



# Rapport de stage - Modélisation à une dimension d'hétérostructures de semiconducteurs par la méthode des fonctions de Green

Rudy BARNAUD - L3 PFA  
Supervisé par Alain Dereux

15 - 19 Janvier 2024

## Table des matières

<b>1</b>	<b>Introduction</b>	<b>2</b>
<b>2</b>	<b>Pré-requis théoriques</b>	<b>2</b>
2.1	Cas d'une particule libre . . . . .	3
2.2	Cas d'une particule arrivant sur une marche de potentiel . . . . .	3
2.3	Densité d'états . . . . .	5
2.4	Stabilité numérique . . . . .	5
<b>3</b>	<b>Modélisation</b>	<b>5</b>
3.1	Discrétisation . . . . .	6
3.2	Coefficients de réflexion et transmission . . . . .	6
3.3	Densité d'états électroniques . . . . .	8
3.4	Intervalles de validité . . . . .	9
<b>4</b>	<b>Conclusion</b>	<b>9</b>

# 1 Introduction

Nous nous intéressons dans ce rapport à la modélisation numérique d'hétérostructures de semi-conducteurs. Leur étude a été primordiale au développement des nouvelles technologies telles que nous les connaissons, qui sont toutes basées sur les propriétés des semi-conducteurs. Nous commencerons par voir les principales expressions analytiques nécessaires à la modélisation numérique de l'évolution d'un électron dans ses hétérostructures, sans pour autant nous attarder sur toutes les démonstrations. Dans une seconde partie, nous analyserons quelques résultats obtenus pendant ce stage, et les conclusions physiques que nous pouvons en tirer. Nous nous restreignons ici au cas unidimensionnel.

## 2 Pré-requis théoriques

Commençons par passer en revue les pré-requis théoriques et formules clefs permettant de mener à bien ce stage. L'objectif de cette section n'est pas de démontrer rigoureusement les formules utiles, mais plutôt de comprendre leur origine.

Nous allons modéliser une particule, dans notre cas un électron, arrivant de  $x \rightarrow -\infty$  et rencontrant une zone de potentiel non-nul. Nous modélisons l'espace unidimensionnel d'étude par deux espaces distincts  $A$  et  $B$ . Le potentiel vu par l'électron est non nul en  $A$ . Étant défini à une constante près, nous choisissons ici que le potentiel en  $B$  est nul, par soucis de clarté. Afin de décrire le comportement de l'électron, introduisons l'équation de Schrödinger à une dimension :

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x,t)}{\partial x^2} \quad (1)$$

Par la méthode de séparation des variables, nous obtenons l'équation de Helmholtz unidimensionnelle avec une source :

$$\frac{d^2 \varphi(x)}{dx^2} + k^2 \varphi(x) = V(x) \varphi(x) \quad \text{avec} \quad k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \quad \text{et} \quad V(x) = \frac{2mU(x)}{\hbar} \quad (2)$$

Nous ne nous intéresserons ici pas à la seconde équation différentielle résultant de cette méthode et portant sur le temps.

Une réécriture équivalente à (2) est l'équation de Lippmann-Schwinger :

$$\varphi(x) = \varphi_0(x) + \varphi_s(x) = \varphi_0(x) + \int dx' G_0(x, x'; k) V(x') \varphi(x') \quad (3)$$

où  $G_0$  est la fonction de Green associée au problème,  $\varphi_s(x)$  la fonction d'onde diffusée et  $\varphi_0(x)$  la fonction d'onde incidente, qui satisfait l'équation de Helmholtz sans second membre. L'onde incidente est donc une onde plane :

$$\varphi_0(x) = A_k e^{ikx} \quad (4)$$

Reste à déterminer la fonction de Green, ce qui dépend du problème d'étude.

## 2.1 Cas d'une particule libre

Dans le cas d'une particule libre, la détermination de la fonction de Green se base sur le fait qu'elle doit satisfaire l'équation suivante :

$$\frac{d^2 G_0(x, x'; k)}{dx^2} + k^2 G_0(x, x'; k) = \delta(x - x') \quad (5)$$

où  $k$  n'est pas affecté par les opérateurs différentiels. Le raisonnement consiste alors à décomposer la fonction de Green sur la base orthonormée constituée par les vecteurs propres  $\varphi_{0,k}(x)$ , puis d'injecter cette décomposition dans l'équation (5). Ce qui donne :

$$G_0(x, x'; k) = \frac{1}{2\pi} \int dk' \frac{e^{ik'(x-x')}}{k^2 - k'^2} = \frac{e^{ik|x-x'|}}{2ik} \quad (6)$$

en calculant avec la méthode des résidus.

Notons que physiquement, l'électron a un temps de vie, ce qui correspond au temps moyen avant qu'il ne comble un trou dans une couche électronique d'un atome du semi-conducteur. Pour prendre en compte cet effet, on doit inclure une petite partie imaginaire à l'énergie, qui vient ensuite se répercuter dans le vecteur d'onde :

$$k^2 = \frac{2m(E + i\Gamma)}{\hbar^2} \quad \text{où } \Gamma \ll 1 \quad (7)$$

Dans ce cas, la dépendance temporelle de la fonction d'onde est  $e^{-iEt/\hbar} e^{-\Gamma t/\hbar}$ , et son carré, la densité de probabilité de présence décroît bien avec le temps. Pour obtenir  $\Gamma$  en J, nous utiliserons la relation suivante, où  $\tau$  est le temps de vie, en secondes :  $\Gamma = \frac{2\pi}{\tau} \hbar$

## 2.2 Cas d'une particule arrivant sur une marche de potentiel

Après avoir compris ce premier cas, attardons-nous sur un second, qui sera l'objet de la suite de ce rapport : la modélisation des jonctions de semi-conducteurs ayant des configurations électroniques différentes. Le potentiel vu par un électron n'est donc pas le même :

il nous faut introduire une marche de potentiel.

En partant de l'équation de Schrödinger et par séparation des variables, nous obtenons à nouveau l'équation de Helmholtz (2), mais en devant séparer les deux régions de l'espace. En supposant que la marche de potentiel se situe en  $x = 0$ , nous obtenons :

$$\begin{cases} k^2(x) = k_0^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} & \text{si } x < 0 \\ k^2(x) = k_1^2 = \frac{2m(E-U)}{\hbar^2} & \text{si } x > 0 \end{cases} \quad (8)$$

Pour des raisons mathématiques, qui s'interprètent très bien physiquement avec la notion de temps de vie, il faut ajouter une petite partie imaginaire à ces vecteurs d'onde :

$$K_0 = k_0 + i\Gamma \quad \text{et} \quad K_1 = k_1 + i\Gamma \quad \text{où } \Gamma \ll 1 \quad (9)$$

En résolvant les deux équations de Helmholtz ainsi obtenues et en imposant que la fonction d'onde et sa dérivée doivent être continues, nous obtenons les expressions suivantes pour la fonction d'onde dans la région  $B$  :

$$\begin{cases} y_b(x) = e^{iK_0x} + r_b e^{-iK_0x} & \text{si } x < 0 \\ y_b(x) = t_b e^{iK_1x} & \text{si } x > 0 \end{cases} \quad \text{avec} \quad \begin{cases} r_b = \frac{K_0 - K_1}{K_0 + K_1} \\ t_b = \frac{2K_0}{K_0 + K_1} \end{cases} \quad (10)$$

et les expressions suivantes dans la région  $A$ , où le potentiel n'est pas constant :

$$\begin{cases} y_a(x) = t_a e^{-iK_0x} & \text{si } x < 0 \\ y_a(x) = r_a e^{+iK_1x} + e^{-iK_1x} & \text{si } x > 0 \end{cases} \quad \text{avec} \quad \begin{cases} r_a = \frac{K_1 - K_0}{K_0 + K_1} \\ t_a = \frac{2K_1}{K_0 + K_1} \end{cases} \quad (11)$$

Remarquons d'ailleurs qu'une analogie avec l'optique ondulatoire peut être utilisée pour retrouver ces résultats, les coefficients de réflexion et de transmission étant similaires.

Les calculs permettant d'obtenir la fonction de Green sont plus conséquents, voir [1], et font intervenir le Wronskien, ils ne sont pas détaillés ici. Les résultats finaux sont :

$$G_{++}(x, x'; k) = \frac{e^{iK_1|x-x'|}}{2iK_1} + \frac{K_1 - K_0}{K_0 + K_1} \frac{e^{iK_1(x+x')}}{2iK_1} \quad \text{si } x > 0 \text{ et } x' > 0 \quad (12)$$

$$G_{-+}(x, x'; k) = \frac{e^{-iK_0x + iK_1x'}}{i(K_0 + K_1)} \quad \text{si } x < 0 \text{ et } x' > 0 \quad (13)$$

## 2.3 Densité d'états

Nous le verrons par la suite, il peut être intéressant de définir la densité d'états, qui permet de quantifier le nombre d'états électroniques pouvant être occupés par l'électron.

Par manque de place, nous ne pouvons pas la détailler, mais une démonstration très élégante permet d'obtenir la densité des états de manière très directe, simplement à partir de la fonction de Green associée au système. Pour la démonstration, voir [1]. La densité des états peut être écrite comme la somme de la densité des états du système de référence  $\rho_0(E)$  et d'une correction, appelée changement de densité des états  $\Delta\rho(E)$  :

$$\rho(E) = \rho_0(E) + \Delta\rho(E) \quad (14)$$

$$= \frac{d}{dE} \left( \frac{1}{\pi} \text{Im} \ln (\det\{G_0(E)\}) \right) - \frac{d}{dE} \left( \frac{1}{\pi} \text{Im} \ln (\det\{\mathbb{1} - G_0(E)U\}) \right) \quad (15)$$

où  $G_0$  est la fonction de Green et  $U$  le potentiel associé au système d'étude.

## 2.4 Stabilité numérique

Les outils informatiques traitant l'information de manière discrète, de grandes successions d'opérations mathématiques peuvent ne pas être stable, et donner des résultats aberrants. En effet, les nombres sont stockés en virgule flottante, et la mantisse a une taille finie : des arrondis doivent donc être effectués, et peuvent dans certains cas se propager.

Une manière de se prévenir de cette propagation des erreurs d'arrondis est d'utiliser des nombres du même ordre de grandeur dans les algorithmes, et les plus proches possibles de l'unité. Des conversions doivent donc être appliquées en amont et en aval des calculs, afin de retrouver des résultats interprétables physiquement.

## 3 Modélisation

Maintenant que les bases théoriques ont été établies, nous pouvons passer à la partie modélisation de ce stage. Pour cela, étant donné la structuration discrète de l'information gérée par nos ordinateurs, il nous faut discrétiser l'espace et adapter les équations en fonction, afin de mener à bien les calculs numériques.

### 3.1 Discrétisation

Nous utilisons un pas constant sur tout l'intervalle spatial d'étude. Deux vecteurs contenant les points de la discrétisation spatiale sont créés, et sont définis de sorte à ce que les points de la discrétisation soient au centre de chaque intervalle. Cela permet de ne pas contenir les points limites, qui pourraient engendrer des décalages.

Concernant la fonction de Green, les équations (6), (12) et (13) sont directement applicables, mais l'équation (3) doit être adaptée. Il est possible de montrer qu'elle se décompose en deux équations :

$$|\varphi_A\rangle = (\mathbb{1} - G_{A,A}^0 W_{A,A})^{-1} |\varphi_A^0\rangle \quad (16)$$

$$|\varphi_B\rangle = |\varphi_B^0\rangle + G_{B,A}^0 W_{A,A} |\varphi_A\rangle \quad (17)$$

où  $G_{A,A}^0$  et  $G_{A,B}^0$  sont respectivement les matrices contenant les éléments de la fonction de Green pour  $x, x' \in A$  et  $x \in B, x' \in A$ .  $W$  est le vecteur contenant le potentiel discrétisé, défini par  $W(x_j) = \text{step} \cdot V(x_j)$ , où  $\text{step}$  est le pas de discrétisation.

### 3.2 Coefficients de réflexion et transmission

Une première tâche de ce stage a été de simuler une double barrière de potentiel trapézoïdale, qui est une première approximation d'une hétérojonction de semi-conducteurs, à laquelle une tension électrique a été appliquée. Après avoir développé un programme fonctionnel pour ce type de potentiel, nous l'avons amélioré afin de prendre en compte un biais pouvant être appliqué. Intéressons-nous à une double barrière de potentiel, représenté figure 1. Notons que ce cas n'est pas qu'un exercice ludique, et qu'il a entre autre été étudié et présenté par Leo Esaki lors d'une conférence du Prix Nobel [2].

Pour cela, remarquons tout d'abord que le domaine d'étude peut être grandement restreint : même si la zone comprenant la perturbation doit être modélisée entièrement, seulement un point à gauche et un à droite de cette dernière sont nécessaires afin de calculer les coefficients de réflexion et transmission.

En utilisant les relations précédemment établies et avec une boucle sur les différentes énergies possibles de l'électron incident, nous avons créé le programme permettant le résultat représenté figure 1.

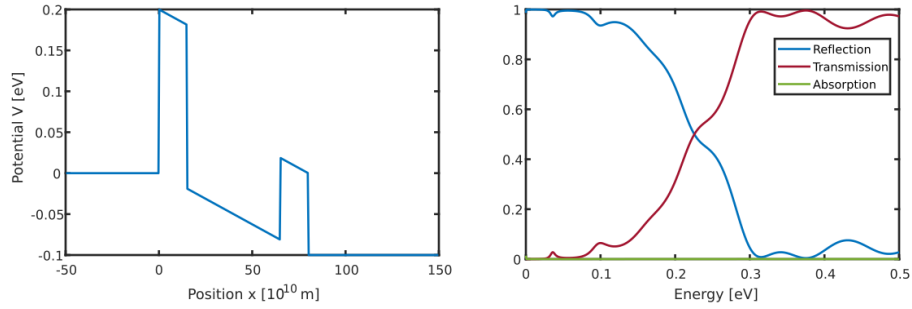


FIGURE 1 – À gauche, la double barrière avec un biais de  $-0.1$  eV. À droite les coefficients de réflexion, transmission et absorption pour des électrons d'énergies entre  $0$  eV et  $0.5$  eV.

Cette première modélisation permet d'obtenir des résultats de la mécanique quantique impossibles en mécanique classique. Le premier est l'effet tunnel : un électron d'énergie inférieure à la barrière de potentiel a une probabilité non nulle de la traverser. Cependant, lorsque son énergie est supérieure, il ne passe pas systématiquement : il peut tout de même être réfléchi. Enfin, il existe plusieurs résonances possibles dans cette configuration de double barrière de potentiel : certaines énergies impliquent des modes quasi-normaux entre les deux barrières de potentiel, représentés figure 2, permettant ainsi ces maxima de transmission tunnel. Sur cette figure, l'électron le moins énergétique a près de cinq fois plus de probabilités de passer à travers la jonction que l'autre électron, grâce à cet effet de résonance entre les deux barrières de potentiel.

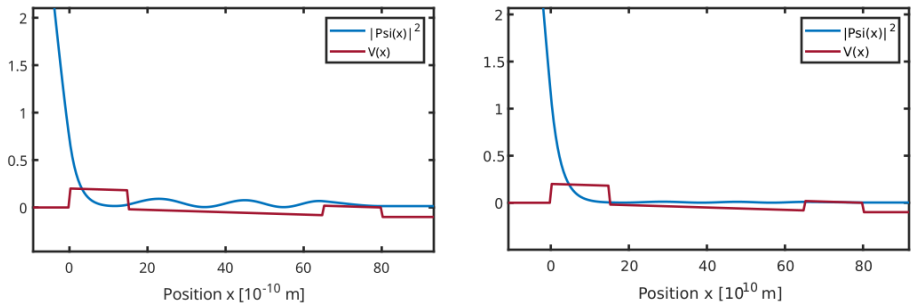


FIGURE 2 – Représentation de la fonction d'onde d'un électron d'énergie  $0.035$  eV (à gauche) et  $0.056$  eV (à droite). Le potentiel est identique à celui représenté figure 1.

Notons enfin que l'absorption est extrêmement faible, mais a tendance à augmenter lors des résonances, ce qui est cohérent : si l'électron est réfléchi ou transmis dès son premier passage, il reste un temps trop faible dans l'hétérojonction pour être absorbé. En revanche, lorsqu'il a une énergie correspondant à un mode résonant, surtout si celui-ci est important,

l'électron peut rester dans la jonction suffisamment de temps pour se recombiner avec un trou dans une bande de valence.

### 3.3 Densité d'états électroniques

L'étude des coefficients de réflexion et transmission nous ont permis de mettre en évidence des modes résonants entre la double barrière de potentiel. L'espace entre les deux étant fini, ces modes sont quantifiés, et une question se pose alors : combien sont-ils, et comment sont-ils répartis ? C'est ce que nous étudions dans cette section.

Le programme permettant de calculer la densité des états reprend les mêmes bases que les précédents, et utilisant cette fois la relation (15). Cependant, un problème se pose : la partie imaginaire du logarithme complexe étant définie à  $2\pi$  près, le résultat contient un certain nombre de discontinuités et n'est pas exploitable. Pour contourner ce problème, il nous a fallu construire une nouvelle fonction permettant de détecter ces sauts de discontinuité, et les corriger en ajoutant des multiples de  $2\pi$  au résultat pour que les données soient continues. Une fois cette correction faite, la dérivation ne pose pas de soucis. Pour une double barrière de potentiel sans biais, avec une première barrière de 15 Å de large et d'énergie 0.2 eV, et une seconde 50 Å plus loin, de même largeur, mais de moindre énergie, seulement 0.1 eV, nous obtenons la densité d'états représentée figure 3.

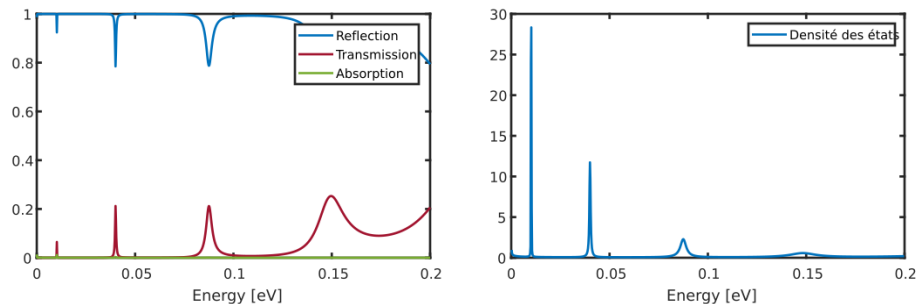


FIGURE 3 – Densité des états pour une double barrière sans biais (à droite), et les coefficients de réflexion et transmission associés (à gauche)

Nous observons alors que les transmissions résonantes sont liées à un grand nombre d'états dans la jonction, ce qui est cohérent avec ce que nous avons vu précédemment, notamment figure 2 : ce sont ces états qui permettent la résonance. Notons d'ailleurs que la densité d'états est d'autant plus grande que le pic de transmission est fin : par analogies aux transformées de Fourier, il faut d'autant plus d'états purs - formant une base sur laquelle tout état peut être décomposé - que la dérivée de l'état à représenter est importante.

Enfin, en vue d'applications pratiques par exemple, nous avons modélisé les coefficients de réflexion et transmission de la jonction en fonction du biais appliqué, figure 4. Cette dernière application nous permet d'observer un phénomène intéressant : en appliquant un biais plus important, via une différence de potentiel, il existe des intervalles sur lesquels la transmission, donc l'intensité électrique diminue. C'est une modélisation de la résistance différentielle négative.

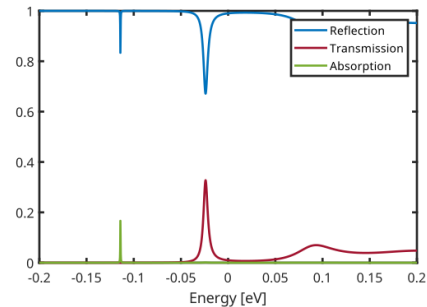


FIGURE 4 – Transmission de l'hétérostructure en fonction du biais.

### 3.4 Intervalles de validité

Avant de conclure, évoquons un point crucial dans ces modélisations : leur intervalle de validité. En effet, de même qu'une mesure expérimentale n'a pas de sens si elle n'est pas munie de son incertitude, nous devons savoir ce qui est modélisé correctement, et ce qui peut ne pas l'être.

Ces limitations dans les modélisations sont provoquées par la discrétisation de l'espace d'étude, spatialement et en énergies. Le pas de discrétisation est un facteur limitant, mais n'est pas le seul : la taille totale de l'espace modélisé est également à prendre en compte, ainsi que la taille des sous-parties.

## 4 Conclusion

En guise de conclusion, notons que des physiciens ont développé rigoureusement les résultats mis en évidence au cours de ces simulations, et citons les travaux de Rolf Landauer, et la formule éponyme faisant le lien entre transmission et densité d'état. Cette semaine de stage aura été très enrichissante. En effet, elle aura été l'occasion de découvrir de nouveaux concepts de mécanique quantique, mais aussi d'avoir une idée plus précise de la recherche en physique, ce qui m'a conforté dans l'idée de poursuivre dans cette voie. Je remercie Bastien Humbert, avec qui j'ai fait ce stage, qui m'a aidé à comprendre certains points théoriques. Enfin et surtout, je remercie grandement Alain Dereux pour avoir rendu possible ce stage et pour avoir été aussi présent et à l'écoute.

## Références

- [1] Alain DEREUX. *Numerical Methods for Physicists*. 2024.
- [2] Leo ESAKI. *Long journey into tunneling*.