

Effets de spin dans les nanostructures semi-conductrices : modélisation et expériences de magnéto-transport

Quang Tuong Nguyen

▶ **To cite this version:**

Quang Tuong Nguyen. Effets de spin dans les nanostructures semi-conductrices : modélisation et expériences de magnéto-transport. Physique [physics]. Ecole Polytechnique X, 2006. Français. NNT : . tel-00113255

HAL Id: tel-00113255
https://pastel.hal.science/tel-00113255

Submitted on 12 Nov 2006

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

ÉCOLE POLYTECHNIQUE

Thèse présentée pour obtenir le grade de

DOCTEUR DE L'ÉCOLE POLYTECHNIQUE

Spécialité : Physique des Solides

par

Tuong NGUYỄN QUANG

Sujet de la thèse :

Effets de spin dans les nanostructures semi-conductrices : modélisation et expériences de magnéto-transport

Soutenue le 20 septembre 2006 devant le jury composé de :

MM:	H. Alloul	Président
	T. Amand	Rapporteur
	C. Chaubet	Rapporteur
	M. Dyakonov	
	D. Mailly	Directeur de thèse
	P. Voisin	Directeur de thèse

à ma famille

"I soon learned to scent out what was able to lead to fundamentals and to turn aside from everything else, from the multitude of things that clutter up the mind."

Albert Einstein (1879-1955)

Remerciements

En premier lieu, cette thèse n'aurait pas pu avoir lieu sans les conseils, les aides de mon professeur Henri Alloul. Je lui suis reconnaissant. Il m'a suivi le long de ma scolarité à l'École Polytechnique et au DEA Physique des Solides. Merci beaucoup Professeur.

Je voudrais remercier mes deux directeurs de thèse : Paul Voisin et Dominique Mailly de m'avoir accueilli dans leur cercle. Dominique a dirigé la partie expérimentale de thèse avec compétence et dynamisme. Merci à Dominique pour m'avoir initié aux joies de la nanotechnologie et tu m'as montré ton talent du roi de la salle blanche. Tes humours, ta joie de discussion et surtout tes encouragements ont été pour moi une aide précieuse. Je voudrais saluer à tous les thésards qui ont eu (ou vont avoir) la chance de travailler avec Dominique dans le domaine de la nanotechnologie. Paul, malgré son temps très chargé, a participé à l'interprétation physique de mes calculs numériques. Je le remercie pour la confiance, la liberté totale qui m'a accordé. Cette liberté totale me permet de réaliser mes idées, mes pensées.

Merci à Jean-Yves Marzin, le directeur du laboratoire, de m'avoir accueilli chaleureusement dans son laboratoire dans les meilleures conditions.

Je remercie Messieurs Thierry Amand et Christophe Chaubet d'avoir accepté d'être les rapporteurs de cette thèse. Ma gratitude va également à Monsieur Michel Dyakonov qui m'a fait le plaisir d'être membre du jury.

Merci à Bernard Étienne, pour les discussions (et les conseils pour mon manuscrit) que nous avons eu tant scientifiquement que autres. Merci pour la passion pour la Physique que nous avons partagé.

J'ai également pu bénéficier tout au long de trois années de ma thèse des discussions avec les chercheurs dans le groupe Phynano et les autres groupes : Giancarlo Faini, Jean-Christophe Girard, Romain Giraud, Bernard Jusserand, Anthony Martinez, Jean-Louis Oudar, Frédéric Pierre, Anne Talneau, Zhao Zhong Wang. Merci à Yong Jin pour son aide dans les processus de la lithographie optique. Merci à Ulf Gennser et à Antonella Cavanna pour avoir épitaxié les couches de gaz bidimensionnel GaAs/Al(Ga)As même si je n'ai pas eu la chance d'avoir des couches de haute densité de porteurs.

Merci à Lorenzo Bernardi, Olivier Oria pour les discussions informatiques ainsi que l'installation du Mathematica dans plusieurs d'ordinateurs du LPN. Et je tiens à remercier tous les développeurs du logiciel libre pour le travail immense qu'ils fournissent.

Merci à Monsieur "hélium" Patrick Hisope pour avoir effectué mes commandes. Merci au personnel de la salle blanche que j'ai très peu fréquenté, les techniciens, ingénieurs qui m'on entouré, et m'ont aidé dans mes procédés.

Je tiens à remercier les thésards, les postdocs et les ingénieurs de recherche du LPN qui m'ont accompagné tout au long de cette thèse : Christophe Brun, Hicham Elfatimi, Emile Grémion, Hicham Elfatimi, Mélanie Le Dû, Kohsin Lee, Damien Lucot, Kamel Merghem, Karine Meunier, Hoang-Trung Nguyen, Abdelkarim Ouerghi, Mathieu Perrin, Thomas Petitpre, Laurent Vila, Christian Ulysse. Ma pensé va enfin vers mon "petit frère" Joseph Dufouleur, avec qui j'ai partagé de bons moments durant cette thèse. Nous avons parcouru le même chemin, du DEA jusqu'à la thèse, à Aussois, au labo, dans le RER, durant nos discussions, scientifiques ou non. Tes humours me laisseront de bon souvenir. Je te souhaite de bien terminer ta thèse et de continuer ta carrière de recherche comme tu le veux.

Cette thèse n'aurai pas abouti sans les engagements constants et les soutiens de ma famille et de mes amis. Je leur dédie cette thèse.

Table des matières

Remerciements **v**

Introduction **1**

I Semi-conducteur **5**

Chapitre I : Théorie k.p dans les hétérostructures de semi-conducteurs III-V **7**

I.1 Les matériaux massifs 8

I.1.1 Propriétés cristallines 8

I.1.2 Propriétés électroniques 9

I.2 Les hétérostructures 10

I.2.1 Hétérojonction à dopage modulé GaAs/$Al_xGa_{1-x}As$ 10

I.2.2 Multipuits quantiques avec ou sans atome commun 12

I.3 Théorie **k.p** 13

I.3.1 Principe de la théorie 14

I.3.2 Modèle de Kane étendu 16

I.3.3 Choix des paramètres **k.p** 18

I.4 Bibliothèque numérique 20

I.5 BIA Splitting de spin 21

I.6 Résultats numériques 22

I.6.1 Masse effective des bandes de valence 22

I.6.2 Splitting de spin des bandes de conduction et des bandes de valence 24

I.7 Conclusion 27

Chapitre II : États évanescent du GaAs 29

II.1 Motivation de l'étude 30

II.2 Principe du calcul 31

II.3 Résultats numériques 32

II.3.1 États évanescents suivant la direction [001] et [111] 32

II.3.2 États évanescents suivant la direction [110] 33

II.3.3 Splitting de spin 37

II.4 Conclusion 39

Chapitre III : Splitting de spin dans les hétérostructures de semi-conducteurs III-V 41

III.1 Revue des mécanismes du splitting de spin 42

III.1.1 BIA Splitting de spin dans les hétérostructures 42

III.1.2 SIA Splitting de spin 43

III.1.3 IIA Splitting de spin 45

III.2 Modèle 47

III.3 Dispersion d'énergie des sous-bandes de valence du puits quantique GaAs/AlAs 52

III.4 Splitting de spin de l'hétérostructure $GaAs/Al_{0.3}Ga_{0.7}As$ 54

III.4.1 Splitting de spin du puits quantique $GaAs/Al_{0.3}Ga_{0.7}As$ 54

III.4.2 Splitting de spin de l'hétérojonction $GaAs/Al_{0.3}Ga_{0.7}As$ 57

III.5 L'anisotropie de l'absorption optique 59

III.6 Conclusion 61

Chapitre IV : Compétition entre le splitting Zeeman et le couplage spin-orbite dans un 2DEG 63

IV.1 Structure de bande du gaz bidimensionnel en présence du champ magnétique 64

IV.2 Structure de bande du gaz bidimensionnel en présence du couplage spin-orbite 67

IV.2.1 La solution exacte pour 3 cas :($\alpha \neq 0, \beta = 0$), ($\alpha = 0, \beta \neq 0$) et ($\alpha = \beta$) 71
IV.2.2 La solution approximative pour $\alpha \gg \beta$, $\alpha \ll \beta$ et $\alpha \approx \beta$ . . . 73
IV.3 Conclusion et discussion 77

II Transport Quantique 79

Chapitre V : Transport quantique dans les structures de semi-conducteur mésoscopique : de la localisation faible à l'anti-localisation faible 81

V.1 Introduction à la localisation faible 82
V.2 Probabilité classique et croisements quantiques 83
V.3 La correction de la localisation faible sans champ magnétique 87
V.4 La correction de localisation faible et de l'anti-localisation faible en champ magnétique 89
V.4.1 Le rôle du champ magnétique 89
V.4.2 Le couplage spin-orbite et l'anti-localisation faible 91
V.4.3 Transport diffusif dans le système bidimensionnel 92
V.4.4 Transport diffusif dans le système unidimensionnel 95
V.4.5 Transport quasi-balistique dans le système unidimensionnel . . 96

Chapitre VI : Réalisation et mesure de magnéto-transport des fils quantique GaAs/$Al_{0.3}Ga_{0.7}As$ 99

VI.1 Gaz bidimensionnel 100
VI.2 Techniques expérimentales 104
VI.2.1 La lithographie électronique 104
VI.2.2 Technique de fabrication des contacts ohmiques 107
VI.2.3 Dispositif expérimental 109
VI.3 Etude du magnétotransport des fils quantiques GaAs/$Al_{0.3}Ga_{0.7}As$ . . 110
VI.3.1 Description des fils GaAs/$Al_{0.3}Ga_{0.7}As$ 110
VI.3.2 Détermination de la densité de porteurs 110
VI.3.3 La correction de localisation faible 113

VI.3.3.1 Magnétorésistance en fonction de la température . . 113
VI.3.3.2 Localisation faible et l'antilocalisation faible 113
VI.4 Conclusion 118

Conclusion **119**

Annexe A : Méthode quadrature **121**

Annexe B : Le cryostat à dilution ^{3}He/^{4}He **125**

Annexe C : Fonction Digamma **129**

Annexe D : Publications **131**

Références bibliographiques **137**

Introduction

L'élaboration des premières couches minces semi-conductrices, au début des années 1970, a ouvert le vaste champ de recherche des hétérostructures semi-conductrices. Les puits quantiques furent les premières structures réalisées. Elles se distinguent du matériau massif par leur caractère bidimensionnel et la quantification partielle des excitations électroniques induite par le confinement. Les multipuits quantiques et les hétérojonctions à base de semi-conducteurs III-V sont au coeur de cette thèse. Elles sont fabriquées grâce aux techniques de croissance comme : l'épitaxie par jets moléculaires ("Molecular Beam Epitaxy"), l'épitaxie phase vapeur aux organo-métalliques ("metal organic chemical vapor deposition"), etc. L'évolution de la nanotechnologie permet maintenant à la communauté scientifique de fabriquer des nanostructures quantiques de basse dimensionnalité tels que les boîtes quantiques et fils quantiques d'envisager l'utilisation de ces nano-objets en tant que dispositifs.

Malgré les efforts dans la fabrication des dispositifs électronique quantique, un aspect quantique important de l'électron, son spin a été peu exploité. Depuis peu se développe, une nouvelle branche de la physique des semi-conducteurs, basée sur le spin de l'électron. Cette "spintronique" place le spin de l'électron au centre des intérêts. La base sous-jacente pour cette nouvelle électronique est la connexion intime entre la charge d'électron et son spin à travers le principe de Pauli. Une implication cruciale de cette relation est que l'on peut avoir accès aux effets de spin à travers la propriété orbitale de l'électron dans le solide. Le lien entre la charge d'électron et son spin s'exprime par l'interaction spin-orbite. Dans les semi-conducteurs, on peut agir sur le coupage spin-orbite à l'aide d'une grille électrostatique, ce qui veut dire que l'on peut contrôler les spins sans avoir besoin d'appliquer un champ magnétique. Contrairement au dispositif utilisant le champ magnétique, celui basé sur l'effet spin orbite devrait être plus rapide, se prêter plus facilement à une réduction de taille et être bien mieux intégrable avec les autres dispositifs de semi-conducteur. Cette interaction combinée avec l'absence du centre d'inversion de la structure blende de zinc des semi-conducteurs III-V est la cause d'un dédoublement des niveaux de l'énergie dans la structure de bande (réelle et complexe). Ce dédoublement porte le nom de splitting de spin. Une modélisation précise des relations de dispersion de l'énergie dans les hétérostructures semi-conductrices, donc du splitting de spin, est une étape importante pour le contrôle des propriétés dépendant de spin. Différents mécanismes contribuant au splitting de spin ont été étudiés théoriquement et expérimentalement. Parmi eux la contribution venant de la brisure de la symétrie des interfaces a une particularité : elle est petite dans les hétérostructures avec atome commun alors qu'elle peut être dominante dans les hétérostructures sans atome commun. Cette brisure de symétrie est également la cause de l'anisotropie de polarisation de l'ab-

sorption optique dans le plan d'un puits quantique qui a été mise en évidence par le groupe de P. Voisin. L'intérêt pour l'étude de splitting de spin, son amplitude dans différents matériaux et hétérostructures, ainsi que ses conséquences possibles dans les applications techniques a été stimulé par la proposition de transistor à rotation de spin de Das et Datta en 1990 [1]. Cette proposition est basée sur la possibilité de moduler le couplage spin-orbite par un champ électrique (en faisant varier ce qu'on appelle la contribution de Rashba au splitting de spin.).

D'un point de vue théorique, le splitting de spin des hétérostructures semiconductrices peut être calculé par plusieurs méthodes. La méthode puissante, intuitive et permettant de distinguer des différentes contributions, que nous utilisons dans cette thèse, est la méthode **k.p**.

Dans la première partie de ce manuscrit, nous nous sommes intéressés aux structures de bande réelles et complexes, aux splittings de spin des relations de dispersion d'énergie des puits quantiques, et des hétérojonctions dans le contexte de nouveaux paramètres **k.p** récemment calculés par la méthode des liaisons fortes. La première étape de notre travail a été de vérifier ce nouvel ensemble de paramètres en faisant des comparaisons sur les résultats de différents calculs des propriétés électroniques du GaAs. Pour cela, nous présentons dans le chapitre I un bref rappel sur la méthode **k.p**, et puis nous comparerons notre calcul de splitting de spin des bandes de trou lourd, de trou léger et de bande de split-off du matériau massif GaAs avec les résultats calculés par la méthode des liaisons fortes. Une fois vérifiée la fiabilité des paramètres, nous continuons à examiner dans le chapitre II la structure de bande complexe du GaAs. En nous appuyant sur le modèle **k.p** à 14 bandes développé par Zawadzki et Pffefer, nous détaillons la structure de bande complexe suivant trois directions [001], [111] et [110] dans lesquelles, la direction [110] contient une complexité importante due au splitting de spin. Cette complexité fait l'objet d'un débat scientifique récent. En particulier, nous utilisons la présentation complexe du vecteur d'onde pour effectuer notre calcul de la structure de bande complexe et indiquons l'origine des boucles reliant les bandes de conductions et les bandes de valences. Nous discutons également les valeurs géantes du splitting de spin des états évanescents de la bande de conduction. Les résultats obtenus permettent de discuter la possibilité de dispositifs à effet tunnel dépendant du spin.

Nous continuerons dans le chapitre III de calculer le splitting de spin cette fois ci dans les hétérostructures de GaAs/$Al_{0.3}Ga_{0.7}As$. La première étape est d'identifier les contributions au splitting de spin. Cela permet de distinguer les effets de symétrie d'interface et les effets massifs associés à l'ionicité de la liaison chimique. Nous comparons notre résultat du calcul de splitting de spin dans l'hétérojonction GaAs/$Al_{0.3}Ga_{0.7}As$ en utilisant les nouveaux paramètres **k.p** venant de l'estimation par la méthode des liaisons fortes avec le résultat obtenus par les mesures de magnéto-transport. En particulier, nous tenons compte de la variation des fonctions périodiques de Bloch et des paramètres de Luttinger dans le matériau du puits et le matériau de la barrière dans notre calcul. Cette variation est négligeable si le matériau du puits et le matériau de la barrière sont similaires (GaAs et $Al_{0.3}Ga_{0.7}As$ par exemple).

Dans un système de gaz d'électrons bidimensionnel en présence d'un champ magnétique, il est possible d'avoir une concurrence entre le splitting de Zeeman et le splitting de spin mentionné ci-dessus. Suivant l'amplitude du couplage spin-orbite,

c'est à dire l'amplitude des coefficients de Rashba et de Dresselhaus, et la gamme de champ magnétique, on peut avoir ou non des battements dans les oscillations dans la densité d'états du système. Ceci permet d'une part de déterminer la zone où se produisent ces battements, ou bien des battements dans la conductivité, d'autre part de nous aider dans l'interprétation des mesures expérimentales.

La compréhension des propriétés physiques concernant l'interaction spin-orbite nécessite de connaître son comportement, de mesurer son amplitude et de la contrôler expérimentalement. Pour déterminer l'amplitude du couplage spin-orbite dans un système de semi-conducteur bidimensionnel, deux techniques de transport sont souvent utilisées : l'antilocalisation faible qui apparaît à très faible champ magnétique, et les battements apparus dans les oscillations Shubnikov de Haas. Pour cela, nous continuerons dans la seconde partie de ce manuscrit, à étudier et à contrôler l'interaction spin-orbite par une approche expérimentale dite "antilocalisation faible". Nous présenterons dans le chapitre V un bref rappel des propriétés du transport du système bidimensionnel et unidimensionnel en présence du couplage spin-orbite. En particulier, nous nous intéressons au comportement de la localisation faible et l'antilocalisation faible en présence du champ magnétique.

En fin, le chapitre VI est consacré aux mesures expérimentales à très basse température des fils quantiques $GaAs/Al_{0.3}Ga_{0.7}As$ fabriqués à partir du gaz d'électron bidimensionnel. Nous analysons dans un premier temps sa magnétorésistance. Cela nous permet d'extraire les temps caractéristiques du système : le temps de relaxation de spin, le temps de cohérence de phase. Le but a été d'observer le "crossover" en deux régimes localisation faible et l'antilocalisation faible. Mais, en pratique, la qualité des échantillons, c'est à dire leurs faibles densités de porteurs, ne nous ont pas permis d'observer le changement de signe caractéristique de l'antilocalisation faible.

Première partie

Semi-conducteur

Chapitre I

Théorie k.p dans les hétérostructures de semi-conducteurs III-V

Les puits quantiques et les hétérojonctions forment une classe d'hétérostructures dont les propriétés, au moins dans leurs caractéristiques les plus générales, reflètent la spécificité de leur dimensionnalité. Nous présenterons au cours de ce chapitre les grandes lignes de leurs structures électroniques, de leurs propriétés optiques en adoptant pour chacune d'entre elles un point de vue général et puis en focalisant sur le modèle **k.p** de Kane étendu appliqué pour les semi-conducteurs III-V massifs.

Dans une première section, nous présenterons brièvement les propriétés cristallines et électroniques des matériaux massifs III-V en insistant sur le fait que l'absence du centre d'inversion dans ces matériaux conduit à un splitting de spin de l'énergie des sous-bandes. La deuxième section sera consacrée plus spécifiquement aux hétérostructures que l'on étudiera dans toute la thèse : l'hétérojonction et les multipuits quantiques.

La troisième section est inévitablement une présentation historique de la méthode **k.p** suivie par l'extension du modèle de Kane [3]. Le choix des paramètres **k.p** utilisés dans ce modèle est parmi trois sets différents : le premier issu d'un calcul récent par la méthode des liaisons fortes, les deux autres correspondent à des valeurs classiques tabulées dans le Landolt-Börnstein.

La cinquième section présentera le mécanisme du splitting de spin dû au couplage spin orbite et à l'asymétrie d'inversion des matériaux massifs. Ce mécanisme peut servir de base pour l'interprétation des résultats numériques.

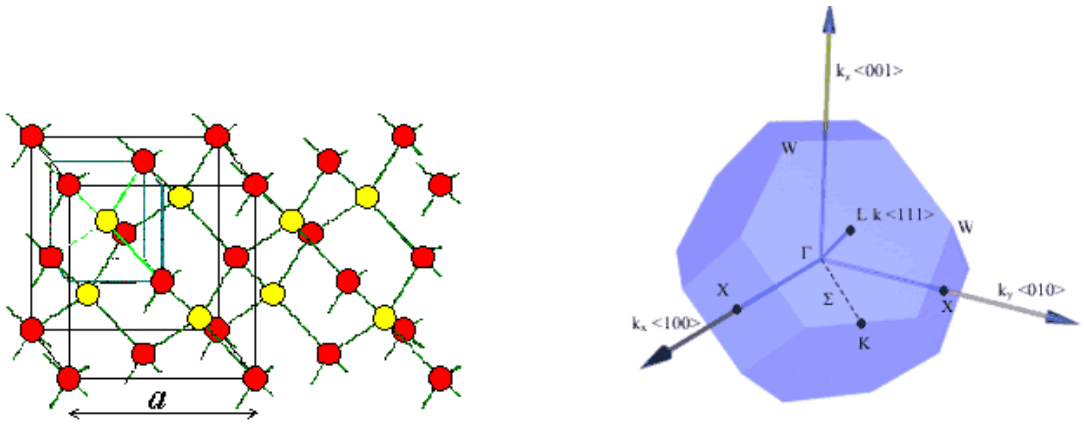
En fin, dans la dernière section, après une brève présentation les résultats concernant le splitting de spin de la bande de conduction du matériau massif qui a été beaucoup étudié, nous nous intéressons à la bande de valence de plusieurs semiconducteurs. Nous calculons la masse effective et les coefficients cubiques γ de Dresselhaus du splitting de spin des bandes de trou lourd, de trou léger et de split-off du matériau massif GaAs.

I.1 Les matériaux massifs

I.1.1 Propriétés cristallines

Les semi-conducteurs III-V tels que GaAs (arséniure de gallium), AlAs, AlSb, etc... ont une structure cristallographique de type blende de zinc. Cette structure, qui s'apparente à celle du diamant (Si, Ge, etc...), est constituée de deux sous-réseaux cubique à faces centrées, l'un d'éléments III, l'autre d'éléments V, décalé l'un par rapport à l'autre du quart de la diagonale principale (voir la figure I.1(a), l'atome en rouge représente un élément III par exemple, l'atome en jaune représente un élément V.). La maille élémentaire comporte deux atomes, le premier (Ga) à l'origine et l'autre (As) à $(a/4,a/4,a/4)$, où a représente le paramètre de maille du matériau. Du fait que les deux sous-réseaux cubiques à faces centrées sont décalés, le cristal n'est pas centrosymétrique. Il en découle des propriétés physiques différentes suivant les directions cristallographiques considérées. Ces propriétés donnent lieu à une des trois contributions du splitting de spin des hétérostructures semi-conductrices III-V (voir le chapitre III), appelée BIA (en anglais "bulk inversion asymmetry".) ou le terme de Dresselhaus.

De ce fait, les liaisons atomiques dans les matériaux III-V ne sont pas simplement covalentes comme dans le cas du silicium. Elles reposent sur le transfert d'électrons des atomes du groupe V (As) sur ceux du groupe III (Ga). Dans un cristal composé de l'arséniure de gallium, chaque atome d'arséniure est entouré de quatre atomes de gallium, et chaque atome de gallium est entouré de quatre atomes d'arséniure. Il se produit alors un échange d'électrons, le cristal se construit avec les ions Ga^- et As^+, qui ont tous quatre électrons périphériques. Cette répartition est à l'origine du caractère partiellement ionique et partiellement covalent des liaisons (semi-conducteurs polaires) qui sont orientées dans l'espace suivant les axes de symétrie d'un tétraèdre régulier. Cette propriété est en particulier responsable de l'anisotropie optique dans les hétérostructures semi-conductrices III-V qui a été mise en évidence expérimentalement par Krebs et Voisin [4].



(a) (b)

FIG. I.1: (a) La structure blende de zinc et (b) sa première zone de Brillouin.

Le réseau réciproque du réseau de Bravais correspondant à la structure blende de zinc est un réseau cubique centré. La première zone de Brillouin du réseau réciproque a la forme octaèdre tronqué (voir figure I.1(b)) par les six faces d'un cube. Elle présente un centre de symétrie à l'origine noté Γ et les axes de symétrie Δ, Λ, et Σ. Les points de croisement de chacun de ces axes avec les frontières de la zone de Brillouin sont les points de haute symétrie, et ils jouent un rôle primordial dans la structure de bande.

I.1.2 Propriétés électroniques

Les matériaux de semi-conducteurs III-V ont huit électrons par cellule unitaire contribuant aux liaisons chimiques. Les autres électrons n'interviennent pas dans les propriétés optiques des hétérostructures. Les orbitales de type s et de type p de chaque atome de gallium Ga s'hybrident avec les orbitales des atomes d'arséniure As, et forment des liaisons covalentes tétraédriques de type sp^3 : 4 orbitales liantes et 4 orbitales antiliantes. Les quatre orbitales liantes donnent lieu à quatre bandes d'énergie, chacune deux fois dégénérée de spin, et forment la bande de valence. Cette bande est pleinement occupée par des électrons à T=0°K, pour un semi-conducteur parfait. Les quatre autres orbitales antiliantes donnent naissance à quatre bandes supérieures, et forment la bande de conduction qui est inoccupée et est séparée de celle précédente par une bande d'énergie interdite de largeur E_g (band gap en anglais). Pour les semi-conducteurs à gap direct[1], le maximum de la bande de valence et le minimum de la bande de conduction sont au point Γ. En présence du couplage spin-orbite, l'hybridation des orbitales anti-liantes de type p donne naissance à une bande Γ_{8c} doublement dégénérée et une bande Γ_{7c} distante d'une énergie Δ_1. La bande de conduction contient donc une bande Γ_{6c} qui résulte de l'hybridation des orbitales de type s, et les deux bandes Γ_{8c} et Γ_{7c}. De manière similaire, la bande de valence contient une bande Γ_{8v} doublement dégénérée et une bande split-off Γ_{7v} distante d'une énergie Δ_0. On montrera dans la troisième section un schéma et les éléments de matrice du semi-conducteur III-V.

[1]Le travail de cette thèse est effectué avec ce type de semi-conducteur

I.2 Les hétérostructures

Depuis les premiers travaux en 1970 de L. Esaki et R. Tsu [5] sur les couches minces semi-conductrices, grâce à l'évolution de la nanotechnologie, la recherche fondamentale et appliquée sur les hétérostructures semi-conductrices a bien avancé. Les puits quantiques sont les premières structures réalisées. En 1978, pour la première fois la technique de dopage sélectif a été appliquée dans les hétérojonctions $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ par Dingle et Störmer [6]. Les multipuits quantiques et l'hétérojonction à dopage modulé font l'objet de nombreuses études dans la physique mésoscopique et elles sont également étudiées dans cette thèse. Sauf mention particulière, toutes les hétérostructures étudiées dans cette thèse sont épitaxiées suivant la direction Oz [001].

I.2.1 Hétérojonction à dopage modulé $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$

Le semi-conducteur intrinsèque est un semi-conducteur pur, c'est à dire dans lequel il y a très peu d'impuretés. Il ne conduit pas l'électricité à très basse température. Tous les électrons dans le cristal sont utilisés pour former les liaisons solides. Il n'y a pas d'électrons libres. Pour pouvoir conduire l'électricité, on devra introduire des porteurs (soit des électrons, soit des trous), cette étape est connue sous le nom de "dopage". Cependant, ce dopage introduit des impuretés qui diffusent très fortement les porteurs. Dans le cas du matériau massif, ce dilemme est infranchissable. Alors que dans le système bidimensionnel, on peut introduire une couche séparatrice appelée espaceur, qui permet de séparer les porteurs mobiles de leurs centres d'impuretés. Cette couche n'est pas très épaisse pour que les impuretés puissent transférer leurs porteurs, mais elle n'est pas non plus mince afin de diminuer l'interaction de Coulomb entre le centre d'impuretés et leurs porteurs. L'hétérojonction à dopage modulé est un système constitué de deux semi-conducteurs dont la bande interdite est différente. Pour le cas de $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$, elle est obtenue par la croissance sur un substrat GaAs d'épaisseur de l'ordre de 2 μm d'une succession de couches de grande bande interdite $Al_xGa_{1-x}As$ (qui jouent le rôle de barrières) et de couches de petite bande interdite GaAs (qui jouent le rôle de puits). Ces deux semi-conducteurs formant le puits et la barrière sont pratiquement en accord de maille. Ceci permet d'avoir des hétéro-interfaces sans défaut, sans contrainte et de hautes qualités. Au cours du processus de la croissance, les dopants[2] sont introduits dans la barrière, une couche séparatrice d'$Al_xGa_{1-x}As$ non-dopée est mise entre la barrière et le puits permettant de faire varier la mobilité des électrons situés à l'interface du GaAs et de l'$Al_xGa_{1-x}As$ (voir la figure I.2). L'épaisseur de cette couche séparatrice est de l'ordre de 15 nm. Du fait de la discontinuité de la bande de conduction (et la bande de valence) à l'interface, les donneurs transfèrent donc spontanément et irréversiblement leurs électrons dans le semi-conducteur de faible bande interdite (GaAs). Les porteurs du gaz bidimensionnel d'électrons (ou de trous) formés à l'interface d'$Al_xGa_{1-x}As$ et GaAs sont confinés suivant la direction de croissance z et

[2]On utilise du Si comme dopant si on veut avoir une hétérojonction de type n. Par contre, si on veut avoir une de type p, on utilise du Be.

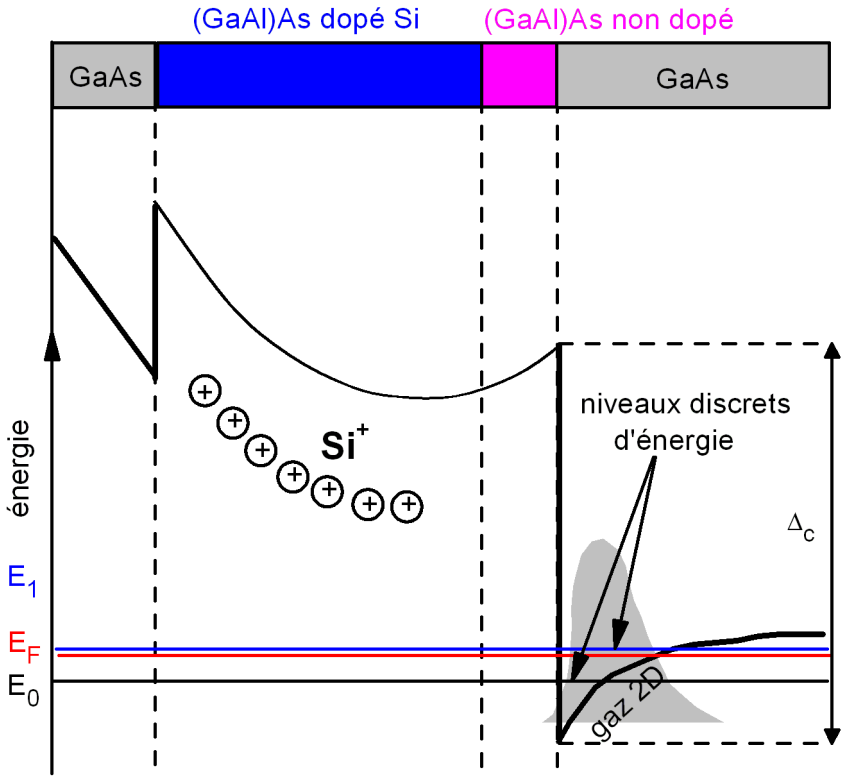


FIG. I.2: Alternance des couches déposées et profil des bandes d'une hétéro-jonction GaAs/$Al_xGa_{1-x}As$ et formation du gaz bidimensionnel d'électron (ou de trou) à l'interface entre GaAs et $Al_xGa_{1-x}As$. Les électrons (ou trous) sont maintenus contre $Al_xGa_{1-x}As$ par le champ électrique venant du dopants chargés (+) de silicium dans $Al_xGa_{1-x}As$.

sont libres dans les deux autres directions x, y. Les électrons sont confinés selon la direction z par un potentiel de confinement V(z). Ce potentiel est composé d'une part la discontinuité de la bande de conduction ΔE_c.Y(z) [3] et d'autre part du potentiel électrostatique $\phi(z)$ issu du processus de transfert de charges. Le potentiel électrostatique dépend de la charge d'espace $\rho(z)$ à l'interface et de la constante diélectrique ϵ suivant la loi de Poisson :

$$\frac{d^2\phi}{dz^2} = -\frac{\rho(z)}{\epsilon} \tag{I.1}$$

Nous nous intéresserons dans la suite, d'une part, à la dispersion d'énergie des sous-bandes de conduction, des sous-bandes de valence et au splitting de spin des sous bandes dans ces hétérojonctions. Et d'autre part, dans la deuxième partie de cette thèse, nous ferons des mesures de la magnétorésistance des fils quantiques réalisés à partir de gaz bidimensionnel d'électrons pour étudier le phénomène d'antilocalisation faible.

[3] Y(z) est une fonction Heaviside, qui vaut 1 si $z \geq 0$, et 0 si $z \leq 0$

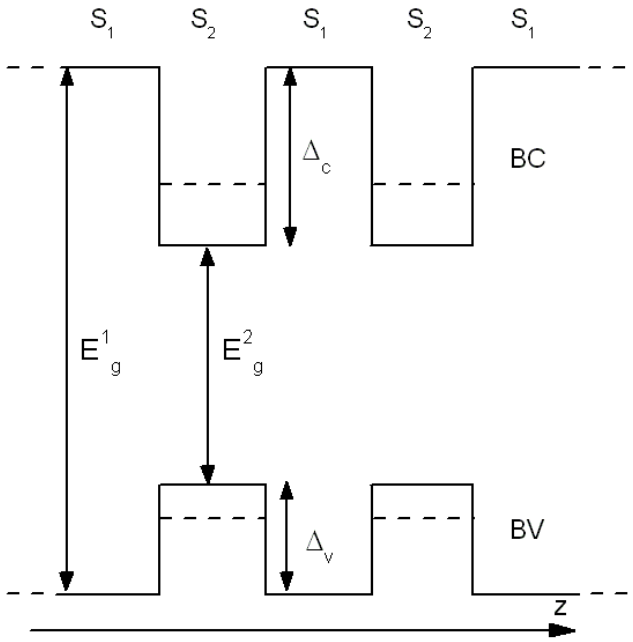


FIG. I.3: Profil de bande pour un multipuits quantique (ou super-réseau). Les niveaux d'énergies des états d'électron et de trous sont indiqués par les traits pointillés. Les notations Δ_c et Δ_v représentent l'offset de conduction et l'offset de valence.

I.2.2 Multipuits quantiques avec ou sans atome commun

Les structures à multipuits quantiques sont composés de plusieurs hétéro-interfaces entre deux semi-conducteurs S1 et S2 (par exemple S_1=InAs, S_2=AlSb) (voir la figure I.3). Ces deux semi-conducteurs sont en général en très bon accord de maille de sorte que la contrainte générée lors de la croissance est très faible. Plusieurs configurations sont possibles suivant la localisation de ces deux puits dans l'espace réel [7]. En raison du fait que les matériaux S_1 et S_2 sont des alliages ioniques, composés d'un anion et un cation (S_1=A_1C_1, S_2=A_2C_2), les interfaces entre S_1 et S_2 sont donc du type A_1-C_2 ou bien du type A_2-C_1. Différentes liaisons dipolaires sont ainsi formées, ce qui peut rendre le puits asymétrique. C'est à dire que ces liaisons dipolaires donnent lieu à différentes contributions à l'offset de bande[4]. La différence de composition de deux matériaux nous permet de classer les multipuits en deux types. Pour le premier, appelé multipuits **avec atome commun**, les deux matériaux massifs partagent la même anion : $C_1 \neq C_2$ et $A_1 = A_2$. Les multipuits GaAs/AlAs appartiennent bien à ce type. Par contre, dans le cas du deuxième, appelé multipuits **sans atome commun**, on a $A_1 \neq A_2$ et $C_1 \neq C_2$. Un bon exemple de ce deuxième type est le super-réseau InAs/AlSb. Une étude bien approfondie de ces interfaces est présentée dans les travaux d'Ivchenko [8, 9], ainsi que dans les thèses d'Olivier Krebs [10] et Sébastien Cortez [11].

[4]C'est la différence d'énergie entre les bandes (de conduction ou de valence) de deux matériaux.

I.3 Théorie k.p

Parmi les modèles qui ont été utilisés pour décrire la structure de bande et les propriétés optiques des hétérostructures au voisinage du centre Γ, le modèle **k.p** se révèle comme étant le plus efficace pour expliquer les effets délicats tels que le splitting de spin, la nonparabolicité des bandes, etc... Dans cette section, on décrira la théorie **k.p** et puis on étendra le modèle de Kane pour le cas de 14 bandes.

Depuis les années cinquante, la structure de bande a été décrite par plusieurs théoriciens. Différentes méthodes ont été développées sans qu'aucune jusqu'à présent ne se soit avérée la meilleure, chacune ayant ses avantages et ses inconvénients. Dans ces différentes approches, les paramètres ajustables jouent un rôle très important. Cela vient du fait que la théorie de Kohn-Hohenberg-Sham, si efficace dans les solides mais aussi en chimie, ne s'applique qu'aux états fondamentaux et non aux états excités. Le nombre de paramètres ajustables dépend du nombre de bandes que l'on veut décrire, suivant la précision que l'on juge nécessaire. Parmi ces méthodes, la théorie $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ a permis d'avoir des solutions analytiques dans certains cas et est donc plus intuitive que les autres méthodes. Par contre, elle n'a pas l'avantage de décrire toute la zone de Brillouin comme la méthode des combinaisons linéaires d'orbitales atomiques.

Dans la suite, on résume l'évolution du modèle $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ de sa naissance jusqu'à maintenant. L'abréviation $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ vient d'un article de Shockley paru en 1950 [12], dans lequel il décrivait la structure de bande des semi-conducteurs via la méthode $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ et via des perturbations du second ordre appliquées à un état dégénéré. C'est R. J. Elliot qui explicitait en premier les matrices utiles pour la bande de valence [13]. Ces matrices sont ensuite complétées par G. Dresselhaus, A. F. Kip et C. Kittel [16]. Dans les années qui suivirent, R. J. Elliot [14] et G. Dresselhaus [16] ont décrit la symétrie d'un certain points de la zone Brillouin des semi-conducteurs ne possédant pas de centre d'inversion (tel GaAs, CdTe) ou possédant d'un centre d'inversion : Ge, Si. Ces articles pionniers ont utilisé d'une façon ou d'une autre la renormalisation de Löwdin [17]. En 1956, J. M. Luttinger [18] a retrouvé les résultats concernant la bande de valence en utilisant la théorie des groupes. Dans cet article, il a introduit pour la première fois des paramètres dits de Luttinger sur lesquels nous insisterons, pour leur rôle dans notre modèle $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ à 14 bandes. Ces paramètres nous permettent de ternir compte des couplages entre des bandes lointaines via l'interaction $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$. Ensuite, en 1957 O. E. Kane [3] a décrit en détail le couplage entre la bande de conduction et la bande de valence. Il calculait pour la première fois la masse effective en fonction de l'énergie de la bande interdite et du couplage spin-orbite. Les matrices 8×8 de Luttinger et de Kane sont deux cas limites du hamiltonien complet de Pidgeon et Brown [19]. Ces deux auteurs ont étendu la théorie de Kane et de Luttinger pour décrire les niveaux couplés de Landau dans la bande de valence. Cet hamiltonien de Luttinger est ensuite décomposé en une somme d'hamiltoniens sphérique, axial, et cubique par A. Baldereschi, N. O. Lipari et M. Altarelli dans les années soixante-dix [20]. Ils ont ramené le problème de quatre équations différentielles à un système de deux équations différentielles couplées et mis en évidence la symétrie de la fonction d'onde.

Toute la théorie semblait connue jusqu'à l'élaboration des premières couches

minces semi-conductrices (1970). Et les puits quantiques furent les premières structures réalisées. Elles se distinguent le matériau massif par leur caractère bidimensionnel (2D) et la quantification partielle des excitations électroniques induites par le confinement. Par la suite, la réalisation de fils quantiques (semi-conducteur à une dimension, où les électrons sont libres dans une direction et confinés dans les deux autres), puis de boîtes quantiques (semi-conducteurs à zéro dimension, les électrons étant confinés dans les trois directions) où seul un ou quelques électrons (ou trous) sont piégés a permis la réalisation d'atomes artificiels. Le passage des semi-conducteurs massifs aux semi-conducteurs à basse dimensionnalité pose quelques problèmes dans la théorie, par exemple le raccordement des fonctions d'ondes [21] à la surface des hétérostructures, etc.

À la fin des années soixante-dix, C. Herman et C. Weisbuch [22] ont indiqué par des expériences de résonances de spin que le hamiltonien 8×8 de Luttinger ou de Kane ne suffit pas pour expliquer les valeurs de la masse effective dans la bande de conduction et de la constante de Landé dans le matériau massif GaAs. Les données de la résonance cyclotron à haut champ magnétique montrent clairement la non-parabolicité des bandes. Toutes ces caractéristiques ne peuvent pas être décrit par ce hamiltonien 8×8 qui ne tient pas compte des bandes de conductions lointaines. Pffefer et W. Zawadzki [23] ont récemment résolu ce problème en développant un modèle de 5 niveaux (c'est-à-dire qu'ils ont construit un Hamiltonien de taille 14×14). Cette base nous permet de tenir compte de manière précise de l'asymétrie d'inversion de la structure zinc blende qui est une des causes de dédoublement des niveaux d'énergie dans de telles hétérostructures. Ce dédoublement de l'énergie s'appelle splitting de spin. Le splitting de spin dans les sous-bandes de conduction et les sous-bandes de valence joue un rôle fondamental pour la spintronique.

Dans une première section, nous présenterons le principe général de la théorie $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ dans laquelle on précisera ses avantages et ses limites. La deuxième section sera consacrée plus spécifiquement au modèle de Kane étendu (on l'appelle aussi le modèle **k.p** à 14 bandes) qui est le coeur de la partie théorique de cette thèse. Nous expliciterons toutes les fonctions de Bloch utilisées. La dernière section traitera du choix des paramètres **k.p**.

I.3.1 Principe de la théorie

Le but de cette partie est de rappeler quelques idées principales de la théorie $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ (que l'on appelle souvent la méthode $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$). Dans cette théorie, les interactions entre bandes sont décrites via le terme $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$. C'est pour cette raison que l'on devrait comprendre la limite du nombre de bandes. On devrait décrire comment, pourquoi et quand les influences des bandes éloignées sur les bandes utiles deviennent négligeables. On présente souvent cette théorie par des calculs de perturbations du deuxième ordre, c'est à dire que l'on considère que le terme $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ est petit par rapport au Hamiltonien du cristal. Pour $\mathbf{k}$ de l'ordre de la largeur de la zone de Brillouin le terme $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ n'est pas une perturbation. Cependant la théorie est toujours utilisable. Dans plusieurs cas, notamment au voisinage de la première zone de Brillouin, cette théorie peut être utile pour expliquer les phénomènes délicats tels que la non-parabolicité des bandes, le splitting de spin des sous bandes, etc...Le

principe du calcul des perturbations est présenté dans les livres [24, 25]. On applique donc directement ses résultats aux semi-conducteurs.

Le Hamiltonien du cristal est écrit sous la forme générale :

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m_0} + V(\mathbf{r}) + H_{so} \tag{I.2}$$

Où m_0 désigne la masse de l'électron libre, H_{so} est le coulage spin-orbite qui est lié au moment cinétique $\mathbf{p}$ par l'expression[25] :

$$H_{so} = \frac{\hbar}{4m_0^2c^2}\sigma.\mathbf{p} \times \nabla V \tag{I.3}$$

V(r) est le potentiel cristallin qui est périodique sur tout le cristal. La périodicité du potentiel entraîne que les fonctions propres sont des fonctions de Bloch :

$$\psi_{nk} = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}u_{nk}(\mathbf{r}) \tag{I.4}$$

Où le vecteur d'onde $\mathbf{k}$ est limité dans la première zone de Brillouin, n est l'indice de bande. La partie périodique $u_{nk}(\mathbf{r})$ de la fonction de Bloch a la même périodicité que le potentiel $V(\mathbf{r})$. Sa variation spatiale dans une hétérostructure, c'est à dire d'une barrière à un puits est petite. En général, cette variation est négligée dans les modèles théoriques des hétérostructures. Ce qui, on le verra dans la suite, n'est pas tout à fait correct dans les puits quantiques où les matériaux du puits et de la barrière sont très différents (c'est le cas pour un puits quantique sans atome commun présenté ci-dessus). De cette factorisation, on dérive l'équation de Shrödinger pour la partie périodique u_{nk} :

$$\left[\frac{\mathbf{p}^2}{2m_0} + V(\mathbf{r}) + H'(\mathbf{k}) + H_{so}\right] u_{nk} = E_n(\mathbf{k})u_{nk} \tag{I.5}$$

où

$$H'(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2k^2}{2m_0} + \frac{\hbar}{m_0}\mathbf{k}.\mathbf{P} \tag{I.6}$$

$$\mathbf{P} = \mathbf{p} + \frac{\hbar}{4m_0c^2}\sigma \times \nabla\mathbf{V} \tag{I.7}$$

et $\sigma = (\sigma^x, \sigma^y, \sigma^z)$ est le vecteur des matrices de Pauli. Remarquons au passage qu'en présence du couplage spin-orbite, le nombre quantique de spin σ n'est plus le bon. Seul l'indice de bande n et le degré de liberté de spin permettent de classifier les bandes.

La théorie **k.p** consiste à traiter le terme $H'(k)$ comme une correction perturbative du hamiltonien $H(\mathbf{k} = 0)$ en développant la partie périodique u_{nk} sur une base complète et orthonormée des fonctions u_{n0} qui sont des fonctions propres du hamiltonien $H(\mathbf{k} = 0)$ avec des valeurs propres $E_n(\mathbf{0})$. On obtient par des calculs simples, l'équation vérifiée par les coefficients de développement $C_{nm\sigma}(k)$ de u_{nk} dans la base u_{n0} en tenant compte du spin :

$$\sum_{m',\sigma'}\left[\left(E_{m'}(\mathbf{0})+\frac{\hbar^2k^2}{2m_0}\right)\delta_{mm'}\delta_{\sigma\sigma'}+\frac{\hbar}{m_0}\mathbf{k}.\mathbf{P}^{\mathbf{mm'}}_{\sigma\sigma'}+\Delta^{mm'}_{\sigma\sigma'}\right]C_{nm'\sigma'}(\mathbf{k})=E_n(\mathbf{k})C_{nm\sigma}(\mathbf{k}) \tag{I.8}$$

avec

$$\mathbf{P}^{\mathbf{mm'}}_{\sigma\sigma'}=\langle m\sigma|\mathbf{P}|m'\sigma'\rangle \tag{I.9}$$

$$\Delta^{mm'}_{\sigma\sigma'}=\frac{\hbar}{4m_0^2c^2}\langle m\sigma|\mathbf{p}.\sigma\times\nabla V|m'\sigma'\rangle \tag{I.10}$$

Où $\mathbf{P}^{mm'}_{\sigma\sigma'}$ est le terme non-diagonal qui cause le mélange des états à $\mathbf{k}$=0 et $\Delta^{mm'}_{\sigma\sigma'}$ est l'élément de matrice du couplage spin-orbite qui donne naissance au splitting de spin du niveau dégénéré $E_n(\mathbf{k})$ même à $\mathbf{k}$=0.

La diagonalisation du système des équations I.8 permet d'avoir la relation de dispersion $E_n(\mathbf{k})$ exacte et les coefficients $C_{nm\sigma}(\mathbf{k})$. On en déduira les fonctions d'onde des porteurs. Cependant, le choix du nombre de bandes dépend du problème que l'on veut traiter. Par exemple, le hamiltonien 4×4 de Luttinger offre une description de la bande de valence Γ_8 qui est suffisante pour décrire le couplage trou lourd et trou léger. Le modèle de Kane [3] avec le hamiltonien 8×8 décrit bien la non-parabolicité des bandes de conduction. Par contre, il ne suffit pas à expliquer la valeur de la masse effective de la bande de conduction, le facteur de Landé dans le matériau massif GaAs et il ne peut pas rendre compte de l'asymétrie d'inversion du massif (BIA). On a donc besoin de l'étendre, d'une part pour expliquer la masse effective, le facteur de Landé de la bande de conduction. Et d'autre part, pour tenir compte correctement des effets d'anisotropie et de splitting de spin associés à l'asymétrie d'inversion des matériaux massifs.

I.3.2 Modèle de Kane étendu

Ce modèle donne une description détaillée de la structure de bande et les propriétés électroniques des structures quantiques auxquelles on s'intéresse. Dans le travail initial, Kane a choisi une combinaison linéaire des orbitales $|S\uparrow\rangle$, $|X\uparrow\rangle$,$|Y\uparrow\rangle$, $|Z\uparrow\rangle$, et $|S\downarrow\rangle$, $|X\downarrow\rangle$,$|Y\downarrow\rangle$, $|Z\downarrow\rangle$[5] comme la base des états propres à $\mathbf{k}$=0 avec un axe de quantification du moment cinétique total $\mathbf{J}$ suivant le vecteur d'onde $\mathbf{k}$. Pour le modèle de Kane étendu, explicité en premier par Zawadzki et Pffefer [23], les derniers ont pris en considération des orbitales liantes type p de la bande de valence Γ_{8v}, Γ_{7v} (X, Y, Z) et les orbitales anti-liantes type s et type p des bandes de conduction Γ_{8c}, Γ_{7c}, Γ_{6c} (X', Y', Z'). Les fonctions de base u_n, dans ce cas, sont présentées dans le tableau I.1. Ces fonctions sont choisies pour diagonaliser le couplage spin-orbite. La figure I.4 esquisse qualitativement les bandes de ce modèle. Le couplage entre ces bandes correspond aux éléments matrices non-diagonales $\mathbf{P}^{mm'}_{\sigma\sigma'}$ et aux couplages spin-orbite $\Delta^{mm'}_{\sigma\sigma'}$ qui sont décrits dans la partie précédente. En raison de la symétrie des orbitales de base, certains couplages sont nuls. Les termes non-nuls sont, à une permutation circulaire près portant sur X,Y,Z :

[5]Les flèches représentent l'état du spin de porteur.

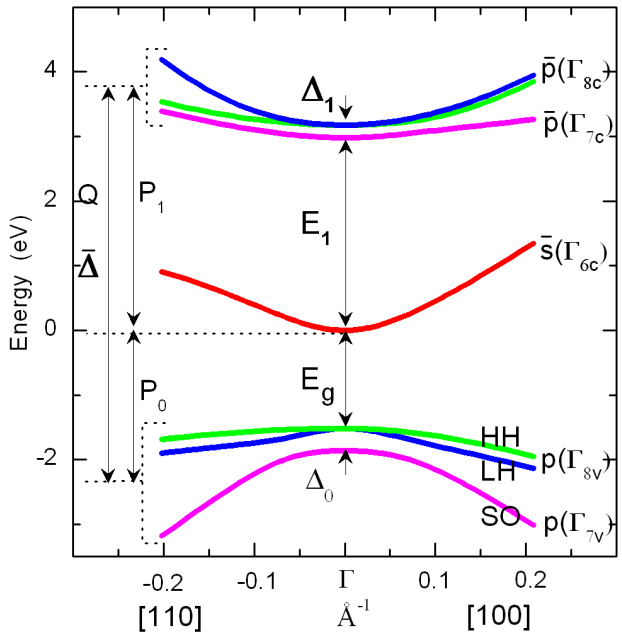


FIG. I.4: Diagramme de bande d'un semi-conducteur III-V proche du centre Γ de la zone de Brillouin. Les notations utilisées dans cette thèse sont précisées.

$$P = \frac{-i\hbar}{m_0}\langle S|p_x|X\rangle \tag{I.11}$$

$$P_1 = \frac{-i\hbar}{m_0}\langle S|p_x|X'\rangle \tag{I.12}$$

$$Q = \frac{-i\hbar}{m_0}\langle X|p_y|Z'\rangle \tag{I.13}$$

$$\Delta_0 = -\frac{3i\hbar}{4m_0^2c^2}\langle X|[(\nabla V \times \mathbf{p})]_y|Z\rangle \tag{I.14}$$

$$\Delta_1 = -\frac{3i\hbar}{4m_0^2c^2}\langle X'|[(\nabla V \times \mathbf{p})]_y|Z'\rangle \tag{I.15}$$

$$\bar{\Delta} = -\frac{3i\hbar}{4m_0^2c^2}\langle X|[(\nabla V \times \mathbf{p})]_y|Z'\rangle \tag{I.16}$$

Où l'élément matrice du moment P_1 entre la bande de conduction Γ_{6c} et les bandes de conductions lointaines (Γ_{8c}, Γ_{7c}) et le couplage spin-orbite $\bar{\Delta}$ entre (Γ_{8c}, Γ_{7c}) et (Γ_{8v}, Γ_{7v}) dépendent fortement de l'ionicité des cations et anions des matériaux III-V. Ces deux termes disparaissent dans un cristal centrosymétrique tels que Ge, Si. Dans une étude récente [26], par les calculs en "tight binding", les auteurs estiment que la valeur de P_1 est 10 fois plus faible que celle standard[6] alors que la valeur de $\bar{\Delta}$ est 3 fois plus grande[7].

[6] C'est à dire la valeur tabulée dans le Landolt-Börnstein.

[7] Ce couplage spin-orbite vaut -0.166 meV dans le calcul en tight binding, et il vaut -0.061 meV selon le tableau Landolt-Börnstein.

J_z	u_n	J	u_n	J_z
$\frac{1}{2}$	u_1=$\sqrt{\frac{1}{3}}R'_+ \downarrow -\sqrt{\frac{2}{3}}Z' \uparrow$	$\frac{3}{2}$	$u_8 = \sqrt{\frac{1}{3}}R'_- \uparrow +\sqrt{\frac{2}{3}}Z' \downarrow$	$-\frac{1}{2}$
$\frac{3}{2}$	$u_2 = \sqrt{\frac{1}{3}}R'_+ \uparrow$	$\frac{3}{2}$	$u_9 = -\sqrt{\frac{1}{3}}R'_- \downarrow$	$-\frac{3}{2}$
$\frac{1}{2}$	$u_3 = \sqrt{\frac{2}{3}}R'_+ \downarrow +\sqrt{\frac{1}{3}}Z' \uparrow$	$\frac{1}{2}$	$u_{10} = \sqrt{\frac{2}{3}}R'_- \uparrow -\sqrt{\frac{1}{3}}Z' \downarrow$	$-\frac{1}{2}$
$\frac{1}{2}$	$u_4 = iS \uparrow$	$\frac{1}{2}$	$u_{11} = iS \downarrow$	$-\frac{1}{2}$
$\frac{1}{2}$	$u_5 = \sqrt{\frac{1}{3}}R_+ \downarrow -\sqrt{\frac{2}{3}}Z \uparrow$	$\frac{3}{2}$	$u_{12} = \sqrt{\frac{1}{3}}R_- \uparrow +\sqrt{\frac{2}{3}}Z \downarrow$	$-\frac{1}{2}$
$\frac{3}{2}$	$u_6 = \sqrt{\frac{1}{3}}R_+ \uparrow$	$\frac{3}{2}$	$u_{13} = -\sqrt{\frac{1}{3}}R_- \downarrow$	$-\frac{3}{2}$
$\frac{1}{2}$	$u_7 = \sqrt{\frac{2}{3}}R_+ \downarrow +\sqrt{\frac{1}{3}}Z \uparrow$	$\frac{1}{2}$	$u_{14} = \sqrt{\frac{2}{3}}R_- \uparrow -\sqrt{\frac{1}{3}}Z \downarrow$	$-\frac{1}{2}$

TAB. I.1: Les fonctions périodiques u_n utilisées dans le modèle de Kane étendu et les moments cinétiques J et J_z correspondants. Dans cette base canonique, les notations $R_\pm$ et $R'_\pm$ représentent $\frac{X\pm iY}{\sqrt{2}}$ et $\frac{X'\pm iY'}{\sqrt{2}}$ respectivement.

Après avoir défini la base des fonctions périodiques, on peut donc trouver la dispersion des bandes ainsi que les fonctions d'ondes en résolvant le système des équations (I.8). Ceci nécessite de diagonaliser la matrice 14×14 obtenue par Zawadzki et Pffefer [23]. Cette matrice que l'on appelle M peut se décomposer en deux parties : l'une contient des paramètres de Luttinger[8] M_L, l'autre M_{NL} ne les contient pas. La matrice contenant les paramètres de Luttinger représente le couplage entre la bande de trou lourd Γ^h_{8v}, la bande de trou léger Γ^l_{8v} et celle split-off Γ_{7v}. En fait, lorsque l'on considère un modèle **k.p** à n bandes, on a une matrice n×n qui contient deux parties : l'une est exacte qui représente le couplage entre les bandes principales et l'autre est perturbative qui représente le couplage entres des bandes lointaines. C'est la partie perturbative qui contient les paramètres de Luttinger et chaque fois que l'on change la valeur de n, on devrait renormaliser ces paramètres. Ici, on néglige les paramètres de Luttinger représentant l'interaction entre les bandes de conductions. Cette décomposition peut nous permettre de s'apercevoir, dans les calculs sur les hétérostructures sans atome commun, l'importance de la différence des paramètres de Luttinger dans le puits et la barrière. Ces paramètres ont effectivement très peu d'influence sur l'absorption optique, ce qui veut dire qu'ils n'affectent pas l'anisotropie optique des multipuits sans atome commun.

I.3.3 Choix des paramètres k.p

Le choix des paramètres **k.p** pour notre calcul se fait sur le fait que les résultats obtenus en utilisant des différents ensembles de paramètres sont proches ou non de l'expérience. Il existe trois ensembles de paramètres : les paramètres issus de la méthode des liaisons fortes (qui seront notés TB), les paramètres standards, qui sont

[8]Ce sont des paramètres qui permettent de déterminer des termes de couplage, quadratiques en **k**, entre des bandes dans le modèle de Luttinger. Ils sont déterminés expérimentalement, par exemple par des mesures magnéto-optique, ou théoriquement par la méthode des liaisons fortes.

		TB[26]	Rössler[27]	Zawadzki[23]
E_0 (eV)	$\Gamma_{6c} - \Gamma_{8v}$	1.519	1.519	1.519
Δ_0 (eV)	$\Gamma_{8v} - \Gamma_{7v}$	0.341	0.341	0.341
E_1 (eV)	$\Gamma_{7c} - \Gamma_{6c}$	2.981	2.969	2.969
Δ_1 (eV)	$\Gamma_{8c} - \Gamma_{7c}$	0.198	0.171	0.171
$\bar{\Delta}$ (eV)	off-diagonal SO splitting	-0.166	-0.11	-0.061
P (eV.Å)	$< \Gamma^v_{15,x} \vert p_x \vert \Gamma_1 >$	9.88	10.493	10.298
P_1 (eV.Å)	$< \Gamma^c_{15,x} \vert p_x \vert \Gamma_1 >$	0.404	4.78	3
Q (eV.Å)	$< \Gamma^c_{15,y} \vert p_y \vert \Gamma^v_{15,z} >$	8.682	8.165	7.646
γ_1	Luttinger parameter	7.48	6.85	8.56
γ_2	Luttinger parameter	2.17	2.1	2.9
γ_3	Luttinger parameter	3.15	2.9	3.74
C		-0.878	-0.939	-1.075

TAB. I.2: Paramètres **k.p** de GaAs extraits de la méthode des liaisons fortes (TB [26]) et ceux utilisés par Zawadzki et Pffefer [23] , et par Rössler [27] (Ils sont tabulés dans le Landolt-Börnstein)

utilisés par Pffefer er Zawadzki [23] (qui seront notés PZ), et les derniers sont utilisés par Rössler et Mayer [27] (on les notera RM). Les paramètres **k.p** utilisés dans ce modèle de Kane étendu pour le GaAs sont présentés dans le tableau I.2. Les deux derniers viennent principalement du tableau de Landolt-Börnstein. Il est important de remarquer que le coefficient C dans ce tableau est introduit dans le modèle pour tenir compte l'effet des bandes lointaines sur les états fondamentaux. Ce coefficient est défini en premier par C. Hermann et C. Weisbuch [22] et il sert à expliquer le comportement de la masse effective des électrons dans la bande de conduction m_0^* et le facteur de Landé effectif g_0^*.

Dans la suite de ce travail, sauf mention particulière, ces nouveaux paramètres déduits de la méthode des liaisons fortes seront utilisés pour calculer la structure de bande, la dispersion de bande des semi-conducteurs III-V, ainsi que les propriétés électroniques des hétérostructures considérées. Les résultats seront comparés avec ceux obtenus en utilisant deux autres ensembles de paramètres.

I.4 Bibliothèque numérique

La bibliothèque numérique que j'ai développée au cours de cette thèse, est un ensemble de routines écrites spécifiquement en Mathematica (et éventuellement en C++.). Elle est utilisée, d'une part, pour la diagonalisation exacte des hétérostructures de semi-conducteurs III-V, d'autre part pour l'étude des propriétés électroniques et optiques de ces hétérostructures. Elle contient des classes d'objets mathématique comme matrice, liste des vecteurs, ...ainsi que les programmes basés sur la méthode **k.p** dans les systèmes quantiques contenant le spin de l'électron.

Tous les calculs effectués au cours de cette thèse ont été basés sur cette bibliothèque. Le schéma I.5 montre son organisation et son fonctionnement. Il est important de remarquer que la diagonalisation des matrices sous Mathematica est très lente, même irréalisable, si la taille des matrices dépasse une limite de l'ordre de 10000×10000.

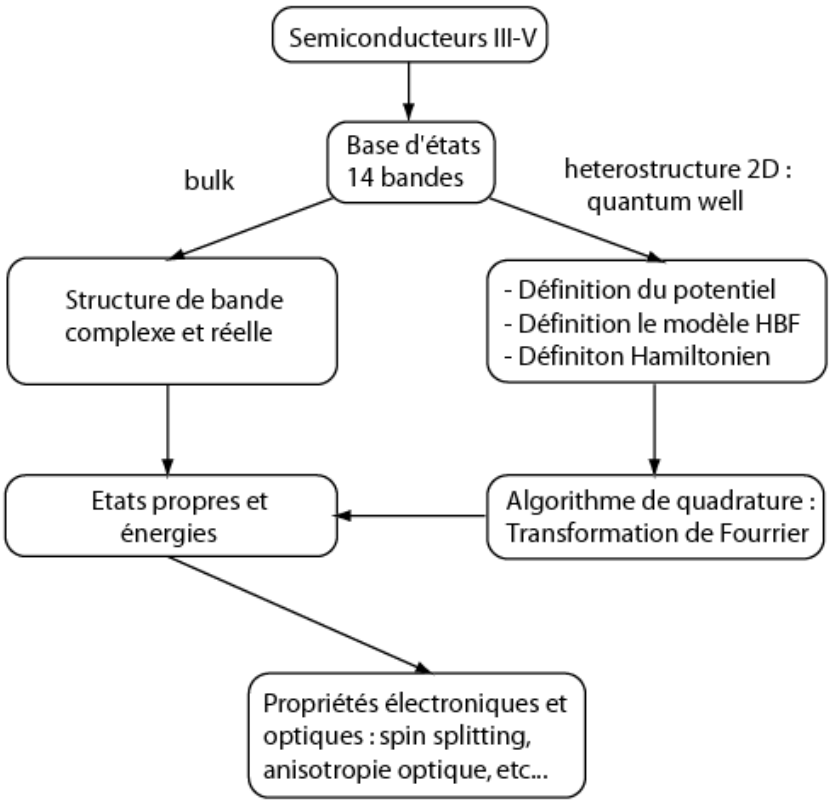


FIG. I.5: L'organisation et le fonctionnement de la bibliothèque.

I.5 BIA Splitting de spin

Dans un semi-conducteur massif, en tenant compte du spin de l'électron, les états des électrons et des trous sont spin-dégénérés s'il n'existe pas de mécanisme qui brise les opérations de symétrie. Cette dégénérescence de spin signifie que l'énergie d'un état de "spin up" d'une sous-bande est égale à celle d'un état de "spin down" de la même sous-bande : $E_\uparrow(\mathbf{k})$=$E_\downarrow(\mathbf{k})$. Cependant, l'interaction spin-orbite donne lieu à un terme qui est responsable de la levée de dégénérescence de spin. L'existence de ce terme est due à l'absence de centre d'inversion de la structure cristalline blende de zinc. À cause de cette absence, ce terme est désigné par une expression en anglais : "bulk inversion asymmetry" et on le note souvent BIA. En 1955, dans un fameux papier du journal "Physical. Review." [28], G. Dresselhaus a introduit ce terme de couplage spin-orbite qui est proportionnel au cube du vecteur d'onde avec un coefficient de proportionnalité γ, d'où la dénomination "terme de Dresselhaus" qui lui est souvent attribuée. Ce terme est obtenu par la théorie **k.p** au troisième ordre ou par la théorie des invariants [29]. L'expression de ce terme est :

$$H_D = \gamma.\sigma.B(\mathbf{k}) \tag{I.17}$$

avec

$$B(\mathbf{k}) = k_x(k_y^2 - k_z^2)\mathbf{e_x} + k_y(k_z^2 - k_x^2)\mathbf{e_y} + k_z(k_x^2 - k_y^2)\mathbf{e_z}$$

où $\mathbf{e}_x$, $\mathbf{e}_y$, $\mathbf{e}_z$ sont les vecteurs unitaires d'une base orthonormée choisie suivant les axes cristallographiques. γ est le coefficient correspondant à la bande considérée et il dépend du matériau. Ce coefficient est proportionnel au produit $P_0.P_1.Q$ pour toutes les bandes. Ceci signifie que le BIA splitting dépend du couplage **k.p** entre les bandes de valence $\Gamma_{7v,8v}$ et les bandes de conduction $\Gamma_{6c,7c,8c}$, et on en déduit donc qu'il a le même ordre de grandeur pour les états des électrons et de trous. De plus, il est nul dans les matériaux centrosymétriques tels que le Ge et le Si (car P_1 vaut 0 dans ces matériaux). Le terme $B(\mathbf{k})$ joue le rôle du champ magnétique interne. L'interaction entre le moment magnétique de spin d'électron et ce champ conduit à un phénomène de relaxation de spin de type Dyakonov-Perel [30]. On peut remarquer que ce vecteur du champ magnétique interne est normal au vecteur d'onde de l'électron $\mathbf{k}$: on a en effet $\mathbf{B(k)}.\mathbf{k}$=0

Le BIA splitting de spin disparaît pour tous les électrons et trous si le vecteur d'onde $\mathbf{k}$ est parallèle à la direction [001]. Ceci peut être vérifié par l'expression (I.17), ou bien par la théorie des groupes. Lorsque $\mathbf{k}$ est parallèle à [110], le splitting de spin pour la bande de trou lourd s'annule, ce résultat est présenté dans la prochaine section. Pour la même raison, le BIA splitting de spin est nul pour les électrons et trous légers si $\mathbf{k}$ est parallèle à la direction [111].

Il est utile de noter que le coefficient de Dresselhaus a été mesuré par l'analyse de l'effet Shubnikov de Haas dans le matériau massif InSb avec une contrainte uniaxiale [31]. Dans le GaAs, il est obtenu par la détection de précession de la polarisation de spin d'un électron photo-excité de la surface (110), et par l'étude de la localisation faible que nous utiliserons également dans la deuxième partie de cette thèse [32, 33, 34].

I.6 Résultats numériques

Dans cette section, nous présentons les résultats numériques obtenus à partir du modèle de Kane étendu expliqué dans la section précédente pour 9 semi-conducteurs III-V : AlAs, GaAs, InAs, AlP, GaP, InP, AlSb, GaSb, InSb. L'étude des paramètres caractéristiques de la bande de conduction tels que la masse effective m_0^* et le splitting de spin ont été beaucoup étudié théoriquement et expérimentalement, surtout dans GaAs. Par contre, il y a très peu d'étude dans la bande de valence. Ceci résulte d'une part de la complexité du sommet de cette bande et d'autre part du manque des bons paramètres **k.p**. C'est pour cette raison que l'on concentrera dans la suite sur les caractéristiques de la bande de valence. De plus, il est important de noter que récemment il y a une augmentation du nombre d'études sur les états des trous dans les nanostructures semi-conductrices, par exemple les études de l'effet Hall de spin dans le gaz de trou bidimensionnel, etc. Nous calculons tout d'abord la masse effective de la bande de trou lourd, de trou léger et de split-off. Ces valeurs de masse effective seront comparées avec le calcul précédent de Cardona [35][9]. Ensuite, nous illustrerons le splitting de spin dû à l'asymétrie d'inversion du matériau massif (le terme BIA) en calculant les trois coefficients caractéristiques γ_{hh}, γ_{lh}, γ_{so} des bandes de Γ_{8v}^h, Γ_{8v}^l et Γ_{7v} respectivement[10]. Dans cette partie, nous essayons de tirer les grandes lignes sur la paramètrisation des paramètres **k.p** sans entrer dans le détail.

I.6.1 Masse effective des bandes de valence

Dans cette section, nous calculons la masse effective des sous-bandes de valence suivant la direction [110] en utilisant les deux ensembles de paramètres TB et PZ. On compare ensuite notre résultat avec celui obtenu par le calcul de Cardona. Ils ont effectué leurs calculs par la méthode "linear muffin-tin orbitals" et par la méthode **k.p** à 16 bandes avec les paramètres de Rössler et Mayer (RM).

Avant d'entrer dans le détail du résultat, nous proposons de vérifier le premier ensemble de paramètres TB en calculant la masse effective de la bande de conduction Γ_{6c} du GaAs, le semi-conducteur le mieux connu. La théorie de perturbation au deuxième ordre nous permet d'avoir une expression analytique de cette masse [23] :

$$\frac{m_0}{m_0^*} = 1 - \frac{1}{3}\left[E_{P_0}\left(\frac{2G_1'}{E_0G_1} + \frac{E_1'}{E_1G_0}\right) + E_{P_1}\left(\frac{2E_0'}{E_0G_1} + \frac{G_0'}{E_1G_0}\right) + \frac{4}{3}\bar{\Delta}\sqrt{E_{P_0} * E_{P_1}}\left(\frac{1}{E_1G_0} - \frac{1}{E_0G_1}\right)\right] + C \quad \text{(I.18)}$$

Où $E_{P_0} = P_0^2/2m_0$, $E_{P_1} = P_1^2/2m_0$ et les paramètres G_1', E_1', G_1, G_0 sont identiques à ceux utilisés dans le papier [23].

On présente sur le tableau I.3 la valeur de cette masse calculée avec trois ensembles de paramètres. On voit bien que le résultat correspondant aux paramètres

[9]Dans son calcul Cardona a utilisé la méthode "linear muffin-tin orbitals" (LMTO) qui est fiable pour ce type de calcul et qui nécessite une technique particulière pour l'ajustement du fait de l'inexactitude inévitable du gap dans le calcul de la fonctionnelle de la densité. Cela aboutit à

Paramètres	TB[26]	Rössler[27]	Zawadzki[23]	Expérience
m_0^* (m_0)	0.0664	0.066	0.0653	0.067

TAB. I.3: La masse effective de la bande de conduction Γ_{6c} du GaAs (en unité de la masse de l'électron libre m_0.) calculée avec trois ensembles différents de paramètres.

	Méthode	AlAs	GaAs	InAs	AlP	GaP	InP	AlSb	GaSb	InSb
	LMTO		0.61				0.52		0.41	0.49
	k.p[a]		0.73				0.66		0.45	0.49
m^*_{hh}	Exp		0.57				0.6		0.37	0.45
	k.p[b]	0.86	0.67	0.9	0.93	0.68	0.656	0.7	0.46	0.5
	LMTO		0.096				0.1		0.06	0.019
	k.p[a]		0.085				0.13		0.044	0.017
m^*_{lh}	Exp		0.082				0.12		0.042	0.016
	k.p[b]	0.028	0.077	0.031	0.17	0.13	0.098	0.11	0.044	0.017
	LMTO		0.2				0.18		0.1	0.15
	k.p[a]		0.18				0.2		0.13	0.098
m^*_{so}	Exp		0.17				0.12		0.13	
	k.p[b]	0.156	0.16	0.098	0.27	0.21	0.16	0.23	0.14	0.13

[a] modèle 16×16
[b] modèle 14×14

TAB. I.4: La masse effective (en unité de la masse de l'électron libre m_0.) de la bande Γ^v_{15} calculée par le modèle de Kane étendu, comparée avec le résultat de Cardona et les résultats expérimentaux dans [35], pour le vecteur d'onde $\mathbf{k}//[110]$.

TB est en meilleur accord avec la valeur expérimentale. De plus, les auteurs de ces paramètres montrent qu'ils offrent une bonne description de la structure de bande du GaAs en comparant avec les calculs complets de la méthode des liaisons fortes. C'est pour cette raison que nous les utilisons dans cette thèse.

Le tableau I.4 présente la masse effective des sous-bandes de valences suivant la direction $\mathbf{k}//[110]$ calculée par le modèle de Kane étendu (les chiffres en rouge) et par les autres méthodes. Pour obtenir ces valeurs de la masse effective, nous avons résolu numériquement[11] le Hamiltonien 14×14 et ensuite nous avons effectué un ajustement en k^2 sur une région du centre Γ où le vecteur d'onde est de l'ordre de $|k| < 0.01\text{Å}^{-1}$ suivant la direction [110]. On voit bien que les résultats obtenus sont en accord avec le calcul LMTO et avec les résultats expérimentaux. Cet accord est surtout excellent pour l'InP. Ceci prouve, une fois encore, que les paramètres TB méritent d'être utilisés dans cette thèse.

la question de l'estimation des éléments de matrices exigés par la méthode **k.p**

[10] En fait, le terme BIA est proportionnel au cube du vecteur d'onde $\mathbf{k}$, et le coefficient de proportionnalité est noté γ. On parlera de trois types de splitting de spin dans le chapitre III.

[11] Autrement dit, nous avons utilisé une approximation parabolique.

I.6.2 Splitting de spin des bandes de conduction et des bandes de valence

BIA de la bande de conduction

Dans cette section nous allons seulement refaire des calculs numériques du coefficient cubique de Dresselhaus pour les 9 semi-conducteurs par la méthode **k.p** à 14 bandes en utilisant l'ensemble de paramètres TB. Nous effectuerons la résolution numérique du hamiltonien 14×14 et puis nous déduisons le coefficient γ_c par un ajustement de l'énergie de bande de conduction obtenue au terme cubique k^3. Cet ajustement se fait dans la région $|k| < 0.01$ Å^{-1} autour du centre Γ de la zone de Brillouin. Le tableau I.5 présente les coefficients γ_c calculés par la méthode **k.p**, par la méthode des liaisons fortes et par les mesures expérimentales. Le signe positif et négatif de γ_c est associé au fait que l'état de symétrie X_4 est au-dessus ou au-dessous de son état partenaire X_3 [35]. On remarque que les deux résultats numériques sont en meilleur accord avec la valeur expérimentale. En particulier, le résultat **k.p** pour InSb est plus proche la valeur expérimentale que celui TB. Pour GaAs, le calcul numérique donne γ_c=23.7 eV. Å^3 et pour InAs le semi-conducteur considéré comme le plus prometteur dans la spintronique, ce coefficient n'est pas encore mesuré, sa valeur théorique obtenue par notre modèle **k.p** à 14 bandes vaut 41.7 eV.Å^3. Notons que le coefficient γ_c peut être mesuré par plusieurs méthodes expérimentales, par exemple l'expérience basée sur la relaxation du spin (mécanisme de Dyakonov-Perel).

La figure I.6(a) montre le splitting de spin le long de la direction [110]. Il est proportionnel au $\gamma_c k^3$ aux alentours du centre Γ, alors que à grande valeur du vecteur d'onde[12] (ou bien à grande valeur de l'énergie) l'effet de la nonparabolicité et les termes d'ordre supérieur peuvent masquer la dépendance $(E - E_0)^{3/2}$.

		AlAs	GaAs	InAs	AlP	GaP	InP	AlSb	GaSb	InSb
γ_c	Exp	-	17.4-26[a]	-	-	-	±(7.3-9.5)[b]	-	±185[b]	226[c]
	k.p[d]	11.4	23.7	41.7	2	-2.4	-9.7	38.2	167	240
	TB	10.6	23.6	42.3	1.9	-1.4	-8.6	39.3	168	389

[a]Ref. [36]
[b]Ref. [37]
[c]Ref. [38]
[d]modèle 14 × 14

TAB. I.5: Les coefficients cubiques du splitting de spin de la bande de conduction Γ_{6c} (en unité eV.Å^3) sont calculés par **k.p** en utilisant un Hamiltonien 14 × 14 avec les paramètres extraits de la méthode des liaisons fortes (TB). Les résultats sont comparés à ceux obtenus par la méthode des liaisons fortes, et par les mesures expérimentales.

[12]D'après les calculs de Zawadzki [23], le splitting de spin est bien décrit pour un vecteur d'onde $|k| < 2.5.10^7 cm^{-1}$

BIA de la bande de valence

	Méthode	AlAs	GaAs	InAs	AlP	GaP	InP	AlSb	GaSb	InSb
	LMTO	0	0	0	0	0	0	0	0	0
	k.p[a]	0	0	0	0	0	0	0	0	0
γ_{hh}	k.p[b]	0	0	0	0	0	0	0	0	0
	ab initio									
	LMTO		40.5				-124		148	256
	k.p[a]		112				-112		256	672
γ_{lh}	k.p[b]	17	48.6	76.3	32.2	41.4	-125	142.6	185.4	307.7
	ab initio		90							100
	LMTO		20.8				-100		54.4	48
	k.p[a]		72				-84		104	160
γ_{so}	k.p[b]	28.9	60.9	41.1	25.7	32.6	-96.4	45.3	85.5	67.5
	ab initio		45							90

[a]modèle 16×16
[b]modèle 14×14

TAB. I.6: Les coefficients cubiques du splitting de spin des bandes de trou lourd (en unité meV.Å^3) (Γ^h_{8v}), de trou léger (Γ^l_{8v}) et de split-off (Γ_{7v}) (en unité eV.Å^3) le long de la direction [110] sont calculés par **k.p** en utilisant un Hamiltonien 14×14 avec les paramètres extraits de la méthode des liaisons fortes (TB). Les résultats sont comparés à ceux obtenus par la méthode LMTO, par le modèle **k.p** 16×16, et par le calcul ab initio pseudo-potentiel.

Dans la suite de cette section, nous serons amenés à nous intéresser aux calculs de splitting de spin dans la bande de valence dans le régime où le vecteur d'onde $|k| \leq 0.01$Å^{-1} pour 9 semi-conducteurs III-V différents. Les coefficients linéaire et cubique de l'énergie de splitting de spin sont calculés par un ajustement (un "fit" en anglais) jusqu'à 100 points sur une région du centre Γ au point de l'ordre de 0.01 Å^{-1} suivant la direction [110]. On se rend compte que le terme cubique de l'énergie du splitting de spin de trou lourd est presque nul. Cette bande clive en spin à un ordre supérieur que k^3 (k^5, etc). Ce résultat est exactement celui obtenu par le calcul analytique et par les calculs numériques de Cardona [35]. On peut voir sur la figure I.6(b) que l'on a seulement un terme linéaire du splitting d'énergie de trou lourd. Si on ajuste l'énergie du splitting de trou lourd à un terme linéaire et un terme cubique, on trouve que le coefficient cubique est de l'ordre de 0.001 meV.Å^3 pour tous ces semi-conducteurs. Il est donc très faible et on peut le considérer comme nul. Le terme linéaire présent dans toutes les bandes, avec un coefficient C_k, et il est provoqué par un terme bilinéaire perturbatif au deuxième ordre inclus dans les hamiltoniens **k.p** et H_{so}.

Dans le cas de la bande de trou léger et de la bande split-off, nous avons utilisé seulement un ajustement cubique pour déterminer les coefficients γ correspondants. On s'aperçoit que les termes d'ordre 5 et d'ordre supérieur jouent un rôle significatif. Les valeurs des coefficients cubiques du splitting de spin sont présentées dans le

tableau dans lequel on cite également les résultats calculés par Cardona *et al.* On voit bien un accord entre leurs résultats et les nôtres. Il est important de remarquer que pour deux semi-conducteurs usuels GaAs et InP, la valeur de γ_{lh} est en excellent accord avec le calcul LMTO.

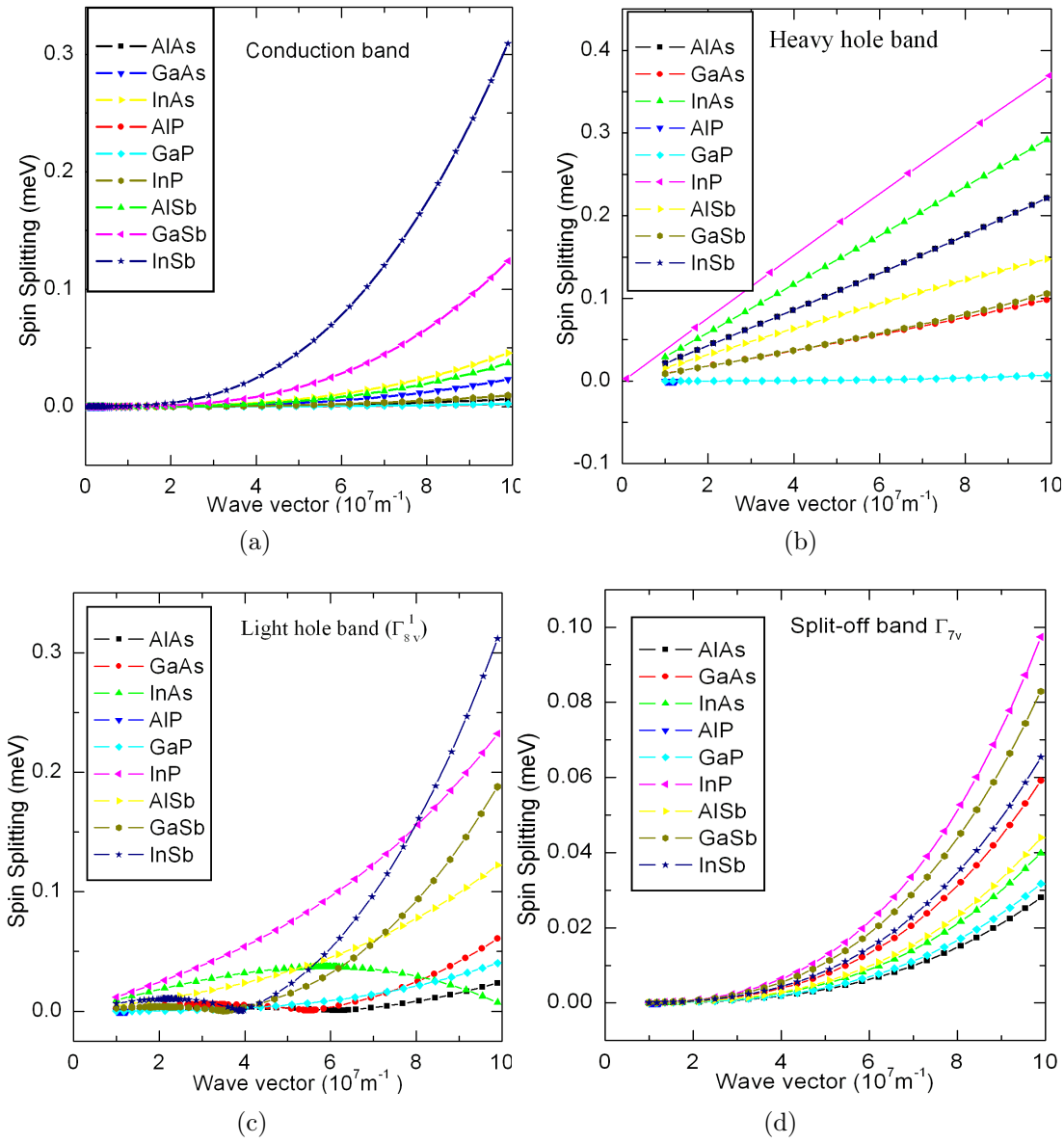


FIG. I.6: Splitting de spin de la bande de conduction (a), de la bande de trou lourd (b), trou léger (c) et split-off (d) de neuf semi-conducteurs III-V. Ces courbes sont obtenues en utilisant la méthode **k.p** et le nouvel ensemble de paramètres TB. Le vecteur d'onde est orienté selon la direction [110].

I.7 Conclusion

Ce chapitre d'introduction a présenté la motivation du travail théorique de cette thèse. Nous avons brièvement présenté les propriétés des hétérostructures que l'on étudiera tout au long de la thèse. En particulier, nous nous intéressons à l'énergie de splitting de spin des sous-bandes de conduction et de valence dans les semiconducteurs massifs III-V.

En utilisant le modèle de Kane étendu et les nouveaux paramètres **k.p** issus de la méthode des liaisons fortes, nous avons montré que notre résultat sur les masses effectives dans la bande de valence et le coefficient cubique du splitting de spin dans les sous-bandes de valence sont en meilleur accord avec les anciens résultats. Ce nouvel ensemble de paramètres **k.p** est ainsi prometteur pour les calculs des propriétés électroniques dans les hétérostructures.

Chapitre II

États évanescent du GaAs

Récemment, le couplage spin-orbite a fait l'objet de plusieurs recherches théoriques et expérimentales. Il couple le spin de l'électron et son mouvement orbital, et ouvre donc la voie au développement d'une nouvelle génération de dispositifs d'électronique de spin. Parmi les dispositifs prometteurs, la diode tunnel dépendante de spin a un bon avenir [39]. Le fonctionnement de cette diode dépend du mécanisme de l'effet tunnel, donc des états évanescents à travers une barrière. Par contre, les effets associés à la structure de bande complexe des semi-conducteurs en présence de l'interaction spin-orbite ne sont pas encore détaillés. Nous nous intéressons dans ce chapitre à explorer en détail la structure de bande complexe du GaAs (bien évidemment cette étude est valable pour tous les semi-conducteurs III-V qui ne possèdent pas de centre d'inversion.) en utilisant la théorie **k.p** à 14 bandes. En effet, la structure de bande complexe a été décrite la première fois par Heine [40]. Il a montré que l'énergie propre E(**k**) du hamiltonien du cristal peut s'exprimer en fonction d'un vecteur d'onde complexe **k**. La relation de dispersion contenant un tel vecteur d'onde complexe s'appelle la structure de bande complexe, et elle décrit le comportement d'un électron traversant une région où son énergie E se trouve dans la bande interdite.

Après une brève présentation de la motivation de l'étude suivie par le principe de calcul, nous allons recalculer dans un premier temps, en détail, la structure de bande complexe le long des directions [001] et [111] suivant lesquelles le terme principal en k^3 du splitting de spin de la relation dispersion des sous-bandes de conduction et de valence de la structure de bande réelle s'annule. Nous montrerons que les boucles reliant la bande de valence à la bande de conduction de GaAs sont bien en accord avec la théorie des groupes et elles ont les mêmes caractères que celles du Ge, un semi-conducteur du groupe IV, qui possède un centre d'inversion. Ce résultat montre que l'asymétrie d'inversion ne joue aucun rôle dans ces deux directions. Naturellement, on a tendance à penser que cette asymétrie ne joue pas non plus de rôle majeur pour un électron se propageant dans la direction [110]. Pourtant, Rougemaille *et al.* [41], dans un papier très récent, affirment qu'il n'existe pas de boucle reliant la bande de conduction Γ_{6c} à la bande de trou léger Γ_{8v}^{l} suivant la direction [110]. La deuxième sous-section présente la méthode d'exploration non-triviale du plan complexe pour montrer que la boucle reliant la bande de conduction Γ_{6c} à la bande de trou léger Γ_{8v}^{l} suivant la direction [110] existe. Enfin, nous discuterons la possibilité des dispositifs à effet tunnel dépendant du spin.

II.1 Motivation de l'étude

Dans un matériau massif de semi-conducteur III-V, le splitting de spin est proportionnel au cube du vecteur d'onde **k** (le terme de Dresselhaus, voir le chapitre I.). Il est exprimé dans la bande de conduction en fonction des composantes du vecteur d'onde par :

$$\Delta E = \gamma_c \sqrt{k_x^2(k_y^2 - k_z^2)^2 + k_y^2(k_z^2 - k_y^2)^2 + k_z^2(k_x^2 - k_y^2)^2} \tag{II.1}$$

Nous voyons tout de suite que le splitting de spin est nul pour les vecteurs d'ondes suivant les deux directions [001] et [111]. Ceci signifie que l'énergie de la bande de conduction Γ_{6c} : $E_{6c} = \mu\mathbf{k}^2 \pm \Delta E$, où $\mathbf{k}^2 = k_x^2 + k_y^2 + k_z^2$, est toujours réelle même si le vecteur d'onde **k** était complexe. Ce résultat montre que les états évanescents existent suivant ces deux directions. Par contre, si on considère la direction [110], suivant laquelle le splitting de spin est maximum, et il prend une valeur imaginaire $\Delta E = \pm i\gamma\sqrt{2}|k|^3$ pour un vecteur d'onde imaginaire pur $\mathbf{k} = \pm i|k|$. En adoptant cette représentation complexe du vecteur d'onde, Rougemaille *et al.* [41] ont facilement déduit de la valeur imaginaire du splitting de spin que les états évanescents sont interdits suivant la direction [110]. C'est à dire qu'à un électron se propageant dans la direction [110] ne correspond aucun état évanescent dans cette direction, pour toutes les énergies à l'intérieur de la bande interdite. Ils concluent que cette interdiction vient fortement de la brisure de symétrie d'inversion du matériau massif. Cette conclusion nous amène à un résultat paradoxal : lorsque l'on branche les paramètres de l'asymétrie d'inversion (i.e ils sont différents de zéros.) les états évanescents dans la direction [110] disparaissent brutalement pour une asymétrie infinitésimale. Ainsi, ces considérations nous ont conduit à réexaminer la structure de bande complexe du GaAs suivant les trois directions [001], [111] et [110] afin de montrer que les états évanescents existent dans toutes les directions et qu'ils ne dépendent pas de la brisure de symétrie d'inversion.

II.2 Principe du calcul

Nous utilisons le formalisme **k.p** à 14 bandes, autrement dit le modèle de Kane étendu présenté dans le chapitre précédent pour calculer la structure de bande complexe. Le Hamiltonien du cristal prend toujours la forme I.2 sauf qu'il faut remplacer le vecteur d'onde réel par un vecteur d'onde complexe. La matrice du Hamiltonien du modèle 14 bandes H_{14} dans ce cas est non-hermitique. Par conséquent, les valeurs propres peuvent être des nombres complexes. Ces valeurs complexes correspondent aux ondes évanescentes et on les écrit sous la forme Re[E]+i*Im[E]. La plupart des opticiens écrivent le vecteur d'onde de l'électron sous la forme imaginaire pur $k = \pm i|k|$, ce qui correspond à une phase $\varphi = \pi/2$ ou $\varphi = 3\pi/2$ dans la deuxième représentation non-triviale $k = |k|e^{i\varphi}$, où |k| est le module du vecteur **k** et il s'exprime en unité $2\pi/a$, où $a = 5.653$ Å est le paramètre de maille du GaAs. L'avantage de la première représentation est qu'elle permet de trouver toutes les solutions évanescentes pour les deux directions [001] et [111] avec un court temps de calcul par rapport à la deuxième représentation. La raison est que suivant ces deux directions la contribution au hamiltonien du cristal dû au couplage spin-orbite et à l'asymétrie d'inversion du massif (le terme Dresselhaus) est nulle. Par contre, lors que l'on considère la direction [110], s'ajoute alors à l'énergie cinétique, une contribution proportionnelle au k^3 pour un petit vecteur d'onde **k**. Ce terme de Dresselhaus prend donc la forme $\gamma|k|^3e^{i3\varphi}$ pour le cas d'un vecteur d'onde complexe. Ceci dit que si on utilise la première représentation, la partie imaginaire des énergies propres Im[E] est non-nulle. On n'a donc pas d'états évanescents. Rougemaille *et al.* [41] ont utilisé cette simple représentation dans leur calcul, et arrivent à la conclusion insuffisante ci-dessus. On utilise donc la deuxième représentation dans le calcul de la structure de bande suivant la direction [110].

En effet, le principe pour chercher les états évanescents est de diagonaliser la matrice **k.p** H_{14} pour un vecteur d'onde **k** fixé et de sélectionner la partie réelle des énergies propres dont la partie imaginaire est nulle. En pratique, la diagonalisation d'une matrice complexe donne un mélange des solutions. C'est à dire que la solution appartenant à une bande peut être trouvée dans une autre bande et vice versa. De plus, on ne peux pas ranger en ordre croissant ou décroissant les énergies propres comme dans le cas classique de la structure de bande réelle. On range dans ce cas la partie réelle de l'énergie propre en ordre croissant et donc on aura les parties imaginaires correspondantes. On étudie la variation de cette partie imaginaire en fonction de la phase φ pour trouver la solution qui correspond à Im[E]=0.

II.3 Résultats numériques

Dans cette section, nous présentons les résultats numériques pour la structure de bande complexe. D'abord, nous présentons la structure de bande complexe du GaAs suivant les deux directions [001] et [111] en utilisant toujours les paramètres **k.p** calculés par la méthode de "tight-binding". Nous détaillons ensuite le calcul pour le cas de la direction [110]. C'est la direction qui donne des résultats intéressants pour l'avenir du filtre de spin.

II.3.1 États évanescents suivant la direction [001] et [111]

La figure II.1 montre la structure de bande complexe et réelle du GaAs suivant les directions [001] et [111]. On voit directement sur la figure II.1(a) qu'il existe des boucles reliant les bandes de valences aux bandes de conductions pour la direction [001] : une boucle entre la bande de trou léger Γ^l_{8v} et la bande de conduction Γ_{6c} ; une boucle entre la bande de trou lourd Γ^h_{8v} et la bande de conduction Γ_{7c} ; une boucle entre la bande split-off Γ_{7v} et la bande de conduction Γ^h_{8c}. Toutes ces boucles sont permises par la théorie des groupes. Il est important de remarquer que suivant cette direction [001], les couplages entre Γ^h_{8v} et Γ_{8c}, et entre Γ_{7v} et Γ_{7c} sont interdits. Par contre, suivant la direction [111], ces deux couplages ne sont pas interdits. C'est pour cette raison que l'on voit sur la figure II.1(b) un mélange entre les deux boucles connectant Γ_{7v} et Γ^h_{8v} à Γ_{7c} et Γ_{8c} et l'anticroisement (ou le croisement) entre ces deux boucles correspond à l'anticroisement dans la dispersion réelle entre la bande de conduction Γ^c_6 et les bandes de conduction lointaines $\Gamma_{7c,8c}$. Cet anti-croisement est dû au fort couplage **k.p** entre eux.

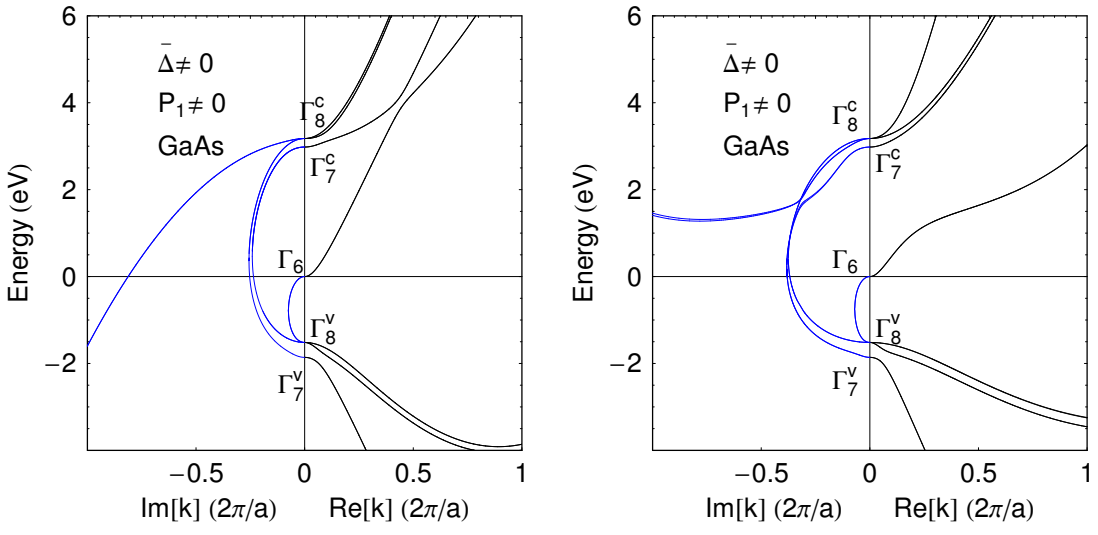


FIG. II.1: Structure de bande réelle et complexe du GaAs le long des directions [001] (a) et [111] (b)

II.3.2 États évanescents suivant la direction [110]

La recherche des solutions évanescentes suivant cette direction est assez difficile du point de vue du calcul numérique. On utilise la deuxième représentation $k = |k|e^{i\varphi}$ pour obtenir toutes les solutions. Pour une énergie propre donnée, les vecteurs des solutions correspondantes sont 4 fois dégénérés. Cela signifie que si k est une solution, k*, -k et -k* sont également les solutions. Cet argument est dû à la symétrie de réflexion le long de l'axe du cristal. Lorsque la phase φ varie, les deux parties réelles et imaginaires d'une énergie propre varient également. À $\varphi = 0$ et $\varphi = \pi$ qui correspondent au vecteur d'onde réel, on aura les bandes réelles se propageant respectivement suivant l'axe positif et négatif. De manière similaire, pour le vecteur d'onde imaginaire pur, on a deux solutions distinctes qui correspondent à $\varphi = \pi/2$ et $\varphi = 3\pi/2$. En général, les énergies propres ont une partie imaginaire finie et ne sont pas des solutions physiques. Pour un vecteur d'onde **k** complexe, qui correspond également à une onde évanescente, les quatre solutions possibles sont distinctes et la partie imaginaire de l'énergie propre peut disparaître pour quelques valeurs de φ qui diffèrent de $\pi/2$ et $3\pi/2$. Ces valeurs non-triviales de φ sont bien des solutions correspondant à des états évanescents physiquement acceptables.

Avant d'entrer dans le détail du calcul numérique, on considère l'approximation à un petit vecteur d'onde **k**. On peut donc dans ce cas obtenir une solution analytique qui permet d'éclairer le problème. Cela permet également de faciliter la procédure pour chercher les solutions mélangées dans le cas d'un vecteur d'onde **k** plus grand. Dans cette approximation, le niveau de l'énergie de la bande de conduction Γ_{6c} peut être écrit comme :

$$E_{\pm} = \mu k^2 \pm \gamma k^3 \tag{II.2}$$

Où $\mu = \hbar^2/2m^*$ et le coefficient de Dresselhaus γ est proportionnel au produit $P_0.Q.P_1$, qui vaut donc zéro dans les matériaux possédant la symétrie d'inversion tels que le Si et le Ge. Sa valeur est 23.7 eV.Å^3 pour GaAs utilisant la même méthode présentée dans le chapitre précédent avec les paramètres **k.p** déduits de la méthode "tight-binding". L'existence des états évanescents nécessite la disparition de la partie imaginaire de l'énergie propre :

$$\mu|k|^2 \sin 2\varphi \pm \gamma|k|^3 \sin 3\varphi = 0 \tag{II.3}$$

Pour pouvoir résoudre cette équation, on trace la variation de Im[E] en fonction de φ pour une petite valeur de $|k| = 0.01$ $(2\pi/\text{a})$. La figure II.2 montre cette variation de la partie imaginaire et la partie réelle de E. On voit donc qu'autour de $\pi/2$ (et $3\pi/2$), il existe un croisement entre la courbe Im[E](φ) et l'axe Ox. On a deux croisements pour deux valeurs de spin : up et down. Nous cherchons donc la solution de l'équation II.3 sous la forme : $\varphi = \pi/2 + \theta$ avec $\theta \ll 1$. On obtient facilement la solution au premier ordre :

$$\theta = \pm\gamma|k|/(2\mu) \tag{II.4}$$

Pour une valeur typique du vecteur d'onde k=0.01 Å^{-1}, on a $\theta = 0.0021$ rad ce qui satisfait l'approximation à **k** petit. Nous avons donc deux phases de solutions qui

possèdent une symétrie de réflexion par rapport à $\pi/2$. Ces deux solutions prouvent que l'existence des états évanescents de la bande de conduction Γ_{6c} dans la bande interdite ne dépend pas de la brisure de symétrie d'inversion ni du couplage spin-orbite.

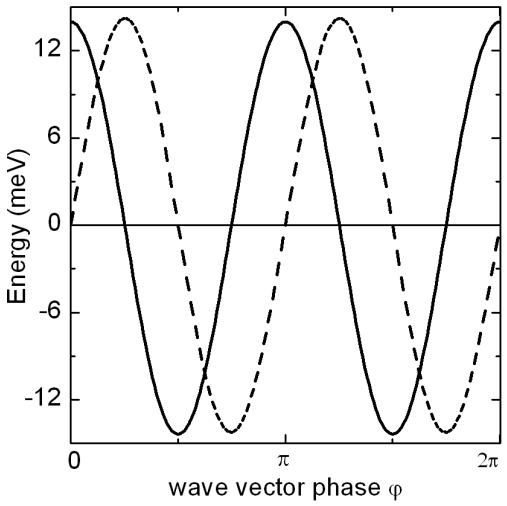
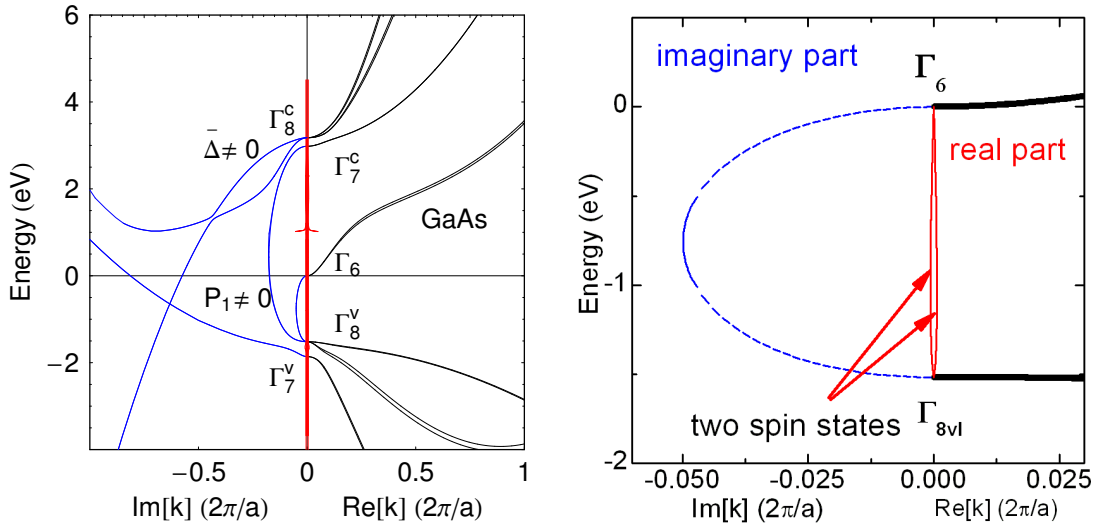


FIG. II.2: La partie imaginaire (trait pointillé) et la partie réelle (trait continu) de l'énergie propre de la bande de conduction Γ_{6c} en fonction de la phase φ du vecteur d'onde pour $|k| = 0.01\ (2\pi/a)$. L'origine de l'énergie est prise en bas de la bande de conduction Γ_{6c}.

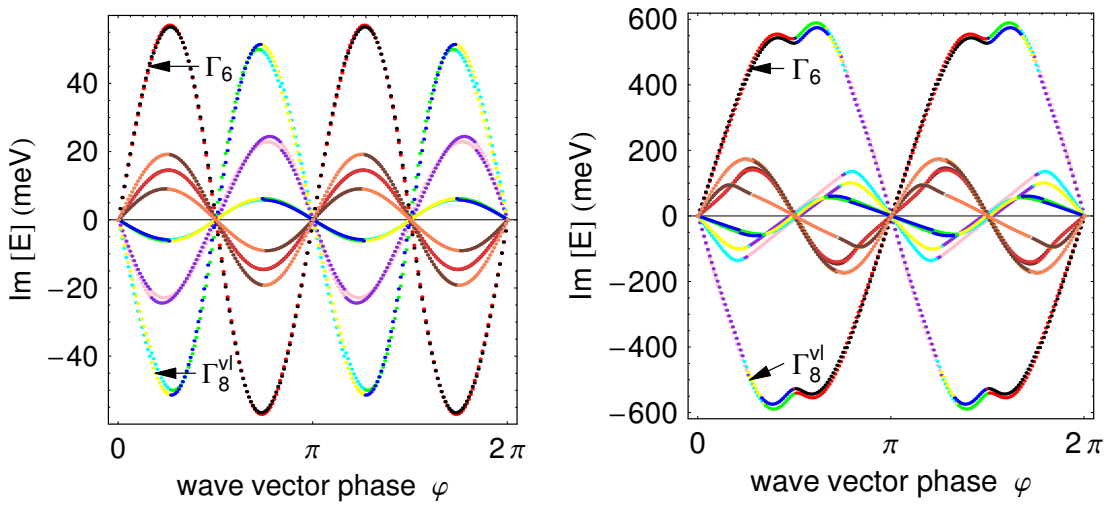
Considérons maintenant le cas d'un vecteur plus grand, le cas où on ne peut pas trouver les solutions analytiques. On diagonalise numériquement la matrice H_{14}, on aura donc la variation de la partie imaginaire et la partie réelle de l'énergie propre de toutes les bandes en fonction de φ. Cette partie imaginaire change son signe près de $\pi/2$ ou $3\pi/2$ comme illustré dans la figure II.2. Par conséquent, il existe une phase φ_0 telle que Im[E](φ_0)=0. En utilisant l'algorithme de la dichotomie (ou bien la méthode de l'interpolation linéaire), deux solutions de phase près de $\pi/2$ ont été trouvées. L'une correspond à la bande de "spin-up", l'autre correspond à la bande de "spin down".

La figure II.3 représente la relation de la dispersion réelle et complexe du GaAs suivant la direction [110]. On a dans ce cas des bandes complexes qui émergent de l'extrême de la structure de bande dans l'espace de **k** réel et forment des boucles complètes reliant la bande de conduction à la bande de valence, comme dans le cas classique du germanium. La différence essentielle se trouve dans la composante réelle de tous les vecteurs d'onde imaginaires le long de la direction [110]. Cette composante est finie dans le cas de l'arséniure de gallium tandis qu'elle est nulle dans le cas du germanium. Il est important de noter que les composantes réelles de deux vecteurs d'onde propres correspondant à une bande et de spin opposé, à une énergie donnée dans la bande interdite, ont des signes opposés. On voit facilement ce résultat dans la formule II.4, pour l'approximation à un petit vecteur d'onde **k**. Ces composantes existent pour toute énergie située dans la bande interdite et



(a) (b)

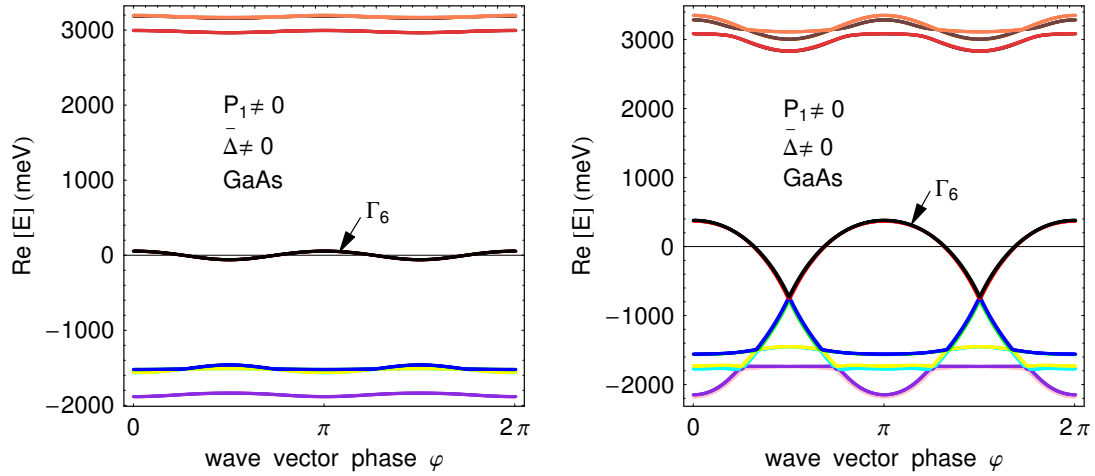
FIG. II.3: Structure de bande réelle et complexe du GaAs le long de la direction [110]. (a) vue globale de la structure de bande. (b) l'agrandissement de la boucle reliant la bande de conduction Γ_{6c} à la bande de trou léger Γ^{l}_{8v} : les bandes réelles (trait épais continu), la composante imaginaire (trait pointillé) et la composante réelle (trait mince continu) du vecteur d'onde évanescent.



(a) (b)

FIG. II.4: La partie imaginaire de l'énergie propre de toutes les bandes en fonction de la phase φ du vecteur d'onde $\mathbf{k}$, pour |k|=0.02 $(2\pi/a)$ (a) et pour un vecteur plus grand |k|=0.06 $(2\pi/a)$ (b). La figure II.4(b) montre la disparition de l'intersection près de $\pi/2$ (ou $3\pi/2$) entre deux courbes rouge et noir correspondant à la bande de conduction Γ_{6c} et l'axe Ox.

sont près de l'axe des ordonnées (énergie). Elles peuvent être trouvées pour toute énergie dans la bande interdite. Ceci aboutit à une situation physique intéressante : une onde électronique se propageant suivant la direction [110] peut correspondre à n'importe quelle onde évanescente le long de cette direction, pour toute énergie. De plus, on remarque que les états évanescents à l'intérieur d'une boucle correspondent à l'intersection près de $\pi/2$ (ou $3\pi/2$) entre l'axe des abscisses et les courbes de la partie imaginaire de l'énergie. Hors de la boucle, ces intersections n'existent plus. La figure II.4 montre cette situation pour la boucle reliant Γ_{6c} à Γ_{8v}^{l}. Si la valeur du vecteur d'onde $|k| < 0.05$ $(2\pi/a)$, le croisement entre la courbe de Im[E] et l'axe Ox près de $\pi/2$ (ou $3\pi/2$) existe, la boucle est donc présente. Par contre, si $|k| > 0.05$ $(2\pi/a)$, comme on le voit sur la figure II.4(b) pour une valeur de $|k| = 0.06$ $(2\pi/a)$, on n'a plus l'intersection près de $\pi/2$ (ou $3\pi/2$), on sort donc de la boucle et il n'y a plus d'état évanescent correspondant à ces deux bandes Γ_{6c}, Γ_{8v}^{l}. Cette figure montre également le mélange des bandes, c'est à dire le mélange des solutions évanescentes.



(a) (b)

FIG. II.5: La partie réelle de l'énergie propre de toutes les bandes en fonction de la phase φ du vecteur d'onde **k** pour |k|=0.02 $(2\pi/a)$ (a) et pour un vecteur plus grand |k|=0.06 $(2\pi/a)$ (b).

À titre d'exemple, si on regarde la bande Γ_{6c} (indiquée par la flèche), à petit vecteur d'onde |k|=0.02 $(2\pi/a)$ (voir figure II.4(a)), on s'aperçoit qu'elle est pure. Par contre, la bande Γ_{8v}^{l} contient une partie venant de la bande de trou lourd. À plus grand vecteur d'onde (voit figure II.4(b)), la bande Γ_{6c} contient une partie provenant des autres bandes : bande Γ_{8v}^{h}, Γ_{8v}^{l} et Γ_{7v}. Ainsi, la détermination de la variation de la partie imaginaire de l'énergie propre en fonction de la phase est une étape essentielle pour construire des boucles et pour établir la structure de bande complexe. Cependant, à très grand vecteur d'onde, il existe des solutions non-physiques et le mélange des bandes est assez complexe, une seule courbe imaginaire ne suffit pas pour éliminer ces solutions inattendues. On a donc besoin de la variation de la partie réelle de l'énergie propre en fonction de la phase. Cette variation nous permet de repérer les vraies solutions. La figure II.5 illustre cette courbe pour deux valeurs de

k : $|k| = 0.02\ (2\pi/a)$ et $|k| = 0.06\ (2\pi/a)$.

Nous insistons ici sur le fait que si on n'a pas ces deux courbes II.4 et II.5, il est extrêmement difficile de déterminer la valeur de l'énergie correspondante à une bande tant qu'elle se trouve dans une autre bande.

II.3.3 Splitting de spin

Nous avons montré dans le sous-chapitre précédent l'existence des états évanescents suivant la direction [110]. Cette existence se voit par la boucle qui relie la bande de conduction Γ_{6c} à la bande de trou léger Γ^l_{8v} comme présentée sur la figure II.6. On voit également sur cette boucle que les composantes imaginaires des états évanescents sont dégénérées de spin. Par contre leur composantes réelles sont distinctes à cause de la symétrie du vecteur d'onde. Ainsi, en présence du couplage spin orbite et de la brisure de la symétrie d'inversion de la structure de blende de zinc, les états évanescents ne sont pas spin-split. Ce résultat étonnant est montré sur la figure II.6(b) et il est obtenu par le calcul numérique.

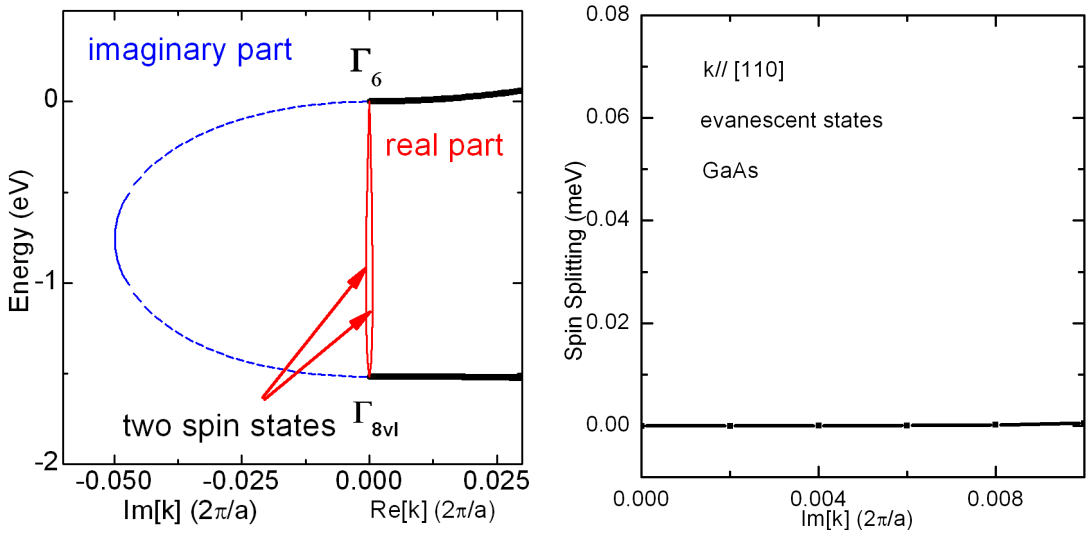


FIG. II.6: La boucle reliant de la bande de conduction Γ_{6c} à la bande de trou léger Γ^l_{8v} (a). Le splitting de spin des états évanescents en fonction de la partie imaginaire du vecteur d'onde suivant la direction [110] (b).

Afin d'avoir une vision plus intuitive et claire sur ce résultat, nous allons maintenant utiliser l'approximation à un petit vecteur d'onde **k** présentée dans la section II.3.2 pour calculer le splitting de spin des états évanescents suivant la direction [110]. En effet, si on considère un développement jusqu'au troisième ordre de l'énergie de la bande de conduction comme dans l'expression (II.2), la partie réelle (ou bien l'énergie des états évanescents) s'écrit alors

$$E = \mu|k|^2 \cos 2\varphi \pm \gamma|k|^3 \cos 3\varphi \qquad \text{(II.5)}$$

Appelons θ_1 et θ_2 les deux valeurs de l'angle qui correspondent au deux branches de spin : spin up et spin down, et qui font disparaître la partie imaginaire de l'éner-

gie propre. On a donc $\theta_1 = -\theta_2$. En remplaçant ces deux valeurs angulaires dans l'expression (II.5), on voit facilement, en utilisant la parité de la fonction cosinus, que le splitting de spin est égal à zéro. Ainsi, on retrouve bien le résultat numérique précédent.

II.4 Conclusion

En conclusion, nous avons, dans ce chapitre, calculé en détail la structure de bande complexe du GaAs, consistant en boucles reliant la bande de valence à la bande de conduction. Nous avons retrouvé les résultats classiques pour les deux directions [001] et [111]. Nous avons démontré l'existence des états évanescents correspondant à un électron traversant une barrière de potentiel pour toutes les directions dans la première zone de Brillouin. De plus, l'analyse de la variation des parties réelles et imaginaires en fonction de la phase φ permet de faciliter la procédure de recherche des solutions, et de comprendre le mélange de ces solutions. Cette étude fournit quelques informations utiles sur les propriétés électroniques associées aux matériaux massifs à travers leur structure de bande complexe.

Chapitre III

Splitting de spin dans les hétérostructures de semi-conducteurs III-V

Dans ce chapitre, nous nous intéressons aux propriétés électroniques des hétérostructures bidimensionnelles : le super-réseau et l'hétérojonction de GaAs/AlAs et GaAs/$Al_{0.3}Ga_{0.7}As$. Ce sont des hétérostructures avec atome commun.

Dans une première section, nous présenterons les mécanismes du couplage spin-orbite qui sont à l'origine du splitting de spin de l'énergie des sous-bandes de conduction et de valence.

La deuxième section présentera le modèle de base permettant de calculer les propriétés physiques des hétérostructures, dont le splitting de spin. Ce modèle est basé sur la méthode **k.p** à 14 bandes et la transformation de Fourrier.

Nous montrerons dans la troisième section la relation de dispersion d'énergie des sous-bandes de conduction et de valence de l'hétérostructure GaAs/$Al_{0.3}Ga_{0.7}As$ et GaAs/AlAs. Nous comparerons ces résultats avec ceux obtenus par les mesures de la spectroscopie "magnéto-tunnel" de L. Eaves [42].

Nous continuerons ensuite, dans la quatrième section, par le calcul de splitting de spin de l'énergie des sous-bandes de conduction et de valence. En particulier, nous effectuerons le calcul pour une hétérojonction GaAs/$Al_{0.3}Ga_{0.7}As$ qui est dopée de type p de $5*10^{11}cm^{-2}$ et qui a une structure similaire à celle utilisée par le groupe de H. Störmer [43]. Nous verrons que le résultat obtenu est très proche de celui obtenu expérimentalement par ce groupe. Enfin, nous discuterons sur la deuxième conséquence du couplage spin orbite et l'asymétrie d'inversion : l'anisotropie de polarisation de l'absorption optique dans ces hétérostructures.

III.1 Revue des mécanismes du splitting de spin

Le splitting de spin de l'énergie des sous-bandes de conduction ou de valence dans les hétérostructures semi-conductrices est le dédoublement des niveaux d'énergie causé par l'absence de la symétrie d'inversion. Cela signifie que la dégénérescence de spin est levée lorsque le potentiel subi par les porteurs est asymétrique, même en l'absence du champ magnétique extérieur. Nous obtenons donc deux branches de spin de la relation d'énergie : $E_\uparrow(\mathbf{k})$ et $E_\downarrow(\mathbf{k})$. La brisure de symétrie d'inversion dans une hétérostructure comprend trois types différents. La première concerne les matériaux massifs possédant une structure cristalline blende de zinc (bulk inversion asymmetry en anglais). La deuxième est la brisure de symétrie du potentiel de confinement de la structure considérée (structure inversion asymmetry). Et la troisième contribution au splitting de spin vient de la brisure de symétrie microscopique des atomes à l'interface de deux matériaux constituant l'hétérostructure. Il est important de remarquer que dans un système possédant la symétrie d'inversion, la dégénérescence de Kramers existe toujours. Nous présentons brièvement dans cette section ces trois contributions au splitting de spin.

III.1.1 BIA Splitting de spin dans les hétérostructures

Nous avons présenté dans la cinquième section du chapitre I la contribution au splitting de spin venant de l'asymétrie d'inversion des matériaux massifs. Nous avons explicité la formule du couplage spin orbite qui est proportionnel au champ magnétique interne $B(\mathbf{k})$. Lorsque l'on considère un système à dimensionnalité réduite, un gaz d'électrons bidimensionnel (voire unidimensionnel) par exemple, les valeurs des composantes du vecteur d'onde dans la direction du confinement quantique, ainsi que leurs valeurs au carré doivent être remplacées par leurs valeurs moyennes calculées sur la fonction d'onde de l'électron. Il est important de noter que la valeur moyenne de la composante du vecteur d'onde est nulle dans la direction, suivant laquelle les porteurs sont confinés dans un puits quantique. Par contre la valeur moyenne du carré de cette même composante du vecteur d'onde est en général non nulle. Dans le cas d'une hétérostructure bidimensionnelle épitaxiée suivant [001], l'expression du champ magnétique effectif $B(\mathbf{k})$ devient :

$$B_{2D}(\mathbf{k}) = k_x(k_y^2 - \langle k_z^2\rangle)\mathbf{e_x} + k_y(\langle k_z^2\rangle - k_x^2)\mathbf{e_y} \tag{III.1}$$

Cette expression nous dit qu'il est possible de contrôler, dans une certaine mesure, le terme de Dresselhaus par une grille : la valeur de $\langle k_z^2\rangle$ dépend du confinement, donc du champ électrique suivant la direction oz. Cette situation est manifestement claire si $\langle k_z^2\rangle \gg k_x^2, k_y^2$, ce qui est peut-être le cas pour un puits quantique étroit. Cependant, ce contrôle n'est pas aussi direct que dans le cas du terme de Rashba que nous allons voir dans le prochain sous-chapitre. De plus, la valeur de $\langle k_z^2\rangle$ n'est pas forcément plus grande que k_x^2 ou k_y^2, à 300 K et à 77 K. Prenons un modèle simple : si on utilise la fonction d'onde proposée par Fang et Howard [44][1] pour calculer la valeur moyenne $\langle k_z^2\rangle$ pour le niveau fondamental présent dans le puits quantique,

[1] C'est une fonction exponentielle que l'on utilise souvent dans la méthode variationnelle comme une fonction d'essai pour calculer les niveaux d'énergie dans un puits quantique.

nous obtenons des valeurs de $\hbar^2\langle k_z^2\rangle/(2m^*)$ comprises entre 13 meV et 60 meV pour E_z variant entre 30 et 300 kV/cm. Ces valeurs sont du même ordre de grandeur que l'énergie cinétique moyenne d'électrons 2D thermalisés (k_BT vaut 6.6 meV à 77 K et 25.8 meV à 300 K.)

III.1.2 SIA Splitting de spin

Le deuxième terme du couplage spin-orbite contribuant au splitting de spin vient de la brisure de symétrie d'inversion du potentiel de confinement de la structure considérée. Ce potentiel contient d'une part la contribution provenant du champ électrique intrinsèque ou extrinsèque, et d'autre part la contribution de la différence des positions des bandes entre les matériaux constituant l'hétérostructure. L'expression de ce Hamiltonien spin-orbite ajouté au Hamiltonien des électrons de la bande de conduction Γ_{6c} est introduite pour la première fois par le physicien soviétique E. I. Rashba [45, 46] en 1960 :

$$H_R = \alpha.\sigma \times \mathbf{k} \tag{III.2}$$

où α est le coefficient dépendant de la structure considérée, que l'on l'appelle souvent le coefficient de Rashba. Il est proportionnel au champ électrique total E (intrinsèque et extrinsèque), $\alpha = a_{64}$E. Le facteur de proportionnalité a_{64} est lui-même dépendant du matériau. Ce facteur est en gros proportionnel à l'interaction spin-orbite Δ_0 et à l'inverse du gap au cube [29]. À son tour, cette interaction spin-orbite Δ_0 peut être estimée grâce à l'ionicité des constituants du semi-conducteur considéré. Elle est proportionnelle au nombre atomique puissance quatre [48]. Ainsi, le terme de Rashba est plus important pour les matériaux lourds à faible largeur de bande interdite. C'est pour cette raison que l'InAs est un bon candidat pour la spintronique à base de semi-conducteur. La première proposition de transistor à rotation de spin due à Das et Datta [1] est basée sur la maîtrise du terme de Rashba par un champ électrique sur les hétérostructures d'InAs.

En utilisant la méthode de partition de Löwdin, on trouve l'expression du facteur de proportionnalité a_{64} [49] :

$$a_{64} = \frac{eP_0^2}{3}\left[\frac{1}{E_0^2} - \frac{1}{(E_0+\Delta_0)^2}\right] + \frac{eP_1^2}{3}\left[\frac{1}{(E_0-E_1)^2} - \frac{1}{(E_0-E_1-\Delta_1)^2}\right] \tag{III.3}$$

Les valeurs du facteur a_{64} calculées pour différents ensembles de paramètres, les valeurs expérimentales du SIA splitting de spin et les valeurs du coefficient α correspondant à un système à base du GaAs sont récapitulés dans le tableau III.1.

Nous présentons également dans le tableau III.2 les données concernant le système à base d'InAs, un semi-conducteur de faible bande interdite, de petite masse effective et de grand couplage spin-orbite Δ_0.

Lorsque l'on considère la bande de valence, la situation est plus compliquée à cause de la dégénérescence de la plus haute bande de valence Γ_{8v}. Les calculs analytiques par la théorie de symétrie montrent que le Hamiltonien de Rashba de la bande Γ_{8v} contient des invariants de différentes symétries [29] :

GaAs/AlGaAs	Spin Splitting (meV)	α (10^{-11} eVm)	a_{64}(eÅ^2)	Reference
2DEG	0.46-0.61	-		Ramvall [50]
	0.74	-		Jusserand [51]
	-	0.05		Marcus [32]
	-	-	4.7	PZ
	-	-	5.39	TB
2DHG	1.41	-		Störmer [43]

TAB. III.1: Les valeurs expérimentales du splitting de spin (mesurées au niveau de Fermi.) et le coefficient de Rashba dans les hétérojonctions (ou puits quantiques) GaAs/AlGaAs, ainsi que le facteur numérique a_{64} de la bande de conduction calculé par la formule III.3 en utilisant deux ensembles de paramètres TB et PZ.

Système	Spin Splitting (meV)	α (10^{-11} eVm)	Tunability	Reference
GaSb/InAs/GaSb	3.7	0.9	-	Luo [53]
AlSb/InAs/AlSb	3.3-4.5	0.6	Non	Heida [54]
AlSb/InAs/AlSb	0	0	-	Brosig [55]
AlSb/InAs/AlSb	0	0	-	Sasa [56]
AlGaSb/InAs/AlSb	5.6-13	1.2-2.8	-	Sasa [56]
InGaAs/InAs/InGaAs	5.1-6.8	0.6-1.1	Oui	Nitta [57]
InGaAs/InAs/InGaAs	9-15	2-4	Oui	Grundler [58]
SiO2/InAs/	5.5-23	1-3	Oui	Matsuyama [59]

TAB. III.2: Les valeurs expérimentales du splitting de spin (mesurées au niveau de Fermi.) et le coefficient de Rashba correspondant aux systèmes bidimensionnels à base d'InAs.

$$H_{8v8v}^{inv} = a_{41}[(k_yE_z - k_zE_y)J_x + cp] + a_{42}[(k_yE_z - k_zE_y)J_x^3 + cp] + a_{51}[\{J_y, J_z\}E_x + cp] + a_{52}[(k_yE_z + k_zE_y)\{J_x, J_y^2 - J_z^2\} + cp] \quad \text{(III.4)}$$

Où **J**=(J_x,J_y,J_z) sont des matrices 4×4 du moment angulaire correspondant à j=3/2 et m=3/2,1/2,-1/2 et -3/2 (voir la référence [29]). Le premier terme qui possède une symétrie axiale, est similaire au cas de la bande de conduction. Le deuxième et le quatrième terme sont anisotropes, c'est à dire qu'ils dépendent de l'orientation cristallographique du vecteur d'onde **k** et du champ électrique **E**. Ces deux termes sont petits par rapport au premier car ils proviennent du couplage **k.p** des bandes lointaines. On présume souvent qu'ils sont nuls. Le troisième terme est indépendant du vecteur d'onde **k**, et il a la même forme que la contribution d'interface dont on discutera dans le prochain sous-chapitre.

Pour un champ électrique orienté suivant la direction Oz, on peut facilement écrire l'expression III.4 sous la forme matricielle. On en déduit le splitting de spin pour la bande de trou lourd et trou léger à faible valeur du vecteur d'onde transverse $k_{//}$:

$$E_{hh}^{Rashba} \propto \langle a_{41}E_z \rangle k_{//}^3 \quad \text{(III.5)}$$

$$E_{lh}^{Rashba} \propto \langle a_{41}E_z \rangle k_{//} \quad \text{(III.6)}$$

III.1.3 IIA Splitting de spin

La discussion du troisième mécanisme de splitting de spin qui est lié à la propriété particulière de la symétrie des hétéro-interfaces dans le système bidimensionnel provient pour la première fois du résultat de l'expérience de van Kesteren [52]. Il a observé l'anisotropie dans le plan de l'absorption optique d'un puits quantique GaAs/AlAs épitaxié suivant la direction [001]. Une telle anisotropie est compatible avec le groupe de symétrie C_{2v} de l'interface GaAs/AlAs (voir la figure III.1).Cette anisotropie optique est très faible dans les systèmes qui partagent des atomes communs (il y a un atome As commun entre GaAs et AlAs). Par contre, en 1996, Krebs et Voisin [4] ont observé une très large anisotropie optique dans le puits quantique **sans atome commun** InGaAs/InP. Cette forte anisotropie est due aux propriétés subtiles de la structure électronique des états de la bande de valence dans les puits quantiques **sans atome commun** et à la brisure de la symétrie de roto-inversion des interfaces. Cette brisure provoque un terme de couplage spin-orbite qui est responsable de la troisième contribution au splitting de spin. Les auteurs ont donc introduit un modèle empirique H_{BF} permettant de prendre en considération la symétrie de l'interface. Ce modèle est tout à fait équivalent au modèle phénoménologique développé par Ivchenko *et al.* [8]. Le Hamiltonien du modèle H_{BF} décrit le couplage entre les états de trou lourd, trou léger et split-off, qui existe même à un vecteur d'onde transverse $k_{//} = 0$ (ce Hamiltonien sera explicité dans la prochaine section). Ce terme de couplage spin-orbite conduit également à un phénomène de relaxation de spin du type Dyakonov-Perel [30].

Il est important de rappeler que le groupe de symétrie d'un puits quantique **avec atome commun** est D_{2d}, tandis que le groupe de symétrie d'un puits quantique

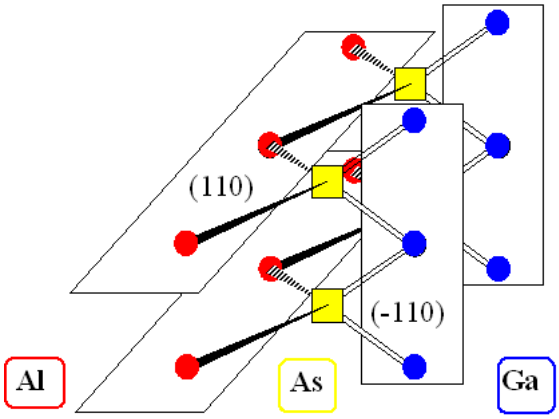


FIG. III.1: Schéma d'arrangement des liaisons chimiques à l'interface de GaAs/AlAs. Les deux plans [110] et [1-10] sont distincts, il en résulte donc une anisotropie optique.

sans atome commun demeure celui d'une interface C_{2v}. La réduction de symétrie D_{2d} à C_{2v} peut se faire par application d'un champ électrique extérieur. C'est à dire que l'anisotropie de l'absorption optique est amplifiée si on applique un champ électrique du système.

Nous allons dans la suite prendre en compte ces trois contributions pour le calcul du slitting de spin dans les hétérojonctions GaAs/$Al_{0.3}Ga_{0.7}As$ et les multipuits quantiques GaAs/AlAs, ainsi que pour les systèmes **sans atome commun** tels que InAs/AlSb.

III.2 Modèle

Le modèle du calcul est basé sur la méthode de Kane étendu à 14 bandes présentée dans le chapitre I. Nous allons l'étendre pour le cas d'un super-réseau. Notre étude s'inscrit dans la continuation du travail de thèse de S. Cortez [11]. En particulier, nous allons nous affranchir de l'approximation faite dans sa thèse : il supposait que la fonction de Bloch dans le matériau puits est la même que celle dans le matériau barrière, et que les paramètres de Luttinger des bandes supérieures sont indépendants du matériau. Cette approximation est bonne dans le cas où les matériau puits et barrière sont très peu différents, par exemple le cas des hétérostructures de GaAs/$Al_{0.3}Ga_{0.7}As$. Par contre, si l'on considère un puits quantique de type II InAs/AlSb, pour une étude de l'anisotropie optique due à l'asymétrie d'inversion de l'interface, on doit introduire la différence entre des fonctions de Bloch et celle des paramètres de Luttinger.

Le Hamiltonien du super-réseau est la somme des Hamiltoniens de chaque couche :

$$\hat{H}_{SR} = \sum_{i=1}^{N_{couche}} \hat{H}_i \theta_i(\mathbf{r}) \tag{III.7}$$

avec

$$\theta_i(\mathbf{r}) = \begin{cases} 1 & \texttt{if r} \in \texttt{i}^{ème}\ \texttt{couche} \\ 0 & \texttt{if r} \notin \texttt{i}^{ème}\ \texttt{couche} \end{cases} \tag{III.8}$$

Où H_i est le Hamiltonien du cristal de la $i^{ème}$ couche (I.2), N_{couche} est le nombre de couches dans une cellule unitaire du super-réseau. Dans les hétérostructures GaAs/$Al_{0.3}Ga_{0.7}As$, les contraintes sont très faibles, nous ne les avons donc pas prises en considération.

Pour obtenir la fonction d'onde propre $\Psi_{n,\sigma,\mathbf{k}}$ de la super-cellule correspondant à un porteur de spin σ, de vecteur d'onde $\mathbf{k}$ et de la bande n, on doit chercher d'abord la fonction d'onde pour le cas où $\mathbf{k}$=0, c'est à dire que l'on cherche la solution en centre de zone. Le problème des fonctions propres en centre de zone est résolu dans l'espace de Fourier, de la même manière que la méthode "quadrature" de Rössler et Winkler [29]. La fonction propre pour le super-réseau à $\mathbf{k} \neq \mathbf{0}$ est simplement exprimée comme une combinaison linéaire des fonctions propres à $\mathbf{k} = \mathbf{0}$. À son tour, cette fonction est écrite comme une combinaison linéaire de différentes fonctions de Bloch en $\mathbf{k} = \mathbf{0}$ avec les coefficients qui sont des fonctions enveloppes. Notre fonction d'onde obtenue par la diagonalisation numérique du Hamiltonien sur la base constituée de fonctions qui s'écrivent comme le produit d'une onde plane (lentement variable à l'échelle de la cellule élémentaire) et d'une fonction de Bloch en $\mathbf{k} = \mathbf{0}$, est de la forme :

$$\Psi_{n,\sigma,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{ik\mathbf{r}} \sum_{n,k} F_{n,k} U_n(\mathbf{r}) |\sigma\rangle \tag{III.9}$$

Où $F_{n,k}$ sont des coefficients du développement de Fourrier sur la base des ondes planes de la fonction enveloppe $F_n(\mathbf{r})$.

Le calcul général se ramène à étudier le couplage entre deux états $|n, \mathbf{q}\rangle$ et $|m, \mathbf{p}\rangle$[2] par le Hamiltonien décrivant le super-réseau. L'hypothèse que les fonctions de Bloch

[2]La notation d'un état $|n, \mathbf{q}\rangle$ signifie que c'est un état de la bande n et de vecteur d'onde $\mathbf{q}$.

sont uniformes sur tout le cristal conduit au fait que les termes en k.p et en k^2 du Hamiltonien de couplage n'interviennent que si les deux ondes planes sont identiques. Ceci dit que le couplage entre deux états de différents vecteurs d'onde est négligé. De plus, le fait que Sébastien Cortez considérait tout le cristal comme étant du GaAs veut dire que l'on n'a pas besoin de faire une transformation de Fourrier pour le Hamiltonien du massif. Afin d'avoir un modèle plus complet, nous allons réintroduire la différence des fonctions de Bloch et des paramètres de Luttinger en tenant compte des paramètres du puits et de la barrière, et en utilisant la transformation Fourrier sur tout le cristal qui contient le matériau puits et le matériau barrière. Une façon simple pour tenir compte des paramètres de Luttinger est décomposer la matrice 14×14 M en deux parties, comme expliqué dans la partie I.3.2 du chapitre I.

Le Hamiltonien final de couplage contient toujours trois termes de nature différentes comme montré par Cortez : un premier terme qui ne couple que des états associés à une même bande. Le second terme est associé aux propriétés **k.p** du super-réseau et ne couple que des états de même vecteur d'onde. C'est ce terme qui contient la variation spatiale des fonctions de Bloch et des paramètres de Luttinger. Le dernier terme couple les bandes de trou lourd, de trou léger et de split-off. Il est associé aux bandes distinctes et à des vecteurs d'ondes distincts. Il découle de l'effet de brisure de symétrie de roto-inversion des interfaces et est responsable des propriétés d'anisotropie optique dans les systèmes de symétrie C_{2v} (NCA, ou puits quantiques asymétriques.) même s'il est faible par rapport aux deux premiers termes. Par rapport au travail de S. Cortez nous avons développé le second terme et corrigé une petite erreur dans le dernier terme. La forme matricielle correcte de ce dernier terme dans la base des fonctions de Bloch présentées dans le tableau I.1 est

$$\begin{bmatrix}
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & i & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & -i & 0 & -i\sqrt{2} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & i\sqrt{2} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & i & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & i & 0 & -i\sqrt{2} & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & i\sqrt{2} & 0 & 0
\end{bmatrix} \tag{III.10}$$

Il est important de noter que cette matrice est calculée dans l'ordre suivant des fonctions de Bloch (voir le tableau I.1) : u_1, u_9, u_3, u_{11}, u_5, u_{13}, u_7, u_2, u_{10}, u_4, u_{12}, u_6, u_{14}.

En pratique, le calcul se fait dans une super-cellule de taille finie, et les vecteurs

d'ondes planes sont discrets. On introduit un "cut-off" sur l'amplitude du vecteur d'onde de manière que le résultat du calcul soit stable, c'est à dire qu'on le choisit pour que sa variation n'affecte quasiment pas de résultat. Il est important de noter que, plus on augmente cette valeur, plus le résultat est précis. On utilise un nombre d'ondes planes de l'ordre de 100 pour chacun des 14 états de Bloch, soit une matrice complexe 1400 par 1400. Le temps du calcul dépend de la taille du super-réseau. Pour un super-réseau de l'ordre de 600 Å, le programme prend 10 heures environ pour obtenir tous les résultats (y compris les niveaux d'énergie, les fonctions d'ondes, le splitting de spin). Tous les calculs utilisent les nouveaux paramètres **k.p** issus de la paramètrization "tight binding" (TB). L'origine de l'énergie est prise au bas de la bande de conduction du GaAs.

La procédure du calcul ci-dessus est faite pour un super-réseau épitaxié suivant la direction [001]. Lorsque l'on veut étudier les super-réseaux épitaxiés suivant les directions [110] et [311], il faut donc transformer le Hamiltonien **k.p** dans l'espace réciproque. Par exemple, suivant la direction [311], on effectue une rotation

$$\mathbf{k}' = T^{-1}\mathbf{k} \tag{III.11}$$

Où T est une matrice de changement de base et k'_x, k'_y, k'_z sont les composantes du vecteur d'onde $\mathbf{k}'$ suivant les nouveaux axes le long [-233], [-110] et [311]. Le nouveau Hamiltonien pour un super-réseau [311] est donc obtenu en substituant III.11 dans III.7. Cette méthode a été implementée par différentes auteurs [47], nous insistons sur le fait qu'elle passe à côté des propriétés de symétrie interfaciale.

Approximation de Hartree

Nous venons de discuter la méthode pour calculer les états propres et les énergies propres à un électron dans une hétérostructure sans dopage. Alors qu'en pratique, les hétérostructures sont souvent dopées. On doit donc tenir compte du potentiel électrostatique créé par les porteurs de dopage. La méthode la plus simple est de considérer l'interaction Coulombienne subie par chaque électron de façon moyenne[3] : un électron donné n'est plus soumis à un potentiel dépendant des positions instantanées de tous les autres électrons, mais uniquement à un potentiel correspondant à la distribution moyenne des électrons. Ce dernier potentiel est la solution de l'équation de Poisson (I.1) avec la densité de charge déterminée par les fonctions propres de l'électron. On a ainsi un couple de deux équations différentielles : Schrödinger et Poisson, agissant sur le mouvement de l'électron dans l'hétérostructure :

$$\begin{cases} \Big(-\frac{\hbar^2}{2m^*}\frac{d^2}{dz^2} + V_b(z) + \phi(z) \Big) F_i(z) = E_i F_i(z) \\ \frac{d^2}{dz^2}\phi(z) = -\frac{e^2}{\epsilon}\Big(N_D^+(z) - \sum_i n_i |F_i(z)|^2 \Big) \end{cases} \tag{III.12}$$

Où $V_b(z)$ est le profil de potentiel de l'hétérostructure dans la bande de conduction (ou la bande de valence si on s'intéresse aux trous.), $\phi(z)$ est le potentiel électrostatique créé par les porteurs de dopage et des donneurs ionisés, N_D^+ est la densité volumique des donneurs ionisés, et n_i est la densité surfacique de porteurs dans la

[3] Il s'agit d'une approximation de type Hartree

$i^{ème}$ sousbande. À une température fixe T, la densité surfacique est liée à l'énergie de Fermi E_F par l'expression[4] :

$$n_i = \frac{m^*}{\pi\hbar^2} k_B T \ln(1 + exp(\frac{E_F}{k_B T})) \tag{III.13}$$

Le système de l'hétérojonction est dans un état équilibre électrique, ce qui nécessite une condition de neutralité :

$$\sum_i n_i - \int_{-\infty}^{\infty} N_D^+(z)dz = 0 \tag{III.14}$$

Le système d'équation (III.12) avec deux équations complémentaires (III.13) et (III.14) est résolu par une méthode auto consistante et itérative[5]. La solution d'ordre zéro de l'équation de Schrödinger est ensuite introduite dans l'équation de Poisson. Cette dernière est résolue avec deux conditions initiales : $\phi(z = 0) = 0$ et $\phi'(z = 0) = 0$. Puis, l'on réinjecte ce potentiel dans l'équation de Schrödinger et on cherche la solution d'ordre supérieur. La procédure de recherche de la solution stable s'arrête au moment où les solutions d'ordre n et n+1 sont presque identiques. En pratique, nous utilisons le critère de convergence $|E_{n+1} - E_n| < 0.01$ meV.

Le calcul du splitting de spin

Le calcul du splitting de spin de l'énergie des sous-bandes de conduction et de valence est relativement long d'un point de vue numérique. En effet, il faut en principe effectuer un calcul complet du Hamiltonien H et puis le diagonaliser pour chaque vecteur d'onde dans le plan $k_{//}$ et chaque angle θ (c'est l'angle entre le vecteur d'onde dans le plan $k_{//}$ et l'axe ox). Nous trouverons les énergies propres correspondantes à chaque valeur de $k_{//}$ et de θ. En fixant une valeur de θ (ou $k_{//}$), on peut donc avoir la variation du splitting de spin en fonction de $k_{//}$ (ou θ). Il est important de noter que plus le nombre de vecteur d'onde $k_{//}$ et le nombre de l'angle θ est grand, meilleurs seront les résultats, c'est à dire que la variation du splitting de spin en fonction de $k_{//}$ et de θ sera fine. Dans la plupart des calculs auxquels nous nous intéressent ici, nous prenons une valeur maximum de $k_{//} = 0.05$ Å^{-1}, le nombre de vecteur d'onde transverse $N_{k_{//}} > 50$ et le nombre de l'angle $N_\theta > 70$. Cela signifie que l'on devrait construire et diagonaliser au moins 3500 fois le Hamiltonien du super-réseau. Le temps minimum pour ce type de calcul avec Mathematica est de 5 h environ.

Le calcul des spectres d'absorption optique

Ce calcul a été présenté dans la thèse de S. Cortez. Le principe est d'effectuer un calcul complet du Hamiltonien pour chaque vecteur d'onde transverse $k_{//}$, puis de sommer les différentes forces d'oscillateur de chacune des transitions optiquement

[4]Ici, on considère que le potentiel chimique μ est égal à l'énergie de Fermi E_F.

[5]En pratique, on sait toujours que les électrons se trouvent uniquement dans la première sous-bande (avec une faible valeur de la densité de porteurs), et le calcul sera donc plus simple.

permises en tenant compte de leur énergie respective. Le coefficient d'absorption en fonction de l'énergie du photon s'écrit :

$$\alpha(\hbar\omega) \propto \sum_{k,v,c} \frac{|\langle\Psi_v|\varepsilon.\mathbf{p}|\Psi_c\rangle|^2}{\hbar\omega}\delta(E_c(\mathbf{k}) - E_v(\mathbf{k}) - \hbar\omega) \tag{III.15}$$

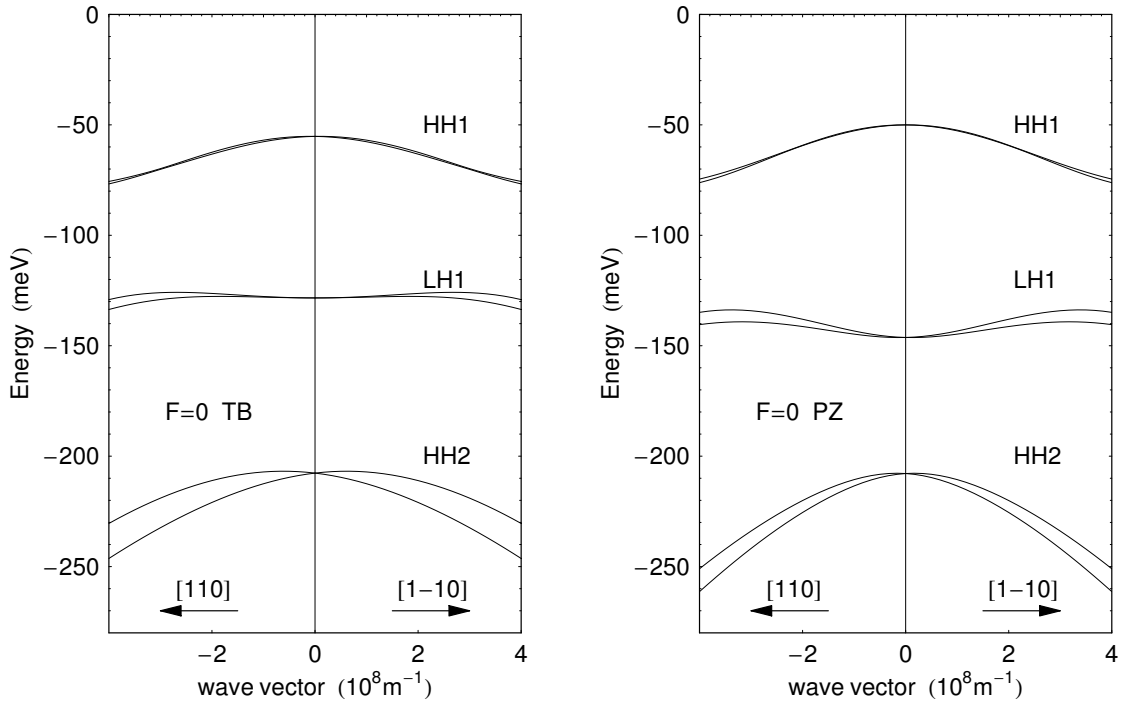
où le vecteur unitaire ε représente la polarisation de la lumière incidente. Comme nous nous intéressons à l'anisotropie optique dans des systèmes de symétrie C_{2v}, nous choisissons donc deux polarisations selon deux axes propres [110] et [1-10] du tenseur optique du système. On remarque que le calcul du coefficient d'absorption contient tous les effets liés à la brisure de symétrie d'inversion de l'hétérostructure. En particulier, contrairement au modèle **k.p** à 8 bandes, l'élément de matrice optique $\langle\Psi_v|\varepsilon.\mathbf{p}|\Psi_c\rangle$ contient la contribution qui vient des bandes de conduction lointaines ce qui traduit de manière complète l'effet BIA.

Nous avons utilisé cette méthode avec une petite correction du terme IIA présentée dans la section précédente pour calculer notre spectre d'absorption optique. Cette méthode consiste à calculer complètement la force d'oscillateur de chaque transition pour un ensemble des points $k_{//}$ et à ajouter un léger élargissement gaussien de chacune des raies d'absorption pour que l'on puisse avoir des spectres proche de la réalité expérimentale. Nous utilisons dans ce calcul des gaussiennes de variance de 1.5 meV. Il est important de remarquer que si on programme de manière spécifique proposée par Mathematica (car dans Mathematica on peut programmer en utilisant des syntaxes du C), on peut optimiser le temps du calcul.

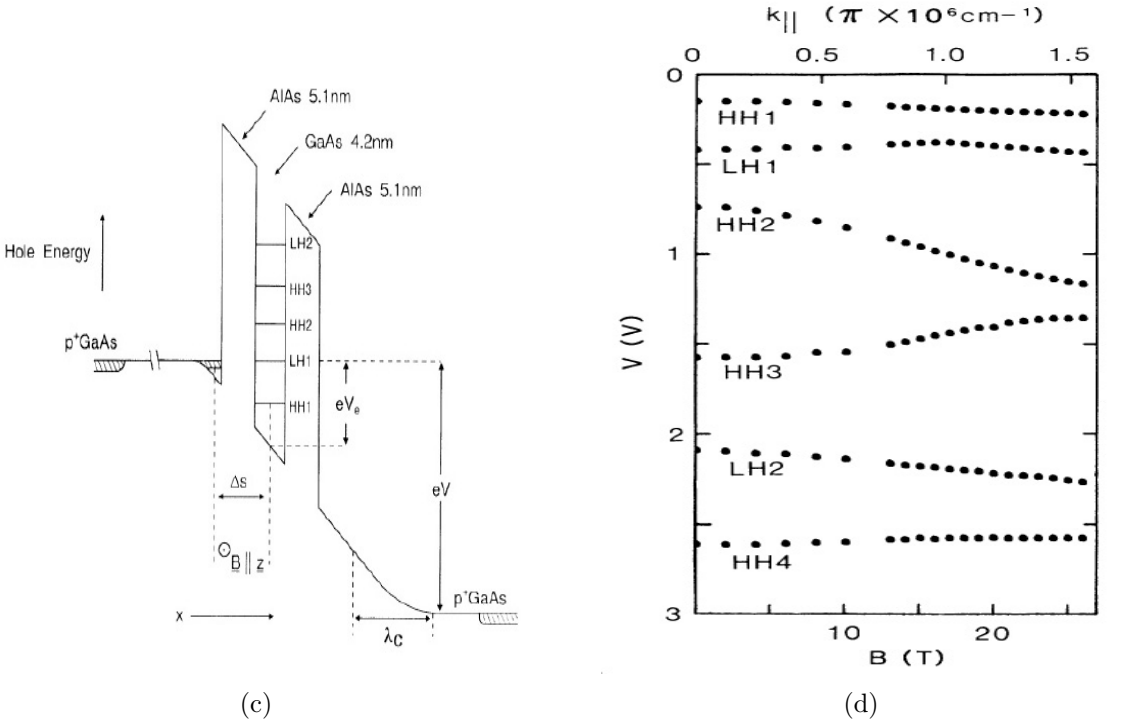
III.3 Dispersion d'énergie des sous-bandes de valence du puits quantique GaAs/AlAs

Les figures III.2(a) et III.2(b) montrent la relation de dispersion de l'énergie des sous-bandes de valence d'un puits quantique de largeur 42 Å GaAs/AlAs épitaxié suivant la direction [001] sur le substrat GaAs, calculée en utilisant deux types de paramètres : TB et PZ respectivement. On voit sur ces deux figures la relation de dispersion suivant les directions [110] et [1-10] des trois sous-bandes les plus hautes dans l'ordre HH1, LH1 et HH2. On remarque tout de suite que les niveaux d'énergies pour les deux sous-bandes de trou lourd HH1 et HH2 au centre de la zone Brillouin $\mathbf{k}$=0 sont presque les mêmes dans les deux figures. Ce résultat est sans doute dû au fait que les deux éléments de matrices P_0 et Q sont similaires dans les deux ensembles de paramètres. Par contre, on voit nettement une différence en ce qui concerne la bande de trou léger LH1. Cette différence est principalement due au fait que les deux autres éléments de matrice P_1 (élément matrice du moment entre les bandes de Γ_{6c} et $\Gamma_{8c,7c}$) et $\bar{\Delta}$ (couplage spin-orbite entre $\Gamma_{8c,7c}$ et $\Gamma_{8v,7v}$) sont fortement surestimés dans l'ensemble des anciens paramètres **k.p** (utilisés par Pfeffer et Zawadzki).

Afin de vérifier notre résultat et de savoir encore une fois lequel entre deux ensembles des paramètres est le meilleur, nous avons comparé ces résultats avec celui obtenu par la spectroscopie par effet magnéto-tunnel (resonant magnetotunneling spectroscopy). En fait, ce résultat expérimental a été obtenu par le groupe de L. Eaves [42], il y a quelques années déjà. Le principe de cet expérience est basé sur le fait que la tension appliquée au dispositif (voir figure III.2(c)) peut mettre énergie de Fermi de l'échantillon (à gauche sur la figure III.2(c).) en coincidence avec les niveaux du puits quantique tandis que le champ magnétique appliqué permet de sonder différentes valeurs du vecteur d'onde transverse $k_{//}$. Lorsque l'on trace la tension de polarisation correspondant aux pics du courant tunnel en fonction du champ magnétique transverse, on observe une similitude avec les courbes de dispersion obtenues par le calcul du modèle **k.p**. La courbe V(B) définit donc la relation de dispersion des sous-bandes du puits quantique. Nous obtenons un excellent accord entre le résultat calculé avec les paramètres TB et le résultat expérimental. En particulier, si on regarde le rapport énergétique entre HH1-LH1 et LH1-HH2, on voit que ce rapport vaut 0.89 expérimentalement et il vaut 0.92 dans le cas où l'ensemble de paramètres TB est utilisé tandis qu'il vaut 1.51 dans le cas où le set de paramètres PZ est utilisé. Ainsi, l'accord entre le résultat expérimental et le nôtre confirme encore une fois nôtre choix des paramètres TB.



(a) (b)



(c) (d)

FIG. III.2: Relation de dispersion de l'énergie dans la bande de valence le long les directions [110] et [1-10] pour un puits quantique GaAs/AlAs 42 Å de large, épitaxié sur le substrat GaAs (001) (en l'absence du champ électrique et du champ magnétique) calculé par le modèle **k.p** à 14 bandes avec les paramètres "tight binding" (a) et avec les paramètres PZ (b). L'origine de l'énergie est prise en haut de la bande de valence du GaAs. Le dispositif expérimental de la méthode "magnéto-tunnelling" spectroscopique (c) et le résultat expérimental (d) d'après la référence [42]

III.4 Splitting de spin de l'hétérostructure $GaAs/Al_{0.3}Ga_{0.7}As$

Dans cette section, nous allons présenter les calculs du splitting de spin dans la bande de conduction et la bande de valence du puits quantique et de l'hétérojonction GaAs/AlGaAs. Sauf mention particulière, le champ magnétique est pris égale à zéro et la bande de valence dont on parle ici, fait référence au niveau fondamental de trou lourd HH1. Nous choisissons un super-réseau composé de trois couches : $Al_{0.3}Ga_{0.7}As$ (255 Å)/GaAs (100 Å)/$Al_{0.3}Ga_{0.7}As$ (255 Å). Cette épaisseur de barrière 510 Å est largement suffisante pour éliminer tout effet tunnel entre puits. Nous étudions dans un premier temps tous les effets associés à la brisure de symétrie d'inversion : BIA, SIA et IIA sur le splitting de spin. Pour analyser ces différentes contributions, nous devons choisir de prendre en considération ou non différents paramètres. Par exemple, pour ne pas tenir compte d'effet SIA, nous mettons le champ électrique égal à zéro et l'hétérostructure est non-dopée. Pour étudier le terme IIA, soit on enlève tous les autres termes et on ne garde que le terme IIA, soit on tient compte en même temps des deux termes BIA et IIA et puis l'on fait une comparaison avec le cas où seul le terme BIA existe. Nous comparons ensuite le résultat du splitting de spin dans la bande de valence de l'hétérojonction avec les mesures de Shubnikov de Haas obtenues par H. Störmer [43] sur le gaz de trous bidimensionnel. Pour faire cette comparaison, nous effectuons les calculs sur une hétérojonction de même structure que celle décrite dans le papier expérimental [43]. Nous calculons pour la première fois la contribution au splitting de spin due à l'asymétrie de l'interface.

III.4.1 Splitting de spin du puits quantique $GaAs/Al_{0.3}Ga_{0.7}As$

Splitting de spin du type BIA

Étudions maintenant le splitting de spin dû aux effets associés à la brisure de symétrie d'inversion des matériaux massifs. Il est important de noter que les deux éléments de matrice (deux paramètres) principaux qui contribuent à la brisure de symétrie d'inversion sont P_1, l'élément de matrice **k.p**, et $\bar{\Delta}$, le couplage spin-orbite entre les bandes de valence $\Gamma_{7v,8v}$ et les bandes de conduction lointaines $\Gamma_{7c,8c}$.

La figure III.3(a) montre la variation angulaire du splitting de spin de la bande de conduction Γ_{6c} pour un petit vecteur d'onde $k_{//}$=0.005 $Å^{-1}$. L'allure circulaire de cette variation signifie que le splitting de spin ne varie pas lorsque l'angle θ varie. On constate tout de suite qu'à petite valeur de **k**, la contribution principale au splitting de spin est linéaire en $k_{//}$. Ce résultat est une conséquence directe de l'expression du champ magnétique interne pour le cas bidimensionnel (III.1). De cette expression, on peut en déduire le splitting de spin pour la bande de conduction Γ_{6c} :

$$\Delta E_{6c} = \gamma_c \left[\langle k_z^2 \rangle k_{//} - \frac{1}{2} k_{//}^3 sin^2(2\theta) + O(k_{//}^5) \right] \qquad \text{(III.16)}$$

où le vecteur d'onde transverse s'écrit $\mathbf{k}_{//}$=$k_{//}$(cosθ, sinθ).

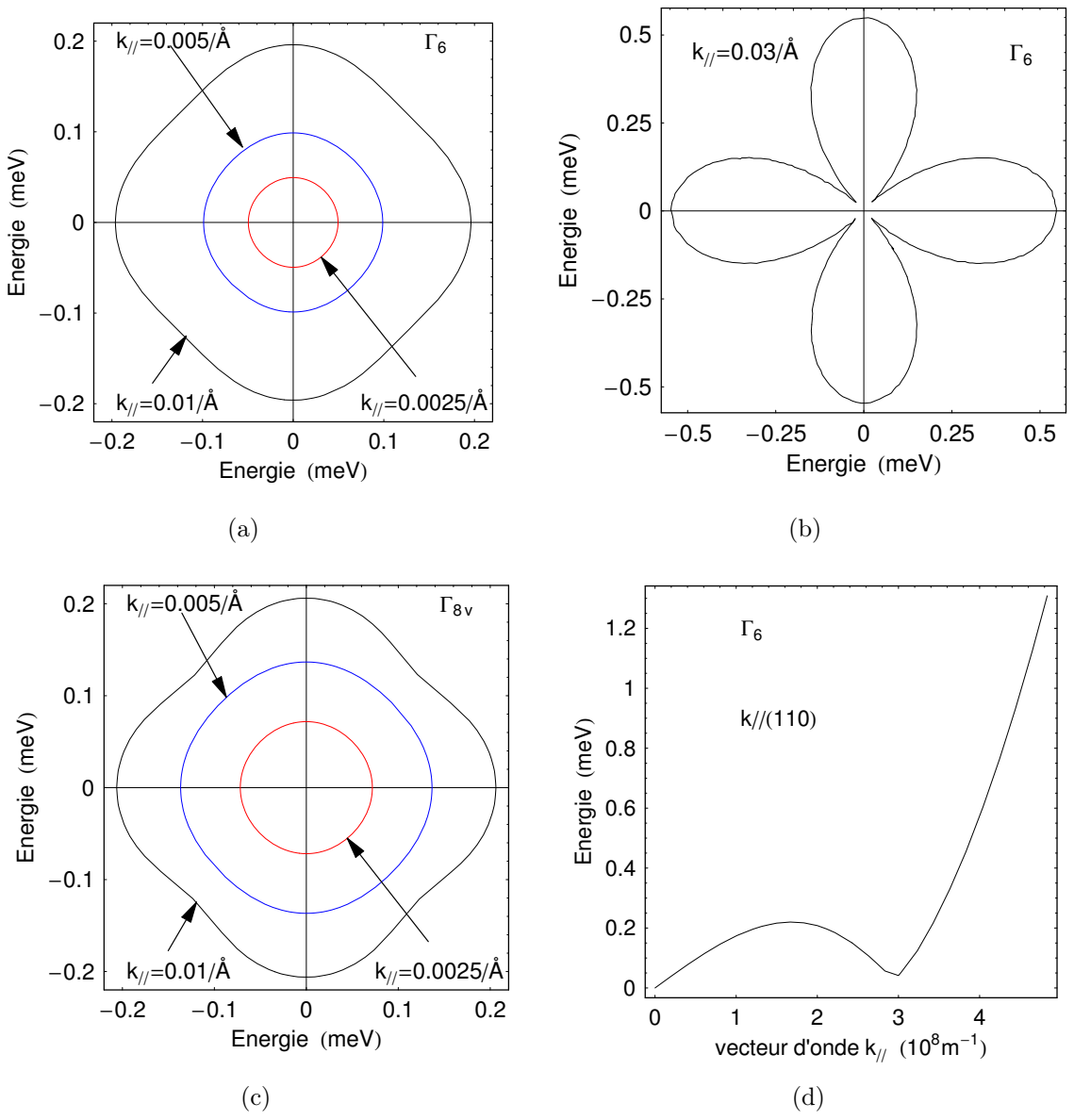


FIG. III.3: La variation angulaire du splitting de spin dans la bande de conduction pour un vecteur d'onde transverse $k_{//}$=0.01 Å^{-1} (a) ; pour un vecteur d'onde $k_{//}$=0.03 Å^{-1} (b) dans la bande de valence (c) du puits quantique $Al_{0.3}Ga_{0.7}As/GaAs$ 100 Å de large ; et la variation du splitting de spin en fonction du vecteur d'onde transverse $k_{//}$ suivant la direction [110] ($\theta = \pi/4$) (d). Le calcul est effectué sans tenir compte du terme d'interface.

Quand on considère un vecteur d'onde plus grand, $k_{//}$=0.01 Å^{-1} par exemple, on voit que la variation du splitting de spin n'est plus circulaire. Cela vient du fait qu'à grand vecteur $k_{//}$ le terme en $k_{//}^3$ devient plus grand et il modifie l'allure du splitting de spin en fonction de θ (voir figure III.3(b)). Ce terme est dominant si $k_{//}$ est très grand. De plus, cette nouvelle allure possède une symétrie d'ordre 4 qui appartient au groupe de symétrie du puits quantique.

Pour analyser cette situation, nous calculons le splitting de spin de la bande de conduction Γ_{6c} en fonction de l'amplitude du vecteur d'onde transverse suivant la direction [110], c'est à dire que $\theta = \pi/4$ (voir figure III.3(d)). Nous obtenons donc une courbe qui décrit bien la relation (III.16). Cette courbe nous indique qu'il existe un endroit où le splitting de spin du type BIA disparaît, ce qui veut dire que les deux branches de spin des courbes de dispersion en énergie se croisent pour cette direction de **k** (On voit bien sur la figure III.3(d) que le splitting de spin suivant la direction [110] est presque nul à $k_{//}$=0.03 Å^{-1}. Ce résultat est montré également sur la figure III.3(b)).

La figure III.3(c) montre le splitting de spin dans la bande de valence pour différentes valeurs du vecteur d'onde $k_{//}$. En comparant cette figure avec celle de III.3(a), on voit que le splitting de spin a la même amplitude dans la bande de conduction que la bande de valence. Cela vient du fait que l'interaction spin-orbite a une même influence sur les états de trous et d'électrons. Cette explication peut être trouvée par un développement de l'équation de Dirac relativiste pour pouvoir réduire à une équation de Pauli représentante le cas non-relativiste [29].

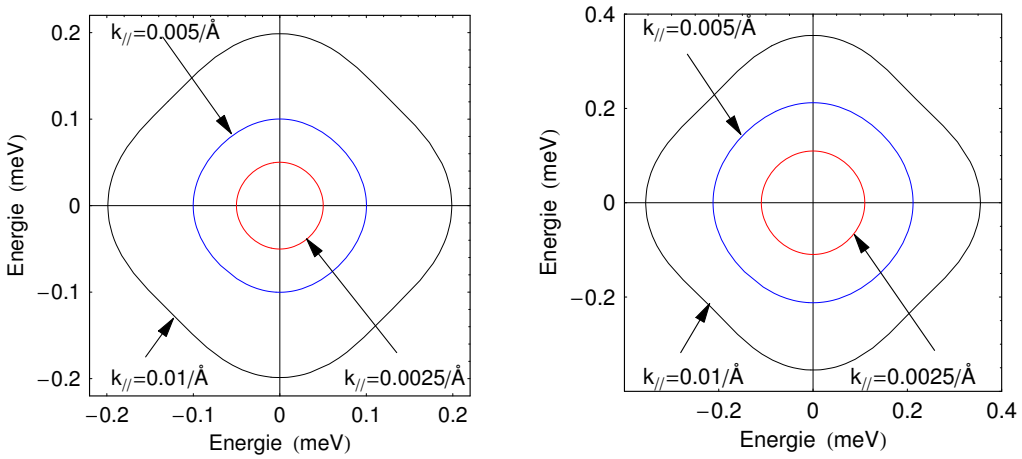
Splitting de spin du type IIA

Nous calculons dans ce paragraphe la contribution au splitting de spin due à l'asymétrie d'inversion à l'interface. Pour le faire, on introduit le Hamiltonien H_{BF} dans le Hamiltonien total de l'hétérostructure. On a ainsi deux contributions au splitting de spin : BIA et IIA. Rappelons que ce Hamiltonien H_{BF} contient d'une part une matrice (voir l'équation III.10) qui représente le couplage entre la bande de trou lourd, la bande de trou léger et la bande split-off, et d'autre part un préfacteur caractérisant l'interface qui est proportionnel à l'offset de la bande de valence pour le système **avec atome commun** selon la théorie développée par S. Cortez et al.

La figure III.4(a) présente le splitting de spin dans la bande de conduction du puits GaAs/Al(Ga)As en présence du terme d'interface. En comparant ce résultat avec celui présenté dans le paragraphe précédent (voir figure III.3(a) et III.3(b)), on voit donc que le splitting de spin de la bande de conduction est presque inchangé sous influence de l'effet d'interface. Ceci est dû au fait que le Hamiltonien H_{BF} ne fait référence qu'à la bande de valence[6]. Cependant, si on effectue un calcul analytique perturbatif en utilisant la théorie **k.p** jusqu'au troisième ordre [60], on obtiendra un terme concernant les interfaces qui contribue au splitting de spin de la bande de conduction d'une même manière que le terme BIA. Ce terme est très faible.

Quand on considère la bande de valence, son splitting de spin est nettement

[6]En fait, le terme H_{BF} ne couple pas d'électrons directement aux trous, cette interaction est inversement proportionnelle au carré de la bande interdite E_0^2, et le splitting de spin est donc plus faible dans la bande de conduction que dans la bande de valence.



(a) (b)

FIG. III.4: La variation angulaire du splitting de spin dans la bande de conduction (a) et dans la bande de valence (b) du puits quantique $Al_{0.3}Ga_{0.7}As/GaAs$ 100 Å de large, calculés en tenant compte du terme d'interface.

augmenté par rapport au cas où l'effet d'interface n'a pas été pris en considération, comme montré sur la figure III.4(b). En comparant deux figures III.3(c) et III.4(b) représentant deux situations : présence et absence du terme IIA respectivement, on obtient la valeur moyenne du splitting de spin dû à l'asymétrie d'inversion à l'interface $\Delta E_{iia} = 0.15$ meV à $k_{//}$=0.01 $Å^{-1}$.

Il est important de noter que le splitting de spin augmente lorsque la largeur du puits quantique diminue. Cela se comprend par un raisonnement simple : le Hamiltonien H_{BF} augmente lorsque le rapport entre le nombre d'atomes de l'interface et celui du massif augmente.

III.4.2 Splitting de spin de l'hétérojonction $GaAs/Al_{0.3}Ga_{0.7}As$

Nous nous intéressons maintenant au splitting de spin dans un gaz bidimensionnel de trous GaAs/(AlGa)As. Expérimentalement, ce splitting de spin a été mesuré par Störmer *et al.* [43] en 1983. Ils ont effectué les mesures de magnéto-transport à très basse température : entre 0.55 K et 4.2K, sur une hétérojonction GaAs/(AlGa)As dopée au Beryllium dont la concentration de dopage va jusqu'à 10^{18} cm^{-3}. L'échantillon est fabriqué par épitaxie par jet moléculaire (molecular beam epitaxy en anglais). Il comprend un substrat GaAs (001) semi-isolant dopé par Cr, suivi par 1 μm GaAs non-dopé, 70 Å (AlGa)As non-dopé et couvert par 500 Å AlGaAs dopé Be. La concentration d'Al est 50 %. Les auteurs ont utilisé également la méthode de la résonance cyclotron pour étudier l'effet Hall quantique dans ce gaz. En analysant les oscillations Shubnikov de Haas, ils ont obtenu le splitting de spin dans la bande de valence : 1.41 meV au niveau de Fermi $k_F = 1.96 * 10^6$ cm^{-1}.

Afin de vérifier ce résultat expérimental, nous allons calculer le splitting de spin dans la bande de valence de la même hétérojonction utilisée par Störmer, c'est à dire que l'on introduit un dopage de type p dans la barrière AlGaAs. La densité du

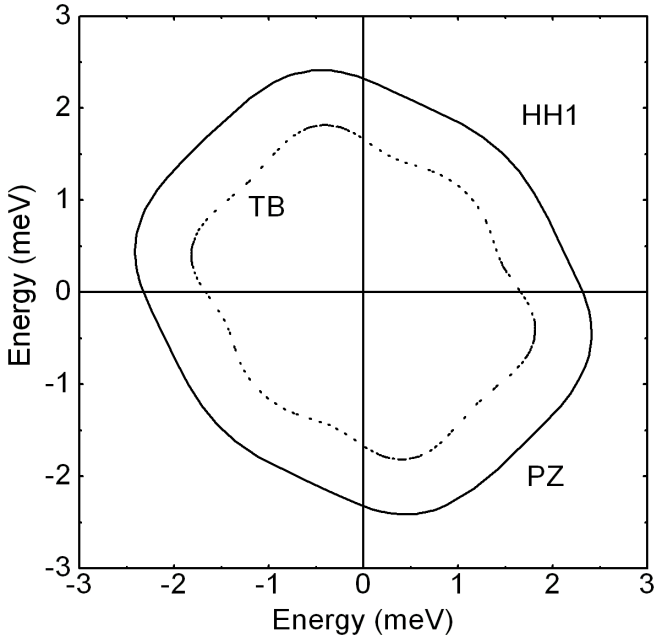


FIG. III.5: La variation angulaire du splitting de spin de la bande de valance de l'hétérojonction $Al_{0.3}Ga_{0.7}As/GaAs$ dopé de $p_s = 5 * 10^{11}$ cm^{-2} dans la barrière, au niveau de Fermi k_F=0.0196 Å^{-1}. La courbe continue est obtenue en utilisant les paramètres PZ alors que celle pointillée est obtenue en utilisant les paramètres TB.

dopage est $p_s = 5 * 10^{11}$ cm^{-2}, ce qui correspond à un champ électrique $E_z = 4 * 10^6$ V/m. Nous utiliserons donc l'approximation de Hartree présentée précédemment pour calculer le potentiel électrostatique créé par les porteurs, et puis l'insérer dans le programme principal sous la forme d'un Hamiltonien du type de Rashba. Nous prenons en considération également dans ce calcul le Hamiltonien H_{BF}. La figure III.5 montre la variation angulaire du splitting de spin de la première sous-bande de valence HH1. La courbe continue correspond à l'ensemble de paramètres PZ et la courbe pointillée correspond à l'ensemble de paramètres TB. Les deux courbes donnent la valeur moyenne du splitting de spin 2.28 meV et 1.65 meV respectivement. Nous obtenons donc un meilleur accord entre notre calcul numérique et l'expérience. Cela justifie encore une dernière fois notre choix des paramètres TB.

On voit également sur la figure III.5 le caractère anisotrope du splitting de spin. Il a une symétrie d'ordre 2 conformément à la symétrie C_{2v} de l'hétérojonction. Le splitting de spin possède deux directions privilégiés [110] et [1-10], correspondant à $\theta = \pi/4$ et $\theta = 3\pi/4$. Ces deux directions sont également celles de l'anisotropie optique.

III.5 L'anisotropie de l'absorption optique

L'étude de l'anisotropie optique des transitions dans les systèmes **avec ou sans atome commun** en présence ou en l'absence du champ électrique a été effectuée depuis une décennie au sein de l'équipe de P. Voisin. O. Krebs a terminé sa thèse en découvrant l'effet Pockels confiné quantiquement. Il a observé une forte anisotropie optique dans les hétérostructures **sans atome commun** InGaAs/InP [61]. À la suite, S. Cortez a modélisé l'anisotropie optique dans ces hétérostructures en utilisant les paramètres bien connu expérimentalement (c'est à dire les paramètres PZ). Ses résultats de modélisation indiquaient le rôle particulièrement important de l'élément matrice Q qui couple les bandes $\Gamma_{7c,8c}$ à $\Gamma_{7v,8v}$, et du couplage spin-orbite $\bar{\Delta}$. Cependant, comme nous en avons discuté précédemment, le paramètre $\bar{\Delta}$ est sous-estimé dans les travaux antérieurs. Il est donc intéressant de réexaminer ces calculs de l'anisotropie optique pour les nouveaux paramètres TB.

Nous allons donc dans la suite calculer le coefficient d'absorption et le taux de polarisation pour les polarisations suivant les directions [110] et [1-10]. Le calcul se fait dans un super-réseau GaAs/$Al_{0.3}Ga_{0.7}As$: 60 Å $Al_{0.3}Ga_{0.7}As$/ 100 Å GaAs/60 Å $Al_{0.3}Ga_{0.7}As$[7] et en tenant compte de tous les effets massifs et l'effet d'interface, et en présence d'un champ électrique de 40 kV/cm. Dans ce cas du puits **avec atome commun**, le couplage d'interface est un terme anti-symétrique dans le sens où chacune des interfaces contribue avec un signe opposé. L'application d'un champ électrique externe modifie les états de la bande de valence H1 et L1, qui se couplent alors entre eux.

La figure III.6 montre l'absorption optique et le taux de polarisation calculés en utilisant deux ensembles de paramètres TB et PZ. Nous remarquons que les spectres d'absorption des niveaux H1, L1 et H2 présentent une très forte absorption exitonique, et que l'absorption bande à bande est difficilement visible sur la transition fondamentale. Le tableau III.3 présente le splitting de l'énergie L1-H2 et H1-L1 obtenu par des calculs numériques et par l'étude en photocourant (d'après la thèse de Sébastien Cortez [11]). Nous obtenons donc un excellent accord entre le résultat numérique obtenu en utilisant l'ensemble des paramètres TB et l'expérience. Le fait que le splitting H2-L1 augmente de 5 meV (PZ) (et 12 meV par le calcul avec les paramètres TB.) à 12 meV (expérience) induit une forte anisotropie optique venant du mélange d'interface car celle-ci est inversement proportionnelle au splitting énergétique. La différence du splitting énergétique montre que le taux de polarisation de la transition L1-E1 est fort dans le résultat obtenu en utilisant les paramètres PZ par rapport au celui TB (6% et 2%) (voir les figures III.6(b), III.6(d) et III.6(f)).

[7] Je prends ces épaisseurs de couches pour pouvoir faire une comparaison avec l'ancien calcul de Sébastien Cortez.

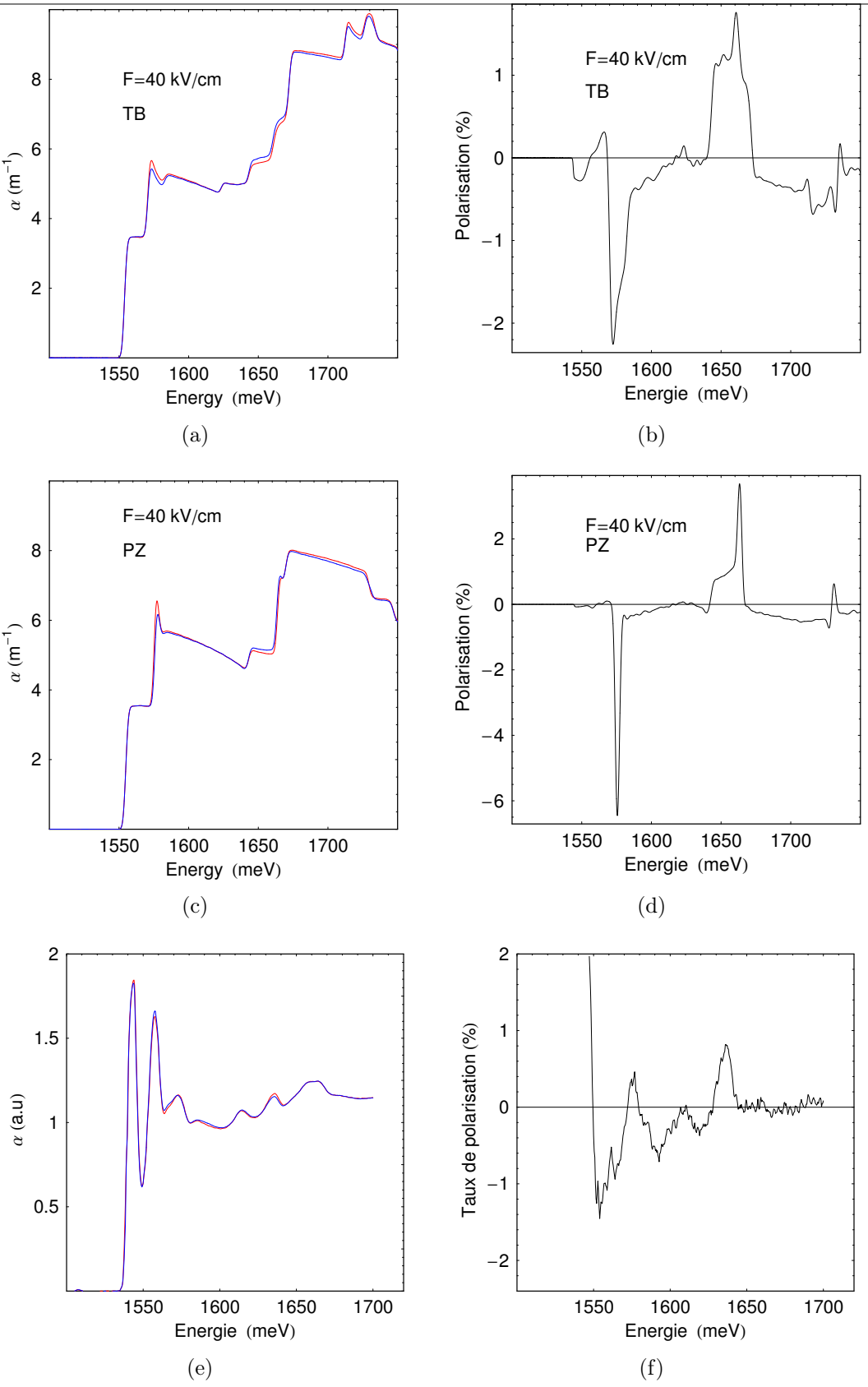


FIG. III.6: Absorption et taux de polarisation d'un puits quantique $GaAs/Al_{0.3}Ga_{0.7}As$ 100 Å de large sous 40 kV/cm, calculées en utilisant l'ensemble des paramètres TB (figures a et b), l'ensemble des paramètres PZ (figures c et d) et les mesures en photocourant (figures e et f) (d'après la thèse de Sébastien Cortez [11]). Les courbes rouges et bleues correspondent respectivement aux directions [110] et [1-10].

Paramètres	TB[26]	Zawadzki[23]	Expérience[11]
H1-L1 (meV)	17	21	15
L1-H2 (meV)	12	5	12

TAB. III.3: Splitting de spin des niveaux H1, L1, H2 d'un puits quantique GaAl/AlGaAs de 100 Å de large.

III.6 Conclusion

Nous avons dans ce chapitre calculé le splitting de spin des sous-bandes de conduction et de valence des hétérostructures de base GaAs. Nous avons tenu compte de tous les effets d'asymétrie d'inversion : BIA, SIA et IIA. Nous calculons pour la première fois le splitting de spin dû à l'asymétrie d'inversion des interfaces. Si on accepte la théorie de S. Cortez *et al* [8] qui lie le terme IIA à l'offset de bandes dans le cas anion commun, sa valeur est faible par rapport aux deux autres contributions dans les hétérostructures **avec atome commun**, mais elle peut être dominante dans les hétérostructures **sans atome commun**. Nous avons particulièrement comparé notre résultat numérique du splitting de spin avec les mesures expérimentales. l'excellent accord entre le calcul numérique utilisant l'ensemble des paramètres TB et l'expérience est indiqué. De plus, nous avons calculé l'absorption optique et le taux de polarisation pour un multipuits quantique GaAs/$Al_{0.3}Ga_{0.7}As$ de largeur de 100 Å. Notre résultat une fois encore, correspond très bien à des mesures expérimentales par l'étude du photocourant.

[8] Cette théorie est contestée par Foreman [82]et dans une moindre mesure, par Ivchenko et al.[8].

Chapitre IV

Compétition entre le splitting Zeeman et le couplage spin-orbite dans un 2DEG

Dans les chapitres précédents, nous avons examiné le rôle du couplage spin-orbite dans les hétérostructures semi-conductrices III-V dans le cadre du model **k.p** à 14 bandes. Ce court chapitre présente une approche différente permettant de comprendre l'influence de cette interaction relativiste sur les états électroniques et la structure de bande du gaz d'électron bidimensionnel en présence du champ magnétique.

Dans une première section, nous ferons un rappel sur les calculs des états électroniques et la structure de bande du gaz d'électrons bidimensionnel en présence du champ magnétique.

La deuxième section sera consacrée à calculer le spectre d'énergie du 2DEG en présence du couplage spin-orbite. Nous examinons dans un premier temps les cas simples avec lesquels on peut obtenir des solutions analytiques. Ce sont des cas où seul l'hamiltonien du type **Rashba** ou du type **Dresselhaus** est présent, ou bien ces deux contributions ont la même amplitude [1]. Ensuite, en utilisant la théorie de perturbation du deuxième ordre, nous calculerons de manière approximative le spectre d'énergie pour les cas où une des deux contributions est faible par rapport à l'autre. Une comparaison des résultats numériques et aux résultats approchés sera faite à la fin du chapitre. La densité d'états a été également calculée, elle manifeste des battements contrairement aux pics de Landau.

Cette étude permet de comprendre l'effet du champ magnétique, donc la contribution de Zeeman, par rapport aux deux termes du couplage spin-orbite.

[1] C'est à dire que les deux coefficients caractéristiques α et β sont égaux.

IV.1 Structure de bande du gaz bidimensionnel en présence du champ magnétique

L'étude théorique et expérimentale du gaz d'électron bidimensionnel dans le contexte de l'effet Hall quantique a été couronnée dans les années 80 par l'attribution des prix Nobel à K. von Klitzing en 1985 [64] et à D. C. Tsui, H. L. Störmer et R. B. Laughlin [65] en 1998. Cette partie rappelle quelques propriétés concernant les niveaux de Landau dans ce gaz. En fait, en l'absence du champ magnétique, les électrons qui conduisent le courant dans un semi-conducteur remplissent les états d'une bande d'énergie, la bande de conduction, depuis le bas de la bande jusqu'à une énergie maximale, appelée énergie de Fermi E_F.

En présence du champ magnétique, le mouvement bidimensionnel des électrons est dévié par la force de Lorentz. Les électrons ont tendance à décrire des orbites circulaires, dans le plan x-y, perpendiculaire au champ magnétique. Le rayon de ces orbites est d'autant plus petit que le champ magnétique est grand. La taille de ces orbites est réglée de telle manière qu'un quantum de flux magnétique Φ_0 la traverse. De telles orbites, de même énergie, côte à côte, pourront remplir l'échantillon avec une densité proportionnelle à B_z/Φ_0, puisque la densité, par unité de surface, varie comme l'inverse de la taille d'une orbite. Très précisément, le champ magnétique transforme complètement la bande continue d'états électroniques en une série de niveaux, calculée en premier par Landau [66], régulièrement espacés (l'espacement, appelé énergie cyclotron, est proportionnel au champ magnétique). Le nombre d'électron qu'on peut mettre dans chaque niveau de Landau est lui aussi proportionnel au champ magnétique. S'il existe des impuretés dans l'échantillon, c'est souvent le cas, les niveaux de Landau sont élargis et deviennent de bandes. Les électrons d'un niveau vont présenter des énergies diverses selon la valeur de l'énergie potentielle créée par les impuretés dans la région où est principalement située leur orbite sous l'influence du champ magnétique.

Considérons maintenant un gaz d'électron bidimensionnel dans le plan x-y et le champ magnétique le long de l'axe Oz. Le Hamiltonien de l'électron en l'absence du couplage de spin-orbite s'écrit [64, 65] :

$$H_0 = \frac{(\vec{p} + e\vec{A})^2}{2m^*} + \frac{1}{2} g^* \mu_B B \sigma^z \tag{IV.1}$$

où $\vec{p} = (p_x, p_y)$ est l'opérateur du moment cinétique d'électrons, m^* leur masse effective, g^* est le facteur effectif de Landé, μ_B est le magnéton de Bohr, $(\sigma^x, \sigma^y, \sigma^z)$ sont des matrices de Pauli et A est le potentiel vecteur associé au champ magnétique que l'on utilise dorénavant le jauge asymétrique de Landau $\vec{A} = (0, Bx, 0)$ [2]

Définissons les opérateurs :

$$a = \frac{l_B}{\hbar\sqrt{2}}(P_x - iP_y)$$
$$a^+ = \frac{l_B}{\hbar\sqrt{2}}(P_x^+ + iP_y^+)$$

[2]Lorsqu'on veut calculer le spectre du centre d'impureté ou les excitons, ce jauge de Landau est moins commode que le jauge symétrique : $\vec{A} = \frac{B}{2}(-y, x, 0)$

où $\vec{P} = \vec{p} + e\vec{A}$. Ces opérateurs satisfont les relations habituelles des opérateurs annihilation et création de l'oscillateur harmonique : $[a, a^+]$=1. On peut donc réécrire le hamiltonien IV.1 :

$$H_0 = \hbar\omega_c(a^+a + \frac{1}{2}) + \frac{1}{2}g^*\mu_B B\sigma^z \tag{IV.2}$$

Dans ce cas ci la composante suivant l'axe x, la composante suivant l'axe y d'une part et la composante de spin du mouvement de l'électron d'autre part sont découplés [67]. Les fonctions propres de le Hamiltonien peuvent être écrites sous la forme factorisée : $|n, \sigma\rangle = |n\rangle|\sigma\rangle$. Les kets $|n\rangle$ sont les fonctions propres de l'opérateur numéro a^+a, tel que $a^+a|n\rangle = n|n\rangle$, où n=0,1,2... est l'indice des niveaux de Landau. Les énergies propres correspondantes sont :

$$E_n^\sigma = (n + 1/2)\hbar\omega_c + \sigma g^*\mu_B B/2 \tag{IV.3}$$

et les fonctions d'ondes

$$\Psi(x, y) = \langle \mathbf{r}|n, \sigma\rangle = \frac{e^{ik_y y}}{\sqrt{L_y}}\Phi_n(x)|\sigma\rangle \tag{IV.4}$$

avec

$$\Phi_n(x) = \frac{e^{-\frac{(x+x_c)^2}{2l_B^2}}}{\sqrt{\sqrt{\pi}2^n n! l_B}} H_n[\frac{(x + x_c)}{l_B}]$$

où $H_n(x)$ est le polynôme de Hermite, $\omega_c = \frac{eB}{m^*}$ est la fréquence de cyclotron, $x_c = l_B^2 k_x$, $l_B = \sqrt{\hbar/eB}$ est la longueur magnétique et $|\sigma\rangle = |\pm\rangle$ sont des états de spin d'électron qui sont écrits comme un vecteur en colonne (1,0) si le spin pointe vers le haut et comme (0,1) s'il pointe vers le bas.

La figure IV.1 présente le diagramme en éventail des six premiers niveaux de Landau et la densité d'états calculée par la formule (IV.7) pour un champ magnétique B=2T. En raison du fait que le splitting de Zeeman est très faible (de l'ordre 1%) par rapport à l'espacement entre deux niveaux de Landau $\hbar\omega_c$, on ne voit pas clairement le dédoublement des traits sur la figure IV.1.

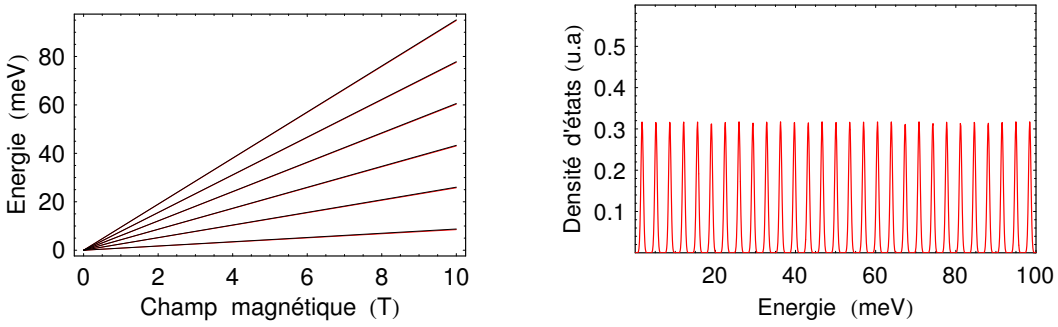
Densité d'états

On traite notre problème pour le cas du gaz bidimensionnel dans l'approximation où le mouvement suivant l'axe z et celui dans le plan x-y sont séparables. La densité d'états (DOS) totale est donc la somme de toutes les contributions venant des différentes sous-bandes. On suppose que les électrons occupent une seule sous-bande. La densité d'états totale est alors :

$$D(E, B) = \sum_{n,k_y,\sigma} \delta(E - E_n^\sigma - \varepsilon_1) \tag{IV.5}$$

Comme l'énergie ne dépend pas de k_y, cette somme est indépendante de k_y. La somme sur k_y vaut donc un facteur qui est exactement la dégénérescence[3] de chaque

[3]Cette dégénérescence est le nombre du centre x_c dans l'échantillon.



IV.1.a IV.1.b

FIG. IV.1: La densité d'états calculée à B=2T (à droite) et le diagramme en éventail chart (à gauche) de 6 premiers niveaux de Landau attaché à la première sous-bande avec l'énergie de confinement ε_1 du 2DEG dans GaAs avec l'élargissement Γ=0.3 meV et le facteur de Landé g*=-0.44.

niveau de Landau par unité de surface : $\frac{1}{2\pi l_B^2}$. La densité d'états totale par unité de surface est alors :

$$D(E,B) = \frac{1}{2\pi l_B^2} \sum_{n,\sigma} \delta(E - E_n^\sigma - \varepsilon_1) \tag{IV.6}$$

Cette densité d'états est bien évidemment affectée par l'imperfection des échantillons considérés. La présence des impuretés, les défauts sur l'interface des hétérostructures, etc. élargissent les pics delta. L'élargissement des niveaux de Landau dépend donc fortement des échantillons, de la nature de leur désordre. En 1974, Ando [68] a proposé un modèle simple de la densité d'états élargie en utilisant l'approximation de second ordre de Born pour effectuer un traitement auto consistant du potentiel d'interaction électron-désordre. Il supposait également que le champ magnétique est suffisamment grand pour pouvoir négliger le mélange des niveaux de Landau dû au désordre. La formule empirique la plus populaire pour la densité totale est obtenue en remplaçant la fonction delta dans l'équation (IV.6) par une Gaussienne[4] :

$$D(E,B) = \frac{1}{2\pi l_B^2} \sum_{n,\sigma} \frac{1}{\Gamma\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{(E-E_n^\sigma-\varepsilon_1)^2}{2\Gamma^2}} \tag{IV.7}$$

où Γ est l'élargissement des bandes.

[4]Sauf mention particulière, dans ce chapitre nous utilisons cet élargissement Gaussien pour calculer la densité d'états.

IV.2 Structure de bande du gaz bidimensionnel en présence du couplage spin-orbite

En présence du couplage spin orbite, et de l'asymétrie inversion du 2DEG, s'ajoutent au Hamiltonien (IV.1) deux contributions : **Rashba** et **Dresselhaus**. Pour faciliter le calcul, nous nous intéressons à étudier seulement le cas où le terme en $k_{//}^3$ de la contribution Dresselhaus est négligeable ($k_{//}$ étant la composante dans le plan du vecteur d'onde $\mathbf{k}$). Ceci est vrai dans un puits quantique étroit de grande bande interdite comme GaAs[5]. Les deux nouveaux termes s'écrivent :

$$H_R = \frac{\alpha}{\hbar}(\sigma^x P_y - \sigma^y P_x) = \hbar\omega_c \alpha_0 \begin{pmatrix} 0 & a \\ a^+ & 0 \end{pmatrix} \tag{IV.8}$$

$$H_D = \frac{\beta}{\hbar}(\sigma^x P_x - \sigma^y P_y) = \hbar\omega_c \beta_0 \begin{pmatrix} 0 & ia^+ \\ -ia & 0 \end{pmatrix} \tag{IV.9}$$

où on introduit deux paramètres sans dimension $\alpha_0 = \alpha\sqrt{\frac{2m^*}{\hbar^3\omega_c}}$ et $\beta_0 = \beta\sqrt{\frac{2m^*}{\hbar^3\omega_c}}$.

Le fait que l'on écrit ces deux contributions en fonction des opérateurs a et a^+, nous permet de voir l'effet de l'interaction spin-orbite sur les états de Landau. En fait, elle groupe ces états dans deux groupes $|n, \sigma_n\rangle$, $|n, -\sigma_n\rangle$ avec $\sigma_n = (-1)^n$ et les états dans un même groupe se couplent entre eux (voir la figure IV.2). Le terme linéaire de **Rashba** couple l'état $|n, \downarrow\rangle$ à l'état $|n-1, \uparrow\rangle$ et le terme de **Dresselhaus** couple l'état $|n, \uparrow\rangle$ à l'état $|n-1, \downarrow\rangle$.

Comme l'action de ces deux nouveaux Hamiltoniens sur une composante de la fonction d'onde en l'absence du couplage spin-orbite donne une autre composante dans la même base de fonctions d'onde, on peut donc chercher la nouvelle fonction propre sous la forme : $\Psi = \sum_n C_n^\sigma |n, \sigma\rangle$. On substitue cette fonction d'onde dans l'équation de Schrödinger $H\Psi = E\Psi$, et puis multiplie des deux côtés par $\Phi_{n-1}(x)$ ou $\Phi_{n+1}(x)$ et intègre sur la variable x en utilisant les propriétés des polynômes de Hermite ; on obtient le système d'équation suivant :

$$\frac{\alpha\sqrt{2n}}{l_B} C_{n-1}^+ + (\varepsilon_n^- - E) C_n^- - i\frac{\beta\sqrt{2(n+1)}}{l_B} C_{n+1}^+ = 0 \tag{IV.10}$$

$$i\frac{\beta\sqrt{2(n+1)}}{l_B} C_n^- + (\varepsilon_{n+1}^+ - E) C_{n+1}^+ + \frac{\alpha\sqrt{2(n+2)}}{l_B} C_{n+2}^- = 0 \tag{IV.11}$$

Ces deux équations sont valides pour le groupe $|n, \sigma_n\rangle$ avec n impair, et le groupe $|n, -\sigma_n\rangle$ avec n pair. C'est à dire que la matrice du Hamiltonien dans l'espace des états de Landau se réduit à deux matrices infinies indépendantes. On posera ensuite $\epsilon_\alpha = \alpha\sqrt{2}/l_B$, et $\epsilon_\beta = \beta\sqrt{2}/l_B$. La matrice correspondant au groupe $|n, \sigma_n\rangle$ s'écrit :

[5] Pour un puits étroit, le terme linéaire en $k_{//}$ est proportionnel à l'inverse du carré de sa largeur. Il est donc dominant si $k_{//} \ll \frac{\pi}{d}$

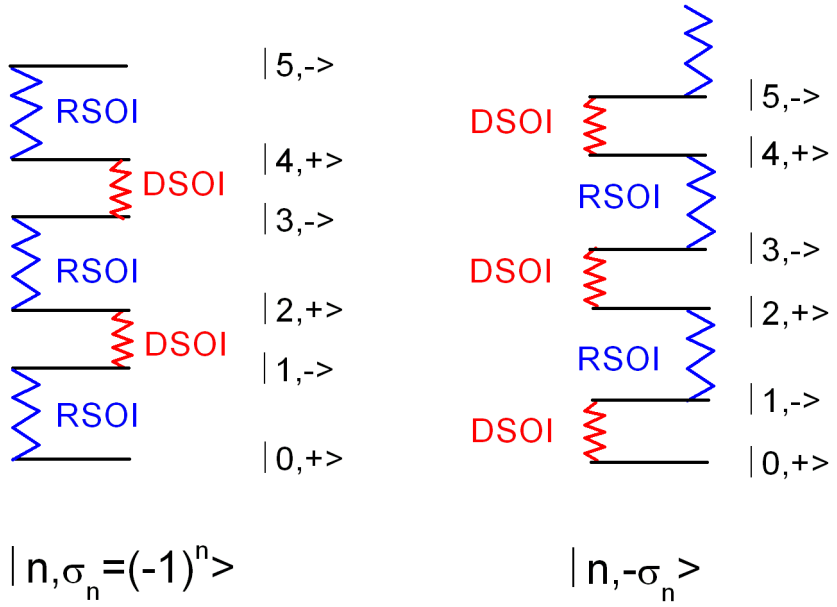


FIG. IV.2: L'action des termes de Rashba (RSOI : Rashba spin orbit interaction) et Dresselhaus (DSOI : Dresselhaus spin orbit interaction) sur les états dans deux groupes $|n, \sigma_n\rangle$ et $|n, -\sigma_n\rangle$.

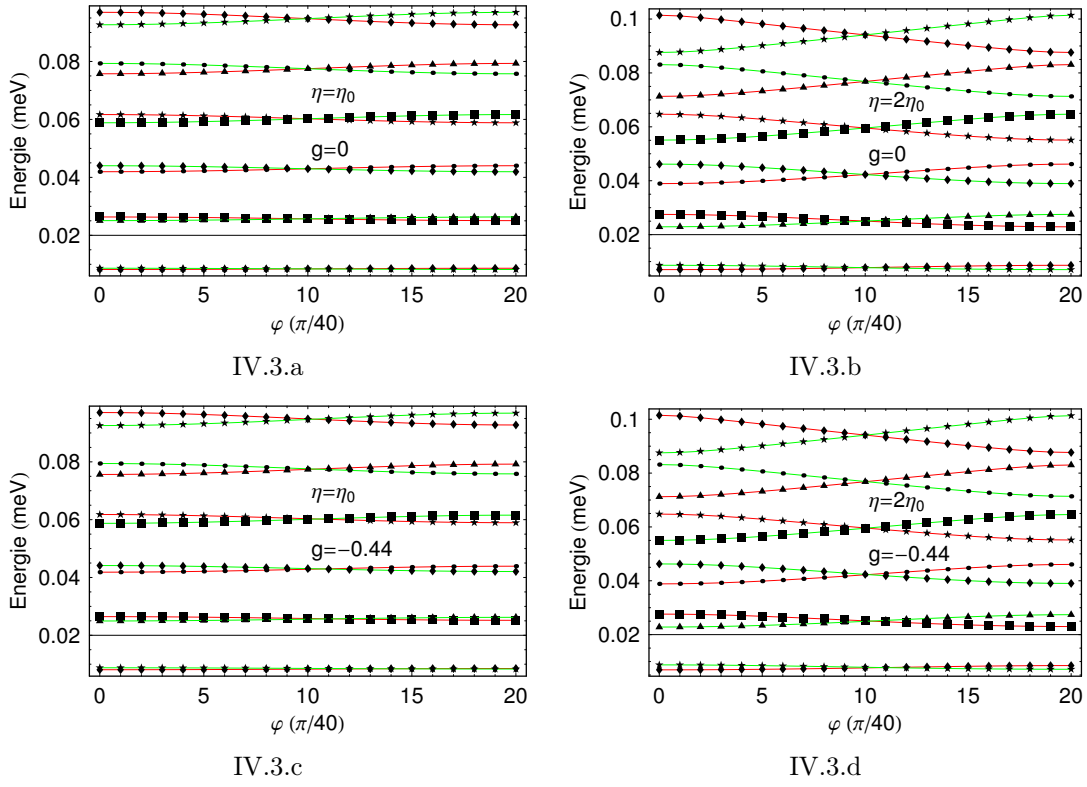
$$\begin{bmatrix} \varepsilon_0^+ & \epsilon_\alpha & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ \epsilon_\alpha & \varepsilon_1^- & -i\sqrt{2}\epsilon_\beta & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & i\sqrt{2}\epsilon_\beta & \varepsilon_2^+ & \sqrt{3}\epsilon_\alpha & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & \sqrt{3}\epsilon_\alpha & \varepsilon_3^- & -i2\epsilon_\beta & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & i2\epsilon_\beta & \varepsilon_4^+ & \sqrt{5}\epsilon_\alpha & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \sqrt{5}\epsilon_\alpha & \varepsilon_5^- & -i\sqrt{6}\epsilon_\beta & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{bmatrix} \tag{IV.12}$$

et celle pour le groupe $|n, -\sigma_n\rangle$ est :

$$\begin{bmatrix} \varepsilon_0^- & -i\epsilon_\beta & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ i\epsilon_\beta & \varepsilon_1^+ & \sqrt{2}\epsilon_\alpha & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & \sqrt{2}\epsilon_\alpha & \varepsilon_2^- & -i\sqrt{3}\epsilon_\beta & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & i\sqrt{3}\epsilon_\beta & \varepsilon_3^+ & 2\epsilon_\alpha & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 2\epsilon_\alpha & \varepsilon_4^- & -i\sqrt{5}\epsilon_\beta & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & i\sqrt{5}\epsilon_\beta & \varepsilon_5^+ & \sqrt{6}\epsilon_\alpha & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{bmatrix} \tag{IV.13}$$

On peut donc obtenir un spectre d'énergie en résolvant numériquement les deux matrices ci-dessus. Afin d'avoir un meilleur résultat, nous tenons compte d'un grand nombre de niveau de Landau. Le spectre obtenu dépend bien évidemment des deux coefficients α et β.

Pour le gaz d'électron formé à l'interface du GaAs et (AlGa)As, on prendra les valeurs expérimentales du α et β obtenues récemment par le groupe de C. Marcus à



IV.3.a IV.3.b

IV.3.c IV.3.d

FIG. IV.3: Le spectre d'énergie du 2DEG à l'interface du puits quantique GaAs/AlGaAs en fonction de l'angle φ ($\tan\varphi = \alpha/\beta$) pour deux valeurs de η dans le champ magnétique perpendiculaire B=100 G. La masse effective utilisée est m^*=0.067 m_0. Les deux images en haut (IV.3.a et IV.3.b.) sont obtenues en l'absence d'effet Zeeman (g*=0).

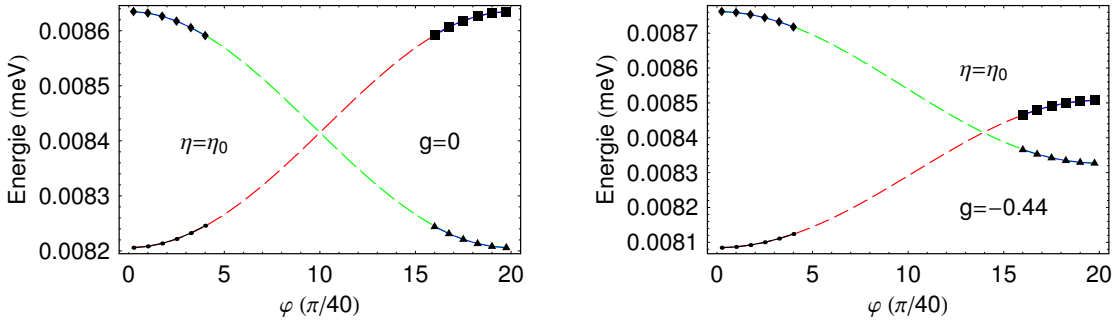
l'Université de Harvard [32]. Ils ont utilisé la méthode de l'antilocalisation faible que nous utiliserons également dans la deuxième partie de cette thèse, pour les estimer. La valeur de α dépend de la concentration du dopage au Si. Par contre, β est un coefficient intrinsèque, il dépend seulement du matériau que l'on utilise. Ces deux coefficients varient donc indépendamment les uns et les autres. Wang et Vasilopoulos [69] ont proposé d'étudier le spectre du 2DEG dans le plan α-β, c'est à dire que l'on introduit un angle φ qui relie ces deux facteurs par la relation :

$$\alpha = \eta \sin\varphi$$
$$\beta = \eta \cos\varphi$$

où η est un paramètre ajustable. Dans cette étude, on utilise deux valeurs de η : 5 meV.Å et 10 meV.Å. Comme α et β sont positifs, on étudie seulement le cas $0 < \varphi < \pi/2$. Le résultat pour α, β négatifs peut être obtenu par la symétrie.

Les figures IV.3 présentent des résultats numériques pour le spectre d'énergie du gaz bidimensionnel formé à l'interface du GaAs et (AlGa)As pour deux valeurs différentes de η et pour deux valeurs du facteur de Landé g*=0 et g*=-0.44. Le facteur Landé varie d'un échantillon à un autre[6], mais ici on utilise g*=-0.44, la

[6]En fait, il varie en fonction croissante de l'énergie et il dépend de la largeur du puits.



IV.4.a IV.4.b

FIG. IV.4: Le premier niveau de Landau du 2DEG GaAs/(AlGa)As à B=100 G, m^*=0.067 m_0 pour deux valeurs différentes du facteur de Landé g*=0 et g*=-0.44. Les points noirs sont reliés entre eux par une courbe bleu et ils représentent des valeurs de l'énergie approximative (IV.24) pour $\alpha > 10\beta$ et $\alpha < 0.1\beta$.

valeur du GaAs massif. Le couplage spin-orbite clive les niveaux de Landau en deux branches de spin : branche + et - qui se croisent lors que φ varie (la courbe rouge correspond à la branche +, celle en verte correspond à la branche -). On voit bien qu'à faible champ magnétique, lorsque le couplage spin-orbite n'est pas négligeable devant la contribution principale, la séparation d'énergie entre deux branches de spin augmente avec l'augmentation de η. C'est à dire que la séparation d'énergie entre deux branches de spin dans le cas où η =2η_0=10 meV.Å est plus grande que celle dans le cas η=η_0=5 meV.Å. Bien évidemment à "fort" champ magnétique (de l'ordre 0.1 T) la contribution principale domine[7], on ne voit plus la séparation ainsi que le croisement entre deux branches de spin (on le voit si on fait un zoom numérique sur la région correspondante, mais cela ne donne pas d'informations intéressantes.). Ces deux branches de spin pour un même niveau de Landau sont dégénéré à α = β ($\varphi = \pi/4$) en absence du terme de Zeeman. L'effet Zeeman déplace donc le point de croisement de deux branches vers la gauche ou la droite suivant le signe du facteur de Landé. Cette dégénérescence d'énergie apparaît à plusieurs valeur de φ, et à chaque niveau de Landau correspond un point de dégénérescence (voir la figure IV.3.d). Pour mieux voir cet effet, on fait un zoom sur le premier niveau de Landau (voir la figure IV.4). Cette figure montre le premier niveau de Landau calculé pour la même constante de spin-orbite : la figure à gauche contient deux branches de spin en l'absence du terme Zeeman tandis que dans celle à droite le terme Zeeman est présent. Le point de croisement entre deux branches de spin se déplace nettement vers la droite.

Afin d'avoir un aperçu du problème, on cherche à résoudre les équations dans des cas analytiques. Ces solutions analytiques nous aident à étudier les propriétés de transport. En effet, le problème du mélange des niveaux Landau du 2DEG en présence du couplage spin-orbite a été examiné en premier par E.I. Rashba. Dans son célèbre article [46], il a introduit une contribution qui porte son nom, à l'Hamiltonien (voir le chapitre III), et il calculait également les niveaux de Landau dans ce cas là. Le

[7] l'espacement entre deux niveau de Landau sera plus grand que la contribution venant de l'interaction spin-orbite

spectre d'énergie est donc exact dans le cas où seul un terme (IV.8) ou (IV.9) existe (soit α=0 ou soit β=0). Nous montrerons par un calcul simple que l'on aura une solution exacte en l'absence du terme de Zeeman si α=β. En suite, nous discuterons les solutions approximatives pour $\alpha \gg \beta$ ou $\alpha \ll \beta$ et pour $\alpha \approx \beta$.

IV.2.1 La solution exacte pour 3 cas :($\alpha \neq 0, \beta = 0$), ($\alpha = 0, \beta \neq 0$) et ($\alpha = \beta$)

Le cas $\alpha = 0$ ou $\beta = 0$

a) $\alpha \neq 0$ et $\beta = 0$: Dans ce cas, les matrices (IV.12) et (IV.13) deviennent des matrices avec des blocks 2×2 sur la diagonale. Prenons, par exemple, la matrice (IV.12). Elle contient des blocks 2×2 sur la diagonale dont la solution nous donne les niveaux de Landau pour les états $|n, \sigma_n\rangle$. Les niveaux de Landau d'indice n sont les valeurs propres de la matrice 2×2 :

$$\begin{bmatrix} \varepsilon_n^+ & \sqrt{n+1}\epsilon_\alpha \\ \sqrt{n+1}\epsilon_\alpha & \varepsilon_{n+1}^- \end{bmatrix} \tag{IV.14}$$

Pour les états $|n, -\sigma_n\rangle$, on a une matrice infinie qui commence par la valeur ε_0^- et une série des blocks de matrice 2×2. La solution de ces blocks donne les valeurs propres et vecteurs propres du Hamiltonien $H_0 + H_\alpha$. On obtient sans difficulté l'expression générale de l'énergie des niveaux de Landau :

$$\varepsilon_n^\pm = (n + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2})\hbar\omega_c \mp \frac{1}{2}\sqrt{(\hbar\omega_c - g\mu_B B)^2 + 8\frac{\alpha^2}{l_B^2}(n + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2})} \tag{IV.15}$$

avec n=0,1,2...Les vecteurs propres correspondants sont des spineurs donnés par :

$$\Psi_n^\sigma = \frac{e^{ik_y y}}{\sqrt{L_y}} \begin{pmatrix} \sin\theta_n^\sigma \Phi_{n-1}(x) \\ \cos\theta_n^\sigma \Phi_n(x) \end{pmatrix} \tag{IV.16}$$

Où θ_n^σ est la l'angle de mélange qui varie de 0 (lorsque $\alpha = 0$) à $\pi/4$ (lorsque le couplage spin-orbite est fort) et est donnée par :

$$\tan 2\theta_n = \frac{2\sqrt{n}\alpha m^* l_B}{\hbar^2(1 - g\frac{m^*}{m_0})}$$

b) $\alpha = 0$ et $\beta \neq 0$: De la même manière que le cas précédent, cette fois le terme Dresselhaus couple l'état Ψ_n^+ de spin-up à l'état Ψ_{n-1}^- de spin-down. On obtient facilement les vecteurs propres et les niveaux de Landau pour le système :

$$\varepsilon_n^\pm = (n + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2})\hbar\omega_c \mp \frac{1}{2}\sqrt{(\hbar\omega_c + g\mu_B B)^2 + 8\frac{\beta^2}{l_B^2}(n + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2})} \tag{IV.17}$$

Et

$$\Psi_n^\sigma = \frac{e^{ik_y y}}{\sqrt{L_y}} \begin{pmatrix} \sin\theta_n^\sigma \Phi_n(x) \\ \cos\theta_n^\sigma \Phi_{n-1}(x) \end{pmatrix}$$

Le cas $\alpha = \pm\beta$ en l'absence du terme Zeeman

Les plus grandes valeurs de α et β observées dans les semi-conducteurs III-V sont de l'ordre de quelques 0.1 eV.Å[72, 54]. L'estimation du coefficient de Dresselhaus dans une configuration de confinement est obtenue par la relation $\beta{=}\gamma\langle k_z^2\rangle$, où γ est une constante spécifique du matériau[8], et $\langle k_z^2\rangle$ est la valeur moyenne du carré de vecteur d'onde suivant l'axe de croissance sur les fonctions d'ondes. Pour un puits infini de largeur w=50 Å, on trouve $\langle k_z^2\rangle{=}(\pi/w)^2$, ce qui donne $\beta \approx 0.09$ eV.Å. Par conséquent, il n'y a pas en principe de difficulté pour réaliser la situation $\alpha = \pm\beta$. Dans ce cas, le résultat pour $\alpha = -\beta$ peut s'obtenir à partir de celui de $\alpha = \beta$ par symétrie. C'est pour cette raison que l'on ne résout ici que ce dernier. L'Hamiltonien du système en l'absence du terme Zeeman est alors :

$$\begin{aligned} H_{\alpha,\beta} &= H_0(g=0) + H_\alpha + H_\beta \\ &= H_0(g=0) + (\frac{\alpha+\beta}{2})(P_x + P_y)(\sigma^x - \sigma^y) \end{aligned} \tag{IV.18}$$

Les fonctions d'ondes sont obtenues en diagonalisant ce Hamiltonien. La diagonalisation se fait via la transformation unitaire $U^+ H_{\alpha,\beta} U$ avec[9]

$$U = \begin{pmatrix} (1+i)/2 & -(1+i)/2 \\ 1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{2} \end{pmatrix}$$

Le nouveau Hamiltonien s'écrit donc :

$$\begin{aligned} H_{diagonal} &= \frac{p_x^2}{2m^*} + \frac{(p_y + eBx)^2}{2m^*} + (\frac{\alpha+\beta}{\hbar\sqrt{2}})(P_x + P_y) \\ &= \frac{(p_x + \sigma\hbar k_{\alpha,\beta}/\sqrt{2})^2}{2m^*} + \frac{(p_y + eBx + \sigma\hbar k_{\alpha,\beta}/\sqrt{2})^2}{2m^*} - \frac{\hbar^2 k_{\alpha,\beta}^2}{2m^*} \end{aligned} \tag{IV.19}$$

où $k_{\alpha,\beta} = \frac{\alpha+\beta}{4\hbar^2} m^*$. On cherche les fonctions d'ondes de même forme que celles précédentes (IV.4). On les obtient facilement :

$$\Psi_n^\sigma = \frac{e^{ik_y y}}{\sqrt{L_y}} e^{-i\sigma x . k_{\alpha,\beta}/\sqrt{2}} \Phi_n(x + \sigma x_{\alpha,\beta}) \begin{pmatrix} \sigma(1+i)/2 \\ 1/\sqrt{2} \end{pmatrix} \tag{IV.20}$$

avec $x_{\alpha,\beta} = l_B^2 k_{\alpha,\beta}/\sqrt{2}$, et les valeurs propres correspondantes sont :

$$\varepsilon_n^\sigma = (n + 1/2)\hbar\omega_c - \hbar^2 k_{\alpha,\beta}^2/2m^* \tag{IV.21}$$

Ce résultat nous montre que l'état de spin de la fonction d'onde est indépendant des coefficients α, β, et de vecteur d'onde. Cette propriété particulière est cruciale pour la proposition de fabriquer un transistor de spin à effet champ non balistique [73] ("nonballistic spin-field effect transistor".).

[8] Elle est en fait le coefficient du terme k^3 dans le splitting de spin et est de l'ordre 27 eV.Å^3.

[9] La matrice U est obtenue grâce à partir de la matrice $\sigma^x - \sigma^y$

IV.2.2 La solution approximative pour $\alpha \gg \beta$, $\alpha \ll \beta$ et $\alpha \approx \beta$

Le cas $\alpha \gg \beta$ ou $\alpha \ll \beta$

Ces deux cas correspondent au fait que un des deux Hamiltoniens H_β (ou H_α) est plus petit que $H_0 + H_\alpha$ (ou H_0+H_β). On traite donc H_β comme une perturbation du Hamiltonien total. On devrait donc calculer les éléments non-diagonals du Hamiltonien total dans la base des fonctions d'ondes Ψ_n^σ (voir l'équation IV.16) $\langle \Psi_m^\sigma | H_\beta | \Psi_n^{\sigma'} \rangle$. Comme $\alpha \gg \beta$, on négligera des termes contenant le produit $\alpha\beta$. En effet, ces termes viennent du produit de $\sin\theta_n^\sigma . \cos\theta_n^\sigma$. En utilisant les propriétés des polynômes de Hermite et en analysant les différentes possibilités pour $\sigma = \pm 1$ et $\sigma' = \pm 1$, on obtient

$$\langle \Psi_m^\sigma | H_\beta | \Psi_n^{\sigma'} \rangle = i(\sigma' - \sigma)\sqrt{m + \sigma}\frac{\epsilon_\beta}{2}\delta_{m,n-2\sigma} \tag{IV.22}$$

La matrice du Hamiltonien total est donc :

$$\begin{bmatrix} \varepsilon_1^- & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & ... \\ 0 & \varepsilon_0^+ & -i\epsilon_\beta & 0 & 0 & 0 & 0 & ... \\ 0 & i\epsilon_\beta & \varepsilon_2^- & 0 & 0 & 0 & 0 & ... \\ 0 & 0 & 0 & \varepsilon_1^+ & -i\sqrt{2}\epsilon_\beta & 0 & 0 & ... \\ 0 & 0 & 0 & i\sqrt{2}\epsilon_\beta & \varepsilon_3^- & 0 & 0 & ... \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \varepsilon_2^+ & -i\sqrt{3}\epsilon_\beta & ... \\ ... & ... & ... & ... & ... & ... & ... & ... \end{bmatrix} \tag{IV.23}$$

D'où les énergies propres

$$\xi_k^\sigma = \frac{\varepsilon_{k-1}^+ + \varepsilon_{k+1}^-}{2} + \frac{\sigma}{2}\sqrt{(\varepsilon_{k-1}^+ - \varepsilon_{k+1}^-)^2 + 4k\epsilon_\beta^2} \tag{IV.24}$$

avec k=0,1,2,... pour σ=1 et k=1,2,3,... pour σ=-1. Le résultat correspondant à $\alpha \ll \beta$ est obtenu de la même façon. Le spectre d'énergie est encore donné par l'équation (IV.24) avec α et β interéchangés.

Le cas $\alpha \approx \beta$

En décomposant la somme $H_\alpha + H_\beta$ sous la forme :

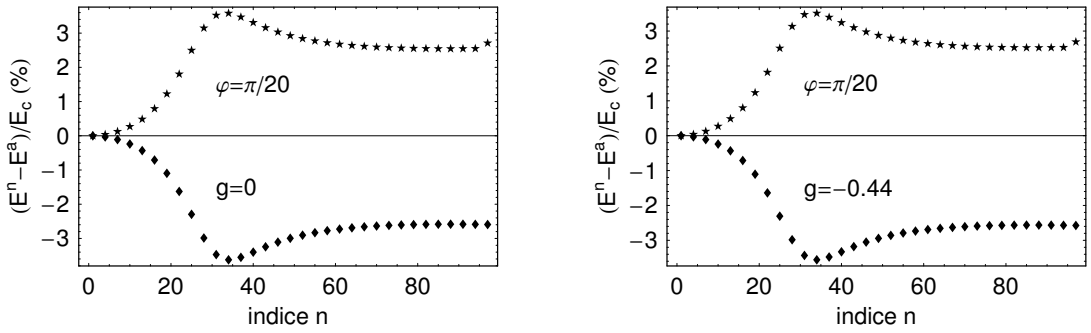
$$H_\alpha + H_\beta = \frac{\beta}{\hbar}(P_x + P_y)(\sigma^x + \sigma^y) + \frac{\alpha - \beta}{\hbar}(\sigma^x P_y - \sigma^y P_x) \tag{IV.25}$$

et en utilisant la transformation unitaire U, on obtient le terme non-diagonal du Hamiltonien total [10]

$$H_{off-diagonal} = i\sigma\sqrt{2}\frac{\alpha - \beta}{2\hbar}(p_y - p_x + eBx) - g^*\mu_B B/2 \tag{IV.26}$$

Grâce au fait que le terme de Zeeman est toujours très faible par rapport à l'énergie de Landau, et que $\alpha \approx \beta$, on peut donc traiter ce terme non-diagonal

[10] le terme diagonal est l'expression IV.19



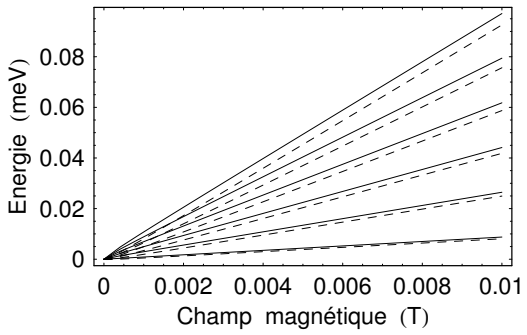
IV.5.a IV.5.b

FIG. IV.5: La différence de l'énergie entre les résultats analytique approximative E^a et numérique E^n, normalisé par l'espacement de Landau $E_c = \hbar\omega_c$. Ces résultats sont obtenus pour le 2DEG GaAs/(AlGa)As à B=100 G, m^*=0.067 m_0, $\eta = \eta_0$ et l'angle $\varphi = \pi/20$ avec deux valeurs différentes du facteur de Landé g*=0 et g*=-0.44.

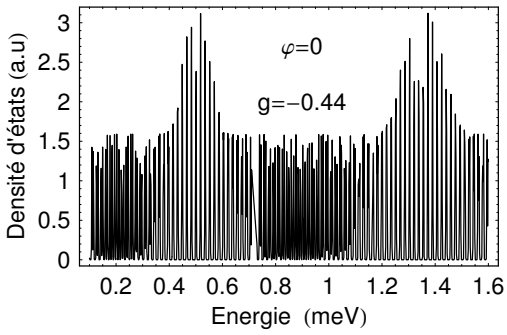
comme une perturbation du Hamiltonien total. L'utilisation de cette théorie de perturbation dans ce cas est très simple alors que pratiquement le calcul analytique du spectre d'énergie est très lourd. Il a une forme de $\varepsilon_n^\sigma + \sigma\Delta_n$, où Δ_n est la séparation de l'énergie de deux branches de spin du n^{ième} niveau.

Le spectre approximatif d'énergie calculé par l'équation IV.24 est montré par des points noirs reliés entre eux par une courbe bleue (voir la figure IV.4, cette courbe bleue coïncide avec la courbe verte.). Ces points sont calculés pour les cas $\alpha > 10\beta$ et $\alpha < 0.1\beta$, c'est à dire que $\tan\varphi > 10$ et $\tan\varphi < 0.1$. Ils sont bien en accord avec le calcul numérique (courbe rouge et verte). En vue de savoir comment se comportent les résultats analytiques pour les niveaux Landau d'indice élevé qui peuvent être occupés à faible champ magnétique, sur la figure IV.5 on présente la différence d'énergie entre le résultat numérique et celui approximatif pour un indice de Landau allant jusqu'à 100. Cette différence est normalisée par l'espacement de Landau. On voit donc que l'énergie approximative surestime l'énergie de sousbande d'une branche de spin (la branche "+" avec des étoiles) et sous-estime la deuxième sousbande (la branche "-" avec des carrés). En regardant la figure IV.3, on trouve que le gap d'énergie entre deux branches estimé par la formule approximative IV.24 est en général plus petit que la valeur qu'il devrait l'avoir. En présence du terme de Zeeman, avec g*=-0.44, la formule approximative donne un résultat (voir la figure IV.5.b) aussi précis que pour le cas où g*=0 et on a la même forme du graphique dans les deux cas.

La figure IV.6.a présente le diagramme en éventail de Landau pour 6 premiers niveaux de Landau en présence du couplage spin-orbite. Cette interaction clive nettement des niveaux de Landau en deux branche "+" (trait continu) et "-" (trait pointillé) à faible champ magnétique. La séparation de l'énergie entre deux branches augmente avec l'augmentation de l'indice n. En comparant cette figure IV.6.a avec la figure IV.1, on constate que le couplage spin-orbite modifie substantiellement ce le diagramme en éventail de Landau. C'est cette interaction qui est la cause des croisements des niveaux de Landau à très faible champ magnétique. Ces croisements se voient très clairement et donnent lieu à la résonance de la conductance dans l'effet Hall de spin [76], si on trace les niveaux d'énergies en fonction du coefficient effec-



IV.6.a



IV.6.b

FIG. IV.6: (a) Le fan chart de Landau calculé en présence du couplage spin-orbite attaché à la première sous-bande ε_1,(b) La densité d'états en fonction de l'énergie avec un élargissement de sousbande Γ=0.001 meV, le facteur de Landé g*=-0.44 à φ=0, pour le 2DEG GaAs/(AlGa)As.

tif de Rashba α_0. La différence de l'espacement dans un niveau dû au spin influe directement sur la modulation de la densité d'états comme montré dans la figure IV.7. Lorsque l'élargissement de sousbande d'un niveau est faible Γ=0.001 meV, la densité d'états (voir la figure IV.6.b) montre des pics de la même hauteur sauf si le niveau de différentes branches a la même énergie. Ceci peut être expliqué en se basant sur le fait que la contribution principale à la densité d'états à l'énergie fixe E vient de deux niveaux de deux branches différentes E^+_{n-1} et E^-_{n-1}, qui sont les plus près de E. S'il y a de plus un troisième niveau par exemple E^+_n qui a la même énergie que E^-_{n-1}, la contribution à la densité va augmenter, on aura donc un pic plus grand. Toute cette explication est vraie dans la limite où l'élargissement de Landau est très faible par rapport à l'espacement $\hbar\omega_c$. Par contre, s'il est plus grand, la densité d'états montre des battements. Les noeuds de ces oscillations apparaissent lorsque un niveau de la branche "-" se situe au milieu de deux niveaux de la branche "+". Dans les figures IV.7.a et IV.7.b, la densité d'états est esquissée en fonction de l'énergie en utilisant les même paramètres que dans les figures IV.7.c et IV.7.d, respectivement, mais avec un terme de Zeeman non nul g=-0.44. L'effet du terme Zeeman est de déplacer les niveaux de Landau et DOS le long de l'axe d'énergie, il n'affecte pas les battements. Les figures IV.7.c et IV.7.d sont calculées par les énergies approximatives (courbe noire) et les énergies numériques (courbe rouge) avec le cas où $\eta = \eta_0$ et $\varphi = \pi/20$. Le déplacement des noeuds et le changement de l'amplitude des oscillations entre deux cas ne sont pas substantiels. Ceci veut dire encore une fois que le calcul perturbatif (IV.24) pour le cas $\alpha \gg \beta$ est en bon accord avec le calcul numérique.

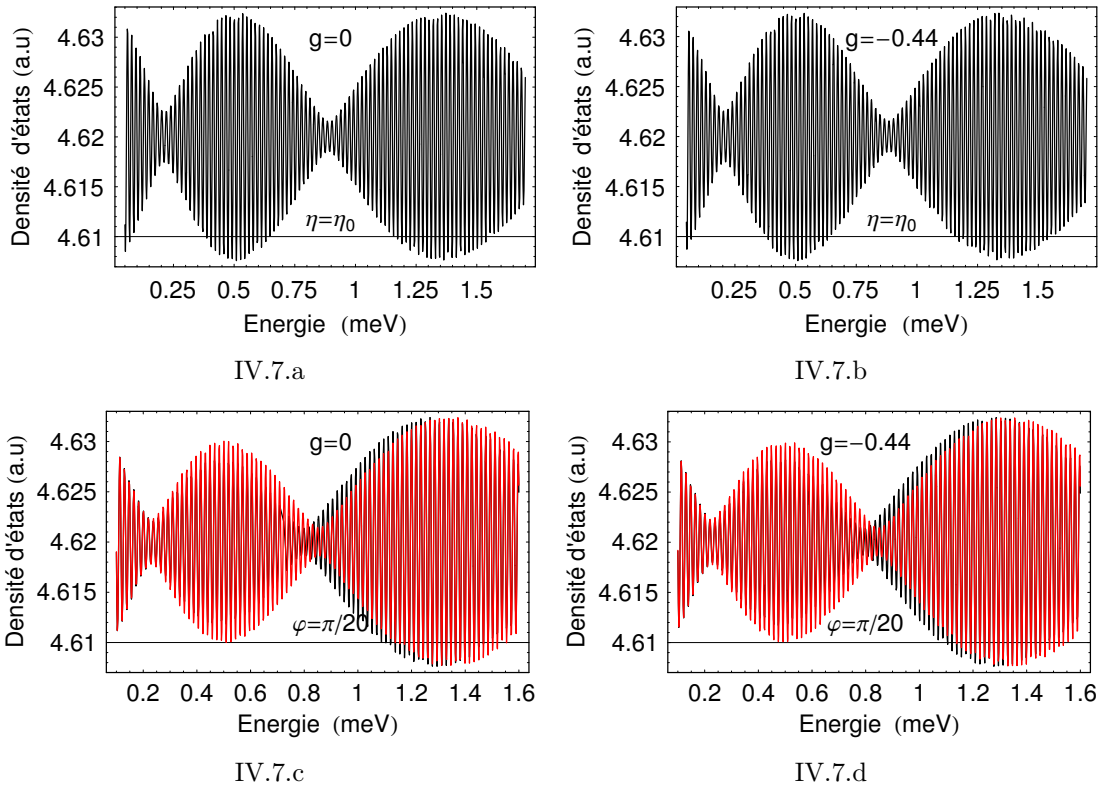


FIG. IV.7: La densité d'états en fonction de l'énergie calculé à B=100G, pour $\varphi = 0$ (IV.7.a et IV.7.b) et $\varphi = \pi/20$ (IV.7.c et IV.7.d). Les images à gauche (IV.7.a et IV.7.c) sont tracé avec g*=0, et celles à droite (IV.7.b et IV.7.d) avec g*=-0.44. L'élargissement de Landau Γ= 0.01 meV.

IV.3 Conclusion et discussion

Pour mieux comprendre le rôle du coulage spin-orbite dans le système bidimensionnel, et en particulier dans le gaz d'électrons bidimensionnel, nous avons utilisé le formalisme de seconde quantification simple pour rappeler les niveaux de Landau et les propriétés du gaz 2D GaAs dans le régime de fort champ magnétique. Puis, en branchant l'interaction spin-orbite, nous étudions la variation de ces niveaux ainsi que l'interférence entre le terme Zeeman et les deux contributions de spin-orbite : **Rashba** et **Dresselhaus**.

Dans le régime de fort champ magnétique (c'est à dire le régime où on ne tient pas compte des effets de cohérence quantique) et en l'absence du couplage de spin-orbite, la bande continue d'états électroniques est remplaceée par une série de niveaux discrets. Nous observons donc des pics delta (ou des Gaussiens si on considère une forme gaussienne pour la densité d'états) de la densité d'états.

Dans le régime où l'interaction spin-orbite est présente, les niveaux de Landau sont clivés en deux branches de spin qui sont dégénérées au point où les amplitudes de deux types de couplage spin-orbite **Rashba** et **Dresselhaus** sont égales. La position de ce point de dégénérescence dépend du champ magnétique.

Les calculs numériques du spectre et de la densité d'états du gaz bidimensionnel présentés dans ce chapitre est une étape nécessaire pour étudier dans la suite sa magnéto-conductivité. En pratique, le calcul de la magneto-conductivité est assez difficile, et il dépasse ce travail de thèse. Par contre, à la fin de cette thèse, W. Yang et K. Chang [70] ont réussi à calculer la magnéto-conductivité et ils discutent également la compétition entre le splitting Zeeman et le couplage spin-orbite dans un 2DEG.

Deuxième partie

Transport Quantique

Chapitre V

Transport quantique dans les structures de semi-conducteur mésoscopique : de la localisation faible à l'anti-localisation faible

La première partie de cette thèse a présenté des calculs numériques montrant le rôle important du couplage spin-orbite dans les hétéro-structures semi-conductrices III-V tels que : GaAs-AlAs, InAs-AlSb, (InGa)As-InP etc. Nous avons montré que ce couplage est particulièrement faible dans la bande de conduction et il affecte très peu les niveaux d'énergies du système. Par contre, il est plus grand dans la bande de valence.

Dans ce chapitre et le prochain chapitre nous proposons d'étudier le rôle de l'interaction spin-orbite par une approche basée sur les effets de la cohérence quantique sur le transport électronique. Cette approche dite "localisation faible" permet de mesurer le temps de cohérence de phase, le temps de collision élastique ainsi que celui correspondant au couplage spin-orbite. Nous déterminons ces temps en interprétant la magnétorésistance mesurée à faible champ magnétique dans le cas de la théorie des corrections quantiques (localisation faible) à la conductance.

Cette expérience est basée sur le fait que l'interaction spin-orbite dépend du niveau de Fermi, donc la densité d'électrons ; une grille a ainsi été utilisée pour moduler la concentration de porteurs. Nous pouvons donc nous attendre à ce qu'il y ait un "cross-over" entre deux régimes : la localisation faible et l'anti-localisation faible en fonction de la tension de grille.

Les deux premières sections du chapitre seront consacrées à la présentation du phénomène de la localisation faible. Nous décrivons en détail cette correction quantique en rappelant les notions de la probabilité classique et du croisement quantique.

Dans la troisième section, nous présenterons la correction de localisation faible à la conductance des systèmes de basse dimensionnalité en l'absence du champ

magnétique. Nous donnerons les grandes lignes de la dépendance en dimensionnalité et en température de cette correction.

La quatrième section s'intéresse au comportement de la localisation faible et de l'antilocalisation faible en présence du champ magnétique. Nous résumerons les propriétés du transport dans les systèmes bidimensionnels et unidimensionnels en présence du couplage spin-orbite.

V.1 Introduction à la localisation faible

L'effet de la localisation faible dans un métal ou un semi-conducteur (ce sont des systèmes désordonnés) est dû à l'interférence quantique constructive (destructive si l'interaction spin-orbite est grande) des ondes d'électrons de conduction qui sont dispersés par les mêmes centres (défaut ou l'impureté) mais se propagent suivant des chemins en sens opposés et donc retournent à l'origine avec la même phase (voir la figure V.1).

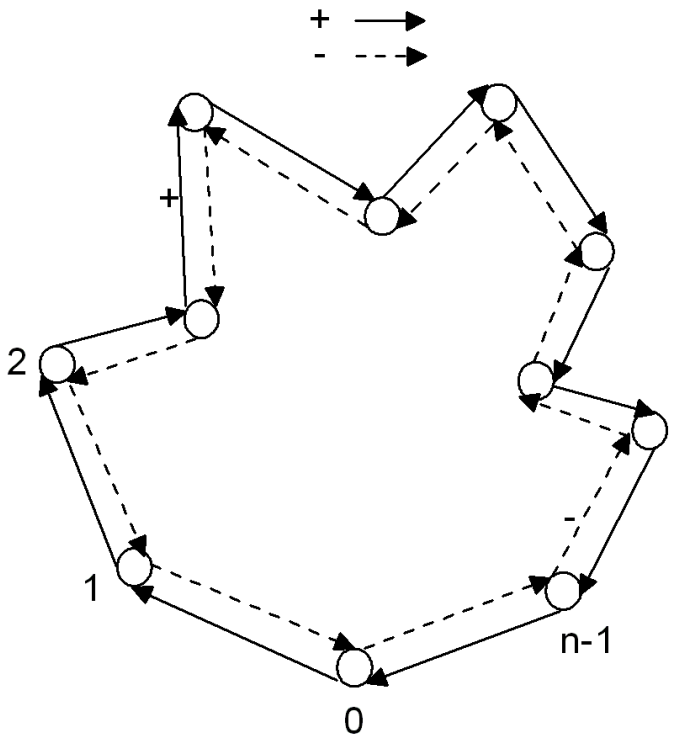


FIG. V.1: La correction de localisation faible de la résistance d'un semi-conducteur par la cohérence quantique des électrons provenant des interférences entre des chemins parcourant une même boucle en sens inverse.

La localisation faible existe dans les nanostructures 1D, 2D et 3D mais on peut facilement l'étudier dans le cas 2D. Ce dernier est très favorable pour les études expérimentales et la correction à la résistance est de l'ordre de 10^{-2} à 10^{-3} avec

la précision de 1%. Cet effet augmente la probabilité de faire une boucle, il mène à une diminution de la conductivité. Dans un champ magnétique, ces deux ondes opposées acquièrent une différence de phase $2e\Phi/c$, où Φ est le flux magnétique à travers la boucle enfermée par les trajectoires des électrons. Cette différence de phase brise l'interférence constructive et restaure la conductivité comme si elle n'était pas affectée par la correction quantique. On peut donc observer une augmentation de la conductivité en fonction du champ magnétique. Ce phénomène est connu sous le nom de la magnétorésistance négative ou bien la magnétoconductivité positive.

Lorsque l'on tient compte des effets de spin, l'interférence dépend significativement du spin total des électrons. L'état singlet avec un spin total J=0 donne à la correction de conductance une contribution positive (on verra que c'est l'antilocalisation faible.). Par contre, l'état triplet avec J=1 donne une contribution négative à la conductance. En l'absence de la relaxation de spin, la contribution de l'état singlet est annulée par celle venant d'un des états triplets. Par conséquent, la dépendance en champ magnétique de la conductivité est la même que dans le cas pour une particule sans spin. Cependant, en présence de la relaxation de spin, l'état triplet peut être supprimé alors que l'état singlet persiste. Le "cross-over" entre la magnétoconductivité négative à faible champ magnétique et la magnétoconductivité positive à fort champ magnétique peut conduire à un minimum sur la courbe de la magnétoconductivité en fonction du champ magnétique (minimum d'antilocalisation).

V.2 Probabilité classique et croisements quantiques

Afin de comprendre en détail le phénomène de localisation faible, considérons maintenant la probabilité qu'à un électron situé initialement en un point **r** de l'échantillon d'atteindre un autre point **r'**. Elle décrit l'évolution d'un paquet d'onde entre deux points **r** et **r'** et s'écrit comme le produit de deux amplitudes complexes A_p (qui sont appelées les propagateurs ou fonctions de Green). La valeur moyenne de la probabilité sur le potentiel aléatoire vaut donc :

$$P(r,r') = \overline{\sum_{p,q} A_p^*(r,r') A_q(r,r')} \tag{V.1}$$

Cette probabilité est calculée par l'intégrale de chemin [91], elle apparaît comme la somme des contributions de paires de trajectoires, chacune étant caractérisée par une amplitude et une phase. Cette somme peut être décomposée en deux termes. L'un est la somme des carrés des amplitudes suivant des différents chemins, c'est à dire pour les trajectoires i et j sont identiques. L'autre est la somme du produit des amplitudes de tous les chemins, pour laquelle $i \neq j$. Ce dernier terme représente l'effet de l'interférence quantique. Pourtant, si on veut vraiment connaître les effets de cohérence de phase sur les propriétés de transport d'un échantillon quelconque, on devra faire une moyenne sur le désordre. (C'est-à-dire qu'on a un ensemble d'échantillons possédant la même longueur de cohérence de phase, et qui diffèrent entre eux par la réalisation microscopique du désordre). Dans la première contribution, les phases disparaissent. Dans la seconde, le déphasage des trajectoires appariées est grand et aléatoire.

Dans le cas classique, c'est-à-dire que l'on a un grand nombre de collisions inélastiques. Les électrons d'un échantillon macroscopique partent du point $\vec{r}$ et arrivent en $\vec{r'}$ en ayant perdu la mémoire de leur phase. Il s'ensuit que le déphasage relatif de deux chemins différents est aléatoire, ce qui fait disparaître le terme d'interférence. La probabilité classique est donc donnée par une somme d'intensités. On appelle souvent ce terme classique le ***diffuson*** :

$$P_{cl}(r,r') = \overline{\sum_p |A_p(r,r')|^2} \tag{V.2}$$

Grâce à la connaissance de la probabilité, en particulier celle classique, on peut calculer la conductivité, mesurer des propriétés du transport électronique. On en déduit la formule de la conductivité de Drude.

Considérons maintenant le mouvement de l'électron dans l'espace réel. Dans la limite de faible désordre, c'est à dire lorsque la longueur d'onde de Fermi λ_F est petite devant le libre parcours moyen élastique l_e et pour des échelles de longueur grandes devant l_e [1], la probabilité classique (V.2) est décrite par la solution de l'équation de diffusion classique :

$$[\frac{\partial}{\partial t} - D\Delta_r]P_{cl}(r,r',t) = \delta(r-r')\delta(t). \tag{V.3}$$

Où D $= v_F^2\tau_e/d$ est la constante de diffusion, v_F est la vitesse de Fermi et τ_e est le temps moyen entre deux collisions élastiques (ou bien le temps de relaxation du moment.).

À partir de cette équation on peut calculer [92, 93] la probabilité qu'un électron initialement à l'origine se trouve au point **r** à l'instant t :

$$P(r,t) \propto \frac{1}{(4\pi Dt)^{-d/2}} \cdot e^{-\frac{r^2}{4Dt}} \tag{V.4}$$

Une quantité importante est la probabilité classique (et quantique) de retour à l'origine $P_{cl}(r,r,t)$ (et $P(r,r,t)$) et son intégrale spatiale S(t) qui représente le nombre total de trajectoires fermées de longueur $\sqrt{Dt}$, et pour un système de volume Ω, vaut

$$S(t) = \frac{\Omega}{(4\pi Dt)^{\frac{d}{2}}}. \tag{V.5}$$

La dépendance en fonction de la dimension de l'espace d joue un rôle important (on verra dans la prochaine section une dépendance en dimensionnalité de la correction quantique à la conductance) et les propriétés physiques sont d'autant plus sensibles aux effets de la diffusion multiple que la dimension d'espace est petite, la probabilité de retour augmente lorsque d diminue.

Considérons un exemple simple pour mieux comprendre cette probabilité. On considère deux ondes électroniques qui partent d'une même origine O et parcourent deux chemins en sens opposés (voir la figure V.1). Les fonctions d'onde électroniques

[1] Cette limite décrit bien d'un système faiblement désordonné, c'est à dire pour lequel les fonctions d'onde sont bien décrites par les ondes planes faiblement perturbées par le potentiel de désordre. Dans le cas bidimensionnel, cette limite est équivalente à g $\gg 1$, où g est la conductance électrique du système.

sont Ψ_1=$A^+e^{i\Phi_1}$ et Ψ_2=$A^-e^{i\Phi_2}$ respectivement. Où A^+ est l'amplitude pour la propagation d'onde dans le sens des aiguilles d'une montre et A^- est celle dans le sens inverse. L'invariance par renversement du temps permet d'avoir $(A^+)^2 = (A^-)^2 = A^2$. La probabilité de retour à l'origine O est donc

$$P(O) = |\Psi_1(O) + \Psi_2(O)|^2 = 2A^2(1 + \cos(\Phi_1 - \Phi_2)) \tag{V.6}$$

Si la phase est aléatoire entre deux chemins (et les autres chemins si on considère plusieurs chemins différents), le terme d'interférence sera moyenné à zéro. La probabilité classique est donc $2A^2$. Si les deux chemins ont la même phase, la probabilité (dite quantique) est donc $4A^2$ ou deux fois plus grande que celle classique. On voit bien donc que la présence de cohérence de phase a pour conséquence *la localisation* des électrons en augmentant la probabilité qu'ils retournent au point initial. Ceci se traduit sur le transport par une correction négative à la conductivité de Drude. Cette correction est très petite par rapport à la partie principale classique de Drude par un facteur de $\frac{1}{k_F \ell_e} \ll 1$. C'est pour cette raison que l'on a un adjectif "faible" dans l'expression "localisation faible".

Croisements quantiques

Dans le cas où la cohérence de phase est suffisante, le terme d'interférence n'est plus négligeable lorsque l'on effectue des moyennes sur le désordre sur les trajectoires fermées. Il reste des termes qui décrivent des appariements de trajectoires distinctes, $i \neq j$, mais suffisamment proches l'une de l'autre pour que leur déphasage reste petit. Considérons par exemple le transport à travers un échantillon de longueur L du métal ou de semi-conducteur faiblement désordonné. La propriété 'faiblement désordonné' de l'échantillon permet de faire apparaître l'effet de croisement quantique. La figure V.2 montre les trajectoires appariées qui constituent une diffusion suivant des séquences de collisions identiques mais se croisent pour former une boucle contenant des trajectoires allant dans des directions opposées.

Cette notion de croisement est à l'origine des effets quantiques comme la localisation faible. C'est la combinaison de ces croisements, d'interférences qu'ils décrivent et de la longue portée spatiale de la diffusion qui permet de propager des effets cohérents sur l'ensemble du système, effets cohérents à la base de la physique mésoscopique. Par les calculs simples, on peut montrer que les corrections quantiques au transport électronique classique sont de l'ordre de $G_{cl} \times \frac{1}{g}$, c'est à dire $\frac{e^2}{h}$, où G_{cl} est la conductance électrique classique et g est la conductance électrique classique en unités du quantum conductance $\frac{e^2}{h}$. C'est pourquoi les propriétés caractéristiques du transport quantique telles que la localisation faible ou les fluctuations universelles de conductance sont d'ordre $\frac{e^2}{h}$. Dans le cas de l'exemple mentionné ci-dessus, la limite de faible désordre est satisfaisante, on peut montrer que les croisements sont indépendants les uns des autres. On peut alors engendrer les corrections successives à la probabilité classique en fonction du nombre de croisements (voir la figure V.2), c'est à dire comme un développement en puissances de 1/g. La correction quantique à la conductance moyenne apportée par les effets d'interférence est associée à un seul croisement, et elle est donc de l'ordre de 1/g. Mais elle dépend de la distribution des boucles, c'est à dire des trajectoires de diffusion fermées dont le nombre est donné par l'intégrale spatiale S(t). Cette correction est proportionnelle à la probabilité

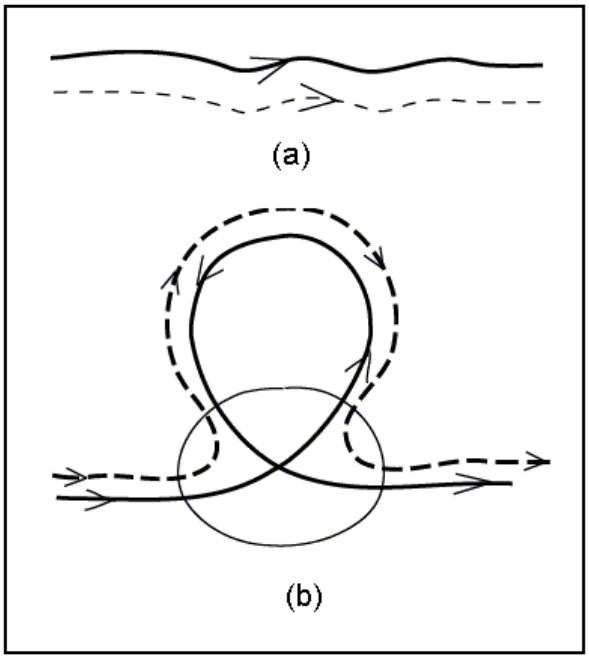


FIG. V.2: Le croisement d'un diffusion avec lui-même (b) engendre une correction quantique à la conductivité classique de Drude (a).

qu'on a présenté ci-dessus. On obtient ainsi la correction relative de la conductance [94] :

$$\frac{\Delta G}{G_{cl}} \sim -\int_0^{\tau_D} S(t)dt \tag{V.7}$$

Où $\tau_D = L^2/D$. Le signe négatif de la correction montre que la conductance moyenne est diminuée en présence d'un croisement quantique et d'une boucle. On retrouve la constatation de la localisation faible au début du paragraphe. On voit dans la formule (V.7) une signature de la cohérence de phase : l'augmentation de la résistance ou bien une diminution de la conductance du système. Cet accroissement de la résistance peut aussi provenir de l'interaction électron-électron. Nous avons ainsi deux contributions à la conductance du système et ces deux contributions dépendent de la température du système étudié. Il n'est donc pas facile de séparer ces deux contributions expérimentalement. Cependant, la contribution venant de l'interaction électron-électron est insensible au champ magnétique. C'est pour cette raison que l'on utilise le champ magnétique comme un outil pour sonder la correction de localisation faible. Les sections qui suivent, présenteront de manière systématique des calculs de la localisation faible dans différents régimes en présence ou en l'absence du champ magnétique. Le rôle de la température et de la dimensionnalité sera discuté.

V.3 La correction de la localisation faible sans champ magnétique

L'amplitude de la correction de localisation faible à la conductance classique de Drude obtenue par le raisonnement ci-dessus, est proportionnelle à la probabilité de retour à l'origine $P_c(r,r,t)$ associée aux paires de trajectoires à collisions multiples de correspondant par renversement du temps[2]. Cette correction a été calculée par la méthode semi-classique due à Khmel'nitskiĭ [92]

$$\frac{\Delta\sigma}{\sigma_{cl}} = -\frac{1}{\pi\hbar\Omega\rho_0(\epsilon_F)}\int_0^\infty S_c(t)dt \tag{V.8}$$

où $\rho_0(\epsilon_F)$ est la densité d'état au niveau de Fermi pour des électrons libres qui s'exprime à toute dimension par

$$\rho_0(\epsilon_F) = \frac{d.\Omega_d}{(2\pi)^d} m_0 k_F^{d-2},$$

avec $\Omega_d = \frac{2}{d}\frac{\pi^{d/2}}{\Gamma(d/2)}$ est le volume de la sphère unité en dimension d.

En tenant compte de la disparition des longues trajectoires, c'est à dire que les trajectoires parcourues en un temps supérieur au temps de cohérence de phase τ_φ ne contribuent pas à la correction de la localisation faible, on introduit donc intuitivement un facteur de $e^{-\frac{t}{\tau_\varphi}}$ dans l'expression (V.8). Cette intuition physique peut être expliquée en raisonnant sur le fait que l'intégrale en temps de $S_c(t)$ diverge à grande valeur du temps. La correction de localisation faible est donc déterminée par le comportement de la probabilité de retour à l'origine au temps τ_φ, ce qui donne une limite supérieure de l'intégrale (V.8). De plus, l'expression (V.8) n'a de sens que dans le régime diffusif, pour lequel t$>\tau_e$. Cette condition permet d'éliminer les électrons qui, à l'instant t, n'ont pas été diffusés. Cette limite a été prise en compte par un facteur heuristique $(1-e^{-t/\tau_e})$ [95] ou bien par un autre facteur de la même forme e^{-t/τ_e}. L'équation (V.8) devient alors

$$\frac{\Delta\sigma}{\sigma_{cl}} = -\frac{1}{\pi\hbar\Omega\rho_0(\epsilon_F)}\int_0^\infty \left(e^{-\frac{t}{\tau_\varphi}} - e^{-\frac{t}{\tau_e}}\right) S_c(t)dt \tag{V.9}$$

Considérons maintenant un milieu de volume Ω, dont l'intégrale spatiale de la probabilité de retour à l'origine associée au ***cooperon*** est exactement la même que celle donnée par l'équation (V.5), et dont la taille caractéristique L=$\Omega^{1/d}$ est supérieure à la longueur de cohérence de phase. Cette dernière associée au temps de cohérence de phase τ_φ par la constante de diffusion D, $L_\varphi = \sqrt{D.\tau_\varphi}$. C'est la longueur caractéristique de la physique mésoscopique, au-delà de laquelle, on ne peut plus avoir les effets d'interférences. En utilisant les propriétés de la fonction Gamma (voir l'annexe VI.4), l'intégrale (V.9), pour d<4, prend la forme :

$$\Delta\sigma = -\frac{2e^2}{\pi\hbar}\frac{1}{(4\pi)^{d/2}}\Gamma\left(1-\frac{d}{2}\right)\left[L_\varphi^{2-d} - (l_e/d)^{2-d}\right] \tag{V.10}$$

[2]On s'appelle cette contribution à la probabilité de retour à l'origine : le ***cooperon***, qui est représenté par la lettre c

On en déduit donc la correction quantique à la conductivité pour différentes valeurs de dimensionalité :

$$quasi-1D \qquad \Delta\sigma = -\frac{2e^2}{h}\frac{1}{S}(L_\varphi - l_e) \tag{V.11}$$

$$2D \qquad \Delta\sigma = -\frac{2e^2}{\pi h}\ln\frac{L_\varphi}{l_e} \tag{V.12}$$

$$3D \qquad \Delta\sigma = -\frac{2e^2}{\pi^2 h}\left(\frac{1}{l_e} - \frac{1}{L_\varphi}\right) \tag{V.13}$$

Où S est la section d'un fil quasi-unidimensionnel. Les cas de d=2 ou d=3 signifient que la diffusion est bidimensionnelle ou tridimensionnelle. Le cas quasi-unidimensionnel veut dire que le transport aura lieu dans une seule direction, mais que le fil est néanmoins tridimensionnel dans la mesure où sa section est grande devant la longueur d'onde λ_F.

Dépendance en température

On a vu dans la section précédente que la correction à la conductance due à la localisation faible est petite. On se pose donc la question comment peut-on faire expérimentalement pour augmenter cette correction ? Et est ce que la température joue un rôle important dans cette correction ? En effet, les expériences montrent qu'à très basse température, le signal de la correction de localisation faible est nettement augmenté. La première mise en évidence expérimentale d'une variation proportionnelle à $\ln T$ de la résistance dans des films métalliques PdAu a été faite par G. Dolan *et al.* [96] (voir la figure V.3).

La cohérence de phase, qui constitue le critère fondamental de l'aspect mésoscopique d'un échantillon, ne sera possible que si la température est suffisamment basse pour ne pas brouiller les interférences électroniques. C'est pourquoi la physique mésoscopique est nécessairement une physique des basses températures.

Considérons maintenant le cas où le temps de diffusion élastique est beaucoup plus petit par rapport à celui inélastique. On peut remplacer ce dernier par le temps de cohérence de phase. Le temps de cohérence de phase, et, celui de la collision inélastique dépendent de la température. Ils augmentent lorsque la température diminue. On suppose donc $\tau_i, \tau_\varphi \propto T^{-p}$, où l'exposant p dépend de la dimensionnalité, du mécanisme de diffusion, etc. La correction quantique à la conductivité (V.11,V.12,V.13) vient alors [98] :

$$quasi-1D \qquad \Delta\sigma \propto -\frac{2e^2}{h}T^{-p/2} \tag{V.14}$$

$$2D \qquad \Delta\sigma \propto +\frac{2e^2}{\pi h}\ln T \tag{V.15}$$

$$3D \qquad \Delta\sigma \propto +\frac{2e^2}{\pi^2 h}T^{p/2} \tag{V.16}$$

À partir de ces équations, on retrouve bien la signature de la localisation : la conductivité diminue avec la diminution de la température. La dépendance en température due aux interactions électrons-électrons donne également un comportement logarithmique [98]. Par contre, le comportement découle de l'interaction entre les électrons et les phonons qui est assez compliqué [98, 99].

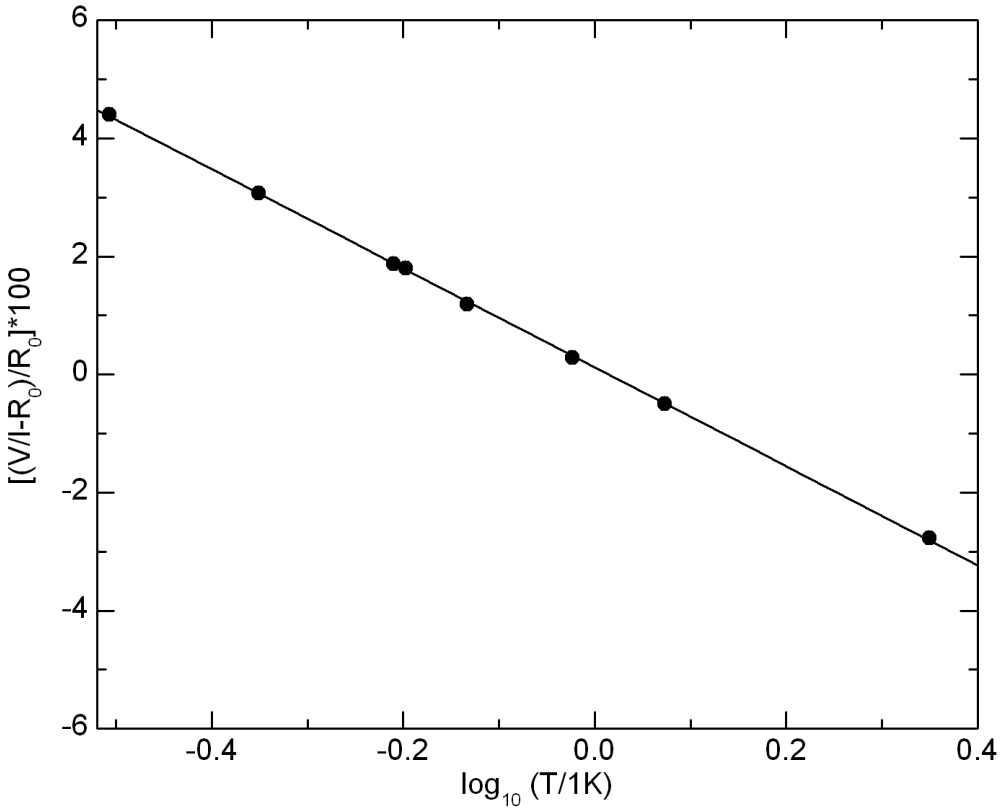


FIG. V.3: La dépendance logarithmique de la résistivité en fonction de la température dans un film PdAu, d'après G. Dolan et D. Osheroff [96]

V.4 La correction de localisation faible et de l'anti-localisation faible en champ magnétique

V.4.1 Le rôle du champ magnétique

La section précédente a présenté la dépendance en température de la localisation faible. A très basse température, environ 50 mK, l'interaction électron-électron peut affecter les effets de cohérence quantique du système. Elle est en fait très sensible dans cette gamme de la température. Par contre, elle n'est pas du tout sensible au champ magnétique. C'est pour cette raison que le champ magnétique a été utilisé pour sonder la correction de localisation faible. Ce champ brise l'invariance par renversement du temps, et introduit donc un déphasage entre les chemins parcourus dans les sens opposés. Il conduit donc à une suppression de la correction de résistance. Lorsque l'on change la direction du champ magnétique, le signe de la correction à la conductance ne change pas. On aura donc un pic de la courbe de correction à la conductance autour du point B=0. Ce pic pointe vers le haut lorsque le couplage spin-orbite est important. Dans un faible champ magnétique [3], la propagation suivant le chemin + (ou -) (voir la figure V.1) acquiert un déphasage φ_p

[3] Avec ce faible champ, on peut négliger la courbure des trajectoires due à la force de Lorentz, et seul l'effet du potentiel vecteur $\vec{A}$ est pertinent.

de sorte qu'il faut remplacer l'amplitude de probabilité A_p considérée en haut par $\tilde{A}_p = A_p e^{i\varphi_p}$. Les déphasages associés aux chemins + et - sont opposés : $\varphi_{p+} = -\varphi_{p-}$. La différence de phase entre eux est donc :

$$\begin{aligned} \phi &= \varphi_{p+} - \varphi_{p-} = \frac{\oint_+ \mathbf{p}^+.dl}{\hbar} - \frac{\oint_- \mathbf{p}^-.dl}{\hbar} \\ &= \frac{2e}{\hbar}\int (\nabla \times \mathbf{A}).d\mathbf{S} = \frac{2eBS}{\hbar} = \frac{2S}{L_B^2} = 4\pi\frac{\Phi}{\Phi_0} \end{aligned} \tag{V.17}$$

Où $\mathbf{p} = m\mathbf{v} - e.\mathbf{A}$ est le moment canonique d'un électron dans un champ magnétique. L'intégrale curviligne est faite le long de la boucle. La différence de phase est donc 4π fois le flux de champ magnétique Φ à travers la boucle, dont l'aire est S, en unité du quantum de flux $\Phi_0 = h/e$. Cette différence de phase implique une perte de la propriété de rétrodiffusion cohérente : $\tilde{A}_{p+} \neq \tilde{A}_{p-}$. La probabilité de retour au point de départ est alors :

$$P(r, r', B, t) = \sum_p |A_p(r, r')|^2(1 + e^{i\phi}) + \sum_{p\neq q, p\neq q-} \tilde{A}_p(r, r')\tilde{A}_q^*(r, r') \tag{V.18}$$

L'équation de diffusion dans ce cas est affectée par le potentiel vecteur **A** et s'écrit :

$$[\frac{\partial}{\partial t} - D(\nabla - 2ie\vec{A})]P_{cl}(r, r', B, t) = \delta(r - r')\delta(t). \tag{V.19}$$

C'est la charge 2e qui intervient car le ***cooperon*** décrit les interférences entre deux chemins électroniques.

À cause des trajectoires fermées, qui couvrent une large région dont la superficie S$> L_B^2$, et qui ne contribuent pas à l'interférence constructive, l'effet du champ magnétique est essentiellement d'introduire une limite supérieure du temps dans l'intégrale (V.9) (un cut-off en anglais). Cette limite est le temps de relaxation magnétique τ_B. Ici $L_B = \sqrt{\frac{\hbar}{eB}}$ est la longueur magnétique qui, dans le cas 2D et 3D, est identique à la longueur l_m, la longueur au-delà de laquelle un électron diffuse subissant un changement de phase moins de 2π. Cette limite et le temps de cohérence de phase, qui est la limite supérieure en l'absence du champ magnétique, sont les deux échelles importantes. Le champ magnétique commence à avoir un effet significatif si τ_B est comparable avec τ_φ. A faible champ magnétique, où $L_B > (L_\varphi, l_e, L_{so})$, la correction quantique de la localisation faible à la conductance existe grâce à une petite perte de cohérence de phase. Par contre, à grand champ magnétique, où $L_B < (L_\varphi, l_e, L_{so})$ tous les chemins sont coupés, c'est à dire qu'ils ne contribuent pas à la localisation faible. La variation du champ magnétique, la longueur de cohérence de phase, le libre parcours moyen, la longueur de spin-orbite aussi bien que les longueurs caractéristiques de l'échantillon L et W conduisent aux différents régimes de transport et aux différentes dimensionnalités. La dimensionnalité effective [4] du système dépend de l'échelle de temps considérée pour le processus de diffusion. Avant de s'intéresser au transport diffusif et quasi-balistique dans le système bidimensionnel et quasi-unidimensionnel (le fil quantique) en présence de tous les mécanismes

[4] C'est le nombre de longueurs caractéristiques de l'échantillon qui sont supérieur à L_φ

de déphasage, on considère le rôle du couplage spin-orbite et la correction qu'il en déduit : l'anti-localisation faible.

V.4.2 Le couplage spin-orbite et l'anti-localisation faible

Nous avons vu dans la section précédente qu'en présence du mécanisme de déphasage tel que celui proposée par le champ magnétique, l'interférence constructive des ondes d'électrons parcourus des chemins opposés est détruite. La présence du champ magnétique restore la conductivité du système [5], on a donc une magnétoconductance positive. C'est le signe de la localisation faible. Par contre, en présence du fort couplage spin-orbite, ce qui donne également un autre mécanisme de déphasage, le signe de la correction à la conductance peut être inversé. Son amplitude est réduite par un facteur de 2. Les calculs par la théorie de perturbation de Hikami *et al.* [100]. et Makeawa et Fukuyama [101] confirment ce changement de signe de la résistance. L'origine physique de cet effet est assez simple à comprendre. Il est dû au fait que l'interaction spin-orbite fait tourner le spin des ondes d'électrons complémentaires mentionnées au dessus (voir la figure V.1) dans les directions opposées. En effet, comme le couplage spin-orbite est proportionnel à la vitesse de l'électron, il change donc de signe par le renversement du temps et en conséquence le spin change de signe entre deux trajectoires qui forment une boucle fermée (le *cooperon*) : le spin qui a diffusé sur la boucle en suivant un sens (précisé par la flèche "+" sur la figure V.1 par exemple) est de signe opposé à celui qui a diffusé en suivant l'autre sens (qui correspond à la flèche "-".). Autrement dit, la rotation du spin d'un électron induite par le couplage spin orbite le long d'une trajectoire parcourue est exactement inversée lorsque l'électron parcourt par la même trajectoire dans le sens inverse. Ainsi, la rotation relative des états de spin est 2π [6]. Nous considérons maintenant de manière quantitative cette situation. Le potentiel du couplage spin-orbite a la forme :

$$V_{so} \propto \widehat{\mathbf{L}}.\widehat{\sigma} \propto V_{kk'}[1 + i\epsilon.\mathbf{k} \times \mathbf{k}'.\mathbf{s}] = V_{kk'}[1 + i\mathbf{K}.\mathbf{s}] \tag{V.20}$$

où $\widehat{\mathbf{L}}$ est l'opérateur moment cinétique de l'électron, $\widehat{\sigma}$ est l'opérateur de spin, $\mathbf{k}$ et $\mathbf{k}'$ sont des vecteurs d'onde électronique respectivement avant et après la diffusion $\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}'$, $\mathbf{K} = \epsilon.\mathbf{k} \times \mathbf{k}'$. Cet opérateur fait tourner légèrement le spin de l'électron incident $\mathbf{s}$ pendant chaque processus de diffusion.

Lors que l'onde électronique atteint l'état final dont le vecteur d'onde est -$\mathbf{k}$, l'état de spin d'électron parcourant une boucle (voir la figure V.1) en suivant le chemin ($\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}'$) dans le sens des aiguilles d'une montre est :

$$\mathbf{s}' = R.\mathbf{s}$$

Quand l'électron parcourt une même boucle en sens opposé, il subit exactement les mêmes collisions mais dans l'autre sens ($\mathbf{k}' \rightarrow \mathbf{k}$). L'état de spin d'électron au point final est donc :

$$\mathbf{s}'' = R^{-1}.\mathbf{s}$$

où R est la matrice de rotation de spin [90] :

[5] S'il existe l'interaction spin-orbite, et si elle est suffisamment faible, on peut toujours observer la localisation faible.

[6] Notons que la particule de spin 1/2 a une périodicité rotationnelle de 4π

$$R = \begin{pmatrix} \cos(\theta/2)e^{i(\phi+\varphi)} & i\sin(\theta/2)e^{-i(\phi-\varphi)} \\ i\sin(\theta/2)e^{i(\phi-\varphi)} & \cos(\theta/2)e^{-i(\phi+\varphi)} \end{pmatrix} \tag{V.21}$$

où θ et ϕ décrivent les nouvelles orientations de l'axe Oz et φ décrit la rotation du plan x-y autour Oz.

En conséquence, l'état de spin des ondes au point final correspondant au vecteur d'onde -**k** n'est pas identique, en présence du couplage spin-orbite. L'interférence des ondes entres deux chemins opposés contient donc un facteur représentant le recouvrement des états de spin $\langle \mathbf{s}'|\mathbf{s}''\rangle = \langle \mathbf{s}|R^2|\mathbf{s}\rangle$. Dans un premier cas où il n'y a pas de spin flip[7], tous les angles sont égaux à 0, le spin n'a aucun influence sur l'interférence. Ceci indique que le facteur de recouvrement de spin est proche de 1 lorsque $\tau_{so} \gg \tau_\varphi$. Par contre, si l'interaction spin-orbite est forte, c'est à dire que $\tau_{so} \ll \tau_\varphi$ et les orientations des états de spins sont statistiques, c'est à dire que l'on doit faire une moyenne sur les angles lors qu'on calcule le terme de recouvrement. La valeur moyenne de ce terme de recouvrement dans ce cas est la valeur moyenne de -$\sin^2(\theta/2)$, qui vaut -1/2. Ce facteur correspond bien aux expressions (V.28) et (V.42) de la correction de localisation faible à la conductivité. En particulier, un calcul non-trivial montre qu'il appartient au terme singulet. Ce qui signifie que l'interaction spin orbite affecte seulement le terme triplet. Dans le cas où $\tau_{so} \lesssim \tau_\varphi$, on observe un comportement de la magnétorésistance positive à faible champ magnétique lorsque le déphasage est dominé par le couplage spin orbite et de la magnétorésistance négative à fort champ magnétique lorsque le déphasage est dominé par le champ magnétique.

V.4.3 Transport diffusif dans le système bidimensionnel

On considère ici le système bidimensionnel au sens de transport, c'est à dire que $L_\varphi \ll W \ll L$. Le caractère diffusif signifie que $l_e \ll W \ll L$. Dans ce cas, l'aire enfermée par une boucle sur un échelle de temps τ_B est de l'ordre de $S \sim D\tau_B$. Le déphasage correspondant est $\phi \sim D\tau_B/L_B^2$. Le critère $\phi \sim 1$ et $\tau_B \sim \tau_\varphi$ implique :

$$\tau_B \sim L_B^2/D \tag{V.22}$$

La correction quantique de localisation faible à la conductance en présence du champ magnétique uniforme est calculée de la même manière que celle en l'absence du champ magnétique (V.9). L'intégrale spatiale de la probabilité de retour à l'origine associée au ***cooperon*** du cas en présence du champ magnétique n'a plus la même forme que le cas où le champ magnétique est absent. Elle décroît exponentiellement aux temps longs comme e^{-t/τ_B}. La correction de localisation faible en tenant compte de l'interaction spin-orbite, de la diffusion des impuretés magnétiques etc, s'écrit alors :

$$\frac{\Delta\sigma(B)}{\sigma_{cl}} = -\frac{1}{\pi\hbar\Omega\rho_0(\epsilon_F)} \int_0^\infty \left(e^{-\frac{t}{\tau_\varphi}} - e^{-\frac{t}{\tau_e}}\right) \langle F_{so}(t)\rangle S_c(t,B)dt \tag{V.23}$$

Où $\langle F_{so}(t)\rangle$ [94, 93] est un facteur représentant du couplage spin-orbite. Il change de signe et tend vers -1/2 lorsque t$\gg \tau_{so}$ [8]. Ceci a pour conséquence de changer le

[7] Ce cas correspond bien au système GaAs/(AlGa)As qui n'a pas d'impureté magnétique.

[8] On retrouvera ce résultat dans la prochaine section où on montrera que la probabilité de retour à l'origine en présence de ce couplage est égale à la moitié de celle classique.

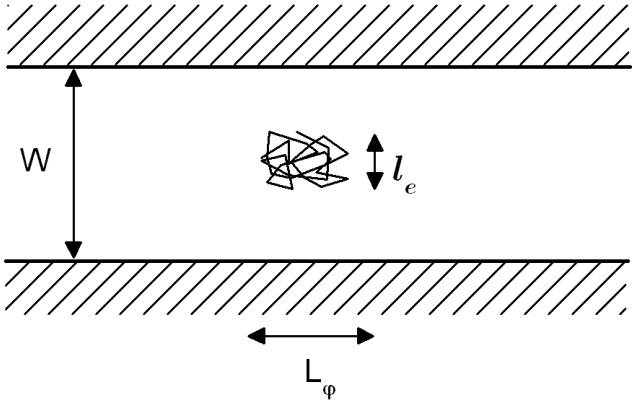


FIG. V.4: La trajectoire fermée typique des électrons contribue à la localisation faible dans le régime diffusive bidimensionnel $l_e \ll L_\varphi \ll W \ll L$.

signe de la correction de localisation faible.

L'expression de la correction de localisation faible à la conductance dans le cas 2D diffusif est donc[9] :

$$\begin{aligned}\delta G^{2D}(B) &= -\frac{W}{L}\frac{e^2}{2\pi^2\hbar}\left[\Psi\left(\frac{1}{2}+\frac{\hbar}{4eDB\tau_e}\right)-\Psi\left(\frac{1}{2}+\frac{\hbar}{4eDB\tau_1}\right)\right.\\ &\left.+\frac{1}{2}\Psi\left(\frac{1}{2}+\frac{\hbar}{4eDB\tau_2}\right)-\frac{1}{2}\Psi\left(\frac{1}{2}+\frac{\hbar}{4eDB\tau_3}\right)\right] \qquad \text{(V.24)}\end{aligned}$$

Avec

$$\frac{1}{\tau_1}=\frac{1}{\tau_\varphi}+\frac{2}{\tau_s}+\frac{1}{\tau_{so}} \qquad \text{(V.25)}$$

$$\frac{1}{\tau_2}=\frac{1}{\tau_\varphi}+\frac{2}{\tau_s} \qquad \text{(V.26)}$$

$$\frac{1}{\tau_3}=\frac{1}{\tau_\varphi}+\frac{2}{\tau_s}+\frac{2}{\tau_{so}} \qquad \text{(V.27)}$$

Où τ_s est le temps de relaxation dû aux impuretés magnétiques, Ψ est la fonction Digamma présentée dans l'annexe VI.4. Comme notre système de gaz bidimensionnel ne contient pas d'impuretés magnétiques, on négligera[10] donc le terme $1/\tau_s$. En posant :

$$B_\varphi = \frac{\hbar}{4eD\tau_\varphi},$$

$$B_{so} = \frac{\hbar}{4eD\tau_{so}},$$

[9]Il est préférable de noter que les quantités $\tau_{so}^x, \tau_{so}^y, \tau_{so}^z$ dans le papier original de Hikami *et al.* ne sont pas les temps de relaxation des composantes de spin correspondantes. Le temps τ_{so} que l'on introduit ici, est le temps de relaxation pour deux composants de spin dans le plan, alors que le temps de relaxation pour le composant de spin perpendiculaire au plan est $\tau_{so}/2$

[10]Dans ces équations, on a déjà considéré que l'espace est isotrope, ce qui donne seulement un terme de τ_{so}

$$B_e = \frac{\hbar}{4eD\tau_e},$$

L'équation V.24 devient alors :

$$\begin{aligned}\delta G^{2D}(B) &= -\frac{W}{L}\frac{e^2}{2\pi^2\hbar}\left[\Psi\left(\frac{1}{2}+\frac{B_e}{B}\right)-\Psi\left(\frac{1}{2}+\frac{B_\varphi+B_{so}}{B}\right)\right.\\ &\left.-\frac{1}{2}\Psi\left(\frac{1}{2}+\frac{B_\varphi+2B_{so}}{B}\right)+\frac{1}{2}\Psi\left(\frac{1}{2}+\frac{B_\varphi}{B}\right)\right] \qquad \text{(V.28)}\end{aligned}$$

Les résultats ci-dessus ont été obtenus pour la première fois par Hikami, Larkin et Nagaoka (HLN) [100]. Dans leurs travaux pionniers, la méthode du groupe de renormalisation a été utilisée. Ces résultats sont valides dans le régime diffusif, c'est à dire dans la limite de faible champ magnétique, et de faible qualité de l'échantillon (faible mobilité) où $L_B \gg l_e$. Dans leurs calculs, ils ont considéré que le mécanisme de relaxation de spin d'Elliot-Yafet [13, 15] est l'origine de l'effet de l'interaction spin-orbite sur la conductivité. Cependant, le mécanisme dominant de relaxation de spin dans un semi-conducteur III-V, qui ne contient pas le centre d'inversion, est celui de Dyakonov-Perel [30]. Au début des années quatre-vingt dix, Yu. B. Lyanda-Geller *et al.* [33, 102, 103] ont démontré que l'effet du couplage spin-orbite peut être considéré comme un effet du potentiel vecteur dépendant du spin. Cette considération ajoute un terme important dans le cooperon et donne donc un résultat différent des précédents. Ce nouveau traitement inclut explicitement le couplage spin-orbite dans le Hamiltonien du système. Malheureusement, ils ont inclu seulement le terme qui est proportionnel à k^3 (le terme BIA dans le chapitre III), ils ont oublié donc les deux autres contributions : l'effet Rashba (SIA) et l'effet de la brisure de symétrie d'inversion à l'interface (IIA). Un élégant article de 1996 de W. Knap [34] a considéré tous les termes en k^3 et en k venant de l'asymétrie d'inversion du massif et celle de la structure du puits quantique. La formule de la correction quantique à la conductivité est alors :

$$\begin{aligned}\Delta\sigma(B) = -\frac{e^2}{2\pi h}\Bigg(&\frac{1}{a_0}+\frac{2a_0+1+\frac{H_{so}}{B}}{a_1(a_0+\frac{H_{so}}{B})-2\frac{H'_{so}}{B}}\\ &-\sum_{n=1}^{\infty}\Big(\frac{3}{n}-\frac{3a_n^2+2a_n\frac{H_{so}}{B}-1-2(2n+1)\frac{H'_{so}}{B}}{(a_n+\frac{H_{so}}{B}a_{n-1}a_{n+1})-2\frac{H'_{so}}{B}[(2n+1)a_n-1]}\Big) \qquad \text{(V.29)}\\ &+2\ln\frac{B_{tr}}{B}+\Psi(\frac{1}{2}+\frac{B_\varphi}{B})+3C\Bigg)\end{aligned}$$

Avec les autres paramètres

$$\begin{aligned}a_n = n+\frac{1}{2}+\frac{B_\varphi}{B}+\frac{H_{so}}{B}, B_{tr} = \frac{\hbar}{4eD\tau_1}, H_{so} = \frac{\hbar}{4eD}(2\Omega_1^2\tau_1+2\Omega_3^2\tau_3),\\ H'_{so} = H_{so}^{(1)}\ or H_{so}^{(2)}, H_{so}^{(1)} = \frac{\hbar}{4eD}2\Omega_1^{(1)2}\tau_1, H_{so}^{(2)} = \frac{\hbar}{4eD}2\Omega_1^{(2)2}\tau_1, \qquad \text{(V.30)}\\ \Omega_1^2 = \Omega_1^{(1)2}+\Omega_1^{(2)2}\end{aligned}$$

Où C est la constante d'Euler, τ_1, τ_3 sont les temps de relaxation, $\Omega_n/\hbar$ (n=1,3) a le sens physique du vecteur de précession : son amplitude est égale à la fréquence de la précession de spin et sa direction définit l'axe de la précession.

Afin de passer la limite diffusive, Kawabata [104] a utilisé les fonctions de Green pour calculer cette correction quantique. Pourtant, il n'a pas tenu compte de l'effet d'interférence dû aux chemins parcourus dans tous les sens (non-backscattering effect) et du couplage spin-orbite. En 1996, A. Zduniak *et al.* [105] a corrigé la méthode de Kawabata en ajoutant l'interaction spin-orbite et en enlevant les termes divergents qui viennent des chemins fermés avec une ou deux collisions. Ils incluent partiellement la correction venant du terme "non-backscattering". Ils ont obtenus donc la formule[11] généralisée de celle de la théorie de HLN pour la correction à la conductivité :

$$\Delta\sigma^{2D}(B) = -\frac{e^2}{\pi h}\Big[F(x,\beta_{so1}) + F(x,\beta_{so2}) + F(x,\beta_\varphi)\Big] \tag{V.31}$$

Avec

$$F(x) = x\sum_{n=0}^{\infty}\frac{P_n^3}{1-P_n}, \tag{V.32}$$

$$P_n = \sqrt{\frac{2}{x}}\int_0^\infty e^{-t^2-t(1+\beta_i)\sqrt{\frac{2}{x}}}L_n(t^2), \tag{V.33}$$

$$\beta_{so1} = \frac{B_\varphi + B_{so}}{B_e}, \beta_{so2} = \frac{B_\varphi + 2B_{so}}{B_e}, \beta_\varphi = \frac{B_\varphi}{B_e}$$

$$L_n(t^2) = \sum_{m=0}^{n}(-1)^m\frac{n!}{(n-m)!}(\frac{t}{m!})^{2m}$$

où $L_n(x)$ est le polynôme de Laguerre, $x = \frac{B}{B_e}$, i = φ, $so1$ ou $so2$. Pour $x \ll 1$, l'équation (V.32) réduit à la formule de HLN (V.28).

V.4.4 Transport diffusif dans le système unidimensionnel

Le transport dans le fil métallique a été traité en premier par Altshuler et Aronov (AA) [115]. Cette théorie s'applique à un canal étroit dont le libre parcours moyen est inférieure à la largeur du fil $l_e << W$. Cela conduit au fait que le mouvement perpendiculaire au canal est diffusif. Le système est unidimensionnel au sens du transport, on a donc $L \gg L_\varphi \gg W$. Or la largeur du fil est inférieure à la longueur de cohérence de phase, le flux de champ magnétique traverse donc seulement la boucle dont l'aire est $S \sim W(D\tau_B)^{1/2} = Wl_m$ (voir la figure V.5). Dans l'échelle de τ_B, c'est cette boucle qui contribuera à la localisation faible, et le champ magnétique diminuera de manière appréciable les corrections quantiques à la conductivité lorsque $B \gtrsim \frac{\hbar}{4eWL\varphi}$ [12]. En conséquence, le critère sur le déphasage $\phi \sim 1$ implique

$$\tau_B \sim \frac{W^2}{D} = \frac{L_B^4}{DW^2}$$

[11] Cette formule est appliquée pour un champ magnétique arbitraire, elle est limitée par une seule condition $\omega_c\tau \ll 1$, où ω_c est la fréquence cyclotron.

[12] C'est le champ pour lequel la trajectoire d'un électron retournant à l'origine après un temps de τ_φ enferme un flux de l'ordre $\hbar/2e$

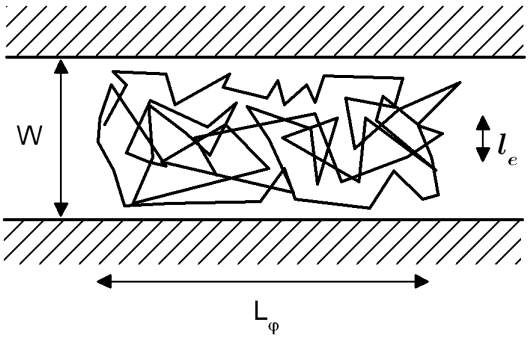


FIG. V.5: La trajectoire fermée typique des électrons contribue à la localisation faible dans le régime diffusif unidimensionnel $l_e \ll W \ll L_\varphi$.

On en déduit donc $L_B^2 = l_m W$. La correction de localisation faible à la conductivité d'un fil 1D en tenant compte du couplage spin-orbite s'écrit :

$$\Delta\sigma(B) = \frac{3}{2} f(B, \tau_2) - \frac{1}{2} f(B, \tau_\varphi), \tag{V.34}$$

$$f(B, \tau_\varphi) = -(\frac{e^2}{\pi\hbar})\sqrt{D}(\tau_{in}^{-1} + \tau_B^{-1})^{-1/2}, \tag{V.35}$$

$$\tau_2^{-1} = (\tau_\varphi^{-1} + \frac{4}{3}\tau_{so}^{-1}). \tag{V.36}$$

Où $f(B, \tau_{in})$ est la correction à la conductance 1D donnée par Altshuler et Aronov, et τ_{so} est le temps caractéristique de l'interaction spin-orbite, c'est à dire le temps au-delà du quel l'état de spin d'un électron sera changé. $D = \frac{v_F^2 \tau_e}{2}$ est la constante de diffusion.

L'expression totale des corrections de localisation faible à la conductance pour $L_\varphi, L_B \gg W \gg l_e$ est donc :

$$\delta G^{1D}(B) = -\frac{e^2}{h}\frac{2\sqrt{D}}{L}\left\{\frac{3}{2}\left[\frac{1}{\tau_\varphi} + \frac{1}{\tau_B} + \frac{4}{3\tau_{so}}\right]^{-1/2} - \frac{1}{2}\left[\frac{1}{\tau_\varphi} + \frac{1}{\tau_B}\right]^{-1/2}\right\} \tag{V.37}$$

Où τ_φ est considéré comme le temps de collision inélastique τ_{in}. Cette expression peut s'écrire en fonction des longueurs caractéristique sous la forme :

$$\delta G^{1D}(B) = -\frac{2e^2}{hL}\left\{\frac{3}{2}\left[\frac{1}{L_\varphi^2} + \frac{1}{L_B^2} + \frac{4}{3L_{so}^2}\right]^{-1/2} - \frac{1}{2}\left[\frac{1}{L_\varphi^2} + \frac{1}{L_B^2}\right]^{-1/2}\right\} \tag{V.38}$$

Dans la limite où B$\rightarrow$ 0, on a un comportement en B^2.

V.4.5 Transport quasi-balistique dans le système unidimensionnel

Dans cette partie, on étudie le rôle de l'interaction spin-orbite dans un fil quantique quasi-unidimensionnel GaAs/Al(Ga)As. Les fils sont gravés à partir d'un gaz

d'électron bidimensionnel. Nous allons voir dans le prochain chapitre que le transport dans ces fils est bien dans le régime quasi-balistique, où $L, L_\varphi, L_B \gg l_e \gg W$. On a vu dans les sections précédentes que Altshuler et Aronov (AA) ont développé une théorie [115] pour la correction quantique à la conductance dans le régime de la localisation faible. Cette théorie est appliquée seulement aux échantillons de faible mobilité, dans lesquels le temps de collision élastique τ_e est beaucoup plus petit que les temps de diffusion inélastique τ_{in}. Le libre parcours moyen l_e est aussi plus petit que la largeur du fil W. Pour les échantillons de haute mobilité, le libre parcours moyen sera plus grand que la largeur du fil. On est dans le régime quasi-balistique. On devrait donc, considérer les diffusions sur les bords de l'échantillon. Beenakker et Van Houten (BVH) [113] ont modifié la théorie de AA en tenant compte de cette diffusion. Ils ont pris en considération de l'annulation du flux des trajectoires contenant seulement des collisions sur le bord de l'échantillon. Ces trajectoires enferme un flux égale à zéro (voir la figure V.6). Cet effet contribue à augmenter la longueur magnétique L_B par rapport au cas diffusif. Dans le régime où le champ magnétique est faible $l_e \gg W$ et $L_B \gg \sqrt{Wl_e}$, le changement de phase entre deux collisions élastiques est plus petit que 1. L'électron se déplace balistiquement d'un bord à l'autre. Le temps de relaxation magnétique est donné par [113] :

$$\tau_B = K1 \frac{L_B^4}{W^3 v_F} \propto B^{-2} \tag{V.39}$$

Où K1=9.5 est le coefficient qui représente la diffusion sur les bords de l'échantillon. Cette expression est similaire à celle du cas diffusif avec un largeur normalisé $W_{eff} = W\sqrt{W/l_e}$. Cela explique pour quoi l'échelle de champ magnétique typique de la magnétoconductance pour le régime quasi-balistique est plus grande que celle du régime diffusif.

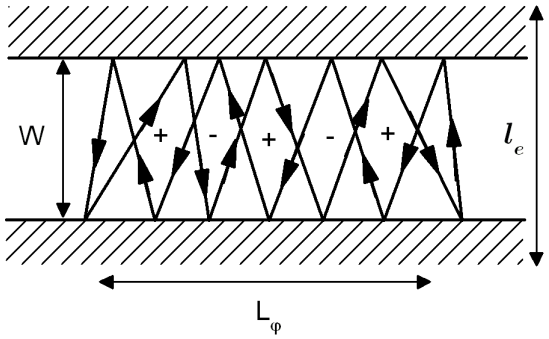


FIG. V.6: La trajectoire fermée typique des électrons contribue à la localisation faible dans le régime quasi-balistique unidimensionnel $W \ll l_e \ll L_\varphi \ll L$. Cette figure illustre bien l'annulation du flux. En effet, la trajectoire est composée de deux boucles de la même superficie mais d'orientation opposée, par conséquent, elle enferme donc un flux nul.

Lorsque le champ magnétique est grand, $L_B \ll \sqrt{Wl_e}$, le changement de phase est plus grand que 1. On ne peut plus utiliser l'approximation gaussienne pour calcu-

ler la correction quantique à la conductivité [13]. BVH a calculé le temps de relaxation magnétique pour ce cas en présence de la diffusion aux bords de l'échantillon.

$$\tau_B = K_2 \frac{L_B^2 \tau_e}{W^2} \propto B^{-1} \tag{V.40}$$

avec K_2=24/5. On voit donc un comportement différent lorsque l'on passe d'un régime de faible champ magnétique au celui de fort champ magnétique. Il existe donc un champ magnétique critique où ces deux régimes sont identiques : $B_c = \frac{K_1}{K_2}\frac{\hbar}{eWl_e}$. Pour décrire donc ce "crossover", BVH a introduit une formule d'interpolation :

$$\begin{aligned} \tau_B &= \tau_B(faible\ champ) + \tau_B(fort\ champ) \\ &= (\frac{L_B}{W})^2 \left(\frac{K_1 L_B^2}{W v_F} + \tau_e . K_2 \right) \end{aligned} \tag{V.41}$$

La correction de la localisation à la conductance d'un fil quantique dans ce cas est donc :

$$\begin{aligned} \delta G(B) &= G(B) - G(0) \\ &= \frac{3}{2} f \left[B, \left(\frac{4}{3\tau_{so}} + \frac{1}{\tau_{in}} + \frac{2}{3\tau_s} \right)^{-1} \right] - \frac{1}{2} f \left[B, \left(\frac{1}{\tau_{in}} + \frac{2}{\tau_s} \right)^{-1} \right], \end{aligned} \tag{V.42}$$

Où :

$$f(B,\tau) = -\frac{e^2}{h} \frac{2\sqrt{D}}{L} \left[\left(\frac{1}{\tau} + \frac{1}{\tau_B} \right)^{-1/2} - \left(\frac{1}{\tau} + \frac{1}{\tau_B} + \frac{1}{\tau_e} \right)^{-1/2} \right]$$

Le temps de diffusion spin-flip τ_s sera négligé dans ces équations car il n'y a pas d'impuretés magnétiques dans l'hétérojonction GaAs/(AlGa)As.

[13] On utilise cette approximation pour estimer la moyenne du terme $e^{i\phi(t)}$, qui a été introduit dans la formule de la conductivité pour tenir compte du changement de phase des trajectoires opposées en présence du champ magnétique.

Chapitre VI

Réalisation et mesure de magnéto-transport des fils quantique $GaAs/Al_{0.3}Ga_{0.7}As$

La localisation faible dans des hétérostructures semi-conductrices se traduit par une signature, comme nous l'avons entrevu dans le chapitre précédent : la diminution de la résistance avec la croissance du champ magnétique autour du champ nul B=0. La cause principale de l'effet de la localisation faible est l'interférence quantique des ondes électroniques. Dans une hétérojonction semi-conductrice $GaAs/Al_{0.3}Ga_{0.7}As$ de haute densité de porteur, l'interaction spin-orbite est donc forte, les corrections quantique à la résistance (ou conductance) du système donnent naissance à l'antilocalisation faible, i.e la diminution de la résistance avec la croissance du champ magnétique. Le but de ce chapitre est d'étudier les propriétés du magnéto-transport dans ces hétérojonctions en espérant observer un "crossover" entre deux régimes : localisation faible et l'antilocalisation faible.

Dans la première section, nous présenterons quelques propriétés importantes du gaz d'électrons bidimensionnel et puis, le passage de ce gaz au cas unidimensionnel. Nous présenterons principalement le confinement quantique de ces systèmes.

La deuxième section présente les techniques expérimentales utilisées pour effectuer des mesures de magnéto-transport. Elles comportent les étapes technologiques pour fabriquer des fils quantiques : lithographie électronique, fabrication des contacts ohmiques et des mesures à très basse température grâce à un cryostat à dilution.

La troisième section contient plusieurs résultats expérimentaux reflétant la localisation faible des porteurs. En particulier, les mesures de la magnétorésistance nous permettent de déterminer le temps de relaxation spin-orbite, et les régimes de fort et faible champ magnétique dans les fils $GaAs/Al_{0.3}Ga_{0.7}As$.

VI.1 Gaz bidimensionnel

Le gaz bidimensionnel d'électrons (ou de trous) est en fait un système dans lequel les porteurs sont confinés suivant la direction de croissance z et sont libres dans les deux autres directions x, y. Par le dopage, les impuretés tels Si (pour le gaz bidimensionnel d'électrons dans $Al_{0.3}Ga_{0.7}As$/GaAs) sont introduites dans le matériau de grande bande interdite ($Al_{0.3}Ga_{0.7}As$), qui portera le nom de la barrière. Du fait de la discontinuité de la bande de conduction à l'interface, les donneurs transfèrent donc spontanément et irréversiblement dans le semi-conducteur de faible bande interdite (GaAs). Ces donneurs forment donc le gaz bidimensionnel d'électrons. Les propriétés principales du gaz bidimensionnel sont présentés dans une revue très connu de T. Ando *et al* [106]. L'exploration des propriétés de gaz bidimensionnel dont la charge d'électron joue un rôle primordial a permis à K. von Klitzing d'avoir un prix Nobel sur l'effet Hall quantique en 1985. Par contre, le rôle de spin d'électron n'a pas manifesté de grand effet jusqu'au moment où on observe l'effet Hall de spin (c'est à dire que l'on observe l'accumulation des spins sur les deux bords d'une barre de Hall). Il est donc préférable de rappeler quelques propriétés qui seront utilisées dans la suite de cette thèse.

Confinement bidimensionnel 2D

Les électrons sont confinés selon la direction z par un potentiel de confinement V(z). Ils sont libres selon les directions x et y. Le Hamiltonien du système est alors :

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m^*} + V(z) \tag{VI.1}$$

avec $\mathbf{p} = -i\hbar\nabla$. Les fonctions d'onde du système sont de la forme $\Psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}, z) = \frac{1}{\sqrt{L_x L_y}} e^{i\mathbf{k}r}\Phi_n(z)$. Les composantes k_x et k_y du vecteur d'onde $\mathbf{k}$ sont quantifiées en unités de $2\pi/L_x$ et de $2\pi/L_y$, où L_x et L_y sont les dimensions de l'échantillon selon x et y. L'énergie totale des électrons est alors donnée par $E_{n,k} = E_n + \frac{\hbar^2\mathbf{k}^2}{2m^*}$. L'énergie E_n et la fonction d'onde de la sous-bande n $\Phi_n(z)$ vérifient l'équation différentielle :

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*}\frac{d^2\Phi_n(z)}{dz^2} + V(z)\Phi_n(z) = E_n\Phi_n(z) \tag{VI.2}$$

où m^* est la masse effective qui vaut 0.067 m_0 pour GaAs, m_0 est la masse de l'électron libre.

La densité d'états par unité de surface et d'énergie pour une sous-bande n est donnée par :

$$D_n(E) = \frac{m^*}{\pi\hbar^2}H(E - E_n) \tag{VI.3}$$

où $H(x)$ est la fonction Heaviside. Pour chaque sous-bande, la densité d'états est donc une constante égale à $\frac{m^*}{\pi\hbar^2}$. La densité totale pour une énergie E est alors un multiple de cette quantité. Dans le cas où seule la première sous bande est occupée,

la densité surfacique d'électrons est reliée au niveau de Fermi E_F par :

$$n_s = \int_0^\infty \frac{m^*}{\pi\hbar^2} f(E) dE \tag{VI.4}$$

où $f(E)$ est la distribution de Fermi-Dirac, $f(E)=\frac{1}{1+exp(\frac{E-E_F}{k_B T})}$. Il vient alors que :

$$n_s = \frac{m^*}{\pi\hbar^2} k_B T \ln(1 + exp(\frac{E_F}{k_B T})) \sim \frac{m^*}{\pi\hbar^2} E_F \quad si \quad k_B T \ll E_F \tag{VI.5}$$

Pour une densité surfacique $n_s = 10^{11} cm^{-2}$, le niveau de Fermi vaut E_F=3.55 meV. La longueur de Fermi associée est égale à $\lambda_F = \sqrt{\frac{2\pi}{n_s}}$=79 nm. Ce calcul est valable tant que $k_B T \ll E_F$, c'est à dire $T \ll 41.0$ K.

Confinement unidimensionnel 1D

Nous avons vu au paragraphe précédent que l'on est capable d'obtenir un gaz bidimensionnel d'électrons, et on verra dans la suite que l'on est également compétent en fabrication des fils quantiques à partir de ce gaz. Le passage à un système unidimensionnel est aussi possible grâce à la grille située au dessus du gaz. Il suffit de polariser avec une tension positive pour confiner le gaz situé dessous[1]. Considérons maintenant quelques propriétés du confinement latéral dans une direction (direction x par exemple). Ainsi, le mouvement des porteurs dans la direction y sera libre. Les états propres et vecteurs propres sont les solutions d'une équation de Schrödinger avec un potentiel de barrière bidimensionnel V(x,z) [126]. Ces solutions ne peuvent être obtenues par des calculs analytiques que dans des cas particuliers. La plupart des structures de fils quantiques semi-conducteurs consistent en un fort confinement dans la direction de croissance z et un faible confinement dans la direction x. Le potentiel total a donc un confinement suivant la direction z plus un confinement perturbatif qui dépend de z et x.

$$V(x,z) = V_b(z) + \Delta V_b(x,z)$$

On cherche les états propres sous la forme :

$$\Psi(r) = \frac{e^{ik_y.y}}{\sqrt{L_y}} \sum_n \chi_n(z)\alpha_n(x) \tag{VI.6}$$

Où $\chi_n(z)$ est n^{ième} solution de l'équation de Schrödinger unidimensionnelle pour le mouvement dans la direction z, k_y est le vecteur d'onde caractérisant le mouvement libre le long de l'axe du fil. $\alpha_n(x)$ est la solution des équations décrivant le mouvement suivant l'axe x. Les énergies propres du fil sont données par :

$$\varepsilon_{n,m}(n)(k_y) = E_n + \varepsilon_m(n) + \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m^*} \tag{VI.7}$$

[1]Dans le cas où les fils quantiques sont fabriqués par la technique de "split gates", le passage d'un gaz bidimensionnel à un gaz unidimensionnel se fait à l'aide de deux grilles situées au dessus du gaz et il suffit de polariser, cette fois, avec une tension négative.

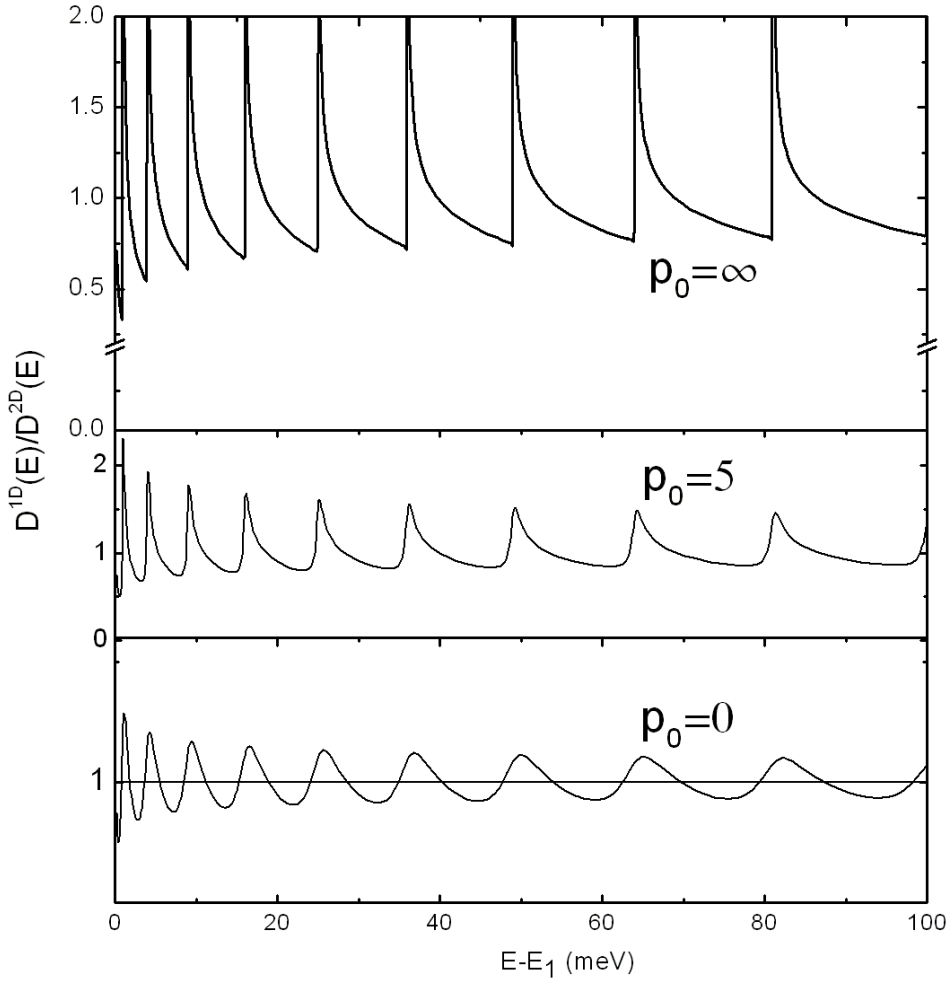


FIG. VI.1: La densité d'états du système quasi-unidimensionnel avec différentes valeurs de p_0 en fonction de la différence d'énergie E-E_1, pour $p_0 = \infty$ on a la densité d'états du système 1D.

Où E_n est l'énergie propre suivant l'axe z. Les états propres sont factorisés suivant x et z. Cette non-corrélation entre le mouvement suivant x et celui le long d'axe z est effective lorsque la quantification le long d'axe x est plus petite que celle le long de l'axe z.

La densité d'état du fil quantique est écrite par :

$$D(E) = 2\sum_{n,k_y} \delta\left[\varepsilon - E - \varepsilon_n - \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m^*}\right] \tag{VI.8}$$

Si on ne considère que les niveaux d'énergies en-dessous du niveau E_2, la densité d'états vient alors :

$$D(E) = \frac{2m^* L_x L_y}{\pi\hbar^2} \sum_n \sqrt{\frac{\hbar^2}{2m^* L_x^2} \frac{1}{(\epsilon - E_1 - \varepsilon_n)}} H(\epsilon - E_1 - \varepsilon_n) \tag{VI.9}$$

Où L_y est la longueur du fil, lorsque le nombre d'états confinés est grand (en pratique $L_y \to \infty$ et $\varepsilon_n \to 0$), on peut relier l'expression de 1D DOS à celle de 2D DOS (density of states) grâce à la formule de la somme de Poisson. Dans ce cas, pour $\varepsilon \gg \varepsilon_1$, avec $\varepsilon \approx \frac{\hbar^2\pi^2n^2}{2m^*L_x^2} = \varepsilon_1 n^2$, on a :

$$D^{1D}(E) = D^{2D}(E)\left[1 + 2\sum_{p=1}^{\infty} J_0\left(\frac{2p\pi}{\alpha}\right)\right] \tag{VI.10}$$

Où $D^{2D}(E)$ est la densité d'états bidimensionnel (VI.3) multiplié par la surface L_xL_y, J_0 est la fonction J de Bessels et

$$\alpha = \sqrt{\frac{\hbar^2\pi^2}{2m^*L_x^2}\frac{1}{(\varepsilon - E_1)}}$$

Grâce à l'analogie entre l'expression (VI.10) et la série de Fourier, on peut la réécrire en introduisant un facteur phénoménologique p_0 :

$$D^{1D}(E) = D^{2D}(E)\left[1 + 2\sum_{p=1}^{\infty} J_0\left(\frac{2p\pi}{\alpha}\right)e^{-\frac{p}{p_0}}\right] \tag{VI.11}$$

La figure VI.1 illustre la variation de $D^{1D}(E)/D^{2D}(E)$ en fonction de $(E - E_1)$ pour ε_1=1 meV et trois valeurs de p_0. Pour $p_0 = \infty$, on a exactement la densité d'états à 1D. En diminuant la valeur de p_0, l'élargissement augmente et la singularité est étalée. Pour p_0=1, la singularité est assez ronde, la densité d'états 1D donne des oscillations autour de celle 2D.

VI.2 Techniques expérimentales

Cette partie traite essentiellement des procédés technologiques élémentaires des matériaux semi-conducteurs III-V permettant la fabrication des échantillons de taille nanométrique. Il s'agit d'un ensemble des fils à base d'hétérostructure $GaAs/Al_{0.3}Ga_{0.7}As$.

VI.2.1 La lithographie électronique

La lithographie est un processus transférant le motif d'un masque sur une couche de résine qui couvre la surface de l'échantillon (le substrat). Elle reproduit donc ce motif sur le substrat. Actuellement, il y a plusieurs types de lithographie (voir la figure VI.2) qui diffèrent entre elles par le moyen d'irradiation utilisée pour insoler la résine.

La lithographie optique est un processus qui utilise la lumière visible ou ultra-violet pour former des motifs sur la résine. Cette technique a une résolution d'ordre micromètre avec une longueur d'onde de l'ordre de 400 nm.

La lithographie électronique (e-beam), que nous avons utilisée, offre la plus haute résolution grâce à la petite longueur d'onde d'électron (≤ 0.1 nm pour les électrons accélérés par une énergie 20-50 keV).

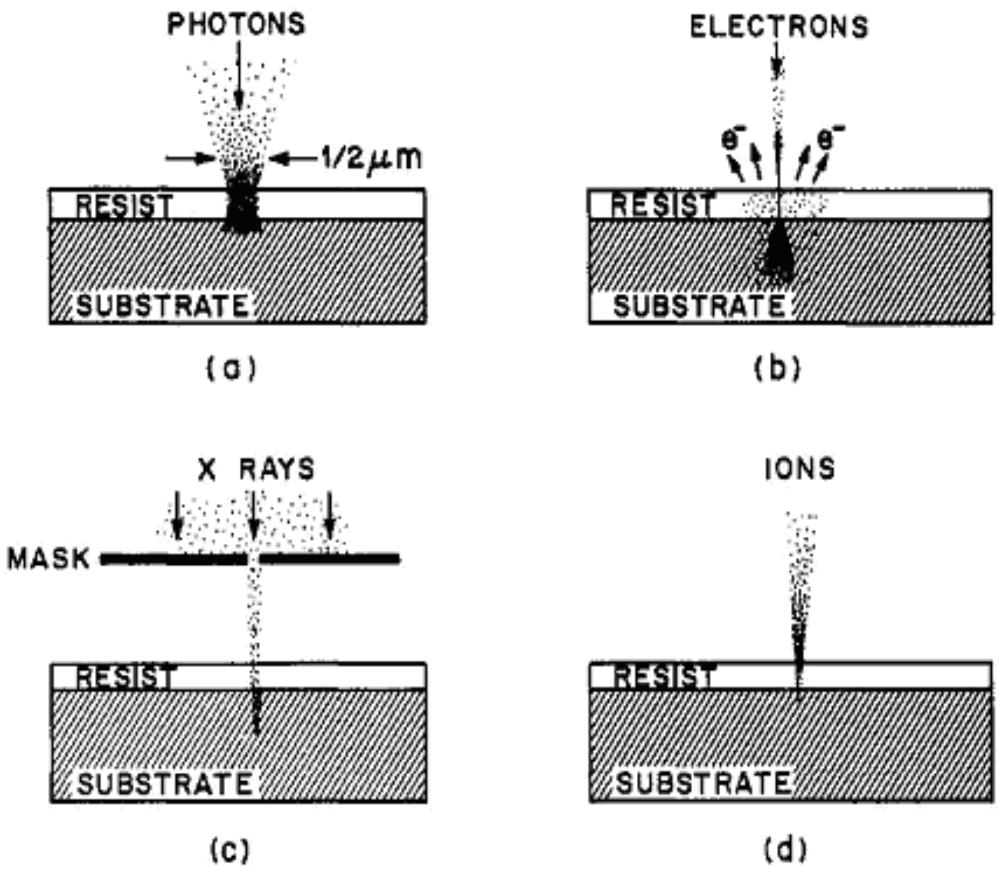


FIG. VI.2: Différentes types de lithographies : a) Lithographie optique. b) Lithographie électronique. c) Lithographie par rayon X. d) Lithographie ionique.

La résolution d'un système de lithographie électronique n'est pas limitée par la diffraction mais par la diffusion des électrons dans la résine et par l'aberration de l'optique électronique. Cette technique nous permet de fabriquer des échantillons de taille nanométrique avec un contrôle très précis. L'appareil utilisé au LPN pour cette thèse est un masqueur LEICA.

Lithographie électronique

Les fils quantiques de notre expériences sont gravés dans une hétérojonction (ou bien dans un super-réseau) $GaAs/Al_{0.3}Ga_{0.7}As$ à dopage volumique dans laquelle nous avons mesuré un libre parcours moyen élastique de l'ordre du micromètre, la largeur des fils varie de 200 nm à 1000 nm, sa longueur est 120 μm.

La première opération de la lithographie consiste à dessiner des marques sur le substrat avec le masqueur électronique. Ces masques qu'on réalise par "lift-off" d'or, procédé que nous détaillerons plus loin, permettront d'aligner les différentes étapes de dessin les unes sur les autres avec une précision de 50 nm. Ensuite, on réalise les fils qui sont reliés à des contacts ohmiques permettant la mesure de sa résistance électrique. Nous détaillons ici cette étape de la fabrication car elle demande deux procédés importants de la nanofabrication : le "lift-off" et la gravure ionique. Les différentes étapes sont schématisées sur la figure VI.3.

Tout d'abord on recouvre l'échantillon d'une couche de résine organique électrosensible. Nous utilisons le PolyMéthylMéthAcrylate (PMMA) qui est actuellement la résine organique donnant la meilleure résolution. Sa concentration est de 50 g/l.

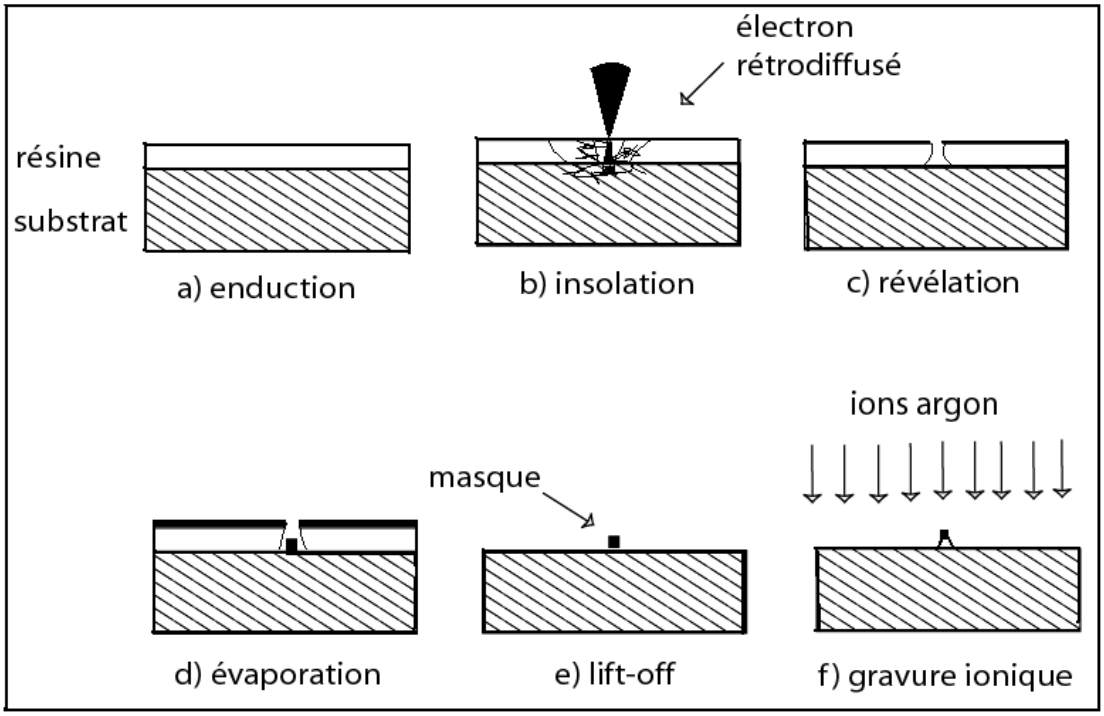


FIG. VI.3: Schéma des différentes étapes de la fabrication.

Cette enduction se fait par rotation rapide du substrat ce qui permet d'obtenir une couche homogène dont l'épaisseur est contrôlée par la vitesse de rotation (VI.3a). L'épaisseur de résine à déposer est choisie en fonction de l'épaisseur de métal que l'on veut évaporer (on dépose typiquement une épaisseur 3 fois plus importante de résine que l'épaisseur de métal souhaitée). Un recuit de quelques minutes stabilise la couche en évaporant le solvant dans lequel est dissout le polymère.

L'échantillon est ensuite insolé avec le faisceau d'électron focalisé du masqueur électronique (voir la figure VI.3b). L'action des électrons est de casser les chaînes de polymère mais pour cela ils doivent perdre beaucoup d'énergie. En effet, l'énergie du faisceau incident est de 100 keV qui est une énergie typique pour obtenir un faisceau fin d'électrons dans une colonne électronique (taille de sonde typique : 5 nm) alors que l'énergie nécessaire pour briser une chaîne est de 5 eV seulement. Ce sont les électrons secondaires qui insolent véritablement la résine. Deux effets importants résultent de la diffusion électronique : l'élargissement du trait et surtout les effets de proximité. Les électrons rétrodiffusés par le substrat insolent la résine à une distance relativement grande du point d'impact du faisceau (jusqu'à 10 μm, voir la figure VI.3b). Ainsi la dose en un point dépend du motif qui entoure ce point. La correction de ces effets conduit à des calculs très longs pour des motifs complexes. Cette correction n'est même plus possible si l'on veut approcher deux motifs en deçà d'une certaine distance, car cela demanderait des doses négatives à certains endroits.

Après insolation du motif, on relève le dessin en utilisant un solvant faible qui n'agit que sur les chaînes courtes. Seules les régions qui n'ont pas été irradiées subsistent : le PMMA est dit positif (voir la figure VI.3c). Le temps de révélation dépend principalement l'épaisseur de résine. Il doit être d'autant plus précis que la taille de des motifs est faible. Si le temps est trop long, on peut doubler la taille d'un trait et faire disparaître des détails éventuels du motif. Si ce temps est trop court, on risque d'avoir un reste de résine au fond du motif. Dans notre cas le temps de révélation est environ une minute avec le révélateur MIBK.

L'étape suivante consiste à déposer par évaporation sous vide une couche de métal sur l'échantillon. Cette étape de métallisation se fait en déposant une couche d'aluminium d'épaisseur 50 nm. Le métal se dépose sur le substrat dans les régions dégagées par la révélation et sur la résine. Si les flancs de la résine sont légèrement ré-entrants, il n'y a pas continuité de la couche métallique (voir la figure VI.3d). Lors de la dissolution de la résine dans un solvant fort il ne subsiste que le métal déposé sur le substrat c'est à dire dans les régions insolées : c'est le "lift-off" (voir la figure VI.3e). Cette opération permet donc de répliquer le motif désiré sous forme d'un dépôt métallique. Si on désire une structure en métal, l'opération est terminée. Dans nôtre cas, le gaz d'électron est enterré dans le semi-conducteur, nous utilisons alors le motif métallique comme masque de gravure. On soumet donc l'échantillon à un faisceau d'ions argon accélérés à 250 V (voir la figure VI.3f). En frappant la surface de l'échantillon, les ions arrachent des atomes et gravent le substrat. Le matériau du masque (ici l'aluminium) est choisi pour sa résistance à la gravure ionique par rapport à celle du GaAs. Le gaz d'électrons est détruit aux endroits qui ne sont pas protégés par le masque et seul le motif désiré persiste. La dernière opération consiste à retirer le masque par attaque chimique (NaOH).

Les contacts ohmiques (on les verra dans la prochaine section) ainsi que le masque de gravure sont réalisés par insolation aux électrons. L'alignement des différents

niveaux d'insolation est assuré par un ensemble de marques en or qui sont repérées avant chaque exposition par le masqueur.

L'utilisation de semi-conducteur permet également de modifier localement la densité électronique au cours de l'expérience, par application d'un champ électrique. Ainsi, en plaçant une grille sur le semi-conducteur, il est possible de bloquer la conduction électronique sous la grille, par application d'un potentiel négatif comme dans un transistor à effet de champ. La grille est réalisée en or ou en aluminium en utilisant la technique de lift-off.

VI.2.2 Technique de fabrication des contacts ohmiques

Un contact ohmique est un contact métal-semi-conducteur avec une très faible résistance de contact. Il est dit ohmique lorsque le courant I est proportionnel à la tension V avec un facteur de proportionnalité égale à l'inverse de la résistance de contact R_c. À l'interface se forme une barrière de potentiel s'opposant au passage du courant. Il existe trois mécanismes principaux régissant l'expression du courant :

- Le franchissement de la barrière par émission thermo-ionique dominant dans les semi-conducteurs peu dopés ($N_d < 10^{17}$ cm^{-3}). La zone désertée qui se forme près du contact est étendue. Elle joue le rôle d'une barrière de potentiel large, ce qui rend le passage par effet tunnel peu probable.
- Le franchissement de la barrière par effet tunnel assisté thermiquement, dans le cas des semi-conducteurs moyennement dopés. L'émission thermo-ionique et l'effet tunnel jouent alors un rôle important dans les mécanismes de conduction.
- Le franchissement de la barrière par effet tunnel pur, qui intervient dans le cas des semi-conducteurs fortement dopés ($N_d > 10^{18}$ cm^{-3}). Le semi-conducteur étant très dopé, la zone désertée est plus petite et donc la probabilité de passage par effet tunnel pur n'est plus négligeable, entraînant un mode de conduction par effet tunnel prédominant.

Contact ohmique profond Au-Ge-Ni sur le substrat GaAs de type n

Ce type de dépôt utilisant l'eutectique or-germanium avec un rapport massique de 88% d'or et de 12% de Germanium a été, jusqu'à encore très récemment, le dépôt le plus connu au laboratoire pour réaliser des contacts ohmiques de type n [71] sur arséniure de gallium. Ce dépôt est un dépôt successifs d'or, germanium et nickel (hétérojonction/100 Å Ni/1200 Å Au/600 Å Ge/200 Å Ni/ 2000 Å Au). La température de fusion de l'eutectique n'est en effet que de 361°C, le germanium jouant le rôle de dopant à l'interface contact ohmique entre le métal et le semi-conducteur. Il résulte de ce surdopage local une augmentation des probabilités de franchissement des barrières par effet tunnel favorable à l'obtention de contacts faiblement résistifs.

Par ailleurs, cette couche d'AuGe est généralement séparée du GaAs par une couche de Nickel et on redépose sur l'ensemble de deux films métalliques, respectivement nickel et or. En pratique, ces dépôts sont faits par évaporation suivie d'un recuit effectué typiquement à une température supérieure à 450 °C. Ce recuit entraîne des phénomènes d'inter-diffusion relativement complexes, avec la formation

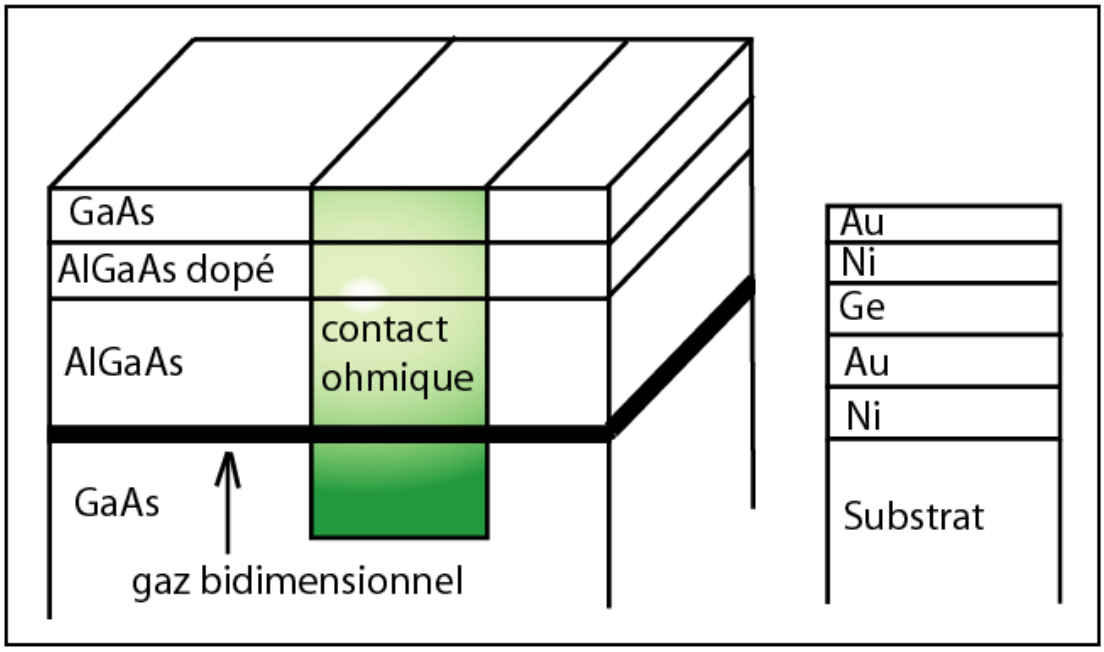


FIG. VI.4: Schéma de principe des contacts ohmiques.

de composés constitués d'éléments du métal et du semi-conducteur. On chauffe la surface de l'échantillon sous atmosphère d'hydrogène afin d'empêcher l'oxydation, l'or et germanium forment un alliage Au_2Ge qui en diffusent dans le (GaAl)As permet de connecter le gaz d'électrons (voir la figure VI.4). On constate que chaque élément joue un rôle très précis avec une diffusion très marquée du Gallium vers la surface libre à l'interface contact-air. À plus haute température, on note la formation de grains généralement de type NiAs(Ge) favorisant le contact, mais aussi d'Or, ce qui se traduit par une augmentation de la résistance de contact. Compte-tenu de ces résultats, les recuits sont de manière générale, réalisés à des températures proches de 450 °C, ce qui permet de préserver une bonne morphologie de contact associé à une faible résistance. Dans ces conditions, il est possible d'avoir une première idée des phénomènes de diffusion par la caractérisation Auger. Rappelons que cette technique permet d'obtenir les concentrations des différents éléments chimiques au voisinage de l'interface. Cependant, on accède au profil des différents constituants en gravant progressivement, tout d'abord le contact ohmique, puis le semi-conducteur. C'est donc une méthode destructive. L'interface entre le métal et le semi-conducteur peut être identifiée, d'une part par la couche nickel d'interface, d'autre part, par la décroissance des concentrations en gallium et en arsenic. On identifie également la présence d'Or et de Germanium constituant l'eutectique, puis de nouveau, la présence de Nickel plus près de la surface libre. Après le recuit, les profils sont très largement modifiés avec l'accumulation de Gallium dans les couches en-têtes et la forte diffusion du nickel et de l'or, conformément à l'analyse précédente. Ces pro-

cessus de diffusion se révèlent très profonds sur des distances que l'on peut estimer de l'ordre de 1000 Å. La couche d'or supérieure sert comme un support pour la microsoudure de fils qui contacteront le dispositif aux appareils de mesure.

VI.2.3 Dispositif expérimental

Après avoir terminé des étapes technologies, on clive l'échantillon en plusieurs morceaux pour qu'il puisse rentrer dans une céramique porte-échantillon. Une machine à thermocompression permet de connecter des plots de contacts ohmiques avec la porte d'échantillon par les fils d'or ou d'aluminium. Cette machine utilise la température et des ultrasons pour faire ces connections. La céramique est ensuite ajustée dans la canne à dilution qui peut descendre jusqu'à une température de 30 mK. Les mesures sont effectuées à très basse température à l'aide d'un cryostat à dilution et d'une détection synchrone. On utilise également une bobine et une source de courant KEITHLEY qui permet de faire des balayages à très faible champ magnétique. (le pas est de l'ordre de 0.5 G).

La figure VI.5 montre le schéma de l'expérience magnétorésistance. Les échantillons sont immergés dans un cryostat à très basse température grâce au mélange ^{3}He/^{4}He. Le principe du cryostat à dilution ^{3}He/^{4}He est présenté dans l'annexe VI.4.

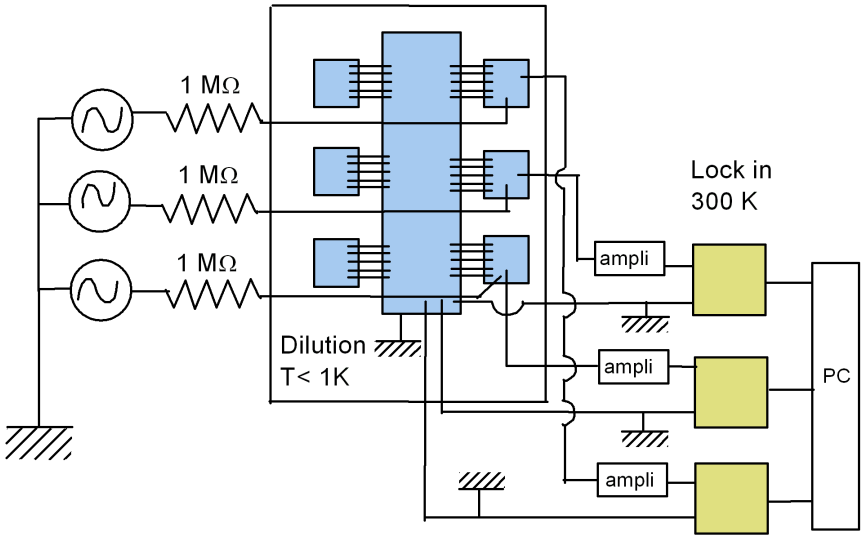


FIG. VI.5: Le schéma du dispositif de l'expérience. Trois lock-in en parallèle permettent de mesurer en même temps les tensions aux bornes de trois ensembles de fils quantiques de tailles différentes. Le courant injecté aux échantillons est fourni par la source. Une résistance de 1MΩ en série permet de contrôler le courant injecté.

VI.3 Etude du magnétotransport des fils quantiques $GaAs/Al_{0.3}Ga_{0.7}As$

VI.3.1 Description des fils $GaAs/Al_{0.3}Ga_{0.7}As$

Nous avons effectué des mesures de la magnétorésistance des fils quantiques GaAs/AlGaAs de l'échantillon TC04[2]. Nous avons mesuré également la magnétorésistance en variant la tension de grille au dessus des fils, ce qui permet de voir le comportement des pics de la localisation faible en fonction de la densité de porteur. Nos échantillons sont fabriqués à partir du gaz bidimensionnel d'électrons $GaAs/Al_{0.3}Ga_{0.7}As$. Six séries de fils de taille différente sont faites sur la même couche (voir la figure VI.6). Chaque série comporte dix fils de même taille. Ces fils se séparent entre eux par une distance de 8 μm qui est suffisamment longue pour pouvoir négliger l'interaction entre eux. La largeur nominale de chaque série de fils varie de 200 nm jusqu'à 1000 nm et sa fluctuation est environ 1%. Pour assurer le fait que tous les dix fils sont bon (c'est à dire qu'ils ne sont pas cassé au cours des étapes de nanofabrication), nous avons effectué des mesures de la résistance sur un seul fil, et puis en comparant avec la mesure précédente, on peut identifier le nombre de mauvais fils. Il est important de noter que la largeur effective des fils est plus petite que les valeurs ci-dessus à cause de l'effet de la déplétion.

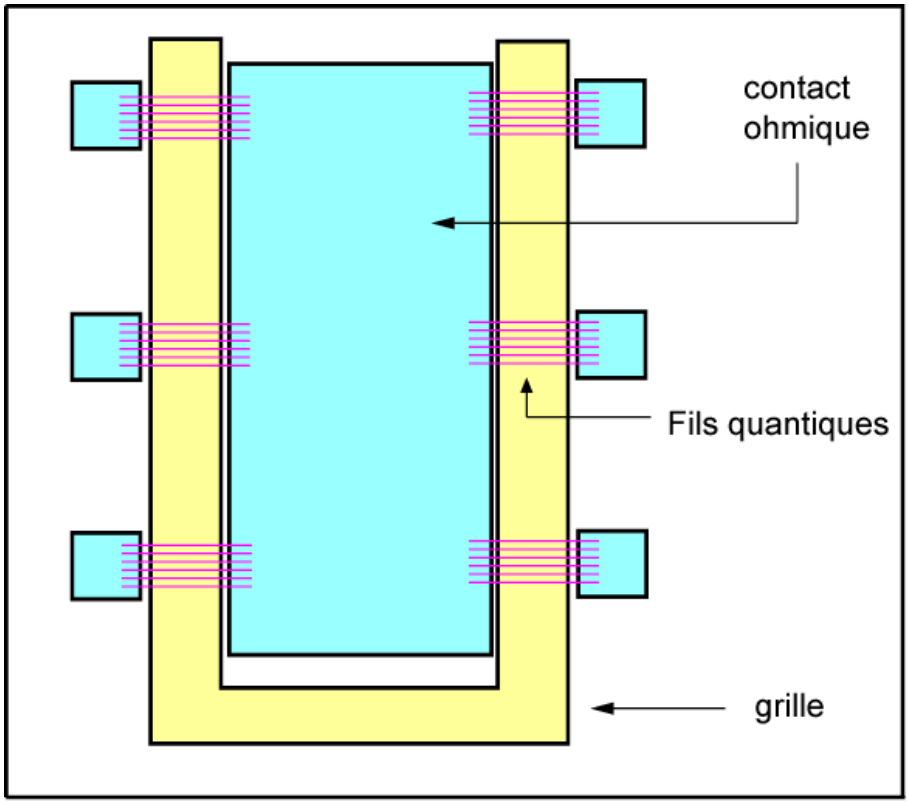
VI.3.2 Détermination de la densité de porteurs

La densité des porteurs du gaz d'électron bidimensionnel est déterminée par des mesures de Shubnikov de Haas. Les oscillations de la résistance en fonction de l'inverse du champ magnétique sont périodiques. La pente p de la droite décrivant la variation les inverses du champ magnétique où se produisent les maxima en fonction de leur indice (qui sont également les indices de Landau) nous donne une manière pour calculer la densité surfacique de porteurs[3]. En fait, cette pente p est inversement proportionnelle à l'énergie de Fermi, et celle-ci est elle-même proportionnelle à la densité surfacique des porteurs n_s.

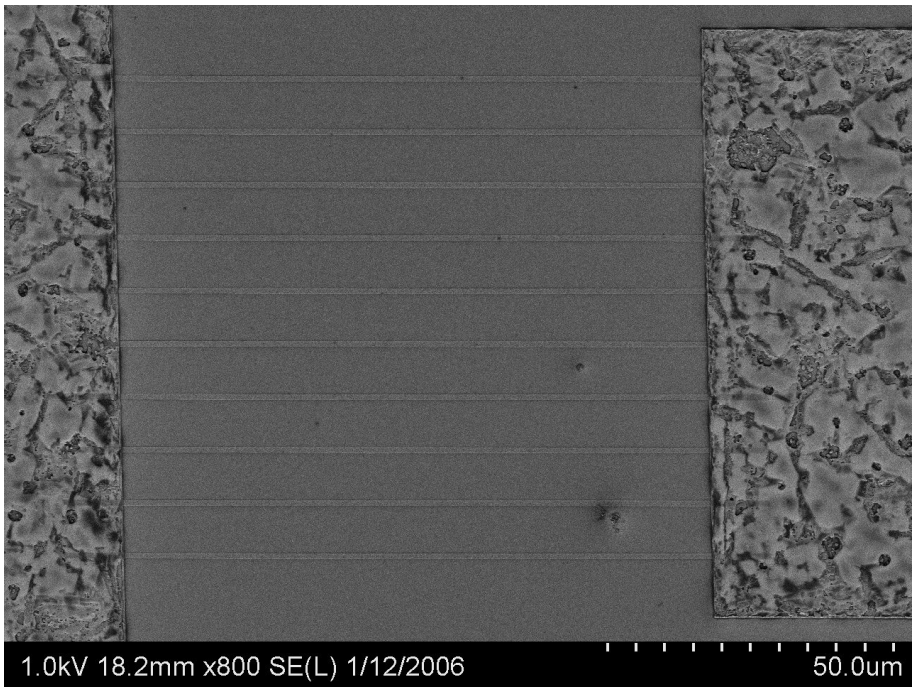
Nous avons effectué des mesures de la magnétorésistance des fils quantiques GaAs/AlGaAs de largeur nominale W=620 nm (Sauf mention particulière, dorénavant on ne parle que des mesures de la série de largeur 620 nm de l'échantillon TC04.) pour différente tension de grille variant de -50 meV jusqu'à 400 meV à très basse température T=50 mK. On extrait de chaque mesure une valeur de la densité d'électron correspondante. La variation de la densité d'électrons en fonction de la tension de grille est reportée sur la figure VI.7. À partir d'un échantillon dont la densité de porteurs correspondant à une tension de grille nulle est $n_s = 3*10^{11}$ cm^{-2}, on peut atteindre une densité de l'ordre de 6.10^{11}cm^{-2} en appliquant une tension 0.4 V. Le tableau VI.1 montre des caractéristiques d'un des fils de l'échantillon TC04 et U600.

[2]En fait, on a effectué des mesures sur une série de 4 échantillons qui sont fabriqués sur 4 couches différentes, mais on a obtenu le même type de résultat, c'est pour cette raison que je présente seulement les résultats obtenus pour le meilleur échantillon TC04.

[3]Ce raisonnement peut retrouver dans l'article connu de T. Ando *et al* [106]



VI.6.a



VI.6.b

FIG. VI.6: (a) Le schéma des fils quantiques GaAs/$Al_{0.3}Ga_{0.7}As$ de taille différente sur le même échantillon, une grille a été mise au dessus des fils pour moduler la densité de gaz d'électrons, et (b) la photo MEB des fils entre deux plots.

Échantillon	n_s ($10^{11}cm^{-2}$)	μ (m^2/Vs)	τ_e (ps)	W (μm)	L (μm)	espaceur (nm)	ℓ_e (μm)
TC04	4.5	72	27	0.62	120	15	7.84
U600	10	10	4	0.4	120	15	1.73

TAB. VI.1: Les paramètres (à T=4K) des échantillons utilisés : la densité de porteurs n_s, la mobilité μ, le temps de collision élastique classique $\tau_e = \frac{\mu m^*}{e}$, la largeur nominale du fil quantique W, sa longueur L, l'espaceur entre le gaz d'électron et les donneurs, et le libre parcours moyen classique $\ell_e = v_F \tau_e$.

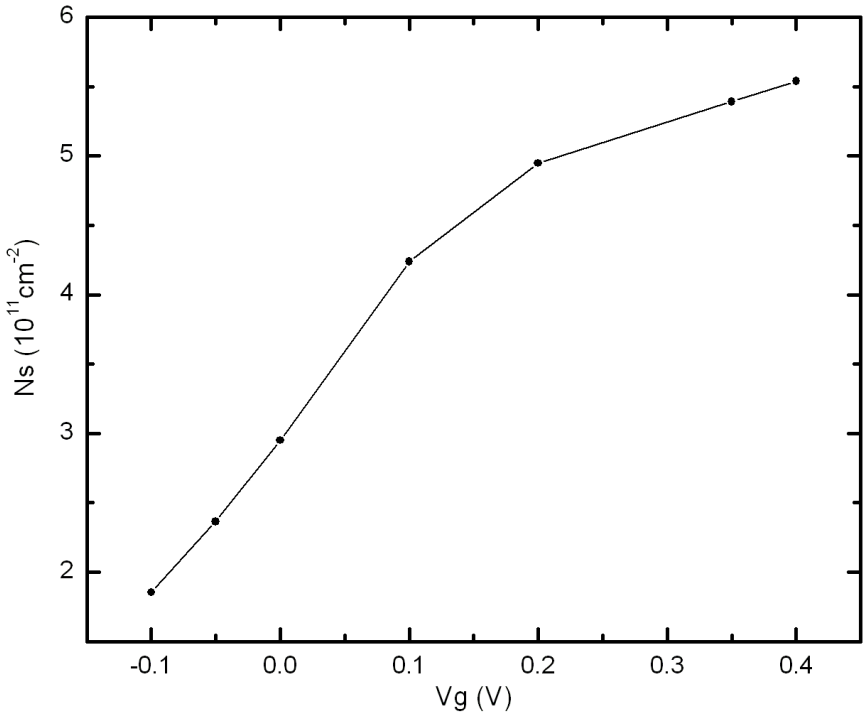


FIG. VI.7: La densité de porteurs mesurée à T=50 mK en fonction de la tension de grille de l'échantillon TC04 de largeur nominale W=620 nm. La densité de porteurs varie de $1.8*10^{11}cm^{-2}$ à $6*10^{11}cm^{-2}$ grâce à une variation de la tension de grille de -0.1 V à 0.4 V.

VI.3.3 La correction de localisation faible

VI.3.3.1 Magnétorésistance en fonction de la température

Nous présentons sur la figure VI.8 la dépendance en champ magnétique de la résistance des fils quantiques GaAs/$Al_{0.3}Ga_{0.7}As$ décrits ci-dessus pour deux valeurs différentes de la température. Nous observons un comportement connu : plus l'on diminue la température, plus le signal de la localisation faible augmente (voir la courbe noire qui correspond à une température T=50 mK et la courbe rouge qui correspond à T=1K.).

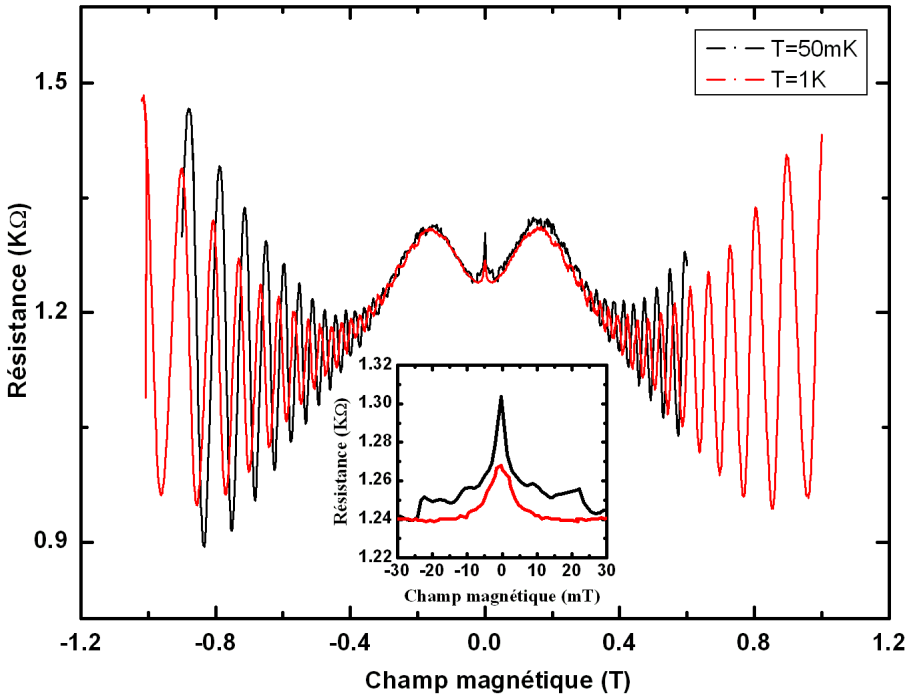


FIG. VI.8: La magnétorésistance des fils GaAs/$Al_{0.3}Ga_{0.7}As$ de l'échantillon TC04 à V_g=0 V ($W_{nominal}$=620 nm) mesurée à T=50 mK (courbe noire) et à T=1 K (courbe rouge), l'encadré est un zoom du pic de la localisation faible.

VI.3.3.2 Localisation faible et l'antilocalisation faible

La figure VI.9 montre la magnétorésistance des fils de largeur nominale de 620 nm de l'échantillon TC04 en fonction de la tension de grille. Nous observons donc une diminution de l'amplitude des pics de la localisation faible quand on augmente la tension de la grille (C'est à dire une diminution de l'amplitude de la correction quantique de localisation faible de la résistance quand on augmente la densité.). Cet effet peut se comprendre par un raisonnement simple : lorsque l'on augmente la tension de la grille, la densité de porteurs augmente également. Il en résulte que l'interaction spin-orbite augmente, et donc le temps de relaxation de spin-orbite τ_{so} diminue. Le temps caractéristique de la cohérence de phase diminue également, ce

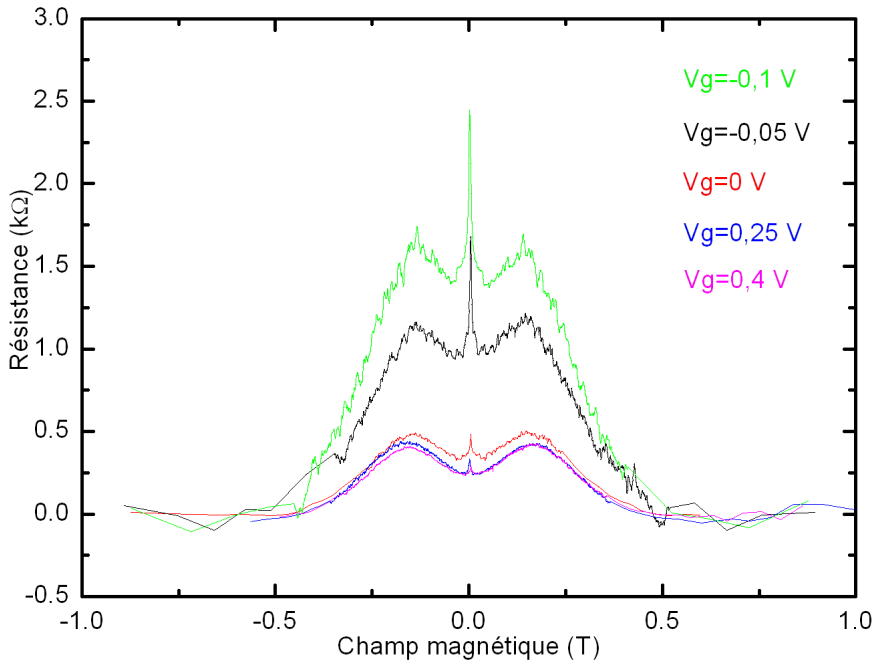


FIG. VI.9: La magnétorésistance des fils quantiques de l'échantillon TC04 ($W_{nominal}$=620 nm) mesurée à T=50 mK en fonction du champ magnétique avec plusieurs tension de grille variant de -50 meV à 400 meV.

qui induit une diminution de la longueur de cohérence de phase L_φ. Comme cette longueur détermine la zone où se produit la localisation faible et son amplitude, on a donc une diminution de l'amplitude du pic de la localisation faible. Ainsi, on a tendance à penser que si l'on augmente la tension de grille, on peut passer du régime de localisation faible au régime d'antilocalisation faible. On se pose donc la question : est ce que ce renversement des positions est possible pour l'échantillon de faible densité de porteurs tel TC04 ?. Cela signifie que l'on devra augmenter la tension de grille, autrement dit que l'on augmente la densité de porteur pour établir la situation de l'antilocalisation faible qui correspond à $(\tau_e, \tau_{so}) < \tau_\varphi$ (En fait, pour la situation de la localisation faible, on a $\tau_{so} > \tau_\varphi \gg \tau_e$). Cependant, la technologie ne nous permet pas d'augmenter davantage la densité de porteur car si l'on augmente trop la tension de grille (une grille aluminium), on fait face à un problème de courant de fuite. Il faudrait dans ce cas avoir une couche GaAs très dopée, de l'ordre de $10^{12}cm^{-2}$. Malheureusement, la situation actuelle du LPN ne nous permet pas d'avoir une telle couche de haute densité de porteurs. On est toujours dans le régime de localisation faible. La question du "crossover" entre ces deux régimes est donc ouverte.

Nous observons également sur cette figure un maximum de la résistance lorsque le champ magnétique vaut 0.15 Tesla. Pour expliquer ce comportement de la résistance, il faut noter que la largeur des fils mesurée est plus petite que le libre parcours moyen ℓ_e (ceci peut se voir sur le tableau VI.1). Par conséquent, le mouvement élec-

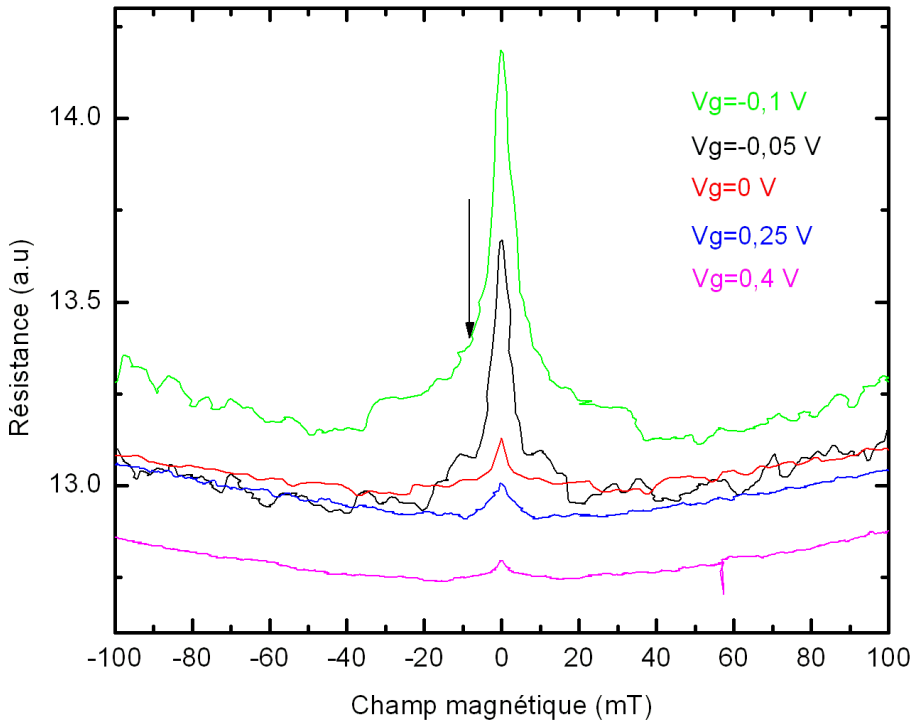


FIG. VI.10: La résistance des fils de largeur nominale W=620 nm mesurée à 50 mK pour différentes valeurs de la tension de grille. La flèche indique le champ "crossover" entre deux régimes faible champ magnétique et fort champ magnétique.

tronique le long de ces fils est diffusif (le mouvement longitudinal), alors que le mouvement transversal est balistique. Lorsque l'on applique un champ magnétique, peu à peu la force de Lorentz courbe ces trajectoires et il existe une interaction entre les électrons avec les bords. Nous pouvons dans ce cas identifier deux régimes du champ magnétique dans lesquels les diffusions spéculaires ne contribuent pas de manière significative à la conductivité. À très bas champ magnétique, les trajectoires électroniques sont presque les mêmes que celles à B=0 et la conductivité est dominée par les électrons qui ont un grand moment longitudinal et qui se dispersent à l'intérieur du fil avant d'entrer en collision avec des bords. À fort champ magnétique, lorsque le rayon cyclotron est plus petit que la largeur du fil, un électron provenant d'un bord peut arriver à l'autre seulement s'il fait une collision interne dans le fil. Dans ce cas, la conductivité est aussi dominée par les diffusions à l'intérieur du fil. Lorsque l'on considère le régime intermédiaire où il y a un grand nombre de collisions entre les électrons avec les bords avant qu'ils fassent une collision à l'intérieur du fil. Ces interactions entre les électrons et les bords augmentent la résistance des fils [107, 108]. On obtient donc une magnétorésistance à faible champ magnétique qui augmente jusqu'à une valeur maximale (qui correspond à B_{max}) pour laquelle la largeur du fil est liée au rayon cyclotron par l'expression [108] :

$$W = 0.55 * r_c(B_{max}) = (0.55 \pm 0.05) * \frac{\sqrt{2\pi\hbar^2 n_s}}{eB_{max}} \quad \text{(VI.12)}$$

Lorsque l'on considère notre échantillon TC04 à la tension de grille V_g=0 V, (qui correspond à une densité de $2.95*10^{11}cm^{-2}$, voir la figure VI.7.), on obtient la largeur du fil W=0.33±0.03 μm.

Nous allons maintenant examiner les informations concernant le régime de localisation faible. Nous présentons sur la figure VI.10 la magnétorésistance de l'échantillon TC04 avec plusieurs tensions de grille à faible champ magnétique (cette figure est similaire à la figure VI.9, mais la zone du champ magnétique est limitée à 0.1 Tesla.). L'analyse de la situation physique d'un fil quasi-balistique dans la section V.4.5 du chapitre précédent nous dit qu'il existe un "cross-over" entre le régime de fort champ magnétique et le régime de faible champ magnétique. En fait, ce "cross-over" parle du changement de régime de l'inverse du temps de relaxation magnétique τ_B : elle a un comportement linéaire à fort champ magnétique et un comportement eb B^2 à faible champ magnétique. Cependant, ce n'est pas facile de voir ce changement sur la figure VI.10.

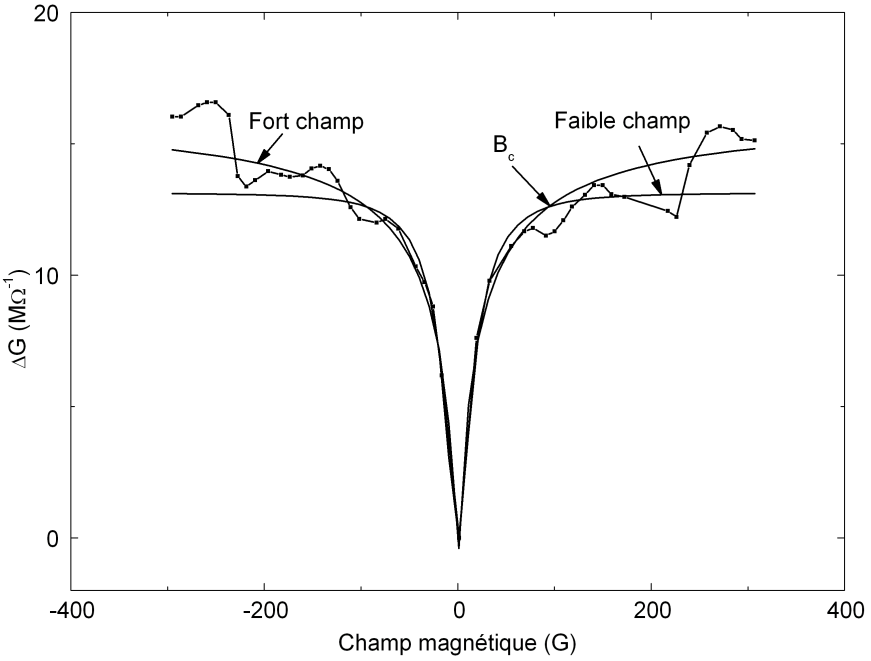


FIG. VI.11: La magnétoconductance des fils de largeur nominale L=620 nm à la tension de la grille V_g=0 V, à T=50 mK et les deux courbes ajustées par l'équation V.42 pour deux cas : faible champ magnétique et fort champ magnétique. La flèche indique le champ magnétique de "cross-over".

Pour déterminer le champ magnétique de "cross-over", nous effectuons deux ajustements de la correction de localisation faible de la magnétoconductance en utilisant la formule V.42 du chapitre précédent de l'échantillon TC04 à V_g=0 V : l'un

$W_{nominale}$ (μm)	0.62 (fort champ)	0.62 (faible champ)
W_{fit} (μm)	0.31	0.48
τ_e (ps)	2.69	1.35
ℓ_e (μm)	0.82	0.81
D (m^2/s)	0.125	0.24
τ_{so} (ns)	45.47	69.28
τ_φ (ps)	84.57	26.38
L_φ (μm)	3.25	2.52
B_c (Gauss)	97	97
B_{th} (Gauss)	44	44

TAB. VI.2: Les paramètres ajustés de l'échantillon TC04 à V_g=0 V : le temps de relaxation de spin τ_{so}, le temps de cohérence de phase τ_φ, le temps de collision élastique τ_e et la largeur nominale $W_{nominale}$ et réelle W_{fit} du fil, la constante de diffusion D, le champ magnétique de "cross-over" mesuré B_c, le champ de "cross-over" théorique calculé par $B_{th}=(K_1/K_2)(\hbar/e)(1/W_{fit}\ell_e)$.

correspond au régime à faible champ magnétique, l'autre correspond au régime à fort champ magnétique (voir la figure VI.11). Nous présentons sur le tableau VI.2 les valeurs obtenues de ces ajustements. Nous notons qu'à très basse température la contribution de la fluctuation de conductance est assez importante, et elle peut influencer l'ajustement à faible champ magnétique. C'est peut-être pour cette raison que plusieurs valeurs obtenues par les deux ajustements, par exemple : W, L_φ, τ_e, τ_{so}, ne sont pas identiques. Nous obtenons également dans le tableau VI.2 les temps caractéristiques τ_e, τ_{so} et τ_φ qui montrent clairement une situation connue : la localisation faible existe que si $\tau_{so} > \tau_\varphi \gg \tau_e$ (Les deux autres situations correspondent à l'antilocalisation faible : $\tau_\varphi > \tau_{so} > \tau_B > \tau_e$ (demi-antilocalisation) et $\tau_\varphi > \tau_e > \tau_{so}$). Il est évident qu'à très basse température, l'interaction électron-électron devient significative. Elle donne naissance à une contribution à la longueur de cohérence de phase, c'est à dire une contribution à τ_φ. Nous n'entrerons pas dans le détail de cette interaction.

Nous remarquons à partir du tableau VI.2 que la valeur du largeur du fil obtenue par les ajustements à faible champ magnétique et à fort champ magnétique est presque en accord avec la valeur obtenue par l'expression VI.12.

VI.4 Conclusion

Ce dernier chapitre a présenté les travaux expérimentaux sur les influences du couplage spin-orbite sur la localisation faible dans les fils quantiques de faible densité de porteur. Nous avons vu qu'en mettant une grille sur les fils, on peut varier la densité de porteurs du gaz qui se situe au dessous. Cela conduit à une augmentation de l'interaction spin-orbit ce qui se voit par des mesures de la magnétorésistance : plus l'on augmente la tension de la grille, plus l'amplitude de la correction de localisation faible de la résistance diminue. À partir des pics de la localisation faible nous avons obtenu le temps caractéristique de ce couplage pour l'échantillon TC04 de largeur nominale de 620 nm en comparant avec les formules théorique. Sa grande valeur montre que le couplage spin orbite dans les fils quantiques ne suffit pas pour faire basculer du régime de la localisation faible au régime d'antilocalisation faible.

Conclusion

Les nouveaux paramètres **k.p**, venant du calcul des liaisons fortes, nous ont permis de comprendre et d'analyser les propriétés du splitting de spin dans le matériau massif (BIA ou terme de Dresselhaus.), en particulier dans le semi-conducteur mieux connu GaAs. Nous avons ainsi mis en évidence les différences entres deux ensembles de paramètres **k.p** et le bon choix des paramètres **k.p**. Les paramètres "historiques" hérités des travaux de C. Hermann et C. Weisbuch et de M. Cardona *et al.* (qui sont utilisés par Zawadzki et Pffefer.) donnent lieu à une différence de la masse d'électron, du splitting de spin des bandes de trou lourd, de trou léger et de split-off du matériau massif GaAs par rapport à la mesure expérimentale et au calcul ab initio par la méthode LMTO. Alors que les résultats obtenus en utilisant des paramètres "tight-binding" donnent un excellent accord avec ces derniers. Nous pouvons noter que dans le contexte de l'intérêt croissant, cette étude de paramétrization est particulièrement importante pour les propriétés dépendant de spin des hétérostructures pour application dans les dispositifs "spintronique".

L'essentiel des travaux de modélisation présentés dans cette thèse se sont appuyés sur l'avantage offert par la méthode **k.p** à 14 bandes, autrement dit le modèle de Kane étendu, qui prend en considération le spin de l'électron, donc le couplage spin-orbite. Celle-ci est en particulier apparue comme plus souple d'utilisation et plus efficace dans la distinction des contributions au splitting de spin et le calcul des états évanescents que la méthode des liaisons fortes. Elle nous a aussi permis d'avoir des expressions analytiques et une vision physique très claire du problème à faible valeur du vecteur d'onde **k**. Enfin, elle nous a donné accès aux dispersions de l'énergie des sous-bandes de conduction et de valence des hétérostructures bidimensionnelles. Elle nous a fourni la matière d'une contribution complémentaire sur les états évanescents du matériau massif. Nous avons mis en évidence l'existence des états évanescents pour toutes les directions de la zone Brillouin contrairement aux conclusions d'un article récent de Rougemaille *et al.* Cette existence se manifeste par des boucles reliant les bandes de conduction et les bandes de valence. Nous avons de plus démontré que l'existence de ces boucles est indépendante de l'asymétrie d'inversion de la structure cristallographique blende de zinc des matériaux massifs. Le point vertical de la boucle reliant la bande de conduction Γ_{6c} à la bande de trou léger Γ_{8v}^{l} correspond à un splitting de spin géant de la bande de conduction qui vaut 120 meV, ce qui est dix fois plus grand que la valeur correspondante dans la structure de bande réelle.

Le splitting de spin des sous-bandes d'énergie des hétérostructures provient de la combinaison du couplage spin-orbite et les effets de l'asymétrie d'inversion. Nous avons démontré que le splitting de spin calculé avec les paramètres extraits de la

méthode des liaisons fortes est en meilleur accord avec des mesures expérimentales. Celui-ci contient la contribution venant de l'effet d'asymétrie de l'interface, la première fois calculée par notre groupe. Nous pouvons noter que cette contribution au splitting de spin est petite dans les hétérostructures **avec atome commun**. Un autre aspect important de l'étude des effets de brisure de symétrie dans les hétérostructures semi-conductrices est la compréhension l'origine physique de l'anisotropie optique sous champ électrique externe dans les super-réseaux et de la différence entre le résultat expérimental et le calcul avec les paramètres **k.p** standard. Tous ces points sont clarifiés dans le chapitre III de cette thèse.

Dans le but de faire un lien plus précis avec la partie expérimentale de la thèse, nous avons entrepris de calculer les états du gaz d'électron en présence du splitting de spin natif et d'un champ magnétique externe. Ce travail difficile ne débouche malheureusement pas sur un calcul de la magnéto-conductivité.

Le couplage spin-orbite est d'une part la cause du dédoublement des niveaux d'énergies dans les hétérostructures semi-conductrices, et d'autre part, il conduit à une transition entre localisation faible et celui, opposé, d'antilocalisation faible. La seconde partie de cette thèse est consacrée à l'étude expérimentale du rôle de couplage spin-orbite dans des fils quantiques semi-balistiques obtenus par gravure à partir d'une structure à gaz bidimensionnel d'électrons. Des fils d'une largeur nominale aussi petite que 620 nm ont ainsi été produits et étudiés en magnéto-transport à des températures inférieures à 100 mK. La lithographie électronique à l'aide du masqueur du LPN et la gravure ionique ont été utilisées pour fabriquer des fils de grande longueur i.e 120 μm afin de limiter l'effet des fluctuations universelles de conductance par moyenne d'ensemble. Une grille permet de plus de faire varier la densité du gaz d'électron par rapport à la densité nominale. L'effet étudié est le pic de localisation faible (magnéto-résistance négative) qui se manifeste à très faible champ magnétique. Comme le splitting de spin au niveau de Fermi augmente linéairement avec la densité, on s'attend à observer cette transition en variant la tension de grille. Une forte diminution du pic de magnétorésistance négative est effectivement observée lorsqu'on augmente la densité du gaz d'électron, mais les densités maximales obtenues n'ont pas permis l'observation du changement de signe caractéristique de la transition localisation/antilocalisation. En effet, les densités nominales dont nous avons disposées étaient trop faibles et nécessitaient des tensions de grille au-delà de la limite imposée par la faible barrière Schottky entre la grille et le GaAs. L'analyse des courbes de localisation faible a permis néanmoins une mesure quantitative des différents temps caractéristiques des échantillons et d'observer les changements de régimes fort champ magnétique/bas champ magnétique liés à la nature quasi-balistique des échantillons. Nous remarquons que dans le système **avec atome commun** GaAs/(AlGa)As, le couplage spin-orbite est petit dans des conditions normales, il faut donc augmenter la densité de porteur pour pouvoir l'augmenter. Or, cette condition dépend entièrement de l'état fonctionnement de la machine MBE au laboratoire, les échantillons de très haute densité de porteurs ne sont pas encore mesurés au sein de notre équipe. En conséquence, nous ne pouvons que interpréter des résultats classiques. Nos travaux sera donc prolongé dès que les couches GaAs à gaz bidimensionnel d'électrons de plus grande densité seront disponibles.

Annexe A

Méthode quadrature

Le premier chapitre (I) de cette thèse résume l'évolution de la méthode **k.p** dès sa naissance jusqu'au aujourd'hui. Nous avons vu que cette méthode et sa variation en terme d'approximation des fonctions enveloppes (EFA en anglais) nous permettent d'avoir un aperçu clair des propriétés électroniques des hétérostructures semi-conductrices. Lorsque l'on considère des hétérostructures, on fait face à un problème de la discontinuité des paramètres à l'interface et donc le raccordement des fonctions enveloppes à l'interface. Dans l'espace réel, la matrice **k.p** du Hamiltonien est transformée en opérateur de l'énergie cinétique en remplaçant le vecteur d'onde **k** par $\frac{1}{i}\nabla$, et l'équation de Schrödinger correspondante est un ensemble des équations différentielles couplées pour les fonctions enveloppes multi-composantes.

La méthode quadrature (quadrature method en anglais) est utilisée par Winkler et Rössler [29] pour résoudre l'équation intégrale issue de l'approximation des fonctions enveloppes dans l'espace du momentum **p**. Cette méthode a l'avantage de traiter numériquement facilement le problème. Les conditions de continuité des fonctions enveloppes à l'interfaces sont satisfaites de manière naturelle à partir du Hamiltonien. Cette méthode est utilisée dans cette thèse pour calculer la relation de dispersion des sous-bandes, etc.

L'idée principale est d'effectuer une transformation Fourrier de l'équation de Schrödinger pour passer de l'espace réel de la position à l'espace du momentum et ensuite de discrétiser l'équation obtenue dans l'espace réciproque. L'équation représentante le problème des fonctions propres est

$$H(z)\Psi(z) = E\Psi(z) \tag{A-1}$$

Ici la matrice $N \times N$ du hamiltonien H agit sur la fonction enveloppe de N composantes $\Psi(z)$. Les éléments de matrices du hamiltonien H peuvent être décomposés en termes des expressions de même puissance de z et $k_z = -i\partial_z$:

$$\begin{aligned} h_{nn'} = & h^{0,0}_{n,n'} + h^{0,1}_{n,n'} + h^{0,2}_{n,n'} + ... \\ & + h^{1,0}_{n,n'} + h^{1,1}_{n,n'} + ... \\ & + h^{2,0}_{n,n'} + ... \end{aligned} \tag{A-2}$$

Où

$$h^{0,\nu}_{n,n'} = z^\nu p^{0,\nu}_{n,n'}(z) \tag{A-3}$$

$$h^{1,\nu}_{n,n'} = -\frac{i}{2}[\partial_z z^\nu p^{1,\nu}_{n,n'}(z) + z^\nu p^{1,\nu}_{n,n'}(z)\partial_z] \tag{A-4}$$

$$h^{2,\nu}_{n,n'} = -\partial_z z^\nu p^{2,\nu}_{n,n'}(z) \tag{A-5}$$

Ici, l'indice μ dans $h^{\mu,\nu}_{n,n'}$ représente la puissance de $k_z = -i\partial_z$ et l'indice ν représente la puissance de z. La fonction complexe $p^{\mu,\nu}_{n,n'}(z)$ décrit la variation spatiale des paramètres de bandes. En général, l'élément de matrice $h^{0,0}_{n,n'}$ contient les termes provenant de la dispersion dans le plan. L'élément de matrice $h^{1,0}_{n,n'}$ résulte des termes non-diagonaux et $h^{1,0}_{n,n'}$ résulte de la contribution des bandes lointaines au deuxième ordre en k_z. Il est important de noter que l'opérateur différentiel $-i\partial_z$ dans l'espace réel devient un opérateur simple, multiplicatif k_z dans l'espace réciproque. Par conséquent, la transformation de Fourrier ramène des équations différentielles (A-1) à la forme :

$$\begin{aligned} H(k)\Psi(k) &= \int_{-\infty}^{\infty} dk' \sum_\nu \left[\wp^{0,\nu}(k-k') + \frac{1}{2}(k+k')\wp^{1,\nu}(k-k') + kk'\wp^{2,\nu}(k-k')\right]\Psi(k') \\ &= E\Psi(k) \end{aligned} \tag{A-6}$$

Où on a utilisé $k \equiv k_z$. La notation $\wp^{\mu,\nu}(k)$ représente la matrice de la transformation Fourrier de $z^\nu p^{\mu,\nu}_{n,n'}(z)$. Les pré-facteurs de ces matrices dépendent de k et k' et résultent de la transformation des opérateurs (A-3) dans l'espace de réciproque. L'expression sous l'intégral dans l'équation (A-6) est évidemment Hermitique.

On diagonalise ensuite les matrices obtenues et obtient donc la fonction propre dans l'espace réciproque. Puis, cette fonction doit être transformée à l'espace réel.

On va maintenant entrer dans le détail de la résolution de l'équation (A-6) par la méthode quadrature. Cette méthode est basée sur l'idée que l'on calcule l'intégrale I=$\int_a^b dx f(x)$ en calculant la somme ci-dessous. Cette somme est une expression approximative de l'intégral I :

$$I_m = \sum_{j=1}^{m} p_j^{(m)} f(x_j^{(m)}) \tag{A-7}$$

Où $p_j^{(m)}$ est le poids de la règle "quadrature" (A-7). La série I_m des règles "quadrature" représente la méthode "quadrature". On remarque que la somme de Riemann est un exemple de cette méthode "quadrature". On peut utiliser l'idée des règles "quadrature" (A-7) pour traiter des équations intégrales couplées de la forme

$$\int_a^b dx' k(x,x')\psi(x') = \lambda\psi(x) \tag{A-8}$$

On discrétise x et x' de sorte que le noyau k(x,x') devienne une matrice finie. On obtient donc une matrice représentante le problème des fonctions propres.

$$\sum_{j=1}^{m} p_j^{(m)} k(x_i^{(m)}, x_j^{(m)})\psi(x_j^{(m)}) = \lambda\psi(x_i^{(m)}) \tag{A-9}$$

Il est important de noter que l'équation intégrale que l'on veut résoudre (A-6) est différente de l'équation (A-8) : le domaine d'intégration est infini et le noyau est un opérateur non-borné. Cependant, le Hamiltonien **k.p** est valide dans la zone où $|k| \ll 2\pi/a$, on s'intéresse donc aux solutions de (A-6) qui diminuent très rapidement hors de la zone près de $k = 0$. Ainsi, l'utilisation des bornes finies dans l'intégration (A-6) est justifiée. De plus, le résultat numérique peut être obtenu avec une précision arbitraire si l'on augmente le nombre de point de l'intégration m.

Annexe B

Le cryostat à dilution ^{3}He/^{4}He

Le liquide ^{4}He sous la pression normale bout à 4.2 K, il subit une transition superfluide à 2.2 K. Grâce au fait que plus la pression gazeuse au dessus du liquide ^{4}He est faible, plus la température d'ébullition est basse, on peut donc descendre jusqu'à 1.2 K en pompant le gaz. De même, l'isotope d'hélium 3 bout à 3.2 K sous la pression normale et en pompant, on peut atteindre la température 300 mK. Par contre, le mélange de deux isotopes a une propriété thermodynamique très intéressante permettant d'obtenir des températures plus basse ce qui est nécessaire pour les études de la physique mésoscopique. Ce mélange est un ingrédient important du cryostat à dilution.

Le principe de fonctionnement du cryostat est originalement proposé par H. London en 1951. Il est basé sur le fait que l'hélium peut exister dans trois phases différentes. Lorsque le mélange de deux isotopes d'hélium : ^{3}He/^{4}He est refroidi en dessous de la température critique (environ 800 mK), il subit une séparation spontanée de phase pour former deux phases :

- une phase que l'on appelle la phase diluée, qui est pauvre en ^{3}He et riche en ^{4}He.
- une autre phase dite concentrée, qui est pauvre en ^{4}He et riche en ^{3}He. Cette phase plus légère flotte au dessus de la phase diluée.

Puisque l'enthalpie de deux phases est différente, il est donc possible d'obtenir de très basse température en évaporant ^{3}He de la phase concentrée dans celle diluée. On a donc besoin l'énergie pour transporter les atomes ^{3}He de la phase concentrée à la phase diluée. Cette énergie vient du système extérieur. Le passage des atomes ^{3}He d'une phase à l'autre s'accompagne un effet frigorifique comparable à celui produit par l'évaporation d'un liquide sous la pression réduite. Si la transformation est effectuée de manière adiabatique, on aura un abaissement de la température de l'ensemble des deux phases.

Le refroidissement du cryostat à dilution commence toujours par une phase de prérefroidissement à la température de l'hélium. Cette opération s'effectue à l'aide d'un gaz d'échange ^{4}He qui est introduit dans le calorimètre afin de thermaliser avec le vase interne contenant de l'He liquide. Le gaz froid doit ensuite être pompé suffisamment longtemps pour permettre aux gaz résiduel de se cryopomper en monocouche sur la surface plus froide, de façon à éviter tout échange entre la partie à T=4K et la dilution. Après au moins une heure de pompage à 4.2 K à l'aide d'une

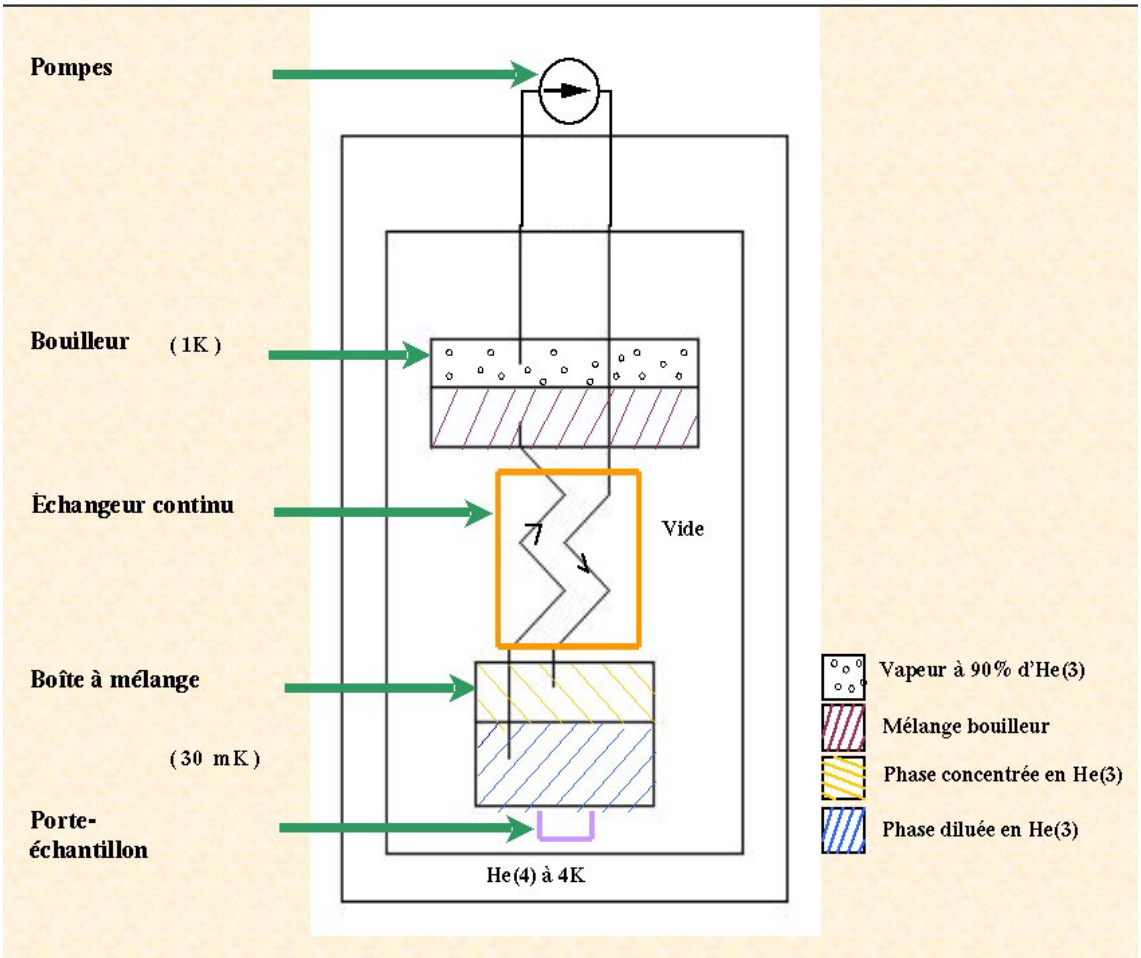


FIG. B-1: Le schéma principe de la diluette.

bonne pompe secondaire, on obtiendra une pression de l'ordre de 2.4 10^{-5} mb. On injecte ensuite le mélange dans le circuit, tout en pompant sur l'évaporateur. Dans un système classique à pot séparé, le mélange injecté se condense vers 1.5 K et après détente dans une impédance. En pompant le système, la partie concentrée du mélange devient de plus en plus riche en ^{3}He, alors que la partie diluée s'en appauvrit.

La figure B-1 montre les composantes essentielles de la diluette : le bouilleur, l'échangeur, la boîte à mélange.

Le rôle de bouilleur est de distiller sous basse pression l'^{3}He de façon à le réinjecter le plus pur possible dans le cryostat en créant une pression osmotique dans la phase diluée. Il est aussi l'endroit où la dilution commence après que le système soit refroidisse jusqu'à 800 mK : la partie diluée (riche en ^{4}He) formée dans la région haute, tombe grâce à sa densité élevée, sur la partie condensée. En chauffant légèrement par un heater, et toujours en pompant, le ^{3}He s'évapore.

Les échangeurs relient la boîte à mélange et le distillateur en deux sens soit de manière continue, soit de manière discrete. Le liquide "chaud" tombe du distillateur sur la boîte à mélange est refroidi par celui qui remonte à l'aide des échangeurs.

La boîte à mélange, dans la quelle se passe la dilution de ^{3}He de la phase concentrée (région haute) à la phase diluée (région basse). L'^{3}He retourne ensuite au distil-

lateur, où il est pompé. On chauffe légèrement le bouilleur (T $\sim$ 0.7 K) de façon à ce que la pression partielle de ^{3}He soit importante alors que celle de ^{4}He est négligeable.

La température minimale que l'on peut atteindre dans notre dilution est de l'ordre de 30 mK, elle dépend fortement de la qualité des échangeurs sans compter les fuites thermiques et les vibrations.

Annexe C

Fonction Digamma $\Psi(x)$

La fonction Digamma $\Psi(x)$ (On la dénote auparavant $\Psi_0(x)$, ou $\Psi^0(x)$) est le dérivé logarithmique de la fonction gamma Γ [128] :

$$\Psi(x) = \frac{d \ln \Gamma(x)}{dx} = \frac{\Gamma'(x)}{\Gamma(x)} \tag{C-1}$$

Où :

$$\Gamma(x) = \int_0^\infty t^{x-1} e^{-t} dt \tag{C-2}$$

ou bien, on peut écrire la fonction Digamma sous une autre forme :

$$\Psi(x) = \int_0^\infty (\frac{e^{-t}}{t} - \frac{e^{-xt}}{1 - e^{-t}}) dt \tag{C-3}$$

L'allure de la fonction digamma (voir la figure C-1) est dessinée par Mathematica.

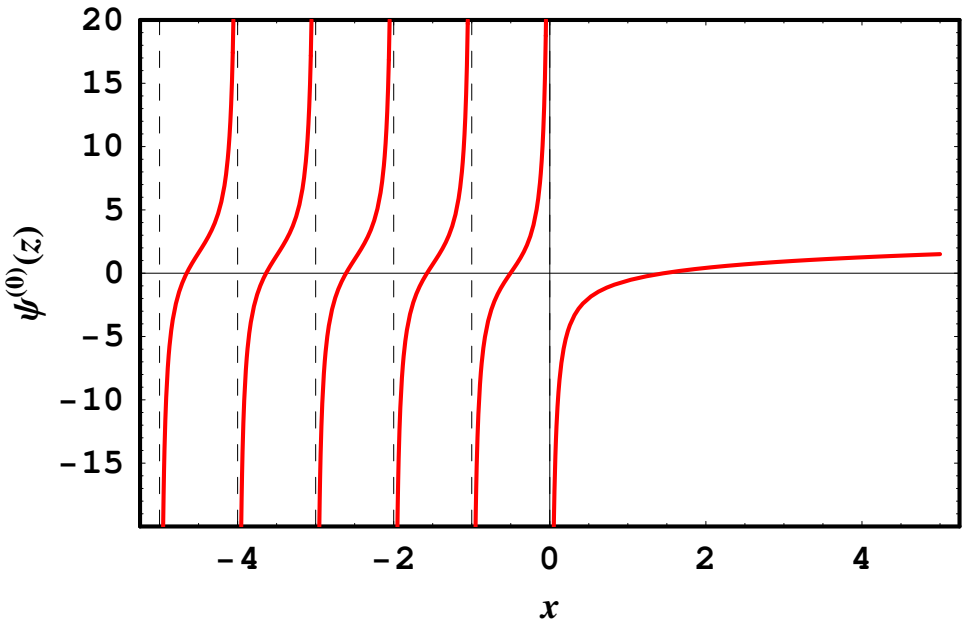


FIG. C-1: Fonction Digamma.

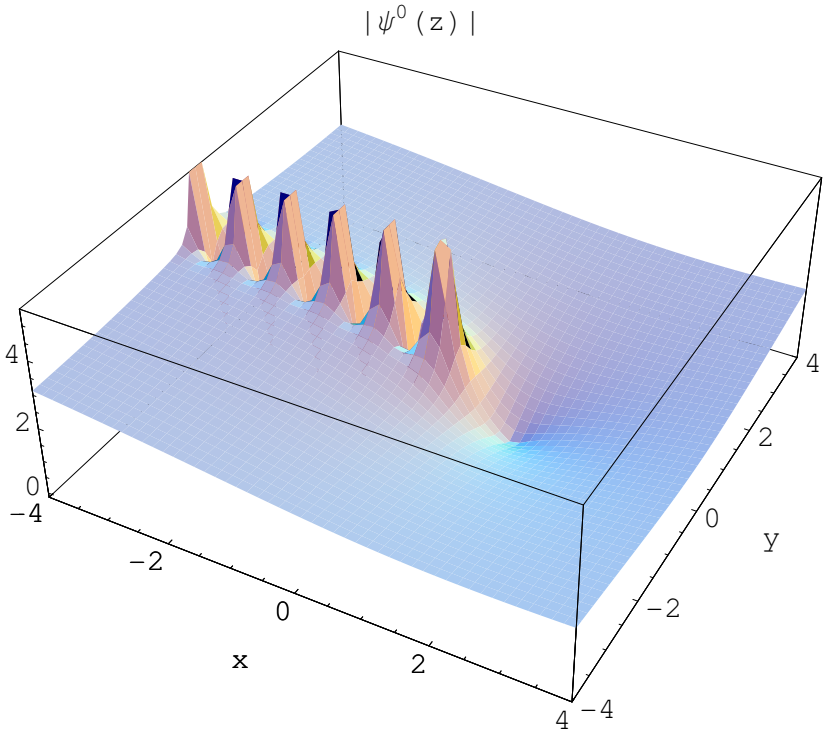


FIG. C-2: Fonction Digamma dessinée dans l'espace 3D.

Cette fonction a plusieurs propriétés qui permettent de calculer la correction de la localisation faible à la conductance dans certaines limites. Je présente donc ces propriétés ici :

$$\Psi(\frac{1}{2}+x) \simeq \ln x + \frac{1}{24x^2} + ..., pour \quad x \to \infty \tag{C-4}$$

$$\Psi(\frac{1}{2}+x) \simeq \Psi(\frac{1}{2}) + x\Psi'(\frac{1}{2}) + ..., pour \quad x \to 0 \tag{C-5}$$

$$\ln N - \Psi(x) = \sum_{0}^{N} \frac{1}{n+x}, \quad pour \quad N \to \infty \tag{C-6}$$

$$\Psi(\frac{1}{2}+z) - \Psi(\frac{1}{2}+y) = \frac{1}{2}\int_0^\infty \frac{e^{-yt}-e^{-zt}}{\sinh(\frac{t}{2})}dt \tag{C-7}$$

$$\Psi(\frac{1}{2}+t) - \ln(\frac{t}{2}) = \int_0^\infty e^{-tx}(\frac{1}{x} - \frac{1}{\sinh x}) \tag{C-8}$$

Pour un entier n≡x,

$$\Psi(n) = -\gamma + \sum_{k=0}^{n-1} \frac{1}{k} = -\gamma + H_{n-1} \tag{C-9}$$

Où $\gamma \simeq 0.577$ est la constante d'Euler-Mascheroni, et H_{n-1} est le nombre harmonique.

Annexe D

Publications

1. *Valence band spin splitting in GaAs/AlGaAs quantum wells*
   Q-T. Nguyen et al., Physica E 34, (2006) 352-354.
2. *Comment on "Spin-induced forbidden evanescent states in III-V semiconductors"*
   Q-T. Nguyen et al., Physical Review Letters 97, 109701 (2006).
3. *Evanescent states in semiconductors III-V with inversion asymmetry and spin-orbit coupling*
   Q-T. Nguyen et al. Proceedings of the 14th International Symposium "Nanostructures : Physics and Technology", St Petersburg, Russia (2006).
4. *Evanescent states in semiconductors III-V and its applications : spin-filter*
   Q-T. Nguyen et al., (in preparation for Physical Review B (2006).

Communications à des conférences

1. *Weak localization in GaAs/AlGaAs semi-ballistic quantum wires with spin-orbit coupling*
   Q-T. Nguyen et al., Conference on quantum mesoscopic physics, Aussois, December 2004 (Poster).
2. *Valence band spin splitting in GaAs/AlGaAs quantum wells*
   Q-T. Nguyen et al., 16th International Conference on electronics properties of two dimensional systems (EP2DS 16, Albuquerque, New Mexico, July 2005. (Poster).
3. *Evanescent states in semiconductors III-V with inversion asymmetry and spin-orbit coupling*
   Q-T. Nguyen et al. 14th International Symposium "Nanostructures : Physics and Technology", St Petersburg, Russia (2006). (contributed talk)

Références bibliographiques

[1] S. Datta and B. Das, Appl. Phys. Lett. **56**, 665 (1990).

[2] I. Žutic, J. Fabian, and S. Das Sarma, Rev. Mod. Phys. **76**, 323 (2004).

[3] E. O. Kane, J. Phys. Chem. Solids. **1**, 249 (1957).

[4] O. Krebs and P. Voisin, Phys. Rev. Lett. **77**, 1829 (1996).

[5] L. Esaki et R. Tsu, IBM J. Res. Dev. **14**, 61 (1970) .

[6] R. Dingle, H. L. Störmer, A. C. Gossard et W. Wiegmann, Appl. Phys. Lett. **33**, 655 (1978).

[7] Q-T. Nguyen, *Rapport de stage du DEA Physique des Solides*, Ecole Polytechnique (Palaiseau, 2003).

[8] E. L. Ivchenko, A. Y. Kaminski, and U. Rössler, Phys. Rev. B **54**, 5852 (1996).

[9] E. L. Ivchenko, A. Y. Kaminski, and P. Voisin, Phys. Solid. State **40**, 1748 (1998).

[10] O. Krebs, Thèse de doctorat de l'Université Paris VII (1998).

[11] S. Cortez, Thèse de doctorat de l'Université Paris VI (2001).

[12] W. Shockley, Phys. Rev. **78**, 173 (1950).

[13] R. J. Elliott, Phys. Rev. **96**, 266 (1954).

[14] R. J. Elliott, Phys. Rev. **96**, 280 (1954).

[15] Y. Yafet, in *Solid State Physics*, Ed. F. Seitz and D. Turnbull Vol **14**, 1 (Academic, NewYork, 1963).

[16] G. Dresselhauss, A. F. Kip and C. Kittel, Phys. Rev. **98**, 368 (1955).

[17] P. O. Löwdin, J. Chem. Phys. **19**, 1396 (1951).

[18] J. M. Luttinger, Phys. Rev. **102**, 1030 (1956).

[19] C. R. Pidgeon and R. N. Brown, Phys. Rev. **146**, 275 (1966).

[20] A. Baldereschi, N. O. Lipari and M. Altarelli, Phys. Rev. B **8**, 2697 (1973).

[21] D. J. Bendaniel and C. B. Duke, Phys. Rev. **152**, 683 (1966).

[22] C. Herman and C. Weibuch, Phys. Rev. B **15**, 823 (1977).

[23] P. Pfeffer and W. Zawadzki, Phys. Rev. B **41**, 1561 (1990).

[24] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu and F. Laloë, *Mécanique Quantique*, Collection Enseignement des Sciences, Ed. Hermann (Paris, 2000).

[25] J. L. Basdevant et J. Dalibar, *Mécanique quantique*, Cours de l'Ecole Polytechnique (Palaiseau, 1999).

[26] J. M. Jancu, E. A. de Andrada e Silva, R. Scholz, and G. C. La Roca, Phys. Rev. B **72**, 193201 (2005).

[27] H. Mayer and U. Rössler, Phys. Rev. B **44**, 9048 (1991).

[28] G. Dresselhaus, Phys. Rev. **100**, 580 (1955).

[29] R. Winkler, *Spin-Orbit Coupling Effects in Two-Dimensional Electron and Hole Systems*, Ed. Springer Verlag (Berlin, 2003).

[30] M. Dyakonov and V. Perel, JETP. **33**, 1053 (1971).

[31] D. G. Seiler, B. D. Bajaj and A. E. Stephens , Phys. Rev. B **16**, 2822 (1977).

[32] J. B. Miller, D. M. Zumbühl, C. M. Marcus, Y. B. Lyanda-Geller, D. Goldhaber-Gordon, K. Campman and A. C. Gossard, Phys. Rev. Lett. **90**, 76807 (2003).

[33] P. Dresselhauss, C. Papavassillion, R. Wheeler and R. Sacks, Phys. Rev. Lett. **68**, 106 (1992).

[34] W. Knap et al., Phys. Rev. B **53**, 3912 (1996).

[35] M. Cardona, N. E. Christensen, and G. Fasol, Phys. Rev. B **38**, 1806 (1988).

[36] G. E. Pikus et al., Sov. Phys. Semicond. **22**, 115 (1988).

[37] A. T. Gorelenok et al., Sov. Phys. Semicond. **20**, 216 (1986).

[38] M. Cardona et al., Solid State Commun. **60**, 17 (1986).

[39] A. T. Hanbicki, O. M. J. van 't Erve, R. Magno, G. Kioseoglou, C. H. Li, B. T. Jonker, G. Itskos, R. Mallory, M. Yasar, and A. Petrou, Appl. Phys. Lett **82**, 4092 (2003).

[40] V. Heine, Proc. Phys. Soc ; London **81**, 300, July (1963).

[41] N. Rougemaille, H-J. Drouhin, S. Richard, G. Fishman and A. K. Schmid, Phys. Rev. Lett. **95**, 186406 (2005).

[42] R. K. Hayden, D. K. Maude, L. Eaves, E. C. Valadares, M. Henini, F. W. Sheard, O. H. Hughes, J. C. Portal, and L. Cury, Phys. Rev. Lett. **66**, 1749 (1991).

[43] H. L. Störmer, Z. Schlesinger, A. Chang, D. C. Tsui, A. C. Gossard, and W. Wiegmann, Phys. Rev. Lett. **51**, 126 (1983).

[44] F. F. Fang and W. E. Howard, Phys. Rev. Lett. **16**, 797 (1966).

[45] E. I. Rashba, Sov. Phys. Solid State. **2**, 1109 (1960).

[46] Y. A. Bychkov and E. I. Rashba, JETP Lett. **39**, 78 (1984).

[47] G. Goldoni and F. M. Peeters, Phys. Rev. B **51**, 17806 (1995).

[48] J. C. Slater, *Quantum Theory of Atomic Structure*, Vol. 2 ,Ed. McGraw-Hill (NewYork, 1960).

[49] E. L. Ivchenko and G. E. Pikus, *Supperlattices and Other Heterostructures*, 2nd Eds., Vol 110 of Solid State Sciences, Spinger Verlag (Berlin, 1997).

[50] P. Ramvall, B. Kowalski and P. Omling, Phys. Rev. B **55**, 7160 (1997).

[51] B. Jusserand, D. Richards, H. Peric and B. Etienne, Phys. Rev. Lett. **69**, 848 (1992).

[52] H. W. van Kesteren, E. C. Cosman and W. A. J. A. van der Poel Phys. Rev. B **41**, 5283 (1990).

[53] J. Luo, H. Munekata, F. F. Fang and P. J. Stiles, Phys. Rev. B **38**, 10142 (1988).

[54] J. P. Heida, B. J. van Wees, J. J. Kuipers and T. M. Klapwijk, Phys. Rev. B **57**, 11911 (1998).

[55] S. Brosig, K. Ensslin, R. J. Warburton, C. Nguyen, B. Brar, M. Thomas and H. Kroemer, Phys. Rev. B **60**, 13989 (1988).

[56] S. Sasa, K. Anjiki, T. Yamaguchi and M. Inoue, Physica B **272**, 149 (1999).

[57] J. Nitta, T. Akazaki, H. Takayanagi and T. Enoki, Physica E **2**, 527 (1998).

[58] D. Grundler, Phys. Rev. Lett. **84**, 6047 (2000).

[59] T. Matsuyama, R. Kürsten, C. Meibner, and U. Merkt, Phys. Rev. B **61**, 15588 (2000).

[60] U. Rössler and J. Kainz, Solid State Commun **121**, 313 (2002).

[61] S. Cortez, O. Krebs and P. Voisin, Images de la Physique. **2000**, 66 (2000).

[62] S. Cortez, O. Krebs, and P. Voisin, Eur. Phys. J. B **21**, 241 (2001).

[63] I. Vurgafman, J.R. Meyer and L.R. Ram-Mohan, J. Appl. Phys. **89**, 5815 (2001).

[64] K. von Klitzing, Rev. Mod. Phys. Vol. **58**, No. 3, July (1986).

[65] R. B. Laughlin, Phys. Rev. B **23**, 5632 (1981).

[66] L. D. Landau, Zeitschrift für Physik, **64**, 629 (1930).

[67] G. Bastard, *Wave Mechanics Applied to Semiconductor Heterostructures*, Les Editions de Physique (Les Ulis, 1988).

[68] T. Ando and Y. Uemura, J. Phys. Soc. Japan **36**, 959 (1974).

[69] X. F. Wang and P. Vasilopoulos, Phys. Rev. B **72**, 085344 (2005).

[70] W. Yang and K. Chang, Phys. Rev. B **73**, 045303 (2006).

[71] Z. Liliental, R. W. Carpenter and J. Escher, Ultramicroscopy **14**, 135 (1984).

[72] J. Nitta, T. Akazaki, H. Takayanagi and T. Enoki, Phys. Rev. Lett. **78**, 1335 (1997).

[73] J. Schliemann, J. C. Egues et D. Loss, Phys. Rev. Lett. **90**, 146801 (2003).

[74] W. Shubnikov, W. J. de Haas, Proc. Netherlands Roy. Acad. Sci. **33**, 130 (1930).

[75] W. J. de Haas, P. M. Alphen, Proc. Netherlands Roy. Acad. Sci. **33**, 1106 (1930).

[76] S. Q. Shen, M. Ma, X. C. Xie et F. C. Zhang, Phys. Rev. Lett. **92**, 256603 (2004).

[77] E. A. de Andrada e Silva, Phys. Rev. B **46**, 1921 (1992).

[78] L. Vervoort, R. Ferreira, and P. Voisin, Semicond. Sci. Technol. **14**, 227 (1999).

[79] G. Bastard, J. A. Brum, and R. Ferreira, in : Solid State Physics, ed. by H. Ehrenreich and D. Turnbull, (Academic, Boston). Vol. **44**, 229 (1991).

[80] P. Pfeffer and W. Zawadzki, Phys. Rev. B **53**, 12813 (1996).

[81] S. Richard, F. Aniel, and G. Fishman, Phys. Rev. B **70**, 235204 (2004).

[82] B. A. Foreman, Phys. Rev. Lett. **81**, 825 (1998).

[83] P. Yu and M. Cardona, *Fundamentals of Semiconductors*, Ed. Springer Verlag (Berlin, 2003).

[84] Landolt and Börnstein, *Numerical Data and Functional Relationships in Science and Technology*, group **III**, Vol. **17**, Ed. Springer Verlag (Berlin, 1982).

[85] D. Bimberg, M. Grundmann and N. N. Ledentsov, *Quantum Dot Heterostructures*, Ed. J. Wiley and Sons (New York, 1999).

[86] J. J. Harris, J. A. Pals and R. Woltjer, Rep. Prog. Phys. **52**, 1217 (1989).

[87] Z. Alferov, Rev. Mod. Phys. Vol. **73**, No. 3, July (2001).

[88] D. L. Smith and C. Mailhiot, Rev. Mod. Phys. Vol. **62**, No. 1, January (1990).

[89] J. S. Blakemore, J. Appl. Phys. **53**(10), 123 (1982).

[90] R. P. Feynman, *The Feynman Lectures on Physics*, Vol. 3, Eds. Addison Wesley Longman (Massachusetts, 1966).

[91] R. P. Feynman and A. R. Hibbs, *Quantum Mechanics and Path Integrals*, Ed. McGraw-Hill (New York, 1965).

[92] D. E. Khmelnitskii, Physica **126B**, 235 (1984).

[93] S. Chakravarty and A. Schmid, Phys. Rep. **140**, No. 4, 193 (1986).

[94] E. Akkermans and G. Montambaux, *Physique Mésoscopique des Electrons et des Photons*, Ed. EDPSciences (Paris, 2004).

[95] C. W. J. Beenakker and H. Van Houten, in *Solid State Physics series*, Vol. 44, Eds. H. Ehrenreich and D. Turnbull, Ed. Academic Press (California, 1991).

[96] G. Dolan and D. Osheroff, Phys. Rev. Lett. **43**, 721 (1979).

[97] G. J. Dolan and J. H. Dunsmuir, Physica **152B**, 7 (1988).

[98] P. A. Lee and T. V. Ramakrishman, Rev. Mod. Phys. **57**, 287 (1985).

[99] Y. Imry, *Introduction to Mesoscopic Physics*, Ed. Oxford University Press, (Oxford, 1997).

[100] S. Hikami, A. I. Larkin and Y. Nagaoka, Pro. Theor. Phys. **63**, 707 (1980).

[101] S. Maekawa and H. Fukuyama, J. Phys ; Soc. Japan. **50**, 2516 (1981).

[102] H. Mathur and A. Stone, Phys. Rev. Lett. **68**, 2864 (1992).

[103] Yu. B. Lyanda-Geller and A. D. Mirlin, Phys. Rev. Lett. **72**, 1894 (1994).

[104] A. Kawabata, J. Phys. Soc. Jpn. **53**, 3540 (1984).

[105] A. Zduniak, M. I. Dyakonov and W. Knap, Phys. Rev. B **56**, 1996 (1997).

[106] T. Ando, A. B. Flower and F. Stern, Rev. Mod. Phys. Vol. **54**, No. 2, April (1982).

[107] C. Naud, Thèse de Doctorat de l'Université Paris VI, (2001).

[108] T. J. Thornton, M. L. Roukes, A. Scherer and B. P. Van de Gaag, Phys. Rev. Lett. **63**, 2128 (1989).

[109] B. L. Altshuler and A. G. Aronov, in : *Electron-Electron Interactions in Disordered Conductors*, Eds. A.L. Efros and M. Pollak (Elsevier Science Publishers B.V., New York, 1985).

[110] G. Bergmann, Phys. Rep. **107**, 1 (1984).

[111] G. Bergmann, Solid State Commun. **42**, 815 (1982).

[112] M. Noguchi, T. Ikoma, T. Odagiri, H. Sakakibara and S. N. Wang, J. Appl. Phys. **80**, 5138 (1996).

[113] C. W. J. Beenakker and H. Van Houten, Phys. Rev. B **38**, 3232 (1988).

[114] I. L. Aleiner, B. L. Altshuler and M. E. Gershenson, Waves in Random Media **9**, 201 (1999).

[115] B. L. Altshuler and A. G. Aronov, Pis'ma Zh. Eksp. Teor. Fiz. **33**, 515 (1981) [JETP Lett. **33**, 499 (1981)].

[116] B. L. Altshuler, D. E. Khmelnitskii, A. I. Larkin and P. A. Lee, Phys. Rev. B **22**, 5142 (1980).

[117] B. L. Altshuler, A. G. Aronov and D. E. Khmelnitskii, J. Phys. C **15**, 7367 (1982).

[118] E. Abrahams, P. W. Anderson, D. C. Licciardello and T. V. Ramakrishman, Phys. Rev. Lett. **42**, 673 (1979).

[119] Handbook of Microlithography, Micromachining, and Microfabiraction, Vol 1 : Microlithography, Eds. P. Rai-Choudhury, SPIE (London, 1997).

[120] T. A. Fulton and G. J. Dolan, Phys. Rev. Lett. **59**, 109 (1987).

[121] J. Romijn and E. Van der Drift, Physica **152B**, 14 (1988).

[122] F. Pierre, Thèse de Doctorat de l'Université Paris VI, (2000).

[123] C. Kittel, *Quantum theory of solids*, Ed. J. Wiley and Sons (New York, 1963).

[124] G. L. Bir and G.E. Pikus, *Symmetry and Strain-Induced Effects in Semiconductors*, Ed. J. Wiley and Sons (New York, 1974) ; Sov. Phys. Solid State **1**, 1502 (1960).

[125] E. Rosencher, *Optoélectronique*, Enseignement de la Physique, Ed. Masson (Paris, 1998).

[126] A. Messiah, *Quantum Mecanics*, Eds. North-Holland (Amsterdam, 1966).

[127] P. G. de Gennes, *Superconductivity of Metals and Alloys*, Ed. Benjamin (New York, 1966).

[128] M. Abramowitz and I. A. Stegun, §*6.3 Psi (Digamma) Function, in Handbook of Mathematical Functions with Formulas, Graphs, and Mathematical Tables*, Eds. Dover, pp. 258-259, (New York 1972).

Spin effects in semiconductor nanostructures : modelling and magneto-transport experiments

Abstract

The combination of spin-orbit coupling and effects associated with breakdown of inversion symmetry leads to the splitting of energy levels of real and complex band structure of bulk materials and of bidimensionnal systems such as : quantum well and heterojunction. The first part of this work consists in calculating numerically all of three contributions of spin splitting : BIA, SIA and IIA using 14-band **k.p** extended Kane model and new parameterization based on fits of the tight-binding band structure. Various numerical results are then compared to previous experimental results. We have obtained, for the first time, a satisfactory quantitative description of hole dispersion curves of GaAs/Al(Ga)As quantum well (obtained experimentally by L. Eaves using resonant magneto-tunneling spectroscopy) and its spin splitting (reported by H. Stömer *et al.* some 20 years ago.). This result seems to indicate that IIA term is small in this case. We also calculated optical absorption spectra of quantum wells and obtained a good agreement with experimental result of the "quantum confined Pockels effect".

Then, we examine complex band structure of GaAs. Non-trivial exploration of complex plan is used and proves that evanescent states exist for any direction in the Brillouin zone. The complex bands emerge from extrema of the band structure in real **k** space and form complete loops connecting the conduction and valence bands. This result is an original contribution to the concept of spin filter.

The second part of this work reports on the experimental study of the role of spin-orbit coupling in semi-ballistic quantum wires that are obtained from a heterostructure of GaAs/AlGaAs using electron beam lithography. We expect to observe a crossover between weak localization regime and antilocalization regime. The peaks of the magneto-resistance curve show well the weak localization regime. The analysis of weak localization curves allows to extract various characteristic times of samples and to observe the crossover between high magnetic field regime and low magnetic field regime that are associated with the nature of quasi-ballistic of the samples.

Keywords

Semiconductor III-V	Theory **k.p**	Quantum wires
Quantum wells	Spin splitting	Weak localisation
Heterojunctions	Evanescent states	Magnetoresistance

Effets de spin dans les nanostructures semi-conductrices : modélisation et expériences de magnéto-transport

Résumé

Le couplage spin-orbite combiné avec des effets de brisure de la symétrie d'inversion conduit au dédoublement de niveaux d'énergie de la structure de bande réelle et complexe des matériaux massifs et des hétérostructures bidimensionnelles tels que puits quantiques et hétéro-jonctions. La première partie de ce travail calcule numériquement les trois contributions au splitting de spin : BIA, SIA et IIA en se basant sur le modèle **k.p** de Kane étendu à 14 bandes et sur les nouveaux paramètres obtenus par la méthode des liaisons fortes. Plusieurs résultats numériques sont confrontés aux résultats expérimentaux anciens. Nous avons obtenu, pour la première fois, une description quantitative satisfaisante des relations de dispersion des sousbandes de valence d'un puits quantique GaAs/Al(Ga)As (mesurées par le groupe de L. Eaves par effet tunnel résonnant en présence d'un champ magnétique dans le plan.) et de leur splitting de spin (mesuré il y a déjà longtemps par H. Stömer). Ces résultats semblent indiquer que le terme IIA est effectivement petit dans ce cas. Nous avons également calculé les spectres d'absorption optique de puits quantiques et obtenu, avec la nouvelle paramétrisation, un accord remarquablement bon avec des résultats expérimentaux d'O. Krebs sur l'effet Pockels confiné quantiquement.

Nous examinons ensuite la structure de bande complexe du GaAs et montrons par une représentation complexe et non purement imaginaire du vecteur d'onde que les états évanescents existent pour toutes les directions de la zone de Brillouin. Cette existence se manifeste par des boucles reliant les bandes de conduction et les bandes de valence. Ce résultat est une contribution originale sur le concept de filtre de spin.

La deuxième partie de ce travail porte sur l'étude expérimentale du rôle de couplage spin-orbite dans des fils quantiques semi-balistiques obtenus par gravure à partir d'une structure à gaz bidimensionnel d'électrons. Nous espérons observer une transition entre le régime de localisation faible et celui, opposé, d'antilocalisation faible. Les pics observés expérimentalement lors des mesures de la magnétorésistance ont des propriétés qui sont bien expliquées en termes de la localisation faible. Ces mesures nous ont permis d'extraire des différents temps caractéristiques des échantillons et d'observer les changements de régime fort champ magnétique/bas champ magnétique liés à la nature quasi-balistique des échantillons.

Mots clés

Semi-conducteur III-V	Théorie **k.p**	Fils quantiques
Puits quantique	Splitting de spin	Localisation faible
Hétéro-jonctions	États évanescents	Magnétorésistance