

Résumé de cours M2 Microélectronique

Module : Physique des composants semi-conducteurs 3

Prof. Abdelhamid BENHAYA

Directeur du Laboratoire d'Electronique Avancée
Responsable Salle Blanche

Département d'Electronique
Faculté de Technologie
Université Batna 2

Domaines d'intérêt:

Technologie des semi-conducteurs
(Matériaux et dispositifs photovoltaïques)

e-mail: a.benhaya@univ-batna2.dz
benhaya_abdelhamid@yahoo.fr

Tel: +213 (0)7 73 87 37 84



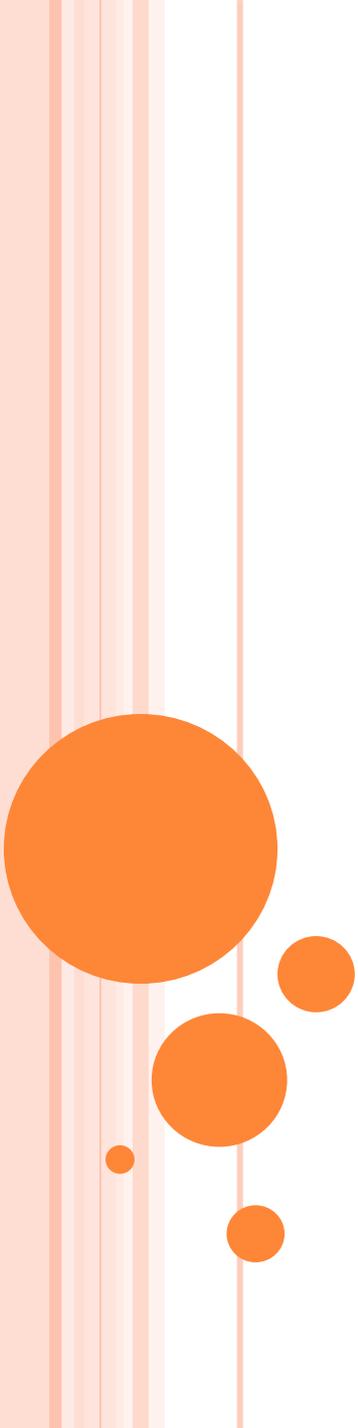
BIBLIOGRAPHIE

Langue Anglaise

1. Marius Grundmann, The Physics of Semiconductors (Chapter 13), Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2006.
2. <https://nanohub.org/resources/5346>
3. <https://nanohub.org/courses/FON2>

Langue Française

1. H. MATHIEU, physique des semi-conducteurs et des composants électroniques (Chapitres 10 et 12) , Dunod, 2001.
2. <https://www.polytech-lille.fr/cours-atome-circuit-integre/>



Partie 2

Puits quantiques

PUITS QUANTIQUES ET SUPERRÉSEAUX

PLAN DE L'EXPOSÉ

- **Techniques de croissance des cristaux semi-conducteurs, caractéristiques et contraintes;**
- **Exemples de matériaux et d'hétérostructures simples;**
- **Différents types d'hétérostructures et leurs caractéristiques;**
- **Comment obtenir une grande mobilité;**
- **Spectre d'énergie et fonction d'onde**
 - **Cas d'un puits de profondeur infini;**
 - **Cas d'un puits de profondeur fini**
- **Multipuits quantiques**
 - **Multipuits indépendants (non couplés).**

- **Multipuits couplés**
 - **Fonctions d'onde**
 - **Valeurs propres**
 - **Diagramme d'énergie**
- **Superréseaux**
 - **Formation et analogie**
 - **Structure de sous-bandes d'énergie**
 - **Comparaison Puits unique-Superréseau**
- **Modèle de Kronig-Penny**
 - **Solutions en tenant compte du théorème de Bloch**
 - **Effet de la largeur du puits**
 - **Courbe de dispersion**

PUITS QUANTIQUES

Techniques de croissance de cristaux semi-conducteurs

Les techniques qui permettent de réaliser des couches monocristallines, sur un substrat convenablement choisi, avec une maîtrise exceptionnelle de la composition chimique, des qualités cristallographiques et de l'épaisseur sont:

- ❑ Epitaxie par jet moléculaire EJM (MBE: Molecular Beam Epitaxy);
- ❑ Dépôt en phase vapeur à partir d'organo-métalliques (MOCVD: Metal-Organic Chemical Vapour Deposition).



PUITS QUANTIQUES

Caractéristiques des deux techniques de dépôt

- ❑ Très faible vitesse de dépôt, pratiquement couche atomique par couche atomique;
- ❑ Réalisation de couches de matériaux différents et/ou différemment dopés, avec des profils de composition et/ou de dopage extrêmement abrupt.
- ❑ La discontinuité d'une couche à l'autre s'étend typiquement sur une épaisseur de l'ordre de la mono-couche atomique.



PUITS QUANTIQUES

Contraintes de réalisation de couches de qualité

La condition nécessaire à la réalisation d'une bonne hétéro-épitaxie d'un semi-conducteur SC1 sur un semi-conducteur SC2 est que les deux matériaux aient:

- ❑ Même structure cristalline;
- ❑ Des paramètres de maille voisins.



PUITS QUANTIQUES

Effets indésirables

- ❑ Si les structures cristallines sont différentes, le dépôt est généralement amorphe ou dans le meilleur des cas polycristallin;
- ❑ Si les paramètres de maille sont différents, le matériau constituant la couche de plus grande épaisseur impose sa maille à l'autre, au moins au voisinage de l'interface. Ceci entraîne l'existence, dans le matériau de faible épaisseur, d'une contrainte biaxiale dans le plan de la couche.



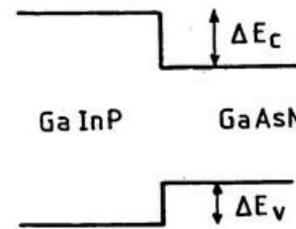
PUITS QUANTIQUES

Exemple de matériaux

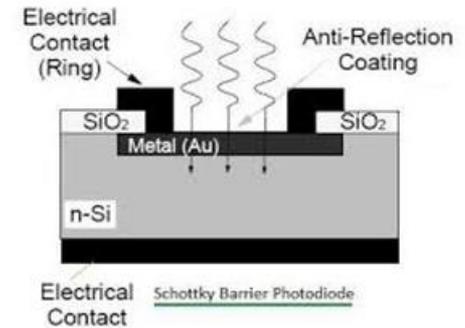
Les semi-conducteurs, tels que les **composés III-V** ou **II-VI** et leurs alliages respectifs, peuvent être épitaxiés les uns sur les autres.

Exemple d'hétérostructures simples

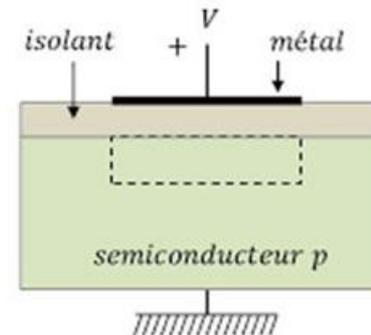
Les hétérostructures les plus simples sont d'une part les **hétérojonctions** entre **deux semi-conducteurs différents**, et d'autre part les structures **Schottky** et **MIS**.



Hétéro SC1/SC2



Structure Schottky



Structure MIS



PUITS QUANTIQUES

Types d'hétérostructures

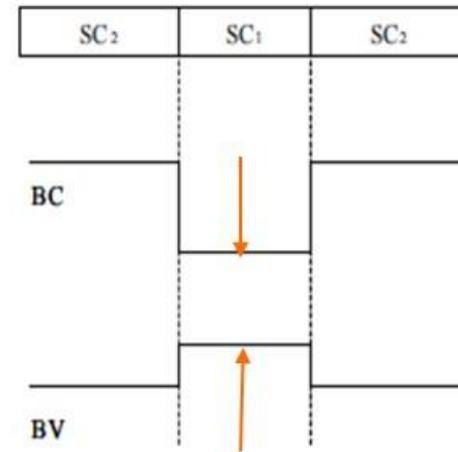
Hétérostructure de type I

Les **extrema** des bandes de valence et de conduction sont **situés dans le même matériau**, c'est-à-dire dans la même région de l'espace.

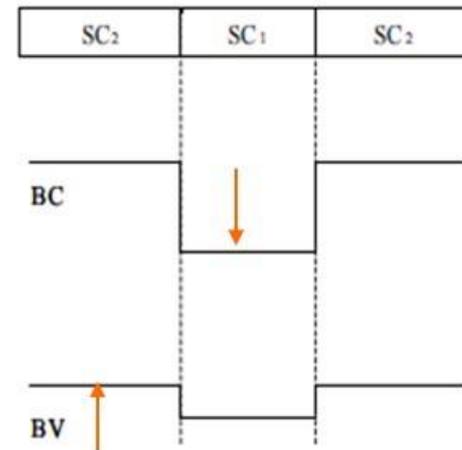
Hétérostructure de type II

Les extrema des bandes de valence et de conduction ne sont pas situés dans la même région de l'espace.

Type I



Type II



PUITS QUANTIQUES

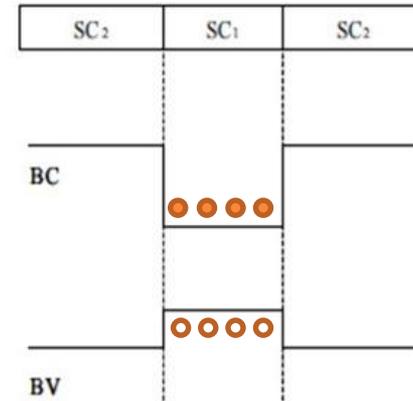
Recombinaison dans les hétérostructures

Dans l'hétérostructure de **type I**, les **électrons** et les **trous** sont **piégés** dans le **même semi-conducteur**, ici SC1

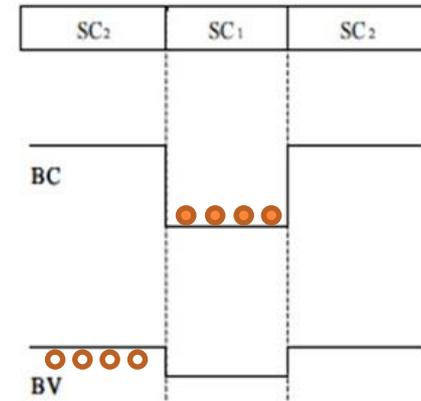
Dans l'hétérostructure de **type II**, les **électrons** et les **trous** sont spatialement **séparés**.

Dans l'hétérostructure de **type I**, leurs **recombinaisons** seront **importantes**, dans l'hétérostructure de **type II**, ces **recombinaisons** seront beaucoup **moins probables**.

Type I



Type II



PUITS QUANTIQUES

Différentes cas

- **Cas1: Structure où SC1= GaAs et SC2= $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ (pour $x=0.3$)**

$$\Delta E_g = 0.428 \text{ eV} \quad \Delta E_c = 0.383 \text{ eV} \quad \Delta E_v = - 0.045 \text{ eV}$$

ΔE_c étant **positif** et ΔE_v **négalif**, l'hétérostructure est de **type I**.

- **Cas2: SC2=GaSb et SC1=InAs.**

$$\Delta E_g = 0.39 \text{ eV} \quad \Delta E_c = 0.84 \text{ eV} \quad \Delta E_v = 0.45 \text{ eV}$$

ΔE_c et ΔE_v **sont de même signe**, l'hétérostructure est de **type II**.



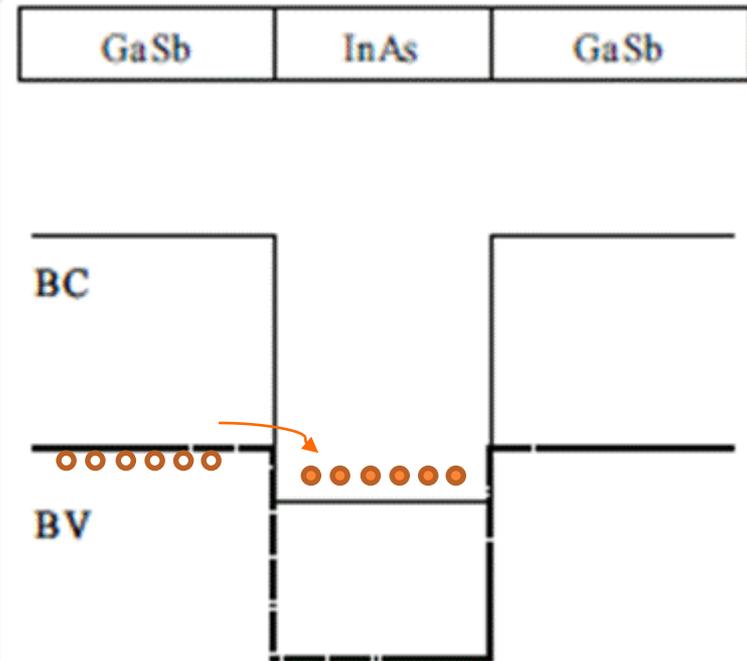
PUITS QUANTIQUES

Remarque importante

L'hétérostructure du cas 2 présente une spécificité toute particulière résultant du fait que la **bande de conduction** dans **InAs** a une énergie **inférieure** à la **bande de valence** dans **GaSb**.

Il en résulte que **les électrons liés de la bande de valence de GaSb se libèrent dans la bande de conduction de InAs**.

La structure présente un **comportement semi-métallique**.



PUITS QUANTIQUES

Comment obtenir une grande mobilité des porteurs

Si on dope le SC2 avec des atomes donneurs, les électrons fournis par les atomes donneurs quittent la bande de conduction du semi-conducteur SC2 pour s'accumuler dans le puits de potentiel que constitue la bande de conduction du semi-conducteur SC1.

L'intérêt évident de ce type de structure est de disposer d'un matériau, le semi-conducteur SC1, fortement dégénéré sans pour autant être dopé.

La séparation spatiale des porteurs libres et des centres diffusants, que sont les donneurs ionisés, diminue considérablement les processus de diffusion et par suite permet d'obtenir une grande mobilité ($2 \cdot 10^6 \text{cm}^2 \text{V}^{-1} \text{s}^{-1}$).

La conductivité $\sigma_{//}$ dans le plan de la structure est très importante.



PUITS QUANTIQUES

Spectre d'énergie

1. Séparation des mouvements

Si l'épaisseur L_1 du semi-conducteur SC1 est faible, ($L_1 < 200 \text{ \AA}$), les états électroniques ne correspondent plus au bas de la bande de conduction, mais sont quantifiés en structure de sous-bandes d'énergie comme dans le cas de la couche d'inversion d'une structure MOS.

Là aussi, le mouvement des électrons est **quasi-libre** dans le **plan de la structure** et est **quantifié** dans la **direction perpendiculaire**.



PUITS QUANTIQUES

Spectre d'énergie (suite)

2. Fonction d'onde

On peut *séparer le mouvement* dans le *plan de la structure* du mouvement dans la *direction perpendiculaire* et écrire la fonction d'onde des électrons sous la forme:

$$\Psi(r) = \xi(z)e^{i(k_x x + k_y y)}\varphi(x, y)$$

$\varphi(x, y)$ est la fonction de Bloch et $\xi(z)$ une fonction enveloppe qui décrit la quantification du mouvement suivant z .

Dans l'approximation de la masse effective le mouvement suivant z est régi par l'équation de Schrödinger.

$$\frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{d^2 \xi(z)}{dz^2} + (E - V(z))\xi(z) = 0$$



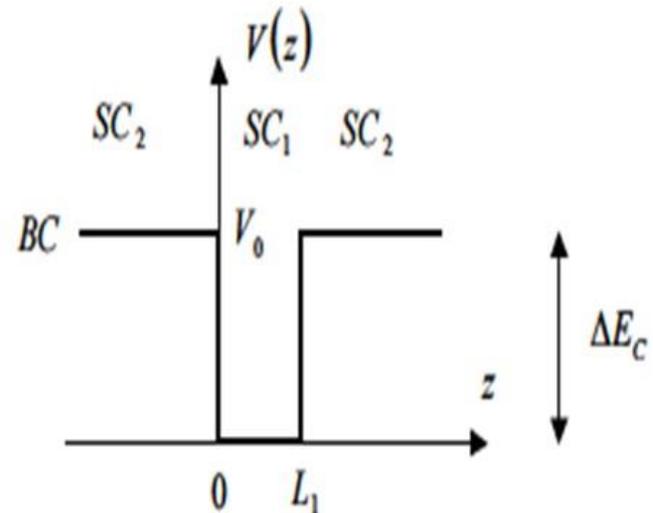
PUITS QUANTIQUES

Spectre d'énergie (suite)

3. Energie potentielle

L'énergie potentielle $V(z)$ est celle du puits carré à une dimension, défini, en prenant l'origine des énergies au bas de la bande de conduction du semi-conducteur SC1, par:

$$\begin{cases} V(z) = \Delta E_c & \text{pour } z < 0 \text{ et } z > L_1 \\ V(z) = 0 & \text{pour } 0 < z < L_1 \end{cases}$$



PUITS QUANTIQUES

Spectre d'énergie (suite)

4. Sous-bandes d'énergie

Il en résulte une structure de sous-bandes d'énergie avec une quantification discrète suivant k_z et une variation pseudo-continue suivant $k_{//}$.

L'énergie totale d'un électron s'écrit:

$$E(k) = E_c + \frac{\hbar^2 k_{//}^2}{2m_e} + E$$

Remarque: Les énergies E des minima des différentes sous-bandes sont évidemment fonction de la profondeur et de la largeur du puits de potentiel.



PUITS QUANTIQUES

Spectre d'énergie et fonction d'onde selon le type du puits de potentiel

1. Puits de profondeur infinie

Si ΔE_c est très importante, on peut supposer un potentiel de hauteur infinie.

Le potentiel s'écrit alors:

$$V(z) = \infty \quad \text{pour } z < 0 \text{ et } z > L_1$$

$$V(z) = 0 \quad \text{pour } 0 < z < L_1$$

Les conditions aux limites sont par conséquent:

$$\xi(z=0)=0$$

$$\xi(z=L_1)=0$$

Dans le puits de potentiel $V(z)=0$, l'équation de Schrödinger s'écrit:

$$\frac{d^2\xi(z)}{dz^2} + K^2\xi(z) = 0$$

$$K = \frac{\sqrt{2m_e E}}{\hbar}$$



PUITS QUANTIQUES

Spectre d'énergie et fonction d'onde selon le type du puits de potentiel

1. Puits de profondeur infinie (Suite)

Les solutions de l'équation précédente sont de la forme:

$$\xi(z) = A \sin(Kz + \varphi)$$

L'application des conditions aux limites nous donne:

$$\xi(z=0) = 0 \quad \text{donc } \varphi = 0$$

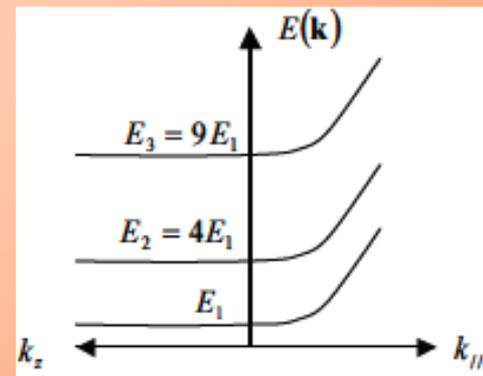
$$\xi(z=L_1) = 0 \quad \text{donc } K = n \pi / L_1$$

Compte tenu de la définition de K, l'expression de l'énergie est donnée par:

$$E = \frac{\hbar^2 K^2}{2m_e} \quad E_n = n^2 \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m_e L_1^2}$$

L'expression de l'énergie totale est:

$$E(k) = E_c + \frac{\hbar^2 k_{//}^2}{2m_e} + n^2 \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m_e L_1^2}$$



PUITS QUANTIQUES

Spectre d'énergie et fonction d'onde selon le type du puits de potentiel

1. Puits de profondeur infinie (Suite)

Dans la mesure où $\phi=0$ et $K=n\pi/L_1$, les fonctions d'onde des électrons dans les différentes sous-bandes de conduction sont données par:

$$\xi(z) = A \sin\left(\frac{n\pi}{L_1} z\right)$$

La condition de normalisation s'écrit:

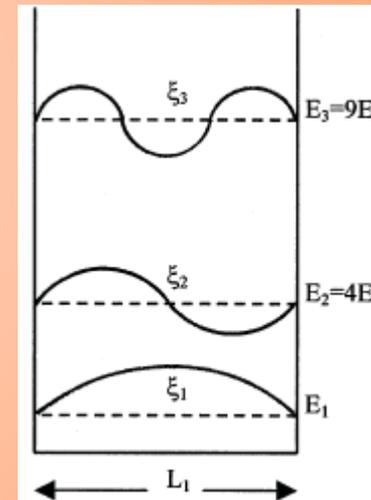
$$\int_0^{L_1} |\xi(z)|^2 dz = 1 \text{ soit } A^2 \int_0^{L_1} \sin^2\left(\frac{n\pi}{L_1} z\right) dz = 1$$

On obtient après transformation

$$\frac{A^2}{2} \int_0^{L_1} \left(1 - \cos\left(\frac{2n\pi}{L_1} z\right)\right) dz = 1$$

ce qui donne: $A = \sqrt{2/L_1}$

Finalement, on a : $\xi(z) = \sqrt{2/L_1} \sin\left(\frac{n\pi}{L_1} z\right)$



PUITS QUANTIQUES

Spectre d'énergie et fonction d'onde selon le type du puits de potentiel

1. Puits de profondeur infinie (Suite)

Exemple: Prenons la structure: $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_{\text{SC2}}\text{GaAs}_{\text{SC1}}\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, avec $x=0,3$ et $L_1=110 \text{ \AA}$ ($\text{SC2}=\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ et $\text{SC1}=\text{GaAs}$)

Sachant que La masse effective des électrons dans GaAs est:

$$m_e = 0,067 m_0.$$

On obtient:

$$E_n = 48 n^2 \text{ (meV)}$$

Et par conséquent:

- $E_1=48 \text{ meV}$;
- $E_2=192 \text{ meV}$
- $E_3=432 \text{ meV}$



PUITS QUANTIQUES

Spectre d'énergie et fonction d'onde selon le type du puits de potentiel

2. Puits de profondeur finie

Dans le cas où l'énergie de confinement des électrons n'est plus négligeable devant la hauteur de la barrière de potentiel (ΔE_c n'est pas très important ou L_1 est très petit), les résultats précédents sont modifiés par la prise en considération de la profondeur finie du puits de potentiel.

On définit le puits comme suit:

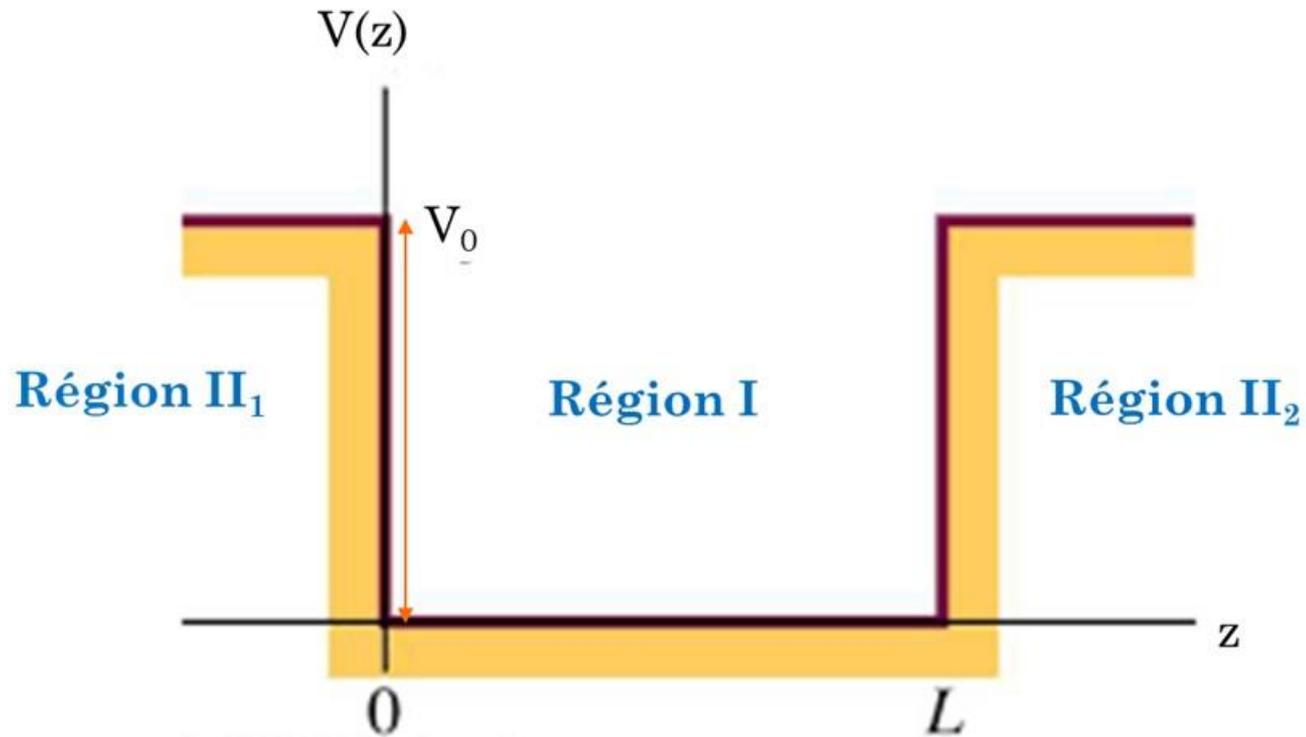
$$\begin{aligned} V(z) &= V_0 && \text{pour} && z < 0 \text{ et } z > L_1 \\ V(z) &= 0 && \text{pour} && 0 < z < L_1 \end{aligned}$$

Dans ce cas, le mouvement des électrons d'énergie $E < V_0$ n'est plus limité à l'intervalle $[0, L_1]$, mais les électrons ont une probabilité non nulle de se trouver à l'extérieur du puits.

Il ya dans ce cas **trois régions** à considérer.



LES TROIS RÉGIONS À CONSIDÉRER.



PUITS QUANTIQUES

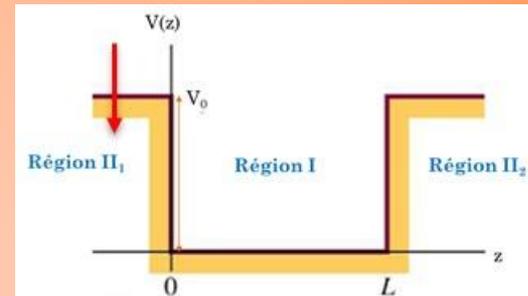
Spectre d'énergie et fonction d'onde selon le type du puits de potentiel

2. Puits de profondeur finie (suite)

Région II₁ : z < 0

L'équation de Schrödinger s'écrit:

$$\frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{d^2 \xi(z)}{dz^2} + (E - V_0) \xi(z) = 0$$



m_2 : la masse effective des électrons dans le semi-conducteur SC2.

L'énergie des électrons est inférieure à V_0 , donc $(V_0 - E) > 0$ et L'équation s'écrit:

$$\frac{d^2 \xi(z)}{dz^2} - K_2^2 \xi(z) = 0 \quad \text{avec } K_2 = \frac{\sqrt{2m_2(V_0 - E)}}{\hbar}$$

La condition $\xi_{II_1}(z \rightarrow -\infty) = 0$, donne:

$$\xi_{II_1} = A e^{K_2 z}$$

PUITS QUANTIQUES

Spectre d'énergie et fonction d'onde selon le type du puits de potentiel

2. Puits de profondeur finie (suite)

Région I: $0 < z < L_1$

Dans cette région $V=0$, et l'équation s'écrit:

$$\frac{d^2 \xi(z)}{dz^2} + \frac{2 m_1 E}{\hbar^2} \xi(z) = 0 \quad \text{avec } K_1 = \frac{\sqrt{2m_1 E}}{\hbar}$$

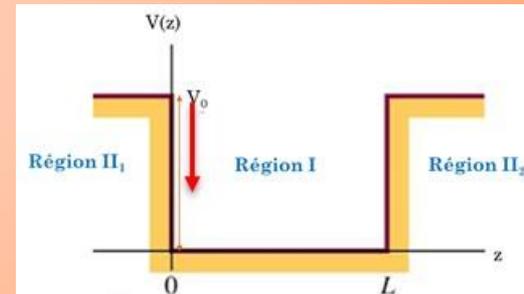
m_1 : la masse effective des électrons dans le semi-conducteur SC1.

L'équation précédente s'écrit:

$$\frac{d^2 \xi(z)}{dz^2} + K_1^2 \xi(z) = 0$$

Dont la solution est de la forme:

$$\xi_I(z) = B \sin(K_1 z + \varphi)$$



PUITS QUANTIQUES

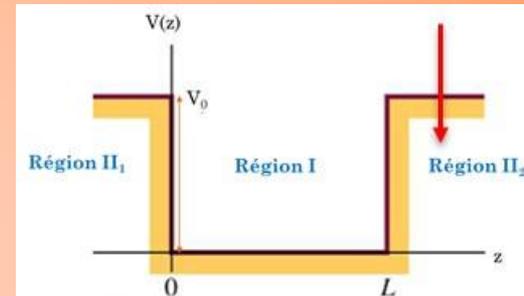
Spectre d'énergie et fonction d'onde selon le type du puits de potentiel

2. Puits de profondeur finie (suite)

Région II₂ : z > L₁

L'équation de Schrödinger s'écrit:

$$\frac{d^2\xi(z)}{dz^2} + \frac{2m_2}{\hbar^2} (E - V_0)\xi(z) = 0$$



m₂: la masse effective des électrons dans le semi-conducteur SC2.

L'énergie des électrons est inférieure à V₀, donc (V₀ - E) > 0 et L'équation s'écrit:

$$\frac{d^2\xi(z)}{dz^2} - K_2^2\xi(z) = 0 \quad \text{avec} \quad K_2 = \frac{\sqrt{2m_2(V_0 - E)}}{\hbar}$$

La condition $\xi_{II_2}(z \rightarrow +\infty) = 0$, donne:

$$\xi_{II_2} = C e^{-K_2 z}$$

PUITS QUANTIQUES

Spectre d'énergie et fonction d'onde selon le type du puits de potentiel

2. Puits de profondeur finie (suite)

Détermination des constantes d'intégration

A partir des conditions aux limites en $z=0$:

$$\xi_{II1}(0) = \xi_I(0) \quad \text{et} \quad \frac{1}{m_2} \xi'_{II1}(0) = \frac{1}{m_1} \xi'_I(0)$$

(continuités de la fonction d'onde et du courant de probabilité)

$$\text{on a:} \quad A = B \sin(\varphi) \quad \text{et} \quad A \frac{K_2}{m_2} = B \frac{K_2}{m_1} \cos(\varphi)$$

A partir des conditions aux limites en $z=L_1$:

$$\xi_I(L_1) = \xi_{II2}(L_1) \quad \text{et} \quad \frac{1}{m_1} \xi'_I(L_1) = \frac{1}{m_2} \xi'_{II2}(L_1)$$

On a:

$$B \sin(K_1 L_1 + \varphi) = C e^{-K_2 L_1}$$

$$B \frac{K_1}{m_1} \cos(K_1 L_1 + \varphi) = -C \frac{K_2}{m_2} e^{-K_2 L_1}$$



PUITS QUANTIQUES

Spectre d'énergie et fonction d'onde selon le type du puits de potentiel

2. Puits de profondeur finie (suite)

Détermination des constantes d'intégration (suite)

A partir des condition aux limites, on obtient:

$$\begin{array}{l} \text{tg } \varphi = \frac{K_1 m_2}{K_2 m_1} \\ \text{tg}(K_1 L_1 + \varphi) = -\frac{K_1 m_2}{K_2 m_1} \end{array} \quad \longrightarrow \quad \text{tg } \varphi = -\text{tg}(K_1 L_1 + \varphi)$$

Et compte tenu du fait que: $\sin^2 \alpha = 1 / (1 + \text{tg}^2 \alpha)$ on obtient:

$$\sin \varphi = \frac{K_1 / m_1}{\sqrt{K_1^2 / m_1^2 + K_2^2 / m_2^2}}$$

PUITS QUANTIQUES

Spectre d'énergie et fonction d'onde selon le type du puits de potentiel

2. Puits de profondeur finie (suite)

Détermination des constantes d'intégration (suite)

D'autre part, l'expression $\operatorname{tg} \varphi = -\operatorname{tg}(K_1 L_1 + \varphi)$ donne $\varphi = -(K_1 L_1 + \varphi) + n\pi$

Ce qui donne:

$$K_1 L_1 = n\pi - 2\varphi$$

En explicitant φ , on obtient:

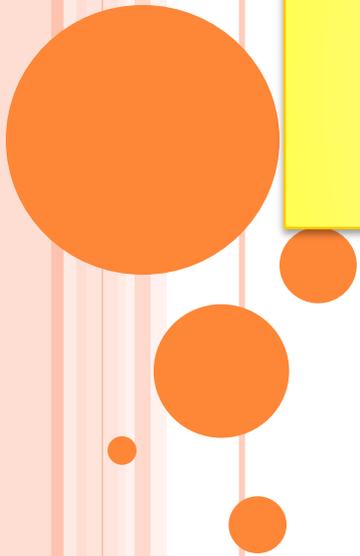
$$K_1 L_1 = n\pi - 2 \operatorname{Arc} \sin \frac{K_1 / m_1}{\sqrt{K_1^2 / m_1^2 + K_2^2 / m_2^2}}$$

Et en explicitant K_1 et K_2 , on obtient l'expression suivante qui donne les valeurs possibles de l'énergie.

$$\frac{\sqrt{2m_1 E}}{\hbar} L_1 = n\pi - 2 \operatorname{Arc} \sin \sqrt{\frac{E}{V_0 m_1 / m_2 + E(1 - m_1 / m_2)}}$$

CHAPITRE 1
EFFETS QUANTIQUES DANS LES
COMPOSANTS
PUITS QUANTIQUES ET
SUPERRÉSEAUX

Partie 3
Multipuits quantiques

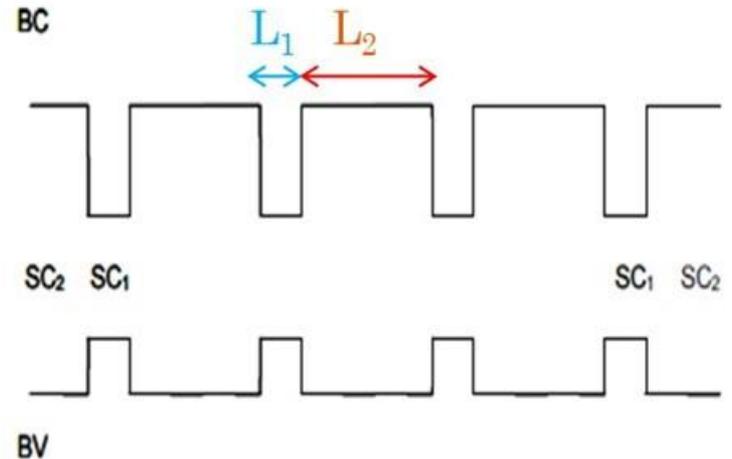


MULTIPIITS QUANTIQUES

Définition

la juxtaposition d'une série de couches alternées d'un semi-conducteur SC1 et d'un semi-conducteur SC2 avec les conditions ($L_1 \approx 100 \text{ \AA}$) et ($L_2 > 200 \text{ \AA}$) est appelée structure à multipuits quantiques.

Avec la condition ($L_1 \approx 100 \text{ \AA}$), les états électroniques dans chacun des puits sont quantifiés et présentent une structure de sous-bandes d'énergie.



MULTIPIUITS QUANTIQUES

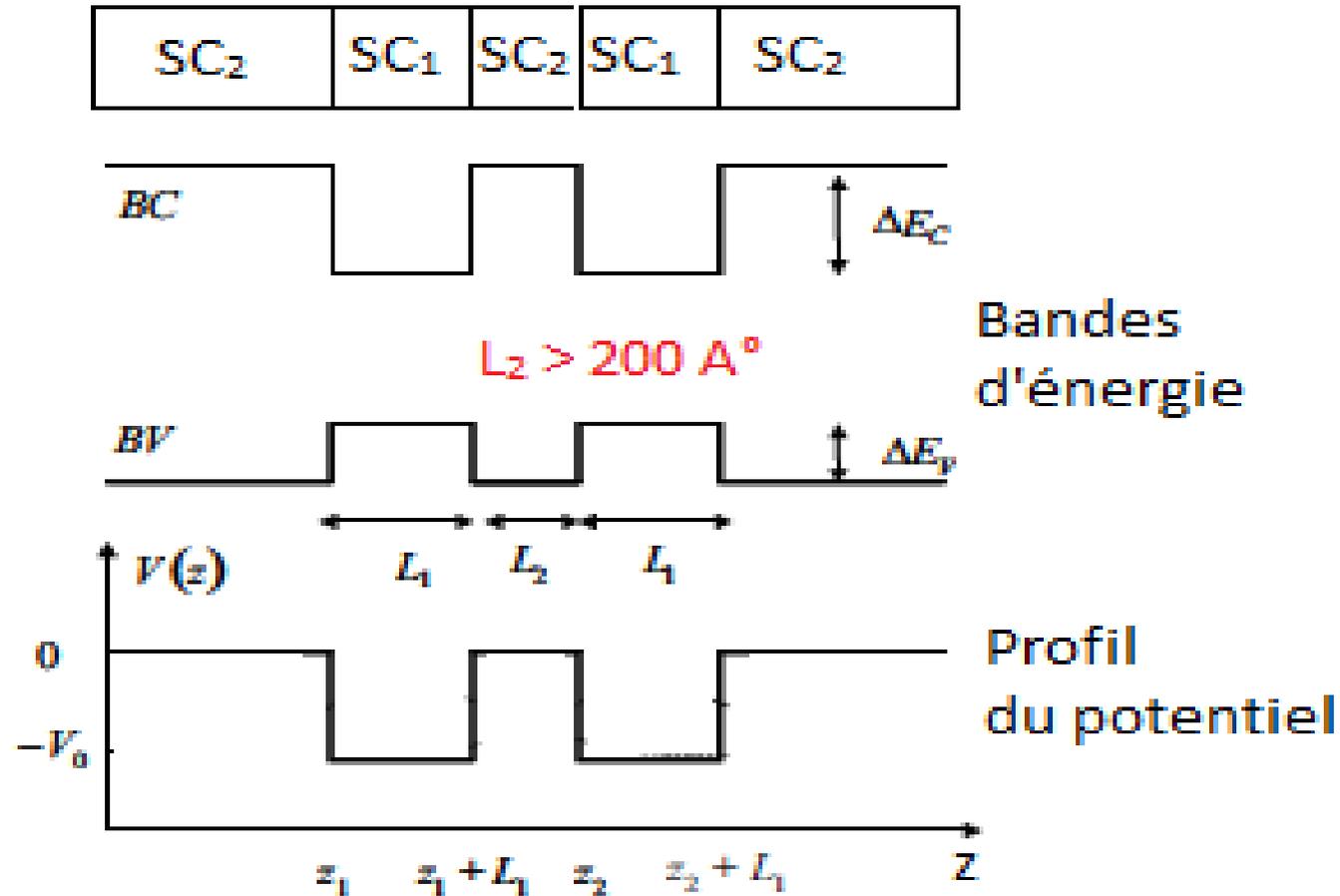
Puits indépendants (non couplés)

Avec la condition ($L_2 > 200 \text{ \AA}$), la probabilité pour qu'un électron passe d'un puits dans l'autre par effet tunnel à travers la barrière est faible, les puits sont indépendants les uns des autres.

Dans chacun des puits indépendants, la structure de sous-bandes d'énergie est analogue à celle du puits unique, le mouvement des électrons dans la structure est bidimensionnel.



MULTIPLAIS QUANTIQUES



MULTIPLAIS QUANTIQUES

Puits indépendants (non couplés) (suite)

En l'absence de couplage, les fonctions d'onde sont données, selon les régions de l'espace, par les expressions:

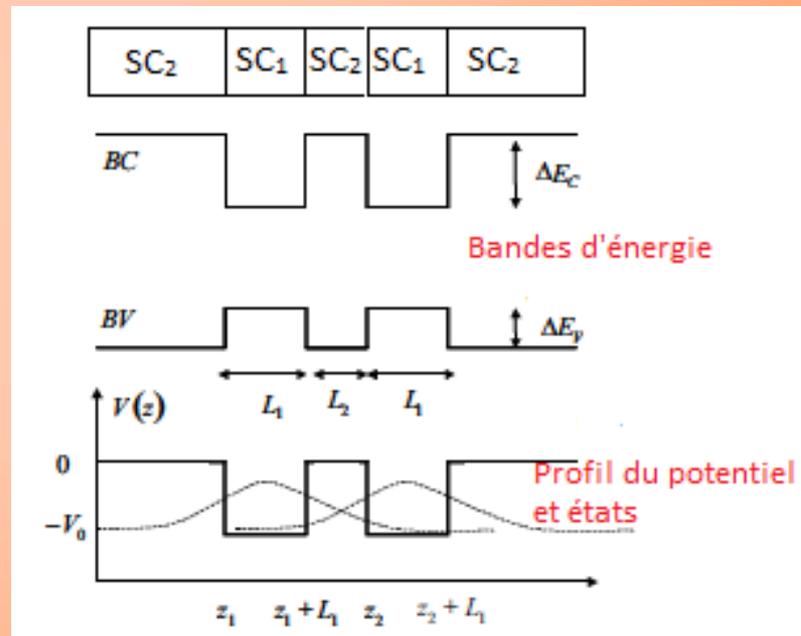
$z < z_1$	$\xi_1(z) = Ae^{K_2(z-z_1)}$
$z_1 < z < z_1 + L_1$	$\xi_1(z) = B \sin(K_1(z-z_1) + \varphi)$
$z_1 + L_1 < z$	$\xi_1(z) = Ce^{-K_2(z-z_1)}$
$z < z_2$	$\xi_2(z) = Ae^{K_2(z-z_2)}$
$z_2 < z < z_2 + L_2$	$\xi_2(z) = B \sin(K_1(z-z_2) + \varphi)$
$z_2 + L_2 < z$	$\xi_2(z) = Ce^{-K_2(z-z_2)}$



MULTIPIITS QUANTIQUES

Puits couplés

Si l'épaisseur L_2 diminue, $\xi_1(z)$ est alors différent de zéro en $z > z_2$, la probabilité de présence de l'électron associé au puits 1, en $z > z_2$ est non nulle ; cet électron voit le puits 2. La réciproque est vraie pour l'électron associé au puits 2.

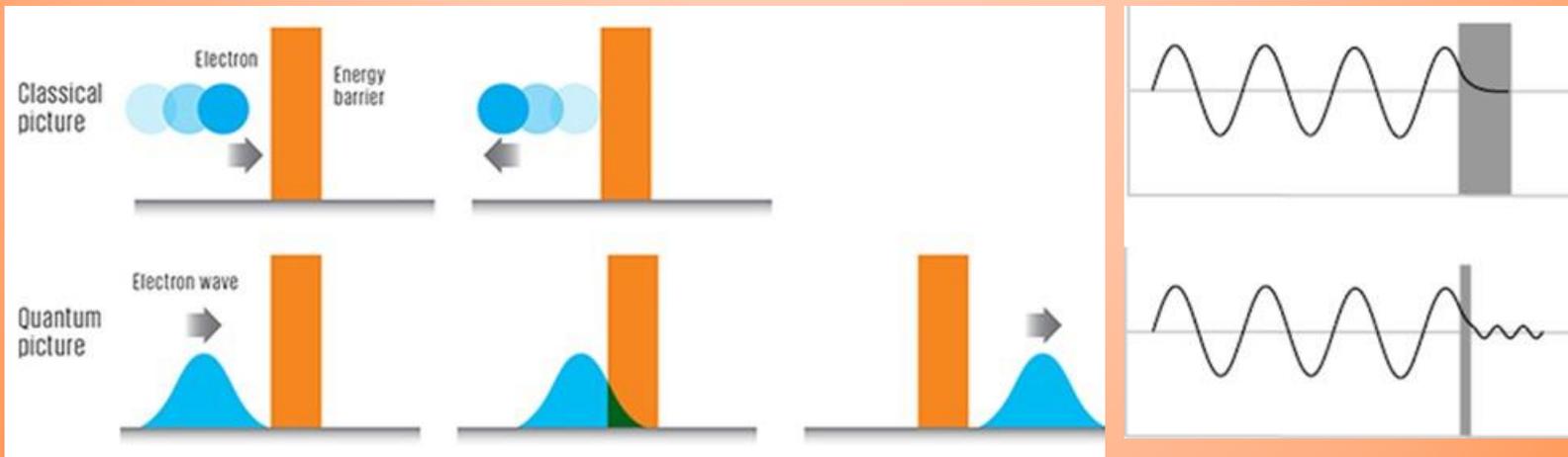


MULTIPIITS QUANTIQUES

Puits couplés (**suite**)

Les états électroniques du puits 1 et du puits 2 sont couplés par effet tunnel.

Ces états ne sont plus états propres du système constitué par les deux puits.



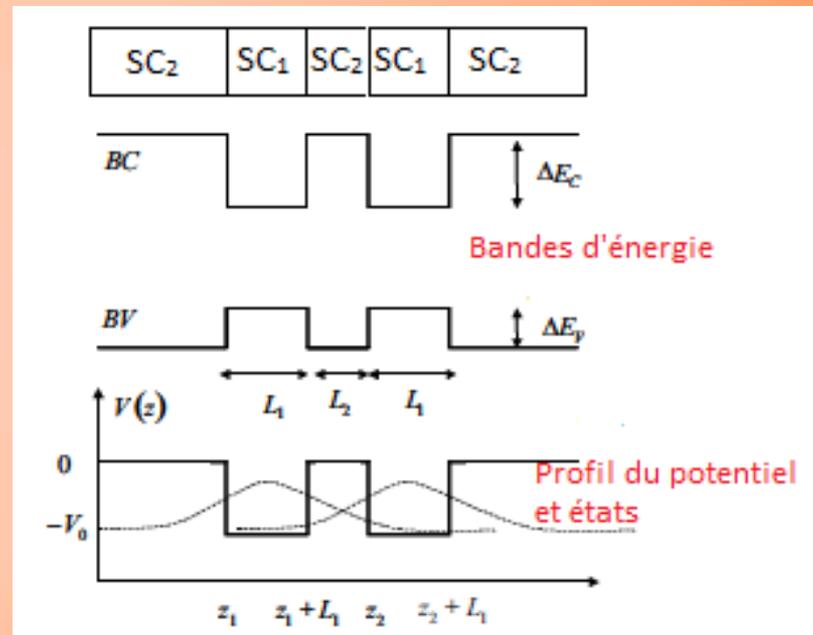
MULTIPIITS QUANTIQUES

Puits couplés (suite)

L'Hamiltonien des électrons est donné par:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{d^2}{dz^2} + V^{(1)}(z) + V^{(2)}(z)$$

$$V^j(z) = 0 \text{ pour } z < z_j \text{ et } z > z_j + L_j$$
$$= -V_0 \text{ pour } z_j < z < z_j + L_j \quad (j = 1, 2)$$



MULTIPIUITS QUANTIQUES

Puits couplés (**suite**)

Fonctions d'onde

Si on connaît les états propres et les fonctions propres dans chacun des puits supposés indépendants, on peut développer les fonctions d'onde du système couplé sur la base des fonctions d'onde des puits découplés.

Pour chacun des électrons, la fonction d'onde s'écrit donc sous la forme d'une combinaison linéaire des fonctions d'onde $\xi_1(z)$ et $\xi_2(z)$ sous la forme:

$$\xi^{(i)}(z) = a_i \xi_1(z) + b_i \xi_2(z)$$

Avec $i=1, 2$



MULTIPLIS QUANTIKUES

Puits couplés (suite)

Valeurs propres

Les états propres sont donnés par la résolution du système d'équations de Schrödinger relatives à chacun des électrons comme suit:

$$H \xi^{(i)}(z) = E \xi^{(i)}(z)$$

En multipliant à gauche par $\xi_j^*(z)$ et en intégrant dans tout l'espace, on obtient le déterminant suivant:

$$\begin{vmatrix} E_1 + s - E & (E_1 - E)r + t \\ (E_1 - E)r + t & E_1 + s - E \end{vmatrix} = 0$$



MULTIPIUITS QUANTIQUES

Puits couplés (suite)

Valeurs propres (suite)

Les paramètres du déterminant sont définis comme suit:

$$E_j = \left\langle \xi_j(z) \left| -\frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{d^2}{dz^2} + V^j(z) \right| \xi_j(z) \right\rangle \quad (j = 1,2)$$

Energie des électrons dans chacun des puits en l'absence de couplage

$$r = \langle \xi_1(z) | \xi_2(z) \rangle = \langle \xi_2(z) | \xi_1(z) \rangle$$

Intégrales de recouvrement des fonctions d'onde

$$s = \langle \xi_1(z) | V^{(2)}(z) | \xi_1(z) \rangle = \langle \xi_2(z) | V^{(1)}(z) | \xi_2(z) \rangle$$

Intégrales de dérive, qui traduisent la dérive des niveaux d'énergie de chacun des puits résultant de la présence de l'autre puits

$$t = \langle \xi_1(z) | V^{(1)}(z) | \xi_2(z) \rangle = \langle \xi_2(z) | V^{(2)}(z) | \xi_1(z) \rangle$$

Intégrales de couplage qui traduisent l'interaction entre les niveaux associés à chacun des puits

MULTIPIUITS QUANTIQUES

Puits couplés (**suite**)

Valeurs propres (**suite**)

Si on néglige les intégrales de recouvrement, le déterminant précédent se simplifie et s'écrit:

$$\begin{vmatrix} E_1 + s - E & t \\ t & E_1 + s - E \end{vmatrix} = 0$$

Les solutions sont de la forme:

$$\begin{aligned} E^{(1)} &= E_1 + s + t \\ E^{(2)} &= E_1 + s - t \end{aligned}$$



MULTIPIUITS QUANTIQUES

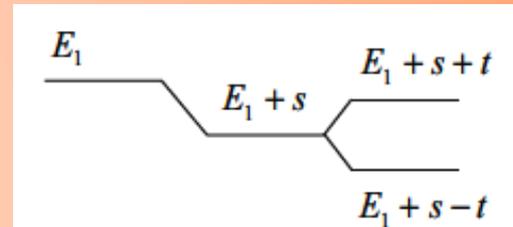
Puits couplés (**suite**)

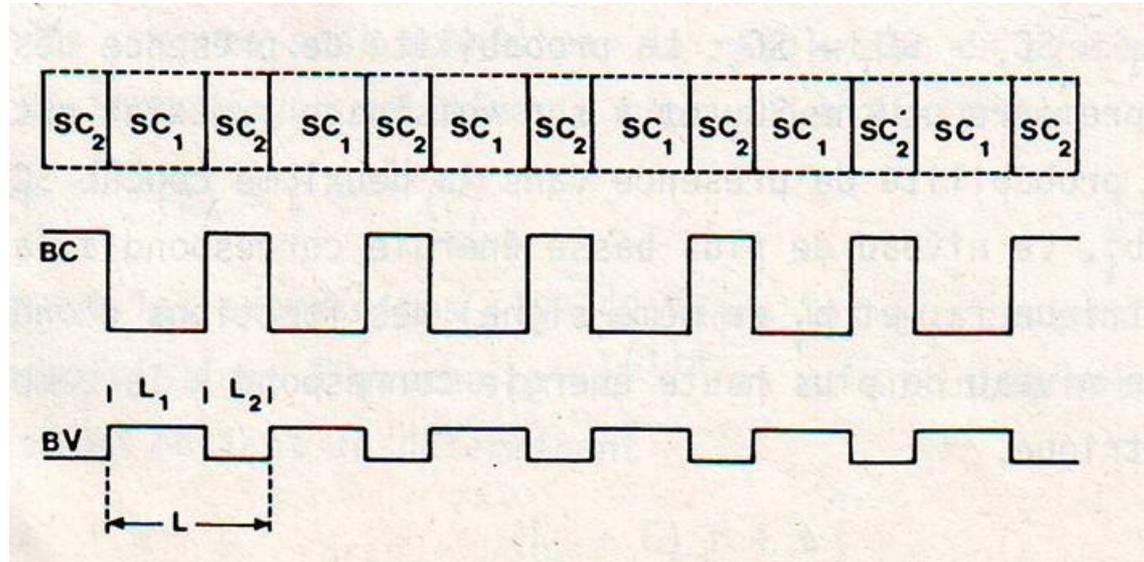
Diagramme d'énergie

Les électrons sont spatialement repartis dans les deux puits et à l'extérieur de ces deux puits (toute la structure SC2-SC1-SC2-SC1-SC2)

a_i^2 donne la probabilité de présence des électrons dans la première couche SC1 et à son voisinage immédiat.

b_i^2 donne leur probabilité de présence dans la deuxième couche SC2.





Partie 4

Superréseaux

SUPERRESEAUX

Définition

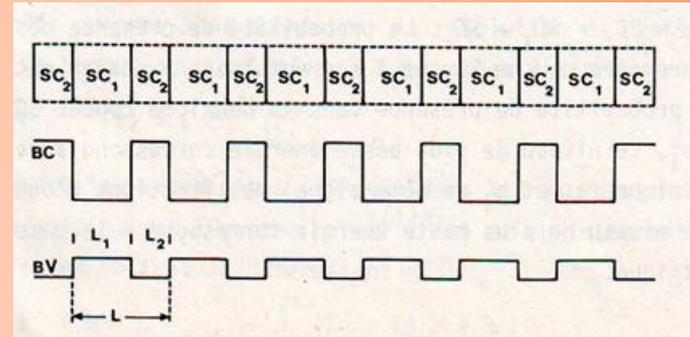
Le système de **multipuits quantiques couplés** porte le nom de **superréseau**.

Formation

Le superréseau résulte de la juxtaposition de multicouches alternées de semi-conducteurs SC1 et SC2, d'épaisseurs respectives L_1 et L_2 . La maille du superréseau est $L=L_1+L_2$.

Analogie

orbitales atomiques → orbitales moléculaire → états cristallins
puits quantique isolé → double-puits quantiques couplés → multipuits quantiques couplés (superréseau)



SUPERRESEAUX

Structure de sous-bandes d'énergie

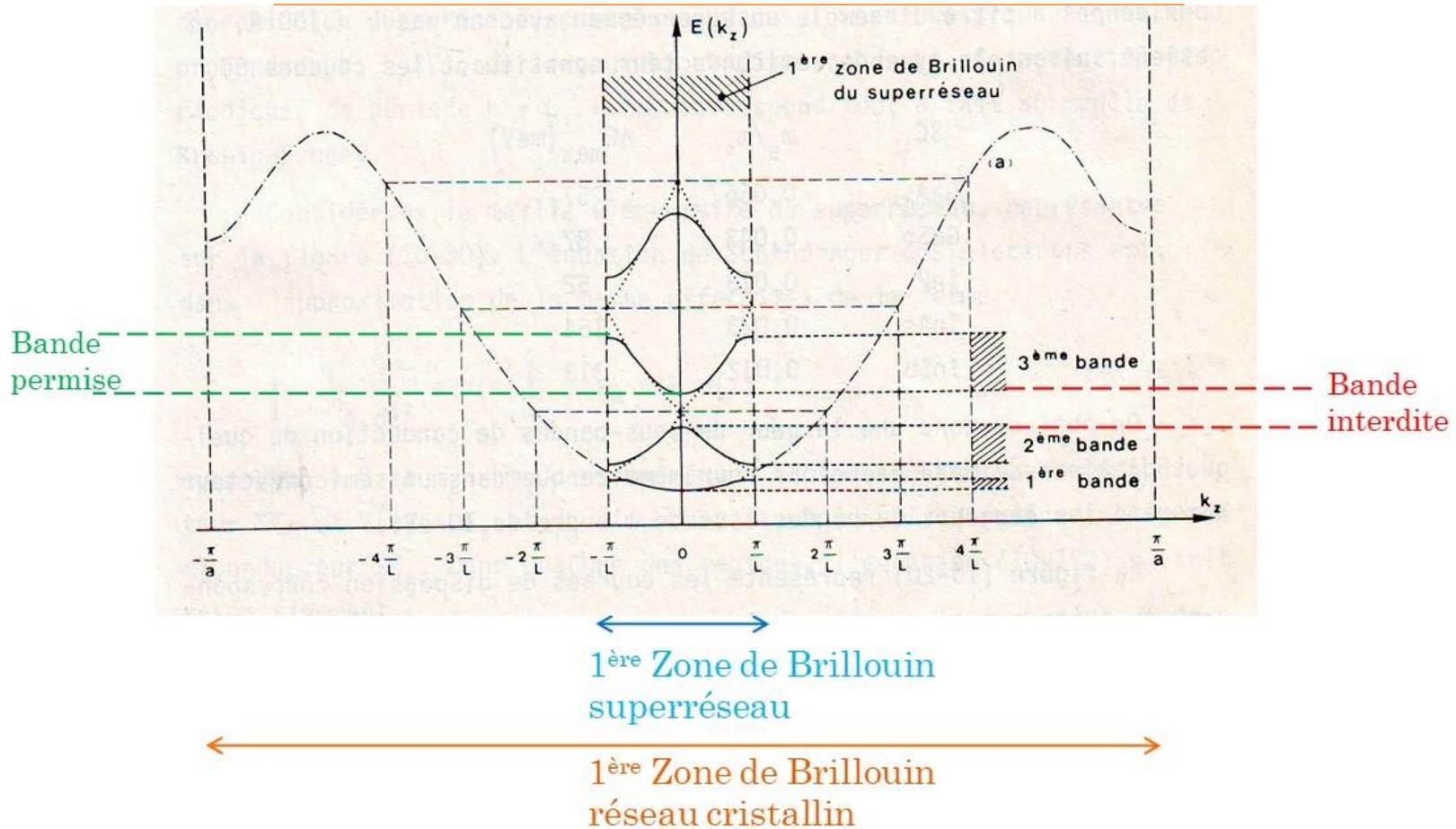
Le **couplage entre les puits** successifs ramène le **mouvement à trois dimensions**.

La structure **périodique du superréseau**, superposée à celle **du cristal**, entraîne l'existence d'une **superstructure** de bandes caractérisée par **une zone de Brillouin** de longueur **$2\pi/a$** dans les directions x et y (plan de la structure) et **$2\pi/L$** dans la direction z.

- **a**: paramètre de maille du réseau cristallin;
- **L**: paramètre de maille du superréseau



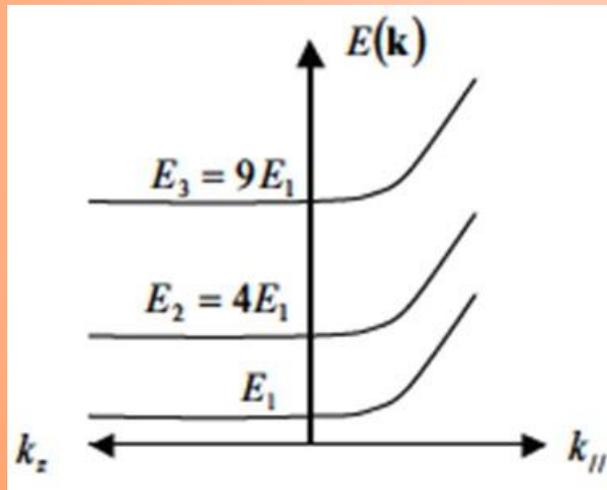
SUPERRESEAUX



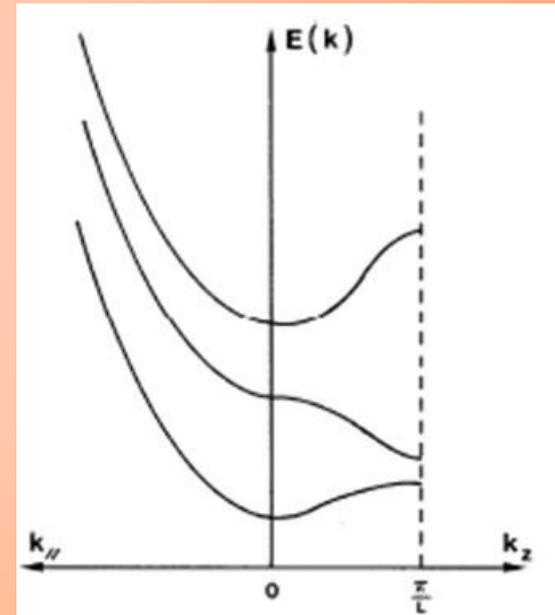
SUPERRESEAUX

Comparaison Puits unique-Superréseau

Courbe de dispersion
puits infini unique

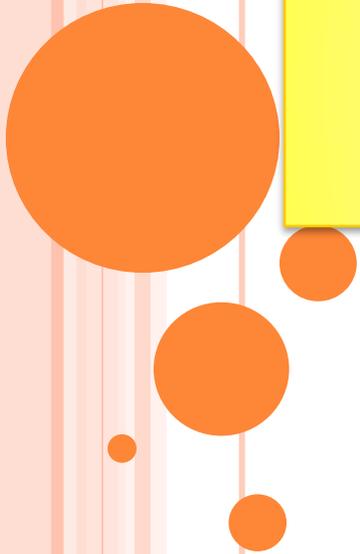


Courbe de dispersion
superréseau



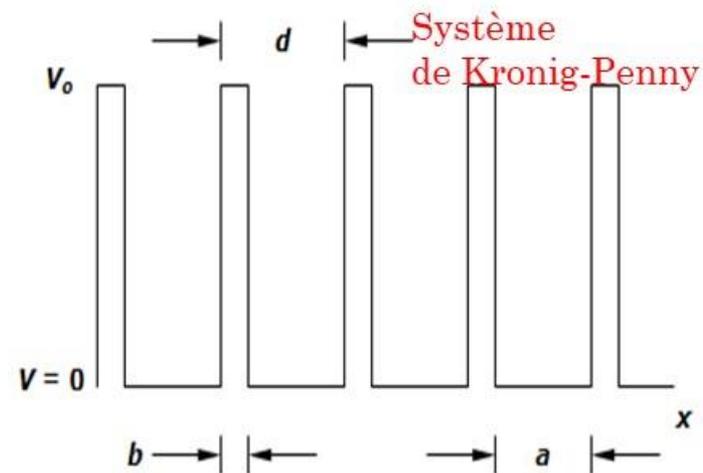
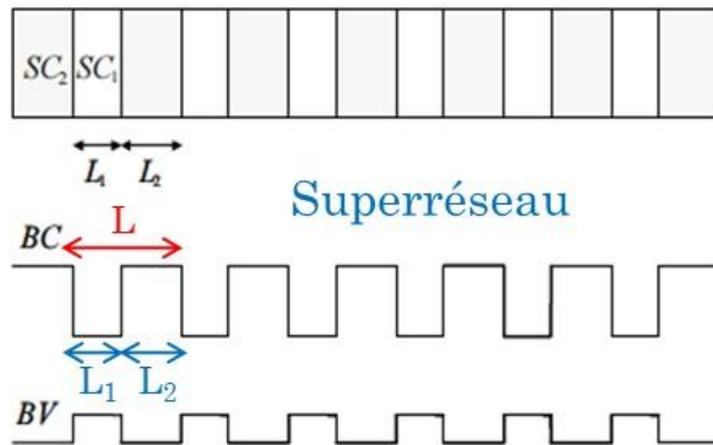
CHAPITRE 1
EFFETS QUANTIQUES DANS LES
COMPOSANTS
PUITS QUANTIQUES ET
SUPERRÉSEAUX

Partie 5
Modèle de Kronig-Penny



MODÈLE DE KRONIG-PENNY

Du superréseau au modèle de Kronig-Penny



Le superréseau se présente, dans la direction du superréseau, comme une succession de puits quantiques de profondeur $V_0 = \Delta E c$ de largeur L_1 et distants de L_2 . Ce potentiel périodique, de période $L = L_1 + L_2$

une infinité de puits quantiques, tous de la même taille a , séparés par des barrières de potentiel rectangulaires de largeur b et de hauteur V_0 , chaque « cellule » (puits+une barrière) ayant une longueur d ($d = a + b$)

Conclusion: Il y a correspondance entre les deux schémas, $L_1 \Rightarrow a$, $L_2 \Rightarrow b$, $L \Rightarrow d$

MODÈLE DE KRONIG-PENNY

Solutions

Dans chacune des régions, l'équation de Schrödinger s'écrit:

$$\text{Région I} \quad \frac{d^2 \psi(z)}{dz^2} + K_1^2 \psi(z) = 0$$

$$\text{Région II} \quad \frac{d^2 \psi(z)}{dz^2} - K_2^2 \psi(z) = 0$$

Avec les notations (ici $E < V_0$) suivantes:

$$K_1 = \sqrt{2m_1 E} / \hbar \quad K_2 = \sqrt{2m_2 (V_0 - E)} / \hbar$$

Les solutions des équations précédentes sont respectivement de la forme:

$$\psi_1(z) = A_1 \cos K_1 z + B_1 \sin K_1 z$$

$$\psi_2(z) = A_2 \operatorname{ch} K_2 (z - L_1) + B_2 \operatorname{sh} K_2 (z - L_1)$$



MODÈLE DE KRONIG-PENNY

Solutions en tenant compte du théorème de Bloch

Vu la périodicité du superréseau, les fonctions d'onde des électrons et leurs dérivées doivent satisfaire au théorème de Bloch.

Ainsi, les fonctions d'onde des électrons dans **la région 3** ne diffèrent des fonctions d'onde dans **la région 1** que par le terme de phase $\exp(ikL)$.

$$\psi_3(z) = e^{ikL} \psi_1(z-L)$$

$$\psi_3(z) = e^{ikL} (A_1 \cos K_1(z-L) + B_1 \sin K_1(z-L))$$

Il est de même pour les dérivées

$$\psi_1'(z) = -A_1 K_1 \sin K_1 z + B_1 K_1 \cos K_1 z$$

$$\psi_2'(z) = A_2 K_2 \operatorname{sh} K_2(z-L_1) + B_2 K_2 \operatorname{ch} K_2(z-L_1)$$

$$\psi_3'(z) = e^{ikL} (-A_1 K_1 \sin K_1(z-L) + B_1 K_1 \cos K_1(z-L))$$



MODÈLE DE KRONIG-PENNY

Solutions en tenant compte du théorème de Bloch (suite)

Les conditions de continuité de la fonction d'onde ψ et du courant de probabilité $1/m \cdot d\psi/dz$ en $z=L_1$ et en $z=L$ s'écrivent:

$$\psi_1(z=L_1) = \psi_2(z=L_1)$$

$$\frac{1}{m_1} \psi_1'(z=L_1) = \frac{1}{m_2} \psi_2'(z=L_1)$$

$$\psi_2(z=L) = \psi_3(z=L)$$

$$\frac{1}{m_2} \psi_2'(z=L) = \frac{1}{m_1} \psi_3'(z=L)$$

Ce qui donne:

$$A_1 \cos K_1 L_1 + B_1 \sin K_1 L_1 - A_2 = 0$$

$$-A_1 \frac{K_1}{m_1} \sin K_1 L_1 + B_1 \frac{K_1}{m_1} \cos K_1 L_1 - B_2 \frac{K_2}{m_2} = 0$$

$$e^{iKL} A_1 - A_2 \operatorname{ch} K_2 L_2 - B_2 \operatorname{sh} K_2 L_2 = 0$$

$$e^{iKL} B_1 \frac{K_1}{m_1} - A_2 \frac{K_2}{m_2} \operatorname{sh} K_2 L_2 - B_2 \frac{K_2}{m_2} \operatorname{ch} K_2 L_2 = 0$$



MODÈLE DE KRONIG-PENNY

Solutions en tenant compte du théorème de Bloch (suite)

Le système d'équations suivantes:

$$\begin{aligned} A_1 \cos K_1 L_1 + B_1 \sin K_1 L_1 - A_2 &= 0 \\ -A_1 \frac{K_1}{m_1} \sin K_1 L_1 + B_1 \frac{K_1}{m_1} \cos K_1 L_1 - B_2 \frac{K_2}{m_2} &= 0 \\ e^{\mu L} A_1 - A_2 \operatorname{ch} K_2 L_2 - B_2 \operatorname{sh} K_2 L_2 &= 0 \\ e^{\mu L} B_1 \frac{K_1}{m_1} - A_2 \frac{K_2}{m_2} \operatorname{sh} K_2 L_2 - B_2 \frac{K_2}{m_2} \operatorname{ch} K_2 L_2 &= 0 \end{aligned}$$

Peut s'écrire sous la forme matricielle suivante:

$$\begin{bmatrix} \cos K_1 L_1 & \sin K_1 L_1 & -1 & 0 \\ -\frac{K_1}{m_1} \sin K_1 L_1 & \frac{K_1}{m_1} \cos K_1 L_1 & 0 & -\frac{K_2}{m_2} \\ e^{\mu L} & 0 & -\operatorname{ch} K_2 L_2 & -\operatorname{sh} K_2 L_2 \\ 0 & e^{\mu L} \frac{K_1}{m_1} & -\frac{K_2}{m_2} \operatorname{sh} K_2 L_2 & -\frac{K_2}{m_2} \operatorname{ch} K_2 L_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_1 \\ B_1 \\ A_2 \\ B_2 \end{bmatrix} = 0$$

Les coefficients A_1 , A_2 , B_1 et B_2 , ne sont différents de zéro que lorsque le déterminant de la matrice est nul, ce qui donne:

$$\cos kL = \operatorname{ch} K_2 L_2 \cdot \cos K_1 L_1 + \frac{1}{2} \left(\frac{K_2 m_1}{K_1 m_2} - \frac{K_1 m_2}{K_2 m_1} \right) \operatorname{sh} K_2 L_2 \cdot \sin K_1 L_1 \quad (1)$$



MODÈLE DE KRONIG-PENNY

Solutions en tenant compte du théorème de Bloch (suite)

Compte tenu des expressions de K_1 et K_2 , l'expression:

$$\cos kL = chK_2L_2 \cdot \cos K_1L_1 + \frac{1}{2} \left(\frac{K_2m_1}{K_1m_2} - \frac{K_1m_2}{K_2m_1} \right) shK_2L_2 \cdot \sin K_1L_1 \quad (1)$$

est de la forme:

$$f(V_0, L_1, L_2, m_1, m_2, E) = \cos kL$$

Etant donné que: $|\cos(x)| \leq 1$, cette condition délimite les **bandes permises** dans lesquelles **k est réel**.

Au contraire, les bandes d'énergie correspondant à:

$$|f(V_0, L_1, L_2, m_1, m_2, E)| > 1$$

sont des **bandes interdites** dans lesquelles **k est imaginaire**.



MODÈLE DE KRONIG-PENNY

Effet de la largeur du puits

Les bandes d'énergie varient quand la structure évolue d'une configuration à couches épaisses à une configuration à couches minces ($L_2 \gg \rightarrow L_2 \ll$).

1. Puits découplés, $L_2 \gg L_1$

Dans ce cas, l'équation (1), après simplification, nous donne:

$$\begin{aligned} \operatorname{tg} \frac{K_1 L_1}{2} = 0 & \qquad \operatorname{cotg} \frac{K_1 L_1}{2} = 0 \\ \frac{K_1 L_1}{2} = n \frac{\pi}{2} \end{aligned}$$

avec $K_1 = \sqrt{2m_1 E} / \hbar$ $K_2 = \sqrt{2m_2 (V_0 - E)} / \hbar$

Ce qui donne:

$$E_n = n^2 \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m_1 L_1^2}$$

On retrouve **les niveaux d'énergie** du **puits isolé**.



MODÈLE DE KRONIG-PENNY

Effet de la largeur du puits (suite)

2. Puits très couplés, $L_2 \ll L_1$

Dans ce cas, l'équation (1), après simplification, nous donne:

$$\cos kL = \cos K_1 L_1 + \frac{1}{2\hbar} \sqrt{\frac{2m_1}{E}} V_0 L_2 \sin K_1 L_1$$

Les bandes permises sont alors délimitées par la condition:

$$|\cos(kL)| \leq 1$$

Les intersections avec les horizontales d'ordonnées ± 1 définissent les extrémités des bandes permise.

Les régions correspondantes de l'axe des abscisses définissent les valeurs permises de $K_1 L$, c'est-à-dire de l'**énergie**.

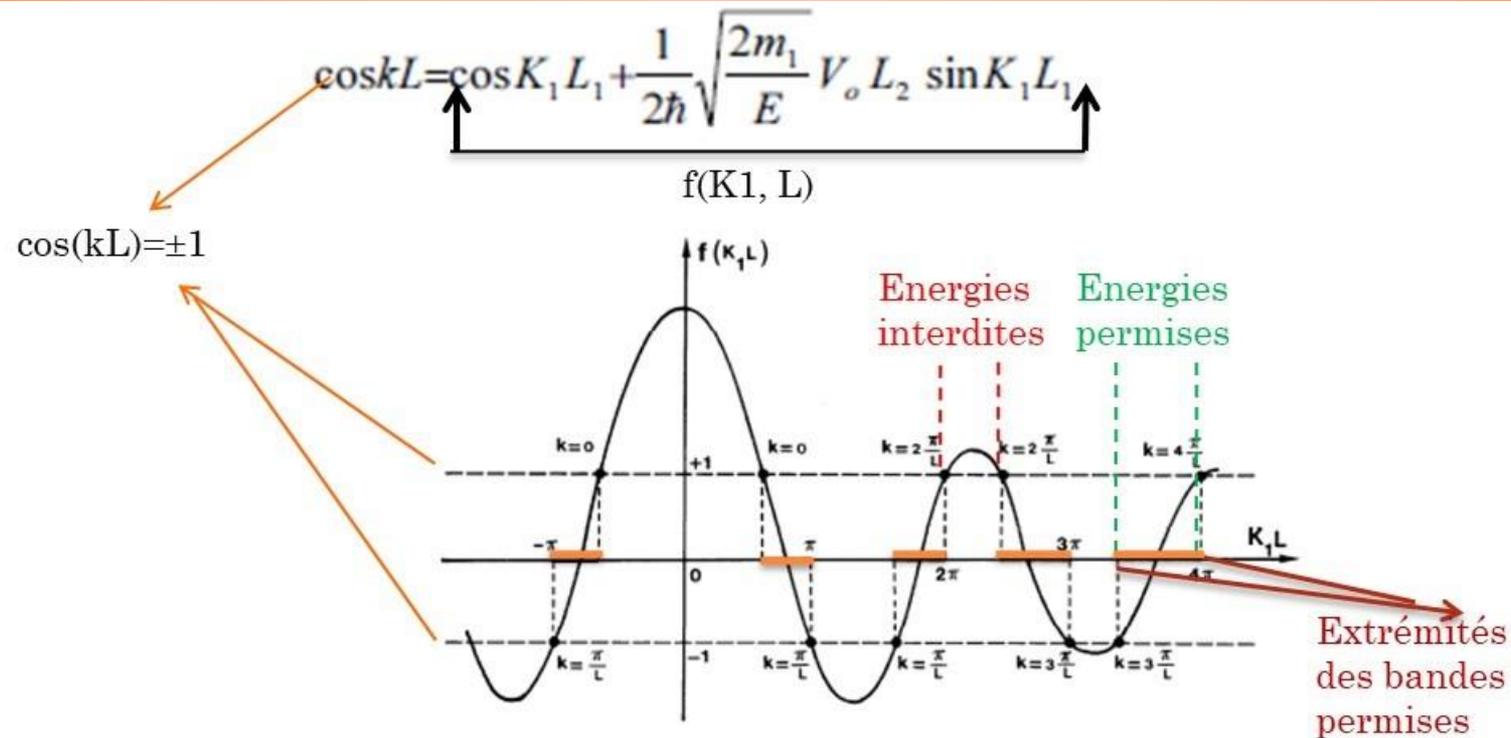


MODÈLE DE KRONIG-PENNY

Effet de la largeur du puits (suite)

2. Puits très couplés, $L_2 \ll L_1$ (suite)

Résolution graphique de l'équation:



MODÈLE DE KRONIG-PENNY

Courbe de dispersion

A partir de l'expression:

$$\cos kL = \cos K_1 L + \frac{1}{2\hbar} \sqrt{\frac{2m_1}{E}} V_0 L_2 \sin K_1 L$$

Et en posant:

$$A = m_1 V_0 L_1 L_2 / \hbar^2$$

On obtient:

$$\cos kL = \cos K_1 L + A \frac{\sin K_1 L}{K_1 L} = f(K_1 L)$$

Un long calcul, montre que:

$$\frac{dE}{dk} = \frac{\hbar^2 K_1 L \sin kL}{m_1 \left(L + \frac{A}{K_1^2 L} \right) \sin K_1 L - \frac{A}{K_1} \cos K_1 L}$$

Ce qui montre qu'aux extrema des bandes permises $k = n\pi/L$, $dE/dk = 0$



MODÈLE DE KRONIG-PENNY

Courbe de dispersion (suite)

Les courbes représentatives sont des **portions de parabole** à l'intérieur de chaque bande permise avec des **déformations** aux voisinages des extrema correspondant à $k = \pm n\pi/L$

Remarque:

A cause de la périodicité de $E(k)$, on limite la représentation dans la 1^{ère} zone de Brillouin.

