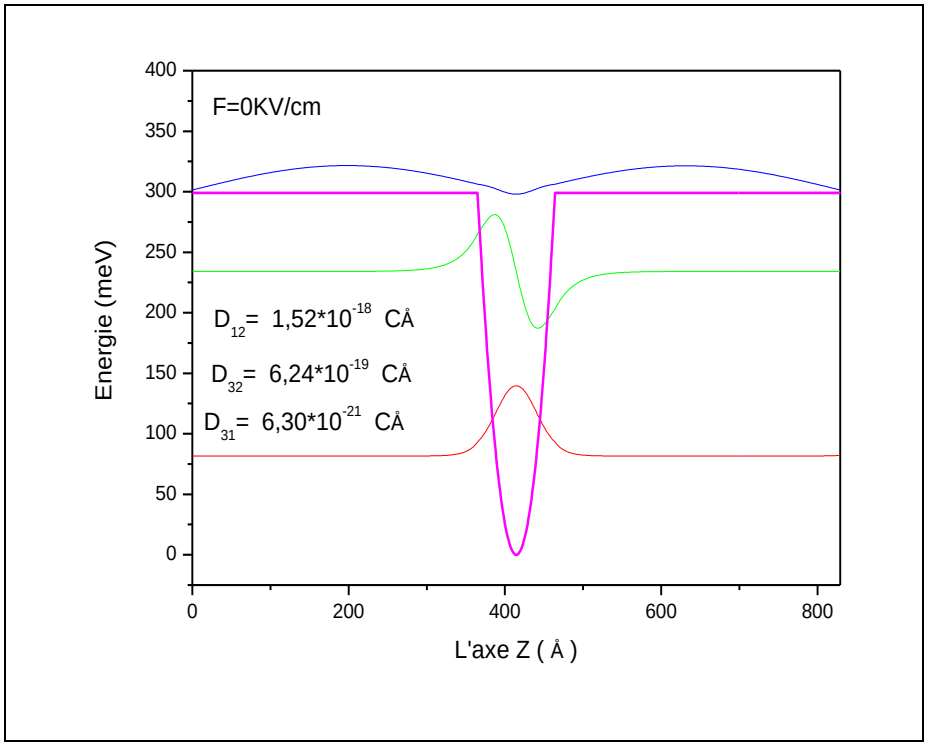


Figure 19: Schéma de bande d'une structure à puits quantique parabolique

Fig. 19. représente la structure et le profil de la bande de conduction , et comme indique les énergies de confinement de l'état fondamental et ceux de premier état et de deuxième état excités et ses fonctions d'onde correspondent sur la direction positive de croissance dans un puits quantique de forme parabolique de paramètres suivants : barrières de la largeur L_b=365Å et puits de la largeur L_w=99Å ,m_w=0.067m_0 , m_b=0.1002m_0 et v_b=299,28mev (v_b=0.6 .1,247x, x=0,4) tel que les paramètres de calcule et les dimensions de structure sont publiés in réf[42] et la méthode utilisée dans ses calculs est la méthode de la différence finie , et comme mentionner ici que ses fonctions d'onde sont les carrés qui représentent la probabilité de présence des électrons. ce chevauchement entre les fonctions d'onde augmente l'élément de matrice dipolaire.

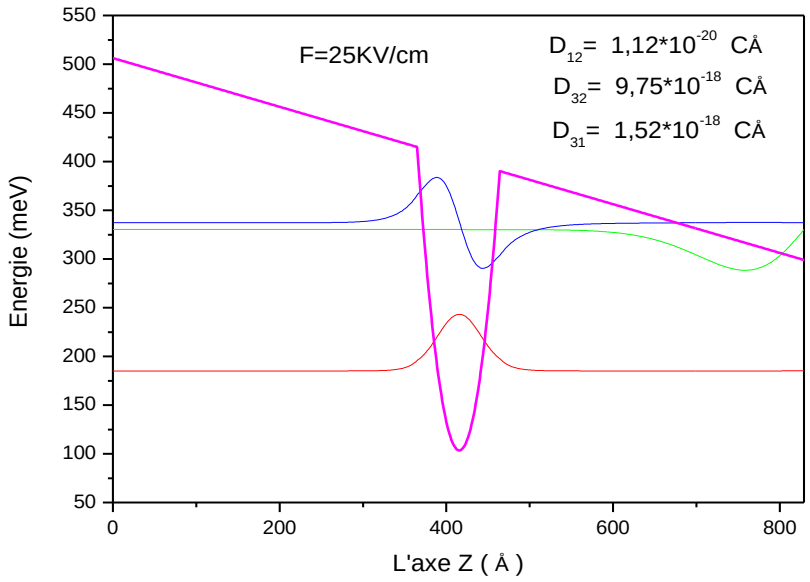


Figure 20: Schéma de bande d'une structure à puits quantique parabolique.

Fig. 20. Représente la même structure de fig.1. Mais sous un champ électrique d'intensité de 25KV/cm, dans ce cas le potentiel de la bande de conduction est incliné et sa pente est (eF), et l'allure des fonctions d'onde sont modifiée aussi.

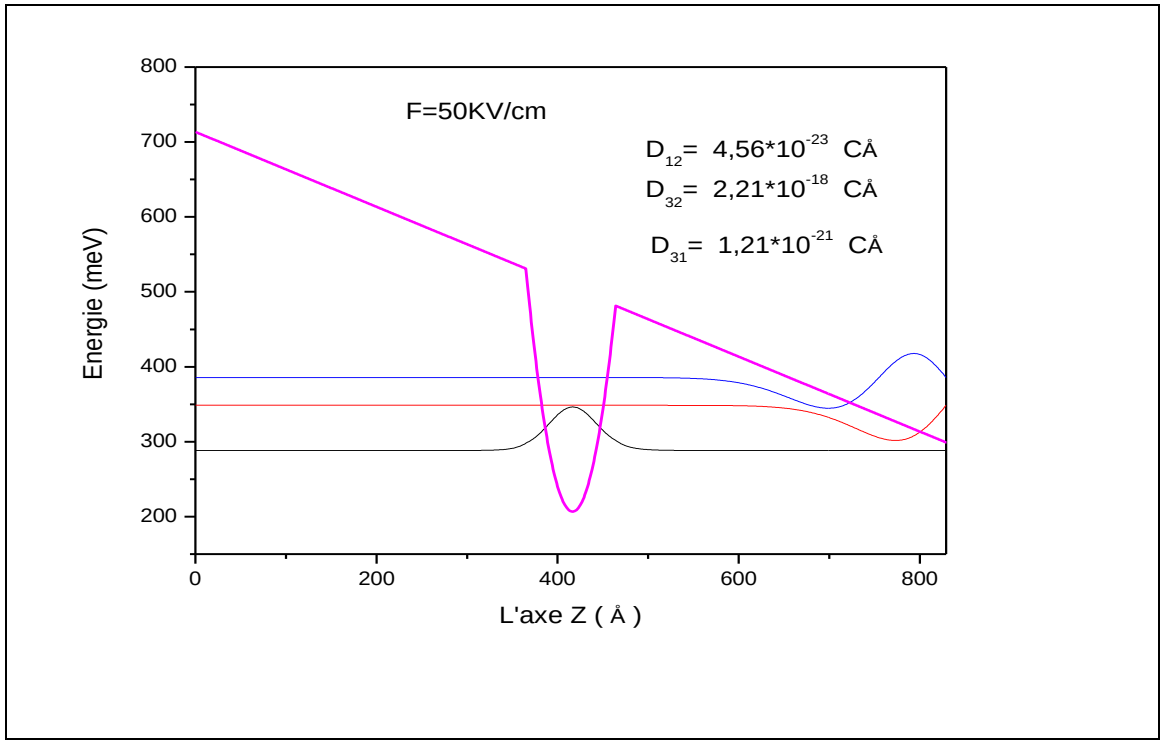


Figure 21: Schéma de bande d'une structure à puits quantique parabolique.

La même chose pour la fig.21. mais la structure sous un champ électrique d'intensité de 50KV/cm. L'influence de champ électrique est sous la forme eF(L_b-z). dans les figures en bas nous avons calculé les niveaux énergétiques et les fonctions d'onde correspondent par la méthode de tir (shooting méthode), et comme nous avons calculé les éléments de matrice dipolaire des transitions possibles qui sont D_{12}, D_{23} et D_{13} correspendent des transitions 1-2, 2-3 et 1-3 respectivement.

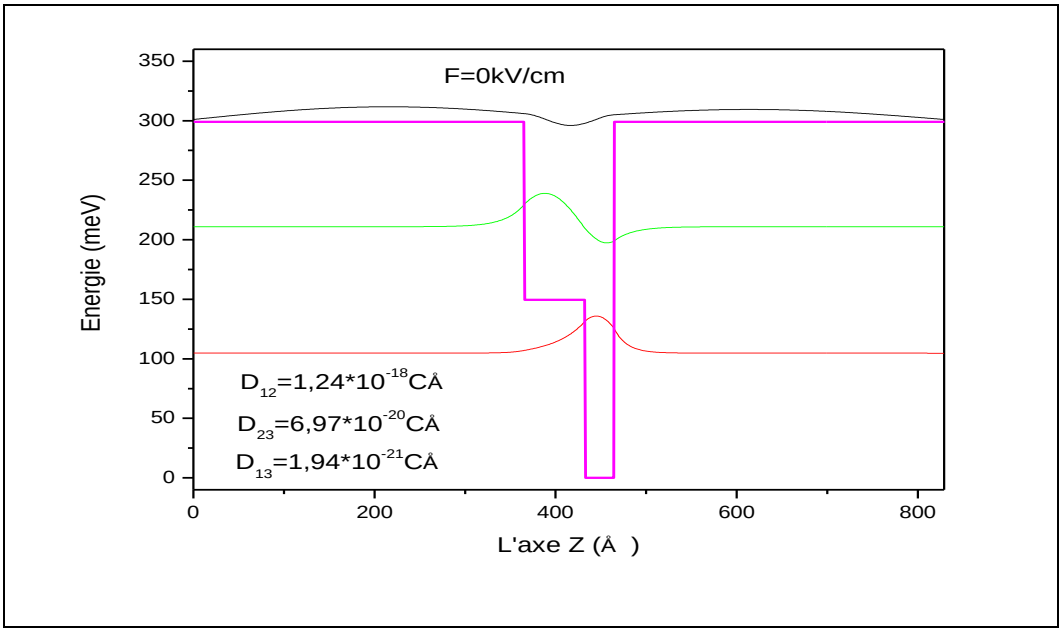


Figure 22: Schéma de bande d'une structure à puits quantique.

Fig. 22. représente la structure et le profil de la bande de conduction , et comme indique les énergies de confinement de l'état fondamental et ceux de premier état et de deuxième état excités et ses fonctions d'onde correspondent sur la direction positive de croissance dans un puits quantique a les paramètres suivants : barrières de la largeur L_{b1}= L_{b3}=365Å , L_{b2}=365Å et puits de la largeur L_w=99Å ,m_w=0.067m_0 , m_b=0.1002m_0 et v_b=299,28mev (v_b=0.6 .1,247x, x=0,4) tel que les paramètres de calcule et les dimensions de structure sont publiés in réf [42] et la méthode utilisée dans ses calculs est la méthode de la différence finie, et comme mentionner ici que ses fonctions d'onde sont les carrés qui représentent la probabilité de présence.

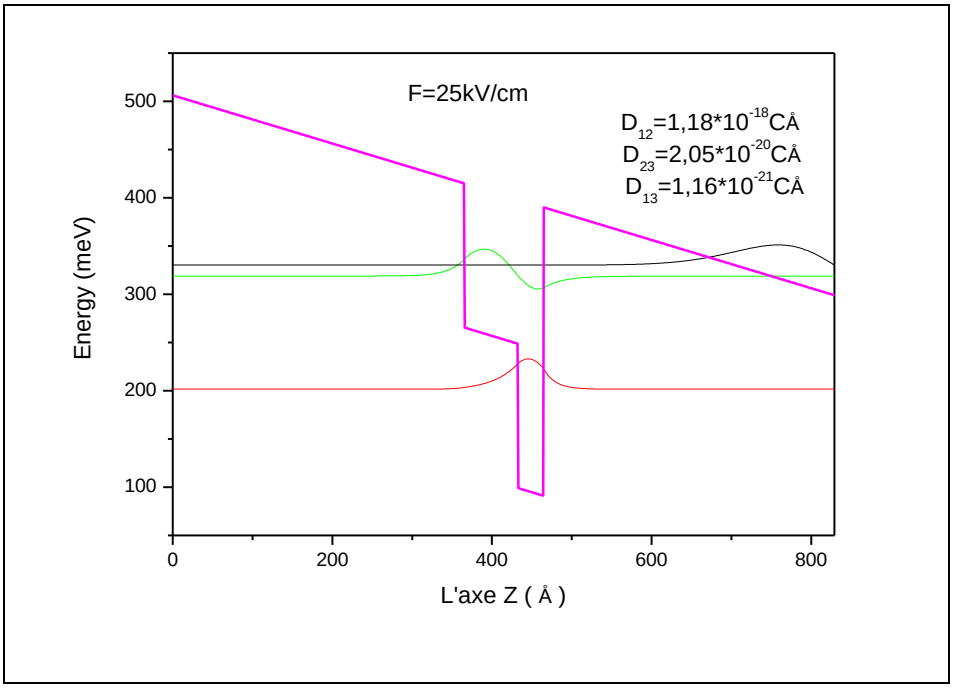


Figure 23: Schéma de bande d'une structure à puits quantique.

La fig.23. Représente la même structure de la fig.22. Mais cette fois la structure est sous un champ électrique de l'intensité de 25KV/cm. Dans les figures en bas nous avons calculé les éléments de matrice dipolaire qui sont exprimés en (CÅ).

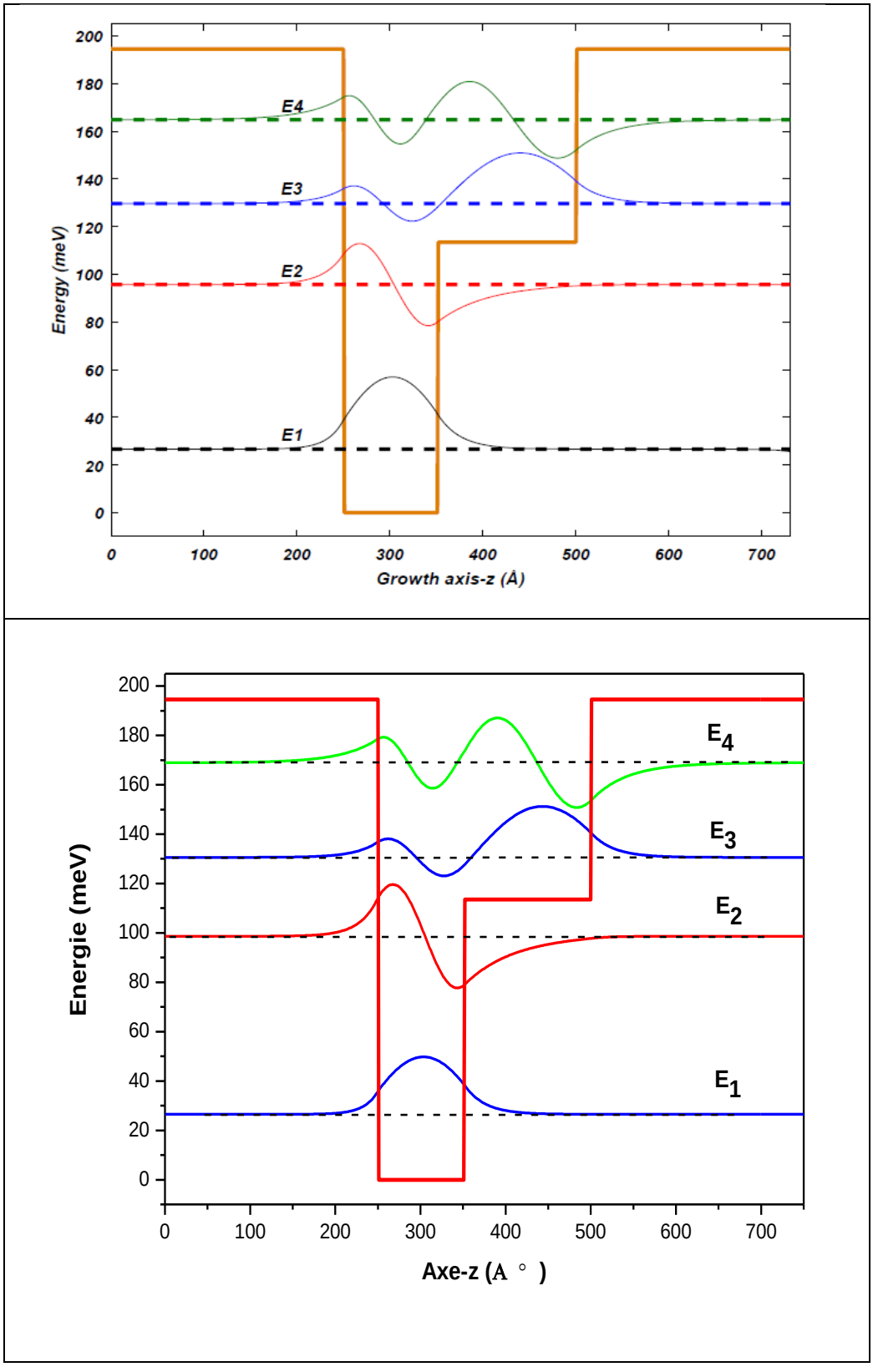


Figure 24: Schéma de bande d'une structure à puits quantique.

a) Publié in référence [43] avec model de non parabolicité, b) notre travail avec model de parabolicité

Fig. 24. représente la structure et le profil de la bande de conduction , et comme indique les énergies de confinement de l'état fondamental et ceux de premier état et de deuxième état excités et ses fonctions d'onde correspondent sur la direction positive de croissance dans un puits quantique des paramètres suivants : barrières de la largeur $L_{b1}= L_{b2}$=200Å et puits de la largeurs L_{w1}=101Å , L_{w2}=149Å avec ($L_{w1}+ L_{w2}$=250Å) , m_{w1}=0.067m_0 , $m_{b1}= m_{b2}$=0.08692m_0 et $v_{b1}=v_{b2}$=194,5mev, v_{w2}=113,48meV, m_{w2}=0.07862m_0, Sachant que le schéma en haut est publié en réf[43] tel que les résultats obtenus est calculés par (shooting méthode) méthode de tir dans le model de non parabolicité (la masse effective dépende de l'énergie) et dans le schéma bas le calcul fait par la même méthode (shooting) mais dans le model de parabolicité et les résultats sont regroupés dans les tableaux 3 et 4 respectivement avec une comparaison.

A partir des résultats cités dans les tableaux Tableau 3. et le Tableau 4. On remarque clairement que lorsque les énergies de séparation entre les états E_{ij} augments que l'élément de matrice dipolaire diminue également.

Niveau	1	2	3	4
Energie (MeV)	26.51	98.63	130.59	168.93

Table 3 Niveaux énergiques calculés dans le model de parabolicité de la structure de la fig.24.

transition	E_{ij}(MeV) model de non parabolicité [43]	Zij(Å) model de non parabolicité [43]	E_{ij}(MeV) model de parabolicité	Zij(Å) model de parabolicité
E_{12}	69,06	28,0844	72,12	27,3507
E_{13}	103,06	0.993	104,08	3,7737
E_{14}	138,21	2,1397	142,21	1,4259
E_{23}	34,00	33,9716	31,96	31,7480
E_{24}	69,15	25,0276	70,30	21,6891
E_{34}	35,15	48,0417	38,34	44,7248

Table 4 : Représente les énergies de séparation et élément de matrice dipolaire par le model de non parabolicité [43] et le model de parabolicité.

III.3 Conclusion

Dans ce travail, la méthode utilisée dans les calculs actuels basés sur le formalisme de la solution de l'équation de Schrödinger par la méthode de Tire, Il a déjà été donné ailleurs, la solution de l'équation de Schrödinger pour la structure à puits quantiques sous l'application du champ électrique pour déterminer l'élément de matrice dipolaire. Une très bonne validation est obtenue.

Conclusion

Conclusion générale

Dans notre modeste recherche, nous avons élaboré le thème intitulé: calcul numérique des éléments de la matrice du moment dipolaire d'un super réseau à base de ($Al_xGa_{1-x}As$ /GaAs). Nous avons calculé un paramètre très important décrivant les propriétés optiques des matériaux. Ce paramètre est l'élément de matrice de moment dipolaire. Nous avons aussi étudié l'hétéro structuré dites super réseaux (SR).

Après avoir résolu théoriquement l'équation de Schrödinger dans les puits quantiques par différents méthodes. Nous avons utilisé le programme Fortran afin de résoudre numériquement l'équation de Schrödinger par la méthode shooting. Ce travail nous a permis de déterminer les valeurs d'énergies et les fonctions d'ondes correspondantes dans une structure à puits quantique ainsi que le moment dipolaire électrique de quelques structure à puits quantique carré et parabolique à base de GaAs / $Al_xGa_{1-x}As$. Nos résultats sont comparés avec d'autres résultats publiés.

.

Bibliographie

[1] L. Esaki and R. Tsu. Superlattice and negative differential conductivity in semiconductors. IBM Journal of Research and Développent, 14 :61‑65, 1970.

[2] D. Galayko «Introduction des composants à semi conducteur»,cours ; 2005; Unité enseignement Elec -info pour master ACSI à l'UPMC.

[3] M. Henry, et Fanet Hervé .Physique des semi-conducteurs et des composants électroniques. 6^{e}édition, Paris, Dunod, 2009.

[4] J.L. Teyssier, Brunet, H. : Introduction _a la physique des mat_eriaux conducteurs et semi-conducteurs avec exercices r_esolus. Dunod (1992).

[5] B. Sapoval, , C. Hermann : Physique des semi-conducteurs. Ellipses (1990)

[6] M.Thierry, Thèse de doctorat, Université de Strasbourg, (2001).

[7] S. Bernard, et C. Hermann. Physique des semi-conducteurs, France, école Polytechnique, 1990, p.284.

[8] A. Chovet et P. Masson. Physique des semi-conducteurs. Marseille, école polytechnique universitaire, 2004, p.74.

[9] N. W. Ashcroft, N. D. Mermin, « Physique des solides », Ed EDP Science, France, (2002).

[10] B. Oliver .Physique des solides, des Semi-conducteurs et Dispositifs. Université de Rennes 1, 2003, p.148.

[11] F. Lévy, « Physique et technologie des semi-conducteurs », Ed PPUR presses polytechniques, (1995).

[12] A. Beiser, Physique Appliquée Cours et Problèmes. McGrawHill, série Schaum(1987).

[13] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu et F. Laloë, Mécanique quantique [détail de l'édition]

[14] J. L. Basdevant et J. Dalibard, Mécanique quantique [détail des éditions]]

[15] Mécanique Quantique Feynman

[16] C. Van de Walle, "II–VI blue/green light emitters. In Semiconductors and Semimetals", Vol. 44, ed, R. Gunshor and A. Nurmikko. San Diego: Academic Press, pp. 122–160, 1997.

[17] P. Y. Dang and Y. R. Wu, Optical polarization anisotropy of tensile strained InGaN/AlInN quantum Wells for TM mode lasers, J. Appl. Phys. 108, 083108 (2010).

[18] R. Teissier, Chari stol, P., &Joullie, A . : Nouveaux lasers à semiconducteurs pour le moyen infrarouge. Images de la physique, 179-185. (2005).

[19] H. Mathieu .Physique des semi-conducteurs et des composants électroniques par H. F. R des sciences. 4ième édition.

[20] D. W. M. Du Mond and J. P. Youtz. J. App. Phys. 11, 357 (1940).

[21] L. Esaka and R. Tsu, IBM J. Res. Develop. 14, 61 (1970).

[22] R. Tsu and L. Esaki, App. Phys. Lett. 22, 562 (1973).

[23] A. Chomatte, B. Devraud, P. Auvray, A. Regreny, J. App. Phys. 59, 3835 (1986).

[24] Cyrille Barreteau, Physique de solide, "crylle.barretteau@cea.fr

htt:/www-dream.cea.fr/spcsi/cbarreteau/physiaue_du_solid/physol.htm.

[25] D. L. Smith and C. Mailhiot, Rev. Mod. Phys. 62, 173 (1990).

[26] M. Wolony et D. Selle. Introduction aux composants à hétérostructures l'onde

électrique, mai-juin, vol 70, 3 (1990) pp.59-74.

[27] G. Bastard, "Wave Mechanics Applied to Semiconductor Heterostructures", Édition de Physique (1989).

[28] H. Schneider, K. V. Klitzing,'' thermionic emission and Gaussian transport of holes in GaAs/AlGa As multiple quantum well structure,'' phys. Rev. B, vol.38, 1988.

[29] T. Makino, J. Glinski, "Transfer matrix analysis of the amplified spontaneous emission of DFB semi-conducteur laser amplifiers," IEEE Journal of Quantum Electronics, vol. 24, no. 8, pp. 15071518, Aug. 1988.

[30] R Tsu, and L. Esaki,Appl.Phys.Letters 22,562(1973)

[31] M .O.Vassel, J. Lee and H.F.LOOKwood, J.Appl.Phys.54(9) ,5206(1983).

[32] A.K.Ghatak and K. Thyagarajan, IEEEJ.Q.E, Vol 24, N°8,1524 (1988)

[33] P. Harrison .Quantum Wells, Wire and Dots, Second Edition. ©2005 John Wiley & Sons, Ltd.

[34] L. Euler. InstitutionesCalculiIntegralis. St Petersbourg, 1768. LeonhardiEuleri Opera Omnia, série I, volume XI, page 424, TeubnerVerlag, Leipzig, 1913.

[35] Ames. Numerical methods for partial differential equations. AcademicPress, New-York, 1977.

[36] N. Trenado. Modélisation et simulation des composants optoélectroniques à puits quantiques (Doctoral dissertation, Université de Rouen) , 2002.

[37] Z. Ren, R.Venugopal, S.Datta, M.Lundstrom. " The ballistic nanotransistor – Asimulation study-", IEDM Tech. Digest, pp .715-718; 2002.

[38] M. Lundstrom, Fellow, IEEE, and Z.Ren. "Essentiel physics of courier transport

in Nanoscale MOSFETs ", IEEE Transations on electron devices, vol. 49, No. 1, January

2002.

[39] M. Heydemmann, Résolution numérique des équations bidimensionnelles de transport Dans les semi-conducteurs, Doctorate dissertation (Paris Sud University, 1972).

[40] O. Simonetti. ' Influence de la quantification en énergie des porteurs sur la

modélisation et la caractérisation électronique des structures MOS à oxyde de grille

ultramince (<3nm)', laboratoire d'automatique et de microélectronique ,France.

[41] I-H. Tan, G. L. Snider, L. D. Chang, and E. L. Hu. "A self-consistent solution of Schrödinger– Poisson équations using a nonuniform mesh." Journal of appliedphysics 68, 8. 4071-4076, 1990.

[42] H. Dakhlaoui. "Tunability of the optical absorption and refractive index changes in step-like and parabolic quantum wellsunderexternalelectricfield." *Optik* 168: 416-423 (2018).

[43] A. Samyh, W. Salhi, A. Rajira, H. Akabli, A. Abounadi, A. Almaggousi. Double two-photon absorption in a asymmetric stepped quantum well in the terahertz range. Superlattices and Microstructures. 130, 560-568(2019).