

# Piège quantique d'électrons dans un semiconducteur

## Rapport de stage du cursus mixte

Hernandez David  
sujet proposé par Robson Ferreira

6 septembre 1999

### Table des matières

<b>1</b>	<b>Introduction</b>	<b>2</b>
1.1	Modélisation . . . . .	2
1.2	Approximations . . . . .	2
1.3	Résultats et applications . . . . .	2
<b>2</b>	<b>Rappels : Généralités sur les semiconducteurs</b>	<b>2</b>
2.1	Structure cristalline . . . . .	2
2.2	Masse effective . . . . .	3
2.3	Agrégats . . . . .	4
<b>3</b>	<b>Modélisation du problème</b>	<b>5</b>
<b>4</b>	<b>Approximations</b>	<b>5</b>
4.1	Séparation des variables . . . . .	5
4.2	Forme de la partie radiale . . . . .	6
4.3	Passage de 3D à 1D . . . . .	6
4.3.1	Etats s . . . . .	6
4.3.2	Etats p . . . . .	7
4.4	Allure du potentiel effectif . . . . .	8
<b>5</b>	<b>Etude de l'équation approchée</b>	<b>9</b>
5.1	Etude d'un potentiel à 3 paliers . . . . .	9
5.1.1	Cas 1 : $0 > E > -V_0^{(3)}$ . . . . .	10
5.1.2	Cas 2 : $0 > -V_0^{(3)} > E$ . . . . .	10
5.2	Méthode de résolution numérique . . . . .	11
5.3	Résultats . . . . .	11
5.4	Commentaires . . . . .	12
<b>6</b>	<b>Application : probabilité d'absorption d'une onde plane</b>	<b>13</b>
6.1	Evaluation dans le cas général : modèle semi-classique . . . . .	13
6.2	Probabilités dans le cas étudié . . . . .	14

6.3	Evaluation numérique . . . . .	14
<b>7</b>	<b>Annexe I : Résultats numériques</b>	<b>16</b>
<b>8</b>	<b>Annexe II : Fonctions d'onde</b>	<b>17</b>

## 1 Introduction

Nous allons montrer dans quelle mesure on peut piéger un électron dans un semiconducteur et nous étudierons de tels états liés. Afin de résoudre par la suite numériquement le problème, on sera amené à faire et à justifier au cours de l'étude théorique un certain nombre d'approximations dont on vérifiera la cohérence.

### 1.1 Modélisation

On peut former dans certains semi-conducteurs des microstructures, dites agrégats, qui se comportent comme des zones où le potentiel électrostatique est inférieur à la valeur moyenne dans le reste du semi-conducteur. Nous allons chercher les états liés pour un électron dans un tel potentiel. On modélise un agrégat par un potentiel  $V$  à symétrie cylindrique (cf 3). Mais on ne sait pas résoudre l'équation de Schrödinger 3D.

### 1.2 Approximations

La géométrie de l'agrégat suggère une solution fondamentale sous forme séparable. La symétrie de révolution amène à considérer un nombre quantique  $n$ . Nous étudions les états  $s$  ( $n=0$ ) et  $p$  ( $n=1$ ).

En intégrant l'équation de Schrödinger 3D, on ramène le problème à une dimension  $z$  avec un potentiel effectif dépendant d'un paramètre  $\lambda$  lié à la forme de la partie radiale. La solution variationnelle est obtenue en minimisant l'énergie totale  $\epsilon(\lambda)$ .

Le potentiel effectif à 1D est encore trop complexe pour une résolution explicite. On l'approxime ainsi par un potentiel en escalier, dont on connaît exactement les états liés. (C'est l'approximation la plus simple, mais on vérifie plus tard qu'elle est en fait très bonne.)

### 1.3 Résultats et applications

On peut alors numériquement étudier  $\epsilon(\lambda)$  et chercher les minimums pour différents paramètres. On obtient aussi les fonctions d'ondes associées aux états liés, qui indiquent la densité de probabilité de présence dans l'espace. Ceci permet d'évaluer par méthode perturbative au premier ordre l'erreur commise lors des approximations. On trouve ici des erreurs négligeables.

On peut alors étudier l'excitation d'un électron piégé dans son état fondamental par un faisceau laser, et mettre en évidence l'anisotropie optique du piège.

## 2 Rappels : Généralités sur les semiconducteurs

### 2.1 Structure cristalline

Les structures étudiées ici sont analogues à celles de la blende de zinc : deux structures cubiques à faces centrées s'interpénètrent, décalées l'une de l'autre d'un quart de diagonale (voir figure 1). Les atomes sont par exemple Ga et As.

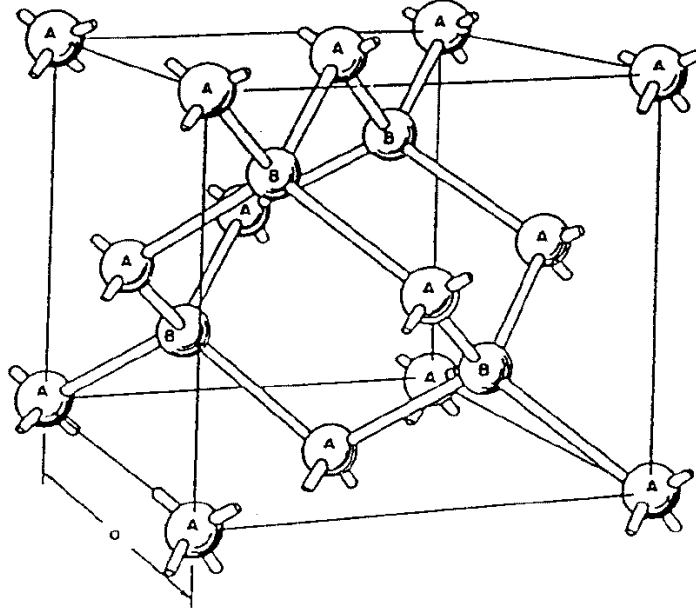


Figure 1 : Arrangement spatial des atomes dans une configuration de la blende de Zinc

## 2.2 Masse effective

Un électron dans un semi-conducteur est soumis à un potentiel périodique  $v$  au lieu de se déplacer dans le vide. En fait on peut modéliser les effets supplémentaires en utilisant dans les équations une masse effective  $m^*$  à la place de la masse d'un électron libre dans le vide  $m_0$ . Voici quelques éléments de la transformation effectuée : L'équation de Schrödinger à résoudre est la suivante :

$$\left[ \frac{p^2}{2m_0} + v(\vec{r}) + \frac{\hbar}{4m_0^2 c^2} (\vec{\sigma} \times \vec{\nabla} v) \cdot \vec{p} + \delta H_r \right] \psi(\vec{r}) = \epsilon \psi(\vec{r})$$

où  $v$  est le potentiel dû à la structure cristalline, les troisième et quatrième termes sont des corrections relativistes,  $\vec{\sigma}$  étant le spin de l'électron.

La symétrie de la structure cristalline impose  $v(\vec{r} + \sum n_i \vec{a}_i) = v(\vec{r})$ , quels que soient les  $n_i$  entiers, où les  $\vec{a}_i$  pour  $i = 1, 2, 3$  forment un triplet de base de la structure cristalline. Donc les solutions de l'équation sont de la forme :

$$\psi_{n\vec{k}}(\vec{r}) = N u_{n\vec{k}}(\vec{r}) e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}$$

où  $u_{n\vec{k}}$  a les mêmes symétries que  $v$ . Les conditions aux limites périodiques imposent  $\vec{k} \cdot N_i \vec{a}_i = 2\pi p_i$  pour  $i = 1, 2, 3$ , avec  $N_i \gg 1$  et les  $p_i$  entiers. On peut ainsi supposer que le domaine des valeurs possibles pour  $k$  est continu. On a alors :

$$\left[ \frac{p^2}{2m_0} + v(\vec{r}) + \frac{\hbar}{4m_0^2 c^2} (\vec{\sigma} \times \vec{\nabla} v) \cdot \vec{p} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + \frac{\hbar \vec{k}}{m_0} (\vec{p} + \frac{\hbar}{4m_0 c^2} (\vec{\sigma} \times \vec{\nabla} v)) \right] u_{n\vec{k}} = \epsilon_{n\vec{k}} u_{n\vec{k}}$$

ce qui peut être retranscrit :

$$[H(\vec{k} = 0) + W(\vec{k})] u_{n\vec{k}} = \epsilon_{n\vec{k}} u_{n\vec{k}}$$

où  $H(\vec{k} = 0)$  a pour fonctions propres les  $\psi_{n0}$ .

On obtient alors par perturbations au deuxième ordre :

$$\epsilon_{n\vec{k}} = \epsilon_{n0} + \frac{\hbar^2}{2} \sum k_\alpha \frac{1}{\mu_n^{\alpha\beta}} k_\beta$$

où  $\alpha, \beta$  varient dans (x,y,z) et le tenseur  $\mu_n^{\alpha\beta}$  dit de masse effective dépend de  $H_0$ .

On montre alors :

$$\hbar \frac{d\vec{k}}{dt} = \vec{F} \text{ et } \vec{v} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \epsilon_n}{\partial \vec{k}}$$

On suppose pour simplifier que le tenseur de masse effective est de la forme (c'est souvent le cas pour les électrons dans la bande de conduction)  $\mu_n^{\alpha\beta} = -m_v \delta_{\alpha\beta}$  avec  $m_v > 0$ .

Ensuite la première équation donne :

$$-m_v \frac{d\vec{v}}{dt} = \vec{F}$$

d'où

$$m_v \frac{d\vec{v}}{dt} = e[\vec{E} + \vec{v} \wedge \vec{B}]$$

pour une force électromagnétique. On appelle  $m_v = m^*$  la masse effective de l'électron.

Ainsi, un électron dans un semiconducteur soumis à un potentiel électrique  $V$  (en plus du potentiel  $v$  dû à la structure cristalline), peut être étudié comme une particule de masse  $m^*$  évoluant dans le potentiel  $eV$ .

### 2.3 Agrégats

Il est possible de former dans un semiconducteur des microstructures, dites agrégats, où la structure cristalline modifiée conduit à un potentiel électrostatique inférieur à la valeur moyenne dans le reste du semiconducteur. On peut espérer piéger des électrons dans de telles zones.

La technique de fabrication des QB (Quantum Boxes) la plus efficace connue repose sur le phénomène suivant : si on dépose sur une surface de GaAs un film de InAs couche après couche (voir figure 2 (a)), on observe pour une épaisseur critique du film (environ  $3\text{\AA}$ ) une réorganisation spontanée en une répartition régulière à haute densité (environ  $4.10^{10} \text{cm}^{-2}$ ) d'îlots de tailles homogènes (environ  $4\text{\AA}$ ) (voir figure 2 (b) et figure 3). Si on continue alors à déposer de l'InAs, les îlots sont de moins en moins nets. Par contre si on dépose à nouveau du GaAs, les îlots ne disparaissent pas (voir figure 2 (c)). Comme dans l'InAs l'énergie d'un électron de la bande de conduction est inférieure à celle dans le GaAs, on obtient des agrégats avec les propriétés décrites précédemment.

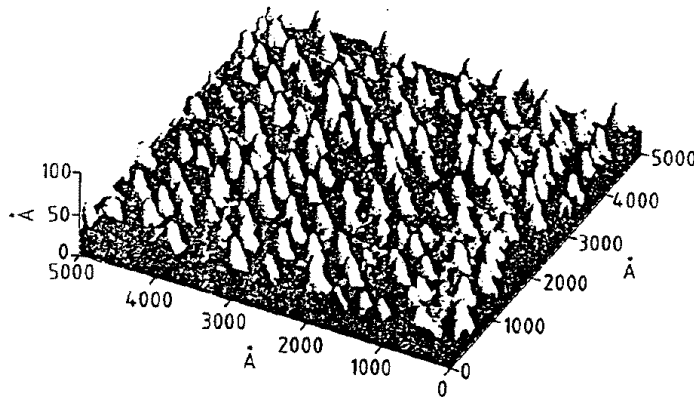


Figure 2 : Formation spontanée d'une QB d'InAs sur du GaAs

L'autoformation des îlots est due à une compétition énergétique : le passage du film 2D à la morphologie 3D diminue plus l'énergie élastique du InAs qu'elle n'augmente celle du GaAs. Cette diminution pour le système de l'énergie élastique compense l'énergie de tension de surface lorsqu'on atteint l'épaisseur critique.

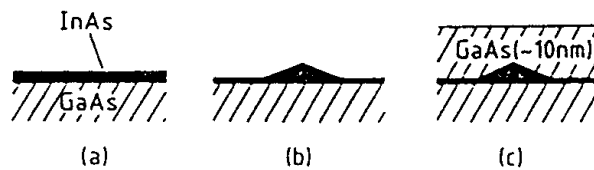


Figure 3 : Image obtenue (AFM) pour une épaisseur de  $7\text{\AA}$  du film d'InAs

### 3 Modélisation du problème

On modélise empiriquement chaque agrégat par le potentiel  $V(\rho, \theta, z)$  défini par :

$$\begin{cases} \forall z < -d, V(\rho, \theta, z) = 0 \\ \forall -d < z < 0, V(\rho, \theta, z) = -V_0 \\ \forall 0 < z < h \text{ et } \rho > R(1 - \frac{z}{R \tan(\alpha)}), V(\rho, \theta, z) = 0 \\ \forall 0 < z < h \text{ et } \rho < R(1 - \frac{z}{R \tan(\alpha)}), V(\rho, \theta, z) = -V_0 \\ \forall z > h, V(\rho, \theta, z) = 0 \end{cases}$$

où typiquement on s'est donné :

$$\begin{cases} d = 3 \text{ \AA} \\ h = 30 \text{ \AA} \\ R = 100 \text{ \AA} \text{ ou } 300 \text{ \AA} \\ \alpha = 30^\circ \\ V_0 = 700 \text{ meV} \end{cases}$$

Voir par exemple la figure :

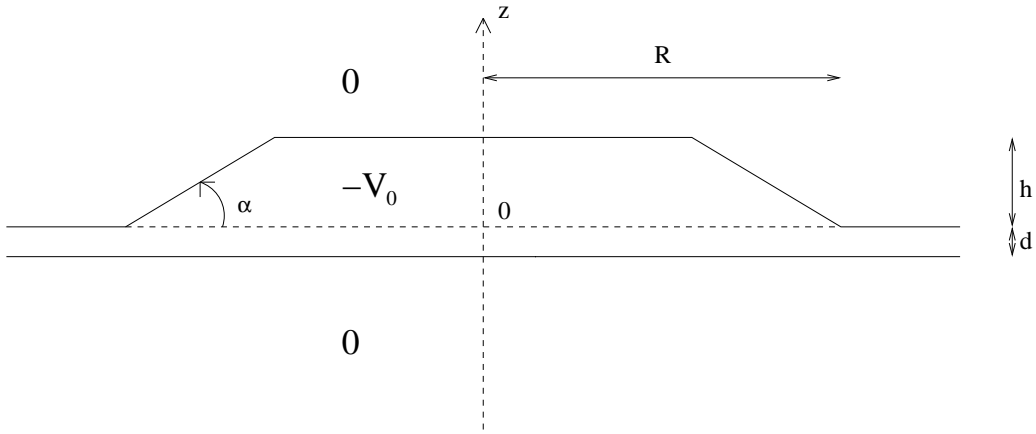


Figure 4 : Frontière de l'agrégat

On modélise le Hamiltonien par :

$$H = \frac{P^2}{2m^*} + V$$

où  $m^*$  est la masse effective d'un électron dans le semiconducteur. On cherche donc à résoudre l'équation de Schrödinger stationnaire :

$$\left(-\frac{\hbar^2 \Delta}{2m^*} + V\right) \phi(\vec{r}) = \epsilon \phi(\vec{r}) \quad (1)$$

où  $\phi(\rho, \theta, z)$  est la fonction d'onde de l'électron et  $\epsilon$  l'énergie associée. On ne sait pas résoudre explicitement cette équation. Nous allons donc procéder à un certain nombre d'approximations permettant de résoudre le problème.

## 4 Approximations

### 4.1 Séparation des variables

Les longueurs typiques données précédemment sont d'un ordre de grandeur supérieures pour les dimensions suivant (Oz) que pour les dimensions radiales. On cherchera donc la solution fondamentale sous la forme séparable :

$$\phi(\rho, \theta, z) = \psi(\rho, \theta) f(z)$$

Par symétrie de révolution, on peut écrire :

$$\psi(\rho, \theta) = \psi_n(\rho)e^{in\theta}$$

avec  $n$  entier. On appelle ainsi les états  $n=0$  états s, et les états  $n=1$  états p.

Pour la normalisation, on a dans le cas séparable :

$$\int_0^{+\infty} |\psi_n(\rho)|^2 2\pi\rho d\rho = \int_0^{+\infty} |f(z)|^2 dz = 1$$

## 4.2 Forme de la partie radiale

Si on se donne la partie radiale de la solution  $\psi_n(\rho)$ , en intégrant l'équation sur  $\rho$ , on obtient une équation que doit vérifier  $f$ . On va ainsi se restreindre à chercher des solutions pour certaines formes de  $\psi$ . On cherchera des solutions sous la forme :

pour les états s :

$$\psi_0(\rho) = C_{\lambda_0} e^{-\left(\frac{\rho}{\lambda_0}\right)^2}$$

pour les états p :

$$\psi_1(\rho) = D_{\lambda_1} \rho e^{-\left(\frac{\rho}{\lambda_1}\right)^2}$$

Le paramètre  $\lambda_n$  représente l'extension spatiale radiale de la fonction d'onde. La solution variationnelle est obtenue en minimisant l'énergie totale  $\epsilon_n(\lambda_n)$ .

## 4.3 Passage de 3D à 1D

La fonction  $\psi_n$  étant donnée, on intègre l'équation sur chaque plan radial à  $z$  fixé :

$$\int_{\rho=0}^{+\infty} \int_{\theta=0}^{2\pi} e^{-in\theta} \psi_n^*(\rho) (H - \epsilon_n) \phi(\vec{r}) \rho d\rho d\theta = 0$$

On obtient alors :

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + V_n'(z)\right) f(z) = E f(z)$$

où  $V_n'$  dépend de  $\psi$ ,  $E$  de  $\epsilon$  et  $\psi$ . On a ramené le problème à l'étude d'un potentiel à une dimension.

### 4.3.1 Etats s

Pour  $n = 0$ , on a  $\psi(\rho, \theta) = C_{\lambda_0} e^{-\left(\frac{\rho}{\lambda_0}\right)^2}$ . La condition de normalisation donne  $C_{\lambda_0}$  :

$$1 = \int_0^{+\infty} \psi_0^2(\rho) 2\pi\rho d\rho = C_{\lambda_0}^2 2\pi \left(\frac{\lambda}{2^{\frac{1}{2}}}\right)^2 \int_0^{+\infty} e^{-u^2} u du$$

$$C_{\lambda_0}^2 \pi \lambda_0^2 = 2$$

L'équation 1 s'écrit :

$$V(\rho, z) f(z) \psi_0(\rho) - \frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{1}{\rho} \left[ f(z) \frac{\partial}{\partial \rho} \left( \rho \frac{\partial}{\partial \rho} \psi_0 \right) + \rho \frac{\partial^2 f}{\partial z^2} \psi_0 \right] = \epsilon f(z) \psi_0(\rho)$$

On obtient ainsi le hamiltonien effectif pour le mouvement suivant la direction  $z$  :

$$\left[ V_0'(z) - \frac{\hbar^2}{2m^*} \Delta \right] f(z) = E f(z)$$

avec :

$$V_0'(z) = \int_0^{+\infty} \psi_0^2(\rho) V(\rho, z) 2\pi\rho d\rho$$

$$E = \epsilon + \frac{\hbar^2}{2m^*} \int_0^{+\infty} 2\pi\psi_0(\rho) \frac{\partial}{\partial \rho} \left[ \rho \frac{\partial}{\partial \rho} \psi_0 \right] d\rho$$

Le deuxième terme dans l'énergie s'explique :

$$\begin{aligned} \int_0^{+\infty} 2\pi\psi_0(\rho) \frac{\partial}{\partial\rho} [\rho \frac{\partial}{\partial\rho} \psi_0] d\rho &= - \int_0^{+\infty} 2\pi\rho [\frac{\partial}{\partial\rho} \psi_0]^2 d\rho \\ &= -C_{\lambda_0}^2 2\pi \int_0^{+\infty} \rho (\frac{2\rho}{\lambda_0^2})^2 e^{-2(\frac{\rho}{\lambda_0})^2} d\rho = -C_{\lambda_0}^2 2\pi \int_0^{+\infty} u^3 e^{-u^2} du = -C_{\lambda_0}^2 \pi = -\frac{2}{\lambda_0^2} \end{aligned}$$

Ainsi :

$$\epsilon_0 = E + \frac{\hbar^2}{m^* \lambda_0^2}$$

On peut interpréter physiquement les deux termes de l'énergie totale  $\epsilon_0$  :  $E$  est l'énergie du piège à une dimension, donc négative, tandis que le terme positif  $\frac{\hbar^2}{m^* \lambda_0^2}$  représente l'énergie cinétique radiale de l'électron.

Déterminons à présent  $V_0'$ . On calcule pour  $0 < z < h$  :

$$V_0'(z) = -V_0 \int_0^{[R - \frac{z}{\tan(\alpha)}]} 2\pi\rho C_{\lambda_0}^2 e^{-2(\frac{\rho}{\lambda_0})^2} d\rho = -V_0 2\pi \frac{\lambda_0^2}{2} C_{\lambda_0}^2 \int_0^{\frac{2^{1/2}}{\lambda_0} [R - \frac{z}{\tan(\alpha)}]} u e^{-u^2} du = -V_0 [1 - e^{-\frac{2}{\lambda_0^2} [R - \frac{z}{\tan(\alpha)}]^2}]$$

On a donc :

$$\begin{cases} \forall z < -d, V_0'(z) = 0 \\ \forall -d < z < 0, V_0'(z) = -V_0 \\ \forall 0 < z < h, V_0'(z) = -V_0 [1 - e^{-\frac{2}{\lambda_0^2} [R - \frac{z}{\tan(\alpha)}]^2}] \\ \forall z > h, V_0'(z) = 0 \end{cases}$$

#### 4.3.2 Etats p

Pour  $n = 1$ , on a  $\psi_1(\rho, \theta) = D_{\lambda_1} \rho e^{-(\frac{\rho}{\lambda_1})^2}$ . La condition de normalisation donne  $D_{\lambda_1}$  :

$$\begin{aligned} \int_0^{+\infty} \psi_1^2(\rho) 2\pi\rho d\rho &= 1 \\ D_{\lambda_1}^2 2\pi (\frac{\lambda_1}{2})^4 \int_0^{+\infty} e^{-u^2} u^3 du &= 1 \\ D_{\lambda_1}^2 \pi \lambda_1^4 &= 4 \end{aligned}$$

L'équation 1 s'écrit :

$$V(\rho, z) e^{i\theta} f(z) \psi_1(\rho) - \frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{1}{\rho} [f(z) e^{i\theta} \frac{\partial}{\partial\rho} (\rho \frac{\partial}{\partial\rho} \psi_1) + f(z) \frac{\psi_1(\rho)}{\rho} \frac{\partial^2}{\partial\theta^2} (e^{i\theta}) + \rho \frac{\partial^2 f}{\partial z^2} \psi_1 e^{i\theta}] = \epsilon_1 f(z) \psi_1(\rho) e^{i\theta}$$

On obtient donc :

$$f(z) V_1'(z) - \frac{\hbar^2}{2m^*} [f(z) \int_0^{+\infty} 2\pi\psi_1(\rho) \frac{\partial}{\partial\rho} (\rho \frac{\partial}{\partial\rho} \psi_1) d\rho - f(z) \int_0^{+\infty} \frac{\psi_1(\rho)^2}{\rho^2} 2\pi\rho d\rho + \frac{\partial^2 f}{\partial z^2}] = \epsilon_1 f(z)$$

soit

$$[V_1'(z) - \frac{\hbar^2}{2m^*} \Delta] f(z) = E f(z)$$

avec :

$$\begin{aligned} V_1'(z) &= \int_0^{+\infty} 2\pi\rho\psi_1^2(\rho) V(\rho, z) d\rho \\ E &= \epsilon_1 + \frac{\hbar^2}{2m^*} [\int_0^{+\infty} 2\pi\psi_1(\rho) \frac{\partial}{\partial\rho} (\rho \frac{\partial}{\partial\rho} \psi_1) d\rho - \int_0^{+\infty} \frac{\psi_1(\rho)^2}{\rho^2} 2\pi\rho d\rho] \end{aligned}$$

On explicite les différents termes de  $E$  :

$$\begin{aligned} - \int_0^{+\infty} 2\pi\psi_1(\rho) \frac{\partial}{\partial\rho} (\rho \frac{\partial}{\partial\rho} \psi_1) d\rho &= -2\pi \int_0^{+\infty} \rho [\frac{\partial}{\partial\rho} \psi_1(\rho)]^2 d\rho \\ &= -2\pi D_{\lambda_1}^2 \frac{\lambda_1^2}{2} \int_0^{+\infty} u(1-u^2)^2 e^{-u^2} du = -2\pi D_{\lambda_1}^2 \frac{\lambda_1^2}{4} = -\frac{2}{\lambda_1^2} \\ \int_0^{+\infty} \frac{\psi_1(\rho)^2}{\rho^2} 2\pi\rho d\rho &= 2\pi D_{\lambda_1}^2 \frac{\lambda_1^2}{2} \int_0^{+\infty} e^{-u^2} u du = \frac{2}{\lambda_1^2} \end{aligned}$$

Ainsi :

$$\epsilon_1 = E + \frac{2\hbar^2}{m^* \lambda_1^2}$$

Déterminons à présent  $V_1'$ . On calcule pour  $0 < z < h$  :

$$\begin{aligned} V_1'(z) &= -V_0 2\pi \int_0^{[R - \frac{z}{\tan(\alpha)}]} \rho D_{\lambda_1}^2 [\rho e^{-\left(\frac{\rho}{\lambda_1}\right)^2}]^2 d\rho \\ &= -V_0 \frac{\pi D_{\lambda_1}^2 \lambda_1^4}{2} \int_0^{\frac{2\frac{z}{\lambda_1}}{[R - \frac{z}{\tan(\alpha)}]}} u^3 e^{-u^2} du \\ &= -V_0 \left[ 1 - e^{-\frac{z}{\lambda_1^2} \left(R - \frac{z}{\tan(\alpha)}\right)^2} \left[ 1 + \frac{2}{\lambda_1^2} \left(R - \frac{z}{\tan(\alpha)}\right)^2 \right] \right] \end{aligned}$$

Ainsi :

$$\begin{cases} \forall z < -d, V_1'(z) = 0 \\ \forall -d < z < 0, V_1'(z) = -V_0 \\ \forall 0 < z < h, V_1'(z) = -V_0 \left[ 1 - e^{-\frac{z}{\lambda_1^2} \left(R - \frac{z}{\tan(\alpha)}\right)^2} \left[ 1 + \frac{2}{\lambda_1^2} \left(R - \frac{z}{\tan(\alpha)}\right)^2 \right] \right] \\ \forall z > h, V_1'(z) = 0 \end{cases}$$

#### 4.4 Allure du potentiel effectif

Graphiquement pour  $\lambda = R = 100 \text{ \AA}$  et  $\alpha = 30^\circ$  on obtient :

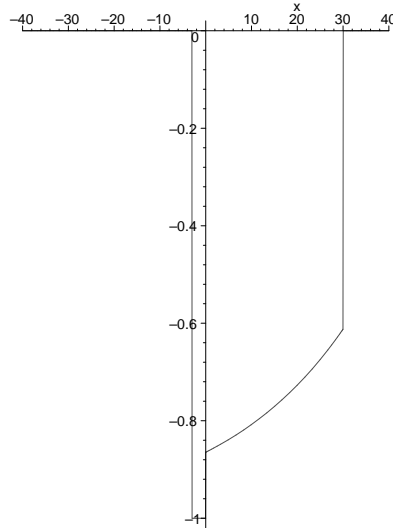


Figure 5 (a) :  $V_0'(z)$  avec  $z$  en  $\text{\AA}$  et  $V_0'$  en unité  $V_0$

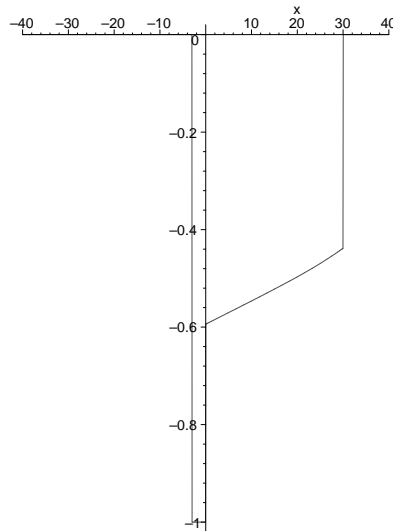


Figure 5 (b) :  $V_1'(z)$  avec  $z$  en  $\text{\AA}$  et  $V_1'$  en unité  $V_0$



La forme des potentiels à une dimension obtenus  $V_0'$  et  $V_1'$  ne permet pas une résolution exacte explicite de l'équation en raison de l'allure complexe pour  $0 < z < h$ . Par contre, on sait résoudre l'équation de Schrödinger dans les cas simples d'un potentiel en escalier, ou bien harmonique par morceaux. On va ainsi remplacer le potentiel effectif par un potentiel approché, puis on vérifiera la cohérence des résultats obtenus par méthode perturbative.

L'approximation la plus simple consiste à remplacer le potentiel dans la zone  $0 < z < h$  par un palier de valeur égale à la valeur moyenne du potentiel, c'est à dire à poser :

$$V_n''(z) = \frac{1}{h} \int_0^h V_n'(u) du$$

pour  $0 < z < h$ .

On considère donc pour  $n = 0$  :

$$\begin{cases} \forall z < -d, V_0''(z) = 0 \\ \forall -d < z < 0, V_0''(z) = -V_0 \\ \forall 0 < z < h, V_0''(z) = -V_0 \left[ 1 - \int_0^1 e^{-2(\frac{R}{\lambda})^2 [1 - \frac{hu}{R \tan(\alpha)}]} du = -V_0^{(3)} \right] \\ \forall z > h, V_0''(z) = 0 \end{cases}$$

et pour  $n=1$  :

$$\begin{cases} \forall z < -d, V_1''(z) = 0 \\ \forall -d < z < 0, V_1''(z) = -V_0 \\ \forall 0 < z < h, V_1''(z) = -V_0 \left[ 1 - \int_0^1 e^{-2(\frac{R}{\lambda})^2 [1 - \frac{hu}{R \tan(\alpha)}]} [1 + 2(\frac{R}{\lambda})^2 [1 - \frac{hu}{R \tan(\alpha)}]]^2 du = -V_1^{(3)} \right] \\ \forall z > h, V_1''(z) = 0 \end{cases}$$

L'allure de  $V''$  est représentée sur la figure 6 :

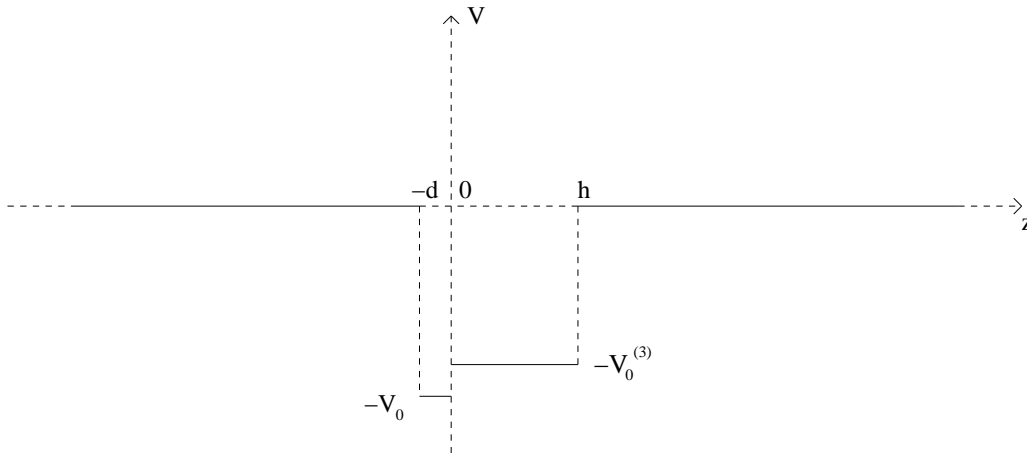


Figure 6 : Potentiel à 3 paliers

Ces approximations faites, on va pouvoir estimer  $\epsilon_n(\lambda_n)$  et espérer trouver un minimum en faisant varier  $\lambda_n$ .

## 5 Etude de l'équation approchée

### 5.1 Etude d'un potentiel à 3 paliers

On étudie de manière générale le potentiel suivant :

$$\begin{cases} \forall z < -d, V(z) = 0 \\ \forall -d < z < 0, V(z) = -V_0 \\ \forall 0 < z < h, V(z) = -V_0^{(3)} \\ \forall z > h, V(z) = 0 \end{cases}$$

avec  $0 < V_0^{(3)} < V_0$  (voir figure 6) pour l'équation :

$$\left(-\frac{\hbar^2 \Delta}{2m^*} + V\right)f(z) = Ef(z)$$

Les formes des solutions diffèrent suivant les valeurs relatives de  $E$ , 0 et  $V_1$ . On ne s'intéresse qu'à des états liés, donc on cherche les solutions pour  $E < 0$ .

### 5.1.1 Cas 1 : $0 > E > -V_0^{(3)}$

Soient

$$\begin{cases} k_0 = \left(-\frac{E2m^*}{\hbar^2}\right)^{\frac{1}{2}} \\ k_1 = \left(-\frac{(V_0+E)2m^*}{\hbar^2}\right)^{\frac{1}{2}} \\ k_2 = \left(\frac{(V_0^{(3)}+E)2m^*}{\hbar^2}\right)^{\frac{1}{2}} \end{cases}$$

Alors toute solution  $f$  d'énergie  $E$  est de la forme :

$$\begin{cases} \forall z < -d, f(z) = Ae^{k_0(z+d)} \\ \forall -d < z < 0, f(z) = B \cos(k_1(z+d)) + C \sin(k_1(z+d)) \\ \forall 0 < z < h, f(z) = D \cos(k_2(z-h)) + E \sin(k_2(z-h)) \\ \forall z > h, f(z) = Fe^{-k_0(z-h)} \end{cases}$$

Comme le potentiel étudié est borné, on a continuité de  $f$  et  $\frac{\partial f}{\partial z}$  en  $-d$ , 0 et  $h$ , ce qui donne :

$$\begin{cases} A = B \\ k_0 A = k_1 C \\ F = D \\ -k_0 F = Ek_2 \\ B \cos(k_1 d) + C \sin(k_1 d) = D \cos(k_2 h) - E \sin(k_2 h) \\ k_1 [-B \sin(k_1 d) + C \cos(k_1 d)] = k_2 [-D \sin(-k_2 h) + E \cos(k_2 h)] \end{cases}$$

On peut exprimer toutes les constantes en fonction de  $A$  :

$$\begin{cases} B = A \\ C = \frac{k_0}{k_1} A \\ F = D = A \frac{\cos(k_1 d) + \frac{k_0}{k_1} \sin(k_1 d)}{\cos(k_2 h) + \frac{k_0}{k_2} \sin(k_2 h)} \\ E = -\frac{k_0}{k_2} A \frac{\cos(k_1 d) + \frac{k_0}{k_1} \sin(k_1 d)}{\cos(k_2 h) + \frac{k_0}{k_2} \sin(k_2 h)} \end{cases}$$

Alors la dernière équation donne une condition de quantification de  $E$  si  $f$  est non nulle :

$$\begin{aligned} & \left[\cos(k_1 d) + \frac{k_0}{k_1} \sin(k_1 d)\right] k_2 [\sin(k_2 h) - \frac{k_0}{k_2} \cos(k_2 h)] \\ &= \left[\cos(k_2 h) + \frac{k_0}{k_2} \sin(k_2 h)\right] k_1 [-\sin(k_1 d) + \frac{k_0}{k_1} \cos(k_1 d)] \end{aligned}$$

### 5.1.2 Cas 2 : $0 > -V_0^{(3)} > E$

$$\begin{cases} k_0 = \left(-\frac{E2m^*}{\hbar^2}\right)^{\frac{1}{2}} \\ k_1 = \left(-\frac{(V_0+E)2m^*}{\hbar^2}\right)^{\frac{1}{2}} \\ k_2 = \left(\frac{(-V_0^{(3)}-E)2m^*}{\hbar^2}\right)^{\frac{1}{2}} \end{cases}$$

Alors toute solution  $f$  d'énergie  $E$  est de la forme :

$$\begin{cases} \forall z < -d, f(z) = Ae^{k_0(z+d)} \\ \forall -d < z < 0, f(z) = B \cos(k_1(z+d)) + C \sin(k_1(z+d)) \\ \forall 0 < z < h, f(z) = De^{k_2(z-h)} + Ee^{k_2(z-h)} \\ \forall z > h, f(z) = Fe^{-k_0(z-h)} \end{cases}$$

Comme le potentiel étudié est borné, on a continuité de  $f$  et  $\frac{\partial f}{\partial z}$  en  $-d$ ,  $0$  et  $h$ , ce qui donne :

$$\begin{cases} A = B \\ k_0 A = k_1 C \\ F = D + E \\ -k_0 F = (D - E)k_2 \\ B \cos(k_1 d) + C \sin(k_1 d) = D e^{k_2 h} + E e^{k_2 h} \\ k_1 [-B \sin(k_1 d) + C \cos(k_1 d)] = k_2 [D e^{-k_2 h} - E e^{k_2 h}] \end{cases}$$

On peut exprimer toutes les constantes en fonction de  $A$  :

$$\begin{cases} B = A \\ C = \frac{k_0}{k_1} A \\ F = A \frac{\cos(k_1 d) + \frac{k_0}{k_1} \sin(k_1 d)}{.5(1 - \frac{k_0}{k_2})e^{-k_2 h} + .5(1 + \frac{k_0}{k_2})e^{k_2 h}} \\ D = A .5(1 - \frac{k_0}{k_2}) \frac{\cos(k_1 d) + \frac{k_0}{k_1} \sin(k_1 d)}{.5(1 - \frac{k_0}{k_2})e^{-k_2 h} + .5(1 + \frac{k_0}{k_2})e^{k_2 h}} \\ E = A .5(1 + \frac{k_0}{k_2}) \frac{\cos(k_1 d) + \frac{k_0}{k_1} \sin(k_1 d)}{.5(1 - \frac{k_0}{k_2})e^{-k_2 h} + .5(1 + \frac{k_0}{k_2})e^{k_2 h}} \end{cases}$$

Alors la dernière équation donne une condition de quantification de  $E$  si  $f$  est non nulle :

$$\begin{aligned} & k_1 [-\sin(k_1 d) + \frac{k_0}{k_1} \cos(k_1 d)] \\ = & k_2 [.5(1 - \frac{k_0}{k_2}) \frac{\cos(k_1 d) + \frac{k_0}{k_1} \sin(k_1 d)}{.5(1 - \frac{k_0}{k_2})e^{-k_2 h} + .5(1 + \frac{k_0}{k_2})e^{k_2 h}} e^{-k_2 h} - .5(1 + \frac{k_0}{k_2}) \frac{\cos(k_1 d) + \frac{k_0}{k_1} \sin(k_1 d)}{.5(1 - \frac{k_0}{k_2})e^{-k_2 h} + .5(1 + \frac{k_0}{k_2})e^{k_2 h}} e^{k_2 h}] \end{aligned}$$

## 5.2 Méthode de résolution numérique

A présent nous avons tous les résultats nécessaires à la résolution numérique du problème approché : les deux équations obtenues en 4.1, de la forme  $f(E, V_1) = 0$  permettent de tracer  $E(V_1)$ . Il peut arriver pour certaines plages des données numériques que l'on ait plusieurs valeurs de  $E$  à  $V_1$  fixé, c'est à dire plus d'une solution liée suivant  $z$ .

Suivant le cas étudié (s ou p) on a  $V_1(a)$  où on a posé  $\lambda = aR$ . On en déduit la courbe  $E(a)$  (la valeur choisie pour  $E$  étant celle de l'état fondamental), puis  $\epsilon(a)$ . On cherche ensuite un minimum de  $\epsilon$ . On obtient ainsi plusieurs états : s fondamental, p fondamental, et éventuellement, s excité 1, s excité 2, p excité 1, p excité 2... avec pour chacun  $E, \epsilon, a, V_1$ . On peut alors aussi tracer les fonctions d'onde normées du potentiel effectif à une dimension grâce aux expressions  $k_0(E), k_1(E), k_2(E)$ .

Pour ce stage les applications numériques ont été effectuées sous MAPLE.

## 5.3 Résultats

On utilise les valeurs numériques données en 3. Les premières estimations de  $V^{(3)}$  en choisissant  $a \simeq 1$  sont très proches de  $V_0$ , on commence donc par effectuer les calculs dans le cas  $-V_0 < -V^{(3)} < E < 0$ . On vérifie ensuite que les valeurs obtenues sont cohérentes.

En utilisant la méthode décrite en 4.2, on obtient deux états s, et deux états p dans chacun des cas  $R=100$  A et  $R=300$  A. Ce qui donne, les énergies étant exprimées en unités  $V_0$  :

$R = 300 \overset{\circ}{A}$	$a$	$\epsilon$	$E$	$V^{(3)}$
$s_1$	0,49	-0,696	-0,703	-0,999
$s_2$	0,49	-0,0385	-0,0460	-0,999
$p_1$	0,45	-0,683	-0,701	-0,997
$p_2$	0,45	-0,0275	-0,0455	-0,997

et

$R = 100 \text{ \AA}$	$a$	$\epsilon$	$E$	$V^{(3)}$
$s_1$	0,49	-0,612	-0,680	-0,971
$s_2$	0,49	0,029	-0,039	-0,971
$p_1$	0,45	-0,482	-0,642	-0,926
$p_2$	0,45	0,133	-0,0285	-0,926

Remarquons qu'on a  $\epsilon_s < \epsilon_p$  dans tous les cas :  $s_1$  est bien l'état fondamental.

On peut alors déterminer les fonctions d'ondes à 1D puis à 3D (voir par exemple figures 7 (a) et (b) ; toutes les autres fonctions d'ondes sont en annexe).

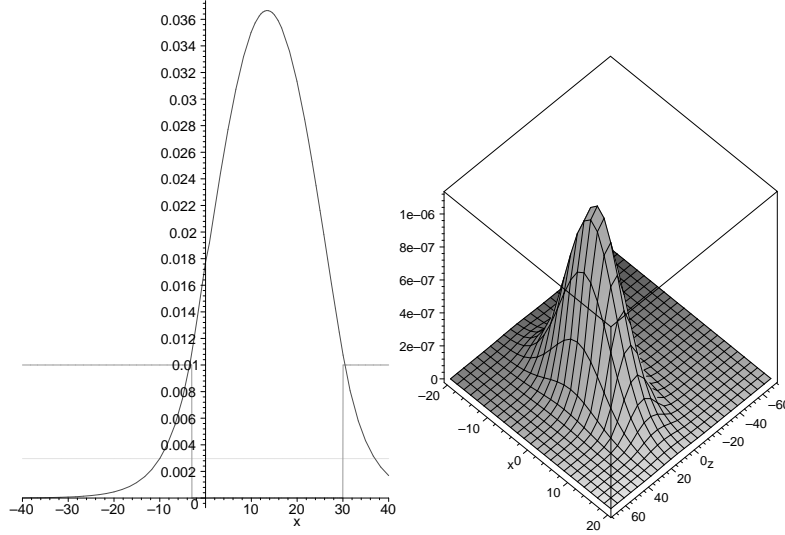


Figure 7 (a) :  $|f_{s_1}(z)|^2$  et  $|\phi_{s_1}(x, 0, z)|^2$  pour  $R = 300 \text{ \AA}$

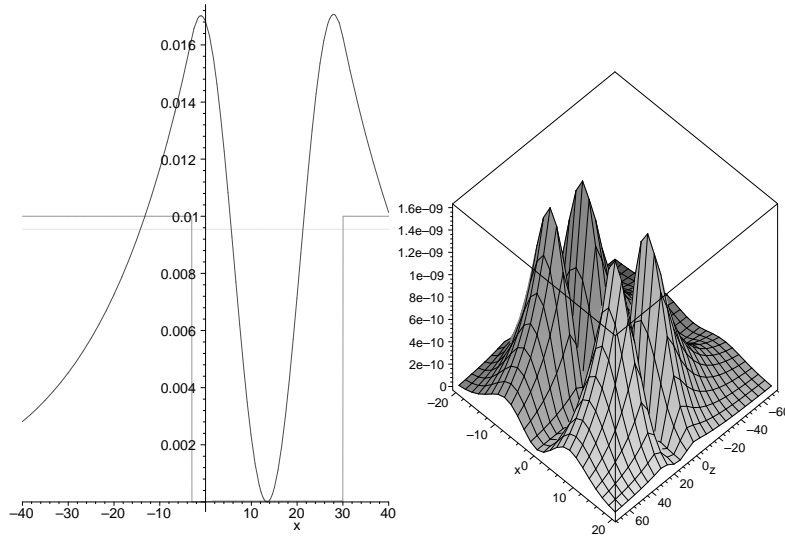


Figure 7 (b) :  $|f_{p_2}(z)|^2$  et  $|\phi_{p_2}(x, 0, z)|^2$  pour  $R = 300 \text{ \AA}$

## 5.4 Commentaires

Remarquons d'abord l'extension spatiale suivant (Ox) nettement plus importante pour  $R = 300 \text{ \AA}$  que pour  $R = 100 \text{ \AA}$ , ce qui traduit l'influence de la géométrie du piège.  $|\phi(x, 0, z)|^2$  admet un extremum pour les états  $s_1$ , deux pour les états  $s_2$  et  $p_1$  (mais suivant des axes différents) et quatre pour les états  $p_2$ . Ainsi pour les états excités, l'électron a une probabilité plus importante de se trouver aléatoirement dans une des "extrémités" du piège, tandis que pour l'état fondamental, le centre du piège est le lieu de probabilité la plus forte. On peut ici étudier une analogie avec la mécanique classique : considérons le cas d'une particule dans un potentiel à une dimension  $g(z)$  tel que  $g'' > 0$ ,  $g(0) = 0$ ,  $g'(0) = 0$ ,  $g(z) = g(-z)$  (oscillateurs harmoniques, elliptiques...)

d'énergie mécanique  $E = f(z) + \frac{1}{2}m\frac{dz}{dt}^2$ . Qualitativement, dans l'état fondamental  $E = 0$ , la particule se trouve certainement au centre du piège en  $z = 0$ ; pour les différents états excités  $E > 0$ , on a le plus chance lors des oscillations de trouver la particule à un instant donné là où sa vitesse est la moins grande, c'est à dire pour  $z$  proche de  $z_{max}$ , aux "extrémités" du piège. En effet, l'équation du mouvement donne pour  $\frac{dz}{dt} > 0$  :  $\frac{dz}{dt} = (2(\frac{E}{m} - g(z)))^{\frac{1}{2}}$ . La probabilité de trouver la particule entre  $z_1$  et  $z_2$  est proportionnelle à  $\int_{z_1}^{z_2} \frac{dt}{dz}(z)dz$  et donc la densité de probabilité de présence est  $P(z) = \frac{1}{(2(E-g(z)))^{\frac{1}{2}}}$  plus importante pour  $z$  proche de  $z_{max}$  que pour  $z = 0$ .

Remarquons que pour les états  $s_2$  et  $p_2$  avec  $R = 100\overset{\circ}{\text{Å}}$ , l'énergie totale  $\epsilon$  est positive, ce qui n'est pas physiquement cohérent pour un état piégé. Les différentes approximations effectuées ont donc introduit ces états artificiellement.

On peut évaluer l'erreur commise en approchant  $V'$  par  $V''$  par méthode perturbative au premier ordre :

$$\epsilon' - \epsilon'' = E' - E'' \approx \int_0^h [V'(z) - V''(z)]|f(z)|^2 dz$$

Voici les résultats (toutes les énergies étant exprimées en unités  $V_0$ ) :

pour  $R = 300\overset{\circ}{\text{Å}}$  :

<i>Etats</i>	$s_1$	$s_2$	$p_1$	$p_2$
$\epsilon$	-0,696	-0,0385	-0,683	-0,0275
$\Delta\epsilon$	$-8.10^{-5}$	$-1,4.10^{-4}$	$1,35.10^{-4}$	$-2,6.10^{-4}$

pour  $R = 100\overset{\circ}{\text{Å}}$  :

<i>Etats</i>	$s_1$	$s_2$	$p_1$	$p_2$
$\epsilon$	-0,612	0,029	-0,492	0,133
$\Delta\epsilon$	$6,5.10^{-3}$	$-4.10^{-3}$	$1,42.10^{-2}$	$-8,43.10^{-3}$

On constate que dans tous ces cas,  $|\frac{\Delta\epsilon}{\epsilon}| \ll 1$ , ce qui justifie l'utilisation de  $V''$  à la place de  $V'$ .

## 6 Application : probabilité d'absorption d'une onde plane

Nous connaissons à présent les premiers états piégés possibles pour l'électron. On va étudier la probabilité d'absorption d'une onde plane monochromatique par un tel électron piégé, c'est à dire la probabilité d'excitation à partir de l'état fondamental. On suppose dans tout ce qui suit que les énergies associées à l'onde incidente sont petites devant les énergies associées au piège quantique.

### 6.1 Evaluation dans le cas général : modèle semi-classique

On soumet l'électron piégé dans l'état fondamental à une onde plane incidente dans la direction  $\vec{u}_\alpha$  :

$$\vec{E} = E_0 \exp(i(kx_\alpha - \omega t))\vec{u}_\alpha$$

L'Hamiltonien est alors :

$$H = \frac{(\vec{P} - q\vec{A}(\vec{r}))^2}{2m^*} + qV(\vec{r})$$

soit au premier ordre en  $E_0$  :

$$H = H_0 - \frac{q}{m} \vec{P} \cdot \vec{A}(0)$$

où  $H_0$  est le hamiltonien de l'électron dans le semiconducteur sans onde incidente. Ainsi :

$$H = H_0 + H_i$$

$$H_i = \frac{qE_0}{m^*\omega} P_\alpha \sin(\omega t)$$

On peut alors traiter le problème de manière perturbative au premier ordre. On montre alors que la probabilité d'atteindre l'état  $j$  à partir de l'état  $i$  est d'autant plus importante que  $I_{\alpha i \rightarrow j} = | \langle j | \vec{R} \cdot \vec{u}_\alpha | i \rangle |$  est grand.

## 6.2 Probabilités dans le cas étudié

Posons :

$$I_{z1 \rightarrow 2} = \int_E \psi_1^*(\vec{r}) z \psi_2 r d^3 \vec{r}$$

$$I_{r1 \rightarrow 2} = \int_E \psi_1^*(\vec{r}) r \cos(\theta) \psi_2 r d^3 \vec{r}$$

Pour toute direction  $\alpha$  normale à  $\vec{u}_z$  on a :  $I_{\alpha 1 \rightarrow 2} = I_{r1 \rightarrow 2}$  par symétrie de révolution. Alors dans les cas étudiés :

$$I_{z s_1 \rightarrow s_2} = \int_0^{+\infty} z f_{s_1}(z) f_{s_2}(z) dz \frac{2}{\pi} \int_0^{+\infty} e^{-2(\frac{\rho}{\lambda})^2} \frac{2\pi \rho d\rho}{\lambda^2}$$

$$I_{z s_1 \rightarrow s_2} = \int_0^{+\infty} z f_{s_1}(z) f_{s_2}(z) dz$$

$$I_{z s_1 \rightarrow p_1} = \int_0^{+\infty} z f_{s_1}(z) f_{p_1}(z) dz \int_0^{+\infty} \int_0^{2\pi} \psi_{s_1}(\rho) \psi_{p_1}(\rho) e^{-i\theta} \rho d\theta d\rho = 0$$

$$I_{z s_1 \rightarrow p_1} = I_{z s_1 \rightarrow p_2} = I_{z s_2 \rightarrow p_1} = I_{z s_2 \rightarrow p_2} = 0$$

$$I_{z p_1 \rightarrow p_2} = \int_0^{+\infty} z f_{p_1}(z) f_{p_2}(z) dz \int_0^{+\infty} \frac{4\rho^2}{\pi \lambda^4} e^{-2(\frac{\rho}{\lambda})^2} 2\pi \rho d\rho$$

$$I_{z p_1 \rightarrow p_2} = I_{z p_1 \rightarrow p_2} = \int_0^{+\infty} z f_{p_1}(z) f_{p_2}(z) dz$$

$$I_{r s_1 \rightarrow s_2} = \int_0^{+\infty} f_{s_1}(z) f_{s_2}(z) dz \frac{2}{\pi} \int_0^{+\infty} \int_0^{2\pi} \cos(\theta) \rho e^{-2(\frac{\rho}{\lambda})^2} \frac{\rho d\rho}{\lambda^2} d\theta = 0$$

$$I_{r p_1 \rightarrow p_2} = \int_0^{+\infty} f_{p_1}(z) f_{p_2}(z) dz \int_0^{+\infty} \int_0^{2\pi} \rho \cos(\theta) \frac{4\rho^2}{\pi \lambda^4} e^{-2(\frac{\rho}{\lambda})^2} \rho d\rho d\theta = 0$$

$$I_{r s_1 \rightarrow p_1} = \int_0^{+\infty} f_{s_1}(z) f_{p_1}(z) dz \int_0^{+\infty} \int_0^{2\pi} \rho \cos(\theta) \frac{2.2^{\frac{1}{2}}}{\pi \lambda_s \lambda_p^2} \rho e^{-(\frac{\rho}{\lambda_s})^2 - (\frac{\rho}{\lambda_p})^2} e^{-i\theta} \rho d\rho d\theta$$

$$I_{r s_1 \rightarrow p_1} = \int_0^{+\infty} f_{s_1}(z) f_{p_1}(z) dz 2^{\frac{1}{2}} \frac{R}{a_s a_p^2 [\frac{1}{a_s^2} + \frac{1}{a_p^2}]^2}$$

et formules analogues pour  $I_{r s_1 \rightarrow p_2}$ ,  $I_{r s_2 \rightarrow p_1}$  et  $I_{r s_2 \rightarrow p_2}$ .

## 6.3 Evaluation numérique

En utilisant les fonctions d'ondes évaluées numériquement précédemment, on obtient (longueurs en  $\text{Å}$ ) :  
pour  $R = 300$  :

$$I_z \begin{vmatrix} s_1 & s_2 & p_1 & p_2 \\ s_1 & -10 & 0 & 0 \\ s_2 & -10 & 0 & 0 \\ p_1 & 0 & 0 & 4480 \\ p_2 & 0 & 0 & 4480 \end{vmatrix}$$

$$I_r \begin{vmatrix} s_1 & s_2 & p_1 & p_2 \\ s_1 & & 0 & 939 & -,75 \\ s_2 & 0 & & -,75 & 470 \\ p_1 & 939 & -,75 & & 0 \\ p_2 & -,75 & 470 & 0 & \end{vmatrix}$$

pour  $R = 100$

$$\begin{array}{l} I_z \\ s_1 \\ p_1 \end{array} \left| \begin{array}{l} s_1 \\ 0 \end{array} \right| \begin{array}{l} p_1 \\ 0 \end{array}$$
$$\begin{array}{l} I_r \\ s_1 \\ p_1 \end{array} \left| \begin{array}{l} s_1 \\ 157 \end{array} \right| \begin{array}{l} p_1 \\ 157 \end{array}$$

Il apparait ici que pour une géométrie avec  $R=100\text{\AA}$ , la direction  $(Oz)$  est privilégiée pour la transmission, tandis que pour une géométrie avec  $R=300\text{\AA}$ , on peut avoir absorption dans toutes les directions. Cependant pour  $R=300\text{\AA}$ , l'excitation de  $p_1$  à  $p_2$  sur  $(Oz)$  est plus probable que celle de  $s_1$  à  $s_2$ , et donc la transmission sera favorisée si les électrons sont tous dans leur état fondamental (basses températures).

## Conclusion

Le modèle quantique simple étudié permet d'obtenir quelques prédictions, en particulier les différences entre les niveaux énergétiques liés, et l'anisotropie optique du semiconducteur lorsque les pièges sont occupés. Les résultats sont en accord avec les mesures effectuées.

Ce type de piègeage présente le double intérêt de contrôler certaines propriétés du milieu semiconducteur et de confiner avec précision les électrons.

## 7 Annexe I : Résultats numériques

Voici les valeurs de  $\epsilon$  qui ont permis la minimisation :

$R = 300\overset{\circ}{\text{Å}}$	$a$	$\epsilon$	$\epsilon(a-, 01)$	$\epsilon(a + .01)$	$E$	$V^{(3)}$
$s_1$	0,49	-0,695612	-0,69554	-0,695608	-0,703	-0,999
$s_2$	0,49	-0,0385			-0,0460	-0,999
$p_1$	0,45	-0,683644	-0,68354	-0,683505	-0,701	-0,997
$p_2$	0,45	-0,0275			-0,0455	-0,997

$R = 100\overset{\circ}{\text{Å}}$	$a$	$\epsilon$	$\epsilon(a-, 01)$	$\epsilon(a + .01)$	$E$	$V^{(3)}$
$s_1$	0,49	-0,611177	-0,61164	-0,611560	-0,680	-0,971
$s_2$	0,49	0,029			-0,039	-0,971
$p_1$	0,45	-0,4819	-0,4814	-0,4816	-0,642	-0,926
$p_2$	0,45	0,133			-0,0285	-0,926

Voici les résultats des calculs permettant d'obtenir les fonctions d'onde. Les valeurs données ici de C,D,E et F ne tiennent pas encore compte de la normalisation, on a choisi A=B=1. Ensuite pour la normalisation, Int est l'intégrale au carrée de la fonction non normalisée obtenue.

<i>Etats</i>	$k_0$	$k_1$	$k_2$	$C$	$D$	$E$	$F$	$Int.10^{-10}$
$s_1; 300\overset{\circ}{\text{Å}}$	0,093	0,060	1,59	0,998	-1,540	0,998	-1,540	91,88
$s_2; 300\overset{\circ}{\text{Å}}$	0,024	0,108	0,108	0,220	-1	0,220	-1	60,00
$p_1; 300\overset{\circ}{\text{Å}}$	0,093	0,0604	0,0603	1,54	1	-1,543	1	92,60
$p_2; 300\overset{\circ}{\text{Å}}$	0,0238	0,108	0,108	0,220	-1	0,220	-1	61,55
$s_1; 100\overset{\circ}{\text{Å}}$	0,091	0,063	0,0599	1,46	0,991	-1,514	0,991	90,01
$s_2; 100\overset{\circ}{\text{Å}}$	0,022	0,109	0,107	0,201	-1	0,204	-1	64,81
$p_1; 100\overset{\circ}{\text{Å}}$	0,0919	0,0622	0,0621	1,477	1,113	-1,647	1,113	86,93
$p_2; 100\overset{\circ}{\text{Å}}$	0,0187	0,109	0,105	0,171	-0,989	0,178	-0,989	71,06

$R$	$100\overset{\circ}{\text{Å}}$	$300\overset{\circ}{\text{Å}}$
$C_\lambda.10^{-10}$	$1,628.10^{-2}$	$5,543.10^{-3}$
$D_\lambda.10^{-10}$	$5,5722.10^{-4}$	$6,19.10^{-5}$



## 8 Annexe II : Fonctions d'onde

Voici le tracé de toutes les fonctions d'onde évaluées :

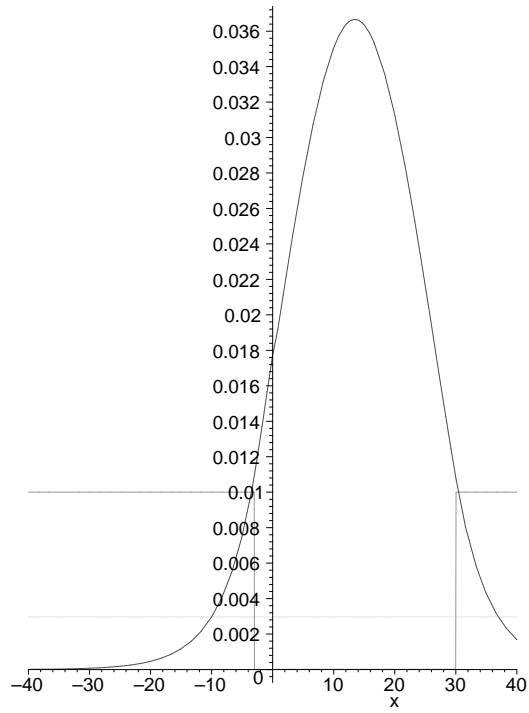


Figure 1 (a) :  $|f_{s_1}(z)|^2$  pour  $R = 300\text{Å}$

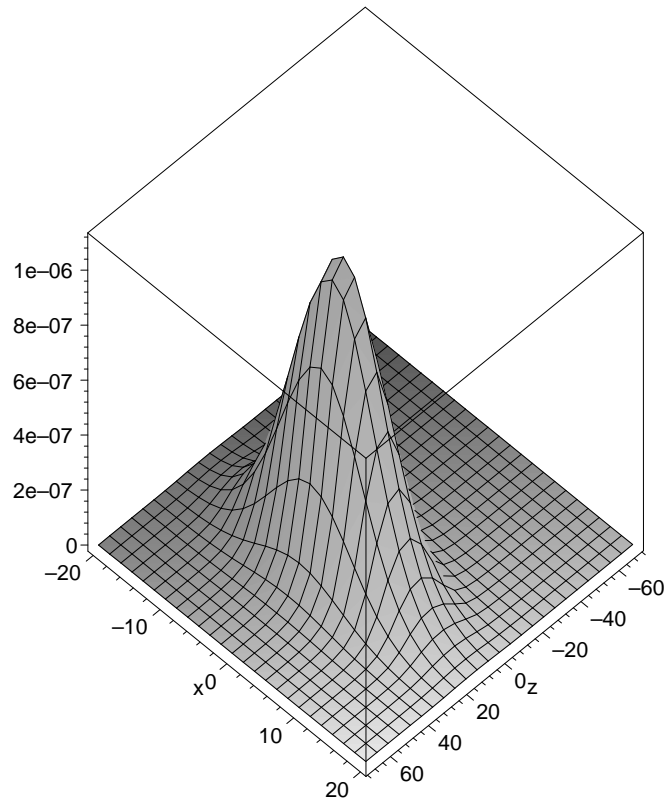


Figure 1 (b) :  $|\phi_{s_1}(x, 0, z)|^2$  pour  $R = 300\text{Å}$

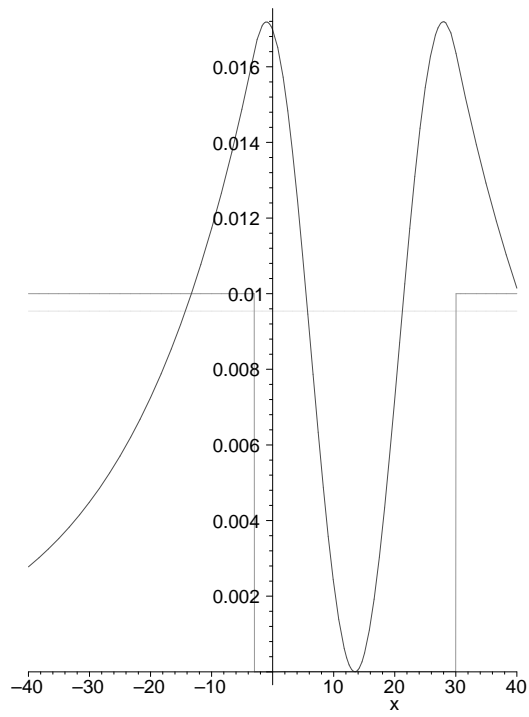


Figure 2 (a) :  $|f_{s_2}(z)|^2$  pour  $R = 300\text{\AA}$

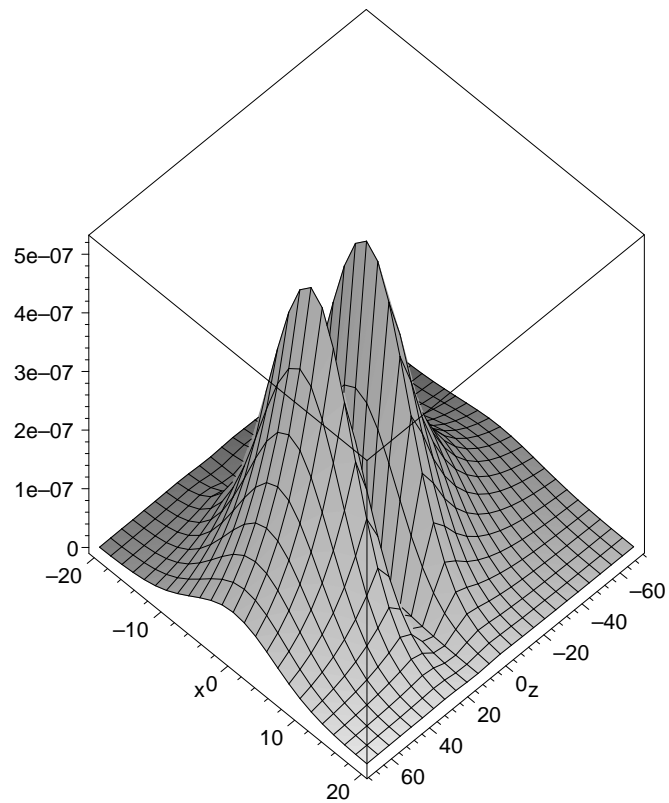


Figure 2 (b) :  $|\phi_{s_2}(x, 0, z)|^2$  pour  $R = 300\text{\AA}$

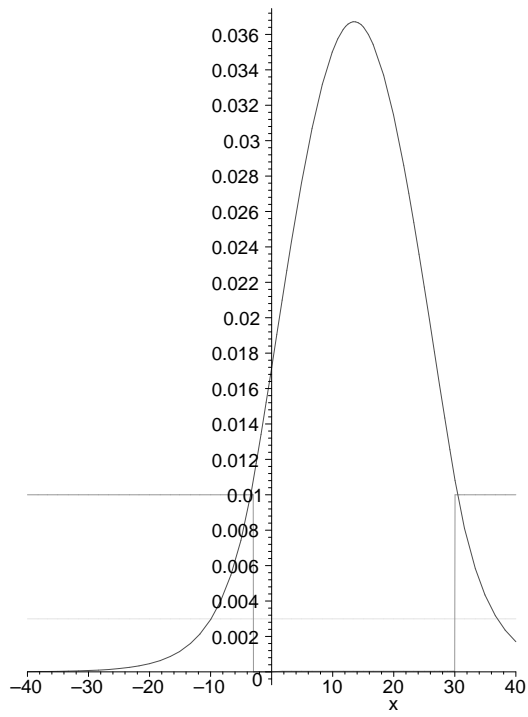


Figure 3 (a) :  $|f_{p_1}(z)|^2$  pour  $R = 300\text{\AA}$

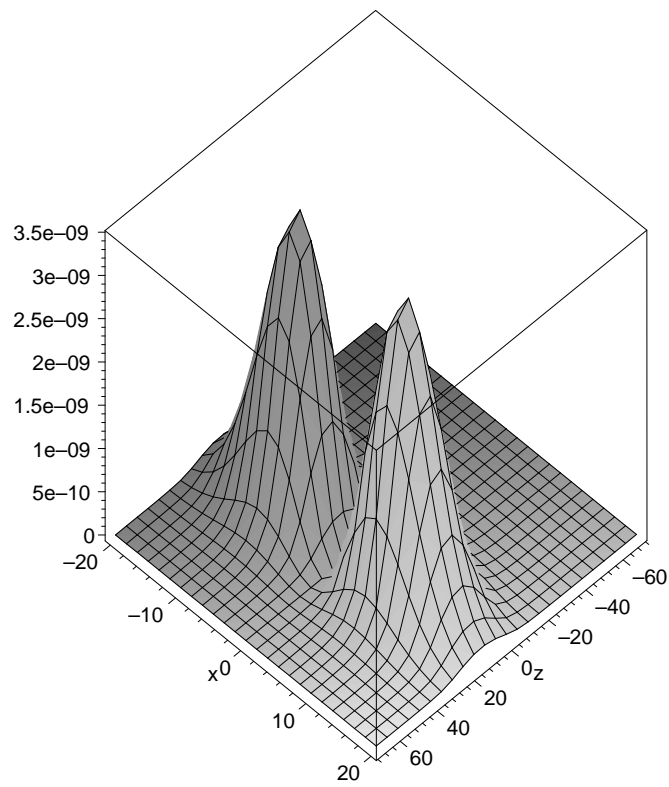


Figure 3 (b) :  $|\phi_{p_1}(x, 0, z)|^2$  pour  $R = 300\text{\AA}$

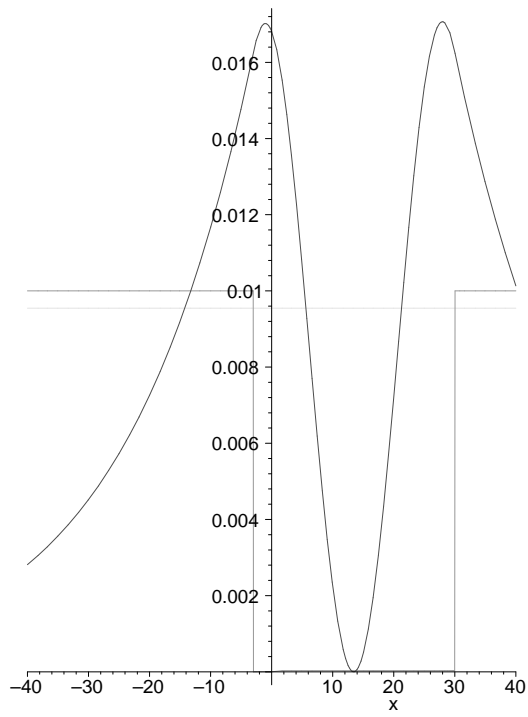


Figure 4 (a) :  $|f_{p_2}(z)|^2$  pour  $R = 300\text{\AA}$

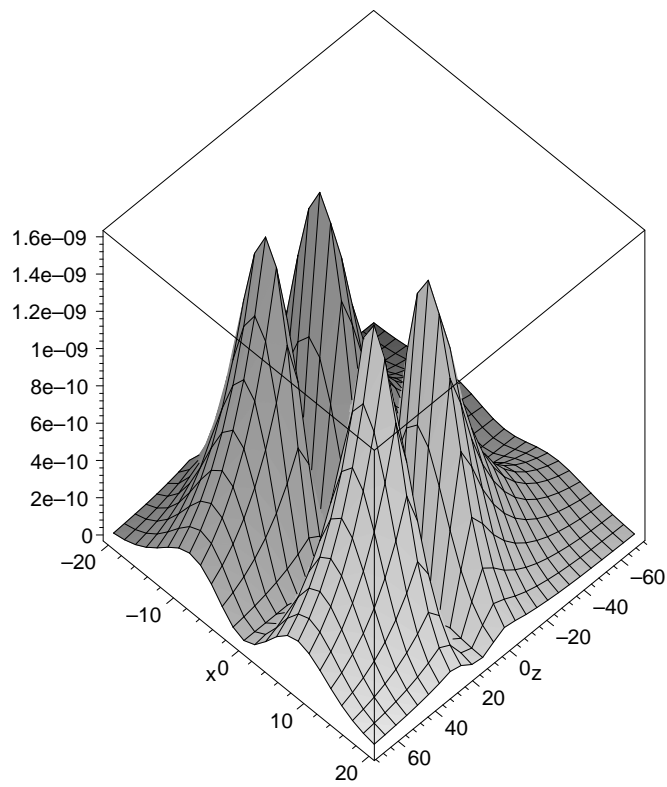


Figure 4 (b) :  $|\phi_{p_2}(x, 0, z)|^2$  pour  $R = 300\text{\AA}$

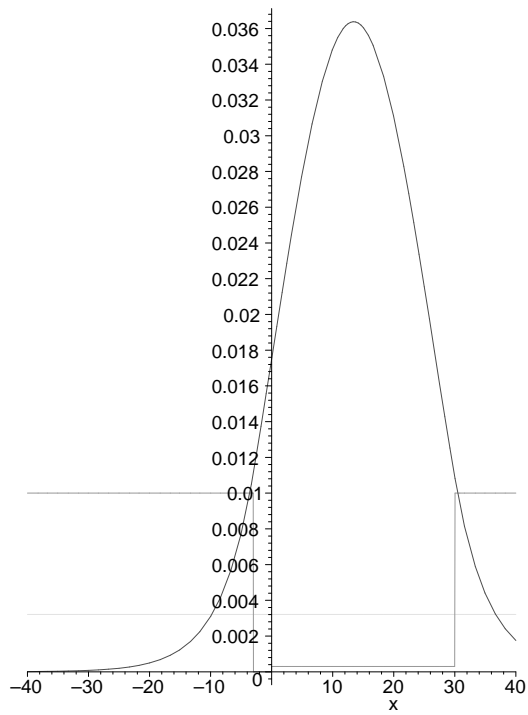


Figure 5 (a) :  $|f_{s_1}(z)|^2$  pour  $R = 100\text{\AA}$

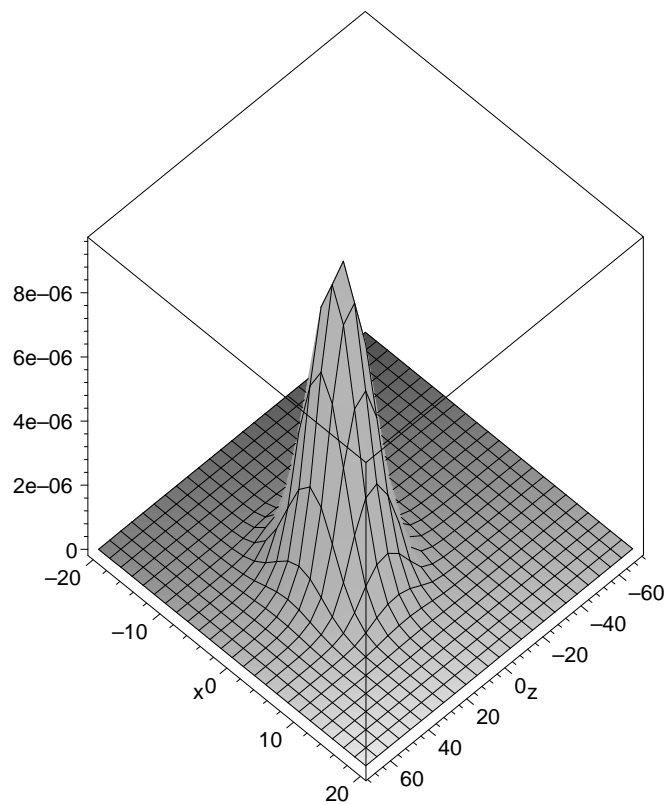


Figure 5 (b) :  $|\phi_{s_1}(x, 0, z)|^2$  pour  $R = 100\text{\AA}$

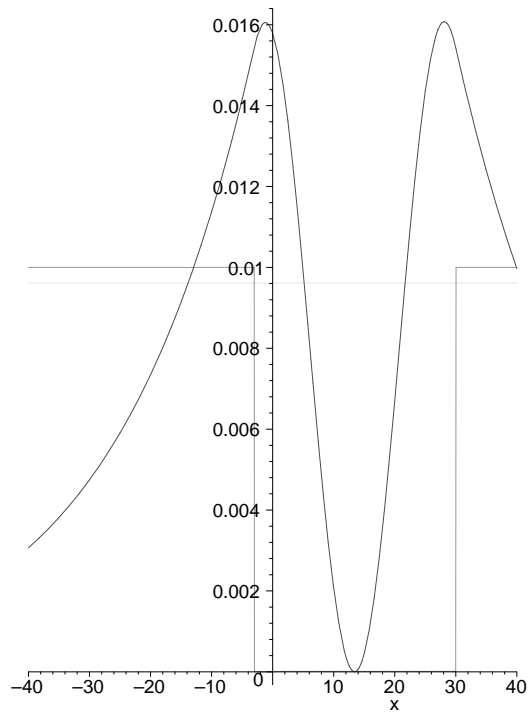


Figure 6 (a) :  $|f_{s_2}(z)|^2$  pour  $R = 100\text{\AA}$

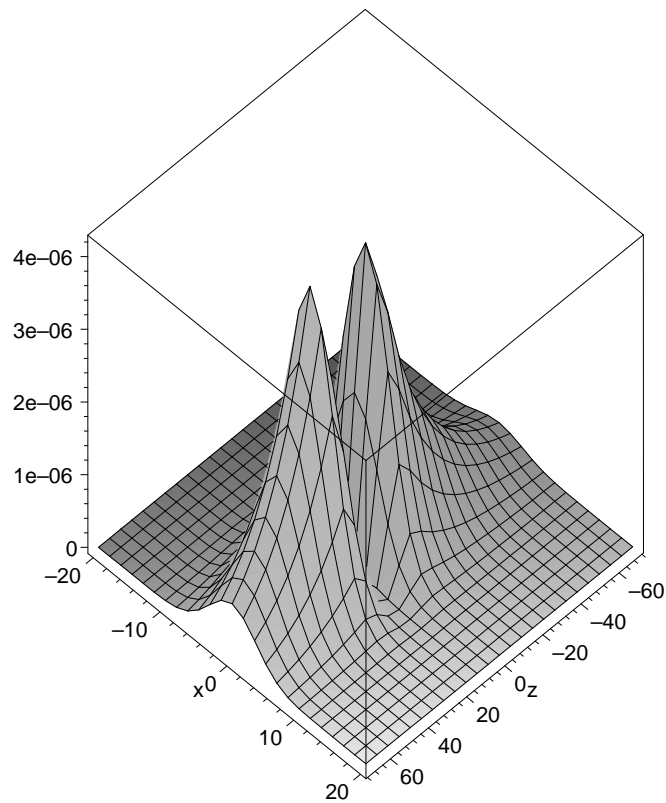


Figure 6 (b) :  $|\phi_{s_2}(x, 0, z)|^2$  pour  $R = 100\text{\AA}$

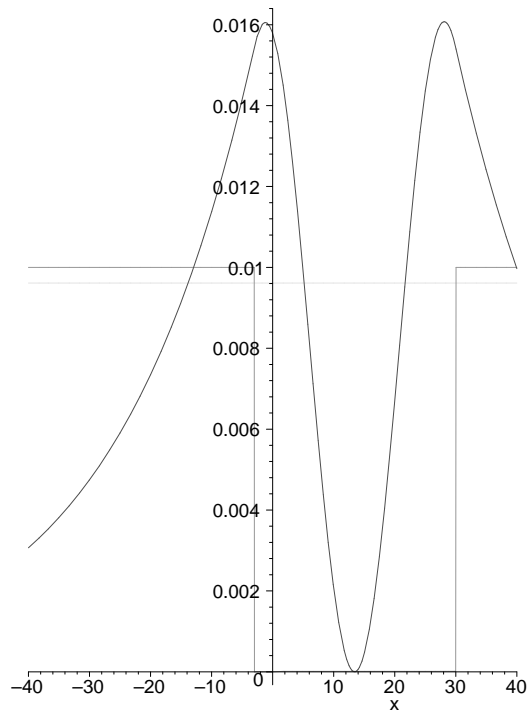


Figure 7 (a) :  $|f_{p_1}(z)|^2$  pour  $R = 100\text{\AA}$

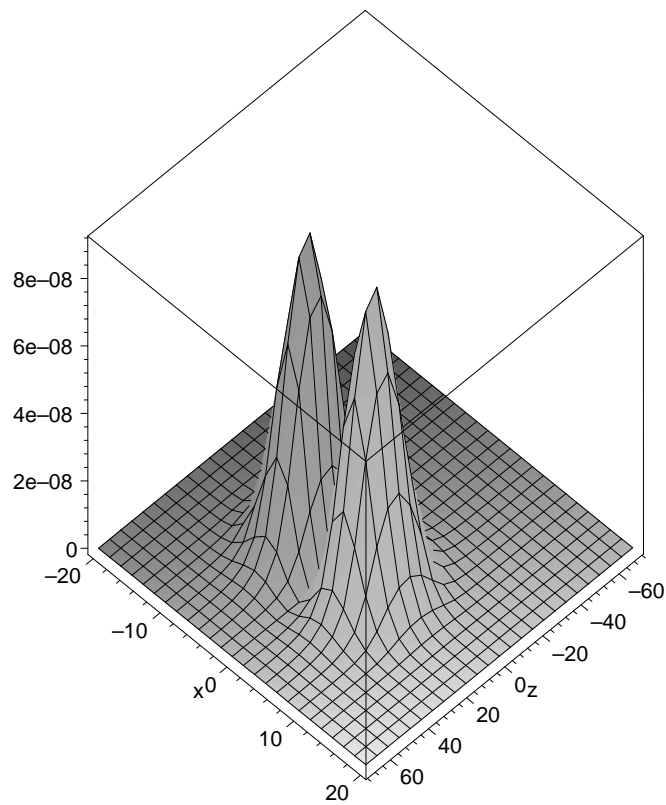


Figure 7 (b) :  $|\phi_{p_1}(x, 0, z)|^2$  pour  $R = 100\text{\AA}$

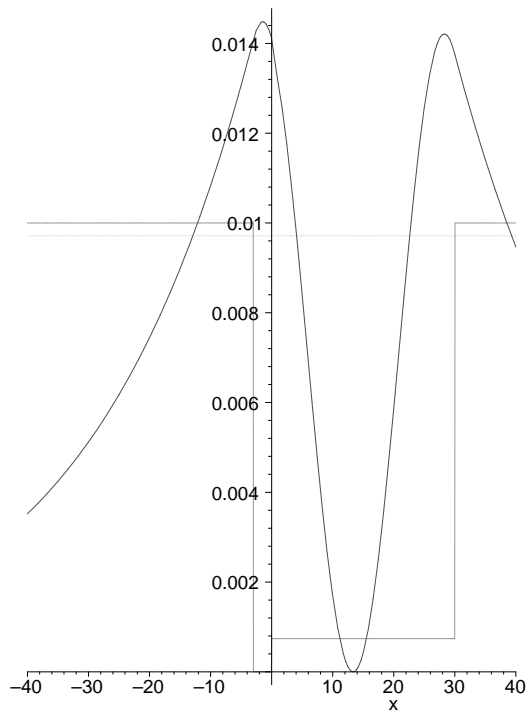


Figure 8 (a) :  $|f_{p_2}(z)|^2$  pour  $R = 100\text{\AA}$

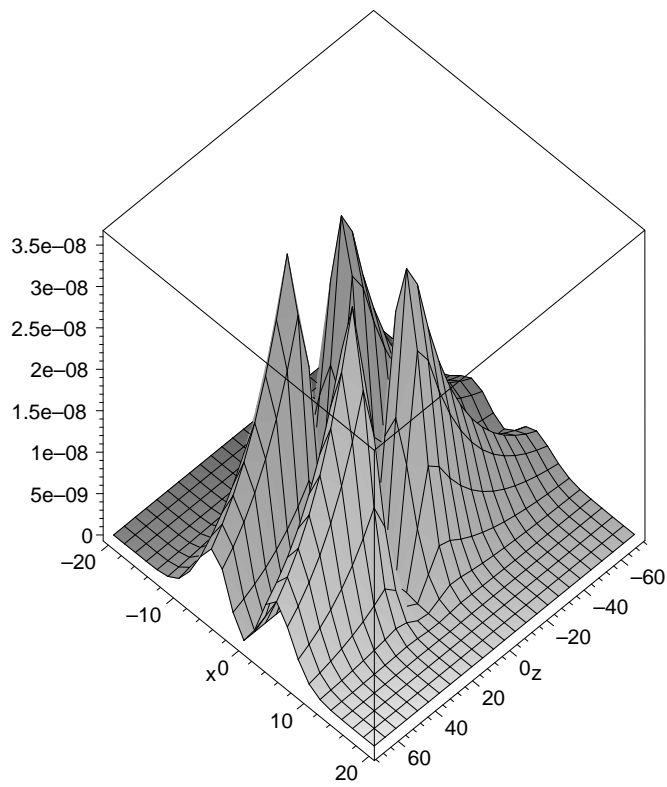


Figure 8 (b) :  $|\phi_{p_2}(x, 0, z)|^2$  pour  $R = 100\text{\AA}$



## Références

- [Bas88] **G. Bastard**, *Wave mechanics applied to semiconductor heterostructures*  
Halstead Press (1988)
- [Ger94] **J-M. Gérard** *Prospects of High-efficiency quantum boxes obtained by direct epitaxial growth*  
Confined Electrons and Photons : New Physics and Applications, édité par E. Burnstein et C. Weisbuch,  
Plenum Press (1994)
- [Rai99] **J-M. Raimond** *Cours d'Electromagnétisme et Relativité*  
Polycopié, ENS (1999)