

Simulation Monte-Carlo du transport et de  
la relaxation des porteurs dans les  
structures à boîtes quantiques  
auto-assemblées

par

Alexandre FARIBAULT

Mémoire présenté au Département de physique en vue de l'obtention du  
grade de Maître ès Sciences (M.Sc.)

FACULTÉ DES SCIENCES  
UNIVERSITÉ DE SHERBROOKE

Sherbrooke (Québec), Canada, mai 2002

# Résumé

Ce travail de maîtrise a pour objectif la création d'un programme de simulation Monte-Carlo adapté à l'étude des propriétés de transport et de relaxation des porteurs dans les structures à boîtes quantiques auto-assemblées.

Ces structures contenant à la fois des états 3D 2D et 0D, il est nécessaire de réaliser un programme permettant de traiter le comportement des porteurs dans ces trois types d'états et de décrire les processus de collision ou de recombinaison permettant aux porteurs de passer d'un état à un autre.

Les résultats obtenus par simulation de l'évolution temporelle de la distribution des porteurs peuvent être comparés à des résultats expérimentaux obtenus par des études de la photoluminescence résolue en temps. Ainsi, on dispose d'une méthode permettant d'évaluer la justesse des modèles théoriques utilisés.

La majorité des modélisations numériques cherchant à reproduire les résultats des expériences de photoluminescence résolue en temps sont basées sur la résolution d'un système d'équations différentielles décrivant l'évolution temporelle de la population des divers niveaux. On cherche, à l'aide du simulateur Monte-Carlo, à corriger certaines faiblesses dans la description des états 3D et 2D qui sont inhérentes à la modélisation par les équations d'évolution. Les modèles étudiés sont simples, mais permettent de réaliser rapidement quelques études. Cependant, on constate que les modèles ainsi créés ne permettent pas de reproduire efficacement les données expérimentales.

On peut par contre, dans l'avenir, envisager la création de modèles plus complets dont la validité peut être testée en les étudiant avec le programme MonteCarlo.

# Remerciements

En premier lieu, je tiens absolument à remercier René Côté, mon directeur de recherche, pour avoir su me guider tout au long du travail réalisé dans le cadre de cette maîtrise.

Je souhaite aussi remercier Denis Morris, pour l'ensemble des détails et des explications qu'il a su me fournir à propos des structures étudiées.

Je désire exprimer ma reconnaissance à Nathalie Perret qui, bien que je n'aie pas eu la chance d'interagir beaucoup avec elle, a tout de même laissé derrière elle une thèse de doctorat qui s'est avérée un outil important pour me permettre de saisir l'état actuel des connaissances sur les systèmes à boîtes quantiques.

De plus, j'aimerais remercier Jacques Renaud avec qui j'ai eu un grand nombre de discussions informelles qui se sont toujours avérées utiles.

Je souhaite aussi remercier le fonds FCAR auquel je suis redevable pour le financement de ce projet.

# Table des matières

<b>Résumé</b>	<b>i</b>
<b>Remerciements</b>	<b>ii</b>
<b>Table des matières</b>	<b>iii</b>
<b>Liste des figures</b>	<b>vii</b>
<b>Liste des tableaux</b>	<b>viii</b>
<b>Introduction</b>	<b>1</b>
<b>1 La méthode Monte-Carlo appliquée à l'étude du transport et de la relaxation</b>	<b>3</b>
1.1 Présentation du chapitre . . . . .	3
1.2 Vue d'ensemble . . . . .	4
1.3 Libre parcours . . . . .	6
1.3.1 Évolution durant le libre parcours . . . . .	6
1.3.2 Génération des temps de libre parcours . . . . .	8
1.4 Collisions . . . . .	10

1.4.1	Choix d'un processus . . . . .	10
1.4.2	Calcul des temps de collision . . . . .	12
1.4.3	Sélection d'un état final . . . . .	15
1.4.4	Principe d'exclusion de Pauli . . . . .	18
1.5	Généralisation en dimension inférieure à 3 . . . . .	21
<b>2</b>	<b>Simulations préliminaires</b>	<b>23</b>
2.1	Présentation du chapitre . . . . .	23
2.2	Modèle de Drude en 3D . . . . .	23
2.2.1	Dérive . . . . .	25
2.2.2	Diffusion . . . . .	29
2.3	Modèle de Drude en 3D avec pompage optique et recombinaison . . .	31
2.3.1	Pompage permanent en un point . . . . .	32
2.3.2	Pompage permanent uniforme sur une fenêtre rectangulaire . .	34
2.4	Modèle simple pour le transport des trous dans le Ge . . . . .	36
2.4.1	Probabilités de collision . . . . .	37
2.4.2	Étude en champ électrique . . . . .	42
<b>3</b>	<b>Les boîtes quantiques auto-assemblées</b>	<b>47</b>
3.1	Présentation du chapitre . . . . .	47
3.2	Fabrication et structure . . . . .	47
3.3	Caractérisation par photoluminescence . . . . .	49
3.4	Équations d'évolution . . . . .	53
3.4.1	Processus Auger . . . . .	54
3.4.2	Diffusion dans les états 3D . . . . .	56

3.5	Modélisation des données expérimentales par les équations d'évolution	58
<b>4</b>	<b>Étude Monte-Carlo</b>	<b>65</b>
4.1	Présentation du chapitre . . . . .	65
4.2	Résolution Monte-Carlo du modèle des équations d'évolution . . . . .	66
4.3	Diffusion semi-classique . . . . .	68
4.4	Vision délocalisée des états 3D . . . . .	74
	<b>Conclusion</b>	<b>81</b>
	<b>Bibliographie</b>	<b>83</b>

# Liste des figures

1.1	Schéma de l'algorithme Monte-Carlo . . . . .	4
1.2	Trajectoires dans l'espace $\mathbf{k}$ (à gauche) et dans l'espace réel (à droite)	7
1.3	Choix d'un processus de collision . . . . .	10
1.4	Méthode de rejet . . . . .	16
2.1	Vitesse de dérive en fonction du temps . . . . .	25
2.2	Vitesse de dérive en fonction du champ électrique . . . . .	26
2.3	Puissance dissipée en fonction du champ électrique . . . . .	27
2.4	Distributions stationnaires pour plusieurs valeurs du champ électrique	28
2.5	Vérification de la relation d'Einstein . . . . .	30
2.6	Distribution spatiale des porteurs avec pompage optique localisé à l'origine . . . . .	33
2.7	Nombre de porteurs simulés en fonction du temps écoulé . . . . .	34
2.8	Distribution spatiale des porteurs avec pompage optique dans une fenêtre rectangulaire ( $l = 100cm$ ) . . . . .	36
2.9	Taux de collision des trous lourds dans le Ge à une température de 300 K	41
2.10	Résultats Monte-Carlo pour les trous dans le Ge . . . . .	43
3.1	Croissance des boîtes quantiques auto-assemblées . . . . .	48

3.2	Mesures de photoluminescence résolue en temps [15] . . . . .	51
3.3	Évolution temporelle des populations [15] . . . . .	52
3.4	Traitement de la diffusion dans les états de barrières . . . . .	57
3.5	Modélisation des données à $20 W/cm^2$ [15] . . . . .	61
3.6	Modélisation des données à $4 W/cm^2$ [15] . . . . .	63
4.1	Reproduction Monte-Carlo de la solution des équation d'évolution . .	67
4.2	Représentation schématique de la structure à boîtes quantiques étudiée	69
4.3	Résultats Monte-Carlo avec transport semi-classique . . . . .	71
4.4	Distribution des porteurs selon l'axe de croissance à $t = 0$ (à gauche) et $t = 140 ps$ (à droite) pour un temps de capture $\tau_{6i} = 1 ps$ . . . . .	72
4.5	Plage utilisée pour la normalisation des fonctions d'ondes . . . . .	74
4.6	Évolution de la population dans la couche de mouillage avec un modèle délocalisé des états 3D . . . . .	79

# Liste des tableaux

2.1	Paramètres utilisés pour les simulations du modèle de Drude avec pompage et recombinaison . . . . .	31
2.2	Limites de $q$ pour les collisions impliquant des phonons acoustiques . . . . .	40
2.3	Paramètres utilisés pour la simulation du transport des trous lourds dans le Ge . . . . .	41
3.1	Paramètres utilisés pour la reproduction par les équations d'évolution des données expérimentales obtenues à $20 W/cm^2$ [15] . . . . .	58
3.2	Paramètres utilisés pour la reproduction par les équations d'évolution des données expérimentales obtenues à $4 W/cm^2$ [15] . . . . .	62
4.1	Coefficient d'ajustement d'amplitude des populations . . . . .	68
4.2	Paramètres du GaAs utilisés pour les simulations Monte Carlo de la structure à boîtes quantiques . . . . .	69

# Introduction

Grâce à la méthode de croissance par auto-assemblage, il est aujourd'hui possible de fabriquer, avec un bon contrôle, des structures contenant des boîtes quantiques. Ces dernières sont des régions de la structure où les porteurs sont confinés quantiquement dans toutes les directions. Ce confinement 0D implique que les porteurs contenus dans ces boîtes ne peuvent occuper qu'une série de niveaux d'énergie discrets.

Les importants effets quantiques responsables de cette discrétisation de la densité d'états pourraient permettre une amélioration considérable des performances des divers dispositifs optoélectroniques. Une bonne compréhension des phénomènes gérant le comportement des porteurs dans les boîtes quantiques ainsi qu'un bon contrôle de leur fabrication permet d'envisager des applications technologiques fort prometteuses pour la construction de lasers ou de détecteurs infrarouges, par exemple. Il est aussi possible d'imaginer des systèmes de mémoire ou de traitement quantique de l'information basés sur les propriétés des boîtes quantiques.

D'un point de vue fondamental, les boîtes quantiques sont un problème d'un grand intérêt. En effet, alors que le comportement des porteurs dans les matériaux massifs (sans confinement quantique) est bien compris, les phénomènes qui dominent la relaxation des porteurs dans les systèmes 0D sont encore mal compris et suscitent d'importants débats dans la communauté scientifique.

La recherche d'une modélisation numérique permettant une reproduction des résultats expérimentaux de photoluminescence résolue en temps, permettrait donc de mieux saisir l'importance des différents processus pouvant intervenir dans ces structures. Une fois ces processus compris, la simulation numérique continue d'être fort

utile pour l'optimisation des paramètres de la structure en vue d'améliorer les performances des diverses applications envisageables.

La méthode Monte-Carlo [1] est présentement fort peu utilisée pour modéliser l'évolution temporelle des porteurs dans les structures à boîtes quantiques et ce malgré le fait qu'elle nous apparaisse comme étant la méthode présentant le moins de limitations quant aux modèles pouvant être traités.

L'objectif fondamental de ce projet est donc la création d'un programme de simulation Monte-Carlo adapté à l'étude des structures à boîtes quantiques auto-assemblées.

# Chapitre 1

## La méthode Monte-Carlo appliquée à l'étude du transport et de la relaxation

### 1.1 Présentation du chapitre

Ce premier chapitre se veut une présentation générale de la méthode Monte-Carlo utilisée au cours de ce projet. On y explore l'ensemble des idées de base sous-jacentes à ce type de simulation. Bien que la description de la méthode soit faite dans un système 3D, la méthode est aisément généralisable à des systèmes où il existe un confinement quantique selon un ou plusieurs axes, comme on pourra le constater à la section 1.5. On présente donc ici une vue d'ensemble de l'algorithme Monte-Carlo pour ensuite s'intéresser plus spécifiquement à ses divers éléments essentiels.

## 1.2 Vue d'ensemble

La méthode Monte-Carlo appliquée à l'étude du transport et de la relaxation des porteurs offre de grandes ressemblances avec les algorithmes de dynamique moléculaire. C'est, en effet, par une simulation directe de l'évolution temporelle de l'état d'un nombre restreint  $N$  de particules qu'on cherche à reproduire, à une erreur statistique près, le comportement d'une distribution réelle contenant  $N_r \gg N$  porteurs.

L'évolution des particules d'un système peut être décrite par deux processus distincts: les libres parcours et les collisions.

Une particule évolue dans le temps en une succession de libres parcours de durée  $\tau$ , au cours desquels son état est modifié de façon continue (par exemple par la présence d'un champ électrique ou magnétique). La fin d'un de ces libres parcours est marquée par un processus de diffusion (collision) qui, lui, change de manière discontinue l'état de la particule étudiée. On peut considérer, dans une même simulation, l'effet de plusieurs types de collisions avec des probabilités de réalisation qui leur sont propres. On peut, par exemple, simuler un système où les porteurs peuvent interagir avec divers types de phonons en plus de collisionner entre eux.

L'ensemble d'un programme Monte-Carlo peut être schématisé de la façon suivante:

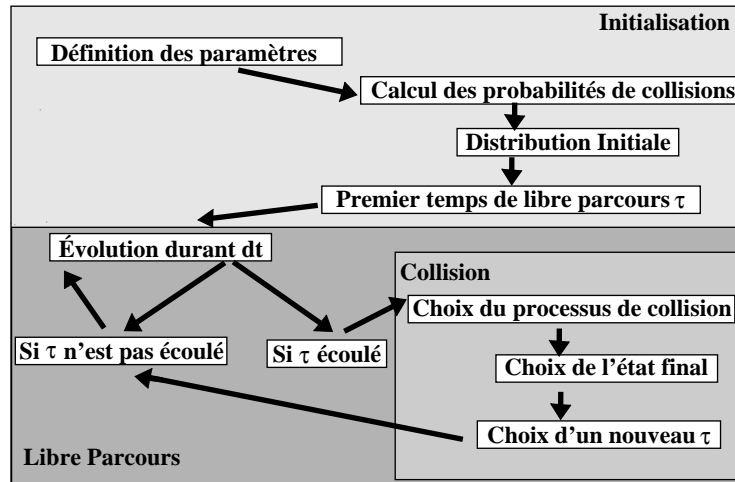


Figure 1.1: Schéma de l'algorithme Monte-Carlo

La section supérieure du schéma de la figure 1.1 décrit l'ensemble des opérations nécessaires à l'initialisation qui est préalable à la réalisation de la simulation proprement dite. Dans cette étape d'initialisation, on définit d'abord les paramètres de la simulation. On regroupe ici l'ensemble des définitions permettant de décrire entièrement l'environnement dans lequel évolueront les porteurs simulés. Dans le cas d'un semi-conducteur massif (problème en 3D), il suffit de définir les propriétés du matériau comme, par exemple, la masse effective des porteurs, la température à laquelle le système est maintenu, les potentiels de déformation décrivant l'interaction des porteurs avec les phonons du cristal, etc. Cependant, si l'on traite une structure plus complexe, comme par exemple un puits quantique, il faut aussi définir les paramètres propres au puits: les dimensions du puits, sa profondeur, l'énergie et les fonctions d'ondes des différents niveaux pouvant être occupés par les porteurs qui y sont confinés, etc. De plus, il faut, si cela s'avère nécessaire, définir la valeur des champs électriques ou magnétiques externes qui sont appliqués sur le système.

Une fois l'ensemble de ces informations connues, on peut calculer les probabilités qu'un porteur dans un état donné subisse une collision d'un type quelconque. Plus de détails sur le calcul de ces probabilités sont présentés à la section 1.4.2.

Pour débiter la simulation, on impose une distribution initiale des  $N$  porteurs simulés. On peut par exemple choisir une distribution thermique de leur énergie ou encore considérer une distribution initiale obtenue après une excitation causée par une impulsion laser.

Une fois la distribution initiale choisie, on sélectionne le premier temps de libre parcours de chacune des particules simulées. Ces temps de libre parcours sont générés en utilisant la méthode décrite en détails à la section 1.3.2.

La simulation de l'évolution temporelle des particules peut débiter une fois cette initialisation complétée. On discrétise le temps en une série d'intervalles très courts de durée  $\Delta t$ . Durant chacun de ces éléments de temps, on fait évoluer, selon les équations du mouvement semi-classique (voir section 1.3.1), l'état de chacune des  $N$  particules simulées. Si le libre parcours d'une particule ne se termine pas dans l'intervalle  $\Delta t$  en cours, son évolution du temps  $t$  à  $t + \Delta t$  sera purement semi-classique. Cependant, si le libre parcours se termine, on doit alors considérer l'effet de la collision qui y a

mis fin.

Le traitement des collisions nécessite de sélectionner stochastiquement, parmi les processus considérés, celui qui est responsable de l'interruption du libre parcours, tout en respectant les probabilités propres à chacun des types de collision traités. La façon de réaliser ce choix est expliquée à la section 1.4.1. On doit ensuite sélectionner, toujours stochastiquement, l'état final dans lequel se trouve la particule à la suite de cette collision, puis générer, pour cette particule, un nouveau temps de libre parcours pour la suite de la simulation.

## 1.3 Libre parcours

### 1.3.1 Évolution durant le libre parcours

L'évolution temporelle de la position et du vecteur d'onde d'un électron traité semi-classiquement, sans champ magnétique externe, est décrite par les deux équations suivantes [2]:

$$\frac{d\mathbf{r}}{dt} = \frac{\hbar\mathbf{k}}{m^*} \quad (1.1)$$

$$\hbar\frac{d\mathbf{k}}{dt} = -e\mathbf{E}, \quad (1.2)$$

où  $\mathbf{E}$  est le champ électrique externe appliqué au système.

Si au temps  $t$  l'électron est dans l'état semi-classique  $(\mathbf{r}, \mathbf{k})$  on prouve aisément que, dans un champ électrique externe constant, on a à la fin d'un intervalle  $\Delta t$ :

$$\mathbf{k}(t + \Delta t) = \mathbf{k}(t) - \frac{e\mathbf{E}}{\hbar}\Delta t \quad (1.3)$$

$$\mathbf{r}(t + \Delta t) = \mathbf{r}(t) + \frac{\hbar\mathbf{k}}{m^*}\Delta t - \frac{e\mathbf{E}}{2m^*}(\Delta t)^2. \quad (1.4)$$

Connaissant l'état initial de chacun des porteurs, on peut donc, tout au long du libre parcours, déterminer son état, en répétant la procédure dictée par les équations 1.3 et 1.4, jusqu'à ce que soit atteint l'intervalle de temps au cours duquel se termine le libre parcours, c'est-à-dire au cours duquel survient une collision.

On peut voir sur la figure 1.2 un exemple des trajectoires suivies par deux particules dans un champ électrique externe constant.

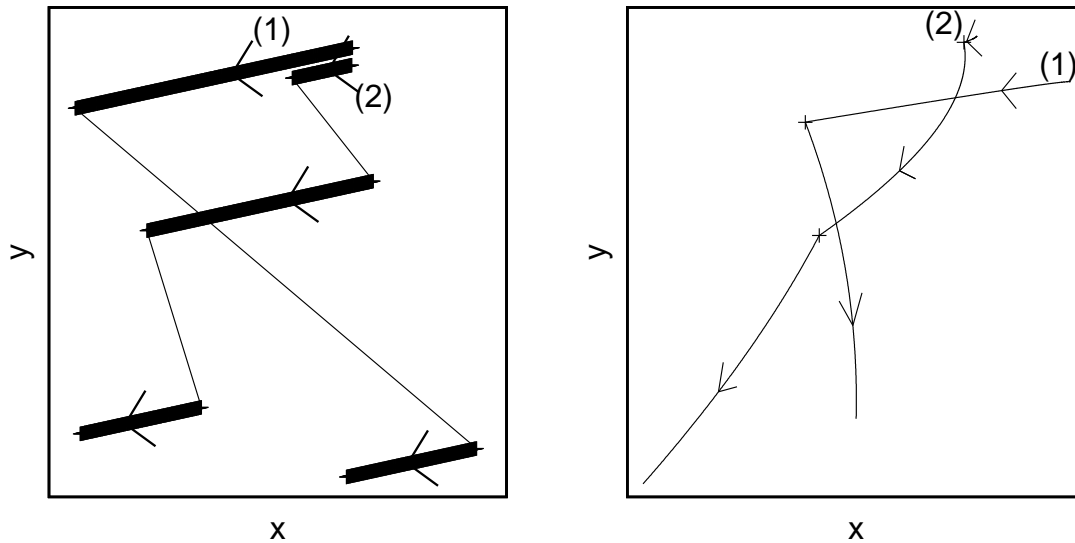


Figure 1.2: Trajectoires dans l'espace  $\mathbf{k}$  (à gauche) et dans l'espace réel (à droite)

On note que dans l'espace réel, la particule se déplace selon des segments paraboliques durant les libres parcours. Lorsqu'une collision (marquée d'un +) se produit, la direction de ce déplacement est modifiée par le changement de  $\mathbf{k}$ . Les collisions n'affectant pas la position d'une particule, les trajectoires dans l'espace réel demeurent en tout temps continues. Au contraire, dans l'espace  $\mathbf{k}$ , on remarque qu'au cours des libres parcours l'évolution des composantes est linéaire dans le temps, tel que l'indique l'équation 1.3. Dans cet espace, les processus de collisions ont pour effet de modifier de façon discontinue la valeur des composantes de  $\mathbf{k}$ . Les lignes étroites sur la figure 1.2 reliant les valeurs avant et après les collisions servent à faciliter le suivi d'une des deux particules.

### 1.3.2 Génération des temps de libre parcours

Un des points importants de l'algorithme Monte-Carlo est la génération stochastique de temps de libre parcours respectant les probabilités de collision propres à chacun des processus. On doit générer initialement un premier temps de libre parcours pour chacun des  $N$  porteurs simulés, mais en plus, chaque fois qu'un de ces porteurs subit une collision (à la fin du libre parcours), un nouveau temps doit être choisi pour ce porteur.

Connaissant  $P(\mathbf{k}(t))dt$ , la probabilité totale qu'un électron de vecteur d'onde  $\mathbf{k}$  subisse une collision durant un intervalle de temps  $dt$ , on en déduit que la probabilité qu'un électron ayant subi sa dernière collision au temps  $t = 0$  n'en ait toujours pas subi au temps  $t$  est

$$P_s(\mathbf{k}(t)) = e^{-\int_0^t P(\mathbf{k}(t'))dt'}. \quad (1.5)$$

La probabilité que le libre parcours (qui suit immédiatement la collision au temps  $t = 0$ ) soit de durée  $t$  est donc la probabilité qu'il subisse une collision au temps  $t$  et ce sans en avoir subi entre 0 et  $t$ , soit

$$P_{libre}(t)dt = P(\mathbf{k}(t))e^{-\int_0^t P(\mathbf{k}(t'))dt'} dt. \quad (1.6)$$

Bien évidemment, la nécessité de calculer l'intégrale présente dans l'argument de l'exponentielle (et ce chaque fois que l'on souhaite générer un temps de libre parcours), rendrait très lourds les calculs nécessaires à la simulation. Cependant, on note que pour une probabilité de collision constante  $P(\mathbf{k}(t)) = \Gamma$ , l'équation 1.6 se réduit à

$$P_{libre}(t)dt = \Gamma e^{-\Gamma t} dt. \quad (1.7)$$

On peut exploiter cette simplification en introduisant dans la simulation, un processus de collision que l'on appelle self-scattering [3, 4] et auquel on accorde une probabilité de réalisation valant :

$$P_{self}(\mathbf{k}(t)) = \Gamma - P(\mathbf{k}(t)) \quad (1.8)$$

ce qui entraîne qu'en incluant le self-scattering parmi les processus de collision, on a une nouvelle probabilité totale de collision qui vaut  $P_{self}(\mathbf{k}(t)) + P(\mathbf{k}(t)) = \Gamma$ .

Si l'on s'assure que  $\Gamma > P(\mathbf{k}(t)) \forall \mathbf{k}(t)$ , on surévalue constamment le taux total de collisions. Cette sur-évaluation systématique peut cependant être compensée si les événements de collision causés par l'introduction du self-scattering ne modifient pas l'état du porteur qui le subit. Dans ce cas, le fait de réaliser une collision due au self-scattering est équivalent à ne pas subir de collision du tout. On verra avec un peu plus de détails comment traiter le self-scattering à la section 1.4.1.

Avec cette nouvelle probabilité totale de collision, qui est constante grâce à l'inclusion du self-scattering, il nous est possible de générer stochastiquement des temps qui respectent la distribution 1.7 normalisée sur l'intervalle  $[0:\infty]$ . On utilise pour cela un générateur de nombres pseudo-aléatoires répartis uniformément sur l'intervalle  $[0:1]$  pour lequel on a une probabilité  $P(r)dr$  de choisir un nombre compris entre  $r$  et  $r+dr$  qui est simplement donnée par  $P(r)dr = dr$ .

En effet, on peut associer au nombre aléatoire  $r$ , une valeur de temps de libre parcours  $t(r)$  choisie de façon à ce que la distribution de probabilité  $P_{libre}$  soit reproduite. On a alors [4]:

$$P(r')dr' = dr' = P_{libre}(t')dt'$$

$$\int_0^r dr' = r = \int_0^{t(r)} P_{libre}(t')dt' = -e^{-\Gamma t(r)} + 1$$

$$t(r) = -\frac{1}{\Gamma} \ln(1 - r).$$

Compte tenu que  $r$  est distribué uniformément on utilise plutôt la forme

$$t(r) = -\frac{1}{\Gamma} \ln(r). \tag{1.9}$$

Au temps  $t = 0$ , on génère pour chacun des  $N$  porteurs simulés un nombre aléatoire  $r$ , auquel on peut associer une durée  $t(r)$  de chacun des premiers libres parcours. Puis,

lorsqu'un des porteurs subit une collision, on doit choisir un nouveau temps pour ce dernier, toujours en utilisant l'équation 1.9.

## 1.4 Collisions

### 1.4.1 Choix d'un processus

Supposons une simulation au cours de laquelle  $m$  processus de diffusion différents peuvent se produire. À chacun de ces processus est associé une probabilité  $P_i(\mathbf{k})$  qui dépend du vecteur d'onde  $\mathbf{k}$  de l'électron. Il faut, lorsque se termine un libre parcours, sélectionner stochastiquement le processus responsable de la diffusion ayant mis fin à ce libre parcours [4]. Ce choix doit, bien évidemment respecter les probabilités considérées et traiter aussi le self-scattering, dont il fut brièvement question à la section 1.3.2.

La figure 1.3 permet de comprendre aisément la méthode utilisée.

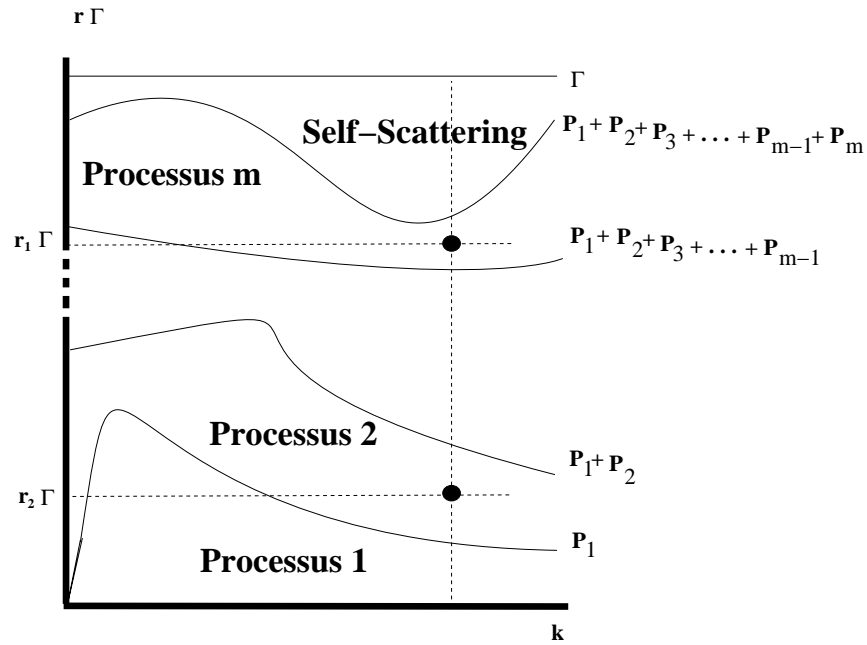


Figure 1.3: Choix d'un processus de collision

On doit choisir un nombre aléatoire  $r$  compris entre 0 et 1, suivant une distribution uniforme. En le multipliant par  $\Gamma$  (la probabilité totale de collision incluant le self-scattering), on obtient évidemment un nombre tiré aléatoirement entre 0 et  $\Gamma$  et réparti uniformément sur cet intervalle (axe y de la fig. 1.3). L'électron est, au moment de la collision, dans un état  $\mathbf{k}$  (axe x de la fig. 1.3) connu. Lorsque  $r \cdot \Gamma$  donne une valeur située entre  $\sum_{i=0}^{m'-1} P_i(\mathbf{k})$  et  $\sum_{i=0}^{m'} P_i(\mathbf{k})$  (où  $P_0(\mathbf{k}) = 0$ ), le processus numéroté  $m'$  est choisi. Par exemple, dans la figure, si le nombre  $r_1$  est tiré, le processus sélectionné est celui numéroté  $m$ , si  $r_2$  est tiré, c'est plutôt le processus 2 qui est retenu. Ainsi, la probabilité qu'un électron de vecteur d'onde  $\mathbf{k}$  subisse une collision de type  $i$  durant un intervalle  $dt$  est donnée par le produit de la probabilité totale de faire une collision ( $\Gamma dt$ ) et de la probabilité  $\left(\frac{P_i(\mathbf{k})}{\Gamma}\right)$  de choisir un  $r \cdot \Gamma$  correspondant au processus  $i$ . On a bien

$$(\Gamma dt) \cdot \left(\frac{P_i(\mathbf{k})}{\Gamma}\right) = P_i(\mathbf{k}) dt.$$

Lorsque  $\sum_{i=0}^m P_i(\mathbf{k}) < r \cdot \Gamma < \Gamma$ , on choisit le self-scattering comme processus de diffusion laissant ainsi la particule dans l'état qu'elle occupait avant la collision. En pratique, la particule ne subit donc pas de diffusion. Conséquemment, la probabilité totale de faire une collision réelle (excluant le processus fictif qu'est le self-scattering) est donnée par la probabilité totale de faire une collision ( $\Gamma dt$ ) moins celle qu'il s'agisse de self-scattering (voir l'équation 1.8), soit

$$(\Gamma dt) - (\Gamma dt) \left(\frac{P_{self}(\mathbf{k})}{\Gamma}\right) = (\Gamma dt) - \left(\Gamma - \sum_{i=0}^m P_i(\mathbf{k})\right) dt = \sum_{i=0}^m P_i(\mathbf{k}) dt.$$

Il est donc possible de simplifier grandement les calculs des temps de libre parcours en introduisant le self-scattering. On peut faire cela sans affecter le comportement des électrons simulés puisque les probabilités qu'ils subissent une collision d'un type particulier demeurent les mêmes en présence de self-scattering.

Cependant, le traitement de ces processus fictifs requière tout de même un temps de calcul qui peut devenir important s'ils sont trop nombreux. Bien que la valeur de  $\Gamma$  choisie soit sans effet sur le résultat des simulations, il est avantageux de la minimiser

pour ainsi réduire le nombre d'événements de self-scattering.

## 1.4.2 Calcul des temps de collision

La réalisation d'une simulation Monte-Carlo nécessite la connaissance de l'ensemble des probabilités de collisions  $P_i(\mathbf{k})$ . On doit donc être en mesure de calculer ces dernières.

Ces valeurs peuvent être obtenues, du moins au deuxième ordre dans la théorie des perturbations, par la règle d'or de Fermi qui nous indique que la probabilité de transition par unité de temps d'un état initial  $|m\rangle$  vers un état final  $|n\rangle$  due à l'existence d'un phénomène perturbatif décrit par un terme d'interaction  $V$  dans l'hamiltonien, est donnée par [5]:

$$P_{mn} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle n | V | m \rangle|^2 \delta(E_n - E_m), \quad (1.10)$$

où  $E_n$  et  $E_m$  sont les énergies respectives du système dans les états  $|n\rangle$  et  $|m\rangle$ .

Conséquemment, la probabilité totale due à  $V$  de diffuser hors de l'état  $|m\rangle$  est obtenue en sommant sur tous les états finaux possibles:

$$P_m = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_n |\langle n | V | m \rangle|^2 \delta(E_n - E_m). \quad (1.11)$$

Dans certains cas simples,  $P_m$  peut être connue analytiquement mais, en règle générale, ce n'est pas le cas. Il peut donc s'avérer nécessaire de réaliser numériquement les intégrales et d'en stocker le résultat dans un tableau auquel on se référera en cours de simulation.

Le principal type de diffusion utilisé dans nos simulations est l'interaction entre les électrons et le réseau par l'échange de phonons; processus auquel on s'intéresse brièvement ici dans un exemple simple.

On suppose pour l'interaction électron-phonon, un hamiltonien de la forme [6]:

$$H_{e-ph} = \sum_{\mathbf{q}} [\alpha(\mathbf{q})e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} a_{\mathbf{q}}^{\dagger} + \alpha^*(\mathbf{q})e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} a_{\mathbf{q}}] \quad (1.12)$$

où  $a_{\mathbf{q}}^{\dagger}$  est l'opérateur de création d'un phonon dans le mode  $\mathbf{q}$ ,  $\alpha^*(\mathbf{q})$  quantifie la force de l'interaction et  $\mathbf{r}$  est la position de l'électron en première quantification. En effet, sous cette forme, seule la partie phononique de l'hamiltonien est traitée en seconde quantification.

Par exemple, si l'on suppose une bande de phonons optiques polaires sans dispersion (c.-à-d.:  $\omega(\mathbf{q}) = \omega_{op}$ ), dans l'approximation de Frölich [7], on a:

$$|\alpha(\mathbf{q})|^2 = 2\pi\hbar\omega_{op} \frac{e^2}{\epsilon_p\Omega q^2}, \quad (1.13)$$

où  $\epsilon_p$  est défini par rapport aux permittivités statique  $\epsilon_0$  et haute fréquence  $\epsilon_{\infty}$  par:  $\frac{1}{\epsilon_p} = \frac{1}{\epsilon_{\infty}} - \frac{1}{\epsilon_0}$ . Dans un échantillon 3D de volume  $\Omega$ , en supposant que les états électroniques peuvent être représentés par une onde plane

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}, \quad (1.14)$$

l'équation 1.11 devient:

$$P_{\mathbf{k}} = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\mathbf{k}_f} \sum_{\mathbf{q}} |\langle \psi_{\mathbf{k}_f}(\mathbf{r}) | H_{e-ph} | \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \rangle|^2 \delta(E(\mathbf{k}_f) + \hbar\omega_{op} - E(\mathbf{k})). \quad (1.15)$$

En supposant une bande parabolique  $E(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}$  avec une masse effective  $m^*$ , on obtient les deux termes suivants, un représentant l'absorption par l'électron d'un phonon optique et le second l'émission d'un phonon optique [9]:

$$P_{\mathbf{k}} = \frac{\omega_{op} e^2 m^*}{\hbar^2 \epsilon_p k} \ln \left| \frac{k + k_f}{k - k_f} \right| \times \begin{cases} N_{op} & \text{absorption} \\ N_{op} + 1 & \text{émission} \end{cases}, \quad (1.16)$$

où  $N_{op} = \left[ e^{\frac{\hbar\omega_{op}}{k_B T}} - 1 \right]^{-1}$  est le nombre de phonons présents à la température  $T$  d'opération, tel que prescrit par la statistique de Bose-Einstein. Dans beaucoup

de simulations, on considère en effet que le système est en interaction avec un bain de phonons dont la population est toujours thermique. On ne considère pas les variations de la distribution de phonons due à l'absorption ou l'émission de phonons par les porteurs en supposant que le retour à l'équilibre de cette distribution se fait extrêmement rapidement. Cependant, il est possible de traiter les effets d'une distribution non-thermique de phonons.

La norme du vecteur  $k_f$  présente dans l'équation 1.16 est obtenue directement par l'application de la loi de conservation de l'énergie.

Il est à noter que le résultat de l'équation 1.16 est obtenu sans considérer l'effet du réseau qui introduit une dispersion de l'énergie des phonons optiques lorsque l'on se rapproche du bord de la première zone de Brillouin. Cependant, compte tenu que l'interaction diminue en  $\frac{1}{q^2}$  (voir éq. 1.13), cette effet ne joue pas de rôle important, puisque les phonons à  $q$  petit sont ceux dont l'échange est favorisé statistiquement. De plus, le fait que  $q < k + k_f$  en raison de la conservation de la quantité de mouvement (implicitement présente dans l'équation 1.15) entraîne que seuls les phonons de faible  $q$  sont réellement impliqués dans les simulations, à moins d'avoir un très fort champ électrique ou une distribution initiale excitée à très haute énergie permettant alors à des porteurs d'atteindre un vecteur d'onde de norme  $k$  élevée. Par exemple, dans les expériences de photoluminescence que l'on décrit aux sections 3 et 4, l'énergie des photons qui excite les porteurs dans le GaAs est de 1,67 eV. En considérant un gap de 1.43 eV, l'énergie initiale des porteurs dans la bande de conduction est inférieure à 0.24 eV. Un rapide calcul nous indique qu'à cette valeur d'énergie les électrons ont un vecteur d'onde de norme  $k \approx 0.12\frac{\pi}{a}$  ce qui est assez loin du bord de la première zone de Brillouin pour ne pas avoir à se soucier des problèmes pouvant survenir près de cette zone.

Le résultat obtenu à l'équation 1.16 est présenté ici à titre d'exemple, les autres calculs de probabilités sont plutôt présentés dans chacune des sections où les processus correspondants sont introduits dans le simulateur.

La description des processus impliquant les phonons de la branche acoustique sont toujours décrit par l'hamiltonien 1.12. Par contre, on se place ici dans l'approximation du potentiel de déformation, où, en considérant une branche acoustique isotrope avec

une vitesse du son constante  $c_s$  (c-à-d  $\omega(\mathbf{q}) = c_s q$ ), on a cette fois [6]:

$$|\alpha(\mathbf{q})|^2 = \frac{D^2}{2\rho c_s^2 \Omega} \hbar \omega(\mathbf{q}), \quad (1.17)$$

où  $D$  est le potentiel de déformation pour les électrons et  $\rho$  est la densité de masse du matériau.

Bien évidemment, la diffusion porteur-porteur [8] est quant à elle décrite par le potentiel coulombien :

$$V(r) = -\frac{e}{4\pi\epsilon} \frac{1}{r} \quad (1.18)$$

### 1.4.3 Sélection d'un état final

Une fois que la sélection d'un type de collision a été faite, il faut déterminer stochastiquement dans quel état,  $\mathbf{k}_f$ , l'électron se retrouve après cette collision. La probabilité de diffusion d'un état initial  $\mathbf{k}$  vers un état  $\mathbf{k}_f$  est simplement donnée par

$$P(\mathbf{k}, \mathbf{k}_f) = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle \psi_{\mathbf{k}_f} | V | \psi_{\mathbf{k}} \rangle|^2 \delta(E_{finale} - E_{initiale}). \quad (1.19)$$

Il est donc aisé de sélectionner l'état final, en utilisant la méthode de rejet [4], permettant la génération de nombres aléatoires selon une distribution de probabilité quelconque.

La méthode est décrite par la figure suivante:

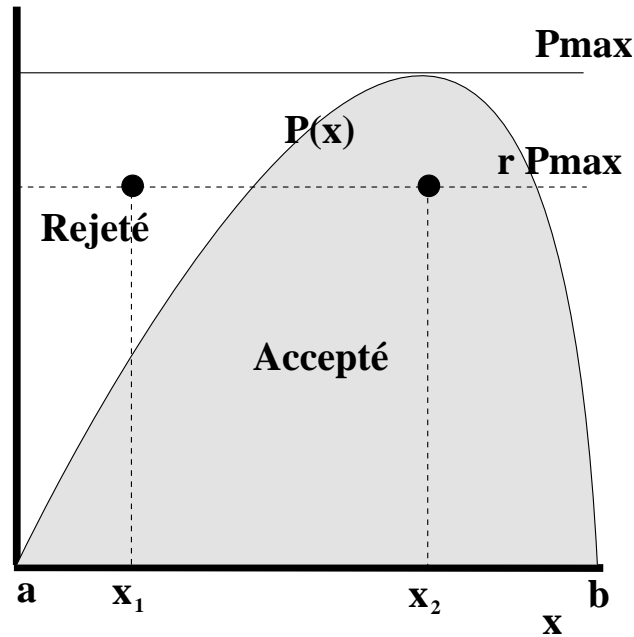


Figure 1.4: Méthode de rejet

La génération de valeurs de  $x$ , une variable quelconque, respectant la distribution de probabilité  $P(x)$  se fait en générant deux nombres aléatoires répartis uniformément entre 0 et 1. Le premier est utilisé pour choisir une valeur de  $x$ , dans l'intervalle  $[a, b]$  étudié. Cela se fait aisément en associant au nombre aléatoire  $r_x$  une valeur de  $x = a + (b - a)r_x$ . Par la suite on tire un deuxième nombre aléatoire  $r$  qui, multiplié par la valeur maximale que peut prendre  $P$  sur l'intervalle, nous donne un nombre compris entre 0 et  $P_{max}$ . Si ce nombre est supérieur à  $P(x)$  évaluée au point  $x$  sélectionné préalablement, la valeur de  $x$  est rejetée (voir  $x_1$  sur la figure) et on reprend le processus en tirant une nouvelle valeur de  $x$ , si par contre, elle est inférieure à  $P(x)$  la valeur de  $x$  est conservée (voir  $x_2$  sur la figure). Ainsi comme les probabilités de générer un  $x$  et un  $rP_{max}$  donnés sont uniformes, les valeurs de  $x$  sont bien générées suivant la distribution  $P(x)$ .

Bien entendu, l'application de cette technique nécessite que les  $x$  possibles soient

limités à un intervalle fini. Dans un cas pratique où  $x$  n'est pas borné, mais que  $P(x)$  tend vers zéro lorsque  $x$  tend vers l'infini, il est possible d'imposer artificiellement une valeur de coupure au-dessus de laquelle on considère la probabilité comme étant strictement nulle.

Il est évidemment possible d'adapter la méthode pour choisir des couples de valeurs  $(x, y)$  selon une distribution de probabilité  $P(x, y)$ , en générant une valeur de  $x$  et une de  $y$  et en rejetant ou en acceptant ce couple selon la valeur de  $P(x, y)$ .

Dans le cas particulier de l'interaction entre les électrons et les phonons optiques polaires, tel que présenté à la section 1.4.2, la norme de  $\mathbf{k}_f$  est fixée par la conservation de l'énergie, car tous les phonons optiques ont la même fréquence. Par conséquent, le choix de l'état final se réduit au choix des deux angles déterminant l'orientation de  $\mathbf{k}_f$ . Les probabilités de transfert d'un état  $\mathbf{k}_i$  vers un état  $\mathbf{k}_f$  sont proportionnelles à:

$$P(\mathbf{k}_i, \mathbf{k}_f) \propto \frac{1}{q^2} = \frac{1}{|\mathbf{k}_f - \mathbf{k}_i|^2}. \quad (1.20)$$

On effectue une rotation des axes afin d'obtenir un référentiel où  $\mathbf{k}_i = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ k_i \end{pmatrix}$ , ce qui simplifie le calcul.

En définissant les angles  $\alpha$  et  $\beta$  tels que  $\mathbf{k}_f = k_f \begin{pmatrix} \sin \alpha \cos \beta \\ \sin \alpha \sin \beta \\ \cos \alpha \end{pmatrix}$ , on trouve que, pour un vecteur d'onde initial  $\mathbf{k}_i$  donné, la distribution de probabilité des angles finaux  $\alpha$  et  $\beta$  est:

$$P(\alpha, \beta) d\alpha d\beta = \frac{1}{k_f^2 + k_i^2 - 2k_i k_f \cos \alpha} \cdot \sin \alpha d\alpha d\beta. \quad (1.21)$$

On note que, compte tenu de l'indépendance de  $P$  envers l'angle  $\beta$ , cet angle sera réparti uniformément sur l'intervalle  $[0, 2\pi]$  et pourra aisément être sélectionné en choisissant un nombre aléatoire  $r$  distribué uniformément entre 0 et 1 et en le multi-

pliant par  $2\pi$ . Quant à l'angle  $\alpha$ , la distribution de probabilité est sensiblement plus complexe. En appliquant la technique utilisée pour la génération des temps de libre parcours (section 1.3.2), on obtient [9], en normalisant la distribution de probabilité  $P(\alpha) = \int_0^{2\pi} P(\alpha, \beta) d\beta$ ,

$$\int_0^r dr' = r = \frac{\int_0^{\alpha(r)} P(\alpha') d\alpha'}{\int_0^\pi P(\alpha') d\alpha'}$$

$$r = \frac{\ln(k_i^2 + k_f^2 - 2k_i k_f \cos \alpha(r)) - \ln(k_i^2 + k_f^2 - 2k_i k_f)}{\ln(k_i^2 + k_f^2 + 2k_i k_f) - \ln(k_i^2 + k_f^2 - 2k_i k_f)}$$

$$\cos \alpha = \frac{(1 + f) - (1 + 2f)^r}{f}, \quad (1.22)$$

où  $f = \frac{2k_i k_f}{k_i^2 + k_f^2 - 2k_i k_f}$ . On peut donc générer les angles  $\alpha$  finaux à l'aide d'un simple générateur de nombres aléatoires uniformément répartis entre 0 et 1. Dans un cas plus complexe il n'est pas nécessairement possible de générer les angles de cette façon simple et on doit alors faire appel à la méthode de rejet décrite précédemment.

Connaissant l'orientation de  $\mathbf{k}_f$  par rapport à  $\mathbf{k}_i$  ainsi que sa norme (par conservation de l'énergie), on dispose d'une méthode permettant de générer stochastiquement l'état final d'un électron après une collision, tout en respectant la distribution de probabilité obtenue par la règle d'or de Fermi.

#### 1.4.4 Principe d'exclusion de Pauli

Le taux de transition donné par l'équation 1.10 ne tient pas compte de la possibilité que l'état final soit déjà occupé par un autre fermion, auquel cas la transition est interdite par le principe de Pauli. Il est cependant aisé de pallier cette lacune. En effet, puisque l'on connaît, de par la nature même de la méthode Monte-Carlo, la distribution de tous les porteurs et ce à tout moment de la simulation, une méthode simple nous permet de traiter le principe d'exclusion de Pauli [10]. Lorsqu'on le considère, le taux de transition d'une particule dans l'état initial  $\mathbf{k}_i$  vers un état final

$\mathbf{k}_f$  devient:

$$P(\mathbf{k}_f, \mathbf{k}_i) = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle \psi_{\mathbf{k}_f}(\mathbf{r}) | V | \psi_{\mathbf{k}_i}(\mathbf{r}) \rangle|^2 [1 - F(\mathbf{k}_f)] \delta(E_f - E_i), \quad (1.23)$$

où  $F(\mathbf{k}_f)$  est l'occupation de l'état final soit occupé et donc  $1 - F(\mathbf{k}_f)$  est la probabilité de le trouver disponible.  $F(\mathbf{k}_f)$  n'est pas nécessairement une distribution de Fermi-Dirac, puisque le système peut être hors d'équilibre au cours d'une simulation.

Or, puisque la méthode de simulation telle qu'elle a été présentée permettait de décrire correctement les taux de collisions donnés par

$$P(\mathbf{k}_f, \mathbf{k}_i) = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle \psi_{\mathbf{k}_f}(\mathbf{r}) | V | \psi_{\mathbf{k}_i}(\mathbf{r}) \rangle|^2 \delta(E_f - E_i),$$

il suffit d'ajouter à la fin de chaque collision une vérification de la disponibilité de l'état. Lorsque toute la procédure de collision est complétée, on évalue  $F(\mathbf{k}_f)$  en comptant le nombre  $N_{in}$  de particules simulées présentes dans un élément de volume de l'espace réciproque  $\Delta k_x \Delta k_y \Delta k_z$ . Or, cet élément de volume peut contenir, en tenant compte du spin, un maximum de  $2 \frac{\Delta k_x \Delta k_y \Delta k_z}{(2\pi)^3/V}$  particules réelles. Puisque l'on simule avec un nombre de porteurs sensiblement plus petit que le nombre réel de porteurs dont on souhaite reproduire le comportement, chacun des  $N$  porteurs simulés représente en fait un nombre  $\frac{N_{réel}}{N}$  de porteurs libres, où  $N_{réel}$  est le nombre total de porteurs libres dont on cherche à simuler le comportement. Conséquentement, le nombre maximal de porteurs simulés permis dans l'élément de volume est :

$$N_{max} = 2 \frac{\Delta k_x \Delta k_y \Delta k_z}{(2\pi)^3} \frac{N}{N_{réel}/V}. \quad (1.24)$$

L'occupation de l'état final est alors donnée par  $F(\mathbf{k}_f) = \frac{N_{in}}{N_{max}}$ . On tire après chaque collision, un nombre aléatoire  $r$  compris entre 0 et 1. Si  $r$  est inférieur à  $1 - F(\mathbf{k}_f)$ , la collision est acceptée et le porteur se retrouve dans l'état  $\mathbf{k}_f$ , cependant si  $r$  est supérieur à  $1 - F(\mathbf{k}_f)$  la collision est refusée et la particule subit un self-scattering demeurant donc dans l'état  $\mathbf{k}_i$ . La collision sera donc acceptée avec la probabilité  $1 - F(\mathbf{k}_f)$ . De cette façon, durant la simulation la probabilité totale qu'un des porteurs simulés se trouvant dans l'état  $\mathbf{k}_i$  diffuse vers l'état  $\mathbf{k}_f$  est donnée par la probabilité de

collision obtenue sans l'application du principe de Pauli, multipliée par la probabilité que la collision soit acceptée au cours de la procédure que l'on vient de décrire et on reproduit donc l'équation 1.23.

Cette façon d'appliquer le principe de Pauli ne nécessite pas d'introduire une variable définissant le spin des porteurs simulés. Dans un système réel où un état est déjà occupé par un porteur de spin donné  $\alpha$ , les autres porteurs de spin  $\alpha$  ont une probabilité nulle de diffuser vers cet état alors que ceux de spin  $-\alpha$  ne sont pas affectés par la présence du porteur dans l'état. Pour une distribution non-polarisée en spin et pour des collisions indépendantes du spin, la moitié des porteurs peuvent donc diffuser vers cet état. Dans la simulation Monte-Carlo, chacun des porteurs simulés a une chance sur deux que sa diffusion vers cet état soit acceptée. Statistiquement, on reproduit donc le comportement en acceptant les diffusions une fois sur deux plutôt qu'en acceptant la diffusion de seulement un porteur sur deux.

Puisque, dans le calcul de l'occupation, on associe chacun des porteurs simulés à une distribution uniforme de porteurs réels comprise dans un élément  $\Delta k_x \Delta k_y \Delta k_z$ , il est important que cet élément de volume de l'espace en  $\mathbf{k}$  soit suffisamment petit pour permettre une bonne résolution en  $\mathbf{k}$ . Cependant, si ces éléments deviennent trop petits, le nombre restreint de porteurs simulés peut entraîner des erreurs dans la simulation. En effet, une collision menant vers un état  $\mathbf{k}_f$  est toujours acceptée si l'élément  $\Delta k_x \Delta k_y \Delta k_z$  contenant  $\mathbf{k}_f$  est vide et par conséquent, même lorsque la discrétisation est très petite, il est toujours possible d'accueillir au moins un porteur simulé par élément  $\Delta k_x \Delta k_y \Delta k_z$ . Sur un volume  $G$  de l'espace  $\mathbf{k}$  il est donc possible d'en accueillir  $\frac{G}{\Delta k_x \Delta k_y \Delta k_z}$ . Prenons par exemple un volume  $G = 100 \frac{8\pi^3}{V}$  qui peut donc contenir un maximum de 100 porteurs réels. Si on utilise une discrétisation  $\Delta k_x \Delta k_y \Delta k_z = \frac{8\pi^3}{V}$ , il est possible d'y accueillir  $\frac{G}{\Delta k_x \Delta k_y \Delta k_z} = 100$  porteurs simulés qui représentent un nombre  $100 \frac{N_{réel}}{N} > 100$  de porteurs réels. Cette discrétisation trop petite permet à un nombre trop grand de porteurs d'être contenus dans un même volume  $G$  de l'espace  $\mathbf{k}$ . Le choix d'une bonne discrétisation est donc difficile à réaliser. La façon la plus simple de le faire est probablement par essai et erreur sur une distribution à l'équilibre thermique avec un bain de phonons. Connaissant la distribution théorique (Fermi-Dirac) à la température du bain de phonon, on peut rechercher la

plus petite discrétisation permettant d'obtenir une distribution électronique simulée qui, dans l'état stationnaire, reproduit bien celle de Fermi-Dirac.

Il est aussi possible d'envisager, dans une description semi-classique où les porteurs sont localisés, de faire une application locale du principe de Pauli. En définissant l'état non pas seulement par son vecteur d'onde, mais aussi par sa position. On peut alors discrétiser le système à la fois dans l'espace  $\mathbf{k}$  et dans l'espace réel. Cependant, pour s'assurer d'une occupation suffisante de chacun de ces éléments de l'espace de phase, le nombre de porteurs simulés requis peut devenir très grand, rendant ainsi la simulation très longue à réaliser.

Puisque l'application du principe de Pauli fait que les probabilités de collision dépendent de la distribution instantanée des porteurs, il devient impératif d'utiliser des intervalles  $\Delta t$  très courts. En effet, si plusieurs porteurs subissent une collision, elles ne sont pas nécessairement traitées d'une façon ordonnée correctement dans le temps, ce qui, si un grand nombre de collisions se produit effectivement durant un intervalle peut avoir des conséquences importantes. Il est donc nécessaire de s'assurer que le nombre de collisions qui surviennent par intervalle  $\Delta t$  ne soit pas beaucoup plus grand que 1 en moyenne.

Il est à noter que, lorsque l'on travaille avec des densités de porteurs relativement faibles, il est possible de ne pas considérer du tout le principe de Pauli, ce qui simplifie grandement la simulation.

## 1.5 Généralisation en dimension inférieure à 3

Le confinement des porteurs selon un ou plusieurs axes donnant naissance à des niveaux d'énergie discrets implique évidemment des modifications à la méthode telle qu'elle a été définie en trois dimensions. On considère que, dans les directions où il n'y a pas de confinement, on peut continuer de traiter le mouvement durant les libres parcours à l'aide des équations semi-classiques (éq. 1.1 et éq. 1.2). Cependant selon les axes de confinement, les variables continues  $\mathbf{k}$  doivent être remplacées par un ensemble discrets de sous-bandes  $n$ . Le niveau  $n$  occupé par un porteur ne peut

être changé que par un processus de collisions et demeure donc le même tout au long d'un libre parcours.

La règle d'or de Fermi (éq. 1.10) doit donc être maintenant calculée entre chaque couple  $(m, n)$  de sous-bandes, puisque chacun de ces niveaux est décrit par une fonction d'onde différente. Par exemple en 2 dimensions (confinement selon  $z$ ), il faut maintenant pour chaque processus de collision, connaître l'ensemble des probabilités de transfert d'un état défini par  $(k_{x_i}, k_{y_i})$  et la sous-bande  $m$  vers l'état  $(k_{x_f}, k_{y_f})$  et la sous-bande  $n$ :

$$P[(\mathbf{k}_f, m), (\mathbf{k}_i, n)] = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle \psi_{(\mathbf{k}_f, m)}(\mathbf{r}) | V | \psi_{(\mathbf{k}_i, n)}(\mathbf{r}) \rangle|^2 \delta(E_f - E_i).$$

La procédure de traitement des collisions est exactement la même sauf que l'on traite les transferts vers chacune des sous-bandes finales comme étant des processus distincts. Le choix du processus responsable de la collision (voir sec. 1.4.1) devient en fait un choix simultané du processus responsable de la collision ainsi que de la sous-bande finale. Le choix des composantes de  $\mathbf{k}$  dans les directions non-confinées est réalisé quant à lui dans le choix de l'état final en utilisant la méthode présentée à la section 1.4.3.

# Chapitre 2

## Simulations préliminaires

### 2.1 Présentation du chapitre

Afin de mieux cerner les possibilités offertes par la méthode Monte-Carlo, on présente dans ce deuxième chapitre quelques simulations simples. On y donne des exemples des types de mesures qui peuvent être effectuées sur la distribution en cours de simulation. L'étude de ces modèles simples permet aussi de vérifier le bon fonctionnement du simulateur tout au cours de son développement.

### 2.2 Modèle de Drude en 3D

Le modèle de Drude étant fort simple, il est tout indiqué de débiter la construction du simulateur Monte-Carlo par l'étude de ce modèle [2]. Puisque le comportement des électrons au cours des libres parcours n'a pas à être modifié pour le traitement de modèles de collisions plus complexes, une vérification de la concordance entre les prévisions théoriques et les résultats de simulation obtenus avec le modèle de Drude permet de s'assurer du bon fonctionnement d'une grande partie du programme. En effet, seules les probabilités associées aux divers événements de collisions seront changées pour passer d'un modèle à un autre.

Dans le cadre du modèle de Drude, on a à traiter un type unique de collision dont la probabilité  $\Gamma = \frac{1}{\tau}$  est indépendante de l'état de l'électron. Par conséquent, il n'est pas nécessaire d'introduire le self-scattering, puisque le temps de collision est constant (voir section 1.3.2). De plus, il n'est bien évidemment pas nécessaire de sélectionner le type de collision (1.4.1) puisqu'un seul processus existe.

Le choix du vecteur d'onde  $\mathbf{k}_f$  d'un électron après une collision est réalisé en choisissant d'abord sa norme  $k_f$ . Cette dernière est sélectionnée stochastiquement, suivant la distribution de Maxwell-Boltzmann (on néglige complètement le principe d'exclusion de Pauli):

$$P(k_f) \propto k_f^2 e^{-\frac{\hbar^2 k_f^2 / 2m^*}{k_b T}}, \quad (2.1)$$

en utilisant la méthode de rejet (1.4.3). La collision à la Drude étant isotrope, le choix

des deux angles décrivant l'orientation de  $\mathbf{k}_f = k_f \begin{pmatrix} \sin \alpha \cos \beta \\ \sin \alpha \sin \beta \\ \cos \alpha \end{pmatrix}$  se fait aisément.

En effet, la distribution de probabilité  $P(\mathbf{k}_f)$  étant indépendante des angles, on a

$$P(\alpha, \beta) d\alpha d\beta \propto \sin \alpha d\alpha d\beta. \quad (2.2)$$

On peut donc choisir  $\beta$  en tirant un nombre aléatoire réparti uniformément entre 0 et  $2\pi$ , alors que  $\alpha$  peut être choisi stochastiquement en associant une valeur de  $\alpha$  à un  $r$  (choisi aléatoirement entre 0 et 1), de la façon suivante

$$\cos(\alpha) = 1 - 2r, \quad (2.3)$$

puisque  $\sin \alpha d\alpha = d(\cos \alpha)$ , ce qui implique que  $\cos \alpha$  est réparti uniformément sur toute la plage des valeurs qu'il peut prendre, soit  $[-1, 1]$ .

Ce résultat est généralisable à toutes les collisions isotropes en 3D. L'angle  $\beta$  est réparti uniformément sur l'intervalle  $[0, 2\pi]$  alors que c'est plutôt  $\cos(\alpha)$  qui est réparti uniformément sur l'intervalle  $[-1, 1]$ .

## 2.2.1 Dérive

On peut, en premier lieu, vérifier qu'il s'établit bien un courant de dérive, lorsque les électrons sont soumis à un champ électrique externe. Pour ce faire, on calcule simplement la valeur moyenne de la vitesse  $\frac{\hbar k}{m^*}$  dans la direction parallèle au champ électrique. Les résultats de cette sous-section sont obtenus avec un temps de collision  $\tau = 1 \cdot 10^{-6}$  s et une masse effective appropriée aux électrons dans le GaAs  $m^* = 0.067m_0$ , où  $m_0$  est la masse au repos d'un électron. Une valeur très élevée de  $\tau$  est choisie car elle permet d'obtenir une vitesse de dérive élevée dans l'état stationnaire permettant ainsi de simuler avec un petit nombre de porteurs, sans que les fluctuations statistiques n'affectent le résultat de façon trop importante.

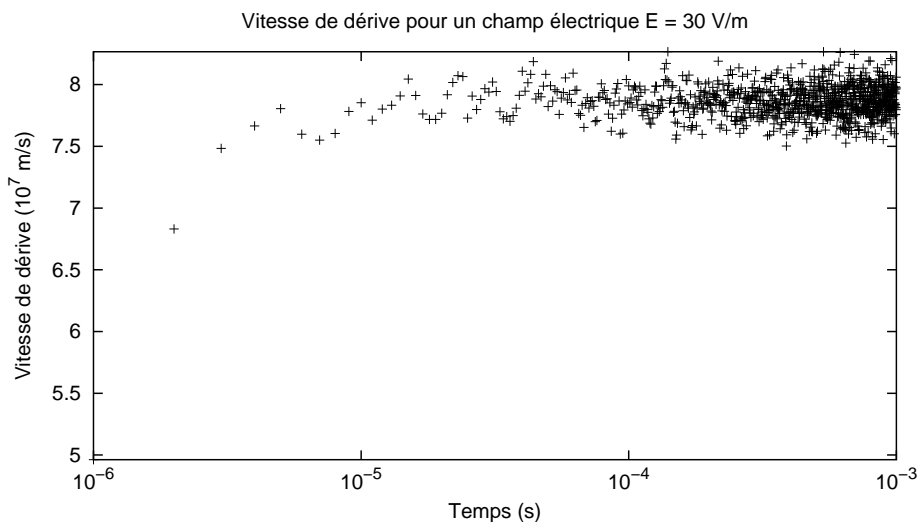


Figure 2.1: Vitesse de dérive en fonction du temps

La présence d'un nombre limité de porteurs dans la simulation entraîne en effet des fluctuations statistiques, plus ou moins importantes, de la vitesse moyenne, tel que l'on peut le constater à la figure 2.1 présentant la valeur de la vitesse moyenne en fonction du temps pour un champ électrique externe de 30 V/m. De plus, dans les simulations présentées ici, la distribution initiale est une distribution thermique et donc de vitesse moyenne nulle. Il faut alors un certain temps avant que s'établisse le régime stationnaire, où l'on observe effectivement une vitesse moyenne non-nulle.

La figure 2.2 présente la vitesse de dérive, pour plusieurs simulations réalisées avec des valeurs différentes du champ électrique appliqué. Les points sont obtenus en moyennant les valeurs calculées sur toute la plage de temps où nous sommes en régime stationnaire. Par exemple, sur les résultats de la figure 2.1, on moyenne entre  $10^{-4}$  et  $10^{-3}$  sec. On a aussi tracé la droite correspondant au résultat théorique prévu par le modèle de Drude [2]

$$\mathbf{v}_{moy} = -\frac{e\mathbf{E}\tau}{m^*}. \quad (2.4)$$

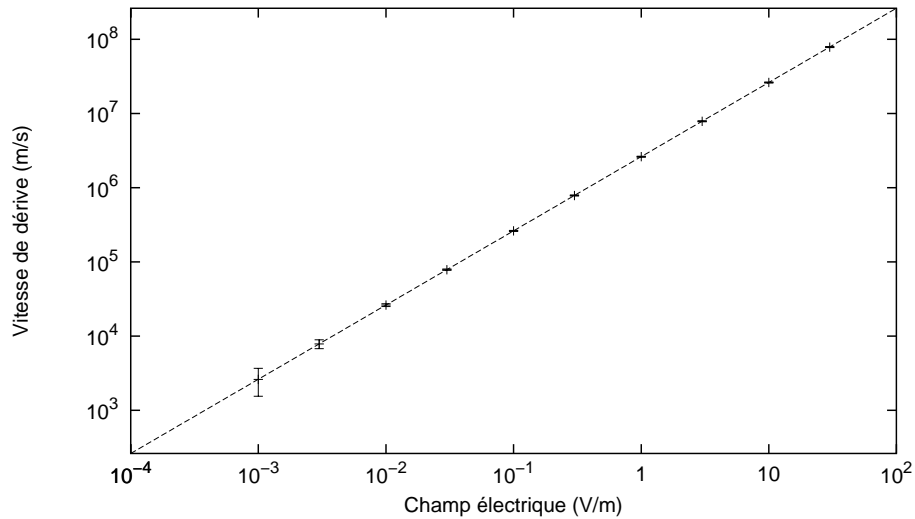


Figure 2.2: Vitesse de dérive en fonction du champ électrique

On note, pour les 10 points présentés, l'excellente correspondance entre les valeurs théoriques et celles obtenues par simulation et ce, dans toute la gamme de champ électrique couverte.

Les barres d'erreurs incluses dans ce graphique représentent l'écart type des valeurs de vitesses moyennes obtenues avec seulement 4000 porteurs simulés. L'erreur relative varie de 40% à champ électrique faible à environ 1.6% pour les valeurs de champ les plus élevées. Évidemment, le fait de changer le nombre de porteurs affecte l'erreur statistique sur les valeurs moyennes. Il ne faut donc pas considérer cette erreur comme

inhérente aux simulations Monte-Carlo, puisqu'elle peut être réduite en augmentant le nombre de particules simulées.

Il faut aussi savoir que l'absence de corrections relativistes dans le programme de simulation entraîne que, pour des valeurs de champ plus élevées que celle présentées ici, la vitesse moyenne des porteurs excéderait la vitesse de la lumière. Le fait d'avoir utilisé un temps de collision très long dans cette série de simulation est responsable du fait que ces valeurs de vitesses sont atteintes pour des champs électriques relativement faibles.

Un autre effet important qu'il est possible d'étudier est la dissipation d'énergie par le système. On peut déterminer la puissance totale dissipée, en additionnant, l'énergie perdue ou gagnée chaque fois qu'un électron subit une collision. En divisant cette somme par la durée totale de la simulation et le nombre d'électrons simulés, on obtient la puissance moyenne par électron dissipée par le système. On peut voir à la figure 2.3, la comparaison entre les valeurs ainsi obtenues et la prédiction théorique du modèle de Drude [2]

$$P = \frac{e^2 \tau}{m^*} E^2. \quad (2.5)$$

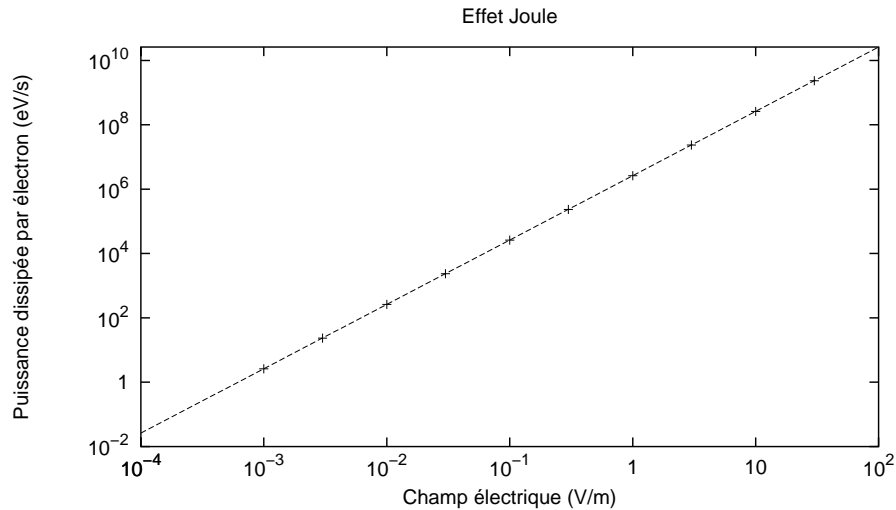


Figure 2.3: Puissance dissipée en fonction du champ électrique

Encore une fois, la simulation reproduit très bien le comportement attendu sur toute la plage de champ étudiée.

On a aussi accès, tout au long de la simulation, à la distribution électronique. On peut donc s'intéresser à la distribution en  $\mathbf{k}$  dans le régime stationnaire, pour constater l'effet du champ électrique sur cette dernière.

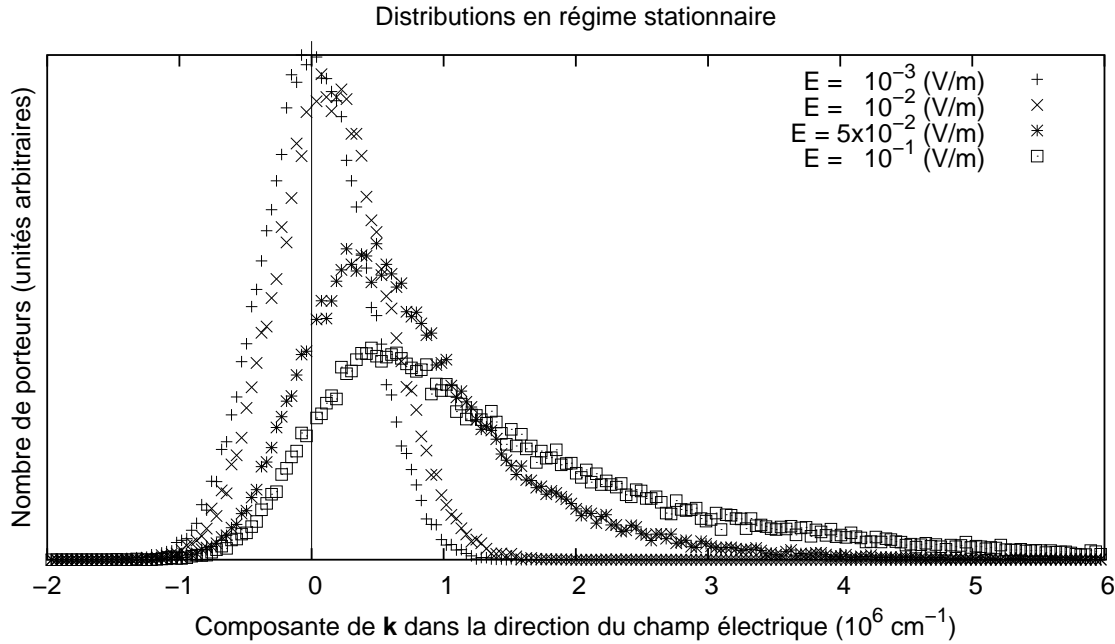


Figure 2.4: Distributions stationnaires pour plusieurs valeurs du champ électrique

On note, sur la figure 2.4, que pour les deux valeurs les plus faibles du champ électrique ( $E = 1 \cdot 10^{-3} V/m$  et  $E = 1 \cdot 10^{-2} V/m$ ), on reste dans un régime linéaire où la distribution demeure gaussienne mais présente un léger décalage en  $\mathbf{k}$  qui donne naissance au courant de dérive. Cependant, l'augmentation du champ électrique entraîne l'apparition d'effets non-linéaires, c'est-à-dire une déformation de la distribution plutôt qu'un simple décalage en énergie de cette dernière. On voit alors se développer une queue à haute énergie.

## 2.2.2 Diffusion

En plus des phénomènes causés par l'application d'un champ électrique externe, il est possible d'étudier le comportement des électrons à champ électrique nul. Dans ce cas, seule la diffusion joue un rôle, puisqu'aucun mécanisme ne permet alors l'établissement d'un courant de dérive.

À champ nul, la distribution devrait respecter l'équation de diffusion suivante en 1D:

$$\frac{\partial n(x, t)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 n(x, t)}{\partial x^2}. \quad (2.6)$$

Le calcul du deuxième moment de cette distribution nous permet d'obtenir la valeur du coefficient de diffusion [4], puisque, avec  $N$  défini comme le nombre total de porteurs

$$\begin{aligned} \langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle &= \frac{1}{N} \int x^2 n(x, t) dx \\ \frac{d \langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle}{dt} &= \frac{D}{N} \int x^2 \frac{\partial^2 n(x, t)}{\partial x^2} dx \\ \frac{d \langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle}{dt} &= \frac{D}{N} \left( - \int \frac{\partial n(x, t)}{\partial x} 2x dx \right) \\ \frac{d \langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle}{dt} &= \frac{2D}{N} \int n(x, t) dx \end{aligned}$$

$$D = \frac{1}{2} \frac{d}{dt} \langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle. \quad (2.7)$$

En réalisant le calcul du deuxième moment de la distribution et ce pour plusieurs valeurs du temps de collision  $\tau$  et de la température  $T$ , il nous est possible de vérifier la relation d'Einstein liant la mobilité au coefficient de diffusion [2]

$$\mu = \frac{e\tau}{m^*} = \frac{eD}{k_B T}$$

$$D = \frac{k_B T \tau}{m^*}. \quad (2.8)$$

Les résultats de simulations sont présentés à la figure 2.5 dans laquelle on a aussi inclus les prévisions théoriques pour les 4 températures étudiées.

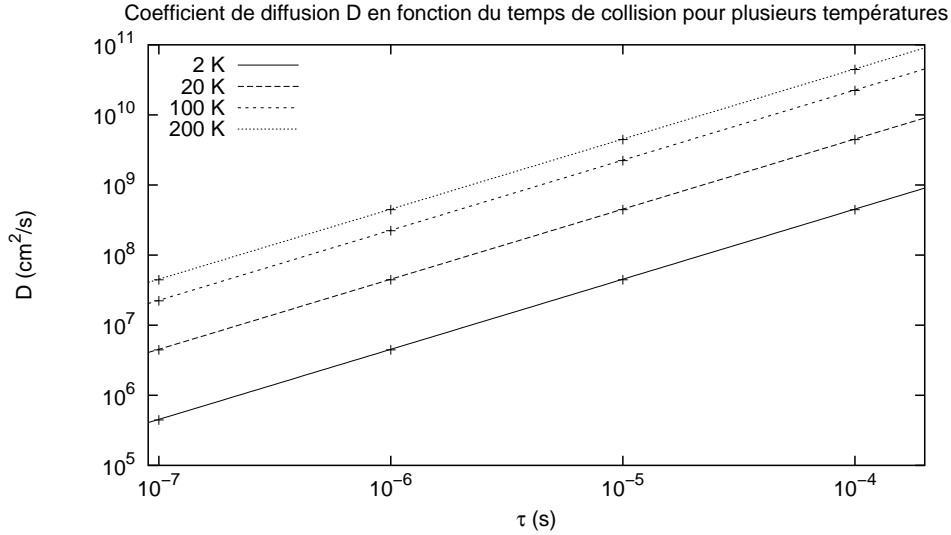


Figure 2.5: Vérification de la relation d'Einstein

On voit clairement que, pour l'ensemble des points calculés, la relation d'Einstein est respectée par les résultats de simulation.

On peut donc conclure, à la lumière de ces résultats et de ceux de la sous-section précédente, que la description de l'évolution des porteurs au cours des libres parcours, tant dans l'espace réel que dans l'espace  $\mathbf{k}$ , est décrite correctement par le simulateur Monte-Carlo. Tel que mentionné précédemment, seule la description des collisions a à être modifiée pour étudier des modèles plus complexes, sauf, bien entendu, si l'on modifie l'évolution semi-classique, par exemple par l'ajout d'un champ magnétique externe.

## 2.3 Modèle de Drude en 3D avec pompage optique et recombinaison

En ajoutant au modèle de Drude la possibilité de générer des porteurs libres par pompage optique ainsi qu'un processus de recombinaison des porteurs, on apporte deux modifications importantes au programme Monte-Carlo. D'abord, le fait d'ajouter la recombinaison nécessite l'application du processus de sélection d'un type de collision, tel que présenté à la section 1.4.1. En deuxième lieu, le programme doit être adapté pour permettre de traiter un nombre variable de porteurs. Même en traitant ces nouveaux phénomènes, une solution analytique existe toujours [11], permettant ainsi une vérification simple et efficace du bon fonctionnement de ces ajouts au programme.

Dans cette série de simulations, on considère un temps de recombinaison unique et invariant  $\tau_{rec}$ . Puisque le temps de recombinaison et le temps de collision sont constants, la probabilité totale qu'un de ces événements se produise est elle aussi constante et il n'est donc pas nécessaire d'introduire immédiatement le self-scattering.

Le pompage permanent est traité en ajoutant un nombre  $N_{ajout}$  de porteurs à la fin de chaque intervalle de temps  $\Delta t$ . Le taux de génération  $g$  est donc donné par  $g = \frac{N_{ajout}}{\Delta t}$ . Les énergies des porteurs créés seront générées suivant la distribution thermique associée à la température du réseau  $T$ .

On utilise dans les sections 2.3.1 et 2.3.2 les paramètres suivants:

$m^*$	$0,067 m_0$
$T$	$20 \text{ K}$
$\Delta t$	$1 \cdot 10^{-8} s$
$\tau_{collisions}$	$1 \cdot 10^{-6} s$
$\tau_{rec}$	$1 \cdot 10^{-4} s$
$g$	$1 \cdot 10^8 s^{-1}$

Tableau 2.1: Paramètres utilisés pour les simulations du modèle de Drude avec pompage et recombinaison

### 2.3.1 Pompage permanent en un point

La première configuration à laquelle on s'intéresse est un pompage localisé en un point de l'espace. Les porteurs sont tous générés exactement à l'origine. On suppose qu'initialement ( $t = 0$ ), il n'y a aucun porteur libre de présent dans le système.

Lorsque le régime stationnaire ( $\frac{dn}{dt} = 0$ ) est atteint, l'équation de diffusion en une dimension s'écrit:

$$D \frac{d^2 n(x)}{dx^2} - \frac{n(x)}{\tau_{rec}} = 0. \quad (2.9)$$

Puisque le pompage est localisé au seul point  $x = 0$ , cette équation est valable en tout point  $x \neq 0$ . La solution générale de cette équation est de la forme  $n(x) = Ae^{-x/L} + Be^{x/L}$  où  $L = \sqrt{D\tau_{rec}}$ . En supposant que l'échantillon est de dimension infinie et en appliquant la condition de continuité à  $x = 0$ , on obtient, dans le régime stationnaire la solution [11]

$$n(x) = Ae^{-|x|/L}, \quad (2.10)$$

où  $A$  sera fixé par le nombre total de porteurs libres présents dans l'état stationnaire.

On peut donc vérifier ce résultat en comparant les distributions dans l'espace réel obtenues à différents moments.

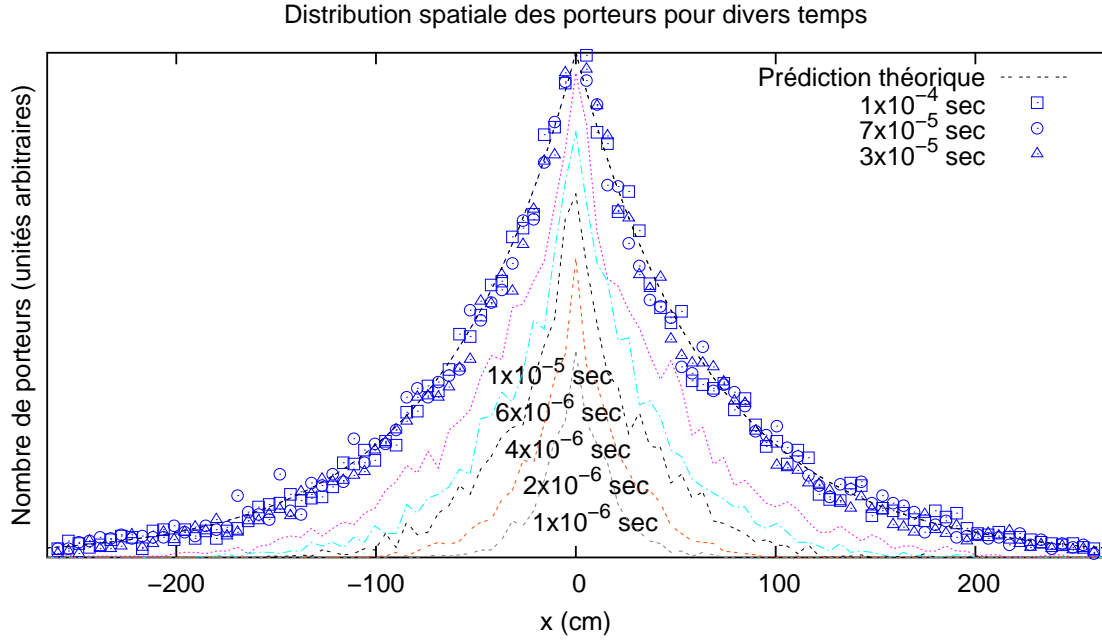


Figure 2.6: Distribution spatiale des porteurs avec pompage optique localisé à l'origine

On note bien qu'il s'établit, après environ  $3 \cdot 10^{-5}$  secondes, un régime stationnaire puisque la distribution cesse alors d'évoluer dans le temps. De plus, tel qu'on le constate sur la figure, cette distribution correspond bien à la solution prévue à l'équation 2.10.

Parallèlement, en ne s'intéressant qu'au nombre total de porteurs, on vérifie que l'évolution temporelle de cette quantité correspond au résultat que permet de prévoir la résolution de l'équation

$$\frac{dn(t)}{dt} = g - \frac{n(t)}{\tau_{rec}}$$

dont la solution est

$$n(t) = g\tau_{rec} \left(1 - e^{-\frac{t}{\tau_{rec}}}\right). \quad (2.11)$$

L'état stationnaire ( $t \rightarrow \infty$ ) devrait donc contenir  $g\tau_{rec}$  porteurs.

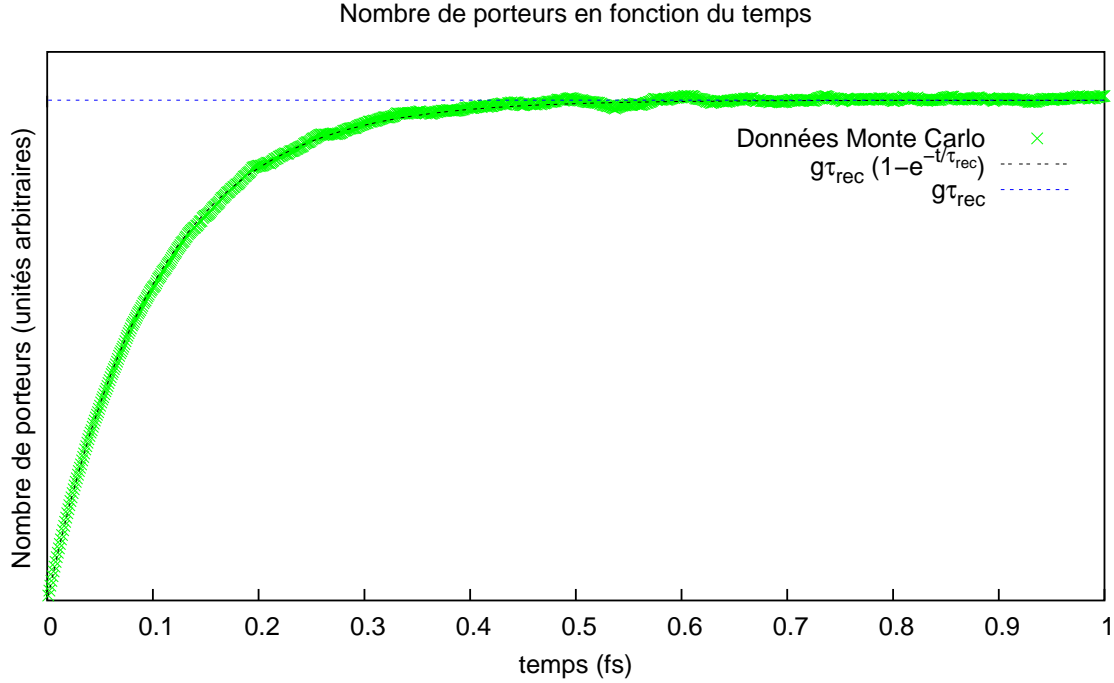


Figure 2.7: Nombre de porteurs simulés en fonction du temps écoulé

On constate bien la concordance entre le résultat Monte-Carlo et la prédiction théorique.

### 2.3.2 Pompage permanent uniforme sur une fenêtre rectangulaire

On peut aussi étudier l'effet d'un pompage optique uniforme sur une fenêtre rectangulaire de largeur  $2l$ . Les porteurs sont alors générés avec une position en  $x$  choisie aléatoirement et uniformément dans l'intervalle  $[-l, l]$ . L'évolution temporelle du nombre total de porteurs simulés n'est pas affectée par ce changement de forme de la zone de pompage, puisque cette forme n'intervient pas dans l'obtention de l'équation 2.11.

Cependant, en régime stationnaire, la distribution dans l'espace réel sera différente

de celle obtenue précédemment.

Dans les régions situées à l'extérieur de la fenêtre l'équation 2.9 est toujours valable. Par contre, dans la région où il y a pompage optique, le régime stationnaire est plutôt décrit par :

$$D \frac{d^2 n(x)}{dx^2} - \frac{n(x)}{\tau_{rec}} + g = 0. \quad (2.12)$$

La solution sans le terme constant  $g$  est toujours donnée par l'équation 2.10 et  $n(x) = g\tau_{rec}$  constitue une solution particulière de l'équation. La solution complète peut donc s'écrire:

$$n(x) = \begin{cases} Ae^{-|x|/L} & \text{si } x < -l \\ A'e^{-x/L} + B'e^{x/L} + g\tau_{rec} & \text{si } -l < x < l \\ Be^{-|x|/L} & \text{si } x > l \end{cases} \quad (2.13)$$

L'application des conditions de continuité de  $n$  et de sa dérivée, permet de déduire la valeur des diverses constantes. La dérivée doit être continue puisqu'elle est proportionnelle au courant de diffusion. Le fait d'avoir un courant différent à gauche et à droite de l'interface entraînerait une accumulation de charge à l'interface, qui ne pourrait être compensée que par une probabilité de recombinaison plus importante à cette endroit. Puisque le temps de recombinaison est le même dans tout l'échantillon, la dérivée de la densité est continue en tout point y compris aux interfaces. On a donc [11]

$$n(x) = \begin{cases} g\tau_{rec} \sinh(l/L)e^{-|x|/L} & \text{si } x < -l \\ g\tau_{rec} (1 - e^{-l/L} \cosh(x/l)) & \text{si } -l < x < l \\ g\tau_{rec} \sinh(l/L)e^{-|x|/L} & \text{si } x > l \end{cases} \quad (2.14)$$

Voici l'allure de la distribution spatiale à divers temps:

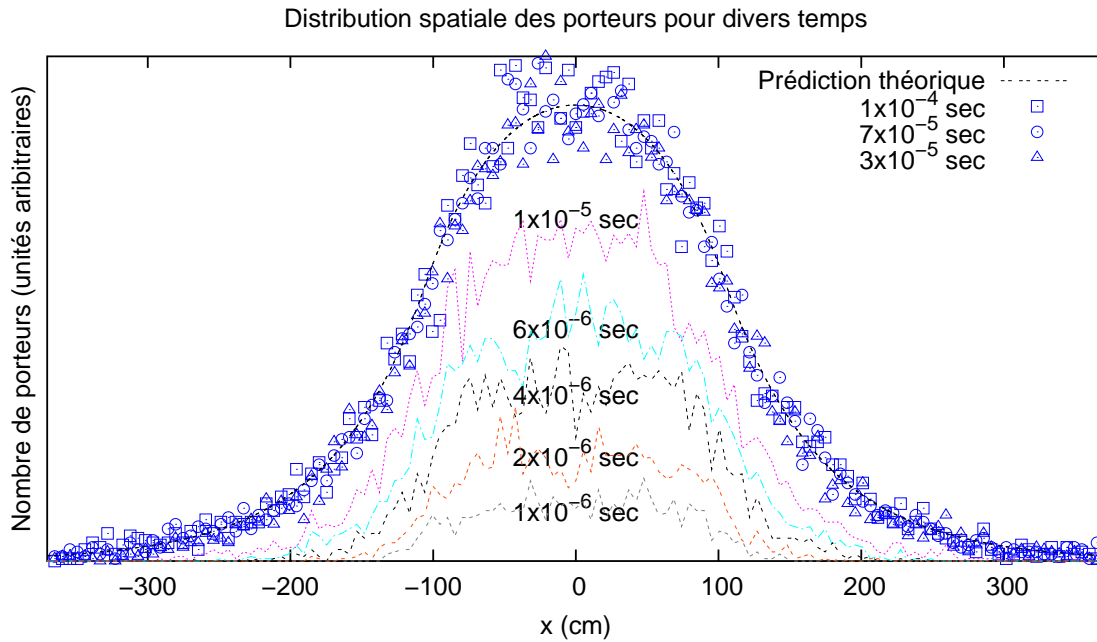


Figure 2.8: Distribution spatiale des porteurs avec pompage optique dans une fenêtre rectangulaire ( $l = 100\text{cm}$ )

Encore une fois, on note l'établissement d'un régime stationnaire qui correspond bien à la prédiction théorique donnée par l'équation 2.14.

## 2.4 Modèle simple pour le transport des trous dans le Ge

Il est possible de s'intéresser maintenant à des modèles plus complexes permettant une description plus sophistiquée des propriétés de transport. Tout en demeurant dans un échantillon 3D, on peut introduire des probabilités de collision obtenues en solutionnant la règle d'or de Fermi (éq. 1.10). Ainsi, on peut obtenir des temps de collisions qui sont dépendants de l'état  $\mathbf{k}$  des porteurs. Pour des fins de comparaisons avec des résultats publiés par Jacoboni [4], on considère le même modèle simple

qu'il a utilisé pour la description du transport de trous lourds dans le Ge. On ne considère que les processus de collision liés à l'absorption et l'émission des phonons d'une branche acoustique et d'une branche de phonons optiques non-polaires. Les taux de collision ayant alors une dépendance en  $\mathbf{k}$ , on doit introduire le self-scattering dans le simulateur (voir les sections 1.4.1 et 1.4.3).

## 2.4.1 Probabilités de collision

Présentons d'abord les probabilités de collision pour chacun des processus considérés telles que calculées avec la règle d'or de Fermi. On utilise toujours l'hamiltonien donné à l'équation 1.12 pour décrire l'interaction entre les porteurs et les phonons:

$$H_{e-ph} = \sum_{\mathbf{q}} [\alpha(\mathbf{q})e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} a_{\mathbf{q}}^{\dagger} + \alpha^*(\mathbf{q})e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} a_{\mathbf{q}}]. \quad (2.15)$$

On suppose aussi que la fonction d'onde associée à un vecteur d'onde donné est une onde plane:

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \quad (2.16)$$

et que la bande est parabolique et peut donc être décrite par une masse effective unique et constante

$$E(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}. \quad (2.17)$$

### Phonons optiques non-polaires

La branche de phonons optiques est considérée comme n'ayant pas de dispersion, c'est-à-dire que  $\omega(q) = \omega_{op}$ , comme on le faisait pour les phonons optiques polaires à la section 1.4.2. Cependant, dans le cas d'un semi-conducteur covalent, tel que le germanium, le couplage est sensiblement différent de celui donné à l'équation 1.13. En effet, le couplage est plutôt décrit par le facteur constant suivant [4]:

$$|\alpha(\mathbf{q})|^2 = \frac{\hbar D_{op}^2}{2\rho\Omega\omega_{op}}, \quad (2.18)$$

où  $D_{op}$  est une constante de couplage propre au matériau étudié,  $\rho$  est la densité massique de ce matériau et  $\Omega$  le volume de l'échantillon

La règle d'or de Fermi (éq. 1.10) nous donne alors le taux de transfert d'un état initial  $\mathbf{k}$  vers un état final  $\mathbf{k}_f$

$$P(\mathbf{k}, \mathbf{k}_f) = \frac{\pi D_{op}^2}{\rho\Omega\omega_{op}} \left\{ \begin{array}{c} N_{op} \\ N_{op} + 1 \end{array} \right\} \delta(E(\mathbf{k}_f) - E(\mathbf{k}) \mp \hbar\omega_{op}), \quad (2.19)$$

où la ligne supérieure décrit le processus d'absorption d'un phonon tandis que la ligne inférieure décrit l'émission.  $N_{op} = \left[ e^{\frac{\hbar\omega_{op}}{k_B T}} - 1 \right]^{-1}$  est la population de phonons optiques à la température  $T$  du réseau. On note d'abord l'absence de dépendance angulaire de ce résultat qui nous permet d'utiliser le résultat du cas isotrope, présenté à la section 2.2, pour choisir les angles de l'état final post-collision.

La probabilité totale qu'un porteur dans l'état  $\mathbf{k}$  réalise une collision impliquant un phonon optique est obtenue en intégrant le résultat 2.19 sur tous les états finaux  $\mathbf{k}_f$  possibles [4].

$$P(\mathbf{k}) = \frac{D_{op}^2 (m^*)^{3/2}}{2^{1/2} \pi \hbar^3 \rho \omega_{op}} \left\{ \begin{array}{c} N_{op} \\ N_{op} + 1 \end{array} \right\} (E(\mathbf{k}) \pm \hbar\omega_{op})^{1/2}. \quad (2.20)$$

## Phonons acoustiques

On décrit dans ces simulations, la bande de phonons acoustiques par une vitesse du son unique et constante  $\omega(\mathbf{q}) = c_s q$ . Seule la bande de phonons acoustiques longitudinaux est traitée car des règles de sélection empêchent le couplage avec les phonons transverses [12]. Le calcul des probabilités de collision impliquant ces phonons est réalisée de la même façon, en utilisant l'hamiltonien général de l'équation 1.12, mais avec un couplage porteur-phonons prenant la forme suivante, tel que mentionné à la section 1.4.2:

$$|\alpha(\mathbf{q})|^2 = \frac{D_{ac}^2}{2\rho c_s^2 \Omega} \hbar \omega(\mathbf{q}). \quad (2.21)$$

L'application de la règle d'or de Fermi (éq. 1.10) donne alors

$$P(\mathbf{k}, \mathbf{k}_f) = \frac{\pi q D_{ac}^2}{\rho \Omega c_s} \left\{ \begin{array}{c} N(q) \\ N(q) + 1 \end{array} \right\} \delta(E(\mathbf{k}_f) - E(\mathbf{k}) \mp \hbar c_s q), \quad (2.22)$$

où  $N(q) = \left[ e^{\frac{\hbar c_s q}{k_B T}} - 1 \right]^{-1}$  est la population de phonons acoustiques présents à la température du système qui, contrairement au cas des phonons optiques dépend du vecteur d'onde phononique  $\mathbf{q}$ . Lors d'une collision allant de  $\mathbf{k}$  vers  $\mathbf{k}_f$ , ce vecteur d'onde est fixé par la conservation de la quantité de mouvement:  $\mathbf{q} = \mathbf{k} \pm \mathbf{k}_f$ .

En appelant  $\theta$  l'angle entre  $\mathbf{k}$  et  $\mathbf{q}$ , on peut intégrer les coordonnées angulaires de l'équation 2.22. On trouve alors, que pour un  $\mathbf{k}$  initial donné, la probabilité d'échanger un phonon acoustique dont le vecteur d'onde a une norme  $q$  est:

$$P(\mathbf{k}, q) dq = \frac{m^* D_{ac}^2}{4\pi \rho c_s \hbar^2 k} \left\{ \begin{array}{c} N(q) \\ N(q) + 1 \end{array} \right\} q^2 dq. \quad (2.23)$$

L'intégration finale sur la norme de  $q$  nous donne [4]

$$P(\mathbf{k}) = \frac{(m^*)^{1/2} (k_B T)^3 D_{ac}^2}{2^{5/2} \pi \rho c_s^4 \hbar^4} E(\mathbf{k})^{-1/2} \left\{ \begin{array}{c} F(x_{2,a}) - F(x_{1,a}) \\ G(x_{2,e}) - G(x_{1,e}) \end{array} \right\}, \quad (2.24)$$

où, en introduisant la variable  $x = \frac{\hbar c_s q}{k_B T}$ , on a défini

$$F(x) = \int_0^x N(x') x'^2 dx' \quad (2.25)$$

et

$$G(x) = \int_0^x (N(x') + 1) x'^2 dx'. \quad (2.26)$$

Il est à noter que dans le programme, on utilise le développement en série proposée par Jacoboni [4] pour évaluer ces fonctions.

Dans l'équation 2.24 les valeurs de  $x_{2,a}$ ,  $x_{1,a}$ ,  $x_{2,e}$  et  $x_{1,e}$  sont les valeurs minimales et maximales (obtenues pour  $\cos(\theta) = \pm 1$ ) que peuvent prendre  $x$  ( $\propto q$ ) tout en permettant la conservation simultanée de l'énergie et de la quantité de mouvement totale. En introduisant la variable  $E_u = \frac{m^*c_s^2}{2}$ , on trouve les résultats qui suivent.

$x_{2,a} = \frac{4E_u^{1/2}}{k_bT}(E_u^{1/2} + E(\mathbf{k})^{1/2})$	$x_{1,a} = \frac{4E_u^{1/2}}{k_bT}(E_u^{1/2} - E(\mathbf{k})^{1/2})$	absorption $E(\mathbf{k}) < E_u$
émission impossible		émission $E(\mathbf{k}) < E_u$
$x_{2,a} = \frac{4E_u^{1/2}}{k_bT}(E_u^{1/2} + E(\mathbf{k})^{1/2})$	$x_{1,a} = 0$	absorption $E(\mathbf{k}) > E_u$
$x_{2,e} = \frac{4E_u^{1/2}}{k_bT}(E(\mathbf{k})^{1/2} - E_u^{1/2})$	$x_{1,e} = 0$	émission $E(\mathbf{k}) > E_u$

Tableau 2.2: Limites de  $q$  pour les collisions impliquant des phonons acoustiques

On remarque que ces valeurs peuvent permettre l'échange de phonons dont le vecteur d'onde serait à l'extérieur de la première zone de Brillouin, comme cela a été discuté à la section 1.4.2 dans le cas des phonons optiques. Cependant, alors que pour les phonons optiques, la probabilité diminue lorsque l'on augmente la norme du vecteur d'onde phononique, dans le cas présent, l'équation 2.23, nous montre que l'émission des phonons acoustiques est plus probable à grand vecteur d'onde. Par conséquent, les simulations réalisées à fort champ électrique ou à très haute température peuvent permettre l'émission de phonons acoustiques ayant une énergie plus élevée que le maximum d'énergie des phonons acoustiques. Pour éviter ce problème il faudrait traiter les phonons en tenant compte de leur relation de dispersion exacte. Bien évidemment, en faisant cela, on complexifie grandement le calcul des probabilités de collisions. Cependant, la méthode Monte-Carlo pouvant traiter n'importe quelle distribution de probabilité, il est donc possible d'avisager une simulation utilisant la relation de dispersion exacte pour les phonons acoustiques.

Le choix de l'état final est réalisé de la façon suivante. On sélectionne d'abord, par la méthode de rejet (voir la section 1.4.3) appliqué à la distribution donnée par l'équation 2.23, la valeur de la norme  $q$  du vecteur d'onde du phonon impliqué dans la collision. Ce choix nous permet de fixer, par conservation de l'énergie, la norme  $k_f$

du vecteur d'onde de l'état final, mais aussi de fixer, par conservation de la quantité de mouvement, l'angle entre les vecteurs  $\mathbf{k}$  et  $\mathbf{k}_f$ . Le deuxième angle, décrivant la rotation de  $\mathbf{k}_f$  par rapport à l'axe défini par la direction de  $\mathbf{k}$ , n'intervient pas dans les probabilités et doit donc être sélectionné suivant une distribution uniforme entre 0 et  $2\pi$ .

Les paramètres utilisés pour ces simulations (voir tableau 2.3) sont ceux associés à la bande de trous lourds du Ge. Nous avons fait ce choix pour pouvoir comparer nos résultats avec ceux de Jacoboni [4] et ainsi tester le bon fonctionnement du simulateur.

$m^*$	$0,346 m_0$
$c_s$	$5,4 \cdot 10^5 \text{ cm/s}$
$\rho$	$5,32 \text{ g/cm}^3$
$\hbar\omega_{op}$	$0,037 \text{ eV}$
$D_{op}$	$8,72 \cdot 10^8 \text{ eV/cm}$
$D_{ac}$	$4,6 \text{ eV}$

Tableau 2.3: Paramètres utilisés pour la simulation du transport des trous lourds dans le Ge

À une température de 300 K, on trouve alors les taux de collision tracés à la figure 2.9 pour les quatre processus d'échange de phonon traités dans ce modèle simple.

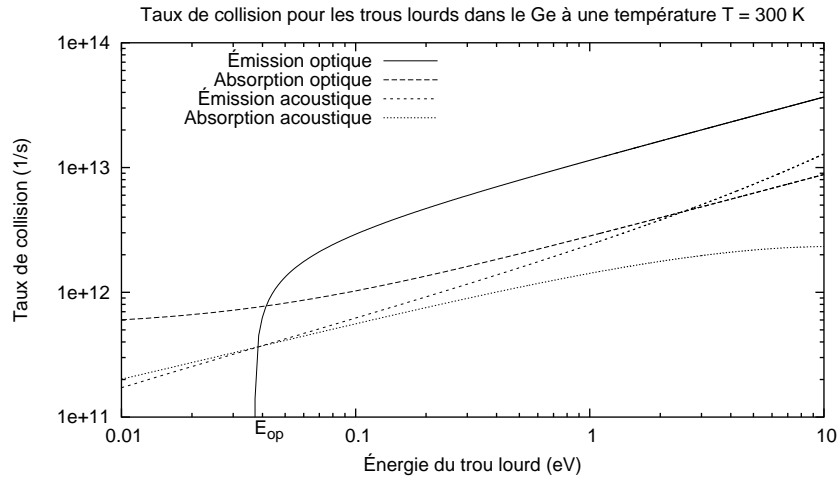
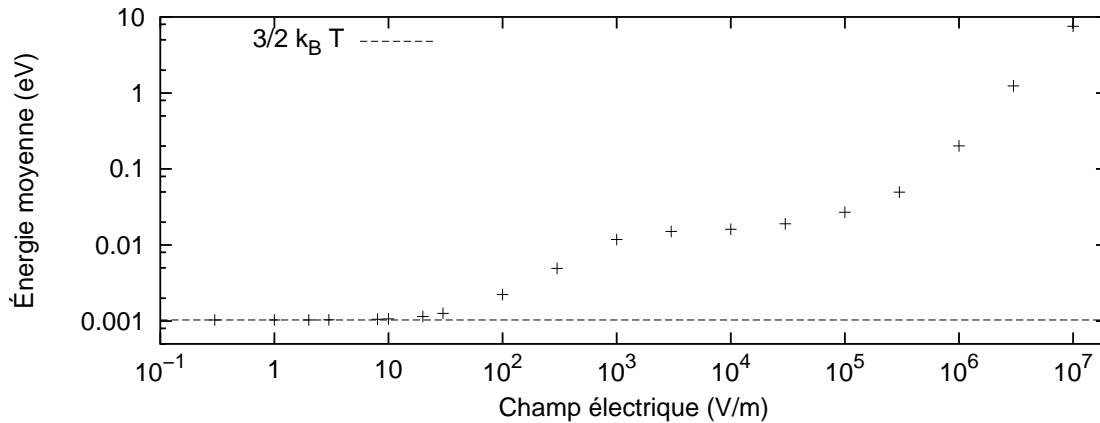


Figure 2.9: Taux de collision des trous lourds dans le Ge à une température de 300 K

On remarque qu'à une énergie  $E_{op} < \hbar\omega_{op}$ , soit l'énergie du phonon optique, la probabilité d'émission d'un phonon optique tombe brutalement à zéro. En effet, lorsque le trou a une énergie  $E < E_{op}$  il lui est strictement impossible d'émettre un de ces phonons puisque l'énergie ne pourrait pas être conservée au cours de ce processus. On note qu'à haute énergie l'émission des phonons acoustiques et optiques est favorisée, alors que l'absorption l'est à basse énergie. On comprend donc, qualitativement parlant, que ce profil de probabilités permet au système de faire évoluer une distribution de porteurs afin qu'elle atteigne l'équilibre thermique avec le réseau. En effet, une distribution à trop haute énergie aura tendance à perdre de cette énergie par l'émission de phonons, alors que l'inverse est vrai pour une distribution de trop basse énergie.

### 2.4.2 Étude en champ électrique

On étudie trois quantités différentes en fonction du champ électrique externe appliqué soit l'énergie moyenne, la vitesse de dérive ainsi que le coefficient de diffusion (calculé par l'équation 2.7). Toutes ces quantités sont évaluées dans l'état stationnaire pour des simulations réalisées à une température de 8 K. On trace aussi la fraction des collisions réalisées qui impliquaient un phonon acoustique.



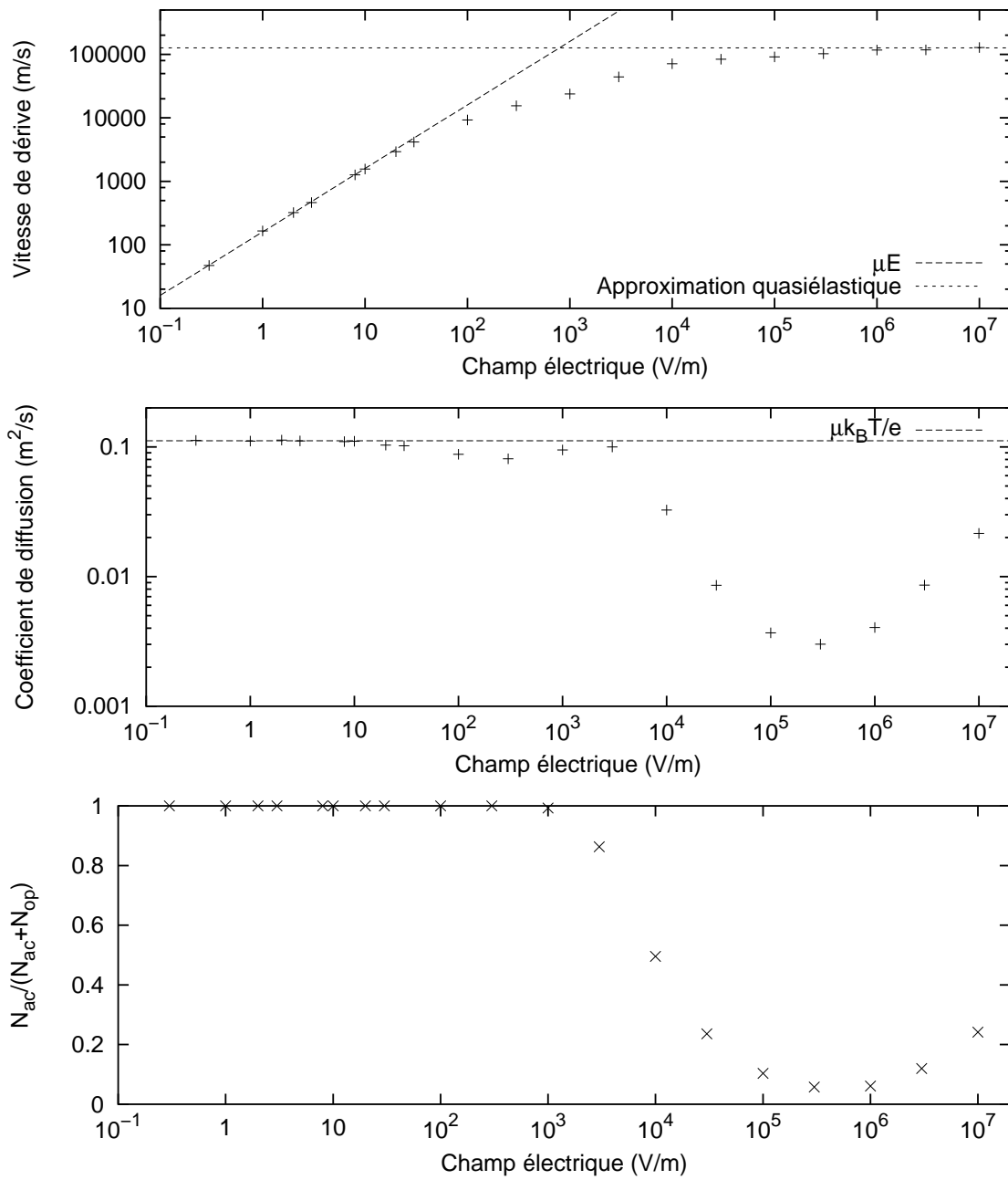


Figure 2.10: Résultats Monte-Carlo pour les trous dans le Ge

En étudiant les vitesses obtenues à champ électrique faible, on constate que le comportement du système n'est linéaire que pour des valeurs de champ inférieures à 20 V/m.

Dans cette gamme de champ électrique, les trois quantités étudiées sont caractérisables par les équations suivantes

$$v_d = \mu E \quad (2.27)$$

$$\langle E \rangle = \frac{3}{2} k_B T \quad (2.28)$$

$$D = \frac{\mu k_B T}{e}. \quad (2.29)$$

Ces valeurs sont reportées dans les figures 2.10, où l'on constate qu'elles décrivent bien les résultats obtenus. La valeur de la mobilité  $\mu \approx 160 \frac{C \cdot s}{Kg}$  est déduite des résultats obtenus pour la vitesse de dérive et on remarque qu'elle reproduit correctement la valeur du coefficient de diffusion.

Lorsque le champ électrique appliqué est situé dans l'intervalle compris entre 20 V/m et 1000 V/m, on note, que les processus impliquant des phonons acoustiques sont toujours les seuls à être actifs. En effet, l'émission d'un phonon optique ne peut avoir lieu que si le champ électrique externe permet aux porteurs d'acquérir une énergie supérieure à  $E_{op}$ . De plus, à une température de 8 K l'absorption d'un phonon optique est, à toute fin pratique, impossible compte tenu que la population de phonons optiques  $N_{op}$  est négligeable. Le fait que les processus acoustiques sont peu efficaces pour disperser l'énergie explique que l'énergie moyenne augmente en fonction du champ électrique dans cet intervalle. De plus, compte tenu que la probabilité d'émission d'un phonon acoustique augmente en fonction de l'énergie du porteur, on constate que la vitesse moyenne augmente moins rapidement que si la tendance linéaire observée à  $E < 20V/m$  se maintenait.

À partir d'un champ électrique d'environ 1000 V/m, les processus impliquant des phonons optiques commencent à être présents. L'émission de phonons optiques étant très efficace pour dissiper l'énergie des porteurs, on s'explique bien que, sur une plage importante de champ électrique [1000 V/m ,  $1 \cdot 10^5$  V/m], l'énergie moyenne des porteurs demeure presque constante. Sur cette plage, le gain d'énergie que les

porteurs subissent en raison du champ électrique est suffisamment lent pour que cette énergie puisse être presque entièrement dissipée par l'émission de phonons optiques. De plus, on observe aussi dans cet intervalle, une diminution importante du coefficient de diffusion. Cette diminution aussi est due à l'efficacité du processus d'émission optique qui impose pratiquement une limite supérieure à la vitesse que peut atteindre un porteur dans la direction du champ. On crée ainsi, en régime stationnaire, une accumulation de porteurs ayant tous une vitesse similaire diminuant ainsi l'expansion diffusive de la distribution des porteurs dans l'espace réel. L'effet est analogue à celui produit par les phonons acoustiques entre 20 et 300 V/m où une légère diminution de  $D$  pouvait être observée.

Lorsque le champ électrique est supérieur à  $1 \cdot 10^5$  V/m, le processus d'émission optique n'est plus assez efficace pour dissiper l'énergie acquise en raison du champ électrique. L'énergie moyenne recommence alors à augmenter significativement en fonction du champ électrique. Le coefficient de diffusion augmente également, de la même façon qu'il le faisait entre 300 V/m et 3000 V/m quand les phonons acoustiques n'étaient plus suffisamment efficaces. La vitesse de dérive tend, quant à elle, à saturer à une valeur calculable analytiquement par la résolution de l'équation de Boltzmann dans l'approximation quasi-élastique ( $\hbar\omega_{op}$  et  $\hbar\omega_{ac} \ll \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}$ ):

$$v_{d,ge} = \left[ \frac{8E_{op}}{3\pi m^*} \right]^{1/2}. \quad (2.30)$$

Tous les résultats obtenus reproduisent bien, même au niveau quantitatif, ceux présentés par Jacoboni pour le même modèle [4]. La seule différence notable entre les deux résultats est observée à faible champ électrique lorsque seuls les phonons acoustiques sont actifs. En effet, la légère diminution du coefficient de diffusion que l'on trouve dans cette gamme de champ électrique n'est pas obtenue par Jacoboni. L'absence de cette diminution laisse croire qu'il a utilisé l'approximation élastique pour décrire les processus impliquant des phonons acoustiques, comme cela se fait couramment. Dans ce cas, les mécanismes en cause ne permettant aucune dissipation d'énergie, la diminution du coefficient de diffusion n'est pas possible. De rapides vérifications ont d'ailleurs été faites en ce sens et montrent qu'en utilisant l'approximation

élastique telle que décrite par Jacoboni [4], cette diminution du coefficient de diffusion n'a pas lieu.

Nous avons aussi vérifié que dans les simulations réalisées à très fort champ, le problème des interactions avec des phonons acoustiques ayant une énergie plus élevée que le maximum permis était très important, car ces processus étaient très fréquents. Nous avons donc réalisé une simulation en limitant les vecteurs d'onde des phonons à la première zone de Brillouin., mais tout en conservant une relation de dispersion purement linéaire. Bien que ce modèle ne tienne pas compte de l'effet du réseau qui impose un comportement sub-linéaire de la relation de dispersion à vecteur d'onde élevé, il permet tout de même de limiter l'énergie des phonons. Cependant, les résultats de cette simulation montre d'importantes différences quantitatives lorsque comparés avec ceux de Jacoboni [4], nous permettant de conclure que ses simulations ne tenaient pas compte de l'existence d'une limite en énergie pour les phonons acoustiques. En effet, l'énergie moyenne devient alors significativement supérieure aux valeurs présentées ici, puisque l'émission de phonons acoustiques à  $q$  très élevé est efficace pour dissiper l'énergie lorsque l'on utilise une relation de dispersion linéaire. Le fait de ne plus permettre ces processus entraîne donc une augmentation de l'énergie moyenne. Il faut cependant noter que le but premier de ces simulations étant la vérification de notre simulateur, nous avons préféré utiliser, malgré ses faiblesses, le modèle proposé par Jacoboni pour permettre la comparaison entre nos résultats et les siens.

# Chapitre 3

## Les boîtes quantiques auto-assemblées

### 3.1 Présentation du chapitre

Ayant discuté, dans les deux premiers chapitres, de la méthode Monte-Carlo, il est maintenant temps de décrire le système auquel on cherche à appliquer cette méthode. Ce troisième chapitre est donc une brève introduction au système de boîtes quantiques auto-assemblées. On y discute tant de leur fabrication et de leur structure que des méthodes expérimentales pour les caractériser. De plus, on discute de la modélisation numérique par la résolution des équations d'évolution.

### 3.2 Fabrication et structure

Bien qu'il existe de nombreuses façon de fabriquer les boîtes quantiques, on s'intéresse particulièrement, dans ce travail, aux systèmes de boîtes auto-assemblées. Ces dernières sont, plus souvent qu'autrement, crues par épitaxie par jets moléculaires. En faisant croître sur un substrat (GaAs par exemple) possédant un paramètre de maille donné  $a$ , des couches d'un deuxième matériau (InAs par exemple) de paramètre de maille  $a' > a$ , il apparaît d'importantes contraintes à l'interface entre les deux matériaux. Après la croissance planaire de quelques monocouches, en réaction à ces contraintes,

le système ne croît plus par ajout de couches bidimensionnelles, mais tend plutôt à créer des îlots. Il est aussi possible de faire croître un empilement de ces couches d'îlots en les séparant par des barrières d'un autre matériau.

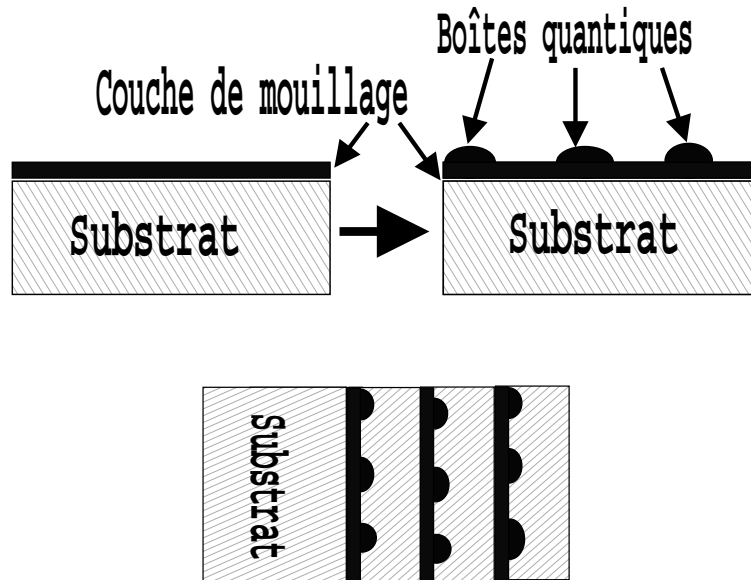


Figure 3.1: Croissance des boîtes quantiques auto-assemblées

En utilisant un substrat ayant un gap supérieur à celui du matériau formant les îlots, et en recouvrant les couches de boîtes avec des barrières faites d'un autre matériau ayant aussi un plus grand gap (le substrat lui-même par exemple), les îlots, s'il sont suffisamment petits, montrent alors le comportement 0D propre aux boîtes quantiques. En effet, l'abaissement du potentiel dans les boîtes, entraîne un confinement quantique dans toutes les directions. On ne trouve alors que des niveaux électroniques discrets à l'intérieur de ces boîtes créant ainsi une densité d'états discrète similaire à celle décrivant les orbitales électroniques dans un atome. Les boîtes quantiques ainsi formées n'ont cependant pas toutes exactement la même taille, la même forme ou la même composition. On obtient typiquement des boîtes ayant entre 10 et 25 nm de diamètre et 4 à 10 nm de hauteur.

Les quelques monocouches qui ont été crues de façon bidimensionnelles forment un mince puits quantique que l'on nomme couche de mouillage. Dans cette région de

la structure, seule la direction de l'axe de croissance montre un confinement quantique et on a alors un système 2D. Ce système présente une dispersion en énergie en raison des deux composantes de  $\mathbf{k}$  décrivant l'état des porteurs dans les directions perpendiculaires à l'axe de croissance.

De plus, le substrat et les barrières formées par le matériau que l'on a fait croître au-dessus des boîtes quantiques forment un troisième sous-système dans lequel le confinement quantique est absent. On y trouve un continuum d'états 3D décrit par trois composantes du vecteur d'onde  $\mathbf{k}$ .

Les échantillons de boîtes quantiques auto-assemblées contiennent donc à la fois des états 3D, 2D et 0D.

Évidemment, les paramètres de fabrication ont un impact important sur les échantillons ainsi fabriqués. La taille et la forme des boîtes, leur homogénéité et leur densité sont influencés principalement par la température du substrat lors de la croissance et par la quantité de matériau que l'on y dépose [13].

Une fois la croissance terminée, il est encore possible de modifier les propriétés des boîtes quantiques par recuit thermique. La haute température atteinte par l'échantillon durant ce processus permet aux atomes des interfaces de migrer dans la structure. Grâce à ce phénomène d'interdiffusion, il est possible de modifier sensiblement le potentiel de confinement des boîtes et donc la structure des niveaux électroniques 0D [14].

Un des grands avantages de réaliser un empilement de couches de boîtes quantiques est d'accroître l'intensité lumineuse émise par le système lors des expériences de photoluminescence (voir sec. 3.3), ce qui facilite la caractérisation optique de ce système.

### 3.3 Caractérisation par photoluminescence

Une des méthodes de caractérisation couramment utilisée pour l'étude des structures à boîtes quantiques est la spectroscopie de photoluminescence. On réalise cette expérience en excitant les porteurs à l'aide d'un faisceau laser. Ces porteurs photoexcités

se déplacent entre les divers états de la structure et, en se recombinant de façon radiative, il émettent alors des photons. Il est possible d'extraire de l'information sur l'échantillon en étudiant l'intensité lumineuse émise. On peut, à l'aide d'un monochromateur, ne détecter que les photons émis à une longueur d'onde précise et donc obtenir un spectre de l'intensité lumineuse émise à une énergie donnée lors des processus de recombinaison. L'énergie des photons émis varie selon l'état occupé par les porteurs avant la recombinaison.

En excitant avec un faisceau laser de façon continue, on ne peut étudier qu'un régime stationnaire de l'échantillon. Cependant, il est possible de s'intéresser au régime transitoire, en réalisant une expérience de photoluminescence résolue dans le temps. Le principe de base est le même que pour la photoluminescence continue, en ce sens que l'on excite encore les porteurs à l'aide d'un laser et que l'on détecte toujours les photons émis lors des processus de recombinaison. Cependant, l'excitation est maintenant réalisée à l'aide d'un laser à impulsions ultra-courtes à un fort taux de répétition. La détection peut maintenant être résolue dans le temps, en séparant l'impulsion laser en deux. La première moitié est utilisée pour l'excitation proprement dite du système et est donc envoyée vers l'échantillon. La deuxième moitié, le signal de référence, est envoyée dans une ligne à délai. Le signal de photoluminescence émis par l'échantillon est par la suite recombinaison au signal de référence dans un cristal non-linéaire. Ce cristal permettant la génération d'harmoniques, on peut observer dans le visible, un signal de photoluminescence originalement dans l'infrarouge et ce uniquement au moment où l'impulsion de référence arrive sur le cristal. En contrôlant, à l'aide de la ligne à délai, le moment où le signal de référence est combiné au signal de photoluminescence, il est possible d'obtenir un spectre de photoluminescence évalué à un temps précis après l'excitation du système. En étudiant ces spectres à plusieurs temps, on peut donc en déduire l'évolution temporelle des populations des différents niveaux de la structure, puisque l'intensité de la photoluminescence d'un niveau est proportionnelle à sa population.

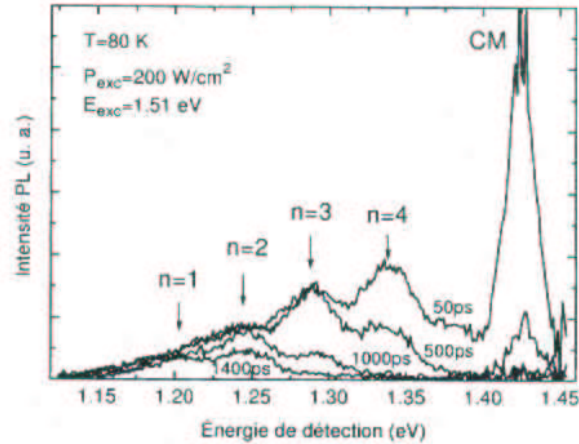


Figure 3.2: Mesures de photoluminescence résolue en temps [15]

On peut voir sur la figure 3.2 un exemple des résultats que l'on obtient par spectroscopie de photoluminescence résolue en temps [15]. On y présente les spectres obtenus à quatre valeurs différentes de temps. Chacun des pics que l'on y observe peut être associé à la recombinaison ayant lieu dans un type d'états donné de la structure. Sur cette figure on présente les pics associés à la recombinaison des porteurs dans le continuum 2D de la couche de mouillage et dans les 4 états 0D qui contiennent les boîtes quantiques. L'intensité de chacun de ces pics est proportionnelle au nombre de processus de recombinaison se produisant au moment considéré dans chacun des niveaux du système et donc à leur population respective à ce moment. Il est à noter que, bien qu'il ne soit pas présenté sur cette figure particulière, on observe aussi un pic associé à la recombinaison radiative dans les niveaux 3D des barrières en plus de ceux présentés ici pour la couche de mouillage (2D) et les 4 niveaux des boîtes quantiques. On note que, dans cet échantillon, la différence en énergie entre les photons correspondant à deux états 0D successifs est de l'ordre de 0.05 eV. Bien qu'il ne s'agisse pas là d'une mesure directe de la différence d'énergie entre deux états électroniques des boîtes quantiques, cette valeur permet quand même de fixer approximativement l'ordre de grandeur de cette différence d'énergie.

Les pics des niveaux 0D ont un étalement relativement important en énergie, auquel contribuent deux effets distincts. L'élargissement homogène des raies, qui pourrait

être observé même sur le spectre d'une boîte quantique unique, est dû au temps de vie fini des états des porteurs dans ces boîtes [16]. Par contre, à cet effet vient s'ajouter celui de l'inhomogénéité des boîtes dans un échantillon. Lorsque l'on sonde un ensemble de boîtes, la diversité des potentiels de confinement de ces boîtes quantiques entraîne une variation de l'énergie d'un niveau  $n$  d'une boîte à l'autre. Cette variation entraîne, bien évidemment, une variation de l'énergie des photons émis lors de la recombinaison radiative et donc un élargissement supplémentaire des pics de photoluminescence [14]. Les dimensions des boîtes varient typiquement d'environ  $\pm 10\%$  dans un échantillon donné [17].

Malgré le fait que l'élargissement des pics peut en compliquer l'extraction, il est possible de tirer de ces résultats l'évolution temporelle des populations des différents niveaux, puisqu'elle est proportionnelle au nombre de recombinaisons y ayant lieu. Ce nombre de recombinaison est lui-même proportionnel à l'intensité lumineuse émise à la longueur d'onde associée à un niveau donné. On obtient alors, en traçant l'intensité lumineuse des pics en fonction du temps, un graphique semblable à celui de la figure 3.3 [15].

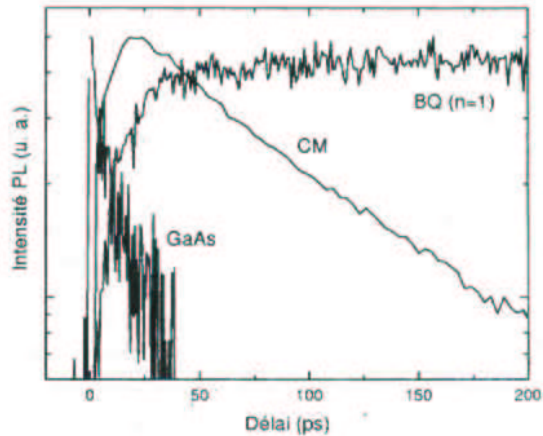


Figure 3.3: Évolution temporelle des populations [15]

### 3.4 Équations d'évolution

Ce sont les résultats décrivant l'évolution des populations, semblables à ceux présentés à la figure 3.3, que la plupart des modélisations numériques cherchent à reproduire. La méthode probablement la plus répandue est la résolution d'équations d'évolution pour les populations de différents niveaux [18, 19, 20].  $N$  équations différentielles couplées reliant les populations des  $N$  niveaux quantiques sont construites et résolues afin d'obtenir l'évolution temporelle de ces populations.

Prenons pour exemple une boîte quantique contenant 4 niveaux confinés auxquels on associe une population  $n_i(t)$ , où  $i$  allant de 1 à 4, est l'indice associé au niveau considéré. On définit aussi un niveau 5, associé à la couche de mouillage, dont la population est  $n_5(t)$ . Ce niveau décrit l'ensemble du continuum 2D de la couche de mouillage et ce modèle ne permet donc pas de tenir compte de l'effet de la dispersion en énergie dans les états de la couche de mouillage. On doit définir l'ensemble des processus de collision permettant le transfert entre chacun de ces états et leur associer un temps caractéristique. Dans un modèle très simple où on ne trouve qu'un temps de recombinaison  $\tau_i^r$ , un temps de relaxation multiphononique  $\tau_{i,i-1}$  permettant à un porteur dans un des états 0D de relaxer vers le niveau d'énergie qui lui est immédiatement inférieur en énergie et un temps de capture  $\tau^c$  permettant aux porteurs d'être transféré de la couche de mouillage vers le dernier niveau d'énergie des boîtes ( $i = 4$ ), le système d'équations à résoudre s'écrit [15]

$$\begin{aligned}
 \frac{dn_5(t)}{dt} &= -\frac{n_5(t)}{\tau_5^r} - \frac{n_5(t)}{\tau^c} \left(1 - \frac{n_4(t)}{g_4}\right) \\
 \frac{dn_4(t)}{dt} &= -\frac{n_4(t)}{\tau_4^r} - \frac{n_4(t)}{\tau_{4,3}} \left(1 - \frac{n_3(t)}{g_3}\right) + \frac{n_5(t)}{\tau^c} \left(1 - \frac{n_4(t)}{g_4}\right) \\
 \frac{dn_3(t)}{dt} &= -\frac{n_3(t)}{\tau_3^r} - \frac{n_3(t)}{\tau_{3,2}} \left(1 - \frac{n_2(t)}{g_2}\right) + \frac{n_4(t)}{\tau_{4,3}} \left(1 - \frac{n_3(t)}{g_3}\right) \\
 \frac{dn_2(t)}{dt} &= -\frac{n_2(t)}{\tau_2^r} - \frac{n_2(t)}{\tau_{2,1}} \left(1 - \frac{n_1(t)}{g_1}\right) + \frac{n_3(t)}{\tau_{3,2}} \left(1 - \frac{n_2(t)}{g_2}\right) \\
 \frac{dn_1(t)}{dt} &= -\frac{n_1(t)}{\tau_1^r} + \frac{n_2(t)}{\tau_{2,1}} \left(1 - \frac{n_1(t)}{g_1}\right), \tag{3.1}
 \end{aligned}$$

où  $g_i$  est la dégénérescence de chacun des niveaux. Le terme  $\left(1 - \frac{n_i(t)}{g_i}\right)$  permet l'application du principe d'exclusion de Pauli dans les 4 niveaux 0D en diminuant la probabilité de transfert lorsque l'état final est déjà occupé par des porteurs. On remarque, par exemple pour le transfert entre la couche de mouillage (niveau 5) et le niveau  $f$  des boîtes ( $i = 4$ ), que le terme  $-\frac{n_5(t)}{\tau^c} \left(1 - \frac{n_4(t)}{g_4}\right)$  décrivant les porteurs quittant le niveau 5 est ajouté au niveau 4 pour décrire les porteurs y étant transférés.

Quant à eux, les processus de recombinaison ne couplent pas les équations de deux niveaux distincts puisque l'effet d'une recombinaison est simplement de retirer du système un porteur libre sans qu'il ne soit transféré vers un deuxième état.

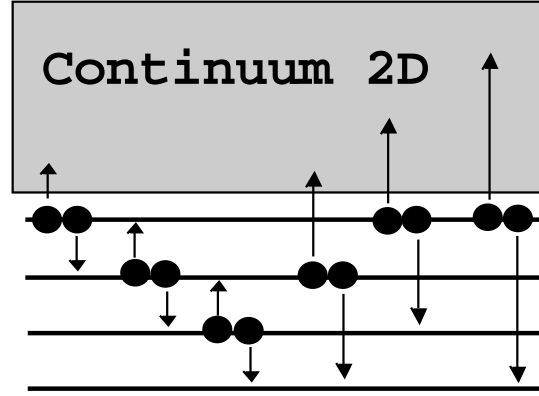
Le modèle que l'on vient de décrire est bien entendu un modèle minimal, mais il permet de comprendre comment est construit le système d'équations qui est résolu dans ce type de calcul. Dans ce cas, la relaxation est faite en cascade, c'est-à-dire qu'un porteur excité ne peut atteindre le niveau fondamental des boîtes ( $n = 1$ ) qu'après avoir occupé successivement tous les niveaux d'énergie qui le séparent du fondamental.

Il est évidemment possible d'ajouter à ces équations des mécanismes impliquant des phonons qui permettent le transfert entre deux niveaux d'énergie quelconques en ajoutant un temps de transfert  $\tau_{i,j}$  pour tout couple de niveaux  $(i, j)$ . On a alors une relaxation qui n'est plus exclusivement en cascade. Les termes à ajouter aux équations sont les mêmes que ceux présents dans le système d'équations 3.1. Le transfert du niveau  $i$  vers  $j$  est considéré en ajoutant le terme  $\frac{n_j(t)}{\tau_{i,j}} \left(1 - \frac{n_j(t)}{g_j}\right)$  à l'équation décrivant  $\frac{dn_j(t)}{dt}$  et en soustrayant ce même terme de l'équation décrivant la variation  $\frac{dn_i(t)}{dt}$  de la population de l'état initial.

### 3.4.1 Processus Auger

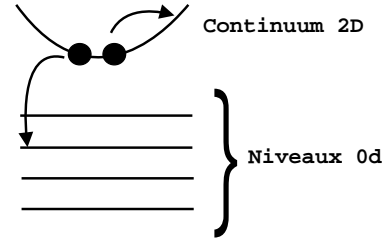
Il est aussi possible de considérer les processus de collision porteur-porteur aussi appelés processus Auger. Dans ce cas, les collisions entraînent la modification de l'état de deux porteurs, l'un des deux perdant de l'énergie au profit du second.

Si l'on suppose que tous les niveaux d'énergie 0D des boîtes quantiques sont séparés par une même énergie, les processus de relaxation Auger possibles sont nombreux. En ne considérant que ceux impliquant deux porteurs situés initialement dans le même niveau d'une boîte quantique, on se réduit à 6 processus possibles, pour une boîte contenant 4 niveaux. En effet, deux porteurs situés



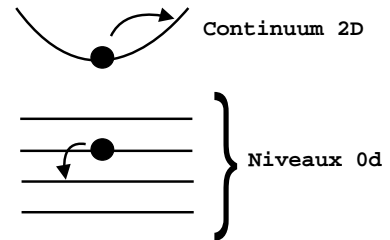
dans le niveau  $n = 4$  peuvent réaliser une collision qui mène un des porteurs dans un état de la couche de mouillage alors que le second est transféré vers un des niveaux  $n = 1, 2, 3$ . Si les deux porteurs sont plutôt dans l'état  $n = 3$ , on peut en transférer un vers la couche de mouillage et le second vers le niveau  $n = 1$  ou encore en transférer un vers l'état  $n = 4$  et l'autre vers  $n = 2$ . Puisque l'on suppose les niveaux équidistants en énergie, ces processus conservent l'énergie totale du système. Finalement, deux porteurs confinés au niveau  $n = 2$  peuvent collisionner et se retrouver dans les états  $n = 3$  et  $n = 1$ . On peut associer à chacun de ces 6 processus un temps caractéristique  $\tau_{ii,jk}^A$ . Le traitement d'un de ces processus nécessite l'ajout de trois termes dans le système d'équations [15]. D'abord, l'état initial dans lequel se trouvait les porteurs sera appauvri de deux porteurs après la collision. On ajoute donc à l'équation décrivant  $\frac{dn_i(t)}{dt}$ , le terme  $-2\frac{n_i(t)n_i(t)}{\tau_{ii,jk}^A} \left(1 - \frac{n_j(t)}{g_j}\right) \left(1 - \frac{n_k(t)}{g_k}\right)$ . Ce terme est proportionnel au carré de la population du niveau  $n = i$ , puisque que les processus Auger nécessitent deux porteurs de ce niveau. De plus, il faut appliquer le principe de Pauli dans les deux niveaux qui seront occupés après la collision. Évidemment, on doit aussi ajouter aux équations décrivant la variation de population dans les deux états finaux,  $\frac{dn_j(t)}{dt}$  et  $\frac{dn_k(t)}{dt}$ , le terme  $+\frac{n_i(t)n_i(t)}{\tau_{ii,jk}^A} \left(1 - \frac{n_j(t)}{g_j}\right) \left(1 - \frac{n_k(t)}{g_k}\right)$ . Puisque l'on n'applique pas, dans ce modèle, le principe d'exclusion dans le continuum d'états 2D de la couche de mouillage, lorsqu'un des porteurs s'y retrouve après la collision on utilise une dégénérescence  $g_5 = \infty$ .

D'autres processus Auger sont aussi envisageables, comme la capture Auger par exemple. Ce processus est semblable à ceux décrits précédemment en ce sens que les deux porteurs sont initialement contenus tous deux dans le même état du modèle, soit l'état 5 qui décrit la couche de mouillage. Ce processus permet à



un des deux porteurs d'être capturé par un des 4 niveaux 0D des boîtes tandis que le second est excité à une énergie plus élevée tout en demeurant dans le continuum 2D. Ce processus peut conserver l'énergie, car bien que le modèle ne permette pas de traduire cette réalité, il existe une dispersion en énergie dans la couche de mouillage. On associe à ce type de collision un temps caractéristique  $\tau_{55,5j}^A$ . Ce processus est donc traduit par l'ajout à l'équation décrivant  $\frac{dn_5(t)}{dt}$ , du terme  $-\frac{n_5(t)n_5(t)}{\tau_{55,5j}^A} \left(1 - \frac{n_j(t)}{g_j}\right)$ . On ne retrouve pas cette fois de facteur 2 puisque l'un des deux porteurs demeure dans le niveau 5. Évidemment, on doit aussi ajouter  $+\frac{n_5(t)n_5(t)}{\tau_{55,5j}^A} \left(1 - \frac{n_j(t)}{g_j}\right)$  dans les équations décrivant les niveaux 0D [15].

Compte tenu du grand nombre de porteurs pouvant se trouver dans la couche de mouillage, on doit aussi considérer les processus de relaxation Auger impliquant un porteur des niveaux 0D et un de la couche de mouillage. On utilise dans ce cas, un temps caractéristique  $\tau_{5i,5j}^A$ . Ce type de collision ne modifie pas la population de la couche de mouillage, puisque le porteur qui s'y trouve est simplement excité à une énergie supérieure du continuum d'états de la couche de mouillage. Par contre, on doit ajouter à l'équation décrivant  $\frac{dn_j(t)}{dt}$  et retrancher de celle décrivant  $\frac{dn_i(t)}{dt}$  le terme  $\frac{n_5(t)n_i(t)}{\tau_{5i,5j}^A} \left(1 - \frac{n_j(t)}{g_j}\right)$  [15].



### 3.4.2 Diffusion dans les états 3D

Si l'on veut aussi considérer les niveaux 3D des barrières, pour chercher à reproduire la montée de la population dans la couche de mouillage, il est nécessaire d'ajouter une autre équation différentielle régissant la population dans ces états. On peut considérer

pour ce nouveau niveau ( $i = 6$ ) les mêmes processus que dans les autres niveaux. Par exemple, en plus de la recombinaison, on peut ajouter une probabilité d'être capturé dans les états de la couche de mouillage ou dans les états 0D des boîtes.

Cherchant à reproduire l'effet de la diffusion dans les barrières, N. Perret a proposé d'ajouter un septième niveau ( $i = 7$ ) pour représenter les niveaux 3D localisés loin des couches de boîtes quantiques, tandis que le niveau 6 représente les niveaux des barrières situés près des boîtes quantiques [15]. La capture vers les niveaux 0D et 2D n'est possible qu'à partir du niveau 6. Les porteurs situés dans les niveaux de surface ( $i = 7$ ) ne peuvent être transférés que par une diffusion vers les niveaux décrits par l'état 6 (voir fig. 3.4).

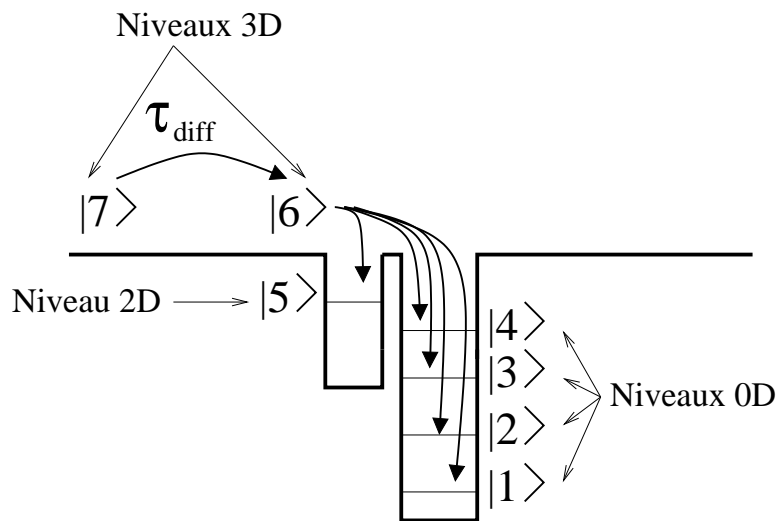


Figure 3.4: Traitement de la diffusion dans les états de barrières

Pour simplifier les calculs on utilise un temps constant de diffusion  $\tau^{diff}$ . L'équation régissant  $\frac{dn_7(t)}{dt}$  contiendra alors le terme  $-\frac{n_7(t)}{\tau^{diff}}$  alors que cette quantité enlevée au niveau 7 sera ajoutée au niveau 6. Cependant, cette description de la diffusion n'est pas conforme au traitement correct d'un problème de diffusion et pourrait être responsable de certaines limitations du modèle.

### 3.5 Modélisation des données expérimentales par les équations d'évolution

N. Perret a cherché à reproduire des données expérimentales à l'aide de la méthode des équations d'évolution, en utilisant à la fois des paramètres fixés par les résultats obtenus expérimentalement et d'autres optimisés par une recherche du plus faible écart possible entre les résultats simulés et ceux de l'expérience [15].

Les résultats obtenus expérimentalement montrent qu'il y a 4 niveaux confinés distincts dans les boîtes quantiques. On considère que le confinement en  $z$  (selon l'axe de croissance) ne permet qu'un seul état, puisque la hauteur des boîtes est relativement petite. En découplant les composantes  $x$  et  $y$  de la composante  $z$  et en supposant que le potentiel effectif de confinement selon  $x$  et  $y$  est parabolique, les dégénérescences associées à chacun des ces 4 niveaux sont respectivement 2, 4, 6 et 8 en tenant compte de la dégénérescence de spin.

L'ensemble des paramètres utilisés pour reproduire une première série de données obtenues expérimentalement avec une puissance d'excitation de  $20 \text{ W/cm}^2$  sont présentés dans le tableau suivant:

$\tau_{6i}$	$8 \cdot 10^{-3} \text{ ps}$	optimisé
$\tau_{5i}$	$400 \text{ ps}$	fixé
$\tau_{ij}$	$300 \text{ ps}$	optimisé
$C_{55,5i}^A = C_{5i,5j}^A$	$1/50 \text{ ps}^{-1}/\# \text{ de porteurs}$	optimisé
$\tau_{ii,jk}^A$	$\infty$	fixé
$\tau_i^r$	$800 \text{ ps}$	fixé
$\tau_{diff}$	$30 \text{ ps}$	fixé
$N_0/N_{dot}$	$30$	optimisé

Tableau 3.1: Paramètres utilisés pour la reproduction par les équations d'évolution des données expérimentales obtenues à  $20 \text{ W/cm}^2$  [15]

On constate d'abord que les processus Auger impliquant deux porteurs initialement dans un même niveau 3D ne sont pas considérés (probabilité = 0). Les probabilités

associées aux processus de capture Auger et de relaxation Auger impliquant un porteur dans la couche de mouillage sont exprimés, dans le travail de N. Perret [15], comme la probabilité qu'a un porteur de réaliser une collision de ce type lorsqu'il est en présence d'une densité de porteurs  $n_5$ . On donne ici les valeurs de  $C_{55,5i}^A = n_5/\tau_{55,5i}^A$  et  $C_{5i,5j}^A = n_5/\tau_{5i,5j}^A$ .<sup>1</sup>

Plusieurs des temps qui, de prime abord, pourraient différer, sont posés comme étant égaux, permettant ainsi de limiter le nombre de paramètres à optimiser. Ainsi les temps de capture des états 3D vers les 4 niveaux 0D ( $\tau_{64}, \tau_{63}, \tau_{62}, \tau_{61}$ ) et vers l'état décrivant le continuum 2D ( $\tau_{65}$ ) sont tous supposés égaux. De la même façon, les temps de capture de la couche de mouillage vers les états 0D ( $\tau_{54}, \tau_{53}, \tau_{52}, \tau_{51}$ ) sont aussi tous égaux, tout comme les temps de capture Auger ( $\tau_{55,54}^A, \tau_{55,53}^A, \tau_{55,52}^A, \tau_{55,51}^A$ ) et les temps de recombinaison ( $\tau_i^r$ ) qui eux sont les mêmes dans les 7 niveaux considérés. Enfin, les temps de relaxation multiphononiques entre les niveaux 0D ( $\tau_{43}, \tau_{42}, \tau_{41}, \tau_{32}, \tau_{31}, \tau_{21}$ ) et les temps de relaxation Auger ( $\tau_{54,53}^A, \tau_{54,52}^A, \tau_{54,51}^A, \tau_{53,52}^A, \tau_{53,51}^A, \tau_{52,51}^A$ ) sont indépendants des états finaux et initiaux des porteurs dans les états 0D.

Il est à noter qu'aucun des processus traités ne permet aux porteurs d'absorber de l'énergie. En effet, la capture à partir du niveau 3D ( $n = 6$ ) ne peut être faite que vers le niveau 2D ( $n = 5$ ) ou les niveaux 0D ( $n = 1, 2, 3, 4$ ). De même, seule la capture du niveau 2D vers les niveaux  $n = 1, 2, 3, 4$  est considérée et la relaxation interniveaux dans les états 0D (processus géré par  $\tau_{ij}$ ) ne permet de passer que d'un niveau  $i$  vers les niveaux  $j$  qui lui sont inférieurs en énergie. L'ensemble des processus qui permettraient à un porteur d'augmenter son énergie devrait avoir pour effet de ralentir la relaxation énergétique du système, mais on considère ici que ce ralentissement est inclus dans les divers temps caractéristiques qui sont obtenus par optimisation.

On justifie le temps de capture  $\tau_{5i}$  de la couche de mouillage vers les états 0D plutôt long, par l'observation expérimentale d'un temps de décroissance long du signal dans la couche de mouillage, que l'on croit dû à la présence soit de défauts d'interface où d'une barrière de potentiel pouvant être créée lors de l'interdiffusion des boîtes quantiques. Ces défauts permettraient en effet de limiter la vitesse de diffusion des

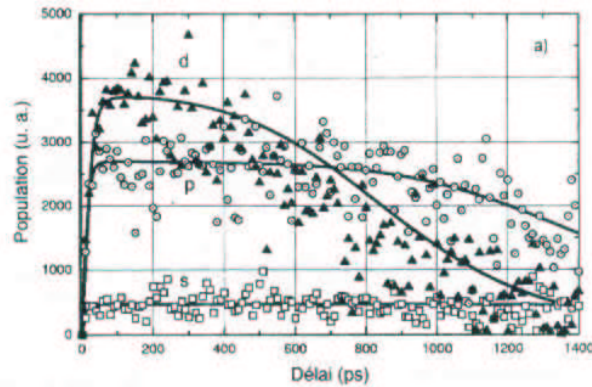
---

<sup>1</sup>La valeur de la densité utilisée par N. Perret pour obtenir ces valeurs n'est cependant pas mentionnée.

porteurs dans la couche de mouillage. Ce temps de 400 ps est fixé par les observations expérimentales, tout comme les temps de recombinaison de 800 ps et le temps de diffusion de 30 ps. L'ensemble des autres temps ont été déduits en optimisant la correspondance entre les résultats expérimentaux et ceux de la modélisation. Le nombre moyen de porteurs par boîte quantique (le rapport entre la densité de porteurs et la densité de boîtes quantiques) est aussi un paramètre déduit par optimisation, qui, dans ce cas, donne une valeur de 30 porteurs par boîte.

Le dernier paramètre ajustable de cette modélisation est l'amplitude de chacun des niveaux. En effet, puisque l'on mesure expérimentalement l'intensité lumineuse émise alors que l'on simule plutôt la population des niveaux, la comparaison entre les deux séries de données des niveaux nécessite d'introduire un facteur multiplicatif. Ces amplitudes sont ajustées indépendamment les une des autres pour obtenir la meilleure correspondance entre théorie et expérience. En effet, les intensités détectées peuvent présenter des amplitudes relatives entre les divers niveaux qui sont faussées de façon importante soit par le cristal non-linéaire qui réalise la conversion des fréquences avant la détection ou encore par la présence d'états multiparticules.

Les résultats obtenus avec ce modèle, pour une puissance d'excitation de  $20 \text{ W/cm}^2$ , sont les suivants [15].



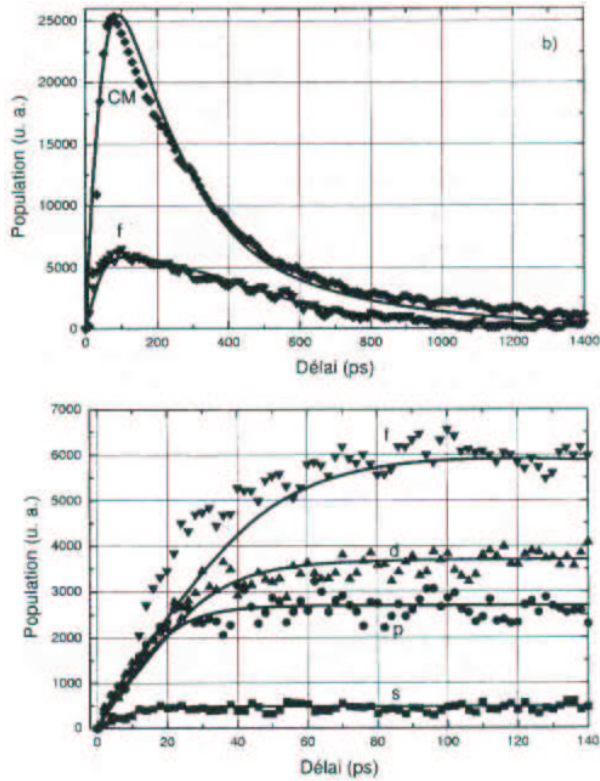


Figure 3.5: Modélisation des données à  $20 W/cm^2$  [15]

Dans ces graphiques, les lignes continues sont les résultats obtenus par le modèle théorique, alors que les séries de points représentent les résultats expérimentaux obtenus dans la couche de mouillage ( $\blacklozenge$ ) et les niveaux 1 ( $\square, \blacksquare$ ), 2 ( $\circ, \bullet$ ), 3 ( $\blacktriangle$ ) et 4 ( $\blacktriangledown$ ). Le dernier graphique ne présente l'évolution que durant les premières 140 ps pour permettre de mieux observer la montée dans les niveaux 0D. On note une correspondance relativement bonne entre les résultats numériques et les résultats de l'expérience pour les données obtenues avec une puissance d'excitation de  $20 W/cm^2$ . Cependant, le comportement modélisé dans la couche de mouillage ainsi que celui des porteurs du niveau 4 présentent des différences notables avec l'expérience.

Une autre série de données à aussi été modélisée, cette fois pour une puissance d'excitation de  $4 W/cm^2$ , en utilisant les mêmes paramètres. Seul le nombre de porteurs par boîte et les temps de capture et de relaxation Auger ont été modifiés.

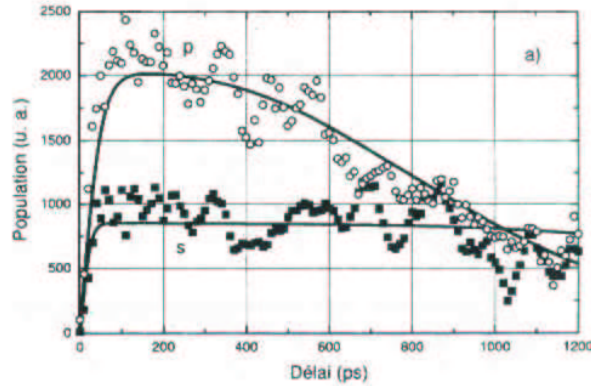
Voici la liste des paramètres utilisés pour cette deuxième série de données.

$\tau_{6i}$	$8 \cdot 10^{-3} ps$	optimisé
$\tau_{5i}$	$400 ps$	fixé
$\tau_{ij}$	$300 ps$	optimisé
$C_{55,5i}^A = C_{5i,5j}^A$	$1/1.66 ps^{-1}/\#$ de porteurs	optimisé
$\tau_{ii,jk}^A$	$\infty$	fixé
$\tau_i^r$	$800 ps$	fixé
$\tau_{diff}$	$30 ps$	fixé
$N_0/N_{dot}$	$14$	optimisé

Tableau 3.2: Paramètres utilisés pour la reproduction par les équations d'évolution des données expérimentales obtenues à  $4 W/cm^2$  [15]

On doit noter que le nombre initial de porteurs par boîtes a été optimisé à 14. Ce résultat semble surprenant puisque l'on devrait s'attendre à ce que le nombre initial de porteurs photoexcités dans la structure soit directement proportionnel à la puissance d'excitation. Ce n'est visiblement pas le cas lorsque l'on compare les 14 et 30 porteurs utilisés à  $4 W/cm^2$  et  $20 W/cm^2$ .

Cette deuxième série de données obtenue avec  $4 W/cm^2$  est présentée à la figure 3.6 pour la couche de mouillage ( $\diamond$ ) et les niveaux 1 ( $\blacksquare$ ), 2 ( $\circ$ ) et 3 ( $\blacktriangle$ ) [15].



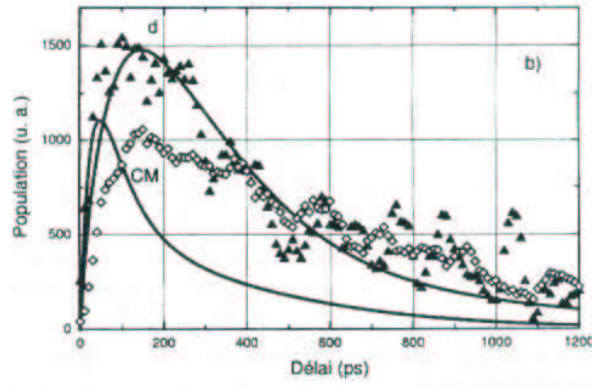


Figure 3.6: Modélisation des données à  $4 \text{ W/cm}^2$  [15]

À cette faible densité d'excitation ( $4 \text{ W/cm}^2$ ), on note que, bien que le comportement dans les états 0D soit encore relativement bien reproduit par la modélisation, le comportement dans la couche de mouillage ne l'est clairement pas. En effet, la couche de mouillage se remplit beaucoup trop rapidement en comparaison avec les résultats des expériences.

En somme, pour les deux puissances d'excitation, le modèle semble permettre une reproduction adéquate des résultats dans les états 0D, mais les observations faites dans la couche de mouillage semblent poser un problème important. À notre avis, la faiblesse principale de la méthode utilisée est son incapacité à traiter adéquatement les continums d'états, comme celui que l'on retrouve dans le volume et la couche de mouillage. En effet, il est impossible, dans ce type de calcul, de considérer une dépendance des temps caractéristiques  $\tau$  envers l'énergie des porteurs dans ces états puisqu'il faudrait construire un système d'équations différentielles contenant une équation pour chacun des états de ces continums. Même si l'on discrétisait l'espace  $\mathbf{k}$  dans ces niveaux pour les décrire par un nombre limité d'états, on devrait tout de même associer à chacun de ces états une équation différentielle couplée à toutes les autres. La résolution de ce problème devient rapidement difficile. Cette limitation entraîne l'impossibilité de traiter la dispersion en énergie dans les états 3D et 2D et ne permet donc que des modèles très simples pour décrire la diffusion dans les états des barrières.

Pour pallier ce problème, nous proposons donc d'utiliser la méthode Monte Carlo pour tenter de développer une modélisation plus complète du transport et de la relaxation des porteurs dans les structures à boîtes quantiques.

# Chapitre 4

## Étude Monte-Carlo

### 4.1 Présentation du chapitre

La méthode Monte-Carlo permet de s'affranchir de certaines limitations propres à la modélisation par les équations d'évolution et de considérer des temps de collision  $\tau$  qui dépendent de l'état des porteurs dans les continums 2D et 3D. Ainsi, la description du transport et de la relaxation dans les barrières et la couche de mouillage peut être faite d'une façon beaucoup plus complète. En contrepartie, la méthode Monte-Carlo introduit, en raison du nombre restreint de porteurs simulés, une erreur statistique qui n'était pas présente dans la résolution des équations d'évolution.

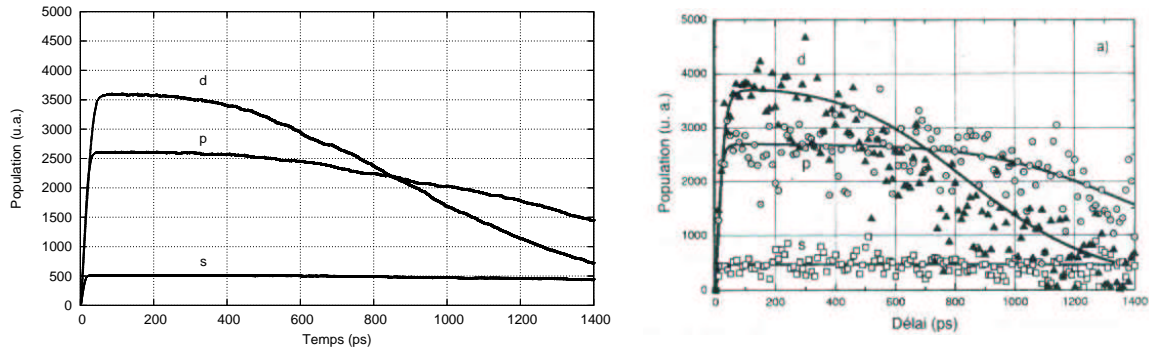
Compte tenu que les imperfections les plus notables du modèle présenté au chapitre 3 se manifestent principalement dans la reproduction du comportement des porteurs dans la couche de mouillage, on peut supposer que la recherche d'une meilleure description du comportement des porteurs dans les niveaux 3D et de la capture des porteurs des niveaux 3D vers les niveaux 2D de la couche de mouillage, puisse suffire à obtenir une bonne modélisation du système.

## 4.2 Résolution Monte-Carlo du modèle des équations d'évolution

Avant toute chose, on doit s'assurer que la méthode Monte-Carlo permet de reproduire les résultats obtenus par la résolution des équations d'évolution, lorsqu'elle est appliquée au même modèle.

On réalise donc une simulation de type Monte-Carlo où les porteurs évoluent entre les 7 mêmes états avec les mêmes temps caractéristiques qui ont été utilisés pour la reproduction des données expérimentales obtenues avec une puissance d'excitation de  $20 \text{ W/cm}^2$ . Cependant, les temps utilisés pour les processus Auger n'étaient pas clairement définis dans la thèse de N. Perret [15] et on utilise donc ici un temps défini de telle façon que lorsque  $\frac{1}{25}$  des porteurs simulés sont situés dans une même couche de mouillage, la probabilité de collision d'un des porteurs avec tous les autres contenus dans la couche de mouillage soit de  $2 \cdot 10^{10} \text{ s}^{-1}$ , la valeur présentée dans les travaux de N. Perret [15]. On utilise  $\frac{1}{25}$  des porteurs pour la simple et bonne raison que les échantillons étudiés contiennent 25 couches empilées [15] et donc en répartissant tous les porteurs simulés de façon uniforme entre les couches, chacune contient  $\frac{1}{25}$  du nombre total de porteurs.

Les résultats Monte-Carlo sont présentés à gauche sur la figure 4.1, tandis qu'à droite on reproduit les résultats de N. Perret [15] déjà présentés à la figure 3.5.



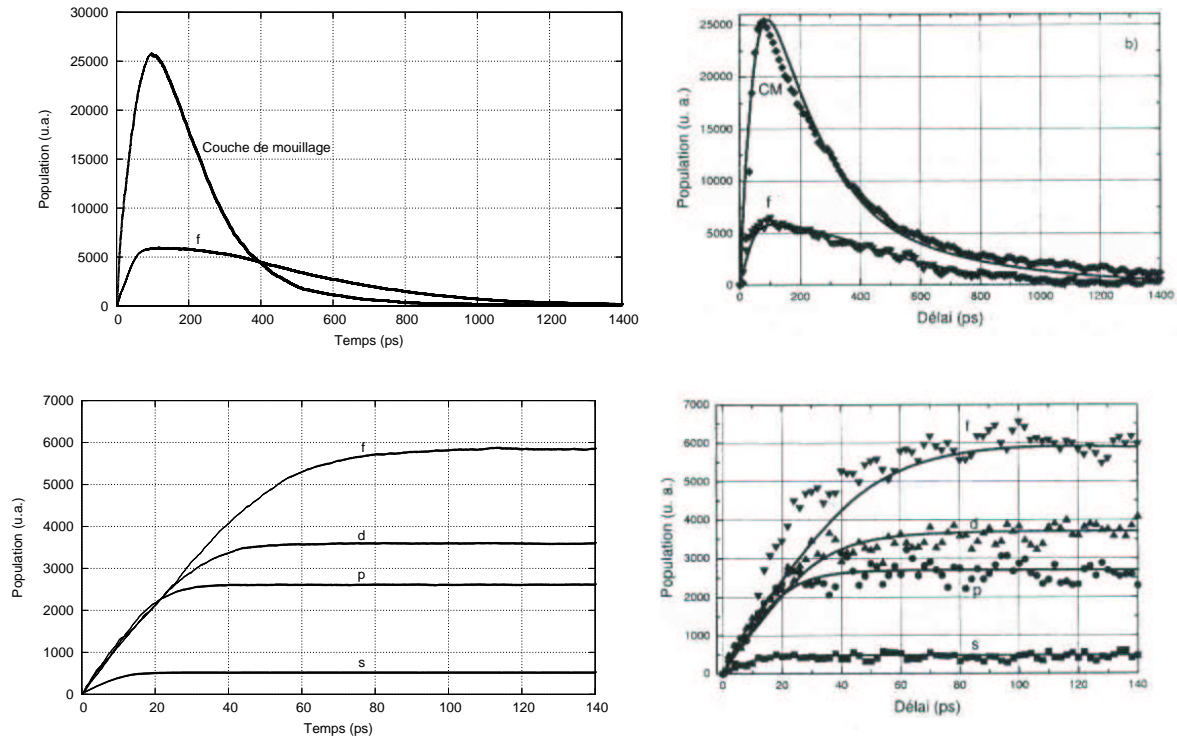


Figure 4.1: Reproduction Monte-Carlo de la solution des équation d'évolution

On constate une bonne correspondance entre les résultats Monte-Carlo et ceux de la modélisation par les équations d'évolution. Cependant, dans les données Monte Carlo, on remarque que la couche de mouillage se vide un peu plus rapidement, ce qui permet de supposer que les temps Auger utilisés sont légèrement sous-évalués par rapport à ceux utilisés dans les équations d'évolution. Malgré cette légère différence et l'erreur statistique inhérente à la méthode Monte-Carlo, on peut conclure que le simulateur Monte-Carlo est apte à reproduire adéquatement l'évolution temporelle des populations de porteurs dans ce modèle. Il est donc possible de chercher à tirer profit des possibilités offertes par le Monte-Carlo pour tenter d'améliorer la modélisation proposée.

Il faut noter que, comme c'était le cas dans les travaux de N. Perret [15]. Il faut utiliser un facteur multiplicatif différent pour chaque niveau pour que les résultats de simulation reproduisent le comportement observé expérimentalement. Les coefficients utilisés ici sont les suivants:

Couche de mouillage	9.0
Niveau f	1.5
Niveau d	1.2
Niveau p	1.3
Niveau s	0.5

Tableau 4.1: Coefficient d’ajustement d’amplitude des populations

Il faut noter que les valeurs de ces coefficients n’ont de signification que lorsque comparées l’une avec l’autre. En effet, ces valeurs sont évidemment dépendantes du nombre porteurs utilisés pour faire la simulation.

### 4.3 Diffusion semi-classique

La première amélioration que rend possible l’utilisation d’une méthode Monte Carlo est une description plus adéquate du phénomène de diffusion dans les états 3D des barrières. En premier lieu, on peut incorporer aux simulations une diffusion semi-classique, semblable à celle utilisée à la section 2.4 pour le transport de trous lourds du Ge. La seule modification qui est faite au modèle utilisé pour les équations d’évolution [15] est de remplacer le temps de diffusion qui y était fixé à 30 ps par une diffusion semi-classique dans les états 3D. Les porteurs évoluent alors selon les équations semi-classiques du mouvement auxquelles on ajoute le traitement Monte-Carlo des processus d’absorption et d’émission de phonons optiques polaires (voir 1.4.2) et acoustiques (voir 2.4.1) en utilisant l’ensemble des paramètres propres au GaAs [21] qui sont indiqués dans la liste suivante. La température du bain de phonons est de 20 K, puisque c’est la température à laquelle les mesures expérimentales ont été faites.

Lorsque la diffusion semi-classique entraîne un porteur dans la région d’une couche de mouillage, ce dernier peut alors être capturé vers les états 2D de cette couche de mouillage où vers chacune des boîtes quantiques qui sont situées sur cette couche. En effet, on réalise la simulation avec un nombre fini de boîtes distinctes réparties également entre l’ensemble des couches de mouillage de la structure. Le nombre de

$m^*$	$0,067 m_0$
$c_s$	$5,24 \cdot 10^5 \text{ cm/s}$
$\rho$	$5,36 \text{ g/cm}^3$
$\hbar\omega_{op}$	$0,03536 \text{ eV}$
$\epsilon_0$	$12.94$
$\epsilon_\infty$	$10.92$
$D_{ac}$	$7,0 \text{ eV}$

Tableau 4.2: Paramètres du GaAs utilisés pour les simulations Monte Carlo de la structure à boîtes quantiques

boîtes que l'on doit traiter dans une simulation donnée est fixé par le nombre de porteurs simulés et le rapport entre la densité de boîtes et la densité de porteurs.

Les porteurs évoluent dans une structure définie en utilisant l'ensemble des paramètres connus du système étudié expérimentalement [15]. Ces données sont illustrées à la figure 4.2.

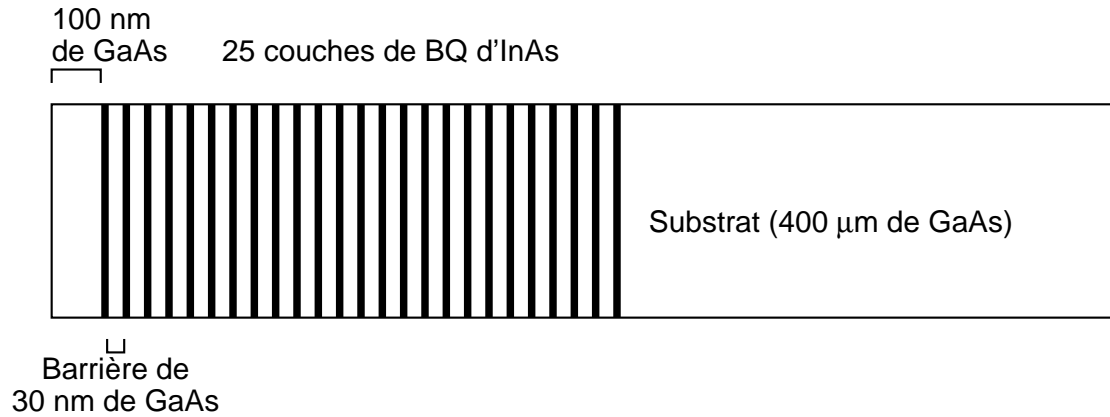


Figure 4.2: Représentation schématique de la structure à boîtes quantiques étudiée

La couche de surface de GaAs, sur laquelle est envoyée l'impulsion laser servant à exciter les porteurs a une épaisseur de 100 nm. Cette couche recouvre une série de 25 couches de mouillage d'InAs sur lesquelles on trouve les boîtes quantiques. Ces

25 couches sont toutes séparées par des barrières de GaAs de 30 nm d'épaisseur. Le tout repose sur un substrat de GaAs d'une épaisseur de 400  $\mu m$ . La densité de boîtes quantiques sur chacune des couches de mouillage est de l'ordre de  $5 \cdot 10^9 cm^{-2}$ . L'épaisseur du puits quantique que forme chacune des 25 couches de mouillage est fixée à 16 Å suivant la modélisation proposée par Wojs [22]. La présence de fortes contraintes dans ces structures implique que le potentiel de confinement dans les puits des couches de mouillage n'est pas simple à déduire. On choisit donc de fixer à 0.34 eV la profondeur des puits, toujours selon la modélisation de Wojs [22], ce qui nous donne une différence d'énergie entre le niveau confiné en 2D et le bas de la bande du continuum des états 3D des barrières de 90 meV.

On ne traite pas ici la variation de masse effective entre les deux matériaux composant la structure. On utilise partout la masse effective de l'électron dans le GaAs, soit  $0.067 m_0$ . On considère, comme c'était le cas dans la modélisation par les équations d'évolution, un transport et une relaxation ambipolaire, c'est-à-dire contrôlée par un seul type de porteurs. Les électrons se déplacent et changent d'états rapidement et les trous reproduisent le comportement électronique par un effet électrostatique. Par exemple, si un grand nombre d'électrons sont capturés vers le puits de la couche de mouillage, la charge qui y est alors accumulée permet d'accélérer la capture des trous vers ce même puits. On étudie donc seulement le comportement de la distribution des électrons lors de nos simulations.

La distribution initiale des porteurs est monoénergétique. C'est donc dire que l'on ne considère pas l'étalement en énergie de l'impulsion laser servant à exciter les porteurs. Cet étalement peut être approximé à l'aide du principe d'incertitude d'Heisenberg. Sachant que les impulsions sont d'une durée d'environ 80 ps, on trouve un étalement en énergie d'environ 0.008 eV. On considère donc que tous les électrons simulés sont excités par des photons d'exactly 1.67 eV d'énergie. La position en  $z$  (axe de croissance) à laquelle chacun des porteurs est initialement généré est choisie stochastiquement selon une distribution exponentielle  $P(z) = e^{-\alpha z}$  où  $\alpha = 0.004 nm^{-1}$  correspond au coefficient d'absorption des photons dans la structure [15].

Les résultats obtenus par cette simulation sont présentés à la figure 4.3:

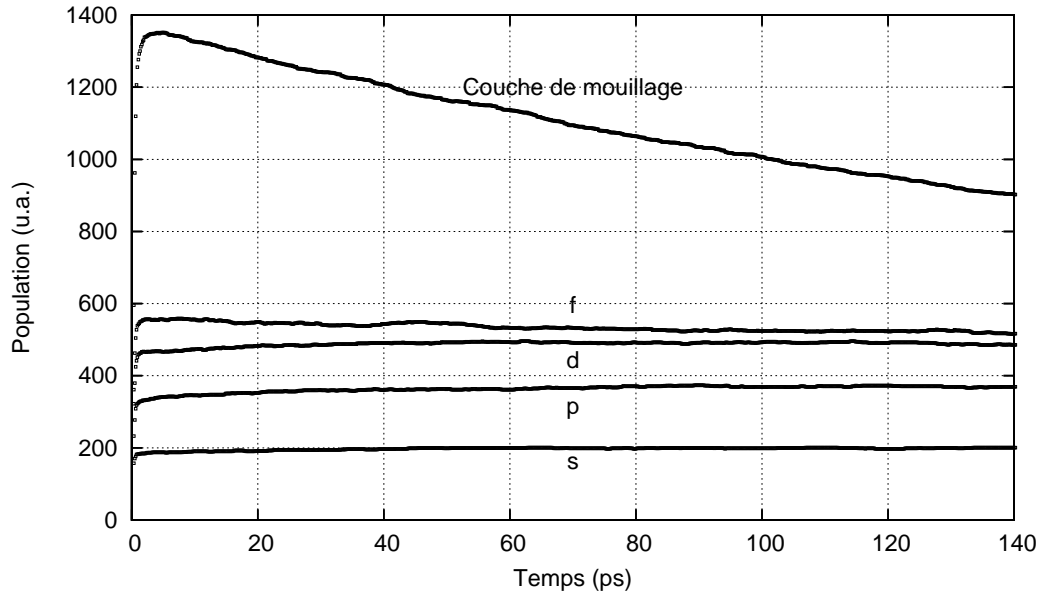


Figure 4.3: Résultats Monte-Carlo avec transport semi-classique

On note très clairement que la montée de la population dans tous les états est beaucoup trop rapide comparativement aux résultats obtenus expérimentalement (voir la figure 3.5). Compte tenu que la seule modification apportée au modèle obtenu par les équations d'évolution est dans la description de la diffusion dans les états 3D des barrières, on doit conclure que le temps de 30 ps qui avait été fixé dans ce modèle n'est pas cohérent avec la description semi-classique du transport électronique dans les niveaux 3D qui est faite ici. Il faut savoir que ce temps avait été fixé à 30 ps car c'était le temps approximatif qu'il fallait au niveaux 3D pour se vider, c'est-à-dire pour ne plus émettre de signal de photoluminescence mesurable. En supposant ce temps de diffusion, le temps de capture à partir des niveaux 3D était optimisé à une valeur extrêmement rapide [15]. Or, la description Monte-Carlo de la diffusion, que l'on suppose plus réaliste, ne permet pas de retrouver les résultats expérimentaux en gardant le même temps de capture. On peut donc supposer que le temps de décroissance du signal de photoluminescence du GaAs n'est pas dû à une diffusion lente (30 ps) suivie d'une capture très rapide, mais à une diffusion plus rapide, comme on l'observe dans les résultats Monte-Carlo, suivie d'une capture plus lente que  $8 \cdot 10^{-3}$  ps.

En conservant la description actuelle de la diffusion dans les états 3D, on peut donc étudier l'effet d'un temps de capture plus long. En réalisant ces simulations, on découvre que l'augmentation du temps de capture entraîne qu'un grand nombre des porteurs simulés peuvent traverser dans son entièreté la région contenant les 25 couches de mouillage et ce sans être capturés par les états 2D ou 0D. On se retrouve alors dans une situation où, tel que l'on peut le constater sur la figure 4.4, un grand nombre des porteurs se retrouvent dans la région du substrat d'où il ne peuvent plus être capturés. Cette figure présente des résultats obtenus avec un temps de capture fixé à 1 ps.

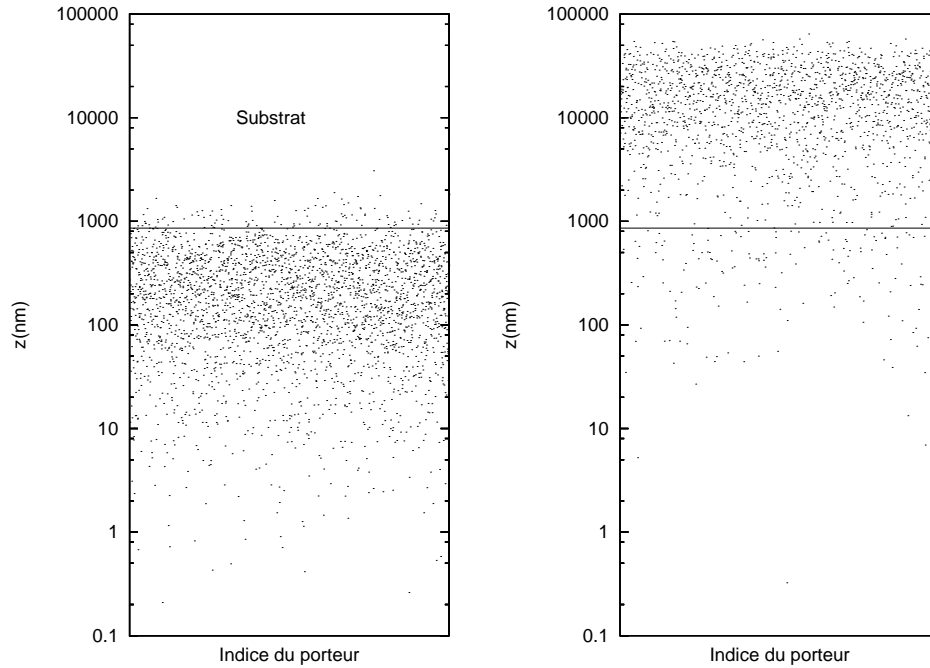


Figure 4.4: Distribution des porteurs selon l'axe de croissance à  $t = 0$  (à gauche) et  $t = 140 \text{ ps}$  (à droite) pour un temps de capture  $\tau_{6i} = 1 \text{ ps}$

Des 30 porteurs par boîte qui étaient initialement générés dans la simulation, seule une partie est donc capturée. Par conséquent, la valeur du nombre de porteurs optimisée pour les équations d'évolution, où cet effet ne pouvait être reproduit, n'est donc pas nécessairement représentative du nombre de porteurs réellement photoexcités par l'impulsion laser, mais représente plutôt un nombre de porteurs qui demeurent dans

la région contenant les couches de boîtes quantiques. L'explication de la non-linéarité du nombre de porteurs simulés envers la puissance d'excitation dont il avait été question à la section 3.5, tient donc potentiellement au fait que la présence du substrat n'était pas considérée dans le modèle utilisé pour résoudre les équations d'évolution.

En cherchant à améliorer la description de la diffusion dans les états de barrières, on se retrouve donc dans une situation où les temps de capture optimisés ne sont plus aptes à reproduire adéquatement les résultats expérimentaux. De plus, la modification de ces temps de capture entraîne que le nombre de porteurs obtenus par optimisation ne permet plus d'obtenir un remplissage suffisant des niveaux. Il apparaît donc que la description semi-classique proposée ne peut pas être facilement ajoutée aux résultats obtenus par la résolution des équations d'évolution pour former un modèle efficace pour décrire le comportement des porteurs dans la structure étudiée.

Il faut cependant reconnaître que le modèle de diffusion Monte-Carlo utilisé est limité puisque certains effets n'y sont pas inclus. Par exemple, on considère dans ce modèle que les électrons interagissent avec un bain de phonons à une température fixée à 20 K. Or, certaines publications [23, 24] montrent clairement que le fait de considérer une distribution phononique hors d'équilibre peut avoir une grande importance sur l'évolution des porteurs et qu'il pourrait être nécessaire de considérer cet effet. De plus, il n'est pas certain que la diffusion puisse vraiment être reproduite par la simulation d'une simple distribution d'électrons. En effet, la diffusion dans les états 3D semble, à première vue, très rapide. En comparant les résultats de simulation obtenus avec ce modèle de diffusion et ceux d'expériences réalisées dans des échantillons de GaAs pourrait permettre de constater si des modifications doivent être apportées au modèle pour permettre de reproduire adéquatement les propriétés de transport du GaAs.

Une autre critique importante peut aussi être soulevée, compte tenu du fait que les couches de mouillage sont des puits très étroits ( $\approx 16 \text{ \AA}$ ). En effet, dans une modélisation semi-classique, où la position des électrons est définie exactement, le paquet d'onde décrivant l'état des électrons devrait avoir un étalement petit par rapport aux longueurs caractéristiques sur lesquelles il y a variation du potentiel de la structure. Il est donc fort probable qu'une vision semi-classique des états électroniques

dans les barrières ne soit pas la mieux adaptée à ce type de structure en raison de la faible largeur des couches de mouillage [25].

## 4.4 Vision délocalisée des états 3D

Adoptant une approche radicalement différente, on cherche dans cette section à décrire les états 3D des barrières, non plus par des paquets d'onde très localisés mais plutôt par des ondes planes ayant une extension spatiale importante. Les états accessibles aux porteurs sont donc définis exclusivement par trois composantes continues décrivant le vecteur d'onde électronique.

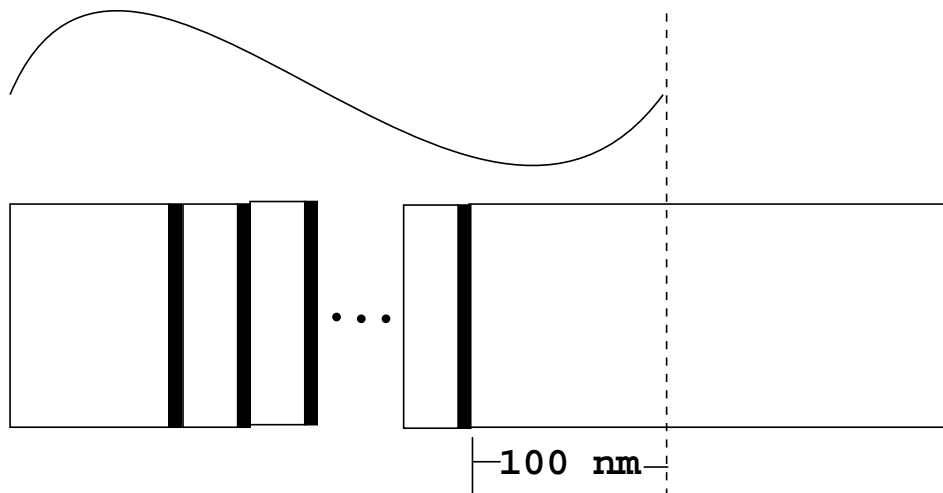


Figure 4.5: Plage utilisée pour la normalisation des fonctions d'ondes

On choisit de normaliser les ondes planes décrivant les états 3D sur une région qui couvre la couche de surface, les 25 couches de mouillage, et qui s'étend sur 100 nm dans le substrat (voir fig. 4.5), pour une étendue totale de 960 nm. Évidemment, ce choix n'est pas a priori aisé à justifier. Cependant, en limitant l'étendue de la fonction d'onde à la région contenant les couches, on peut considérer que, de façon très approximative, on obtiendrait des résultats équivalents si son étendue était moindre. Par exemple, si les fonctions d'ondes 3D étaient normalisées sur la moitié des couches

plutôt que sur leur totalité, elles auraient une amplitude deux fois plus grande et donc un recouvrement deux fois plus grand avec les fonction d'ondes 2D dans les puits. On calculerait alors une probabilité de capture vers un puits qui serait environ deux fois plus grande, mais la capture ne serait possible que vers la moitié des puits puisque la fonction d'onde 3D n'en recouvre que la moitié. En somme, une probabilité  $x$  fois plus grande d'être capturé vers  $x$  fois moins de puits devrait donner des résultats approximativement semblables au modèle considéré où les fonctions d'ondes recouvrent toutes les couches de boîtes.

Dans cette vision des états des barrières, le concept de position n'est pas défini et on ne traite donc pas le transport dans les états 3D. Tout ce que peut faire un porteur dans les états de barrières est de modifier, par une collision, son vecteur d'onde  $\mathbf{k}$  et ainsi se déplacer dans l'espace  $\mathbf{k}$ . Le modèle utilisé pour décrire les processus permettant ce transfert entre les divers états 3D est le même que celui utilisé à la section 4.3 et contient donc l'émission et l'absorption de phonons optiques et acoustiques.

Par contre, la capture des états 3D vers les états 2D de la couche de mouillage est maintenant décrite par le résultat d'un calcul de règle d'or de Fermi permettant ainsi une dépendance du temps de capture envers l'énergie des porteurs dans le continuum 3D. La capture des porteurs vers un puits quantique étant principalement due à l'émission d'un phonon optique [26], c'est là le seul processus de capture que nous considérons. On calcule le temps de capture de la même façon que l'on calculait la probabilité d'émission d'un phonon optique à la section 1.4.2, mais en remplaçant les deux ondes planes qui étaient alors utilisés par les fonctions d'ondes appropriées. Dans le formalisme des fonctions enveloppes, l'état 2D sera décrit par [6]

$$\psi_{\mathbf{k}_\perp}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{S}} e^{-i\mathbf{k}_\perp \cdot \boldsymbol{\rho}} \chi_{2D}(z), \quad (4.1)$$

où  $S$  est la surface de l'échantillon dans les directions perpendiculaires à l'axe de croissance,  $\mathbf{k}_\perp$  décrit les deux composantes de  $\mathbf{k}$  dans les directions non-confinées et  $\boldsymbol{\rho}$  est le vecteur position selon les deux direction non-confinées.  $\chi_{2D}(z)$  est la solution de l'équation de Schrödinger dans un puits carré d'une largeur de 16 Å et

d'une profondeur  $V_0 = 0.34$  eV. Le puits étant très étroit, un seul niveau est obtenu, à une énergie  $E_n$  inférieure de 90 meV à  $V_0$ .

Les fonctions d'ondes des états 3D sont quant à elles données par

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{S}} e^{-i\mathbf{k}_{\perp} \cdot \boldsymbol{\rho}} \chi_{k_z}(z), \quad (4.2)$$

où  $\chi_{k_z}(z)$  sont les ondes planes normalisées sur la région décrite à la figure 4.5.

En calculant la règle d'or de Fermi entre ces états à l'aide du couplage électron-phonon donné par l'hamiltonien présenté aux équations 1.12 et 1.13, on obtient une probabilité totale de capture pour un électron dans l'état 3D initial  $|\mathbf{k}\rangle = |\mathbf{k}_{\perp,i}, k_z\rangle$  qui est donnée par [21]

$$P_{cap}(\mathbf{k}) = \frac{\omega_{op} e^2 m^*}{2\hbar^2 \epsilon_p} \int_0^{2\pi} d\theta \frac{I^{k_z}(Q)}{Q} (N_{op} + 1) \quad (4.3)$$

avec

$$I^{k_z}(Q) = \int dz \int dz' \chi_{k_z}^*(z) \chi_{2D}(z) e^{-Q|z-z'|} \chi_{k_z}(z') \chi_{2D}^*(z'), \quad (4.4)$$

$$Q = (k_{\perp,i}^2 + k_{\perp,f}^2 - 2k_{\perp,i} k_{\perp,f} \cos \theta)^{1/2} \quad (4.5)$$

et

$$k_{\perp,f} = \left[ k_{\perp,i}^2 + \frac{2m^*}{\hbar^2} (V_0 - E_n - \hbar\omega_{op}) \right]^{1/2} \quad (4.6)$$

qui est la norme du vecteur d'onde final du porteur dans l'état 2D, fixée par conservation de l'énergie.  $\theta$ , l'angle entre la projection  $k_{\perp,i}$  du vecteur d'onde 3D dans le plan perpendiculaire à l'axe de croissance et le vecteur d'onde 2D  $k_{\perp,f}$ , est quant à lui sélectionné stochastiquement en utilisant la méthode présentée à la section 1.4.3, appliquée à la distribution de probabilité  $P(\theta) = \frac{I^{k_z}(Q)}{Q}$ .

Alors que pour les équations d'évolution, on pouvait considérer que le temps de capture optimisé rendait compte de la possibilité de fuite hors des états 2D vers les états 3D, le calcul fait ici n'en tient évidemment pas compte. Il est donc nécessaire d'inclure cette fuite dans les processus de collision que peuvent subir les porteurs présents dans les états 2D. Le calcul est à toute fin pratique le même que pour la capture, à la différence près que cette fois l'état initial et l'état final ont des rôles inversés. La sommation sur les états finaux possibles impliquera alors deux angles distincts, un pour fixer l'orientation de la projection  $\mathbf{k}_{\perp,f}$  du vecteur d'onde 3D final  $\mathbf{k}_f$  dans le plan  $(x, y)$  et un second pour fixer l'angle entre  $\mathbf{k}_f$  et l'axe de croissance  $z$ . Le taux de fuite pour un porteur initialement dans l'état 2D décrit par le vecteur d'onde  $\mathbf{k}_{\perp,i}$  est donné par [21]:

$$P_{fuite}(\mathbf{k}_{\perp,i}) = \frac{\omega_{op} e^2 m^*}{2\hbar^2 \epsilon_p} \int_0^\pi d\theta_p \int_0^{2\pi} d\theta \frac{I^{k_z}(Q)}{Q} (N_{op} + 1), \quad (4.7)$$

où

$$\begin{aligned} k_z &= k_{3D} \cos \theta_p, & k_{\perp,f} &= k_{3D} \sin \theta_p, \\ k_{3D} &= \left[ k_{\perp,i}^2 + \frac{2m^*}{\hbar^2} (E_n - V_0 - \hbar\omega_{op}) \right]^{1/2} \end{aligned} \quad (4.8)$$

et  $Q$  est toujours donné par l'équation 4.5.

Le processus responsable de la fuite est aussi l'émission d'un phonon optique, compte tenu qu'à une température de 20 K, le nombre de phonons présents est très faible impliquant ainsi une probabilité minime d'absorption de phonon optiques. Évidemment, la fuite hors des états 2D par émission d'un phonon optique ne sera possible que pour les porteurs ayant une énergie supérieure à  $V_0 + \hbar\omega_{op}$ . Le choix des deux angles décrivant l'état final après la collision est encore réalisé stochastiquement en respectant la distribution de probabilité  $\frac{I^{k_z}(Q)}{Q}$ .

Puisque l'on traite la probabilité de fuite hors des états de la couche de mouillage et que cette dernière dépend de l'énergie des porteurs dans le continuum 2D, il est important qu'une redistribution en énergie des porteurs dans les états 2D soit possible. Pour ce faire, on considère donc la possibilité qu'ont les porteurs confinés en

2D d'émettre et d'absorber des phonons optiques. Puisque les phonons acoustiques ont des énergies plutôt faibles, ce sont les phonons optiques qui sont principalement responsables de la variation de l'énergie des porteurs. On considère donc seulement l'émission et l'absorption de phonons optiques pour les porteurs dans le continuum 2D. Encore une fois, le calcul est analogue à celui réalisé pour la capture 3D  $\rightarrow$  2D, mais cette fois la fonction d'onde en  $z$  (axe de croissance) est la même dans les états finaux et initiaux. On obtient donc les probabilités suivantes pour l'absorption et l'émission d'un phonon optique par un porteur confiné en 2D [6]:

$$P_{op}(\mathbf{k}_{\perp,i}) = \frac{\omega_{op}e^2m^*}{2\hbar^2\epsilon_p} \int_0^{2\pi} d\theta \frac{I(Q)}{Q} \times \begin{cases} N_{op} & \text{absorption} \\ N_{op} + 1 & \text{émission} \end{cases} \quad (4.9)$$

avec

$$I(Q) = \int dz \int dz' \chi_{2D}^*(z) \chi_{2D}(z) e^{-Q|z-z'|} \chi_{2D}(z') \chi_{2D}^*(z'). \quad (4.10)$$

$Q$  est toujours donné par l'équation 4.5, mais, selon que l'on considère l'absorption ou l'émission d'un phonon optique, la valeur du vecteur d'onde de l'état final qui entre dans l'équation 4.5 sera différente puisque cette valeur est déduite de la conservation de l'énergie totale du système.

En dernier lieu, compte tenu du confinement quantique dans une des dimensions lorsqu'un porteur se trouve dans les états 2D, le principe de Pauli peut prendre une importance plus grande que dans les états 3D. Puisque l'on cherche à reproduire le mieux possible la distribution en énergie des porteurs dans la couche de mouillage, on doit donc appliquer le principe de Pauli dans cette série d'états. La technique décrite à la section 1.4.4, adaptée à une discrétisation d'un espace  $\mathbf{k}$  à deux dimensions est appliquée après chaque processus de capture 3D  $\rightarrow$  2D et après chaque émission ou absorption d'un phonon optique par les porteurs présents dans les états 2D de la couche de mouillage.

L'ensemble de la modélisation est toujours la même que celle utilisé pour la résolution des équations d'évolution. La seule modification apportée ici est de remplacer les processus de diffusion et de capture qui mènent les porteurs des états 3D vers les

états 2D par le modèle décrit précédemment.

On trace, à la figure 4.6, le résultat obtenu pour l'évolution de la population de la couche de mouillage pour cette méthode Monte-Carlo ainsi que le résultat qui était obtenu avec le modèle à 7 niveaux utilisé pour construire les équations d'évolution [15].

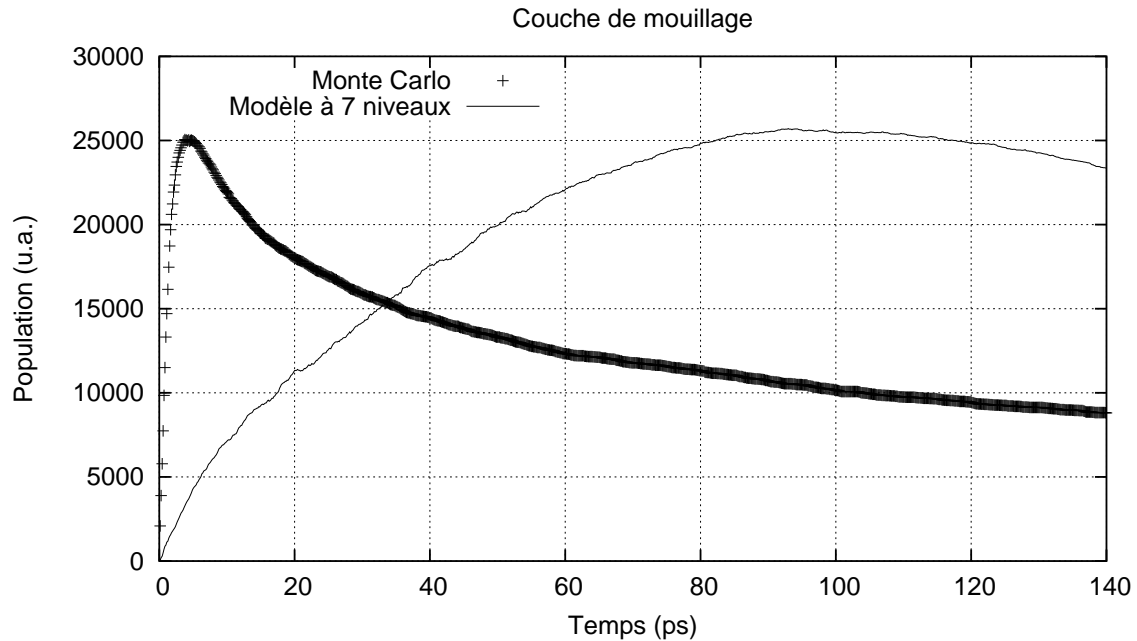


Figure 4.6: Évolution de la population dans la couche de mouillage avec un modèle délocalisé des états 3D

On note clairement que la montée de la population est beaucoup trop rapide comparativement au résultat de la modélisation à 7 niveaux (section 4.2) qui lui était tout de même relativement près des données expérimentales.

Il serait possible de ralentir la capture et donc potentiellement de permettre la reproduction des résultats expérimentaux en utilisant des fonction plus étendues pour décrire le continuum d'états 3D. En effet, on aurait dans ce cas un recouvrement moindre des fonction d'ondes 3D avec celles de états 2D des puits que forment les couches de mouillage et par conséquent, la probabilité de capture calculée serait moindre. Cependant, il n'est pas trivial de déterminer quelle pourrait être l'étendue

réelle des fonction d'ondes dans ce type de structures. On aurait potentiellement à réaliser une optimisation de ce paramètre, ce qui ne conférerait alors pas d'avantage réel à la méthode Monte Carlo par rapport à la résolution des équations d'évolution.

# Conclusion

Au cours de ce travail, on a pu construire un programme de simulation Monte Carlo permettant de traiter simultanément les états 3D, 2D et 0D que l'on retrouve dans les structures à boîtes quantiques auto-assemblées. Malgré le fait qu'elle semble particulièrement bien adaptée à ce problème, la méthode Monte-Carlo est encore très peu utilisée pour la modélisation du comportement des porteurs dans ces structures. Nous disposons donc d'un outil fort intéressant pour la recherche d'une modélisation efficace.

Bien que l'on pouvait à première vue supposer que quelques modifications simples apportées au modèle proposé par N. Perret pourrait permettre de construire une modélisation adéquate de la photoluminescence dans les structures à boîtes quantiques, les modèles que l'on a tenté d'utiliser ici n'ont pas permis d'obtenir une bonne correspondance entre les résultats de simulation et les données obtenues expérimentalement. Il apparaît clairement qu'un modèle plus complexe est nécessaire. Même si l'on a réutilisé une grande partie des paramètres obtenus par l'optimisation des résultats de la résolution des équations d'évolution, il faut noter que ce n'est pas là une nécessité pour construire un modèle utilisable dans les simulations Monte-Carlo. En effet, il serait plus intéressant de développer une modélisation dans laquelle l'ensemble des processus considérés seraient décrits par des temps caractéristiques calculés à partir de modèles microscopiques.

Comme on a aussi pu le constater, une des questions importantes à résoudre est celle de la description des états des porteurs dans le continuum 3D des barrières de GaAs. L'approche semi-classique (état localisé) est difficile à justifier compte tenu de la largeur des puits que forment les couches de mouillage. Cependant, une vision

délocalisée des états nécessite de définir l'étendue des fonctions d'onde électroniques ce qui est difficile à réaliser. La solution de ce dilemme réside potentiellement dans une approche hybride où le paquet d'onde possède une étendue spatiale importante, mais où l'on peut aussi traiter la diffusion de ce paquet d'onde dans la structure.

D'un autre point de vue, il est envisageable de s'affranchir temporairement de cette difficulté en cherchant à reproduire les résultats d'expériences dans lesquelles les porteurs sont excités non pas dans les états des barrières, mais plutôt directement dans les états 2D de la couche de mouillage. Il serait alors possible de construire un modèle complet pour la description du comportement des porteurs dans les états 2D et 0D. Une fois assuré que l'on dispose d'un bon modèle pour le traitement de ces états, il serait alors envisageable d'étudier plus spécifiquement les comportements dans les états 3D.

En exploitant le plein potentiel de la méthode Monte-Carlo, on peut s'attendre à être en mesure de dégager une meilleure compréhension du transport et de la relaxation des porteurs dans les structures à boîtes quantiques auto-assemblées.

# Bibliographie

- [1] P. D. Buckle, P. Dawson, S. A. Hall, X. Chen, M. J. Steer, D. J. Mowbray, M. S. Skolnick et M. Hopkinson, *Photoluminescence decay time measurements from self-organized InAs/GaAs quantum dots*, J. Applied Phys. 86, 2555 (1999)
- [2] N. W. Ashcroft et N. D. Mermin, *Solid state physics*, Saunders College (1976).
- [3] H. D. Rees, , Phys. Lett. A 26, 416 (1968).
- [4] C. Jacoboni et L. Reggiani, *The Monte Carlo method for the solution of charge transport in semiconductors with applications to covalent materials*, Rev. of Modern Phys. 55, 645 (1983).
- [5] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu et F. Laloë, *Mécanique quantique*, Hermann, Paris (1973).
- [6] R. Ferreira et G. Bastard, *Evaluation of some scattering times for electrons in unbiased single- and multiple-quantum-well structures*, Phys. Rev. B 40, 1074 (1989).
- [7] J. Callaway, *Quantum theory of the solid state*, Academic Press Inc., San Diego (1974).
- [8] M. Mosko, A. Moskova et V. Cambel, *Carrier-carrier scattering in photoexcited intrinsic GaAs quantum wells and its effect on femtosecond plasma thermalization*, Phys. Rev. B 51, 16 860 (1995).
- [9] W. Fawcett, A. D. Boardman et S. Swain, *Monte Carlo determination of electron transport properties in gallium arsenide*, J. Phys. Chem. Solids 31, 1963 (1970).

- [10] P. Lugli et D. K. Ferry, *Degeneracy in ensemble Monte Carlo method for high-field transport in semiconductors*, IEEE Trans. Electron. Devices 32, 2431 (1985).
- [11] H. Mathieu, *Physique des semiconducteurs et des composants électroniques*, Masson, Paris (1987).
- [12] O. Madelung, *Introduction to solid-state theory*, Springer-Verlag, New York (1978).
- [13] S. Fafard, Z. R. Wasilewski, C. N. Allen, D. Picard, M. Spanner, J. P. McCaffrey et P. G. Piva, *Manipulating the energy levels of semiconductor quantum dots*, Phys. Rev. B 59, 15 368 (1999).
- [14] N. Perret, D. Morris, L. Franchomme-Fossé, R. Côté, S. Fafard, V. Aimez et J. Beauvais, *Origin of the inhomogeneous broadening and alloy intermixing in InAs/GaAs self-assembled quantum dots*, Phys. Rev. B 62, 5092 (2000).
- [15] N. Perret, *Propriétés optiques et mécanismes de relaxation de l'énergie des porteurs dans des boîtes quantiques*, Thèse de doctorat, Université de Sherbrooke (2001).
- [16] D. Gammon, E. S. Snow, B. V. Shanabrook, D. S. Katzer et D. Park, *Homogeneous linewidths in the optical spectrum of a single Gallium Arsenide quantum dot*, Science 273, 87 (1996).
- [17] D. Leonard, K. Pond et P. M. Petroff, *Critical layer thickness for self-assembled InAs islands on GaAs*, Phys. Rev. B 50, 11 687 (1994).
- [18] M. Grundmann et D. Bimberg, *Theory of random population for quantum dots*, Phys. Rev. B 55, 9740 (1997).
- [19] V. Zwiller, M.-E. Pistol, D. Hessman, R. Cederström, W. Seifert et L. Samuelson, *Time-resolved studies of single semiconductor quantum dots*, Phys. Rev. B 59, 5021 (1999).
- [20] M. Brasken, M. Lindberg, M. Sopanen, H. Lipsanen et J. Tulkki, *Temperature dependence of carrier relaxation in strain-induced quantum dots*, Phys. Rev. B 58, R15 993 (1998).

- [21] M. Abou-Khalil, *Modélisation du transport des porteurs de charge dans les dispositifs actifs à hétérostructures et à puits quantiques par la méthode Monte-Carlo*, Thèse de doctorat, Université de Montréal (1996).
- [22] A. Wojs, P. Hawrylak, S. Fafard, L. Jacak, *Electronic structure and magneto-optics of self-assembled quantum dots*, Phys. Rev. B 54, 5604 (1996).
- [23] P. Lugli, P. Bordone, L. Reggiani, M. Rieger, P. Kocevar et S. M. Goodnick, *Monte Carlo studies of nonequilibrium phonon effects in polar semiconductors and quantum wells. I. Laser photoexcitation*, Phys. Rev. B 39, 7852 (1989).
- [24] M. Rieger, P. Kocevar, P. Lugli, P. Bordone, L. Reggiani et S. M. Goodnick, *Monte Carlo studies of nonequilibrium phonon effects in polar semiconductors and quantum wells. II. Non-Ohmic transport in n-type gallium arsenide*, Phys. Rev. B 39, 7866 (1989).
- [25] M. Mosko et K. Kalna, *Carrier capture into a GaAs quantum well with separate confinement region: comment on quantum and classical aspects*, Semicond. Sci. Technol. 14, 790 (1999).
- [26] P. W. Blom, C. Smit, J. E. M. Haverkort et J. H. Wolter, *Carrier capture into a semiconductor quantum well*, Phys. Rev. B 47, 2072 (1993).