

# **Thèse**

**Présentée à la**

**FACULTÉ DES SCIENCES D'AGADIR**

**pour l'obtention du Doctorat  
en Sciences Physiques**

**Spécialité : Physique des solides  
Option : Physique des Solides**

**Sujet de la thèse :**

---

**Modélisation et caractérisation par le transport électronique des semi-conducteurs II-VI : Application à l'alliage ternaire  $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$  et au superéseau  $\text{HgTe/CdTe}$ .**

---

**par**

**Abderrahim EL ABIDI**

**Soutenue le 17 juillet 2010 devant la commission d'examen :**

---

**A. El Kaaouachi  
M. Ouazzani-Jamil  
A. Taoufik  
A. Tirbiyine  
H. Chaib  
H. Sahsah  
A. Toumanari  
A. Nafidi**

**Professeur, Faculté des Sciences, Agadir  
Professeur, Faculté des Sciences D El Mehraz, Fès  
Professeur, Faculté des Sciences, Agadir  
Professeur, Faculté Polydisciplinaire Safi  
Professeur, Faculté Polydisciplinaire, Ouarzazate  
Professeur, Faculté des Sciences, Agadir  
Professeur, ENSA, Agadir  
Professeur, Faculté des Sciences, Agadir**

**Président  
Rapporteur  
Rapporteur  
Rapporteur  
Examineur  
Examineur  
Examineur  
Directeur de thèse**

**UNIVERSITÉ IBN ZOHR  
FACULTÉ DES SCIENCES  
AGADIR**

**Numéro d'ordre : 80 /2010  
Année : 2010**

# **Thèse**

**Présentée à la**

**FACULTÉ DES SCIENCES D'AGADIR**

**pour l'obtention du Doctorat  
en Sciences Physiques**

**Spécialité : physique des Solides  
Option : Physique des Solides**

**Sujet de la thèse :**

---

**Modélisation et caractérisation par le transport électronique des semi-conducteurs II-VI : Application à l'alliage ternaire  $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$  et au super réseau  $\text{HgTe}/\text{CdTe}$ .**

---

**par**

**Abderrahim EL ABIDI**

**Soutenue le 17 juillet 2010 devant la commission d'examen :**

---

<b>A. El Kaaouachi</b>	<b>Professeur, Faculté des Sciences, Agadir</b>	<b>Président</b>
<b>M. Ouazzani-Jamil</b>	<b>Professeur, Faculté des Sciences D El Mehraz, Fès</b>	<b>Rapporteur</b>
<b>A. Taoufik</b>	<b>Professeur, Faculté des Sciences, Agadir</b>	<b>Rapporteur</b>
<b>A. Tirbiyine</b>	<b>Professeur, Faculté Polydisciplinaire Safi</b>	<b>Rapporteur</b>
<b>H. Chaib</b>	<b>Professeur, Faculté Polydisciplinaire, Ouarzazate</b>	<b>Examineur</b>
<b>H. Sahsah</b>	<b>Professeur, Faculté des Sciences, Agadir</b>	<b>Examineur</b>
<b>A. Toumanari</b>	<b>Professeur, ENSA, Agadir</b>	<b>Examineur</b>
<b>A. Nafidi</b>	<b>Professeur, Faculté des Sciences, Agadir</b>	<b>Directeur de thèse</b>

**Ce travail a été réalisé au sein de l'équipe de Physique de la Matière Condensée du Département de Physique Faculté des Sciences, Université Ibn Zohr d'Agadir.**

## Dédicaces

A mes très chers parents Kacem et Fatima qui ont toujours été là pour moi, et qui m'ont donné un magnifique modèle de labeur et de persévérance. J'espère qu'ils trouveront dans ce travail toute ma reconnaissance et tout mon amour.

A ma chère femme Asma

A ma chère grand-mère Zahra

A ma chère sœur Amina et mes chers frères Khaled et Hicham

A tous ceux qui me sont chers

Je dédie ce mémoire

# Remerciement

Cette étude a été effectuée au sein du Groupe de la physique de la matière condensée, à la faculté des sciences d'Agadir, sous la direction de Monsieur le Professeur A. Nafidi qui a suivi pas à pas le déroulement de ce travail. Je suis heureux de lui témoigner ici mon attachement et ma reconnaissance pour l'efficacité et la bienveillance avec laquelle il a constamment guidé et encouragé ce travail. Il a toujours su proposer les choix scientifiques adaptés à la résolution des problèmes que j'ai rencontrés au cours de ce travail. Je l'en remercie sincèrement. J'ai été très marqué par ses qualités professionnelles et humaines. Qu'il trouve ici, l'expression de ma profonde gratitude.

Je tiens à remercier vivement Messieurs les membres du jury pour l'intérêt qu'ils ont porté à ce travail :

- Monsieur A. El Kaaouachi, Professeur de L'Université IBN ZOHR, Faculté des Sciences d'Agadir pour m'avoir fait l'honneur de présider ce jury.
- Messieurs : M. Ouazzani-Jamil Doyen de la Faculté des Sciences Dhar El Mehraz, de Fès, A. TAOUFIK Professeur de L'Université IBN ZOHR, Faculté des Sciences d'Agadir et A. Tirbiyine Professeur à la Faculté Polydisciplinaire de Safi pour avoir accepté la tâche de rapporteurs de ce travail.
- Messieurs H. Chaib Professeur à la Faculté Polydisciplinaire d'Ouarzazate, A. Toumanari professeur à l'école nationale des sciences appliquées (ENSA) à Agadir, et H. Sahsah Professeur à L'Université IBN ZOHR, Faculté des Sciences d'Agadir pour avoir accepté la tâche d'examineurs ce travail.

Ma reconnaissance va aussi aux membres du groupe pour les discussions enrichissantes, leurs suggestions et leurs conseils et surtout pour l'ambiance amicale qu'ils ont su créer autour de moi. Je n'oublierai pas le temps que nous avons passé ensemble.

Enfin, merci à toute ma famille pour sa patience, ses encouragements auxquels elle a consenti pendant ces années de recherches.

# TABLE DES MATIERES

<b>INTRODUCTION.....</b>	<b>1</b>
<b>CHAPITRE I :Généralités sur la photodétection et propriétés de l'alliage <math>Hg_{1-x}Cd_xTe</math> et du superréseau HgTe/CdTe.....</b>	<b>6</b>
I.A Introduction.....	7
I.B La photodétection infrarouge .....	7
I.C Le tellure de mercure et de cadmium .....	13
I.D Les super-réseaux HgTe/ CdTe .....	25
I.E Applications des détecteurs d'infrarouges .....	34
<b>CHAPITRE II : CADRE THEORIQUE .....</b>	<b>38</b>
II.A Introduction .....	39
II.B Théorie de transport de Boltzmann .....	39
II.C Modélisation de la mobilité et mécanismes de diffusion .....	48
II.D Effet Shubnikov-de Haas et gaz d'électron bidimensionnel .....	52
II.E Structure des bandes du superréseau .....	58
<b>CHAPITRE III : Rappel sur les techniques expérimentales .....</b>	<b>69</b>
III.A Introduction .....	70
III.B La technique de l'épitaxie par jets moléculaire ou MBE .....	70
III.C Préparation des échantillons .....	74
III.D Techniques de mesures .....	75
<b>CHAPITRE IV : Application à l'alliage <math>Hg_{1-x}Cd_xTe</math> (<math>x=0.22</math>) .....</b>	<b>81</b>
IV.A Introduction .....	82
IV.B Analyse de la constante de Hall .....	82
IV.C Calcul de l'énergie de Fermi .....	86
IV.D Calcul de l'état donneur .....	88
IV.E Analyse de la conductivité .....	89
IV.F Modélisation de la mobilité .....	90
IV.G Conclusion .....	91
<b>CHAPITRE V : Application aux sperréseaux HgTe/CdTe .....</b>	<b>94</b>
V. A Introduction .....	95
V. B Résultats de calcul des spectres d'énergie .....	95
V. C. Application au superréseau HgTe (56 Å)/ CdTe (30 Å) .....	97
V. D. Application au superréseau HgTe (180 Å)/ CdTe (44 Å) .....	103
V. E. Conclusions.....	107
<b>CONCLUSIONS ET PERSPECTIVES .....</b>	<b>110</b>
<b>ANNEXES .....</b>	<b>114</b>
<b>RESUME .....</b>	<b>139</b>

# INTRODUCTION

Observer par l'image des phénomènes grâce à un rayonnement invisible à l'oeil est sans doute un vieux rêve de l'humanité. La voie suivie pour observer l'invisible consiste à étudier une rétine artificielle constituée d'une matrice d'éléments sensibles au rayonnement considéré et de l'associer à un système d'acquisition et de traitement de l'information. En bref, un appareil photo ou une caméra numérique sensible à d'autres rayonnements que la lumière visible. Les détecteurs élémentaires sont constitués de simples jonctions p - n réalisées dans un matériau semi-conducteur dont la hauteur de bande interdite est adaptée à l'énergie des photons infrarouges (IR) que l'on souhaite détecter.

Les détecteurs d'infrarouges ont connu plusieurs avancées technologiques récentes. Les matrices de microbolomètres ont permis de démocratiser des caméras non refroidies. Les applications haut de gamme connaissent aussi des avancées prometteuses, avec les multipuits quantiques.

Les rayons infrarouges ont une fréquence moins élevée que la lumière visible rouge. Ces ondes sont invisibles à l'homme car sa vision dans le spectre du rouge ne va pas en deça de  $0,60\text{ }\mu\text{m}$ . Selon leurs fréquences, les différentes radiations électromagnétiques sont plus ou moins absorbées par les molécules présentes dans l'atmosphère en fonction du spectre d'absorption de celles-ci. Il existe des fenêtres atmosphériques de transmission, c'est à dire des plages de fréquences pour lesquelles les radiations ne sont que faiblement absorbées par l'atmosphère terrestre. Les fenêtres d'infrarouge sont : proche NIR (Near InfraRed), court SWIR (Short Wave InfraRed), moyen MWIR (Medium Wave InfraRed), long LWIR (Long Wave InfraRed) et lointain FIR (Far InfraRed).

Issue de plusieurs dizaines d'années de recherche, la technologie de l'analyse de l'infrarouge est largement reconnue et utilisée dans les secteurs les plus pointus de la sécurité, la police et le militaire. Ces détecteurs de haute technologie, conçus pour détecter des longueurs d'ondes de  $7\text{ à }14\text{ }\mu\text{m}$ , sont équipés d'un logiciel leur permettant d'être plus sélectifs quant à la nature de la source de chaleur, c'est à dire la reconnaissance des différentes signatures infrarouges : minérales, végétales ou animales. Parmi les applications de ces détecteurs, on cite des applications en Astronomie, Métrologie et cartes météorologiques, Imagerie médicale et scanners, Photos satellites et cartographie, Défense et actions militaires, informations tactiques et stratégiques fiables et récentes pour la

préparation d'opérations militaires ou de sécurité, Détection et localisation des mines enterrées, Vision nocturne, Contrôle non destructif, La chasse et surtout nocturne du gibier, Détection infrarouge de passage et antivol.

Les détecteurs infrarouges étudiés, dans ce mémoire, ont comme principe de détection la conversion photovoltaïque. Ce mode de détection identique à celui bien connu des cellules solaires, suppose que l'on dispose d'un semi-conducteur dont l'énergie de bande interdite (gap) est voisine de celles des photons à détecter. Parmi les candidats pressentis, l'alliage ternaire  $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$  (tellure de mercure et de cadmium) a été retenu car il présente une propriété unique: son gap direct peut être ajusté continûment de 0 à 1,6 eV en modulant la stoechiométrie moyenne  $x$  de cadmium. Le problème essentiel à résoudre pour l'emploi de ce détecteur est l'homogénéité de la composition sur l'ensemble du détecteur, en particulier pour les longueurs d'onde  $\lambda_c \geq 12\mu\text{m}$  la composition de l'alliage ternaire est critique pour  $x < 0,2$ .

Le travail de Essaki et Tsu en 1970 [1] a causé un grand intérêt à l'étude des superréseaux formés à partir de couches alternées de deux semiconducteurs. Le développement de l'épitaxie par jet moléculaire a été appliqué par succès pour fabriquer différents puits quantiques et superréseaux. Parmi eux, les superréseaux III-V ( $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ - $\text{GaAs}$  [1-2]-type I), IV-IV ( $\text{InAs}/\text{GaSb}$  [3] - type II) et plus tard II-VI ( $\text{HgTe}/\text{CdTe}$  [4] - type III). Ce dernier a été prédit comme une stable alternative à l'alliage  $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$  en optoélectronique infrarouge. Spécialement dans la région de la deuxième fenêtre atmosphérique (autour de  $10\mu\text{m}$ ) qui est de grand intérêt dans les communications.

$\text{HgTe}$  et  $\text{CdTe}$  cristallisent dans la structure blend-zinc. Le faible désaccord de mailles 0,3 % conduit à une faible interdiffusion entre les couches de  $\text{HgTe}$  et  $\text{CdTe}$  à basse température du substrat près de  $200^\circ\text{C}$  par EJM.  $\text{HgTe}$  est un semiconducteur à bande interdite nulle (due à l'inversion des positions relatives des sommets des bandes  $\Gamma_6$  et  $\Gamma_8$  [5]) quand il est mis entre deux couches de  $\text{CdTe}$  (semiconducteur à bande interdite large 1,6 eV à 4,2 K) conduit à un superréseau  $\text{HgTe}/\text{CdTe}$  à bande interdite faible qui est la clé d'un détecteur d'infrarouge. Plusieurs papiers décrivent la structure des bandes par la méthode de la liaison serre [4] de ce système aussi bien que les propriétés magnétooptiques et de transport [6].



L'alternative de l'alliage  $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$  est donc le superréseau  $\text{HgTe}/\text{CdTe}$  de bande interdite ajustable par la variation de la période cristalline  $d=d_1+d_2$ , selon l'axe de croissance  $z$ , et qui est bien contrôlée grâce à la croissance par épitaxie par jet moléculaire.

La comparaison des deux matériaux détecteurs s'étend également aux problèmes rencontrés classiquement dans les détecteurs, les courants de diffusion des zones  $p$  du détecteur et le courant Tunnel bande à bande. Le premier terme est lié à la valeur de la masse effective électronique qui est d'un ordre de grandeur plus grand dans le superréseau (masse transverse) donc correspondant à un plus faible courant. Le deuxième terme est lié à la longueur tunnel. Il apparaît que dans le superréseau, cette longueur est faible comparée au ternaire. Il y aura ainsi limitation des courants nuisant à la détectivité.

Dans ce mémoire nous exploitons nos calculs de la structure des bandes d'énergie électroniques dans le formalisme de la fonction enveloppe. Nous interprétons nos résultats de mesures du transport électronique et nous finirons par la description de la corrélation entre les paramètres de transport théoriques et expérimentaux des superréseaux  $\text{HgTe}/\text{CdTe}$  élaborés par épitaxie en jet moléculaire.

Ce mémoire de thèse comporte les chapitres suivants :

Le premier chapitre décrit des généralités sur la photodétection et les propriétés de l'alliage  $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$  et du superréseau  $\text{HgTe}/\text{CdTe}$ . Nous exposons les intérêts, le principe de fonctionnement des photodétecteurs, la place de l'alliage  $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$  et du superréseau  $\text{HgTe}/\text{CdTe}$  dans la photodétection Infrarouge, les propriétés cristallographiques, physiques, la structure des bandes d'énergie, la mobilité des porteurs de charges de l'alliage  $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ , les différents types de superréseaux (type I, type II et type III) et les superréseaux  $\text{HgTe}/\text{CdTe}$ . Enfin nous énumérons les applications technologiques des détecteurs d'infrarouges

Le deuxième chapitre porte sur la résolution de l'équation de Boltzmann dans l'approximation du temps de relaxation, l'effet Hall, l'effet Seebeck, la théorie de la modélisation de la mobilité et les mécanismes de diffusion qui contribuent au transport électronique, le gaz d'électron bidimensionnel et l'Effet Shubnikov-de Haas. Enfin, nous exposons la théorie de calcul de la structure des bandes du superréseau  $\text{CdTe}$  et  $\text{HgTe}$  dans le plan et la direction orthogonale au plan du superréseau. Nous calculons l'influence de divers paramètres (tels que la température, la période de superréseau, l'écart  $\Lambda$  entre les

bandes de valence de HgTe et CdTe) sur la structure des bandes d'énergie et la bande interdite.

Le troisième chapitre sera consacré aux techniques expérimentales en particulier la technique de l'épithaxie par jets moléculaires et la préparation des échantillons pour les mesures. Nous décrirons les techniques de mesures, la mesure de l'effet Hall, de la conductivité, de l'effet Seebeck et de la magnétorésistance ou de l'effet Shubnikov-de Haas.

Dans le quatrième chapitre nous présenterons les interprétations des résultats expérimentaux et la détermination des propriétés du transport (analyse de la constante de Hall, le calcul de l'énergie de Fermi, le calcul de l'énergie de l'état donneur et l'analyse de la conductivité) et de modéliser la mobilité dans  $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$  ( $x = 0.22$ ).

Le cinquième chapitre débute par l'exposé des résultats de calcul d'énergie selon  $k_y$  et  $k_z$  des échantillons sperréseaux HgTe/CdTe investies expérimentalement. Ensuite, le superréseau HgTe (56 Å)/ CdTe (30 Å) à caractère semiconducteur a été caractérisé par les mesures de la diffraction de Braag, la magnétorésistance, la conductivité, la constante de Hall, la mobilité de Hall, l'effet thermoélectrique, l'effet Shubnikov -de Haas et le calcul des niveaux de Landau. Alors que le superréseau HgTe (180 Å)/ CdTe (44 Å) à caractère semi métallique a été caractérisé par les mesures de la magnétorésistance, la résistance de Hall, la conductivité, la constante de Hall, la mobilité de Hall et le calcul de l'énergie de Fermi  $E_F$  (T) pour un transport parallèle bidimensionnel (2D) et tridimensionnel (3D).

Enfin, nous finirons ce mémoire de thèse par une conclusion générale, les perspectives et cinq annexes théoriques qui traitent la résolution de l'équation de Boltzmann dans l'approximation du temps de relaxation, les tenseurs de conductivité et résistivité, l'Effet Hall et la formulation générale de la constante de Hall, l'Effet Seebeck et la formulation du coefficient thermoélectrique  $\alpha$ , la quantification de l'énergie et les singularités de la densité d'états d'un gaz d'électrons 3D sous un champ magnétique, et enfin, le formalisme de la fonction enveloppe et les relations de dispersion des sous bandes d'énergie des superréseaux HgTe/CdTe.

## Références

- [1] L. Esaki and R. Tsu, Superlattice and negative differential conductivity in Semiconductors, IBM J. Res. Development, 61-65 (1970).
- [2] R. Dingle, A. C. Gossard, and W. Wiegmann, Direct Observation of Superlattice Formation in a Semiconductor Heterostructure, Phys. Rev. Lett. 34, 1327 - 1330 (1975).
- [3] H. Sakaki, L. L. Chang, G. A. Sai-Halasz, C. A. Chang and L. Esaki, Two-dimensional electronic structure in InAs-GaSb superlattices, Solid State Communications, Volume 26, Issue 9, 589-592 (1978).
- [4] G. Bastard, Theoretical investigations of superlattice band structure in the envelope-function approximation, Phys. Rev. B 25, 7584 - 7597 (1982).
- [5] J. Tuchendler, M. Grynberg, Y. Couder, H. Thomé, and R. Le Toullec, Submillimeter Cyclotron Resonance and Related Phenomena in HgTe, Phys. Rev. B 8, 3884 - 3894 (1973).
- [6] Ab. Nafidi, A. El Kaaouachi, H. Sahsah, Ah. Nafidi, Band structure and magneto-transport in HgTe/CdTe superlattice, Book of abstracts of the International Conference on Theoretical Physics (HT 2002), Paris, France 22-27 July, 274-275 (2002).

# Chapitre 1

## Généralités sur la photodétection et propriétés de l'alliage $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ et du superréseau $\text{HgTe/CdTe}$

### SOMMAIRE

<b>I.A Introduction.....</b>	<b>7</b>
<b>I.B La photodétection infrarouge.....</b>	<b>7</b>
I.B.1 Les intérêts de la technologie infrarouge .....	7
I.B.2 Principe de fonctionnement des photodétecteurs .....	9
I.B.3 Place de l'alliage $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ et du superréseau $\text{HgTe/CdTe}$ dans la photodétection Infrarouge .....	12
<b>I.C Le tellure de mercure et de cadmium .....</b>	<b>13</b>
I.C.1 Propriétés cristallographiques du tellure de mercure et de cadmium .....	14
I.C.1.a Structure cristalline .....	14
I.C.1.b Les imperfections du réseau cristallin .....	16
I.C.1.b.1 Dislocations et défauts ponctuels .....	16
I.C.1.b.2 Atomes étrangers .....	17
I.C.2 Propriétés physiques du tellure de mercure et de cadmium.....	17
I.C.2.a $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ un alliage semi-conducteur à bande interdite continûment ajustable	17
I.C.2.b Structure de bandes d'énergie .....	20
I.C.2.c Mobilité des porteurs de charges .....	24
<b>I.D Les super-réseaux <math>\text{HgTe/CdTe}</math> .....</b>	<b>25</b>
I.D.1 Les différents types de superréseaux .....	28
I.D.1.a Superréseaux de type I .....	29
I.D.1.b Superréseaux de type II .....	29
I.D.1.c Superréseau de type III .....	29
I.D.2 Les superréseaux $\text{HgTe-CdTe}$ .....	30
<b>I.E Applications des détecteurs d'infrarouges .....</b>	<b>34</b>

## **I.A INTRODUCTION**

Les détecteurs d'infrarouges ont connu plusieurs avancées technologiques récentes. Les matrices de microbolomètres, ont permis de démocratiser des caméras non refroidies. Les applications haut de gamme connaissent aussi des avancées prometteuses, avec les multipuits quantiques.

Notre attention se porte plus particulièrement sur le cas du tellure de mercure et de cadmium à savoir l'alliage  $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$  et le superréseau HgTe/CdTe, deux matériaux très utilisés pour la fabrication de photodétecteurs infrarouge. Après en avoir retracé l'histoire, nous en présentons les caractéristiques physiques afin de pouvoir mettre en place un modèle adéquat, capable de rendre compte du comportement électronique du matériau et des phénomènes physiques qui s'y produisent.

## **I.B LA PHOTODETECTION INFRAROUGE**

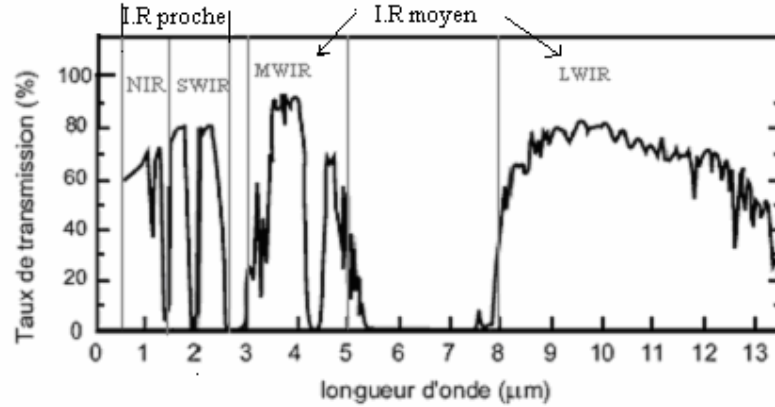
### **I.B.1 Les intérêts de la technologie infrarouge**

Selon leurs fréquences, les différentes radiations électromagnétiques sont plus ou moins absorbées par les molécules présentes dans l'atmosphère en fonction du spectre d'absorption de celles-ci. Les longueurs d'ondes du domaine de l'infrarouge, situées entre 700 nm et 500  $\mu\text{m}$ , n'échappent pas à cette règle et nous avons reporté sur la figure I.1 le taux de transmission des ondes infrarouges en fonction de leurs longueurs d'ondes [1.1].

Nous pouvons remarquer qu'il existe des fenêtres atmosphériques de transmission, c'est à dire des plages de longueurs d'ondes pour lesquelles les radiations ne sont que faiblement absorbées par l'atmosphère terrestre. Ces fenêtres de transmission sont classées selon les longueurs d'ondes concernées de la façon suivante :

- La fenêtre d'infrarouge proche NIR (Near InfraRed) correspond aux longueurs d'ondes comprises entre 0,7  $\mu\text{m}$  et 1,5  $\mu\text{m}$ ;
- La fenêtre d'infrarouge court SWIR (Short Wave InfraRed) correspond à l'intervalle de longueurs d'ondes 1,5  $\mu\text{m}$  – 2,5  $\mu\text{m}$
- La fenêtre d'infrarouge moyen MIR (Mid Infrared): cette fenêtre se compose de deux subdivisions :
  - L'infrarouge médian MWIR (Middle Wave InfraRed) correspond à la plage 3,4  $\mu\text{m}$  – 5,2  $\mu\text{m}$ .
  - L'infrarouge thermique ou Infrarouge de long longueur d'onde LWIR (Long Wave InfraRed) concerne les longueurs d'ondes comprises entre 7,5  $\mu\text{m}$  et 14  $\mu\text{m}$ .

- La fenêtre d'infrarouge lointain : FIR (Far InfraRed) concerne les longueurs d'ondes situées en dessus de 14  $\mu\text{m}$ .

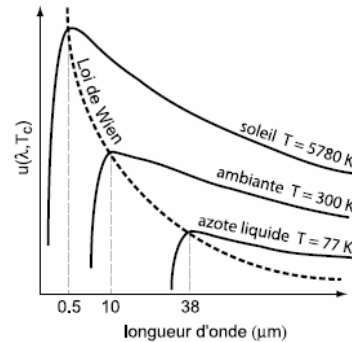


**Figure I.1 :** Transmission en fonction de la longueur d'onde par temps clair

D'un autre côté, les corps émettent des radiations dans différentes gammes de fréquences et en particulier des ondes du spectre infrarouge correspondant aux fenêtres atmosphériques de Transmissions décrites précédemment. La densité spectrale d'énergie rayonnante  $u(\lambda ; T)$  diffère selon la température du corps et vérifie la loi de Planck donnée par la relation (1.1) où  $\lambda$  est la longueur d'onde d'émission,  $T_c$  la température du corps noir,  $h$  la constante réduite de Planck,  $k_B$  la constante de Boltzmann et  $c$  la vitesse de la lumière dans le vide.

$$u(\lambda, T_c) = \frac{8\pi hc}{\lambda^5} \frac{1}{\exp\left(\frac{hc}{\lambda k_B T_c}\right) - 1} \quad (1.1)$$

Nous avons reporté dans la figure I.2 l'allure de cette grandeur pour des températures de 5780 K, 300 K et 77 K, correspondant respectivement à la température du soleil, à celle ambiante et à celle de l'azote liquide.



**Figure I.2 :** Allure de la densité spectrale d'énergie rayonnante  $u$  en fonction de la longueur d'onde et illustration de la loi de Wien relative au déplacement du maximum d'émission.

Chaque courbe présente un maximum pour une longueur d'onde qui lui est propre. Par conséquent, pour chaque température il existe une longueur d'onde pour laquelle l'émission d'énergie par le corps noir est maximale. Ce maximum de la densité  $u$  se déplace vers des longueurs d'ondes plus grandes lorsque la température diminue en suivant la loi de Wien, donnée par la relation :

$$\lambda_{\max} \cdot T_c = 2898 \mu\text{m.K} \quad (1.2)$$

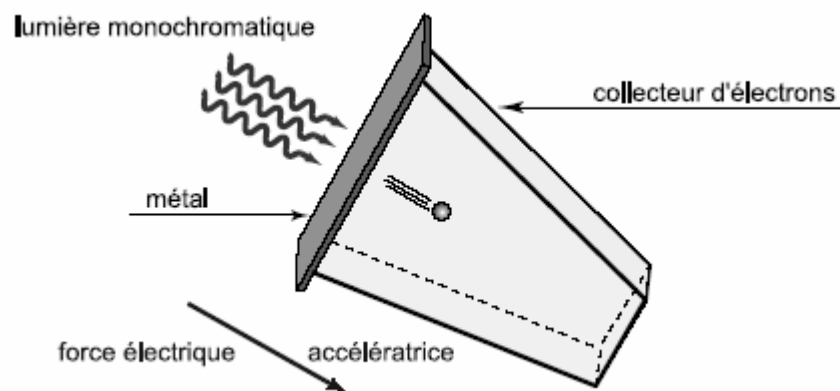
Où  $\lambda_{\max}$  est la longueur d'onde correspondant au maximum d'émission. Cette expression permet de conclure que le maximum d'émission d'un corps noir se trouvant à une température environnant 300 K sera atteint pour des longueurs d'ondes se situant dans le spectre infrarouge. Par conséquent, la fabrication et la mise en place de dispositifs capables de détecter ces longueurs d'ondes présentent un très grand intérêt. Remarquons que, plus particulièrement, la longueur d'onde d'émission maximale d'un corps noir se trouvant à température ambiante se situe aux alentours de 10  $\mu\text{m}$ , c'est à dire dans la fenêtre LWIR, ce qui fait de cette dernière une fenêtre de prédilection pour les applications de vision nocturne ou en condition de faible visibilité.

L'intérêt drainé par la technologie infrarouge a rendu cette fenêtre incontournable dans un grand nombre de domaines, toujours plus nombreux, dont les principaux segments sont les applications militaires, le contrôle non destructif et l'imagerie médicale [1.2]. Ainsi, des dispositifs de vision nocturne équipent les avions de chasse ou les fantassins, permettant la détection, la reconnaissance et la prise en chasse de cibles, quand des dispositifs de thermographie fournissent des informations sur la température des corps observés. D'autres systèmes permettent le guidage d'avions et de missiles ou bien la surveillance par satellite, que ce soit dans le cadre d'applications de défense ou dans le domaine civil (météorologie, détection des feux de forêts, chasse nocturne etc.). Des applications de spectroscopie infrarouge sont pour leur part mises en oeuvre dans les domaines scientifique, médical et industriel.

### **I.B.2 Principe de fonctionnement des photodétecteurs**

Au XIX<sup>ème</sup> siècle, période à laquelle la technologie infrarouge a fait ses premiers pas, les capteurs utilisés étaient des photopiles ou des bolomètres, dont les principes de fonctionnement étaient basés sur des effets thermoélectriques [1.3]. Il a fallu attendre la mise en évidence de l'effet photoélectrique et surtout son explication par Albert Einstein en 1905 pour que les capteurs thermiques puissent céder la place aux photodétecteurs quantiques tels qu'on les conçoit encore aujourd'hui. C'est plus précisément en 1917 que

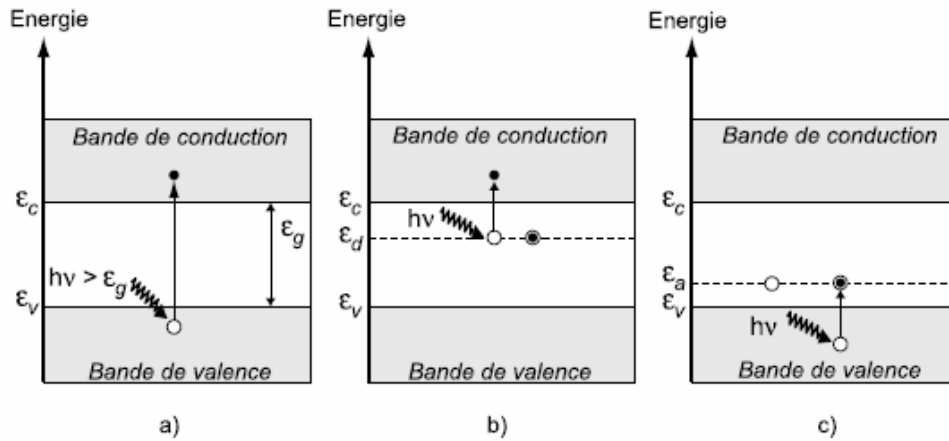
Case développa le premier photodétecteur basé sur la conversion directe de la lumière en signal électrique [1.4]. Plus tard, en 1933, la photoconductivité du PbS serait découverte faisant de ce matériau le premier semi-conducteur à application optronique. Si depuis la seconde guerre mondiale la technologie infrarouge a connu un essor extraordinaire, le principe de fonctionnement des photodétecteurs est resté le même, reposant sur l'effet photoélectrique dont le schéma de principe est reporté sur la figure I.3. Cet effet peut s'énoncer ainsi : Lorsqu'un photon rencontre un électron prisonnier d'un atome, il lui transmet son énergie. Si cette énergie est suffisante, celui-ci peut alors quitter l'atome et devenir un électron libre.



**Figure I.3 :** Schéma de principe de l'effet photoélectrique

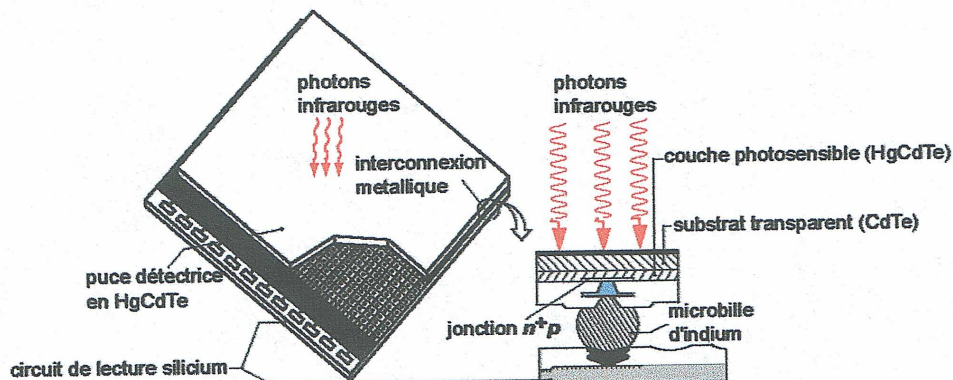
L'énergie nécessaire pour libérer l'électron photoexcité est appelée travail de sortie. Dans le cas des photodétecteurs à base de semiconducteurs, le travail de sortie correspond à l'énergie nécessaire pour faire transiter un électron depuis un niveau dans lequel il se trouve piégé vers la bande de conduction. C'est à ce processus de transformation de la lumière en électricité par basculement d'états qu'ils doivent leur nom de détecteurs quantiques. Le niveau piège peut être un état de la bande de valence, comme le montre la figure I.4(a). Le travail de sortie correspond dans ce cas à la bande interdite du matériau et l'on parle d'un mode de photodétection intrinsèque. Mais ce peut être aussi un atome donneur [figure I.4(b)] ou accepteur [figure I.4(c)] qui engendre le niveau piège et l'on parle dans ce cas d'un mode de photodétection extrinsèque, respectivement de type n ou de type p. Cette fois-ci, le travail de sortie ne correspond plus à la bande interdite mais à l'énergie  $E_c - E_d$  dans la photodétection de type n ou  $E_a - E_v$  dans celle de type p, où les grandeurs  $E_a$ ,  $E_d$ ,  $E_c$  et  $E_v$  représentent respectivement les énergies du niveau donneur, du niveau accepteur, du minimum de la bande de conduction et du maximum de la bande de valence.





**Figure 1.4 :** différents types de photodétection : intrinsèque (a), extrinsèque de type n (b) et extrinsèque de type p (c).

Comment est-on passé de la réalisation de simples diodes élémentaires à de véritables rétines infrarouges constituées de dizaines voire de centaine de milliers de pixels (détecteurs élémentaires) ? La réponse se trouve dans l'architecture hybride (figure I.5) retenue pour ces composants [1.5]. Elle est constituée d'une part de la matrice de détection réalisée dans le semi-conducteur HgCdTe, d'autre part d'un circuit de lecture réalisé en technologie CCD (Charge Coupled Device) ou CMOS (Complementary Métal-Oxide Semiconductor) sur silicium. Ces constituants sont interconnectés par des microbilles d'indium en nombre égal à deux celui des points élémentaires de détection, soit de l'ordre de 300000 pour une matrice de format TV (640 x 480 pixels). Chaque point élémentaire du circuit de détection convertit le flux lumineux en charges électriques qui sont à leur tour convertit en tension en bout de colonne de manière à extraire un signal de type vidéo.



**Figure 1.5 :** Architecture hybride des senseurs infrarouges montrant l'interconnexion des diodes photovoltaïques HgCdTe aux pixels du circuit silicium par microbilles d'indium.

### **I.B.3 Place de l'alliage $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ et le superréseau HgTe/CdTe dans la photodétection Infrarouge**

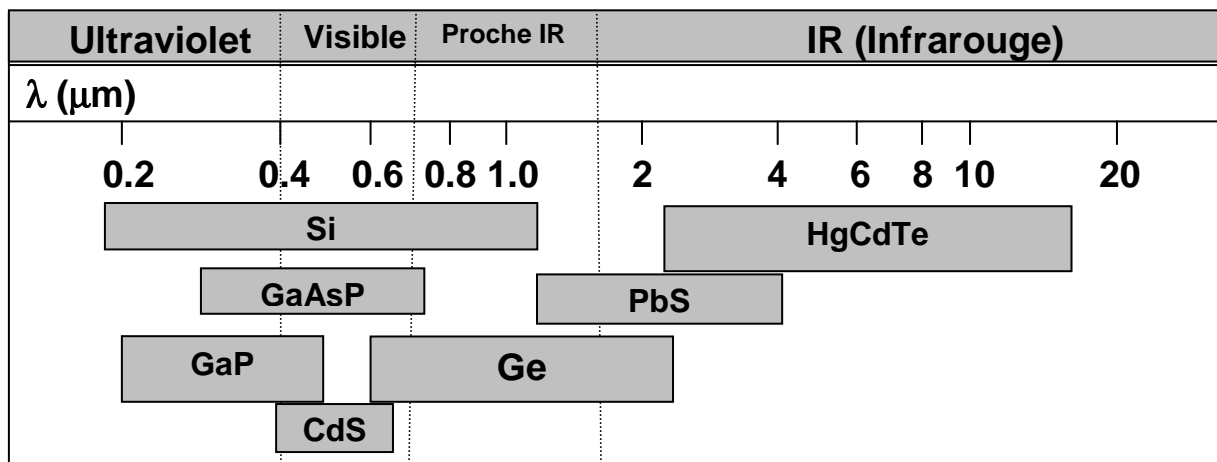
La photodétection infrarouge est, à l'image de la télémétrie et de nombre d'applications, un domaine qui a pris son essor de par ses nombreuses perspectives militaires. Cependant, si le radar était un outil déjà au point durant la seconde guerre mondiale, la photodétection infrarouge n'était pour sa part qu'une technologie naissante. Elle consistait principalement en l'utilisation d'éléments de cellules simples de sulfure de plomb (PbS), opérant dans la gamme de longueurs d'ondes 1,5 - 3  $\mu\text{m}$ , pour la détection et la défense anti-missiles [1.6]. Mais, très vite, l'extension du domaine spectral vers l'infrarouge moyen 3 - 5  $\mu\text{m}$  (MWIR) puis vers la fenêtre (LWIR) 8-14  $\mu\text{m}$  répondit au besoin de mettre en place d'autres applications telles que le guidage ou l'imagerie passive qui permet, en particulier, l'observation nocturne de l'ennemi à l'aide de dispositifs ne permettant pas leur détection.

A la fin des années 1950, des semi-conducteurs comme l'antimoniure d'indium (InSb), le sélénium de plomb (PbSe) ou le tellure de plomb (PbTe) permettaient d'opérer dans la bande 3 - 5  $\mu\text{m}$  quand des matériaux tels que le germanium dopé par du mercure (Ge : Hg) étaient destinés à la fenêtre 8 - 14  $\mu\text{m}$ . Si les deux premiers sont intrinsèques et peuvent de ce fait fonctionner à la température de l'azote liquide, ce dernier fonctionne sur le principe de la photodétection extrinsèque décrite précédemment et nécessite par conséquent un refroidissement nettement plus important [1.3]. Plus précisément, la température de fonctionnement du Ge:Hg est de 30 K, ce qui pose des problèmes en terme de coût et implique en même temps des difficultés au niveau de l'embarquement des dispositifs.

L'objectif pour la bande LWIR était alors de trouver un matériau intrinsèque et pouvant opérer à 77 K : un matériau qui aurait en quelques sortes les propriétés de l'InSb mais avec une bande interdite réduite de moitié. En 1959, Lawson et al. [1.7] mirent en évidence la dépendance de la largeur de bande interdite du HgCdTe en fonction de la fraction de cadmium. En effet, la bande interdite de cet alliage ternaire peut être ajusté de façon continue entre 0 et 1,6 eV (à 77 K) permettant théoriquement la détection de toutes les longueurs d'ondes supérieures à 0,8  $\mu\text{m}$ . Par la suite, cette propriété serait mise à profit pour mettre au point des photodétecteurs intrinsèques, à base de  $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ , fonctionnant dans l'ensemble des fenêtres atmosphériques, et en particulier dans l'intervalle de longueurs d'ondes 8 - 14  $\mu\text{m}$  (figure I.6), correspondant aux applications de vision nocturne.

Malgré de grands obstacles technologiques, tant au niveau de la fabrication que de la caractérisation du matériau, de rapides progrès furent faits. Ainsi, dès 1965, de premiers prototypes de photodétecteurs à base de HgCdTe firent leur apparition dans des systèmes d'imagerie thermique, débouchant très vite sur la production d'éléments simples ou de petites matrices linéaires. La technologie des détecteurs photoconducteurs atteignit sa maturité en 1980, en particulier dans le cas du  $\text{Hg}_{0.795}\text{Cd}_{0.205}\text{Te}$ , utilisé alors dans la fenêtre LWIR pour faire de la cartographie aérienne ou des systèmes FLIR (Forward Looking InfraRed) permettant la navigation et l'attaque en conditions de faible visibilité.

De nos jours, le HgCdTe est utilisé pour fabriquer des matrices photodétectrices basées sur la conversion photovoltaïque et opérant dans les différentes fenêtres atmosphériques [1.8]. Il ouvre des perspectives intéressantes vers des applications de photodétection multi spectrales [1.9]. Il est utilisé tant dans le domaine militaire (guidage de missile, défense anti-missile, vision nocturne, surveillance aérienne, etc.) que dans le domaine industriel (contrôle non destructif) ou civil (imagerie médicale, observations satellites, etc.).



**Figure 1.6 :** Longueur d'onde de détection des semi-conducteurs les plus utilisés

### I.C LE TELLURE DE MERCURE ET DE CADMIUM

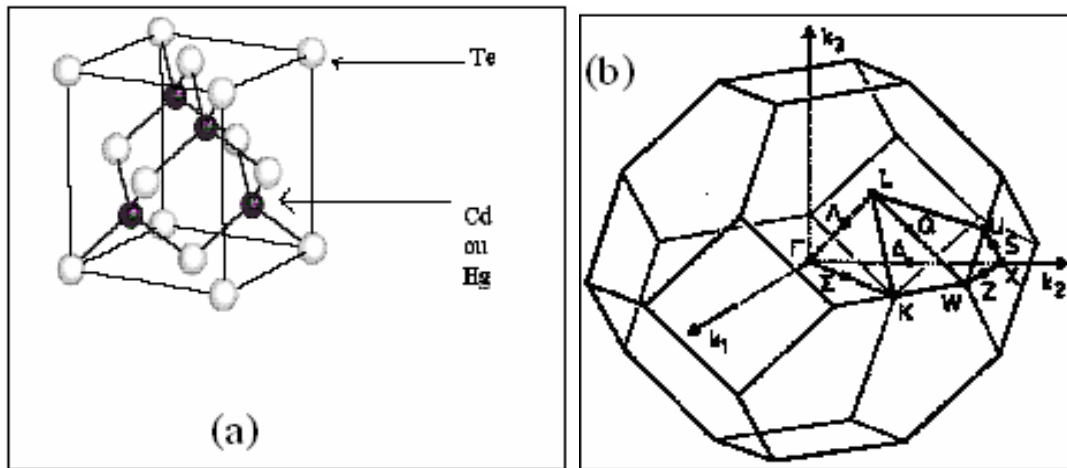
En ce qui concerne le tellure de mercure et de cadmium, peu de paramètres électriques, tels que la mobilité ou le coefficient de diffusion, sont disponibles dans la littérature. Il est toutefois possible de trouver un grand nombre de paramètres physiques. Nous exposons ici ceux qui nous seront utiles pour mettre en place un modèle décrivant correctement ce matériau.

## I.C.1 Propriétés cristallographiques du tellure de mercure et de cadmium

### I.C.1.a Structure cristalline

L'alliage ternaire  $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$  a une structure de type Zinc blende constitué de deux sous réseaux cubique a face centrés translatés d'un quart de la diagonale principale du cube où chaque ion Te est entouré par quatre plus proches voisins qui peuvent être un ion Hg ou un ion Cd (voir figure I.7 (a)). La première zone de Brillouin pour ce type de structure est présentée dans la figure I.7 (b) avec les principaux points et lignes de symétrie.

D'un point de vue technologique, le tellure de mercure et de cadmium est un alliage ternaire fabriqué à partir de tellure de cadmium (CdTe) et de tellure de mercure (HgTe), qui sont respectivement un semi-conducteur et un semi-métal de type II-VI (figure I.8). Ces matériaux cristallisant tous les deux dans la structure blende de zinc. La structure cristallographique de l'alliage tellure de mercure et de cadmium est elle aussi de type blende de zinc.



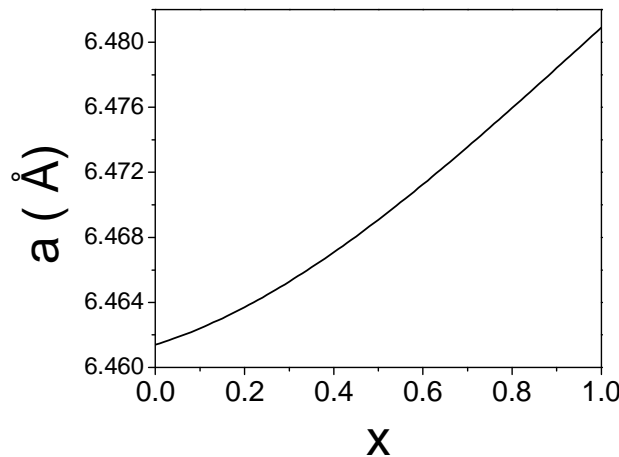
**Figure I.7 :** Structure cristalline de  $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$  (a). Première zone de Brillouin de  $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$  (b).

		IIIa	IVa	Va	VIa	VIIa
		B	C	N	O	F
		Al	Si	P	S	Cl
Ib	IIb	Ga	Ge	As	Se	Br
Cu	Zn	In	Sn	Sb	Te	I
Ag	Cd	Pb	Bi	Po	At	
Au	Hg					

**Figure I.8 :** Extrait de la classification périodique des éléments.

Les paramètres de maille du CdTe et du HgTe sont très proches puisqu'ils sont de 6.482 Å pour le premier et de 6.462 Å pour le second. De fait, ils sont miscibles en toutes proportions et, si l'on note  $x$  la proportion de cadmium, celle-ci peut prendre n'importe quelle valeur comprise entre 0 et 1. Le paramètre de maille  $a$  du  $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$  vérifie alors la relation empirique [1.10] :

$$a(\text{\AA}) = 6,4614 + 0,0084 x + 0,0168 x^2 - 0,0057 x^3 \quad (1.3)$$



**Figure I.9 :** Paramètre  $a$  de la maille cubique de l'alliage  $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$  en fonction de la proportion  $x$  de cadmium.

Cette dernière expression est reportée sur la figure I.9. Remarquons que le paramètre  $a$  augmente légèrement de 2% avec  $x$ .

Il existe aussi une relation empirique liant la proportion de cadmium  $x$  à la masse volumique  $\rho$  du matériau [1.11], exprimée par :

$$x = 3,628 - 0,44924\rho \quad (1.4)$$

où  $\rho$  est exprimée en  $\text{g/cm}^3$ .

Si elle agit sur les paramètres cristallographiques, la proportion de cadmium modifie au même titre la structure de bandes électronique du matériau (Figure.I.15).

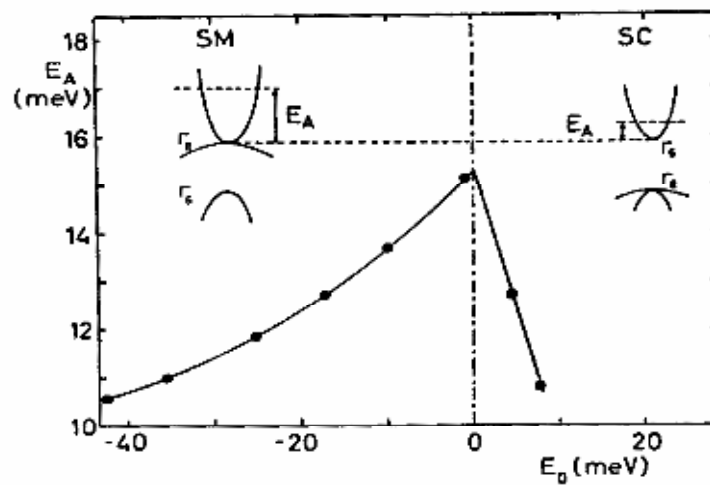
### I.C.1.b Les imperfections du réseau cristallin

Les principales propriétés physiques dans les semi-conducteurs ou les semi-métaux tels que la mobilité et la densité des porteurs à basses températures, sont contrôlées par les imperfections du cristal. Il y a trois types d'imperfection d'intérêt majeur : les dislocations, les défauts ponctuels et les impuretés d'atomes étrangers.

### I.C.1.b .1 Dislocations et défauts ponctuels

On peut citer : la dislocation  $60^\circ$  a été observée dans CdTe [1.12]. Il n'y a aucun travail disponible sur la dislocation dans l'alliage qui présente des défauts ponctuels sous forme de lacunes et interstitiels.

Il a été observé que le type n ou p dépend de leurs préparations. Habituellement des matériaux  $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$  de types n ou p avec  $x=0.2$  sont produits par le processus de solidification dans une vapeur riche en Hg ou Te. Trois types de défauts sont à l'origine de ce comportement, à savoir des lacunes Hg et Te et des interstitiels Hg.



**Figure 1.10 :** Position du niveau accepteur associé aux lacunes Hg en fonction de la bande interdite [1.13].

L'évidence pour les lacunes Hg a été obtenue dans une composition semi-conductrice aussi bien que dans une semi-métallique. Elles correspondent à un état accepteur résonnant avec la bande de conduction pour  $x \leq 0,16$  dont l'énergie dépend de la fraction molaire  $x$ , c'est à dire de la bande interdite  $E_0$  comme il est montré sur la figure 1.10 [1.13].

Elliott et al [1.14] ont déduit à partir de mesures du gel thermique des porteurs et de photoluminescence un niveau accepteur d'approximativement à 20 meV au-dessus de la bande de valence. Cette valeur d'énergie a été trouvée dans l'alliage semiconducteur de type p pour  $0,2 \leq x \leq 0,5$ . Cet état accepteur est d'origine une lacune de Hg. Les alliages riches en Hg conduisent au type n. Les alliages de type n peuvent aussi être dues aux lacunes Te ou aux interstitiels Hg ([1.15],[1.16]).

### **I.C.1.b.2 Atomes étrangers**

Les propriétés d'atomes étrangers ont été investies dans plusieurs expériences. Cependant, les données fiables sont seulement disponibles pour Cu qui agit comme accepteur. Son niveau d'énergie est approximativement 1meV au-dessus du bord de la bande  $\Gamma_8$  dans la région semi-métallique du système de l'alliage [1.17]. Les niveaux donneurs en rapport avec les atomes étrangers n'ont pas été identifiés. Ceci peut être dû à la faible énergie d'ionisation dans les alliages pour x faible. Pour x pas trop grand, les propriétés du transport extrinsèque sont dominées plutôt par les défauts ponctuels que par les impuretés étrangères. Pour obtenir des matériaux purs pour des applications techniques, Il a été plus facile de réduire le nombre d'impuretés chimiques que celui des défauts.

## **I.C.2 Propriétés physiques du tellurure de mercure et de cadmium**

### **I.C.2.a $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ un alliage semi-conducteur à bande interdite continûment ajustable**

Les détecteurs d'infrarouges étudiés, dans ce mémoire, ont comme principe de détection la conversion photovoltaïque. Ce mode de détection identique à celui bien connu des cellules solaires, suppose que l'on dispose d'un semi-conducteur dont l'énergie de bande interdite (gap) est voisine de celles des photons à détecter. Parmi les candidats pressentis, l'alliage ternaire  $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$  (tellurure de mercure et de cadmium) a été retenu car il présente une propriété unique: sa bande interdite direct peut être ajusté continûment de 0 à 1,6 eV [1.18] en modulant la stoechiométrie moyenne x de cadmium (Figure1.11). Ainsi, pour réaliser un photodétecteur à base de HgCdTe de bande interdite 0,1 eV et devant fonctionner à la température de l'azote liquide (77 K), une composition moyenne en cadmium de 20,5% est requise (Figure1.11).

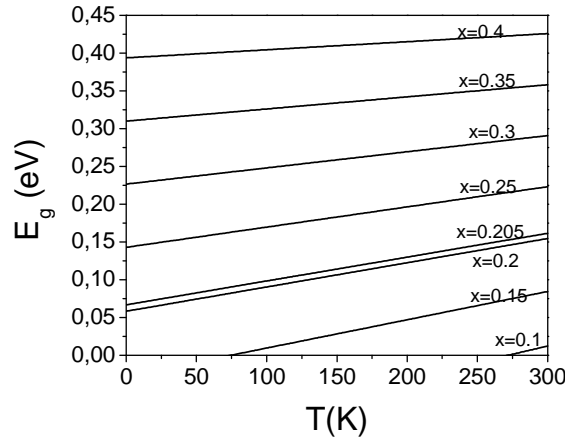
La bande interdite  $E_g$  de l'alliage tellurure de mercure et de cadmium vérifie la relation empirique [1.11] :

$$E_g(x,T) = -0,302 + 1,93x - 0,810x^2 + 0,832x^3 + 5,035 \cdot 10^{-4}(1-2x)T \quad (1.5)$$

où T(K) est la température du matériau et  $E_g$  (eV) sa bande interdite.

L'expression (1.5) est reportée sur la figure 1.12 pour des températures de 4,2K, 77K et 300 K. Nous pouvons remarquer que, à 77 K, la bande interdite du  $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$  est continûment ajustable entre les valeurs -0,3 et 1,6 eV, qui sont respectivement les bandes interdites de HgTe et de CdTe. De plus, la bande interdite n'est positive que pour des

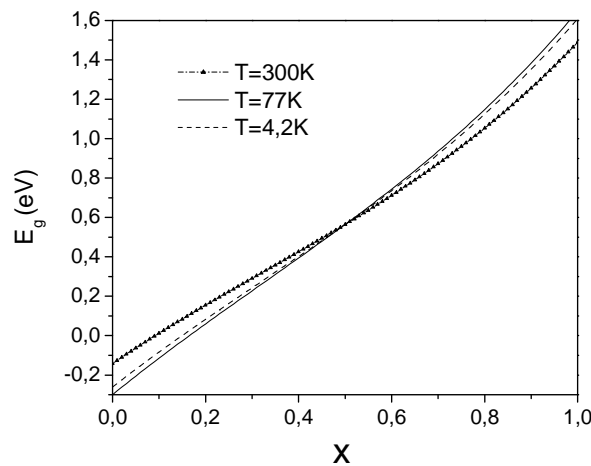
valeurs de  $x$  supérieures à 0,15. Dans ces conditions, ce n'est qu'à partir d'une fraction de cadmium de 15 % que l'on peut parler de matériau semi-conducteur.



**Figure 1.11 :** Evolution de la bande interdite  $E_g$  de l'alliage  $Hg_{1-x}Cd_xTe$  avec la température  $T$  et la composition  $x$  de Cadmium.

Si la proportion de cadmium  $x$  détermine la bande interdite, il en est de même pour la longueur d'onde de coupure  $\lambda_c$ . En effet, l'énergie d'un photon  $E_{ph}$  associée à une radiation de longueur d'onde  $\lambda$  vérifie la relation :

$$E_{ph} = \frac{hc}{\lambda} \quad (1.6)$$



**Figure 1.12 :** Largeur de bande interdite  $E_g$  en fonction de la proportion de cadmium pour des températures de 4,2K, 77K et 300 K.



Ce dernier n'est détecté que si  $E_{ph} \geq E_g$  où  $E_g$  vérifie la relation :

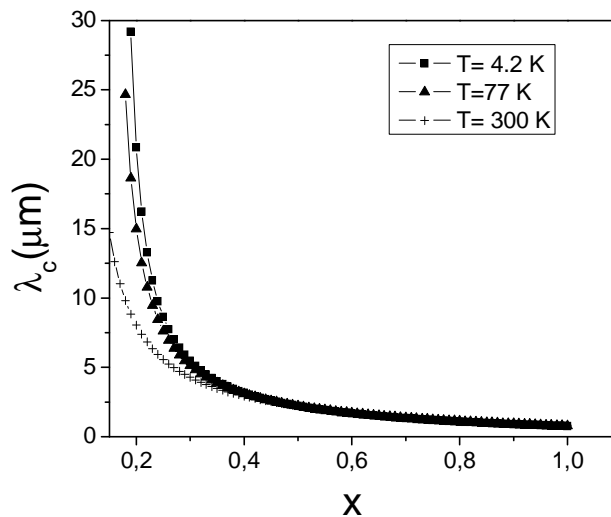
$$E_g (\text{eV}) = \frac{1,24}{\lambda_c (\mu\text{m})} \quad (1.7)$$

Par conséquent, le matériau semi-conducteur ne détecte que les longueurs d'ondes  $\lambda$  vérifiant :

$$\lambda (\mu\text{m}) \leq \lambda_c (\mu\text{m}) = \frac{1240}{E_g (\text{meV})} \quad (1.8)$$

Nous avons reporté sur la figure 1.13 la longueur d'onde de coupure en fonction de la fraction de cadmium  $x$  et la température. Pour un  $x$  donné inférieur à 0,45,  $\lambda_c$  augmente quand  $T$  diminue.

Remarquons que la quasi-constance du paramètre de maille par rapport à la proportion de cadmium, à laquelle nous avons fait référence précédemment, est une propriété très intéressante du HgCdTe puisqu'elle permet la croissance de différentes compositions du matériau sur le même substrat. Il devient de ce fait possible de faire des photodétecteurs infrarouges multispectraux, c'est à dire permettant la détection à partir d'un seul et même dispositif des longueurs d'ondes appartenant à différentes fenêtres atmosphériques. Cet aspect présente actuellement un enjeu important, notamment au niveau de l'amélioration de la détection d'objets noyés dans des environnements complexes [1.9].



**Figure 1.13 :** Longueur d'onde de coupure  $\lambda_c$  en fonction de la fraction  $x$  de cadmium pour des températures de 4,2K, 77K et 300 K

### I.C.2.b Structure de bandes d'énergie

$\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$  de structure cristalline blende de zinc a une structure de bande électronique similaire à celle de InSb. Les propriétés fondamentales sont au centre de la première zone de Brillouin  $\Gamma$  où la bande interdite est directe.

La méthode  $\vec{k} \cdot \vec{p}$  établie par Kane [1.19] repose sur la théorie des perturbations. Elle peut être déduite de l'équation de Schrödinger d'un électron suivante :

$$\left[ \frac{\vec{p}^2}{2m} + U(\vec{r}) \right] \varphi_{n\vec{k}}(\vec{r}) = E_n(\vec{k}) \varphi_{n\vec{k}}(\vec{r}) \quad (1.9)$$

Le théorème de Bloch donne les fonctions d'ondes  $\varphi_{n\vec{k}}(\vec{r})$  solutions comme :

$$\varphi_{n\vec{k}}(\vec{r}) = u_{n\vec{k}}(\vec{r}) \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}) \quad (1.10)$$

Où  $n$  désigne l'indice d'une bande d'énergie,  $\vec{k}$  est le vecteur d'onde situé dans la première zone de Brillouin, et  $u_{n\vec{k}}$  a la périodicité du cristal de potentiel  $U(\vec{r})$ . Ce qui conduit à l'équation (en termes de  $u_{n\vec{k}}$ ):

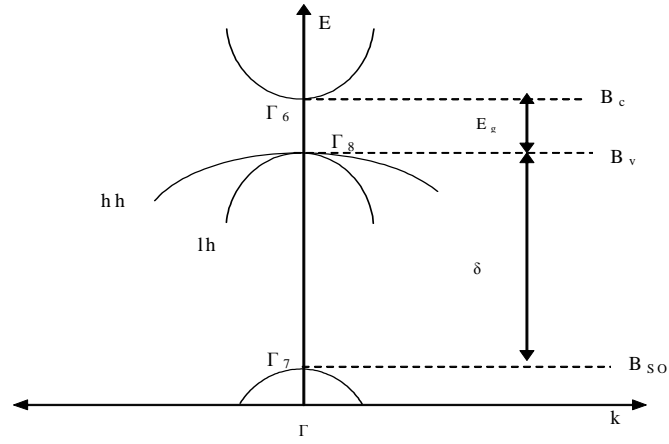
$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U(\vec{r}) + \frac{\hbar}{m} (\vec{k} \cdot \vec{p}) \right] u_{n\vec{k}}(\vec{r}) = \left[ E_n(\vec{k}) - \frac{\hbar^2}{2m} k^2 \right] u_{n\vec{k}}(\vec{r}) \quad (1.11)$$

Connaissant la solution pour un état donné  $\vec{k}_0$  on peut trouver par extrapolation les solutions près de cet état. Ce qui conduit à déterminer le spectre d'énergie  $E_n(\vec{k})$  dans la première zone de Brillouin. L'origine des énergies est au sommet de la bande de valence.

La méthode  $\vec{k} \cdot \vec{p}$  de Kane donne les relations de dispersion suivantes (autour de  $k$ -Figure I.14) pour un semi-conducteur à bande interdite  $E_g$  étroite (i.d  $E_g \ll \delta$  et  $P.k$ ) de:

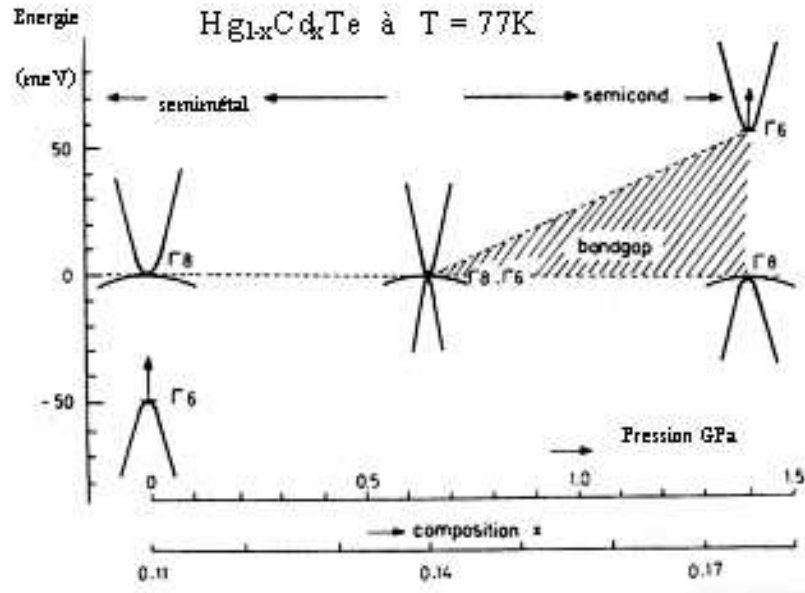
$$\left. \begin{aligned} & \bullet \text{ la bande de conduction : } E_c = E_g + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + \frac{1}{2} \left( \sqrt{E_g^2 + P^2 k^2} - E_g \right) \\ & \bullet \text{ la bande de valence : } \\ & \quad - \text{ des trous lourds : } E_{hh} = -\frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \\ & \quad - \text{ des trous légers : } E_{lh} = -\frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} - \frac{1}{2} \left( \sqrt{E_g^2 + P^2 k^2} - E_g \right) \\ & \quad - \text{ d'interaction spin-orbite : } E_{so} = -\delta - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} - \frac{P^2 k^2}{8(E_g + \delta)} \end{aligned} \right\} \quad (1.12)$$

Cette dernière bande décrit l'interaction spin-orbite des électrons et est décalé, vers le bas de la bande de valence, de l'énergie  $\delta$ . P étant l'élément de la matrice de Kane.



**Figure I.14 :** Modèle pour la structure de bande d'un semi-conducteur cristallisant dans la structure blende de zinc

La clé du changement de la structure de bandes de l'alliage  $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ , en fonction de la fraction molaire  $x$  est l'inversion d'ordre des bandes  $\Gamma_6$  et  $\Gamma_8$  dans HgTe en



**Figure I.15 :** Variation de la structure des bandes de  $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$  avec la composition et la pression à 77 K [1.20]

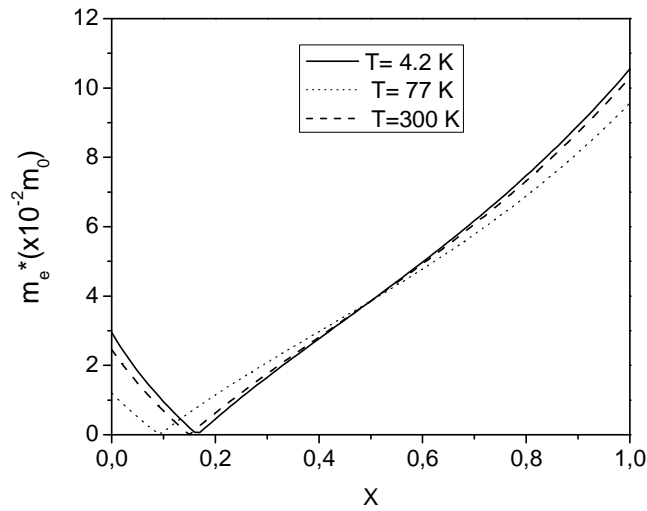
comparaison avec les composés II-VI normaux de structure ZnS. Cette inversion d'ordre résulte principalement d'effets relativistes abaissant le niveau  $\Gamma_6$  jusqu'à ce qu'il soit au dessous du niveau  $\Gamma_8$  Figure I.15.

La figure I.12 montre que la bande interdite augmente de -0,3 eV (HgTe) à 1,6 eV (CdTe) quand  $x$  augmente de 0 à 1. La transition de l'état semimétallique à l'état semi-conducteur se manifeste pour  $x$  voisin de 0,14. Les bandes interdites étroites sont obtenues pour  $0,14 \leq x \leq 0,25$ . L'échantillon étudié dans ce mémoire est dans ce domaine.

La masse effective en bas de la bande de conduction  $m_c$  peut être quant à elle calculée à partir de ces grandeurs puisqu'elle vérifie la relation suivante [1.10] :

$$m_c = \frac{3\hbar^2 E_g (\delta + E_g)}{4P^2 (\delta + \frac{3}{2} E_g)} \quad (1.13)$$

Où  $P$  est l'élément de matrice de Kane, avec  $P \approx 8,28 \cdot 10^{-10}$  eV.m [1.21]. Nous avons tracé cette relation sur la figure I.16.



**Figure I.16 :** Masse effective électronique en bas de la bande de conduction , normalisée à la masse de l'électron libre, en fonction de la fraction de cadmium pour des températures de 4,2 K , 77K et de 300K

Si l'on veut que le modèle représenté sur la figure I.14 soit suffisamment précis et utilisable pour un plus grand nombre de semi-conducteurs, il faut prendre en compte la non-parabolicité de la bande de conduction. En effet, l'interaction des états de la bande de valence et de la bande de conduction, due à la proximité de celles-ci dans le diagramme

des énergies, induit une non-parabolicité de la courbe de dispersion des états de conduction [1.22]. Elle dépend de l'écart énergétique des deux bandes c.à.d de la bande interdite  $E_g$  du matériau. Elle sera d'autant plus importante pour  $E_g$  faible.

La courbe de dispersion de la bande de conduction vérifie alors la relation [1.23]

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m_c} = E(k) [1 + \alpha E(k)] \equiv \gamma(E(k)) \quad (1.14)$$

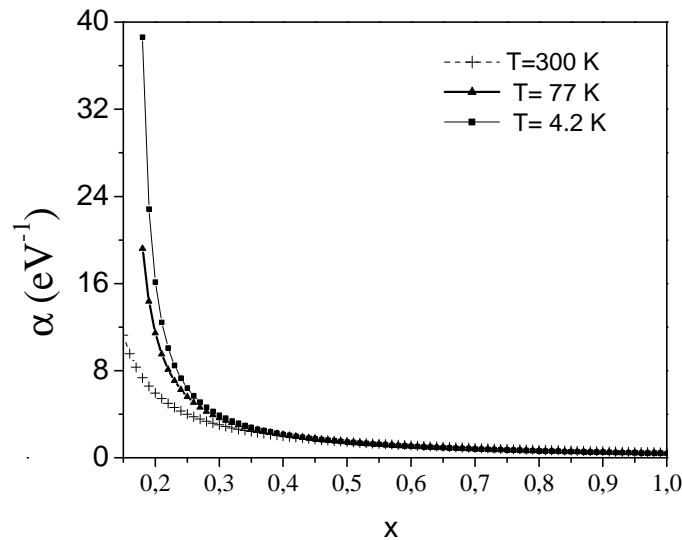
Où, de façon équivalente,

$$E(k) = \frac{-1 + \sqrt{1 + 4\alpha\gamma}}{2\alpha} \quad (1.15)$$

La grandeur  $\alpha$  décrit la non-parabolicité de la bande de conduction et est de fait appelée coefficient de non-parabolicité. Celui-ci est relié à la bande interdite par la relation [1. 24] :

$$\alpha = \left( 1 - \frac{2m_c}{m_0} \right) \cdot \frac{1}{E_g} \left[ 1 - \frac{E_g \cdot \delta}{3(E_g + \delta)(E_g + \frac{2}{3}\delta)} \right] \quad (1.16)$$

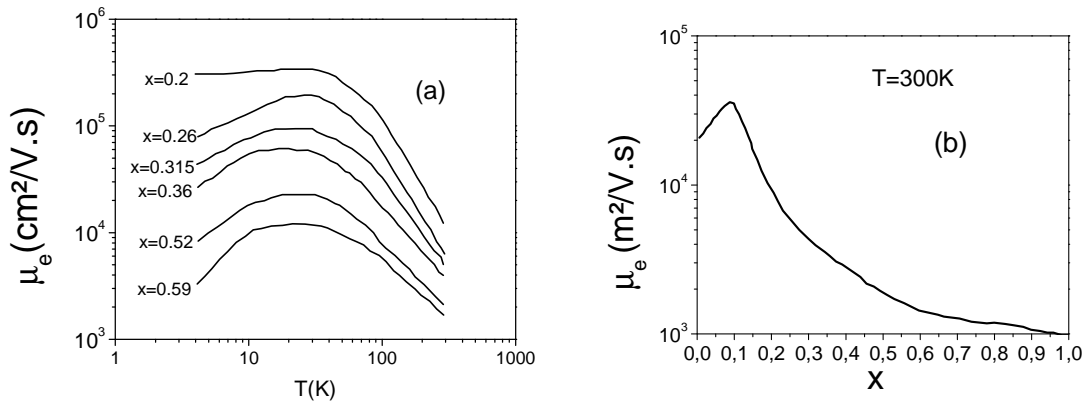
Où  $m_0$  est la masse de l'électron libre. Notre calcul de  $\alpha$  est représenté sur la figure I.17. Conformément à nos attentes, le coefficient de non-parabolicité décroît quand  $x$  augmente, c'est à dire à mesure que  $E_g$  augmente. De plus, pour les faibles proportions de cadmium ( $x < 0.25$ ),  $\alpha$  augmente quand la température diminue.



**Figure I.17 :** Coefficient de non- parabolicité  $\alpha$  en fonction de la proportion de cadmium pour des températures de 4,2K, 77K et 300K.

### I.C.2 .c Mobilité des porteurs de charges

La mobilité permet d'évaluer la rapidité des porteurs de charges du matériau semi-conducteur. On peut alors imaginer l'importance de ce paramètre dans les applications optroniques. Aussi, de nombreuses expérimentations ont été menées afin de mesurer la mobilité du  $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$  pour différentes compositions et pour différentes températures. Nous avons reporté dans la figure I.18 les mobilités de Hall mesurées par Scott [1.25] pour différents échantillons de  $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$  afin d'évaluer la dépendance de la mobilité de la température et de la fraction de cadmium. Pour les concentrations considérées, la figure I.18(a) montre que la mobilité croît avec la température jusqu'à 50 K. Puis elle décroît après dans le domaine intrinsèque. Cette diminution est due à l'augmentation des collisions des porteurs de charges avec les phonons à hautes températures. De plus, aux basses températures ( $T < 10\text{K}$ ) et pour  $x$  faible ( $x < 0.25$ ) l'alliage  $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$  présente des mobilités élevées de l'ordre de  $3 \cdot 10^5 \text{ cm}^2/\text{V.s}$ . A 300 K, la figure 1.18(b) montre que, pour des proportions de cadmium correspondantes au matériau semi-conducteur (c'est à dire pour  $x \geq 0.15$ ) et quand  $x$  augmente la mobilité de l'alliage décroît entre les valeurs  $3 \cdot 10^4$  et  $10^3 \text{ cm}^2/\text{V.s}$ .



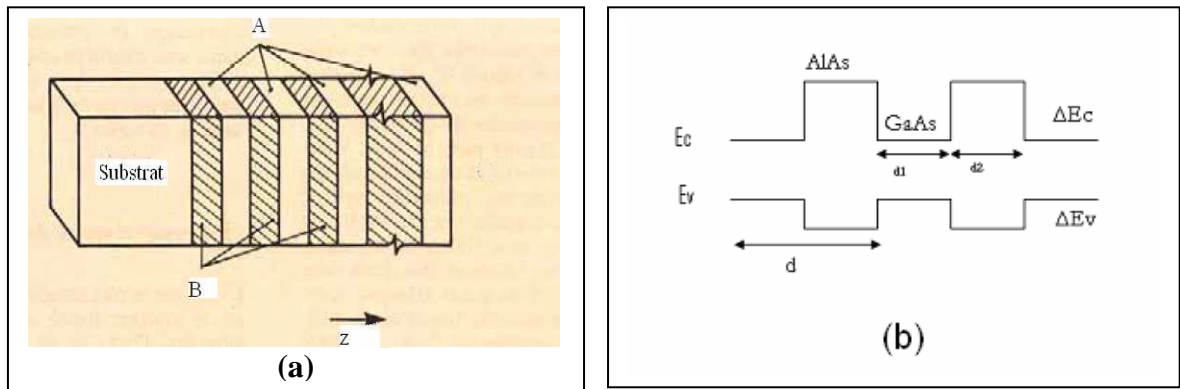
**Figure I.18 :** Mobilité de Hall en fonction de la température pour différentes fractions de cadmium (a) et en fonction de la fraction de cadmium pour une température de 300K (b). Les échantillons considérés ont des densités de porteurs inférieures à  $2 \cdot 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ . [1.25]

### I.D LES SUPER-RESEAUX HgTe/ CdTe

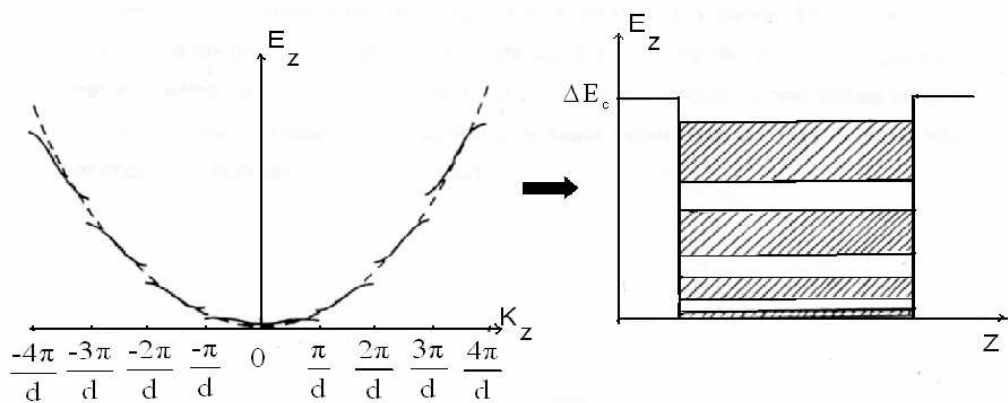
Un superréseau est un ensemble (sandwich) formé par l'empilement de couches de quelques dizaines d'angström de deux semiconducteurs de mailles cristallines voisines et de bandes interdites différentes (Figure I.19 (a)). La figure I.19.(b) montre un exemple de

distribution du potentiel dans le superréseau GaAs/AlAs suivant la direction de croissance  $z$  des couches [1.26]. Le potentiel est périodique de période  $d$ , unidimensionnel selon  $z$ . La périodicité artificielle  $d$ , plus grande que celle du réseau cristallin cubique a justifié l'appellation de superréseau.

La superposition de  $d$  à la maille  $a$  dans l'espace direct conduit à un rétrécissement de la zone de Brillouin en une zone de largeur  $2\pi/d$  dans l'espace réciproque selon  $k_z$  [1.27]. Des mini bandes interdites apparaissent et comme le mouvement dans le plan du superréseau est libre suivant  $k_x$  et  $k_y$ , on assiste à la formation de sous bandes quantiques ou mini bandes (figure I.20).



**Figure I.19 :** (a) Schéma illustrant un superréseau (b) distribution du potentiel dans le superréseau GaAs/AlAs suivant la direction de croissance  $z$  des couches



**Figure I.20 :** Formation de sous bandes quantiques et de mini bandes interdites dans un superréseau.

Les propriétés du superréseau seront dépendantes des épaisseurs respectives  $d_1$  et  $d_2$  des couches des deux constituants ainsi que des barrières de potentiel  $\Delta E_c$  et  $\Delta E_v$  (figure I.19 (b)).

Ainsi des électrons d'énergie supérieure à  $\Delta E_c$  ne verront pas le superréseau et le matériau peut être considéré comme tridimensionnel.

Si l'énergie des électrons est inférieure à  $\Delta E_c$ , deux cas sont possibles :

- Si l'épaisseur  $d_2$ , de la couche du semiconducteur à bande interdite  $E_{g_2}$  large, est grande comparée à la longueur de pénétration de la fonction d'onde du porteur dans le puit de potentiel, chaque puit sera découplé du voisin et le superréseau pourra être traité comme un ensemble de puits quantiques découplés.
- Dans le cas contraire, il y aura possibilité de passage tunnel des porteurs entre puits et couplage des fonctions d'ondes par un transport parallèle à l'axe  $z$  de croissance.

La première proposition de synthèse de superréseau a été suggérée par Essaki et Tsu en 1969 [1.28] soit par modulation de composition, soit par modulation de dopage par épitaxie par jet moléculaire.

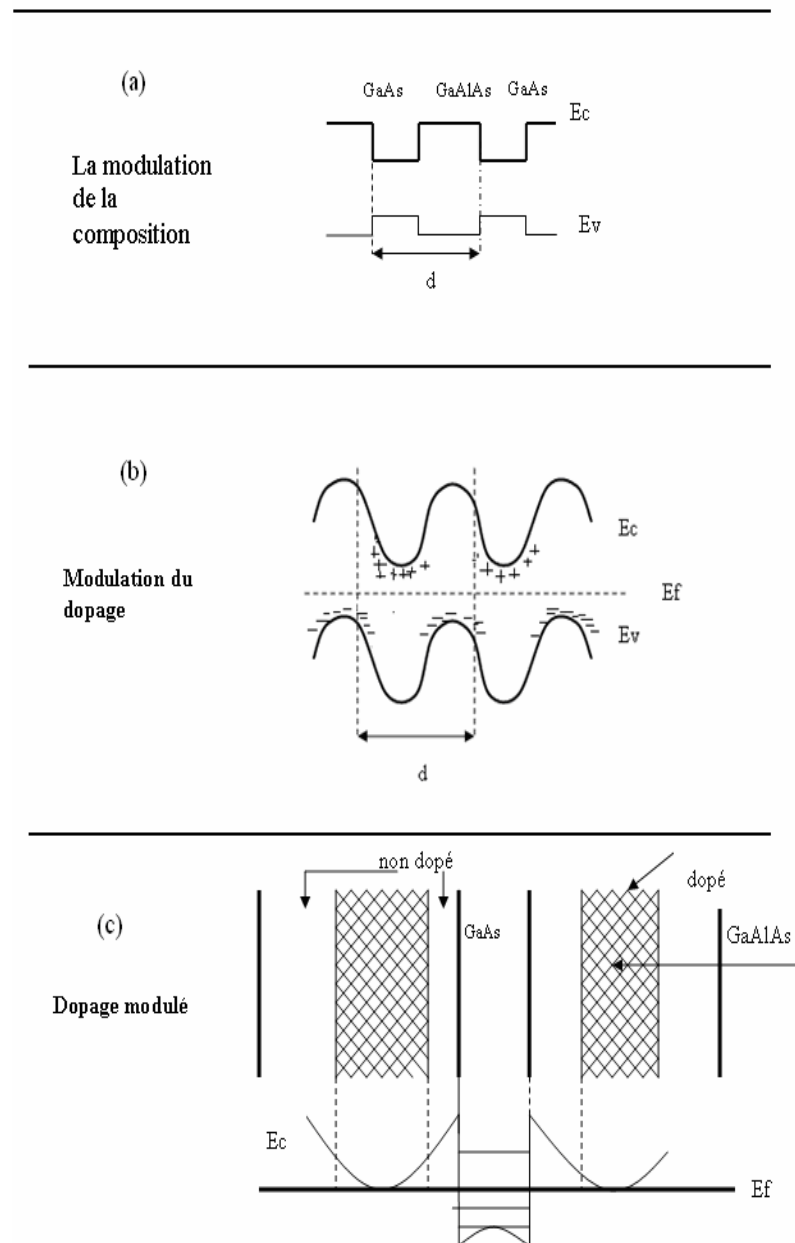
Dans le premier cas, cela implique un faible désaccord de maille cristalline des deux constituants.

L'allure des bandes est présentée dans la figure I.21.a.

Les superréseaux à modulation de dopage s'obtiennent par dopage alterné  $n$  et  $p$  d'un même semiconducteur au cours de la croissance figure I.21.b.

Chaque couche  $n$  ou  $p$  est séparée par une zone intrinsèque  $i$  d'où le nom de  $nipi$  [1.29]. Les grandes possibilités de croissance qu'offrent les techniques d'épitaxie (jet moléculaire ou organométallique) ont permis le développement de structures plus complexes, par exemple, celles à dopage modulé. La figure I.21.c donne un tel exemple : les porteurs dans la couche active (matériau à bande interdite étroite) proviennent du transfert de charge du matériau à grande bande, dopé, au travers de l'hétérojonction lors de son élaboration. La présence d'une couche non dopée sépare les porteurs des impuretés, ce qui confère une haute mobilité aux porteurs, la diffusion par impuretés étant ainsi fortement réduit.





**Figure I.21 : Synthèse du superréseau GaAs-GaAlAs**

### I.D.1 Les différents types de superréseaux

Le modèle d'Anderson [1.30] décrit qualitativement la formation des jonctions entre deux semiconducteurs différents ou hétérojonctions. Ces hétérojonctions sont à la base des superréseaux.

La courbure des bandes aux interfaces dans les hétérojonctions dépendra du type des semiconducteurs n ou p, des affinités électroniques  $\chi_i$  et des bandes interdites  $E_{gi}$  des deux semiconducteurs. En fonction des  $\chi_i$  et  $E_{gi}$  et des dopages il sera possible de prévoir la courbure éventuelle des bandes à l'interface dans le cas idéal où il n'y a pas d'états

d'interface. Les technologies modernes de croissance évitent en grande partie la contribution de ces derniers.

Il ressort, en fonction des paramètres précédents que l'on peut classer les superréseaux en 3 types :

- Le superréseau de type I décrit par  $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As-GaAs}$  du groupe III-V ([1.31], [1.32])
- Le superréseau de type II décrit par  $\text{InAs-GaSb}$  du groupe IV-IV ([1.32])
- Le superréseau de type III décrit par  $\text{HgTe-CdTe}$  du groupe II-VI ([1.33])

#### **I.D.1.a Superréseaux de type I**

La figure I.22.a montre la position respective des extremums des bandes de l'hétérojonction  $\text{GaAs-Ga}_x\text{Al}_{1-x}\text{As}$ , caractérisée par la relation :

$$E_{g2} - E_{g1} = \Delta E_c + \Delta E_v \quad (1.17)$$

Dans le superréseau, les bandes de conduction et de valence du matériau à plus petite bande interdite, GaAs, vont se trouver entre celle de GaAlAs (Figure I.22.a)

Les électrons ou trous sont confinés dans les puits de potentiel ainsi formés. L'énergie des sommets de mini bandes est notée  $E_i$  ou  $H_i$ .

#### **I.D.1.b Superréseaux de type II**

La figure I.22.b donne la disposition des bandes dans l'hétérojonction  $\text{InAs-GaSb}$ . Dans ce cas nous avons :

$$E_{g2} + E_{g1} = \Delta E_c + \Delta E_v - 2E_s \quad (1.18)$$

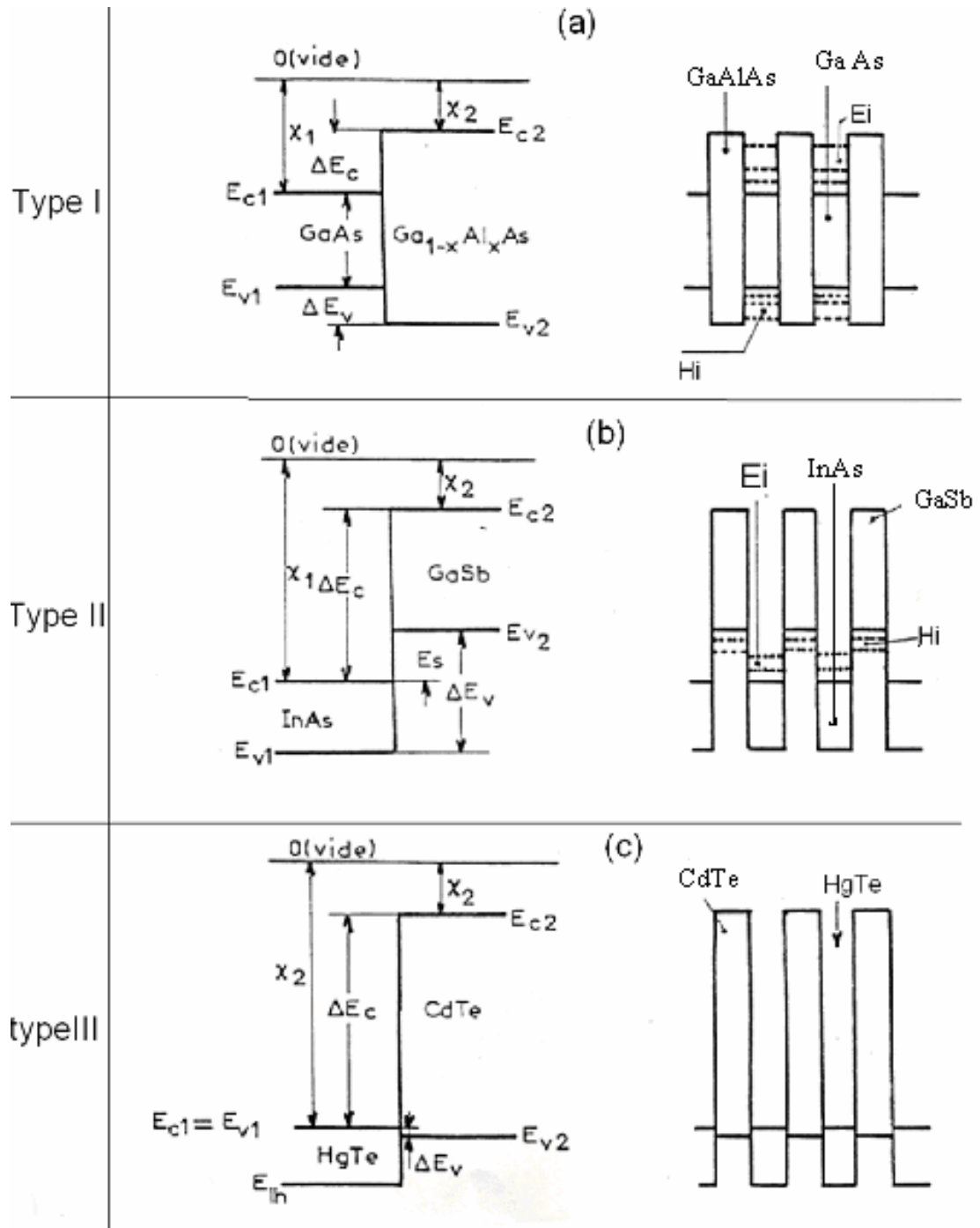
Nous voyons que l'énergie du bas de la bande de conduction de InAs se situe sous le sommet de la bande de valence de GaSb.

Dans ce superréseau, la disposition des bandes est donnée par la figure I.22.b.

Le confinement des électrons et des trous se produit dans chaque matériau. Bien que séparés spatialement la présence des deux types de porteurs confère un caractère semi-métallique [1.34].

#### **I.D.1.c Superréseaux de type III**

La particularité de ce type de superréseau est liée à l'inversion des bandes de particules légères dans HgTe par rapport à celle de CdTe. L'écart en énergie des sommets des bandes de trous lourds, estimé nul [1.35] mais trouvé faible égal à 40meV par des mesures magnéto-optiques [1.36], donne le schéma de bande de la figure I.22.c. Une représentation du superréseau que nous étudierons dans ce mémoire.



**Figure 1.22 :** Les trois types des superréseaux.

### I.D.2 Les superréseaux HgTe-CdTe

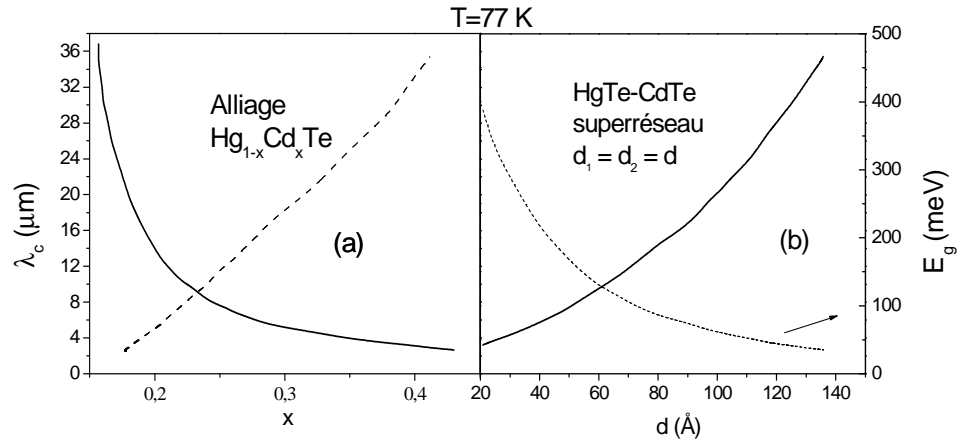
Caractérisés par l'inversion de la structure de bandes des particules légères de HgTe [1.37] et les nouvelles possibilités d'élaboration, ce type de matériau a attiré l'attention des théoriciens dès 1979 [1.35] montrant l'intérêt que pouvait avoir ces superréseaux dans les applications comme détecteurs d'infrarouge, spécialement aux grandes longueurs d'onde. Ceci a été montré par Smith et al. 1983 [1.38] dans une comparaison avec le composé

ternaire  $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ . Ce dernier, semiconducteur dont la bande est ajustable par contrôle de la composition, est fréquemment utilisé dans les matrices détectrices d'image.

Le problème essentiel à résoudre pour l'emploi de ce semiconducteur est donc l'homogénéité de la composition sur l'ensemble du détecteur, la bande interdite de l'alliage varie linéairement mais rapidement avec la composition  $x$ . ([1.37], [1.39]).

Les calculs de structure de bande du superréseau ([1.35],[1.40]) montre qu'il est possible d'obtenir un matériau avec une bande interdite ajustable en fonction du pas du superréseau (épaisseurs relatives et absolues  $d_1$  et  $d_2$  des couches HgTe et CdTe).

Pour des épaisseurs facilement accessibles par épitaxie les spectres des longueurs d'ondes 8-14  $\mu\text{m}$  correspondant à la fenêtre atmosphérique LWIR est détectable. La figure I.23 montre la comparaison à 77K de la bande interdite  $E_g$  et de la longueur d'onde de détection par l'emploi soit de l'alliage ternaire, soit du superréseau.

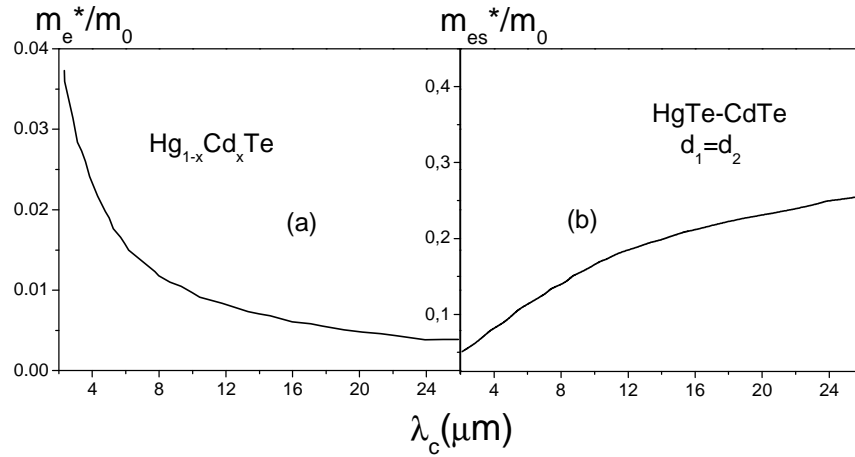


**Figure I.23 :** La longueur d'onde de coupure et l'énergie de la bande interdite en fonction de : la composition  $x$  pour l'alliage ternaire  $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$  (a), et en fonction de l'épaisseur  $d$  de la couche pour le superréseau HgTe/CdTe avec  $d_1=d_2$  (b).[1.38]

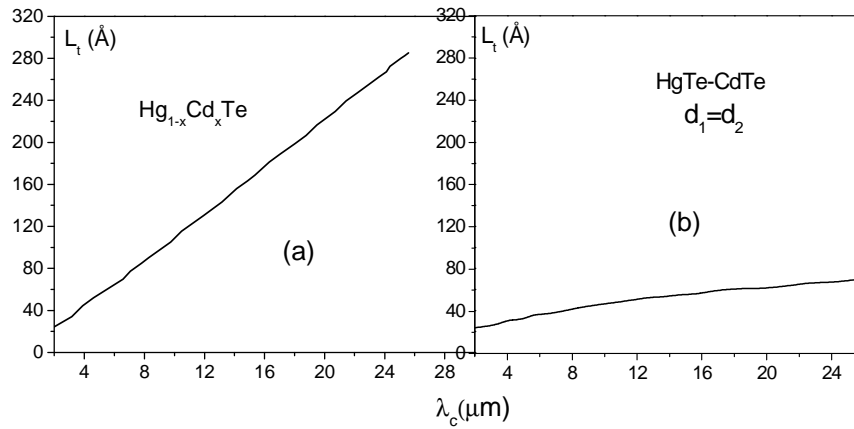
Nous avons calculé la bande interdite du superréseau dans le formalisme de la fonction enveloppe développé par Bastard [1.40] au centre de la zone de Brillouin et pour un « offset » des bandes de trous lourds  $\Lambda = 40\text{meV}$  selon les résultats de Guldner et al [1.36].

Nous constatons que pour les longueurs d'onde  $\lambda_c \geq 12\mu\text{m}$  la composition de l'alliage ternaire est critique pour  $x < 0,2$ .

La comparaison des deux matériaux détecteurs développée par Smith [1.38] s'étend également aux problèmes rencontrés classiquement dans les détecteurs, les courants de diffusion des zones p du détecteur et le courant Tunnel bande à bande. Le premier terme est lié à la valeur de la masse effective électronique qui est d'un ordre de grandeur plus grand dans le superréseau (masse transverse) donc correspondant à un plus faible courant. Le deuxième terme est lié à la longueur tunnel. Il apparaît que dans le superréseau, cette longueur est faible comparé au ternaire. Il y aura ainsi limitation des courants nuisant à la détectivité. Les figures I.24 et I.25 représentent les variations des termes précédents [1.38].



**Figure I.24 :** la masse effective de l'électron en fonction de la longueur d'onde de coupure pour l'alliage  $Hg_{1-x}Cd_xTe$  (a), et pour le sperréseau  $HgTe-CdTe$  (b). La masse effective de l'électron est anisotrope, la composante normale à la couche plane est montrée.



**Figure I.25 :** La longueur tunnel en fonction de la longueur d'onde de coupure pour l'alliage  $Hg_{1-x}Cd_xTe$  (a), et pour le superréseau  $HgTe-CdTe$  (b).

En 1983, Faurie et al [1.41] publient la réalisation de superréseaux HgTe-CdTe par épitaxie en jet moléculaire (MBE) par une méthode d'effluent en source thermique suivi ensuite par Chow où la technique MBE faisait également appel à l'évaporation laser [1.42]. Depuis, de nombreuses publications ont traité le sujet de la croissance et des aspects structurels des couches épitaxiées selon le processus mis en jeu et le type de substrat utilisé (par exemple, les publications des Mercury Cadmium Telluride Workshop 1985 et 1986 dans le Journal of Vacuum Science and Technology).

Un résultat essentiel a été obtenu par Guldner en 1983 [1.36] qui est la détermination de l'écart des bandes de trous lourds de HgTe et CdTe par magnétotransmission ; cet écart (offset)  $\Delta$  est de 40 meV ; il est un terme important des calculs de structure des bandes du superréseau.

Le faible écart du paramètre de maille de HgTe et CdTe induit malgré tout une contrainte biaxiale aux interfaces ce qui peut avoir comme effet de provoquer l'ouverture d'une bande interdite dans HgTe [1.43] et de modifier les bandes du superréseau.

Un autre aspect important est le phénomène d'interdiffusion qui peut se produire lors de la croissance, la température du substrat devant être un compromis entre celle liée à la qualité cristalline (plus élevée) et le coefficient de collage du mercure (plus bas). Il est bien connu que le mercure diffuse aisément dans CdTe [1.44]

Si les études de croissance, la caractérisation par rayons X ou photoluminescence ou la transmission optique ont fait l'objet de nombreuses publications, les propriétés de transport par contre ont été moins traitées. En 1983 Ong indique un caractère métallique à deux dimensions dans des échantillons obtenus par évaporation flash [1.45]. Ultérieurement Boero [1.46] indique l'existence d'un état accepteur résonnant et observe des oscillations Shubnikov-de Hass. Harris [1.47] et Cheng [1.48] font état d'échantillons obtenus par MBE ou MBE assistée par laser avec de hautes mobilités et l'observation de l'effet Hall quantique.

Enfin sur le plan théorique, l'accent a été mis sur le rôle joué par l'état d'interface fondamental (par opposition aux états résultants de liaisons atomiques non saturées). Liu Lin et Sham [1.49] ont montré que la sous bande associée à ces états d'interface a une dispersion dans le plan parallèle au plan du superréseau et que cette sous bande s'hybride avec les sous bandes de trous lourds. Cette sous bande modifie la bande interdite fondamentale et a un effet important sur l'interprétation des transitions optiques et sans doute aussi sur le transport.

## **I.E APPLICATIONS DES DETECTEURS D'INFRAROUGES**

Issue de plusieurs dizaines d'années de recherche, la technologie de l'analyse de l'infrarouge est largement reconnue et utilisée dans les secteurs les plus pointus de la sécurité, la police et militaire. Ces détecteurs de haute technologie, conçus pour détecter des longueurs d'ondes de 7 à 14  $\mu\text{m}$ , sont équipés d'un logiciel leur permettant d'être plus sélectifs quant à la nature de la source de chaleur, c'est à dire la reconnaissance des différentes signatures infrarouges : minérales, végétales ou animales.

On peut citer comme exemples courants :

- Astronomie
- Métrologie et cartes métrologiques.
- Imagerie médicale et scanners.
- Photos satellites et cartographie.
- Défense et actions militaires. Disposer d'informations tactiques et stratégiques fiables et récentes est un élément essentiel pour la préparation d'opérations militaires ou de sécurité.
- Détection et localisation des mines enterrées.
- Vision nocturne.
- Contrôle non destructif.
- La chasse et surtout nocturne du gibier.
- Détection infrarouge de passage et antivol.

## Références

- [1.1] G. Gaussorgues, La thermographie infrarouge, ISBN 2-7430-0290-5. Tec & Doc, Paris, 4 edition (1999).
- [1.2] G. Destefanis, Comment observer l'invisible ?, Clefs CEA, 40 (1998).
- [1.3] A. Rogalski, Infrared detectors : status and trends. Progress in Quantum Electronics, 27, 59-210 (2003).
- [1.4] T. Case, Notes on the change of resistance of certain substrates in light. Physics Reviews, 9, 305-310 (1917).
- [1.5] G. L. Destefanis, Semicond. Sci. Technol, 6 (1998).
- [1.6] P. K. Kruse, The emergence of  $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$  as a modern infrared sensitive material. Dans R. K. Willardson, et A. Beer, editors, Semiconductors and Semimetals, vol. 18. Academic Press, New York (1981).
- [1.7] Lawson, W. Nielsen, E. H. Putley et A. S. Young, Preparation and properties of HgTe and mixed crystals of HgTe-CdTe. J. Phys. Chem. Solids, 9, 325-329 (1959).
- [1.8] G. Destefanis, HgCdTe infrared diode arrays. Semicond. Sci. Technol., 6, C88 C92 (1991).
- [1.9] J. C. Peyrard, Prospective sur les besoins de défense en détecteurs infrarouge. C. R. Physique, 4(10), 1077-1082 (2003).
- [1.10] S.D .Yoo, et K. D. Kwack, Theoretical calculation of electron mobility in HgCdTe, J. Appl. Phys, 81(2), 719 (1997).
- [1.11] G. L. Hansen, J. L. Schmit, et Casselman, T. N. Energy gap versus alloy composition and temperature in  $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ . J. Appl. Phys, 53(10), 7099, (1982).
- [1.12] F. Buch, C. N. Ahlquist, J. Appl. phys.45, 1756 (1974).
- [1.13] A. Mauger et al. Phys. Rev. B12, 2412 (1975).



- [1.14] C.T. Elliott et al. J. Phys. Chem. Sol.9, 325 (1959).
- [1.15] R.R. Galaszka : Acta Physica Polonica 24, 791(1963).
- [1.16] J. Melngailis et al. : J. Appl. Phys. 44, 2647 (1973).
- [1.17] G. Bastard, D. Nozière : phys.Rev. B13, 2560 (1976).
- [1.18] D. Long et J. L. Schmitt . R. K. Willardson et A.C. Béer, editors, Semiconductors and Semimetals: Mercury Cadmium Telluride and closely related alloys, vol. 5. Academic Press, New York (1970).
- [1.19] E. O. Kane, Semimetals and semiconductors ed, R. K. Willardson et A. C. Beer vol. 1, Chap.3, 75. Academic Press, New York (1966).
- [1.20] R. Dornhaus, G. Nimtz, Springer Tracts Mod . Phys.78, 1-112, Springer, Berlin, Heidelberg (1976).
- [1.21] B. Gelmont, B. Lund, , K. Kim, G. U. Jensen, M. Shur, et T.A. Fjeldly, Monte Carlo simulation of electron transport in mercury-cadmiumtelluride, J. Appl. Phys, 71(10), 4977 (1992).
- [1.22] D. K. Ridley. Quantum processus in semiconductors, Oxford University Press, New York, 4 edition (1999).
- [1.23] E. M. Conwell, et M. O. Vassel. High field transport in n-type GaAs. Phys. Rev., 166, 797 (1968).
- [1.24] S. D. Yoo, et K. D. Kwack, Theorical calculation of electron mobility in HgCdTe. J. Appl. Phys, 81(2), 719 (1997).
- [1.25] W. Scott, Electron mobility in  $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ . J. Appl. Phys, 43(3), 1055, (1971)
- [1.26] B. R. Nag. Electron transport in compound semiconductors Springer Series in solid state sciences, 11, 50 (1980).
- [1.27] G. Gregories thèse, I.N.S.A Toulouse (1985).
- [1.28] L. Essaki, R. Tsu, IBM research note RC 2418 (1969).

- [1.29] G. H. Dohler *Jap. J. Appl. Phys.* 22, 29 (1982).
- [1.30] A.G. Milnes et D.L. Feucht. *Heterojunctions and metal semiconductor junctions.*  
Academic press, New York and London (1972).
- [1.31] L. Esaki et R. Tsu, *Superlattice and negative differential conductivity in Semiconductors*, IBM J. Res. Development, 61-65 (1970).
- [1.32] R. Dingle, A. C. Gossard, et W. Wiegmann, *Direct Observation of Superlattice Formation in a Semiconductor Heterostructure*, *Phys. Rev. Lett.* 34, 1327 - 1330 (1975).
- [1.33] G. Bastard, *Theoretical investigations of superlattice band structure in the envelope-function approximation*, *Phys. Rev. B* 25, 7584 – 7597 (1982).
- [1.34] H. Sakali, L.L. Chang, G.A. Sal-Halasz, C.A. Chang et L. Esaki *Sol. Stat. Comm.* 26, 5819 (1978).
- [1.35] J. N. Schulman et T. C. Mc Gill *Appl. Phys. Lett.* 34 (10), 663, (1979).
- [1.36] Y. Guldner, G. Bastard, J. P. Vieren, M. Voos, J. P. Faurie et A. Million *Phys. Rev. Lett.* 51(10), 907 (1983).
- [1.37] Dornhaus et G. Nimtz, *The properties and applications of the Hg<sub>1-x</sub>Cd<sub>x</sub>Te alloy system*, 78, Springer –Verlag (1976).
- [1.38] D. L. Smith, T. C. Mc Gill, J. N. Schulman *Appl. Phys. Lett.* 43, (2), 180 (1983).
- [1.39] C. Junhao, X. Shichou et T. Dingyuan *App. Phys. Lett.* 43, (11), 1064 (1983)
- [1.40] G. Bastard *Phys. Rev ; B*, 24 (10), 5693 (1981).
- [1.41] J. P. Faurie, A. Million, et J. Piaguet *Appl. Phys. Lett.* 41 (8), 713 (1982)
- [1.42] P. P. Chow, et D. Johnson *J. Vac. Sci. Technol.* A3(1), 67 (1985).
- [1.43] J. N. Schulman, Y. Chung Chang *J. Vac. Sci. Technol.* A4(4), 2114 (1986).
- [1.44] K. Zanio, *J. Vac. Sci. Technol.* A4 (4), 2106 (1986).
- [1.45] N. P. Ong et G. Kote *Phys. Rev. B ;* 28, 4, 2289 (1983).

- [1.46] F. J. Boero et N.P.Ong, J. N. Cheung sol. Stat. Comm. 54, 1, 35 (1986).
- [1.47] K.A. Harris J. Vac. Sci. Technol. A4(4), 2061 (1986).
- [1.48] J. T. Cheung, G. Nizawa J. Vac. Sci. Technol. A4(4), 101 (1986).
- [1.49] Y.R. Lin-Liu et L. T. Sham Phys. Rev. B; 32, 8, 5561 (1985).

## Chapitre II

# CADRE THEORIQUE

### SOMMAIRE

<b>II.A Introduction.....</b>	<b>39</b>
<b>II.B Théorie de transport de Boltzmann .....</b>	<b>39</b>
II.B.1 La fonction de distribution et l'équation de Boltzmann .....	39
II.B.2 Résolution de l'équation de Boltzmann dans l'approximation du temps de relaxation .....	40
II.B.3 Effet Hall .....	43
II.B.4 Effet Seebeck .....	46
II.B.4.a Cas de non dégénérescence .....	48
II.B.4.b Cas de dégénérescence forte .....	48
<b>II.C Modélisation de la mobilité et mécanismes de diffusion .....</b>	<b>48</b>
<b>II.D Effet Shubnikov-de Haas et gaz d'électron bidimensionnel .....</b>	<b>52</b>
II.D.1 Energie et singularités de la densité d'états sous champ magnétique .....	52
II.D.2 Effet Shubnikov -de Haas .....	55
II.D.3 Mécanisme de l'effet S.D.H .....	56
II.D.4 Gaz d'électrons à deux dimensions.....	56
<b>II.E Structure des bandes du superréseau .....</b>	<b>58</b>
II.E.1 Structure des bandes de CdTe et HgTe .....	59
II.E.2 Approximation de la fonction enveloppe et relations de dispersion .....	61
II.E.2.a Relation de dispersion suivant $K_z$ .....	61
II.E.2.b Relation de dispersion suivant $K_p$ .....	62
II.E.3 Résultats des calculs dans la direction $k_z$ ( $k_p=0$ ) Influence de divers paramètres .....	63
II.E.3.a Effet de la période du superréseau sur la structure des bandes et $E_g$ .....	63
II.E.3.b Effet de la température sur $E_g$ .....	66
II.E.3.c Influence de l'écart $\Delta$ des bandes de valence .....	66

## II.A INTRODUCTION

La clé de la compréhension des dispositifs pour l'optoélectronique réside dans le développement de modèles permettant de mettre en évidence leurs caractéristiques physiques. A cet effet, nous décrirons dans ce chapitre le transport électronique dans un semi-conducteur, ainsi que les principaux effets de transport tel que la conductivité, la mobilité électrique, l'effet Hall et l'effet Seebeck. La méthode théorique la plus convenable pour procéder à une telle étude est la méthode fondée sur l'équation cinétique de Boltzmann. La résolution de cette équation ainsi que ces principaux résultats sont décrits dans ce chapitre

Dans ce chapitre, nous allons décrire aussi le cas d'un système à une température très basse et sous champ magnétique, un effet physique lié à ce système est l'effet Shubnikov- de Haas, avant de décrire le modèle théorique de la structure des bandes du superréseau dans le formalisme de la fonction enveloppe. Les relations de dispersion dans la direction de croissance du superréseau et le plan des couches sont établis.

## II.B THEORIE DE TRANSPORT DE BOLTZMANN

### II.B.1 La fonction de distribution et l'équation de Boltzmann

Soit  $f(\vec{r}, \vec{k}, t)$  la densité en phase (ou distribution) telle que le nombre de particules possédant à l'instant  $t$  la position  $\vec{r}$  à  $d^3\vec{r}$  près et l'impulsion  $\vec{k}$  à  $d^3\vec{k}$  près à l'instant  $t$  est  $f(\vec{r}, \vec{k}, t)d^3\vec{r} d^3\vec{k}$  : Ceci représente le nombre de particules dans l'élément de volume  $d^3\vec{r} d^3\vec{k}$  de l'espace des phases d'un corps à l'instant  $t$ . La densité en phase est de type Maxwell - Boltzmann ou Fermi - Dirac selon le système considéré. L'équation de transport de Boltzmann, qui régit l'évolution de  $f(\vec{r}, \vec{k}, t)$  peut être obtenue de la façon suivante. Entre les instants  $t$  et  $t+dt$ , les points représentatifs se translatent continûment vers l'élément de volume  $d^3\vec{r}' d^3\vec{k}'$  égal à  $d^3\vec{r} d^3\vec{k}$  au seconde ordre près, sous l'action des forces extérieures et de la diffusion.

Cependant par suite des collisions certaines particules sont perdus d'autre sont gagnées dans ce volume la conservation du nombre total de particules n'imposant que la relation intégrale, indépendante du temps :

$$\int f(\vec{r}, \vec{k}, t) d^3\vec{r} d^3\vec{k} = \text{constante} \quad (2.1)$$

La comparaison entre le nombre des particules autour de  $(\vec{r}, \vec{k})$  à  $d^3\vec{r} d^3\vec{k}$  près à  $t$ , et celui autour de  $(\vec{r}+d\vec{r}, \vec{k}+d\vec{k})$  à  $d^3\vec{r} d^3\vec{k}$  près à l'instant  $t + dt$ , entraîne que :

$$f(\vec{r}+d\vec{r}, \vec{k}+d\vec{k}, t+dt) = f(\vec{r}, \vec{k}, t) + \left( \frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{coll}} dt \quad (2.2)$$

$\left( \frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{coll}}$  Étant la variation du nombre de particules due aux collisions. Ceci donne, au premier ordre l'équation de Boltzmann [2.1]:

$$\frac{\partial f}{\partial \vec{r}} \frac{d\vec{r}}{dt} + \frac{\partial f}{\partial \vec{k}} \frac{d\vec{k}}{dt} + \frac{\partial f}{\partial t} = \left( \frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{coll}} \quad (2.3)$$

Pour une particule soumise à la force de Lorentz :  $\vec{F} = q(\vec{E} + \vec{v} \wedge \vec{B})$  dans le régime stationnaire elle s'écrit :

$$\vec{v} \cdot \vec{\nabla}_r f + \frac{1}{\hbar} \vec{F} \cdot \vec{\nabla}_k f = - \frac{f - f_0}{\tau(\vec{k})} \quad (2.4)$$

Le premier terme exprime la variation de densité en phase dans un système spatialement inhomogène, lorsque le point considéré se déplace, ce terme est lié à la diffusion. Le deuxième terme indique la variation de  $f$  sous l'effet de la force électromagnétique appliquée à une charge  $q$ .

Le terme de collision est difficile à calculer. On utilise l'approximation dite du temps de relaxation, selon la quelle :

$$\left( \frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{coll}} = - \frac{f - f_0}{\tau(\vec{k})} \quad (2.5)$$

Avec  $\tau(\vec{k})$  le temps nécessaire pour arriver à l'équilibre.

### II.B.2 Résolution de l'équation de Boltzmann dans l'approximation du temps de relaxation

La résolution détaillée est décrite dans l'annexe (A) à la fin de ce mémoire.

Nous écrivons l'équation de Boltzmann dans l'approximation du temps de relaxation comme :

$$\vec{v} \cdot \overrightarrow{\text{grad}}_r f + \frac{1}{\hbar} \vec{F} \cdot \overrightarrow{\text{grad}}_k f = - \frac{f - f_0}{\tau(\vec{k})} \quad (2.6)$$

En tenant compte des hypothèses suivantes :

- Régime stationnaire :  $\partial_t f = 0$ .
- Bande sphérique et parabolique :  $m^* = \text{constante}$ .
- Le champ électrique  $E_x$  faible
- Le champ magnétique  $\vec{B} = B_z \vec{e}_z$  d'amplitude arbitraire.

La solution  $f$  s'écrit sous la forme :  $f = f_0 + (\vec{v} \cdot \vec{G})$  (2.7)

$\vec{G}$  est un vecteur vérifiant l'équation suivante :

$$\vec{G} + \frac{q\tau}{m^*} (\vec{B} \wedge \vec{G}) = \vec{G}_0 \quad \text{Avec : } \vec{G}_0 = \frac{\partial f_0}{\partial E} (\tau D \text{grad}_{\vec{r}} T - q \tau \vec{E}) \quad (2.8)$$

Sous forme tensorielle on définit  $\vec{G}$  comme :

$$G_i = \sum_j g_{ij} G_{0j} \quad (2.9)$$

$$\text{C'est-à-dire : } \hat{G} = \hat{g} \hat{G}_0 \quad \text{Avec : } \hat{g} = \begin{pmatrix} \frac{1}{1 + \omega_c^2 \tau^2} & \frac{\omega_c \tau}{1 + \omega_c^2 \tau^2} & 0 \\ \frac{-\omega_c \tau}{1 + \omega_c^2 \tau^2} & \frac{1}{1 + \omega_c^2 \tau^2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (2.10)$$

Le vecteur densité de courant est défini comme:

$$\vec{J} = \frac{2q}{(2\pi)^3} \int \vec{v} f d\vec{k} = \frac{2q}{(2\pi)^3} \int \vec{v} (f_0 + \vec{v} \cdot \vec{G}) d\vec{k} = \frac{2q}{(2\pi)^3} \int \vec{v} (\vec{v} \cdot \vec{G}) d\vec{k} \quad (2.11)$$

Dans le cas d'un gradient de température nul ( $\text{grad}_{\vec{r}} T = 0$ ) on montre que:

$$\vec{v} \cdot \vec{G} = \vec{v} \cdot \hat{g} \vec{G}_0 = (-q\tau \frac{\partial f_0}{\partial E}) [v_x (\frac{\epsilon_x}{1 + \omega_c^2 \tau^2} + \frac{\epsilon_y \omega_c \tau}{1 + \omega_c^2 \tau^2}) + v_y (-\frac{\epsilon_x \omega_c \tau}{1 + \omega_c^2 \tau^2} + \frac{\epsilon_y}{1 + \omega_c^2 \tau^2}) + v_z \epsilon_z] \quad (2.12)$$

En portant cette expression dans (2.11) et faisant nos calculs dans le cas d'une bande sphérique ou isotrope nous montrerons que:

$$\vec{J} = \vec{J}_x + \vec{J}_y + \vec{J}_z$$

Avec :

$$\begin{cases} J_x = \frac{q^2 \epsilon_x}{m^*} \left\langle \frac{\tau}{1 + \omega_c^2 \tau^2} \right\rangle + \frac{q^2 \epsilon_y}{m^*} \left\langle \frac{\omega_c \tau^2}{1 + \omega_c^2 \tau^2} \right\rangle \\ J_y = -\frac{q^2 \epsilon_x}{m^*} \left\langle \frac{\omega_c \tau}{1 + \omega_c^2 \tau^2} \right\rangle + \frac{q^2 \epsilon_y}{m^*} \left\langle \frac{\tau}{1 + \omega_c^2 \tau^2} \right\rangle \\ J_z = \frac{q^2 \epsilon_z}{m^*} \langle \tau \rangle \end{cases} \quad (2.13)$$

$\langle X(E) \rangle$  Étant la moyenne de  $X(E)$ , elle est défini comme :  $\langle X(E) \rangle = \frac{1}{3\pi^2} \int_0^\infty (-\frac{\partial f_0}{\partial E}) X(E) k^3 dE$

Sous forme tensorielle  $\vec{J}$  s'écrit :

$$\vec{J}_i = \sum_j \sigma_{ij} \vec{\varepsilon}_j ; \text{ c'est-à-dire : } \vec{J} = \hat{\sigma} \vec{\varepsilon} \quad (2.14)$$

$\hat{\sigma}$  est le tenseur de la conductivité :

$$\begin{pmatrix} J_x \\ J_y \\ J_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} & 0 \\ \sigma_{yx} & \sigma_{yy} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varepsilon_x \\ \varepsilon_y \\ \varepsilon_z \end{pmatrix} \quad \text{Avec : } \begin{cases} \sigma_{xx} = \sigma_{yy} = \frac{q^2}{m^*} \left\langle \frac{\tau}{1 + \omega_c^2 \tau^2} \right\rangle \\ \sigma_{xy} = -\sigma_{yx} = \frac{q^2}{m^*} \left\langle \frac{\omega_c \tau^2}{1 + \omega_c^2 \tau^2} \right\rangle \\ \sigma_{zz} = \frac{q^2}{m^*} \langle \tau \rangle = \sigma_0 \end{cases} \quad (2.15)$$

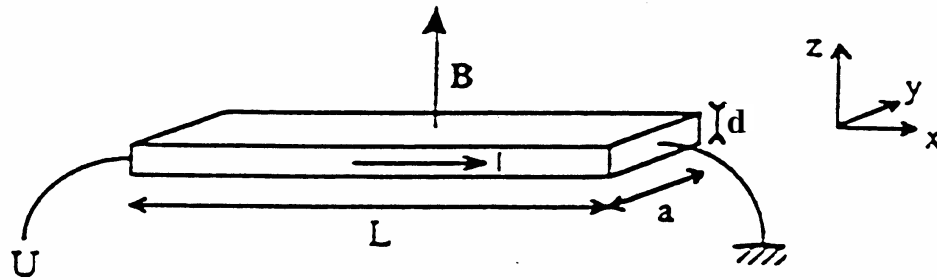
A partir de ce résultat on peut déterminer le tenseur de résistivité  $\hat{\rho}$  telle que :

$$\vec{\varepsilon} = \hat{\rho} \vec{J} \quad (2.16)$$

$$\begin{cases} \rho_{xx} = \rho_{yy} = \frac{\sigma_{xx}}{\sigma_{xx}^2 + \sigma_{xy}^2} \\ \rho_{xy} = -\rho_{yx} = -\frac{\sigma_{xy}}{\sigma_{xx}^2 + \sigma_{xy}^2} \\ \rho_{zz} = \frac{1}{\sigma_{zz}} \end{cases} \quad (2.17)$$

### II.B.3 Effet Hall

Soit un échantillon parallélépipédique long et mince placé dans un champ magnétique  $\vec{B}(0,0,B_z)$  (Figure II.1).

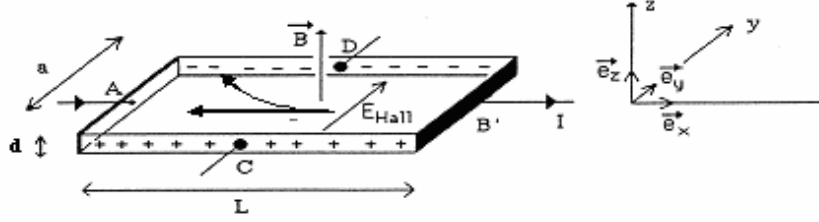


**Figure II.1:** Schéma de l'échantillon en géométrie de Hall

En appliquant un champ électrique  $\vec{\varepsilon}(\varepsilon_x, 0, 0)$ , entre les extrémités de l'échantillon, une densité de courant  $J_x$  est induite le long du barreau. Les porteurs sont soumis à la force :  $\vec{F} = q(\vec{\varepsilon} + \vec{v} \wedge \vec{B})$ .



Pour simplifier, prenons le cas d'un échantillon de type n où les porteurs sont des électrons. Juste après l'application de  $\vec{E}$ , sous  $\vec{B}$ , les électrons sont déviés dans la direction  $+y$  (figure II.2) et viennent s'accumuler sur une face du barreau, un excès de charges positives s'établit sur l'autre face en regard – par influence électrostatique- jusqu'à ce qu'un champ électrique  $E_y$  appelée champ de Hall (figure II .2) compense l'action de la force  $q \vec{v} \wedge \vec{B}$ . Ainsi un courant transversal ne peut échapper du barreau d'où :  $J_y = 0$ .



**Figure II.2:** Interprétation de l'effet Hall

La quantité  $R_H = \frac{E_y}{J_x B_z}$  s'appelle la constante de Hall. Dans ce qui suit on va donner les expressions de  $R_H$  trouvées, les calculs détaillés sont dans l'annexe (B).

La constante de Hall est donnée par les expressions :

$$R_H = \frac{1}{B} \frac{\sigma_{xy}}{\sigma_{xy}^2 + \sigma_{xx}^2} \quad (2.18)$$

$$R_H = \frac{1}{B} \frac{\sigma_{xy}}{\sigma_{xy}^2 + \sigma_{xx}^2} = \frac{1}{B \sigma_0} \frac{\left\langle \frac{\omega_c \tau^2}{1 + \omega_c^2 \tau^2} \right\rangle \langle \tau \rangle}{\left\langle \frac{\tau}{1 + \omega_c^2 \tau^2} \right\rangle^2 + \left\langle \frac{\omega_c \tau^2}{1 + \omega_c^2 \tau^2} \right\rangle^2} \quad (2.19)$$

Où  $\tau$  est le temps de relaxation,  $\omega_c = \frac{qB}{m^*}$  pulsation cyclotron. Et  $\sigma_0 = \frac{q^2}{m^*} \langle \tau \rangle$  la conductivité sans champ magnétique.

- **Dans le cas d'un seul type de porteur (régime extrinsèque)**

➤ Dans le cas d'un champ magnétique faible ( $\omega_c \tau \ll 1$ ) :

L'équation (2.19) devient :

$$R_H = \frac{r_H}{q \langle 1 \rangle} = \frac{r_H}{q n} \quad (2.20)$$

Avec :  $r_H = \frac{\langle 1 \rangle \langle \tau^2 \rangle}{\langle \tau \rangle^2}$  facteur de diffusion  $1 \leq r_H \leq 2$ .

Pour un cas simple du type n :  $r_H = 1$ , d'où :  $R_H = -\frac{1}{n e}$  . (2.21)

Dans l'approximation du temps de relaxation :  $\tau(E) = E^p = E^{s-1/2}$  . La valeur de  $r_H$  dépend du mécanisme de diffusion dans le semi-conducteur comme le montre le tableau en dessous.

**Tableau II.1** : Valeurs des coefficients de diffusion  $s$ ,  $p$ ,  $r_H$  par rapport au type de diffusion dans un semiconducteur.

Type de diffusion	s	p	$r_H$
Diffusion par les phonons acoustiques	0	-1/2	$r_H = 3\pi/8 = 1,18$
Diffusion par les phonons optiques	1	1/2	$r_H = 45\pi/128 = 1,13$
Diffusion par les ions d'impuretés.	2	3/2	$r_H = 315\pi/512 = 1,93$

➤ Dans le cas d'un champ magnétique fort ( $\omega_c \tau \gg 1$ ) :

$$R_H \approx \frac{1}{B \cdot \sigma_0} \frac{\left\langle \frac{1}{\omega_c} \right\rangle \langle \tau \rangle}{\left( \left\langle \frac{1}{\omega_c} \right\rangle^2 \right)} \quad (2.22)$$

On montre que :  $R_H \approx \frac{1}{q \langle \tau \rangle}$  (2.23)

Pour les électrons ( $q=-e$ ) on aura:  $R_H = -\frac{1}{n \cdot e}$  . (2.24)

- Dans le cas de deux types de porteurs (régime intrinsèque)

$$R_H = \frac{1}{B} \frac{\sigma_{xy}^e + \sigma_{xy}^t}{\left( \sigma_{xx}^e + \sigma_{xx}^t \right)^2 + \left( \sigma_{xy}^e + \sigma_{xy}^t \right)^2} \quad (2.25)$$

Dans le cas d'un champ magnétique faible :  $R_H = \frac{e}{\sigma_0^2} (r_i p \mu_i^2 - r_e n \mu_e^2)$

En prenant  $r_e = r_i = r_H$  et  $b = \frac{\mu_e}{\mu_i}$ , on a :  $R_H = \frac{r_H}{e} \cdot \frac{p - n b^2}{(p + n b)^2}$  (2.26)

Dans la plupart des semi-conducteurs, la mobilité des électrons est plus grande que la mobilité des trous : ( $\mu_e \gg \mu_h$ ) c'est-à-dire que :  $b \gg 1$ . La constante de Hall s'annule pour :  $p = n b^2$ .

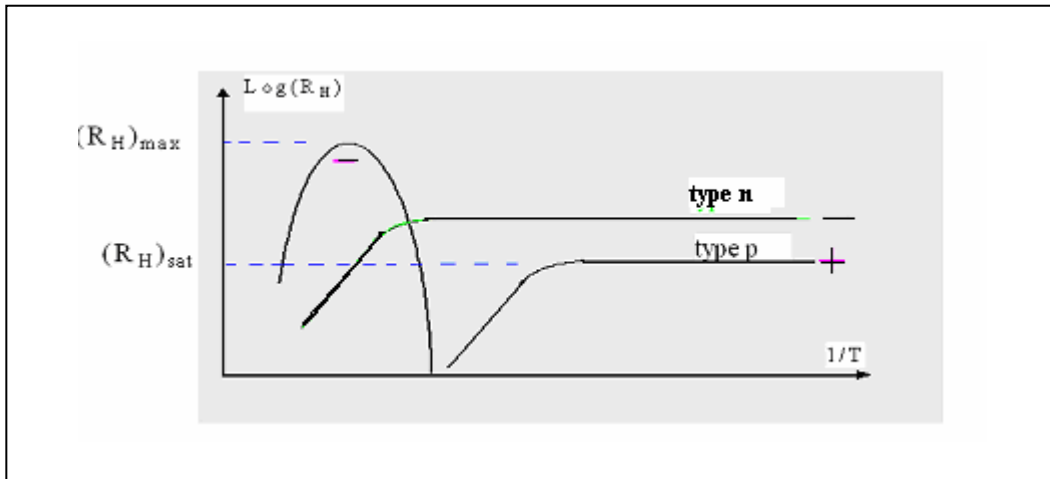
Pour un rapport des mobilité ( $b = 10$ ), la constante de Hall s'annulera pour  $p = 100n$ , cela veut dire qu'une densité d'électrons  $n = p/100$  est suffisante pour annuler  $R_H$ .

La constante de Hall est négative si  $p < n b^2$ , pour un rapport  $b = 10$   $R_H$  est négative pour  $n > p/100$ .

La constante de Hall est positive si  $p > n b^2$ , pour un rapport  $b = 10$   $R_H$  est positif pour  $n < p/100$ .

- **Cas d'un semi-conducteur type p**

Dans un semi-conducteurs de type p ( $R_H > 0$ ), on assiste à une inversion de signe de  $R_H$  en fonction de la température. Cette inversion du type de semi-conducteur de type p au type n aura lieu autour d'une valeur de  $n$  tel que :  $p = n b^2$ . Le comportement de  $R_H$  en fonction de  $\frac{1}{T}$  pour deux semi-conducteurs un de type n et l'autre de type p est schématisé sur la figure II.3.



**Figure II.3:** Variation de  $\log R_H$  en fonction de  $1/T$  pour les deux type n et p.

Considérons le model suivant : le semi-conducteur contient une concentration d'accepteurs  $N_A$  ionisés dans tout le domaine de la température. L'équation de neutralité électrique s'écrit :  $p = N_A + n$ .

Dans le domaine extrinsèque et à basse température  $p \approx N_A$  on a la relation :

$$(R_H)_{\text{sat}} = \frac{r_H}{|e|N_A} \quad (2.27)$$

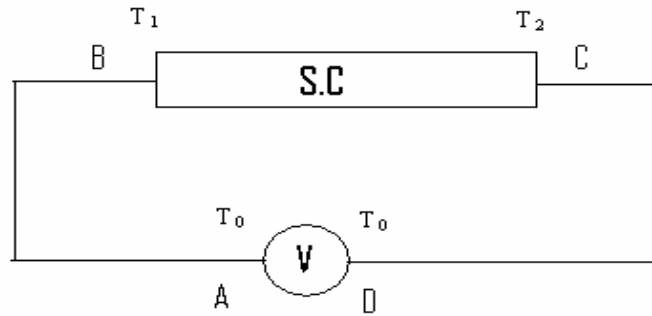
De l'équation (2.23) on a :

$$(R_H)_{\text{max}} = \frac{r_H}{|e|N_A} \cdot \frac{(b-1)^2}{4b} \quad (2.28)$$

D'où le rapport :

$$\frac{(R_H)_{\text{max}}}{(R_H)_{\text{sat}}} = \frac{(b-1)^2}{4b} \quad (= \frac{b}{4} \text{ pour } b \gg 1) \quad (2.29)$$

#### II.B.4 Effet Seebeck



**Figure II.4:** Circuit de mesure du pouvoir thermoélectrique.

Soit un semi-conducteur d'extrémités portées à des températures  $T_1$  et  $T_2 = T_1 + dT$  différentes, il apparaît alors dans un circuit fermé un courant dit courant thermoélectrique.

Si on provoque dans ce circuit une rupture (ou on insère un voltmètre), on constate qu'entre les extrémités de ce circuit il apparaît une différence de potentiel que l'on appelle force thermoélectrique. Cette tension  $u$  est décelée par un voltmètre : c'est l'effet Seebeck [2.2].

Dans ce qui suit, on va décrire les principaux résultats trouvés lors du calcul du pouvoir thermoélectrique, décrit en détail dans l'annexe (C).

$$u = \oint \varepsilon_x dx ; \varepsilon_x : \text{champ électrique créée par le gradient de température.}$$

On avait trouvé lors de la résolution de l'équation de Boltzmann que :

$$\vec{J} = \frac{2q}{(2\pi)^3} \int \vec{v} (\vec{v} \cdot \vec{G}) d\vec{k}$$

Si  $\vec{B} = \vec{0}$  :

$$J_x = \frac{2q}{(2\pi)^3} \int v_x^2 \frac{\partial f_0}{\partial E} \tau (D \frac{dT}{dx} - qE_x) d\vec{k}$$

On montre que :

$$J_x = \frac{q^2}{m^*} \langle \tau \rangle \epsilon_x - \frac{q}{m^* T} \langle E \cdot \tau \rangle \frac{dT}{dx} + \frac{q}{m^* T} E_F \langle \tau \rangle \frac{dT}{dx} - \frac{q}{m^*} \frac{dE_F}{dT} \langle \tau \rangle \frac{dT}{dx} \quad (2.30)$$

$J_x = 0$ , car le voltmètre possède une impédance infiniment grande. D'où :

$$\epsilon_x = \frac{1}{qT} \left[ \frac{\langle E \cdot \tau \rangle}{\langle \tau \rangle} - E_F \right] \frac{dT}{dx} + \frac{1}{q} \frac{dE_F}{dx} \quad (q = \pm e) \quad (2.31)$$

On définit  $\alpha$  le coefficient ou la force thermoélectrique par la relation :

$$\alpha = \frac{1}{qT} \left[ \frac{\langle E \cdot \tau \rangle}{\langle \tau \rangle} - E_F \right] \quad (2.32)$$

Posons :  $X = \frac{E}{k_B T}$  ;  $\eta = \frac{E_F}{k_B T}$ , le coefficient thermoélectrique  $\alpha$  est :

$$\alpha = \pm \frac{k_B}{e} \left[ \frac{\langle X \cdot \tau \rangle}{\langle \tau \rangle} - \eta \right] \quad (2.33)$$

D'où :

$$\epsilon_x = \alpha \frac{dT}{dx} + \frac{1}{q} \frac{dE_F}{dx} \quad (2.34)$$

$$\text{et : } u = \int_A^D \epsilon_x dx = \int_A^D \alpha dT + \frac{1}{q} \int_A^D dE_F$$

$$\text{Or : } \frac{1}{q} \int_A^D dE_F = E_F(D) - E_F(A) = 0$$

Car les nœuds A et D ont la même température T c'est-à-dire ils ont le même niveau de Fermi.

$$u = \int_{T_0}^{T_1} \alpha_M dT + \int_{T_1}^{T_2} \alpha_{SC} dT + \int_{T_2}^{T_0} \alpha_M dT$$

$\alpha_M$  : Coefficient thermique du métal.

$\alpha_{SC}$  : Coefficient thermique du S.C.

$$u = \int_{T_2}^{T_1} \alpha_M dT + \int_{T_1}^{T_2} \alpha_{SC} dT = \int_{T_1}^{T_2} \alpha_{SC} dT - \int_{T_1}^{T_2} \alpha_M dT$$

D'où :

$$\frac{du}{dT} = \alpha_{s.c} - \alpha_M \quad (2.35)$$

En pratique on a :  $\alpha_M \sim \frac{\alpha_{s.c}}{100}$  on mesure alors :

$$\alpha_{s.c} = \frac{\Delta u}{\Delta T} = \frac{u_A - u_D}{T_2 - T_1} \quad (2.36)$$

#### II.B.4.a Cas de non dégénérescence : ( $E_F \ll k_B T$ )

Dans le cas de la non dégénérescence la fonction de distribution de Fermi- Dirac tend vers la fonction de distribution de Maxwell- Boltzmann et  $\tau \sim E^{s-\frac{1}{2}}$  (s dépend du mécanisme de diffusion dans le semi-conducteur)

On montrera que :

$$\alpha = \pm \frac{k_B}{e} [s+2-\eta] \quad ; \eta = \frac{E_F}{k_B T} \quad (2.37)$$

La mesure de  $\alpha = \Delta u / \Delta T$  nous permet de remonter à la valeur de s (s= 0,1,2, ... ) ce qui nous permettra de déterminer le type du mécanisme de diffusion dans le semi-conducteur.

#### II.B.4.b Cas de dégénérescence forte : ( $E_F \gg K_B T$ )

En 1<sup>ère</sup> approximation à basse température ( $T \rightarrow 0$ ), la dérivé  $\left( -\frac{\partial f_0}{\partial E} \right)$  tend vers la fonction de Dirac :  $\delta(E-E_F)$ . On montre que :

$$\alpha = \pm \frac{\pi^2 k_B^2 T}{3 e E_F} (s+1) \quad (2.38)$$

La mesure de  $\alpha$  va nous permettre d'avoir une information sur le mécanisme de diffusion.

### II.C MODELISATION DE LA MOBILITE ET MECANISMES DE DIFFUSION

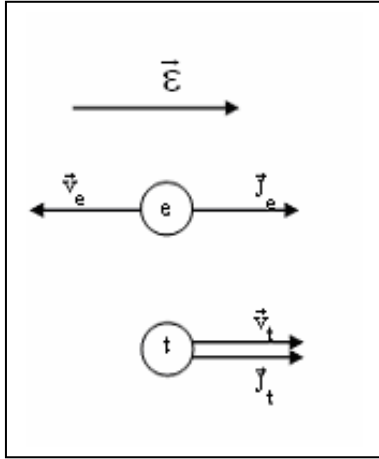
La figure II.5 montre le mouvement des électrons et des trous dans le champ électrique  $\vec{E}$  : les vitesses des électrons et trous sont opposées mais leurs densité de courant ont le même sens, celui de  $\vec{E}$ . La conductivité totale s'écrit :

$$\sigma_0 = \frac{J_e + J_t}{E} = |e| \left( n \frac{v_e}{E} + p \frac{v_t}{E} \right) = |e| (n\mu_e + p\mu_h) \quad (2.39)$$

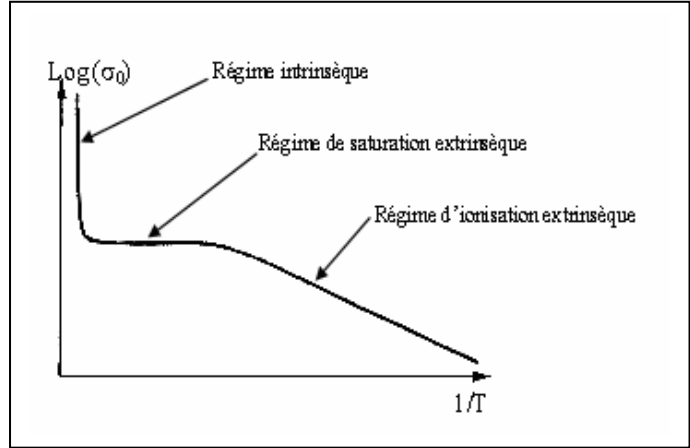
$\mu_e$  et  $\mu_h$  sont respectivement la mobilité des électrons et celle des trous.

Posant :  $b = \frac{\mu_e}{\mu_h}$  on a donc :  $\sigma_0 = |e|(p + nb)\mu_h$  (2.40)

Ainsi, la conductivité dépend de la mobilité et de la concentration des porteurs, qui dépendent tout les deux de la température.



**Figure II.5:** Mouvement des porteurs de charge dans un champ électrique



**Figure II.6:** Variation de  $\text{Log}(\sigma_0)$  avec  $1/T$  dans les semi-conducteurs

La figure II.6 donne l'allure de la conductivité en fonction de l'inverse de la température.

Pour un semi-conducteur de type n, la combinaison de la conductivité sans champ magnétique  $\sigma_0 = ne\mu$  et la constante de Hall  $|R_H| = \frac{r_H}{n|e|}$  donne la mobilité de Hall :

$$\mu_H = \sigma_0 R_H \quad (2.41)$$

La mobilité des porteurs dans un semi-conducteur est liée directement aux différents modes de diffusion. On a  $\mu_H = \sigma_0 |R_H| = n|e|\mu \frac{r_H}{n|e|}$

$$\text{D'où [2.1] :} \quad \mu_H = r_H \mu \quad (2.42)$$

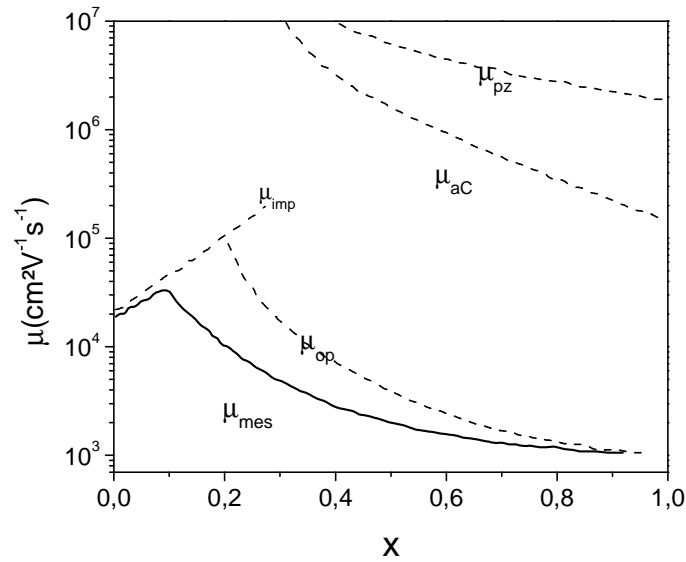
$\mu$  est la mobilité d'entraînement des porteurs (drift mobility).

$\mu_H$  est la mobilité de Hall (Hall mobility).

Aux basses températures, la diffusion par les impuretés ionisées contrôle la mobilité des porteurs.

Aux hautes températures et à la température ambiante, les mécanismes de diffusion par phonons (mode acoustique, piézoélectrique ou optique polaire) contrôlent la mobilité intrinsèque.

Dans le cas de  $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$  ( $0.2 < x < 0.22$ ) la diffusion par les impuretés ionisées et par le mode polaire optique contrôlent la mobilité ambiante (figure II.7)



**Figure II.7:** Variation de la mobilité et la mobilité mesurée avec la composition  $x$  [2.3].

La figure II.7 montre la mobilité et la mobilité mesurée  $\mu_{\text{mes}}$  dans  $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$  à la température ambiante, en fonction de  $x$  comparée à la mobilité calculée en considérant les différents mécanismes de diffusion Scott [2.3].

Les relations entre la mobilité et la température, pour les différents processus de diffusion sont données comme suit :

- La mobilité due à la diffusion par phonons acoustiques due à une déformation de potentiel est donnée par [2.4]:

$$\mu_{\text{ac}} = \frac{3 \cdot 10^{-5} C_1}{\left(\frac{m^*}{m_0}\right)^{5/2} T^{3/2} E_{\text{ac}}^2} \quad (2.43)$$

Où :  $C_1 = 6,97 \cdot 10^{10} \text{ N.m}^{-2}$  [2.5] est la constante élastique longitudinale,  $E_{\text{ac}} = 9,5 \text{ eV}$  [2.5] est le potentiel de déformation pour les phonons acoustiques.

- La mobilité due à la diffusion par phonons acoustiques liés à une déformation piézo-électrique est donnée par la relation [2.2]:



$$\mu_{pz} = 2.6 \frac{\epsilon_s}{(m/m_0)^{3/2} k^2 (T/100)^{1/2}} \quad (2.44)$$

$\epsilon_s$  est la constante statique diélectrique dans le semi-conducteur, elle est donné par la relation [2.6]:

$$\epsilon_s = 20,5 - 15,5 x + 5,7 x^2$$

k' est donné par la formule :  $k' = \frac{e_{pz}}{\sqrt{e_{pz}^2 + \epsilon_0 \cdot \epsilon_s \cdot C_1}}$

Où  $\epsilon_0$  est la constante diélectrique dans le vide et  $e_{pz}$  est la constante piézoélectrique.

- La mobilité due à la diffusion par les phonons optiques est donnée par la relation [2.2]:

$$\mu_{op} = 2.6 \cdot 10^5 \frac{\exp\left(\frac{\theta_D}{T}\right)}{\alpha \cdot (m^*/m_0) \cdot \left(\frac{\theta_D}{k'}\right)} \quad (2.45)$$

Où  $\theta_D$  est la température de Debye et  $\alpha$  la constante de couplage sans dimension donnée

par :

$$\alpha = \frac{1}{137} \sqrt{\frac{mc^2}{2k_B \theta}} \left( \frac{1}{\epsilon_{op}} - \frac{1}{\epsilon_s} \right) \quad (2.46)$$

$\epsilon_{op}$  est la constante diélectrique optique.  $\alpha$  est égal à 0,39 pour CdTe et 0,05 pour HgTe [2.7], les températures de Debye de HgTe et CdTe sont respectivement égales à 147,5 K [2.8] et 160 K [2.9].

Quand l'alliage  $Hg_{1-x}Cd_xTe$  est un système à deux modes, les modes optiques associé à CdTe et à HgTe sont observés. Nous avons calculé la mobilité en premier lieu en substituant les valeurs des paramètres appropriés de CdTe dans la relation (2.45), puis en substituant ceux de HgTe et finalement en moyennant les deux résultats à l'aide de l'expression [2.7]:

$$\frac{1}{\mu_{op}} = \frac{x}{\mu(CdTe)} + \frac{1-x}{\mu(HgTe)} \quad (2.47)$$

- La mobilité due à la diffusion par les impuretés  $\mu_{imp}$  est donnée par l'équation de Brooks-Herring [2.10]:

$$\mu_{imp} = \frac{3,28 \cdot 10^{15} \epsilon_s^2 T^{3/2}}{(N_a + N_d) (m^*/m_0)^{1/2} \left[ \ln(b+1) - \frac{b}{b+1} \right]} \quad (2.48)$$

Où:  $b = \frac{1,2910^{14} (m^*/m_0) \epsilon_s T^2}{N^*}$ ,  $N^*$  est la densité d'écrantage effective donnée par :

$$N^* = n + \frac{(n + N_a)(N_d - N_a - n)}{N_d}, \quad N_a \text{ et } N_d \text{ sont respectivement la concentration des}$$

accepteurs et donneurs.

- La mobilité totale est calculée par la relation qui découle de la règle de Matthiessen :

$$\frac{1}{\mu} = \sum_i \frac{1}{\mu_i} \quad (2.49)$$

$\mu_i$  est la mobilité individuelle calculée pour les différents processus de diffusion et  $i$  indique le type de processus de diffusion pris en compte.

## II.D EFFET SHUBNIKOV-DE HAAS ET GAZ D'ELECTRONS BIDIMENSIONNEL

### II. D.1 Energie et singularités de la densité d'états sous un champ magnétique

Le semi-conducteur est soumis à un champ magnétique  $\vec{B}=(0,0,B_z)$ . Dans la description quantique, le hamiltonien des électrons sous champ magnétique s'écrit :

$$H = \frac{(\vec{p} - e\vec{A})^2}{m^*} \quad (2.50)$$

Où  $\vec{A}$  est le vecteur potentiel vecteur lié à l'induction magnétique  $\vec{B}$  par la relation :  $\vec{B} = \vec{\nabla} \wedge \vec{A}$  et  $e$  est la charge de l'électron.

On peut choisir pour le vecteur potentiel la jauge :

$$\vec{A}=(A_x, A_y, A_z) = (-yB_z, 0, 0)$$

Les calculs en détail de ce paragraphe sont dans l'annexe (D) à la fin de ce mémoire.

Posons :  $\vec{\pi} = \vec{p} - e\vec{A}$

$$\text{D'où : } \begin{cases} \pi_x = p_x - eA_x \\ \pi_y = p_y - eA_y \\ \pi_z = p_z - eA_z \end{cases} \quad (2.51)$$

Le calcul des commutateurs  $[\pi_x, \pi_y]$  ;  $[\pi_x, \pi_z]$  et  $[\pi_y, \pi_z]$  donne :

$$[\pi_x, \pi_y] = i\hbar e B_z ; [\pi_x, \pi_z] = 0 ; [\pi_y, \pi_z] = 0 \quad (2.52)$$

On écrit l'hamiltonien  $H$  sous la forme :

$$H = \frac{(\vec{p} - e\vec{A})^2}{m^*} = \frac{(\vec{\pi})^2}{m^*} = \frac{(\pi_x^2 + \pi_y^2 + \pi_z^2)}{m^*} = \frac{(\pi_x^2 + \pi_y^2)}{m^*} + \frac{\pi_z^2}{m^*} = H_{\perp} + H_z$$

$$\text{Avec : } H_{\perp} = \frac{(\pi_x^2 + \pi_y^2)}{m^*} \text{ et } H_z = \frac{\pi_z^2}{m^*} \quad (2.53)$$

Or,  $[H_z, H_{\perp}] = 0$ , donc  $H_z$  commute avec  $H_{\perp}$  on déduit que le mouvement selon Oz est découplé du mouvement transversal dans le plan (xOy).

L'équation de Schrödinger peut être découplé en deux équations :

$$\begin{cases} H_z \psi = E_z \psi \\ H_{\perp} \psi = E_{\perp} \psi \end{cases} \quad (2.54)$$

Avec :  $\psi(x,y,z) = A\phi(x,y)e^{ik_z z}$ . L'énergie totale de l'électron est :

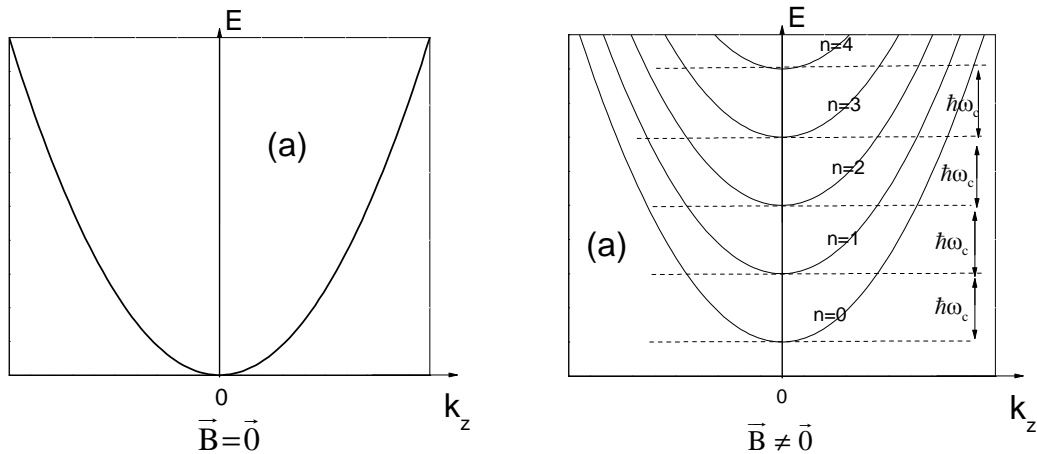
$$E = (E_z + E_{\perp}) \quad (2.55)$$

On montre que :  $E_z = \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m^*}$  et  $E_{\perp} = E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega_c$  avec n est un entier ( $n=0 ; 1 ; 2 ; \dots$ )

Finalement l'énergie des électrons dans le cristal, sous  $\vec{B}$  est quantifié en niveaux de Landau (figure II.8) et on a :

$$E = E(k_z, n, \omega_c) = \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m^*} + \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega_c \quad (n=0 ; 1 ; 2 ; \dots) \quad (2.56)$$

n est un entier qui désigne le niveau de Landau et  $\omega_c = eB/m^*$  est la pulsation cyclotron.



**Figure II.8 :** Variation de l'énergie des électrons en fonction de  $k_z$  pour  $\vec{B} = \vec{0}$  (a) et pour  $\vec{B} \neq \vec{0}$  (b).

Le mouvement des électrons est libre suivant (Oz) mais dans le plan (xOy) il est circulaire à vitesse angulaire cyclotron  $\omega_c$ . E est quantifié et prend des valeurs discrètes espacées de  $\hbar\omega_c$ .

La densité d'état  $D_B(E)$  sous B s'écrit :

$$D_B(E) = \sum_{n=0}^N D_B^{(n)}(E)$$

Avec : 
$$D_B^{(n)}(E) = \frac{\theta' |e| B}{\sqrt{E - \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega_c}} \text{ et } \theta' = \frac{2V \sqrt{2m^*}}{(2\pi \hbar)^2} \quad (2.57)$$

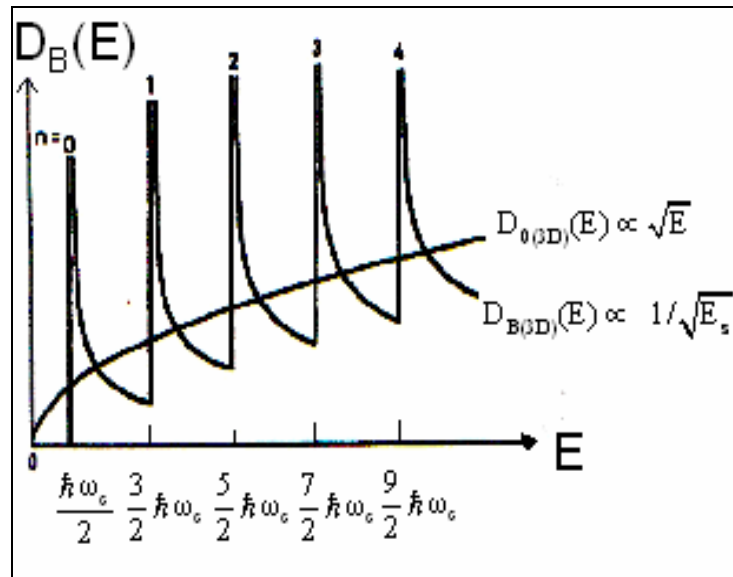
V : est le volume du cristal.

Dans l'annexe (D) nous avons montré que :  $D_B^{(n)}(E) \sim \frac{1}{\sqrt{E_z}} \sim \frac{1}{\sqrt{E - (n + \frac{1}{2}) \hbar \omega_c}}$

C'est une densité d'état à une dimension ( $\sim 1/\sqrt{E_z}$ ) le mouvement est libre suivant (Oz).

Pour  $k_z = 0$  :  $E = (n + 1/2) \hbar \omega_c \Rightarrow D_B^{(n)}(E)$  diverge.

Nous assistons à des singularités de  $D_B(E)$  aux points :  $E = \frac{\hbar \omega_c}{2}, \frac{3}{2} \hbar \omega_c, \frac{5}{2} \hbar \omega_c, \dots$  (figure II.9). Ces oscillations sont dues aux singularités de la densité d'états  $D_B(E)$  sous le champ B.

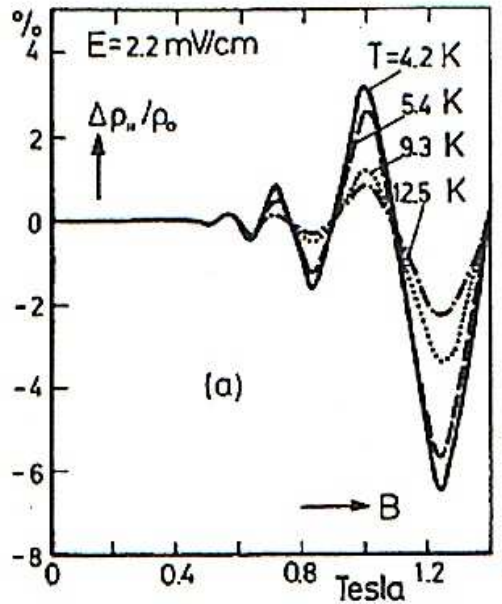


**Figure II.9 :** Densité d'état sans champ magnétique  $D_{0(3D)}(E) \propto \sqrt{E}$  et sous champ magnétique  $D_{B(3D)}(E) \propto 1/\sqrt{E_z}$

## II. D.2 Effet Shubnikov-de Haas

Cet effet présente les oscillations de la magnétorésistance (figure II.10) observées si les trois conditions suivantes sont remplies :

- Le champ magnétique  $B$  doit être fort ( $\omega_c \tau \gg 1$ ) et la température  $T$  doit être basse (dégénérescence forte).
- L'élargissement thermique d'un niveau de Landau doit être inférieur à l'écart entre deux niveaux de Landau ( $\hbar \omega_c > k_B T$ ).
- Le niveau de fermi  $E_F$  doit être au dessus de la dernière sous bandes de Landau ( $E_F > \hbar \omega_c$ ).



**Figure II.10:** Magnétorésistance longitudinale dans InAs de type  $n$  sous  $E = 2,2 \text{ mV/cm}$  à différentes basses températures [2.2].

Le calcul de la magnétorésistance  $\frac{\Delta \rho}{\rho}$ , en négligeant sa partie non oscillante à champ faible, conduit à [2.2]:

$$\frac{\Delta \rho}{\rho} = \sum_{r=1}^{\infty} b_r \cos\left(\frac{2\pi E_F}{\hbar \omega_c} r - \frac{\pi}{4}\right) \quad (2.58)$$

Le coefficient  $b_r$  décroît rapidement quand  $r$  augmente et en pratique on retient le terme correspondant à  $r = 1$  dans la somme.

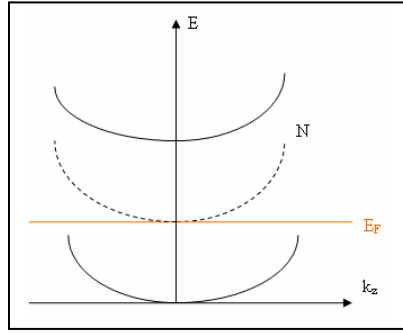
$$b_r = (-1)^r \sqrt{\frac{\hbar \omega_c}{2E_F r}} \cos\left(r \frac{\pi g m}{2 m_0}\right) \frac{\alpha T}{\sinh(\alpha T)} \exp(-\alpha T_D) \quad (2.59)$$

Avec :  $\alpha = r2\pi^2 k_B / \hbar \omega_c$ ,  $g$  est le facteur de Landé des porteurs de charges et  $T_D$  la température de Dingle. L'amplitude  $b_1$  des oscillations Shubnikov-de Haas augmente quand  $T$  diminue comme montré sur la Figure (II.10).

### II. D.3 Mécanisme de l'effet S.D.H

Quand  $B$  augmente, l'espacement entre niveaux de Landau  $\hbar \omega_c$  augmente, donc les niveaux de Landau montent. Chaque fois qu'un niveau  $E_n$  coïncide avec  $E_F$  il se dépeuple de ces porteurs de charges au profit de  $E_F$ . On assiste alors à une diffusion résonante des porteurs de charges due aux singularités de  $D_B(E)$ .

- Si le niveau  $n$  coïncide avec  $E_F$  on a :  $E_F = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega_c = \left(n + \frac{1}{2}\right) \frac{\hbar e B_n}{m^*}$
- Si le niveau  $n+1$  coïncide avec  $E_F$  on a :  $E_F = \left(n + 1 + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega_c = \left(n + \frac{3}{2}\right) \frac{\hbar e B_{n+1}}{m^*}$



La période des oscillations s'écrit :

$$\Delta\left(\frac{1}{B}\right) = \frac{1}{B_{n+1}} - \frac{1}{B_n} = \frac{\hbar e}{m^* E_F} \quad (2.60)$$

Dans le cas d'une bande sphérique parabolique on a :  $E_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m^*}$

- pour un gaz d'électrons tridimensionnel (3D) :  $E_F = \frac{\hbar^2}{2m^*} (3\pi^2 n')^{\frac{2}{3}}$
- pour un gaz d'électrons bidimensionnel (2D) :  $E_F = \frac{\pi \hbar^2}{m^*} n'$

D'où :

$$\Delta\left(\frac{1}{B}\right) = \frac{2e}{\hbar} n'^{\frac{2}{3}} \text{ à (3D)} \quad (2.61)$$

Et :

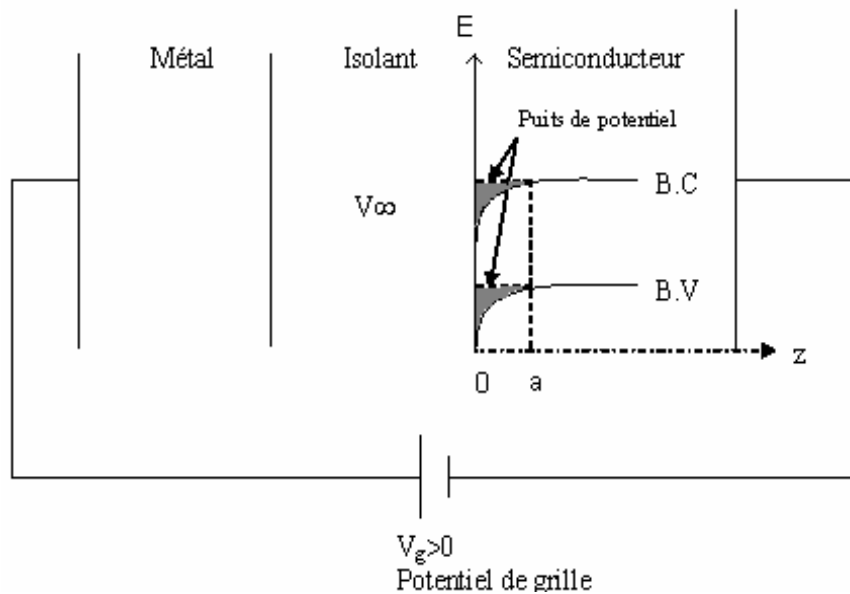
$$\Delta\left(\frac{1}{B}\right) = \frac{e}{\pi \hbar n'} \text{ à (2D)} \quad (2.62)$$

Le tracé de  $\Delta\rho/\rho$  en fonction de  $1/B$  et la mesure de la période  $\Delta(1/B)$  conduit à la concentration  $n'$  des porteurs de charges avec une grande précision mieux que celle mesurée par effet Hall où cette dernière est affectée par l'incertitude sur la mesure de l'épaisseur de l'échantillon ainsi que les incertitudes sur la mesure de la tension de Hall, le courant et le champ magnétique.

#### II.D.4 Gaz d'électrons bidimensionnel

On Considère une structure métal - isolant - semiconducteur (MIS). En appliquant une tension de grille  $V_g > 0$  à l'échantillon, les bandes se courbent à l'interface (figure II.11).

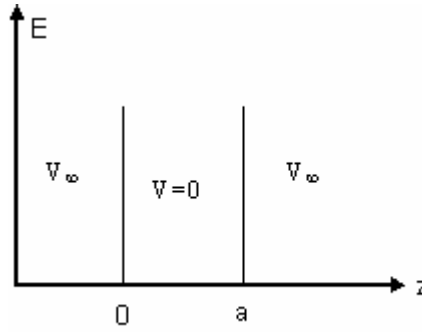
Si le semi conducteur est de type n, les électrons sont attirés vers le puit de potentiel. L'isolant isole le métal du semi-conducteur pour que les électrons ne puissent pas passer par effet tunnel dans le métal.



**Figure II.11:** Schéma représentant la structure métal- isolant- semiconducteur.

L'énergie des électrons dans les puits est modifiée, elle dépend de la forme du puit de potentiel.

Si on considère que le puit de potentiel est rectangulaire comme schématisé dans la figure (II.12) et que l'échantillon est de dimensions finies.



**Figure II.12:** Schéma représentant le puit de potentiel rectangulaire.

La résolution de l'équation de Schrödinger avec :  $V(z)=0$  pour  $0 < z < a$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(x, y, z) = E \psi(x, y, z) \quad (2.63)$$

En tenant compte des conditions :  $\psi(x, y, 0) = \psi(x, y, a) = 0$

On cherche :  $\psi(x, y, z) = A e^{i(k_x x + k_y y)} \varphi(z)$

D'où :  $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial z^2} = E' \varphi$  avec :  $E' = E - \frac{\hbar^2(k_x^2 + k_y^2)}{2m}$  et  $\varphi(z) = \sin(k_z \cdot z + \delta)$

$$\varphi(0)=0 \Rightarrow \delta = 0$$

$$\varphi(a)=0 \Rightarrow \sin(k_z a) = 0 \Rightarrow k_z a = n\pi \Rightarrow k_z = \frac{\pi}{a} n$$

$k_z$  est donc quantifié et par conséquent l'énergie dans la direction  $z$  est aussi quantifiée :

$$E'_n = \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m a^2} n^2 ; n=0 ; 1 ; 2 ; \dots \quad (2.64)$$

Le mouvement de l'électron dans le plan ( $xOy$ ) est libre. L'énergie totale des électrons est :

$$E_n = E'_n + \frac{\hbar^2}{2m} (k_x^2 + k_y^2)$$

$$E_n = \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\pi}{a} \right)^2 n^2 + \frac{\hbar^2}{2m} (k_x^2 + k_y^2) \quad (2.65)$$

Si  $V_g$  augmente le puit de potentiel devient plus profond et le nombre de sous bandes augmente. Les porteurs de charges ayant l'énergie  $E_n$  sont appelés gaz d'électron bidimensionnel ou à 2D puisque leur mouvement est libre dans le plan ( $x, O, y$ ).

## II.E. STRUCTURE DES BANDES DU SUPERRESEAU

La structure de bande du superréseau HgTe/CdTe a été envisagée et calculée par J. N. Shulmann et T. Mc Gill [1.35] par la méthode de combinaison linéaire d'orbitales



atomiques (L.C.A.O). Ils démontraient la possibilité d'utiliser ce nouveau matériau pour la détection IR à la place de l'alliage ternaire HgCdTe. Dans leur calcul, l'écart en énergie entre les bandes de trous lourds de HgTe et CdTe avait été pris nul  $\Lambda=0$ .

La méthode de calcul utilisée ne donne que des indications au centre de la première zone de Brillouin. Bastard et Smith [1.33] ont développé l'étude par la méthode de la fonction enveloppe (E.FA) également dans le cas où  $\Lambda=0$  mais qui permet d'avoir une indication sur la dispersion au voisinage de  $\Gamma$ .

Les mesures de magnétoabsorption en I.R. donne un écart  $\Lambda=40$  meV, proche du choix  $\Lambda=0$ . Cependant d'autres mesures indiquent des valeurs différentes de  $\Lambda$  ([2.11]; [2.12]).

Si on veut réaliser un détecteur I.R, il est nécessaire de bien connaître la bande interdite du matériau. Dans le cas de l'alliage, c'est la composition qui est le paramètre principal. Dans le cas du superréseau, c'est la période, son contrôle et aussi l'existence de transitions abruptes aux interfaces entre les couches des deux matériaux.

Nous calculerons la structure de bandes dans la direction de croissance et suivant le plan des couches cristallines dans le modèle de Bastard [1.33]. Cette étude sera étendue avec l'évolution de la bande interdite en fonction de la température et l'écart  $\Lambda$ .

### II.E.1 Structure des bandes de CdTe et HgTe

Le modèle de Kane à trois bandes [2.13] décrit la structure des bandes des composés semi-conducteurs III-V et II-VI. Le minimum de bande interdite se situe en  $\Gamma$  au centre de la zone de Brillouin. Ce modèle prend en compte les interactions entre les différentes bandes  $\Gamma_6$ ,  $\Gamma_7$  et  $\Gamma_8$ .

En  $k=0$  ( $\Gamma$ ), le couplage spin orbite lève la dégénérescence 6 de la bande de valence en un doublet  $\Gamma_7$  et un quadruplet  $\Gamma_8$ . L'éloignement de  $\Gamma_7$  de  $\Gamma_8$  ( $\approx 1$ eV) fait qu'il peut être négligé dans chaque matériau du superréseau. Dans la suite du texte nous adopterons les indices suivants pour désigner les électrons par e, les trous légers par lh et les trous lourds par hh.

CdTe est un semiconducteur à bande interdite large ( $E_g = 1600$  meV à 4,2K) la structure de ses bandes est montrée sur la figure II.13.

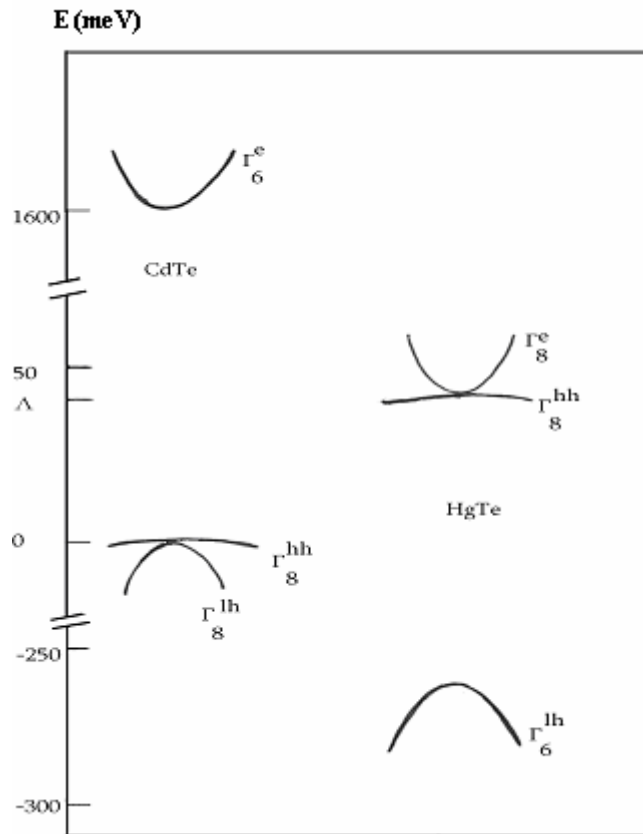
Par contre, HgTe présente une inversion de positions des bandes  $\Gamma_6$  et  $\Gamma_8$  la bande de trous légers  $\Gamma_8^{lh}$  de CdTe est devenue bande de conduction  $\Gamma_6^c$  dans HgTe ; de même la bande de conduction  $\Gamma_6^c$  de CdTe se transforme en bande de trous légers dans HgTe.

La bande interdite  $E_{\Gamma_6} - E_{\Gamma_8}$ , positive de CdTe devient alors négative dans HgTe ( $\epsilon_1 = -302$  meV à 4.2 K). De plus  $\Gamma_8^e$  et  $\Gamma_8^{hh}$  sont en contact en  $k=0$  dans HgTe ce qui permet de dire que HgTe est un semiconducteur à bande interdite nulle.

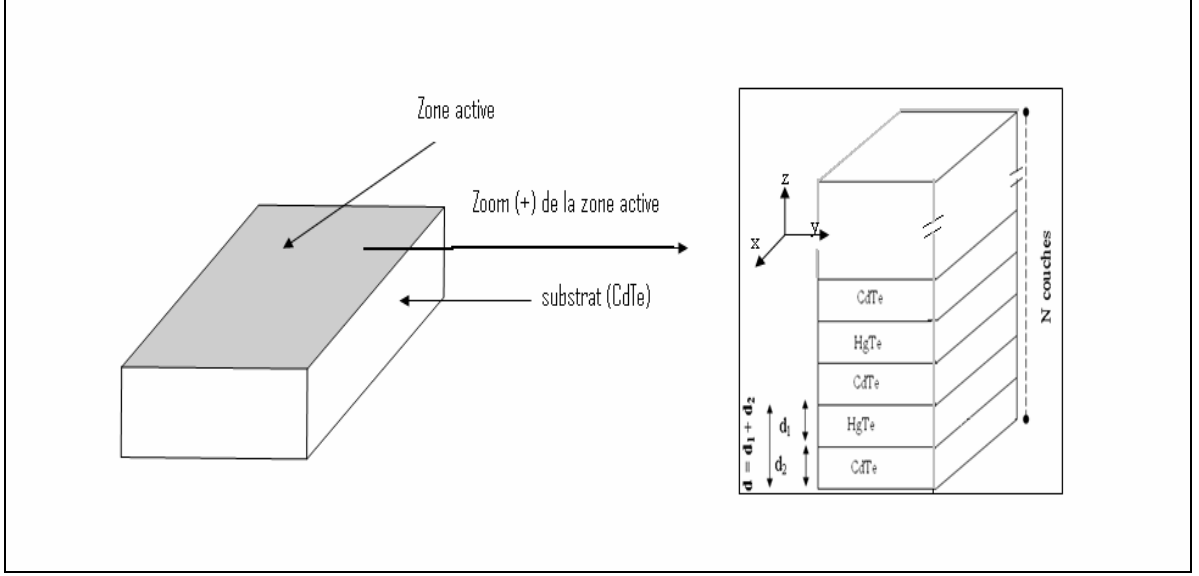
Dans le cas de la formation d'un puit quantique ou d'une hétérojonction, les paramètres importants sont l'écart entre les bandes de conduction et les bandes de valence des deux matériaux.

Diverses valeurs de l'écart  $\Delta E_v$  des bandes de valence ont été proposées, comme cela a été dit antérieurement. Nous limiterons dans un premier temps nos calculs de structure de bandes dans le superréseau à la valeur  $\Lambda = 40$  meV obtenu par mesure magnétooptique de Guldner [1.36].

La faible valeur positive de  $\Lambda$  implique, d'une part l'existence d'une barrière de potentiel pour les trous d'autre part une forte interaction des bandes  $\Gamma_8^{lh}$  de CdTe avec  $\Gamma_8^e$  de HgTe. L'incertitude sur ce paramètre joue un grand rôle.



**Figure II.13:** Structure des bandes des deux matériaux CdTe et HgTe



**Figure II.14:** Schéma représentant le superréseau HgTe/CdTe

### II.E.2 Approximation de la fonction enveloppe et relations de dispersion

Les calculs des spectres d'énergie  $E(k_z)$  et  $E(k_p)$ , respectivement, dans la direction de croissance et dans le plan du superréseau; ont été faits dans le formalisme de la fonction enveloppe. Dans ce qui suit nous présentons les relations de dispersion des particules légères et lourdes dans le cas où  $k_p=0$  ainsi que les relations de dispersion en fonction de  $k_p$ . Le formalisme de cette approximation ainsi que la procédure suivie pour la détermination de relations de dispersion sont donnés dans l'annexe (E).

#### II.E.2.a Relations de dispersion suivant $k_z$

Les relations de dispersion des particules légères sont données par l'équation suivante :

$$\cos[k_z(d_1+d_2)] = \cos(k_1d_1) \cos(k_2d_2) - \frac{1}{2}\left(\xi + \frac{1}{\xi}\right) \sin(k_1d_1) \sin(k_2d_2) \quad (2.66)$$

Avec :  $\xi = \frac{k_1}{k_2} r$  ;  $r = \frac{E - \varepsilon_2}{E + |\varepsilon_1| - \Lambda}$  et :

$$\begin{cases} \frac{2}{3} P^2 \hbar^2 k_1^2 = (E - \Lambda) (E - \Lambda + |\varepsilon_1|) & \text{pour CdTe} \\ \frac{2}{3} P^2 \hbar^2 k_2^2 = E (E - \varepsilon_2) & \text{pour HgTe} \end{cases} \quad (2.67)$$

En posant :  $\frac{1}{2m^*} = \frac{2}{3} \frac{P^2}{\varepsilon_G}$  ;  $m^* = 0,03 m_0$  est la masse cyclotron de l'électron dans

HgTe.

Cette relation de dispersion est vérifiée lorsque  $-1 \leq \cos(k_z d) \leq +1$  c. à d :  $-\pi/d \leq k_z \leq +\pi/d$  dans la première zone de Brillouin. La relation de dispersion des trous lourds, de type parabolique, est décrite par la même équation (2.66) ci-dessus, mais avec :

$$\xi = \frac{k_1}{k_2} r, r=1 \text{ et : } \begin{cases} k_1^2 = -\frac{2m_{HH}^*}{\hbar^2} E & \text{pour CdTe} \\ k_2^2 = -\frac{2m_{HH}^*}{\hbar^2} (E - \Lambda) & \text{pour HgTe} \end{cases} \quad (2.68)$$

### II.E.2.b Relations de dispersion suivant $k_p$

Si le vecteur d'onde dans le plan de superréseau n'est plus nul, la matrice de Luttinger n'est plus diagonale et elle décrit l'interaction des particules légères et des trous lourds.

Les relations de dispersion des particules légères pourront être obtenues par un calcul analogue au cas précédent comme l'indique Bastard [1.33]

Elles sont données par l'équation suivante :

$$\cos(k_z d) = \cos(k_1 d_1) \cos(k_2 d_2) - \frac{1}{2} \left[ \left( \xi + \frac{1}{\xi} \right) + \frac{k_p^2}{4k_1 k_2} \left( r + \frac{1}{r} - 2 \right) \right] \sin(k_1 d_1) \sin(k_2 d_2) \quad (2.69)$$

$$\text{Avec : } \xi = \frac{k_1}{k_2} r ; r = \frac{E - \varepsilon_2}{E + |\varepsilon_1| - \Lambda}$$

$$\begin{cases} \frac{2}{3} P^2 \hbar^2 (k_1^2 + k_p^2) = (E - \Lambda)(E - \Lambda + |\varepsilon_1|) & \text{pour HgTe} \\ \frac{2}{3} P^2 \hbar^2 (k_2^2 + k_p^2) = E (E - \varepsilon_2) & \text{pour CdTe} \end{cases} \quad (2.70)$$

La relation de dispersion des trous lourds est de type parabolique, décrite par la même équation que (2.69), mais avec :

$$\xi = \frac{k_1}{k_2} r (r=1) \quad \begin{cases} k_1^2 + k_p^2 = -\frac{2m_{HH}^*}{\hbar^2} E & \text{pour CdTe} \\ k_2^2 + k_p^2 = -\frac{2m_{HH}^*}{\hbar^2} (E - \Lambda) & \text{pour HgTe} \end{cases} \quad (2.71)$$

### II.E.3 Résultats des calculs suivant la direction $k_z$ ( $k_p=0$ ) Influence de divers paramètres

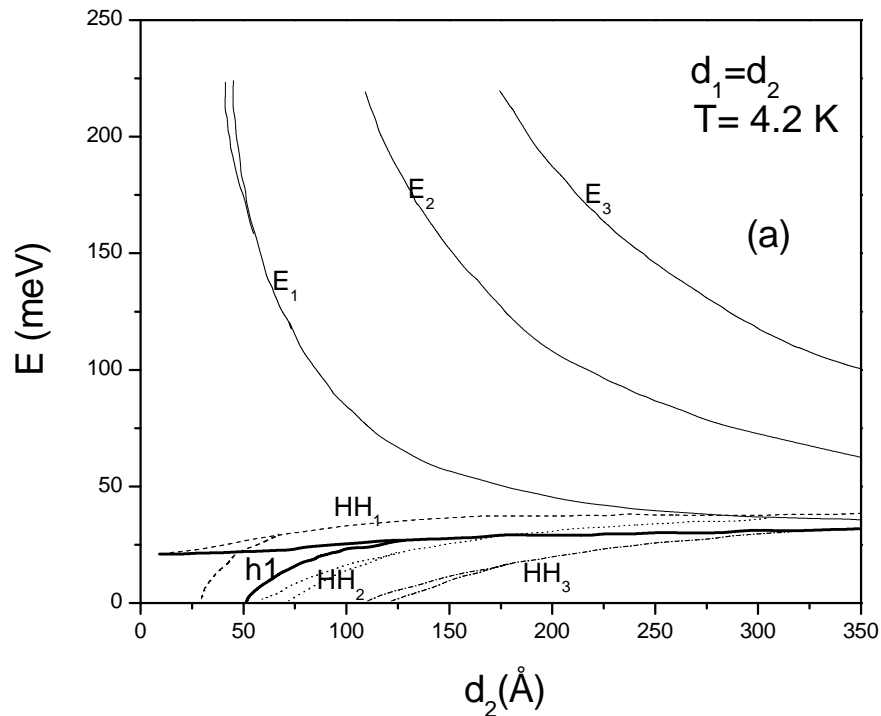
Les traitements mathématiques précédents nous donnent les relations de dispersion suivant l'axe  $k_z$  (l'axe de croissance du superréseau est  $oz$ ), l'allure des niveaux de particules légères  $E_i$  (électronique),  $h_i$  trous légers et  $HH_i$  (trous lourds) et la bande interdite  $E_g = E_i - HH_i$

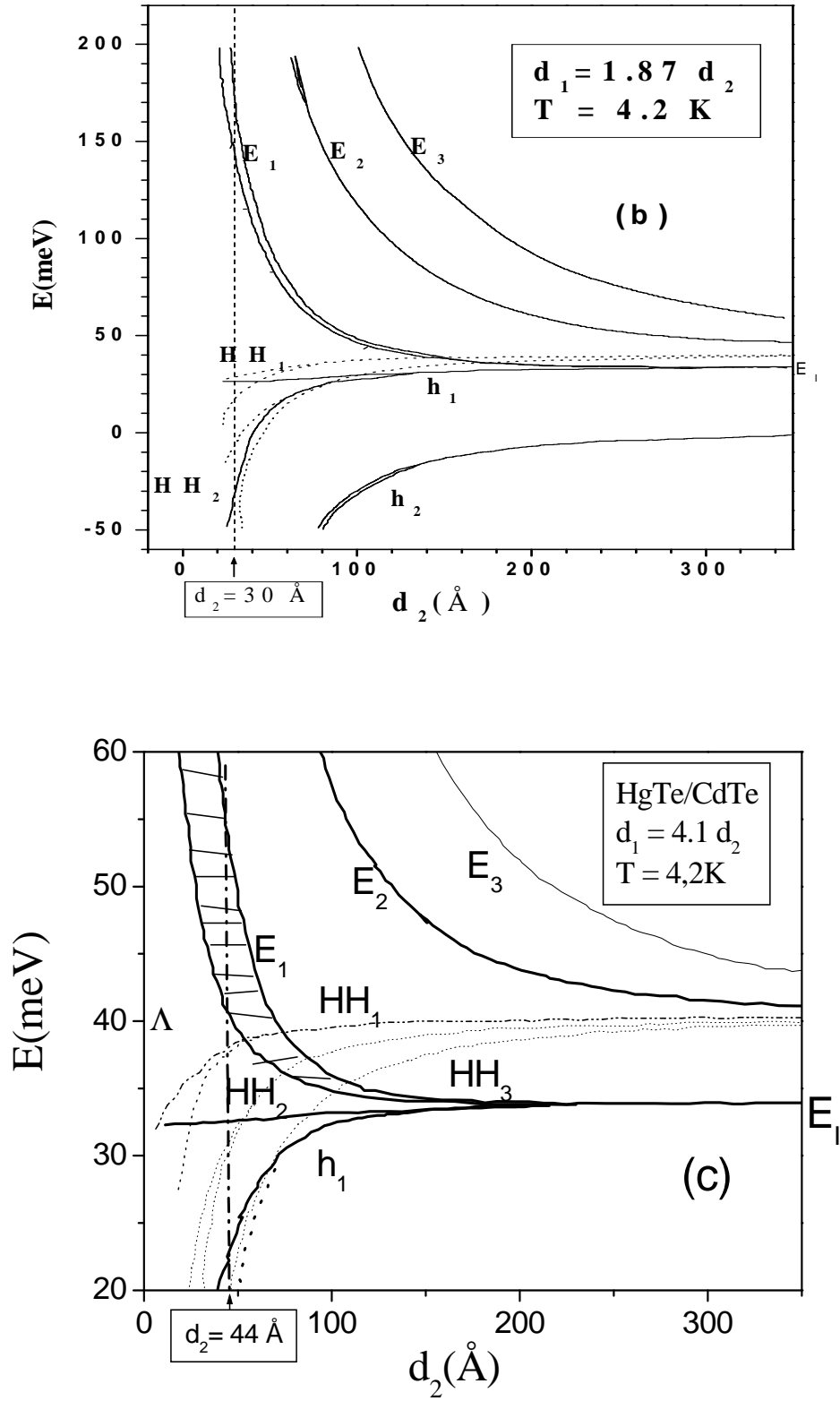
Nous allons voir quelle est l'influence de divers paramètres :

- La période  $d = d_1 + d_2$  du superréseau sur les niveaux.
- L'épaisseur  $d_1$  de la couche de HgTe sur la bande interdite.
- La température sur la bande interdite  $E_g$ .
- L'écart des bandes de valence de HgTe et CdTe sur  $E_g$ .

#### II.E.3.a Effet de la période du superréseau sur la structure des bandes et $E_g$

Pour des commodités de calcul, il a été choisi de déterminer l'évolution des niveaux  $E_i$ ,  $h_i$ , et  $HH_i$  en fonction de l'épaisseur  $d_2$  des couches de CdTe pour le rapport  $d_1/d_2$  correspondant à notre échantillon (Figures II.15. b et II.15. c).



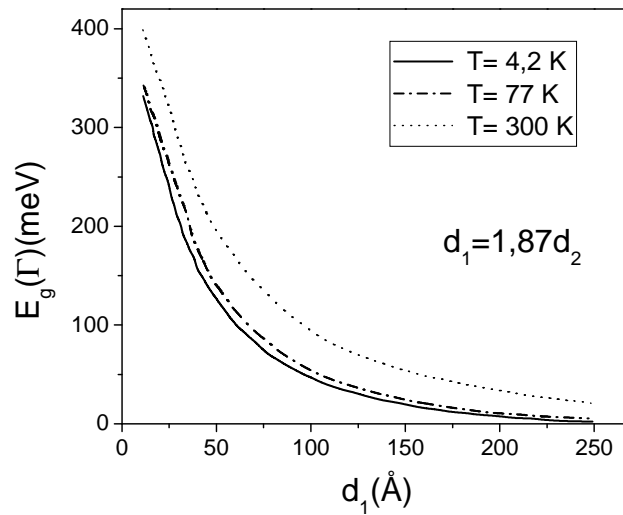


**Figure II.15:** Calcul des niveaux d'énergie  $E_i$ ,  $h_i$ , et  $HH_i$  en fonction de l'épaisseur  $d_2$  dans les cas  $d_1=d_2$ ,  $d_1=1,87d_2$  et  $d_1=4.1 d_2$  à la température  $T=4,2 \text{ K}$ .

Il apparaît que :

- Pour un rapport donné, l'épaisseur  $d_2$  contrôle la bande interdite  $E_g = E_1 - HH_1$ . Pour de faibles valeurs de  $d_2$ , un caractère semi-conducteur est développé (couplage entre puits de HgTe).
- Si au contraire  $d_2$  croît, les bandes d'énergie  $E_1$  et  $h_1$  tombent dans la barrière d'énergie  $[0, \Lambda]$  et deviennent un état d'interface discret d'énergie  $E_I = \Lambda \varepsilon_2 / (|\varepsilon_1| + \varepsilon_2) = 34 \text{ meV}$  pour  $d_2$  infinie. Le superréseau tend à devenir un ensemble de puits de HgTe isolés (non couplés par effet tunnel par le transport perpendiculaire suivant l'axe  $oz$  en d'autres termes les longueur d'onde des fonctions d'ondes dans HgTe sont inférieures à l'épaisseur  $d_1$ ) et accuse ainsi un caractère semi-métallique.
- Le rapport  $d_1/d_2$  contrôle la largeur des bandes d'énergie du superréseau (pour  $0 \leq k_z \leq \pi/d$ ). Une grande largeur de bandes, c'est-à-dire un  $d_1/d_2$  grand éloigne le matériau d'un comportement bidimensionnel.

La figure II.16 montre l'influence de  $d_1$  sur la bande interdite  $E_g$  au centre  $\Gamma$  de la zone de Brillouin. Quand  $d_1$  augmente,  $E_g$  diminue, s'annule à  $d_{1c} = 250 \text{ \AA}$  critique et devient négatif en accusant un comportement semimétallique.



**Figure II.16:** L'énergie de la bande interdite  $E_g$  en fonction de  $d_1$  pour différentes valeurs de températures.

### II.E.3.b Effet de la température sur $E_g$

Le tableau II.2 donne les valeurs des bandes interdites des matériaux hôtes en fonction de la température.

*Tableau II.2. Les valeurs  $\varepsilon_1$  et  $\varepsilon_2$  des bandes interdites de HgTe et CdTe*

T(K)	4,2K	77K	300K
$\varepsilon_1$ HgTe(meV)	-302	-261	-122
$\varepsilon_2$ CdTe (meV)	1600	1550	1425

L'élément de matrice de Kane P est pris indépendant de la température ; en effet

$$P = \varepsilon_G(T) / m^*(T) \quad (2.72)$$

La figure.II.16 montre aussi l'influence de la température sur la dépendance de la bande interdite du superréseau avec  $d_1$ . La bande interdite croît avec T comme dans l'alliage  $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ . Cependant l'évolution de la bande interdite du superréseau est sublinéaire et les variations avec la température seront moindres que dans l'alliage ternaire  $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$  ce qui est important en technologie infrarouge.

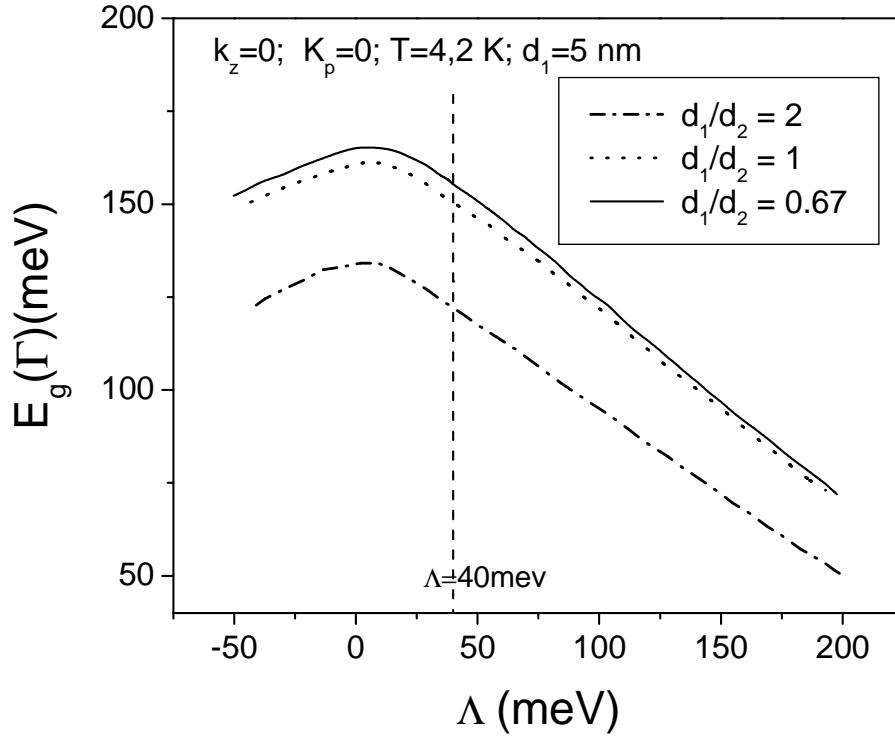
### II.E.3.c Influence de l'écart $\Lambda$ des bandes de valence

Le calcul numérique de la structure des bandes nécessite la connaissance du paramètre  $\Lambda$  : écart en énergie des bandes de valence de HgTe et CdTe .

Dans le premier calcul la structure des bandes du superréseau HgTe-CdTe, J N Schulmann [1.35] avait pris  $\Lambda = 0$ . Guldner par mesure optique donne  $\Lambda = 40\text{meV}$  ; Cependant des valeurs comprises entre 120 à 600 meV sont trouvées dans la littérature ([2.11] [2.12]). Devant cette incertitude, la question qui se pose est de savoir l'influence de  $\Lambda$  sur la bande interdite  $E_g$ .

La figure II.17 montre la variation de  $E_g(\Gamma)$  pour trois cas de période à 4.2K où l'épaisseur  $d_1$  de HgTe a été prise constante  $d_1=50 \text{ \AA}$ . Pour une température donnée,  $E_g$  augmente avec  $\Lambda$ , présente un maximum large pour  $\Lambda=10 \text{ meV}$  et décroît après. Pour un  $\Lambda$  donné,  $E_g$  augmente quand le rapport  $d_1/d_2$  diminue. Le choix de  $\Lambda=40\text{meV}$  semble correct. Ces résultats sont semblables à ceux de G.Y.Wu. [2.14].





**Figure II.17:** L'énergie de la bande interdite  $E_g$  en fonction de l'écart  $\Delta$  des bandes de valence pour différentes valeurs de  $d_2$  à la température 4,2 K.

Nous verrons dans les chapitres 4 et 5 que les paramètres de transport déduits de nos calculs théoriques de structures des bandes et ceux de nos mesures expérimentales sont en excellent accord.

## Références

- [2.1] P. Kiéev, Semiconductor physics, Mir, Moscou, (1975).
- [2.2] K. Seeger, Semiconductor physics, an introduction Springer, (2002).
- [2.3] W. Scott, R. J. Appl. Phys. 43, (3), 1055 (1972).
- [2.4] F. J. Blatt, Solid state physics, édité par F. Seitz et D. Turnbull, 4, Academic Press, New York, 332, (1957).
- [2.5] D. Chattopadhyay et B.R. Nag, Journal of applied physics, 45, (3), (1974).
- [2.6] J. Wenus, J. Rutkowski., A. Rogalski, IEEE trans, On electron devices, 48, 1326 (2001).
- [2.7] W. Scott, J. Appl. Phys. 43, (3), (1972).
- [2.8] J. G. Collins et al, J. Phys. C: Solid State Phys. 13, 1649 (1980).
- [2.9] T. F. Smith et al J. Phys. C: Solid State Phys. 8, 2031 (1975).
- [2.10] J. D. Wiley, Semiconductors and semimetals, 10, Academic Press, New York, (1975).
- [2.11] D. Olego, J. P. Faurie et P.M. Raccah, Phys.Rev. Lett.55, 328 (1985).
- [2.12] S. P. Kowalczyk, J.T. Cheung, E.A. Kraut et R.W. Grant Phys. Rev. Lett. 56, (15), 1605 (1986).
- [2.13] O. Kane J.Phys. Chem. Solids 1, 249 (1957).
- [2.14] G. Y .Wu et T.C. Mc Gill Appl. Phys. Let 47 (6), 634 (1985).

## Chapitre III

### Rappel sur les techniques expérimentales

#### SOMMAIRE

<b>III.A Introduction</b> .....	70
<b>III.B La technique de l'épitaxie par jets moléculaires ou MBE</b> .....	70
III.B.1 Conditions de Knudsen .....	70
III.B.2 Schéma d'un système MBE .....	71
III.B.2.a Chambre d'introduction .....	72
III.B.2.b La chambre de croissance .....	72
III.B.3 Mesures en temps réel .....	72
III.B.4 La surface : un équilibre dynamique .....	73
III.B.5 Avantages et inconvénients d'une croissance lente .....	73
III.B.5.a Avantages .....	73
III.B.5.b Désavantages .....	74
<b>III.C préparation des échantillons</b> .....	74
<b>III.D Techniques de mesures</b> .....	75
III.D.1 Mesure de l'effet Hall et de la conductivité .....	75
III.D.1.a Principe de mesure .....	75
III.D.1.b Montage des échantillons .....	76
III.D.2 Mesure de l'effet Seebeck .....	79
III.D.3 Mesure de l'effet Shubnikov- de Haas .....	80

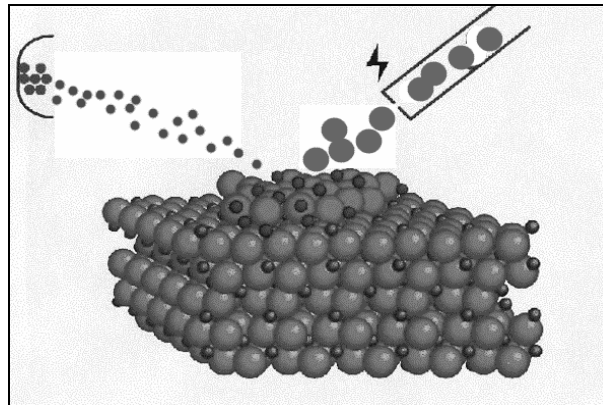
### III.A INTRODUCTION

L'échantillon  $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$  ( $x=0,22$ ) d'épaisseur  $5\text{ }\mu\text{m}$ , a été élaboré par la technique d'épitaxie par jet moléculaire (EJM) sur un substrat CdTe [111] à  $180\text{ }^\circ\text{C}$ . La composition nominale ( $x = 0,22$ ) a été déterminé par la mesure de la densité. Les mesures de l'effet Hall et de la conductivité ont été faites dans la gamme de température  $4,2\text{--}300\text{ K}$ . Un faible courant ( $I = 0,1\text{ }\mu\text{A}$ ) circule le long de l'échantillon sous un champ magnétique ( $B = 0,1\text{ T}$ ).

Nos superréseaux HgTe/CdTe ont été élaborés par la technique d'EJM sur des substrats CdTe [111] à  $180\text{ }^\circ\text{C}$ . L'échantillon ( $56/30\text{ \AA}$ ) (90 couches) a une période  $d=d_1+d_2$  où  $d_1(\text{HgTe})=56\text{ \AA}$  et  $d_2(\text{CdTe})=30\text{ \AA}$  et l'échantillon ( $180/44\text{ \AA}$ ) avec le même nombre de couches et une période  $d=d_1+d_2$  où  $d_1(\text{HgTe})=180\text{ \AA}$  et  $d_2(\text{CdTe})=44\text{ \AA}$  sont des plaquettes de dimensions  $(5\times 5\times 1)\text{ mm}^3$ . Les propriétés de transport ont été étudiées dans une gamme de température de  $1,5\text{--}300\text{ K}$  sous un champ magnétique allant jusqu'à  $8\text{ Tesla}$ .

### III.B LA TECHNIQUE DE L'EPITAXIE PAR JETS MOLECULAIRE OU MBE

L'épitaxie par jets moléculaires (ou MBE pour Molecular Beam Epitaxy) est une technique qui consiste à envoyer un ou plusieurs jets moléculaires vers un substrat préalablement choisi pour réaliser une croissance épitaxiale (figure III.1) [3.1-2]. Elle permet de faire croître des échantillons nanostructurés de plusieurs  $\text{cm}^2$  à une vitesse d'environ une monocouche atomique par seconde.



**Figure III.1 :** *Illustration de la croissance par jet moléculaire.*

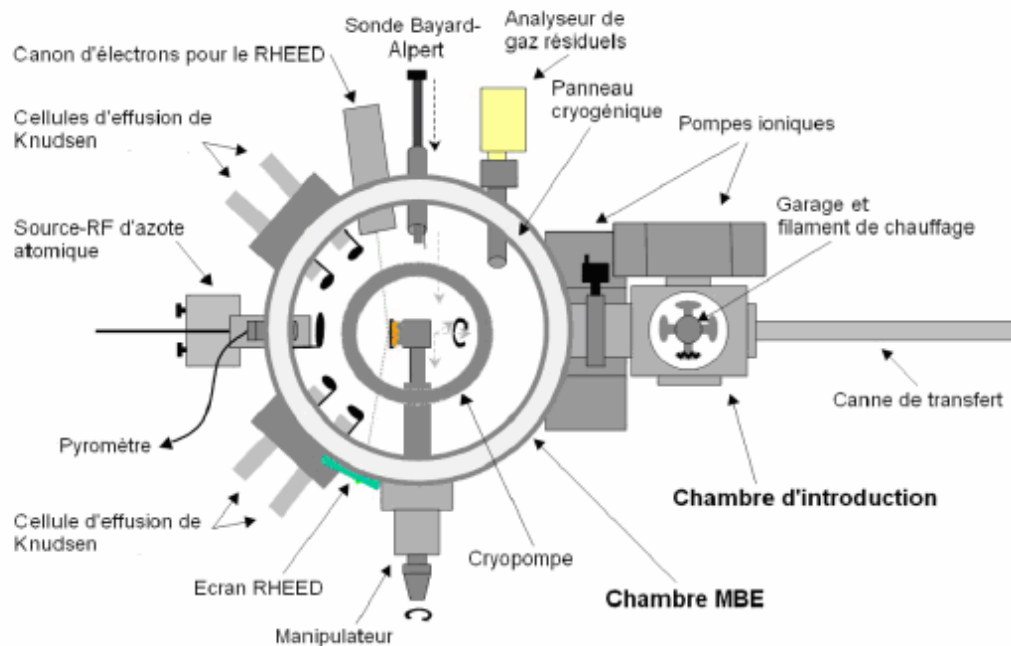
#### III.B.1 Conditions de Knudsen

Généralement, on désire réaliser la croissance de matériaux solides à température ambiante. On place ces matériaux dans des creusets situés au sein d'une cellule de Knudsen. Ces creusets sont réalisés en PNB (nitrure de bore pyrolytique, stable et peu

réactif jusqu'à 2000K). La température d'évaporation est une variable essentielle à contrôler car elle va déterminer le flux moléculaire arrivant sur l'échantillon. La croissance des matériaux est relativement lente. En effet, il ne faut pas que des molécules évaporées réagissent avec d'autres avant d'avoir atteint le substrat. On s'arrangera pour que le libre parcours moyen  $\lambda$  soit supérieur à la distance séparant la cellule de Knudsen au substrat. En pratique on fait en sorte que  $\lambda$  soit supérieur à 1 mètre. Si ces conditions sont observées on peut alors parler de jets moléculaires. On montre que :  $\lambda = 1/\sqrt{2} \pi \sigma^2 n$  où  $\sigma$  est la distance à partir de laquelle on considère que les molécules sont en collision (on suppose les molécules sphériques de rayon  $\sigma$ , typiquement de quelques Ångström) et  $n$  est la densité d'atomes (atomes/m<sup>3</sup>). Or la densité volumique d'atomes est directement proportionnelle à la pression  $p$  et à la température  $T$  selon  $p = n \cdot k_B \cdot T$  où  $k_B$  est la constante de Boltzmann.

### III.B.2 Schéma d'un système MBE

Un schéma général est présenté sur la figure III. 2 :



**Figure III.2 : Schéma général d'une chambre MBE.**

### **III.B.2.a Chambre d'introduction**

La chambre d'introduction a pour but de ne jamais mettre la chambre d'EJM directement en contact avec l'air ambiant, de maintenir une pression basse et donc d'éviter les contaminations. La chambre d'introduction est moins volumineuse que la chambre d'EJM, ce qui permet un pompage plus rapide.

Le vide atteint est au maximum de  $10^{-8}$  Torr du fait des joints en Viton. La chambre d'introduction est également munie d'une grille chauffante sous laquelle on peut placer un échantillon qui atteindra une température de quelques 650 K, ceci ayant pour principal but d'éliminer les traces de vapeur d'eau.

### **III.B.2.b La chambre de croissance**

Trois pompes assurent un vide d'environ  $10^{-11}$  Torr dans la chambre de croissance : une pompe turbomoléculaire, une pompe ionique et une pompe cryogénique. Le contrôle de la pression et des espèces résiduelles est assuré par une sonde Bayard-Alpert et un spectromètre de masse par quadrupôle respectivement. L'échantillon est placé sur un support rotatif permettant une homogénéisation du flux incident. Un système de chauffage radiatif contrôlé par un thermocouple permet de réguler la température de l'échantillon. Lors de la croissance, la planéité de la surface peut-être analysée en temps réel grâce à l'analyse de la diffraction d'électrons de haute énergie par réflexion (RHEED). Enfin, le flux est mesuré par une seconde sonde Bayard-Alpert.

### **III.B.3 Mesures en temps réel**

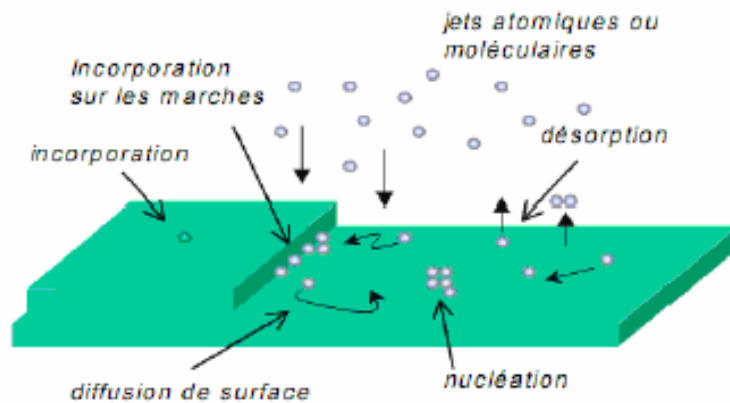
Les mesures en temps réel les plus rencontrées en EJM sont :

- La mesure de pression résiduelle à l'aide d'une sonde de type Bayard-Alpert. Une sonde similaire pouvant être placée au-dessus de la cellule d'évaporation pour déterminer le flux moléculaire atteignant le substrat (cette mesure doit bien évidemment se faire uniquement avant la croissance).
- On peut déterminer la composition des gaz résiduels grâce à la spectrométrie de masse par quadrupôle (QMS)
- La détermination de la température du substrat grâce à un pyromètre optique détectant les radiations infrarouges.

- Mais surtout on peut analyser l'évolution dimensionnelle et cristalline de la croissance grâce au RHEED (Reflection High Energy Electron Diffraction : diffraction d'électrons de haute énergie).

#### III.B.4 La surface : un équilibre dynamique

Il faut savoir que la croissance de la surface est un procédé dynamique et non pas statique. En effet, lorsqu'une molécule atteint la surface, elle n'y reste pas simplement collée. Typiquement les molécules vont diffuser grâce à leur énergie thermique. De là, il y aura de la nucléation : des atomes vont se rencontrer, s'assembler et leur mobilité va diminuer. D'autres molécules vont pouvoir s'adjoindre, on parle alors d'agrégation. Globalement ces agrégats se déplacent peu. Leurs bords sont très mobiles, c'est ce qu'on désigne par la "diffusion de bord". A côté de cela, l'énergie thermique des molécules peut être telle qu'elles quittent l'échantillon : c'est ce qu'on nomme la désorption. Enfin, certains agrégats peuvent se séparer, il s'agit alors d'une dissociation.



**Figure III.3 :** *Dynamique à la surface de l'échantillon.*

#### III.B.5 Avantages et inconvénients d'une croissance lente

Nous terminerons cette partie en citant les principaux avantages et désavantages de l'EJM, notamment par rapport à l'épitanie en phase vapeur ou par rapport à la MOCVD (Metal-Organic Chemical Vapor Deposition).

##### III.B.5.a Avantages

- L'atmosphère est sous UHV, ce qui implique peu de contaminations.
- La rapidité des obturateurs, permettant des hétérojonctions abruptes.

- Une information sur la composition du flux atteignant l'échantillon est possible.
- On peut obtenir une information sur le mode de construction de la surface grâce au RHEED.
- Une connaissance des espèces résiduelles peut être obtenue grâce à l'analyse par quadrupôle.
- On peut utiliser une large gamme de dopants.
- La MBE n'utilise pas de gaz toxiques.

#### **III.B.5.b Désavantages**

- La vitesse de croissance MBE est plus faible surtout dans le cas d'hétérostructures.
- Le dopage-p est plus efficace par MOVPE. Le remplissage des cellules de Knudsen ou la moindre autre opération technique de maintenance nécessitant l'ouverture de la chambre MBE est fastidieuse et peut durer plusieurs semaines voire plusieurs mois.
- La préparation de la chambre et de l'échantillon est sévère pour obtenir une bonne croissance, désorber le substrat et avoir un vide très poussé, ce qui prend un temps non négligeable.

### **III.C PREPARATION DES ECHANTILLONS**

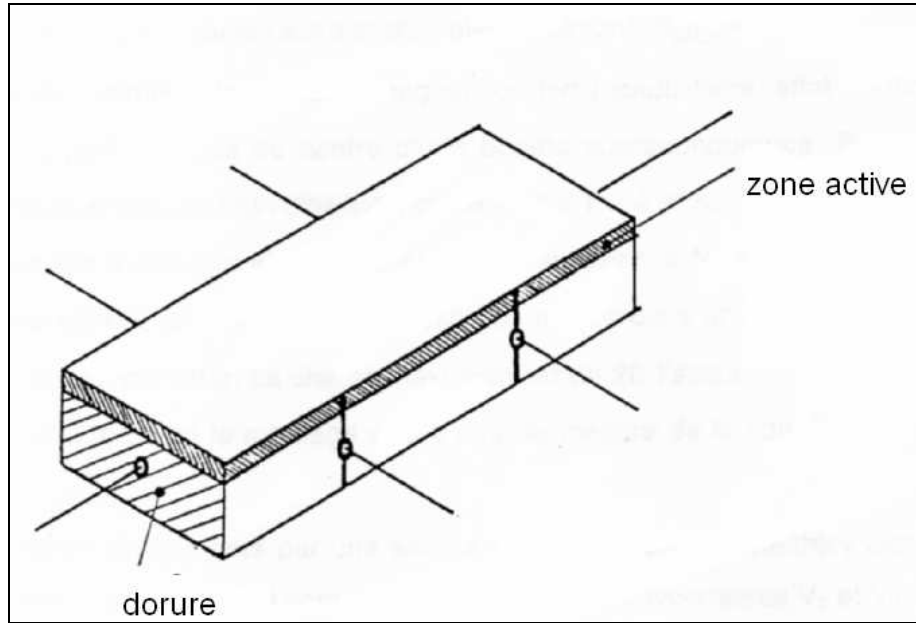
L'alliage ternaire  $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$  ( $x = 0,22$ ) a été élaboré par la technique de l'épitaxie par jet moléculaire (MBE) sur un substrat [111] CdTe.

Les échantillons du superréseau HgTe/CdTe ont été aussi élaborés par la technique de l'épitaxie par jet moléculaire (MBE). Ils se présentent sous forme de plaquettes  $(5 \times 5 \times 1) \text{ mm}^3$ . La couche active du superréseau, très mince est caractérisée par un aspect de miroir.

Les échantillons, destinés à la mesure de la conductivité et de l'effet Hall sont découpés avec une scie à fil après protection de la surface par un film de paraffine.

Les contacts ohmiques ont été réalisés par un dépôt chimique de l'or à partir de l'acide tétrachloroaurique  $\text{HAuCl}_4$  dans une solution du méthanol. Les fils d'or de mesure sont montés à la laque d'argent sur la trace dorée du substrat CdTe (figure III.4).





**Figure III.4 :** Schéma illustrant les prises de contact ohmiques sur les échantillons HgTe-CdTe destinés à la mesure de la conductivité et l'effet Hall.

### III.D TECHNIQUES DE MESURE

#### III.D.1 Mesure de l'effet Hall et de la conductivité [3.3]

##### III.D.1.a Principe de mesure

Dans le chapitre II nous avons donné l'expression de la constante de Hall :

$$R_H = \frac{\epsilon_y}{J_x B_z} = \frac{\epsilon_y}{J_x B}$$

Comme montré sur la figure III.5, l'échantillon est de dimensions (a, b, c).

$$\text{Or: } \epsilon_y = \frac{V_y}{b} = \frac{V_H}{b} \quad \text{et} \quad J_x = \frac{I_x}{a.b} = \frac{I}{a.b}$$

$$\text{D'où :} \quad R_H = \frac{a.V_H}{I .B}$$

$V_H$  est la tension de Hall mesurée,  $I$  est le courant qui traverse l'échantillon.

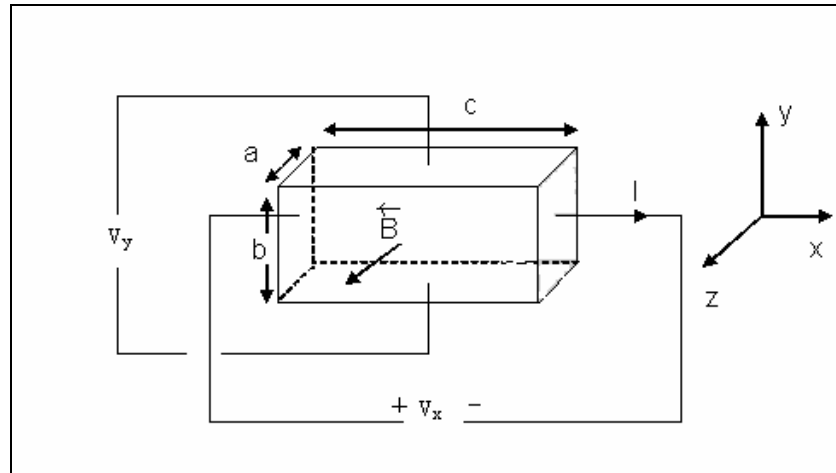
Le signe de  $R_H$  dépend du signe de  $V_H$ . À une température donnée, si  $R_H > 0$  les porteurs majoritaires sont des trous et l'échantillon est du type p, dans le cas contraire les porteurs majoritaires sont des électrons et l'échantillon est du type n.

La conductivité  $\sigma_0$  est mesurée à champ magnétique nul. Son expression est

$$\text{donnée par la relation : } \sigma_0 = \sigma_{xx} = \frac{J_x}{\epsilon_x}$$

$$\text{Or : } J_x = \frac{I_x}{a.b} = \frac{I}{a.b} \text{ et } \varepsilon_x = \frac{V_x}{c}. \text{ D'où : } \sigma_0 = \frac{c.I}{a.b.V_x}$$

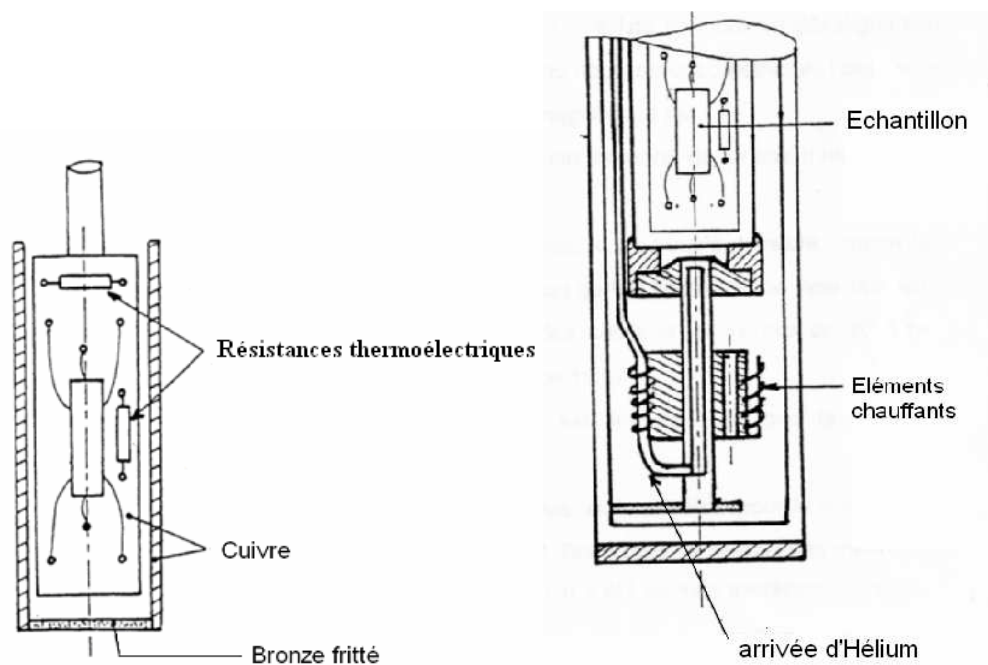
La mesure de  $I$ ,  $V_x$ ,  $a$ ,  $b$  et  $c$  conduit à  $\sigma_0$ .



**Figure III.5:** Schéma illustrant le principe de mesure de la constante de Hall et la conductivité

### III.D.1.b Montage des échantillons

La mesure de la constante de Hall et la conductivité ont été réalisées dans un cryostat à température variable (figure III.6 a).



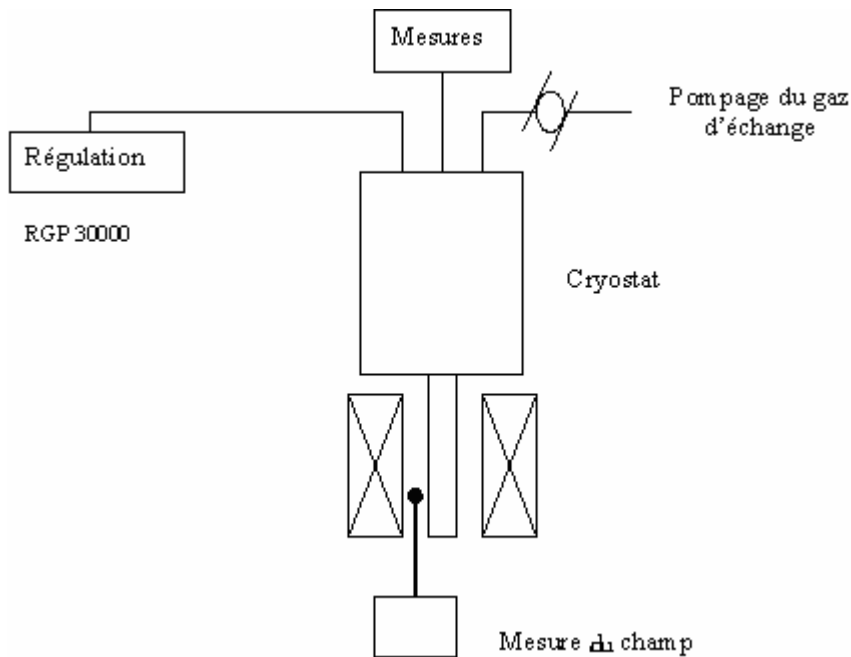
**Figure III. 6 :** Schéma du cryostat à température variable.

La température de l'échantillon est fixée par une consigne de chauffage (régulateur RGP 3000) de l'hélium aspiré depuis le vase réservoir par une pompe à membrane (Réciprotor).

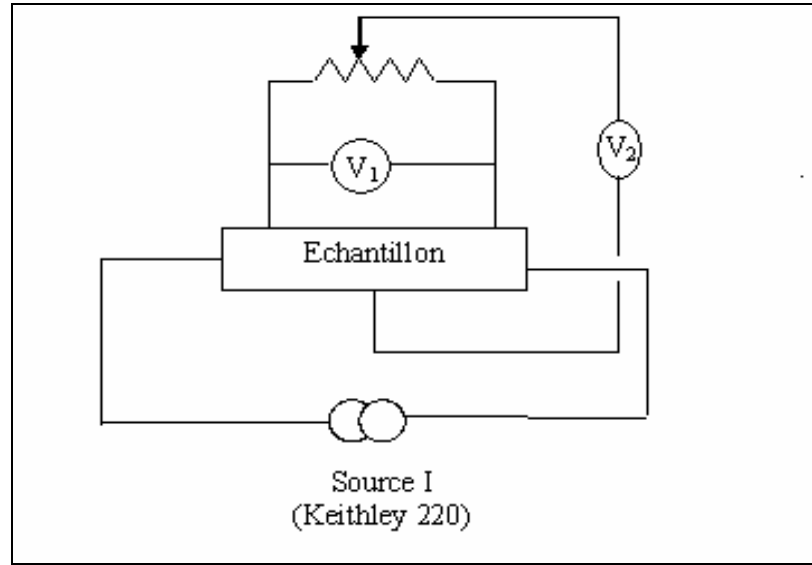
L'échantillon est placé sur un support en cuivre, isolé de ce dernier par un film mince de mylar. Pour assurer une bonne homogénéité de la température, le support est inséré dans un tube en cuivre fermé à son extrémité inférieure par un bronze fritté poreux (figure III.6. a). L'écoulement du gaz ( $T > 4,2\text{K}$ ) devient plus laminaire et la masse de cuivre assure une intégration des fluctuations de température.

La température est mesurée au moyen des sondes de carbone ( $T < 100\text{ K}$ ) ou de platine placées dans le voisinage immédiat de l'échantillon.

La cryostat est placé dans l'entrefer d'un électroaimant ( $B_{\text{max}}=1,2\text{ T}$ ) (figure III.6. b).



**Figure III. 6 b :** Schéma de la chaîne de mesures.



**Figure III.7 :** Montage utilisé pour la mesure de la conductivité et de l'effet Hall.

L'échantillon est alimenté par une source de courant continu Keithley220. Les tensions de conductivité et de Hall sont mesurées par les microvoltmètres  $V_1$  et  $V_2$  (figure III.7).

Dans le cas idéal, les prises de contact pour la mesure de l'effet Hall sont strictement en regard l'une l'autre. En réalité, il existe toujours un désalignement. Celui-ci est compensé par le montage potentiométrique. L'alignement fictif des sondes de Hall étant effectué à champ magnétique nul.

Nous sommes attachés à un certain nombre de précautions lors des mesures de la conductivité et de l'effet Hall.

- Le courant d'alimentation a été maintenu le plus faible possible compte tenu de la faible épaisseur des couches du superréseau de l'ordre du micron pour une largeur de 2 mm, soit une section typique de l'ordre de  $2 \cdot 10^{-3} \text{ mm}^2$ . Le courant choisi est  $I=10 \text{ } \mu\text{A}$ . Pour l'alliage ternaire  $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$  volumineux un courant  $I= 0.1\text{mA}$  traverse l'échantillon. Ces courants ont été choisis dans les parties linéaires des caractéristiques  $I=f(V)$  et  $V_H=f(I)$  mesurées au préalable.
- Lors de la mesure de la mobilité et de la constante de Hall, le champ magnétique a été choisi le plus faible possible à partir de la partie linéaire de la caractéristique  $V_H(H)$ . En effet, l'effet Hall est défini à champ magnétique tendant vers zéro. Nous avons utilisé  $B=0,1\text{T}$  pour le superréseau  $\text{HgTe/CdTe}$  et  $0,2 \text{ T}$  pour l'alliage  $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ .

- Pour annihiler d'éventuels effets liés à l'existence de gradient thermique, un effet de désalignement de sondes (magnétorésistance parasite s'ajoutant au signal de Hall) :

- La valeur mesurée de la tension  $V_x$  pour déterminer  $\sigma_0 = \frac{c.I}{a.b.V_x}$  a été moyennée

pour les deux sens du courant  $I$  soit  $V_x = 1/2[|V_x(I^+)| + |V_x(I^-)|]$ .

- La valeur mesurée de la tension de Hall  $V_H$  pour déterminer  $R_H = \frac{a.V_H}{I.B}$  a été

moyennée pour les deux orientations du champ magnétique (haute et basse) et les deux sens du courant .soit :

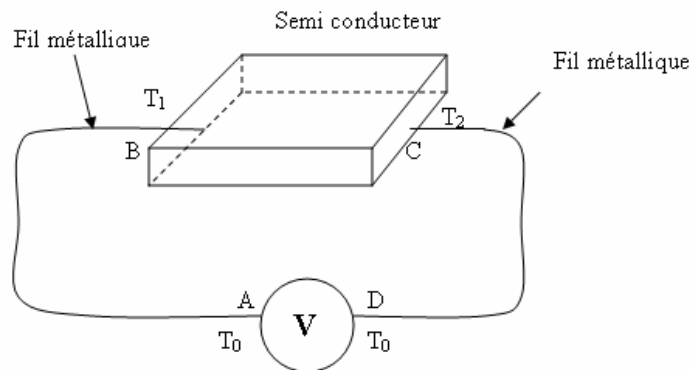
$$V_H = 1/4[|V_H(I^+, B^+)| + |V_H(I^-, B^-)| + |V_H(I^+, B^-)| + |V_H(I^-, B^+)|]. \text{ Ceci permet de}$$

sonder le volume de l'échantillon actif.

- Toutes les mesures ont été effectuées après stabilisation de la température de l'ensemble du porte échantillon afin d'éviter les effets magnétothermiques.

### III.D.2 Mesure de l'effet Seebeck [3.4]

Les deux cotés de semiconducteur sont à des températures  $T_1 \neq T_2$ . Il apparaît alors une tension détectée par un voltmètre.



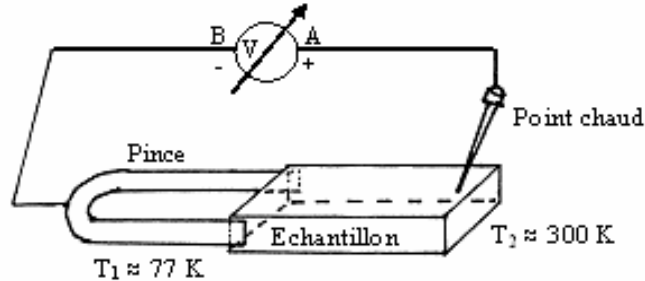
**Figure III.8 :** Principe de mesure du coefficient thermoélectrique  $\alpha$

$$\alpha_{sc} = \frac{dV}{dT} = \frac{\Delta V}{\Delta T}$$

La mesure de  $\Delta T$  se fait à l'aide d'un thermocouple.

La mesure de l'effet Seebeck permet la détermination du type d'un semi conducteur par effet Seebeck. Une partie de semi conducteur est plongée dans l'azote liquide ( $T=77K$ ) l'autre est au contact de l'atmosphère ( $T=300K$ ) ; la polarisation de voltmètre indique le

type de semi conducteur. Si le sens est direct, comme celui indiqué dans la figure III.9, le semi conducteur est de type n sinon il est du type p.



**Figure III.9 :** Détermination du type du semiconducteur par effet thermoélectrique

### III.D. 3 Mesure de l'effet Shubnikov- de Haas. [3.5]

L'observation préliminaire de l'effet Shubnikov-de Haas s'est manifestée à champ magnétique fort. L'échantillon est mis au centre d'une bobine supraconductrice ( $B_{\max} = 10$  T à 1,6K) dans un bain d'hélium liquide ( $1,4 \text{ K} < T < 4,2 \text{ K}$ ).

Des mesures à champs encore élevés ont été faites au service national des champs intenses de Grenoble (SNCI). Dans ce cas, l'échantillon est dans un cryostat au cœur d'une bobine résistive de Bitter, refroidie à la température d'Hélium liquide, qui produit un champ magnétique fort allant jusqu'à 20 T.

Pour observer les oscillations quantiques de la magnétorésistance, il nous a été nécessaire de procéder à une compensation de la variation monotone de la magnétorésistance par une méthode d'opposition.

## Références

- [3.1] J. R. Arthur, Surface Science 500, 189 (2002)
- [3.2] W. P. McCray, MBE Deserves a Place in the History Books, Nature Nanotechnology, 2, 5, 2-4 (2007).
- [3.3] V. V. Tsurkan, S.A. Ratseev, V.E. Tezlevan et S.I. Radautsan, Progress in Crystal Growth and Characterization, 10, 385-389, (1984)
- [3.4] K. Seeger, Semiconductor Physics An Introduction, Springer, (2004)
- [3.5] K. Suizu and S. Narita, Solid State Communications, Volume 10, Issue 7, Pages 627-631, (1972)

## Chapitre IV

# APPLICATION A L'ALLIAGE



### SOMMAIRE

<b>IV.A Introduction .....</b>	<b>82</b>
<b>IV.B Analyse de la constante de Hall.....</b>	<b>82</b>
<b>IV.C Calcul de l'énergie de Fermi.....</b>	<b>86</b>
<b>IV.D Calcul de l'énergie de l'état donneur .....</b>	<b>88</b>
<b>IV.E Analyse de la conductivité .....</b>	<b>89</b>
<b>IV.F Modélisation de la mobilité .....</b>	<b>90</b>
<b>IV.G Conclusion.....</b>	<b>92</b>

#### IV. A INTRODUCTION

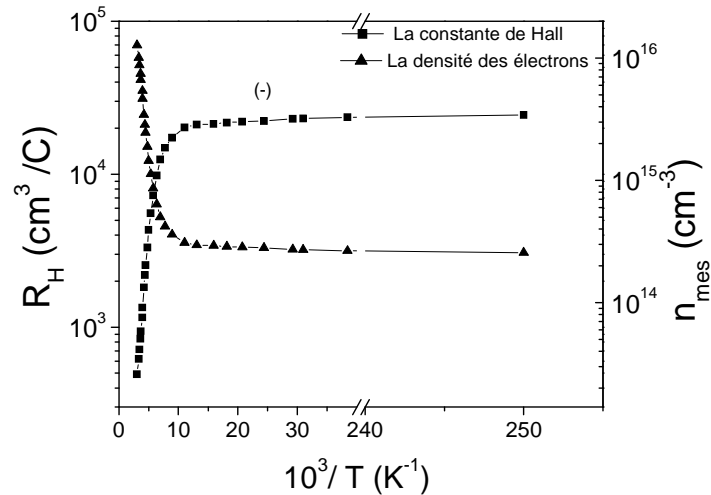
Le niveau de développement accompli dans les techniques de la croissance des semi-conducteurs a permis l'observation de plusieurs aspects expérimentaux très fins des propriétés optiques et de transport de ces structures. Parmi eux l'alliage II-VI ternaire  $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$  qui a été prédit comme une alternative stable pour l'application dans les appareils optoélectroniques infrarouges. Surtout dans la région de la deuxième fenêtre atmosphérique (autour de  $10\ \mu\text{m}$ ), qui a un grand intérêt dans les communications. Plusieurs publications rapportent sur la structure de bandes de ce système aussi bien que ses propriétés magnéto optiques [4.1].

L'étude de la dépendance de la constante de Hall, la conductivité et la mobilité respectivement avec la température révèle l'importance des mécanismes de diffusion. Le but de cette partie est de déterminer les propriétés du transport et de modéliser la mobilité dans  $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$  ( $x=0.22$ )

Dans tous nos calculs, la masse effective des trous a été fixée à  $m_h = 0.55 m_0$  [4.2]. L'origine d'énergie est prise au sommet de la bande de la valence ( $E_v = 0$  alors  $E_c = E_g$ ).

#### IV.B ANALYSE DE LA CONSTANTE DE HALL

Nos mesures de la constante de Hall ( $R_H < 0$ ) à différentes températures montre que l'échantillon est un semi-conducteur de type n (figure IV.1 ).



**Figure IV.1:** Constante de Hall et densité d'électron en fonction de la température.



Aux basses températures, dans le régime extrinsèque nous sommes en présence d'un gel de porteurs de charges pour  $4,2\text{K} < T < 25\text{K}$ . La densité des porteurs de charges est approximativement indépendante de la température. La constante Hall  $R_H$  diminue légèrement quand la température augmente pour  $4,2\text{K} < T < 50\text{K}$  indiquant une augmentation de la densité de porteurs comme décrit par la relation [4.3] :

$$n \approx \alpha \exp -(\Delta E_d / 2k_B T)$$

Dans cette relation :  $\alpha$  est une constante indépendante de la température et  $\Delta E_d = E_c - E_d$  est l'énergie d'activation des donneurs.

A partir de  $R_H = -\frac{1}{ne}$  on obtient :  $|R_H| \sim \alpha^{-1} \cdot \exp(\Delta E_d / 2k_B T)$

$$\text{D'où : } \ln |R_H| \sim \ln \alpha^{-1} + \frac{\Delta E_d}{2k_B T} \text{ et } \log_{10} |R_H| \sim \log_{10} \alpha^{-1} + \frac{\Delta E_d}{2 \ln(10) \cdot k_B T}$$

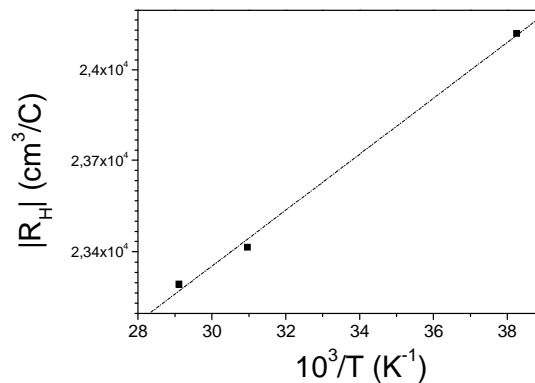
Finalement :

$$\log_{10} |R_H| \sim \log_{10} \alpha^{-1} + \frac{\Delta E_d}{2 \cdot 10^3 \ln(10) \cdot k_B} \frac{10^3}{T}$$

La courbe représentant  $\log |R_H|$  en fonction  $\frac{10^3}{T}$  est donc une droite d'équation :

$$\log_{10} |R_H| = a + b \frac{10^3}{T} \text{ avec : } b = \frac{\Delta E_d}{2 \cdot 10^3 \ln(10) \cdot k_B}$$

La détermination de la pente de cette droite va nous permettre d'estimer l'énergie  $\Delta E_d$  à l'aide de la relation :  $\Delta E_d = 2 \cdot 10^3 \ln(10) \cdot k_B \cdot b$



**Figure IV.2:** Variation de  $\log_{10}(R_H)$  en fonction de  $10^3/T$  dans le régime extrinsèque.

Le calcul de la tangente de la courbe de  $\log_{10}|R_H| = f(10^3/T)$  dans la figure IV.2 nous a permis de déterminer  $\Delta E_d = -0,67 \text{ meV}$ . Cela montre l'existence d'un état donneur à  $0,67 \text{ meV}$  au-dessus du bas de la bande de conduction ( $E_d = E_c - \Delta E_d = E_g + 0,67 \text{ meV}$ ).

Quand la température augmente, dans le régime intrinsèque, les électrons transitent thermiquement du niveau donneur (causé plutôt par les lacunes de Te et les interstitiels de Hg [4.4]) et de la bande de valence à la bande de conduction. Ce transit augmente la concentration des porteurs de charges.

Dans le domaine intrinsèque on a :  $n = p = n_i$

D'après la loi d'action de masse dans un semi-conducteur :  $n.p = N_c.N_v e^{-E_g/K_B T}$

$$\text{on a : } n = (N_c.N_v)^{1/2} e^{-E_g/2K_B T}$$

En remplaçant  $N_c$  et  $N_v$  par leurs expressions nous obtenons :

$$n = A.T^{3/2} \exp\left(\frac{-E_g}{2k_B T}\right); A \text{ étant une constante indépendante de la température.}$$

A partir de  $R_H = -\frac{1}{ne}$  on obtient :  $|R_H| \sim A.T^{-3/2}.\exp(E_g/2k_B T)$

$$\text{D'où : } |R_H T^{3/2}| \sim A.\exp(E_g/2k_B T)$$

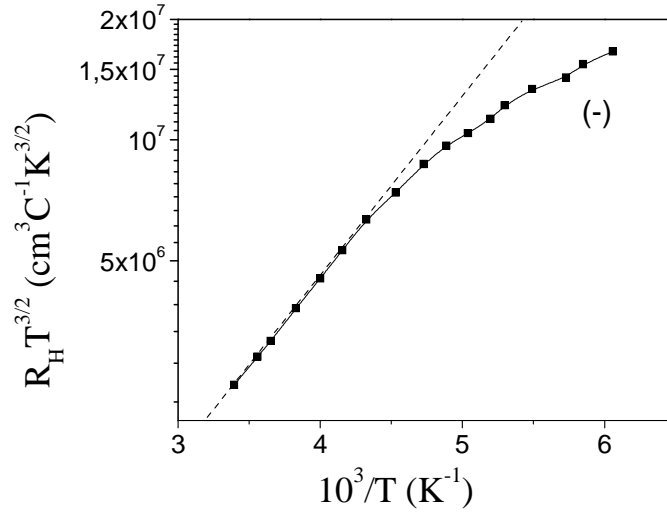
$$\text{Finalement : } \ln|R_H T^{3/2}| = \ln(A) + \frac{E_g}{2k_B T}$$

$$\text{D'où : } \log_{10}|R_H T^{3/2}| = \log_{10}(A) + \frac{E_g}{2.10^3 \ln(10)k_B} \frac{10^3}{T}$$

La courbe représentant  $\log|R_H T^{3/2}|$  en fonction  $\frac{10^3}{T}$  est donc une droite d'équation :

$$\log_{10}|R_H T^{3/2}| = a' + b' \frac{10^3}{T} \text{ avec : } b' = \frac{E_g}{2.10^3 \ln(e).k_B}$$

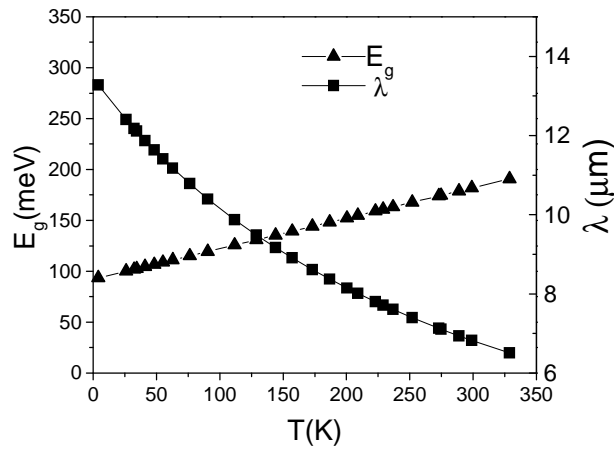
La détermination de la pente de cette droite va nous permettre d'estimer l'énergie de la bande interdite :  $E_g = 2.10^3 \ln(e).k_B.b'$



**Figure IV.3:** Variation de  $\log_{10}(R_H T^{3/2})$  en fonction  $10^3/T$  dans le régime intrinsèque.

La détermination de la pente de la droite  $\log_{10}|R_H T^{3/2}| = f\left(\frac{10^3}{T}\right)$  de la figure IV.3

nous a permis de déterminer une bande interdite  $E_g = 178$  meV qui est en bon accord avec  $E_g(300\text{K}, x=0.22) = 184$  meV calculée par la formule de Hansen et al [1.11]. La longueur d'onde de détection correspondante est de :  $\lambda = 6,89 \mu\text{m}$ . L'échantillon est donc un détecteur d'infrarouge moyen (MIR) à la température ambiante. Et pour le domaine de températures investis,  $6,9 \mu\text{m} \leq \lambda_c \leq 13,3 \mu\text{m}$ , c'est un détecteur d'infrarouge moyen (LWIR).



**Figure IV.4:** L'énergie de la bande interdite  $E_g$  et longueur d'onde de détection  $\lambda_c$  en fonction de la température.

La figure IV. 4 montre que  $E_g$  augmente linéairement avec la température  $T$  tandis que la longueur d'onde de détection  $\lambda_c$  décroît comme  $1/T$ .

#### IV.C CALCUL DE L'ENERGIE DE FERMİ

Le calcul de l'énergie de Fermi  $E_F$  à la température  $T$  est donné par l'expression de la densité  $n$  des électrons dans la bande de conduction :

$$n = \frac{2}{\sqrt{\pi}} N_c \int_0^\infty \frac{(E)^{1/2}}{1 + e^{(E - \eta)}} dE$$

Avec:  $\eta = \frac{E_F - E_c}{K_B T}$  et  $N_c = 2 \left( \frac{2\pi m^* k_B T}{h^2} \right)^{3/2}$

Nous avons itéré sur la valeur de  $E_F$ , entre 0 et  $E_g + 10 k_B T$ , ce qui donne une densité  $n$  voisine de la valeur  $n_{\text{mes}}$  mesurée par effet Hall.

L'énergie de la bande interdite est calculée en utilisant la formule de G. Hansen et al [1. 11] :

$$E_g(x, T) = -0,302 + 1,93x - 0,810x^2 + 0,832x^3 + 5,035 \cdot 10^{-4} (1-2x) T$$

Ici  $T$  est la température en Kelvin,  $E_g$  est l'énergie de la bande interdite du matériau en eV et  $x$  la valeur de la fraction de composition de  $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ .

La masse effective  $m^*$  a été calculée par le modèle de Kane [4.5].

$$m^* = \frac{1}{-0,6 + 6,333 \left( \frac{2}{E_g} + \frac{1}{E_g + 1} \right)} m_0$$

$m_0$  : est la masse de l'électron libre.

La concentration des porteurs de charges  $n_{\text{mes}}$  a été calculée à partir de la formule standard:

$$n_{\text{mes}} = \frac{r_H}{|R_H| \cdot e} \quad (\text{Pour commodité } r_H \text{ a été pris égal à l'unité}).$$

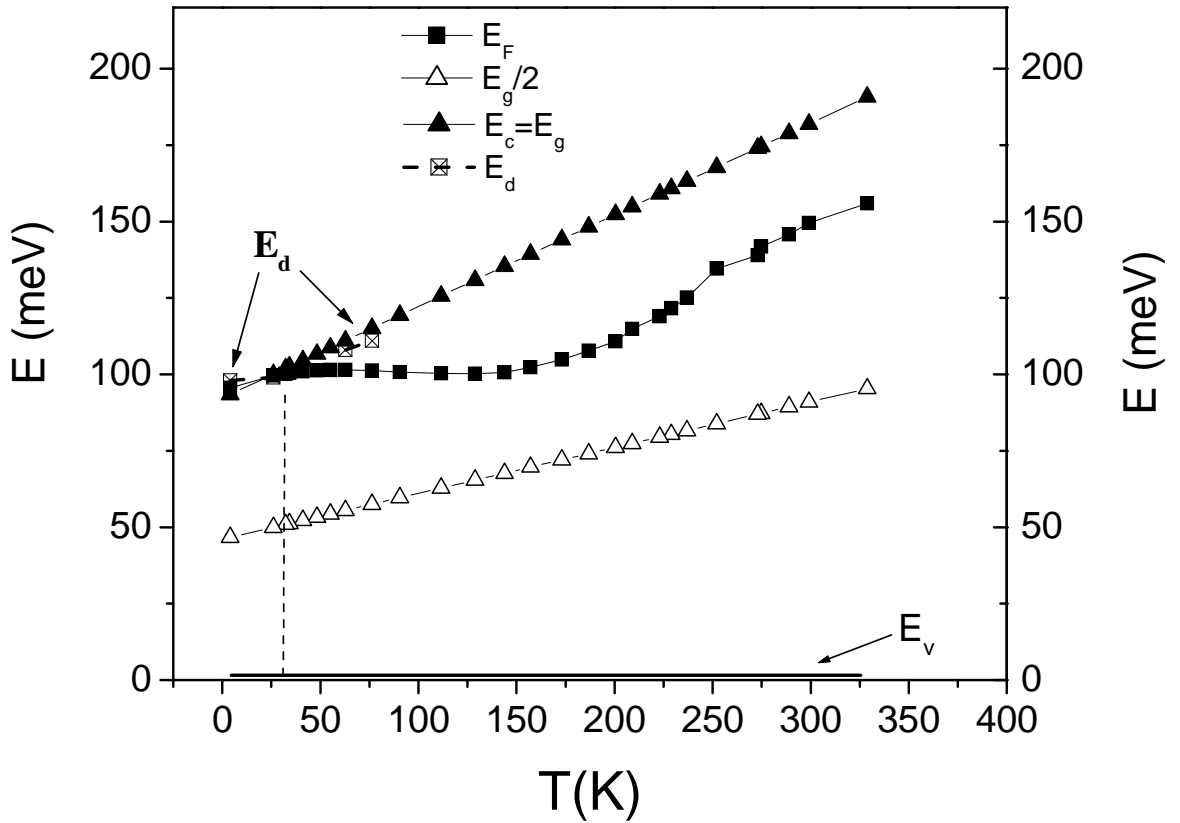
Pour déterminer l'énergie du niveau donneur, nous avons itéré dans les formules suivantes donnant l'expression de  $E_F$  en fonction de la température [4.6] :

$$\left\{ \begin{array}{ll} \text{Pour : } k_B T < E_g/10 & E_F = E_d + k_B T \ln \left\{ \frac{1}{4} \left[ -1 + \left( 1 + 8 \frac{N_d}{N_c} e^{(E_c - E_d)/k_B T} \right)^{1/2} \right] \right\} \\ \text{Pour : } k_B T > E_g/10 & E_F = \frac{E_c + E_v}{2} + \frac{k_B T}{2} \ln \frac{N_v}{N_c} \end{array} \right.$$

Dans ces formules nous avons itéré sur les valeurs de  $E_d$  entre 0 et  $E_g + 5 k_B T$ . L'énergie  $E_d$ , est par conséquent, celle qui donne la valeur de  $E_F$  calculée auparavant. Le calcul de  $E_d$  a été fait dans le régime extrinsèque ( $4,2\text{K} \leq T \leq 77\text{K}$ ).

La densité des impuretés donneuses dans l'échantillon est  $N_d \approx n_{\text{mes}} \approx 5,24 \cdot 10^{14} \text{ cm}^{-3}$  dans le régime de gel des porteurs de charges.

La concentration d'électrons  $n_{\text{mes}}$  en fonction de la température est montrée dans la figure IV.1. L'énergie de Fermi correspondante calculée est donnée dans la figure IV.5.



**Figure IV.5 :** Les énergies de Fermi et de la bande interdite calculées en fonction de la température.[4.7]

Pour  $4,2 \text{ K} \leq T \leq 76 \text{ K}$ ,  $E_F$  est aux alentours de la bande de conduction de quelques  $k_B T$  : le gaz d'électrons est dégénéré. Ailleurs,  $E_F$  s'éloigne de  $E_c$  et le gaz d'électrons est non dégénéré.

#### IV.D CALCUL DE L'ENERGIE DE L'ETAT DONNEUR

Pour calculer la valeur de l'énergie du niveau donneur  $E_d$ , nous avons itéré sur des valeurs de  $E_d$  dans les formules suivantes donnant les expressions de  $E_F$  en fonction de la température [4.6] :

$$\left\{ \begin{array}{ll} \text{Pour : } k_B T < E_g/10 & E_F = E_d + k_B T \ln \left\{ \frac{1}{4} \left[ -1 + \left( 1 + 8 \frac{N_d}{N_c} e^{(E_c - E_d)/k_B T} \right)^{1/2} \right] \right\} \\ \text{Pour : } k_B T > E_g/10 & E_F = \frac{E_c + E_v}{2} + \frac{k_B T}{2} \ln \left( \frac{N_v}{N_c} \right) \end{array} \right.$$

L'énergie  $E_d$  est donc celle qui donne une valeur de l'énergie de Fermi très voisine de celle calculée précédemment.

Le calcul de  $E_d$  (Tableau IV.1) a été fait dans le régime extrinsèque ( $4.2\text{ K} \leq T \leq 77\text{ K}$ ).

La densité des impuretés de type donneur dans l'échantillon est  $N_d \approx n_{\text{mes}} \approx 5.24 \cdot 10^{14} \text{ cm}^{-3}$  cette valeur est déterminée expérimentalement dans le régime de gel des porteurs.

Aux basses températures (25 K-100 K), l'énergie thermique est suffisante pour ioniser tous les donneurs et on atteint un plateau de concentration de porteurs. Cela nous permet d'extraire la densité  $N_D$  :

$$n \approx N_D - N_A \approx N_D \approx 5.24 \cdot 10^{14} \text{ cm}^{-3}.$$

**Tableau IV.1:** Les valeurs de  $E_g$ ,  $E_F$  et  $E_d$  calculées à 4,2K et 77K.

T(K)	$E_g$ (meV)	$E_F$ (meV)	$E_d$ (meV)	$\Delta E_d$ (meV)
4,2	95,2	97	98	-2,8
77	116,9	103	111	5,9

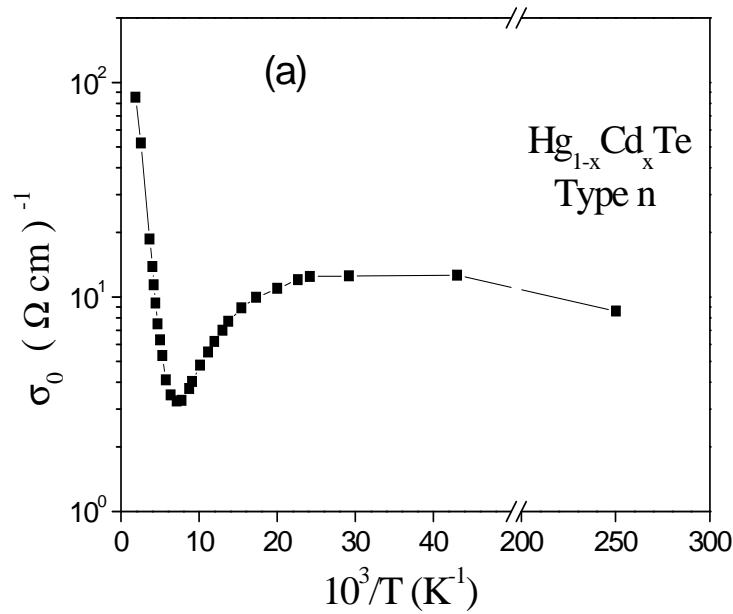
La figure IV.5 montre que  $E_d$  augmente linéairement avec T et passe en dessous de  $E_c$  à  $T = 30\text{ K}$ . A  $T = 4.2\text{ K}$ , les donneurs commencent à s'ioniser et  $E_F = 98\text{ meV}$  augmente jusqu'à  $100\text{ meV}$  à  $T = 30\text{ K}$ .

Pour  $30 \text{ K} \leq T \leq 130 \text{ K}$ ,  $E_F = 100 \text{ meV} = \text{constante}$ : tous les donneurs sont ionisés. Après  $E_F$  augmente jusqu'à  $150 \text{ meV}$  à l'ambiante ceci est dû au passage des électrons de la bande de valence à la bande de conduction.

A  $T = 4,2 \text{ K}$ , nos calculs (Tableau IV.1) montrent que :  $E_d - E_c = 2,8 \text{ meV}$  et  $E_d - E_F = 1 \text{ meV} \approx 0,67 \text{ meV}$  déduite de nos mesures d'effet Hall. (càd  $E_d > E_F > E_c$  (Figure IV.5)).

Un état résonnant de  $6 \text{ meV}$  au-dessus de la bande de conduction à  $4.2\text{K}$  a été observé dans des mesures de l'effet Shubnikov de Haas dans  $\text{Hg}_{0,8}\text{Cd}_{0,2}\text{Te}$  [4.8]. Ce résultat est en accord avec notre  $E_d - E_c = 2,8 \text{ meV}$  dans  $\text{Hg}_{0,8}\text{Cd}_{0,22}\text{Te}$  dégénérée à cette température.

#### IV.E ANALYSE DE LA CONDUCTIVITE



**Figure IV.6:** Variation de la conductivité en fonction de température.

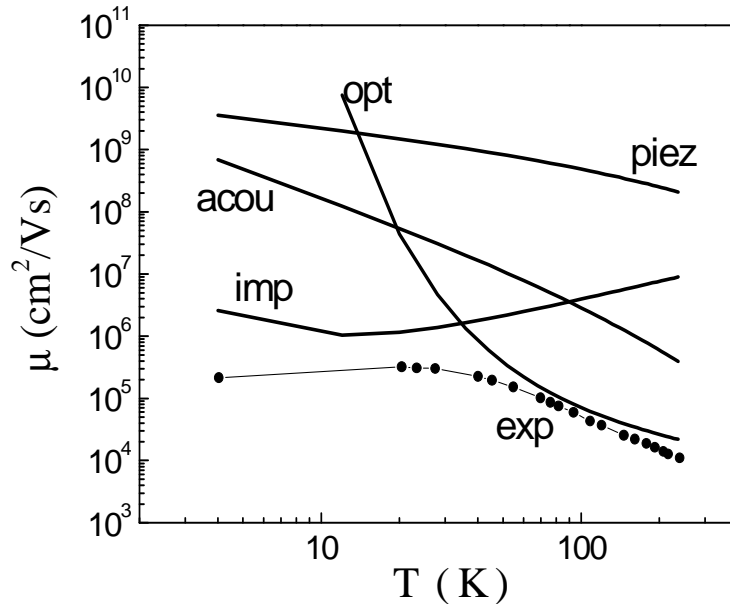
La concentration intrinsèque  $n_i$  augmente exponentiellement avec la température suivant la relation :  $n_i = \sqrt{N_C N_V} \cdot \exp(-E_g / 2K_B T)$ . Or la conductivité intrinsèque  $\sigma_0$  est exprimée par la relation  $\sigma_0 = |e| n_i \mu_h (1+b)$  avec  $b = \mu_e / \mu_h$ . La figure IV.6 montre l'évolution de  $\sigma_0$  avec  $1/T$ . Quand la température est réduite,  $\sigma_0$  entre dans la région extrinsèque où la concentration des porteurs de charges est constante et  $\sigma_0$  augmente, pour

le cas le plus simple  $\sigma_0 \propto \tau_0 \propto T^{-3/2}$ . À des températures plus basses, nous assistons à un gel des porteurs.

#### IV.F MODELISATION DE LA MOBILITE

Dans nos calculs de la mobilité électronique (§ II.C) nous avons inclus quatre types de processus de diffusion notamment, la diffusion par les phonons acoustiques, la diffusion piézo-électrique, la diffusion par les phonons optiques polaires et la diffusion par les impuretés ionisées. La mobilité de Hall est :  $\mu_H = |R_H \cdot \sigma_0|$ , où  $R_H$  est le coefficient de Hall et  $\sigma_0$  la conductivité sans champ magnétique va être comparé à la mobilité électronique  $\mu$  calculée.

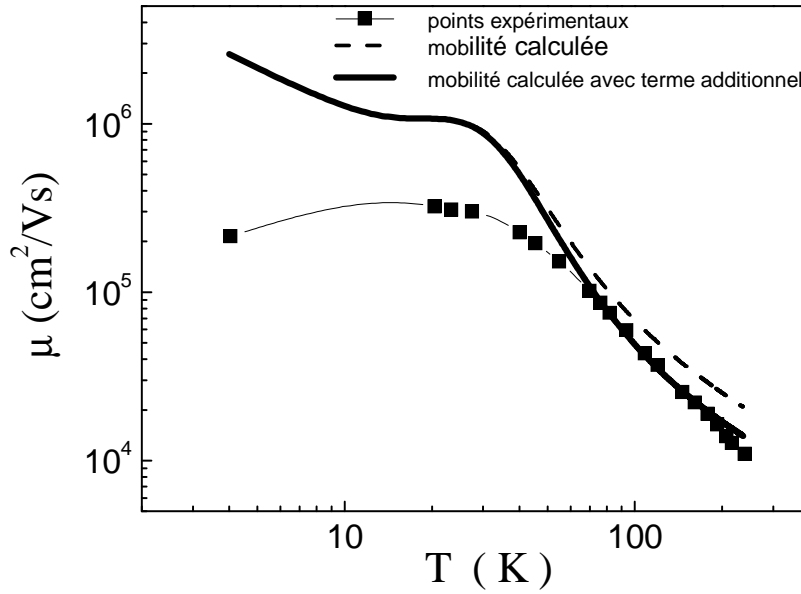
La figure IV.7 montre l'effet des mécanismes de diffusion de chaque processus sur la mobilité électronique. La diffusion par les impuretés ionisées domine au-dessous de 25 K, la diffusion par les phonons optiques domine à hautes températures ( $>70\text{K}$ ) et la mobilité est générée par les deux mécanismes de diffusion dans le domaine de température intermédiaire [4.7].



**Figure IV.7:** Variation de la mobilité électronique en fonction de la température. Les cercles fermés représentent les résultats expérimentaux. Les autres courbes représentent les contributions des quatre mécanismes de diffusion.



La figure IV.8 montre qu'aux basses températures, notre mobilité calculée est à peu près 10 fois plus grande que celle mesurée. Ce désaccord peut être expliqué par l'effet des impuretés de type accepteur et la non parabolicité de la bande de conduction que nous n'avons pas pris en compte dans nos calculs. Cette différence est réduite à un facteur de 1,3 pour des températures plus hautes [4.7].



**Figure IV.8 :** Mobilité calculée et mobilité expérimentale en fonction de la température.

Dans le but d'améliorer l'accord entre la théorie et l'expérience, dans le régime intrinsèque, nous avons ajouté un terme remplaçant les mécanismes de diffusion qu'on n'a pas discuté dans ce chapitre tel que la diffusion de l'électron-trou et la diffusion par phonons transversaux optiques. Nous avons estimé un tel terme par une fonction d'essai:  $\mu_a = \mu_1 \exp(\mu_2/T)$  [4.9] où  $\mu_1 = 15835 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$  et  $\mu_2 = 239 \text{ K}$  sont nos paramètres d'ajustement appropriés [4.7]. Ces valeurs ont été déterminées en minimisant la somme de carrés qui caractérisent la qualité d'ajustement. En tenant compte de ce terme additionnel, à l'aide de la règle de Matthiessen  $\frac{1}{\mu} = \sum_i \frac{1}{\mu_i}$ , nous avons obtenus un bon accord pour des températures plus hautes que 70 K comme il est montré sur la figure IV.8.

## V.G CONCLUSION

La caractérisation de cet alliage semiconducteur de type n est résumée dans le tableau IV.2. Nous constatons en particulier que le gaz d'électrons est dégénéré à  $T=4.2\text{ K}$  avec une haute mobilité de Hall  $\mu_H = 2 \cdot 10^5\text{ cm}^2/\text{Vs}$  et une concentration d'électrons de  $n = 2,52 \cdot 10^{14}\text{ cm}^{-3}$  et une faible conductivité de  $\sigma_0=8,5\text{ }\Omega/\text{cm}$  en accord avec la faible bande interdite mesurée  $E_g=178\text{ meV}$  et théorique  $E_g(x=0.22, 300\text{ K})=183\text{ meV}$ . Quand la température augmente vers l'ambiante la mobilité des électrons décroît comme prévu par la diffusion par les phonons tandis que la conductivité augmente.

**Tableau IV.2:** Caractéristiques de l'alliage semi-conducteur  $\text{Hg}_{0,78}\text{Cd}_{0,22}\text{Te}$  de type n

T(K)	$n(\text{cm}^{-3})$	$\mu_H(\text{cm}^2/\text{V}\cdot\text{s})$	$\sigma_0(\Omega\text{ cm}^{-1})$
4	$2,50 \cdot 10^{14}$	200 000	8,50
77	$3,01 \cdot 10^{14}$	140 000	6,86
280	$1,03 \cdot 10^{16}$	$\approx 10\text{ 000}$	17,82

Ces résultats sont en accord avec le fait que pour une composition faible en Cadmium ( $x=0,20$ ) l'alliage  $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$  a des propriétés électroniques proches de celles du semimétal  $\text{HgTe}$ .

## Références

- [4.1] J. L. Schmit, J. Appl. Phys. 41, 2876, (1990)
- [4.2] J. Wenus, J. Rutkowski, A. Rogalski, IEEE trans. On electron devices, 48, 7, 1326-1332 (2001).
- [4.3] K. Seeger, Semiconductor physics, an introduction, chap 6 p.159-221, Springer, (2002).
- [4.4] R. Dornhaus, H. Happ, K.H. Müller, G. Nimtz, W. Schlabit, P. Zaplinski, et G. Bauer, Proc. XIIthInt. Conf. Phys. Semicond., Stuttgart 1974, édité par M.H. Pilkuhn p.1157. Teubner, Stuttgart (1974).
- [4.5] M. A. Kinch, M. J Brau, A. Simmons, J. Appl. Phys.44, 1649 (1973).
- [4.6] P. Kiéev, Semiconductor physics, Chap. 3, Mir, Moscou, (1975).
- [4.7] A. EL Abidi, A. Nafidi, A. EL Kaaouachi, and H. Chaib, Electron transport in nanosystems. NATO Science for peace and security Series-B: physics and biophysics, p.383-394 Springer Science + B.V (2008).
- [4.8] R. Dornhaus, G. Nimtz, W. Schlabit, H. burkhard, Solid State Commun, 17, 837 (1975).
- [4.9] P. Moravec, R. Grill, J. Franc, R. Vaghova, P. Höschl and E. Belas, Semicond. Sci. Tecghnol, 16 7-134, (2001).

## Chapitre V

# Application aux superréseaux HgTe/CdTe

### SOMMAIRE

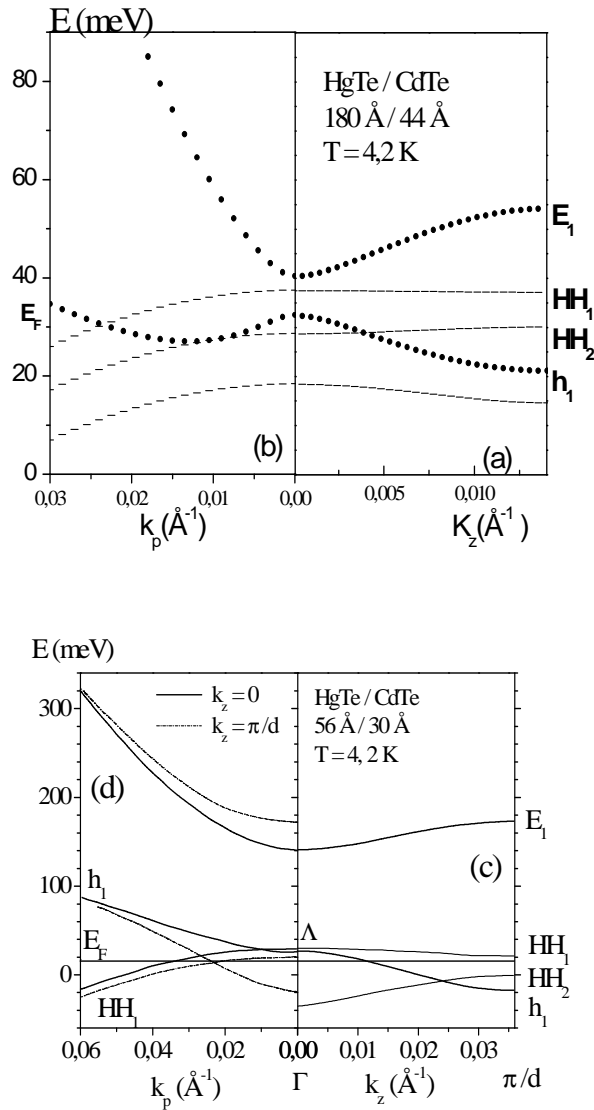
<b>V.A Introduction.....</b>	<b>95</b>
<b>V. B Résultats de calcul des spectres d'énergie.....</b>	<b>95</b>
<b>V. C. Application au superréseau HgTe (56 Å)/ CdTe (30 Å) .....</b>	<b>97</b>
V.C.1 Etude de la diffraction de Braag et analyse de la agnétorésistance.....	97
V.C.2 Conductivité, constante de Hall et mobilité de Hall.....	98
V.C.3 Analyse de l'effet thermoélectrique .....	100
V.C.4 Analyse de l'effet Shubnikov -de Haas .....	101
V.C.5 Calcul des niveaux de Landau .....	102
<b>V. D. Application au superréseau HgTe (180 Å)/ CdTe (44 Å) .....</b>	<b>103</b>
V.D.1 Analyse de la magnétorésistance et de la résistance de Hall .....	103
V.D.2 Conductivité, constante de Hall, et mobilité de Hall .....	104
V. D.3 Variation de l'énergie de Fermi $E_F$ (T) pour un transport bidimensionnel (2D) et tridimensionnel (3D) .....	106
<b>V. E. Conclusion .....</b>	<b>107</b>

## V. A INTRODUCTION

Dans ce chapitre nous allons présenter et discuter les résultats de mesures et de calculs et les interprétations qui en découlent. Il comprendra deux types d'échantillons étudiés :

- Un superréseau semi-conducteur HgTe (56 Å)/CdTe (30 Å).
- Un superréseau semi-métallique HgTe(180 Å)/CdTe (44 Å).

## V .B RESULTATS DE CALCUL DES SPECTRES D' ENERGIE

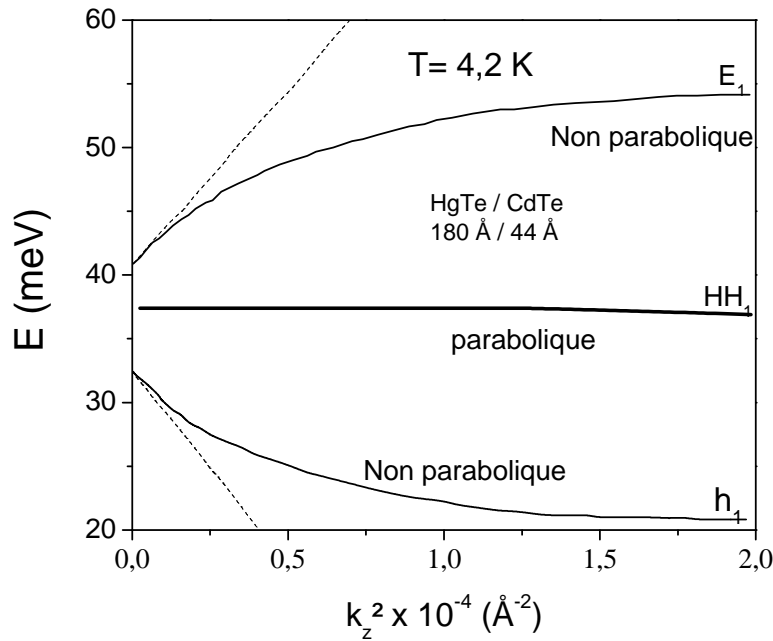


**Figure V.1:** Calcul de bandes d'énergie dans la direction  $k_z$  (a ; c) et en fonction de  $k_p(k_x, k_y)$  (b ; d) du superréseau HgTe/CdTe à la température  $T = 4.2$  K,  $E_F$  est le niveau de Fermi.

Les figures V. 1.a.c et V. 1.b.d montrent les courbes  $E(k_z)$  et  $E(k_p)$  respectivement suivant  $k_z$  et dans le plan dans le cas de nos deux échantillons de période  $d=d_1+d_2$  et de rapport  $d_1/d_2$  différent.

Les figures V. 1.a.b correspondent à l'échantillon (18 nm / 4,4nm). L'épaisseur  $d_1=18$  nm et le rapport  $d_1/d_2 = 4.1$  sont grands, ceci conduit à une faible bande interdite  $E_g = 2,5$  meV. Suivant  $k_p$ , les bandes  $HH_1$  et  $h_1$  en dessous du niveau de Fermi sont pleines, soit une conduction de type p semimétallique assurée par les trous lourds et les trous légers.

Les figures V. 1.c.d correspondent à l'échantillon (5,6 nm/3 nm). L'épaisseur  $d_1=5,6$  nm et le rapport  $d_1/d_2 = 1,87$  sont faibles ceci conduit à une large bande interdite  $E_g = 112$  meV et un comportement semiconducteur. Suivant  $k_p$ , la bande  $HH_1$  en dessous du niveau de Fermi est pleine soit une conduction semiconductrice de type p assurée par les trous lourds.



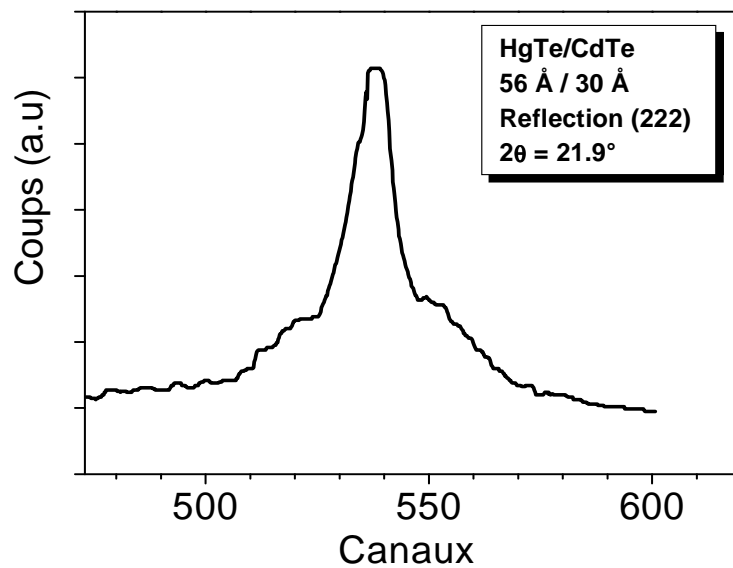
**Figure V.2:** L'énergie  $E$  en fonction de  $k_z^2$  pour les bandes  $E_1$ ,  $HH_1$  et  $h_1$  à la température 4,2 K

Le tracé des énergies  $E_1$ ,  $h_1$  et  $HH_1$  en fonction de  $k_z^2$  est porté sur la figure V.2. Le cas parabolique donnerait des droites, ce qui est le cas pour la bande des trous lourds  $HH_1$ , alors que les bandes d'électrons  $E_1$  et de trous légers  $h_1$  (des particules légères) sont non paraboliques.

## V. C. APPLICATION AU SUPERRESEAU HgTe (56 Å)/ CdTe (30 Å)

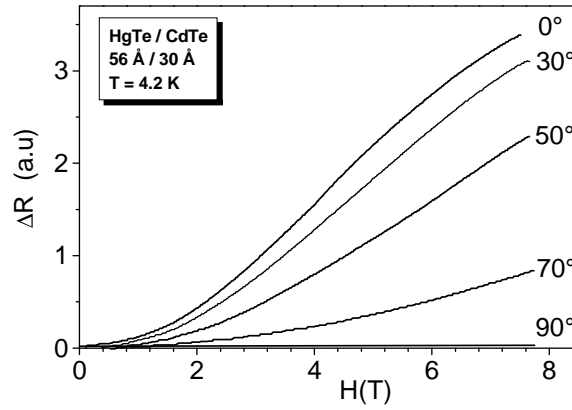
### V. C.1 Etude de la diffraction de Bragg et analyse de la magnétorésistance

Des séries de marches sont observés autour de la réflexion de Bragg (222), correspondant aux répliques oscillantes décrites par Arch [5.1] (Voir figure V.3). La différence entre leurs résultats et les nôtres tient sans doute à la monochromaticité et la puissance de leurs sources synchrones utilisées. L'échantillon se présente comme une structure modulée avec une haute qualité aux interfaces.



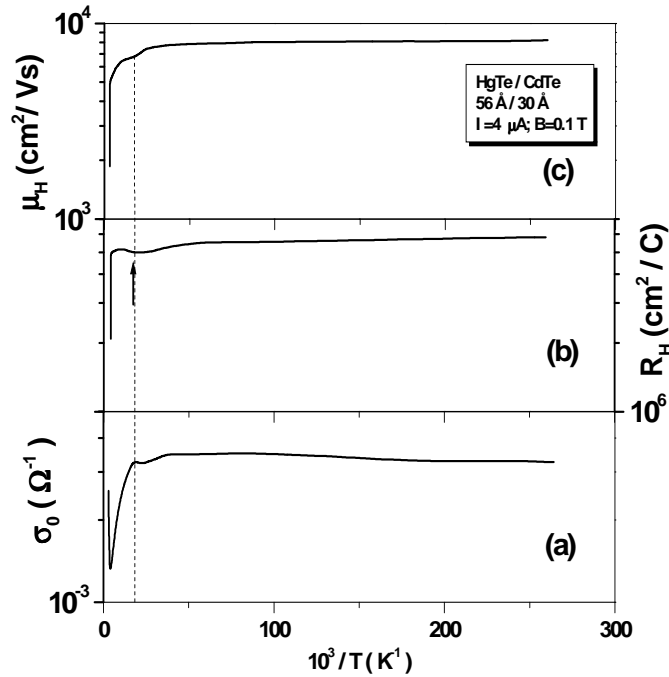
**Figure V.3:** Profil de la diffraction des rayons X à température ambiante autour de la réflexion de Bragg (222) du superréseau HgTe/CdTe.

La figure V.4 montre que la variation de la magnétorésistance  $\Delta R$  disparaît quand le champ magnétique est parallèle au plan du superréseau indiquant un comportement bidimensionnel (2D) [5.2].



**Figure V.4:** Variation de la magnétorésistance transversale avec le champ magnétique pour différentes valeurs de l'angle entre le champ magnétique et la normale à la surface de superréseau HgTe/CdTe.

#### V. C.2 Conductivité, constante de Hall et mobilité de Hall



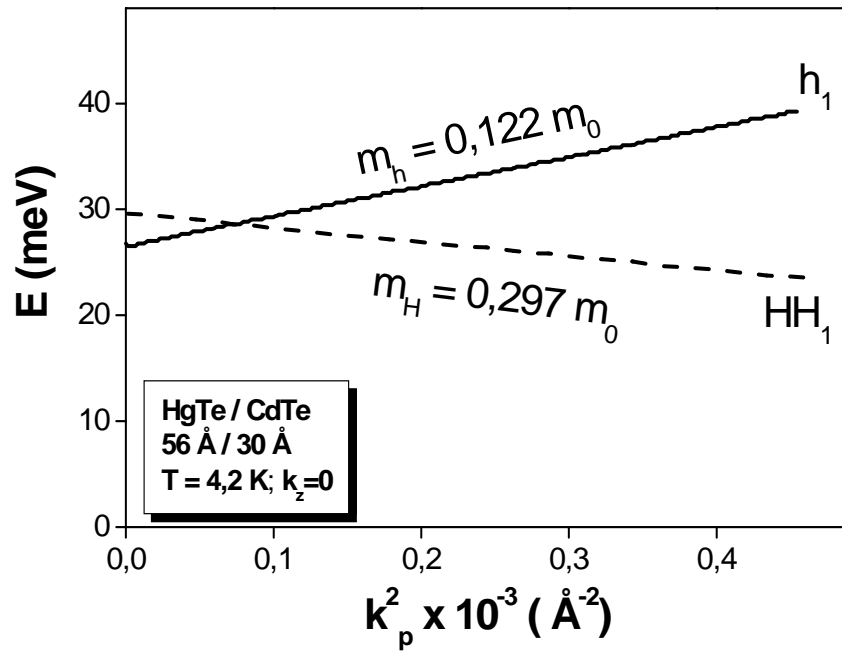
**Figure V.5:** Variation en fonction de l'inverse de la température de a) la conductivité b) la constante de Hall et c) la mobilité de Hall du superréseau HgTe/CdTe.

La diminution de  $R_H$  ( $1/T$ ) à 40 K montrée sur la figure V.5.b peut être due à l'accouplement entre les puits de HgTe (petit  $d_1/d_2$  et  $d_2$ ), à l'élargissement des sous bandes



des porteurs sous l'influence du champ magnétique et/ou au chevauchement impliquées entre les sous - bandes de porteurs ( $HH_1$ ) et ( $h_1$ ) au point  $(k_z; k_p) = (\pi/d; 0.023 \text{ \AA}^{-1})$  le long de  $E(k_p)$  sur la Figure V.1.d. Dans le régime intrinsèque, la mesure de la pente de la droite  $R_H T^{3/2}$  donne la valeur de l'énergie de la bande interdite :  $E_g = E_1 - HH_1 = 190 \text{ meV}$  ; en accord avec la valeur calculée  $E_g(\Gamma, 300 \text{ K}) = 178 \text{ meV}$  d'après la structure de bande dans la Figure V.1.c d.

Aux basses températures, l'échantillon montre que c'est un semi conducteur de type p avec une concentration  $p = 1.84 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$  et une mobilité de Hall  $\mu_p = 8200 \text{ cm}^2 / \text{Vs}$ . Les trous lourds du superréseau dominant la conduction dans le plan (d'après la Figure V.1.d). La figure V.6, donne le rapport des masses des trous lourds et trous légers:  $m_{HH_1}^* = 2,434 m_{h_1}^*$ .



**Figure V.6:** Détermination des masses effectives de l'électron  $m_{HH_1}^*$  et  $m_{h_1}^*$  respectivement pour les trous lourds  $HH_1$  et les sous bandes des trous légers  $h_1$  à 4.2K au centre  $\Gamma$  de la première zone de Brillouin du superréseau HgTe/CdTe.

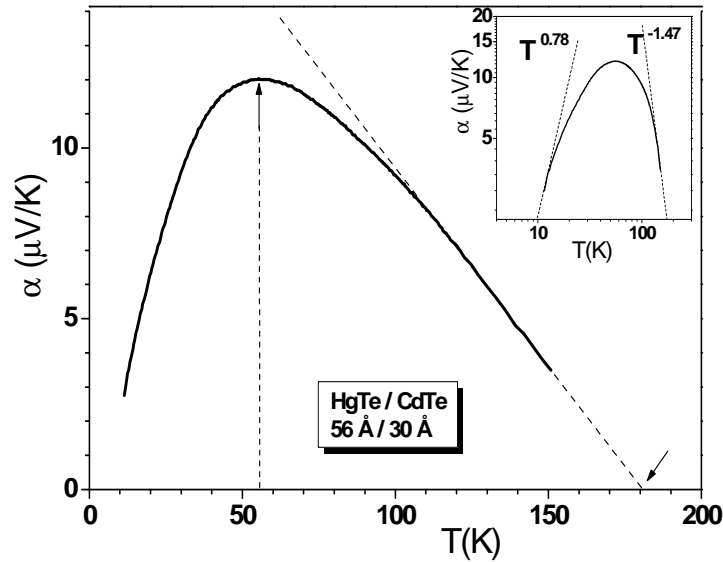
Les bandes  $HH_1$  et  $h_1$  sont paraboliques d'après la figure V.6. Ce qui nous permet d'estimer l'énergie de Fermi (2D) à :  $|E_F - E_{HH_1}| = |p\pi\hbar^2/m_{HH_1}^*| = 14 \text{ meV}$ . Cette énergie est indiquée sur la figure V.1. (c.d).

### V.C.3 Analyse de l'effet thermoélectrique

Les mesures du coefficient thermoélectrique  $\alpha$  ont indiqué une conductivité de type p ( $\alpha > 0$ ) ce qui est en accord avec le résultat de l'effet Hall (voir figure V.5.b).

L'encart de la figure V.7 montre qu'aux basses températures,  $\alpha \sim T^{0.8}$  ce qui est en accord avec la théorie où :  $\alpha = \frac{\pi^2 k_B^2 T}{3 e E_F} (s+1)$  (Formule (C13) de l'annexe C) et le temps de collision est :  $\tau \sim E^{s-(1/2)}$ .

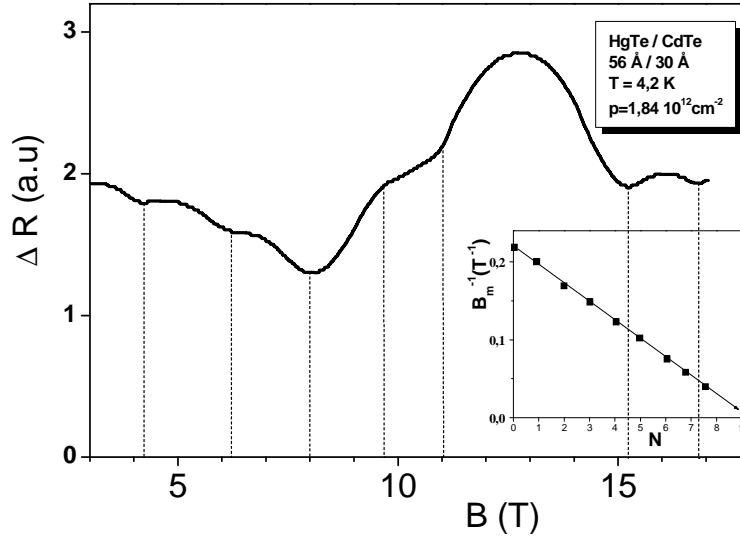
Ceci nous a permis d'estimer l'énergie de Fermi à  $E_F = 12 \text{ meV}$  (en accord avec le calcul de  $|E_F - E_{HH_1}| = 14 \text{ meV}$ ) [5.2] avec :  $s = 2,06$  correspondant à la diffusion des trous par les impuretés ionisées. Il est pertinent ici de signaler que le maximum de  $\alpha$  à  $T = 55,2 \text{ K}$  correspondent à la chute de la mobilité de Hall sur la "figure.V.5.c". Ici  $m_{HH_1}^* = 2,434 m_{h_1}$ . À  $T = 190 \text{ K}$ , une inversion de signe de  $\alpha$  est attendu. Elle correspond exactement au minimum de la conductivité  $\sigma_0$  sur la figure V.5.a. Dans le régime intrinsèque  $\alpha \sim T^{-3/2}$  montre une diffusion des trous par les phonons.



**Figure V.7:** Coefficient thermoélectrique du superréseau HgTe/CdTe en fonction de la température.

#### V.C.4 Analyse de l'effet Shubnikov- de Haas (SDH)

Une concentration  $p=1,84 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$  et une mobilité de Hall relativement élevée de l'échantillon aux basses températures, nous ont permis d'observer l'effet SDH jusqu'à 18 Tesla. Les résultats sont représentés sur la figure V.8.



**Figure V.8:** Variation de la magnétorésistance transversale pour le champ magnétique fort appliqué au superréseau HgTe/CdTe.

A partir de l'équation (2.62) nous déduisons l'expression de  $p$  (2D) en fonction de la période d'oscillation :  $p = e / \pi \hbar \Delta \left( \frac{1}{B} \right)$

Tenant compte du mécanisme de l'effet SDH expliqué dans le chapitre II, Les minima de la magnétorésistance correspondent aux valeurs du champ magnétique  $B_m$  qui vérifient la relation :  $E_F = E_N$  ( $E_N$  est l'énergie du niveau de Landau).

C'est à dire :

$$E_F = \left( N + \frac{1}{2} \right) \frac{\hbar e B_m}{m^*}$$

En tenant compte de l'expression (2.60) on obtient :

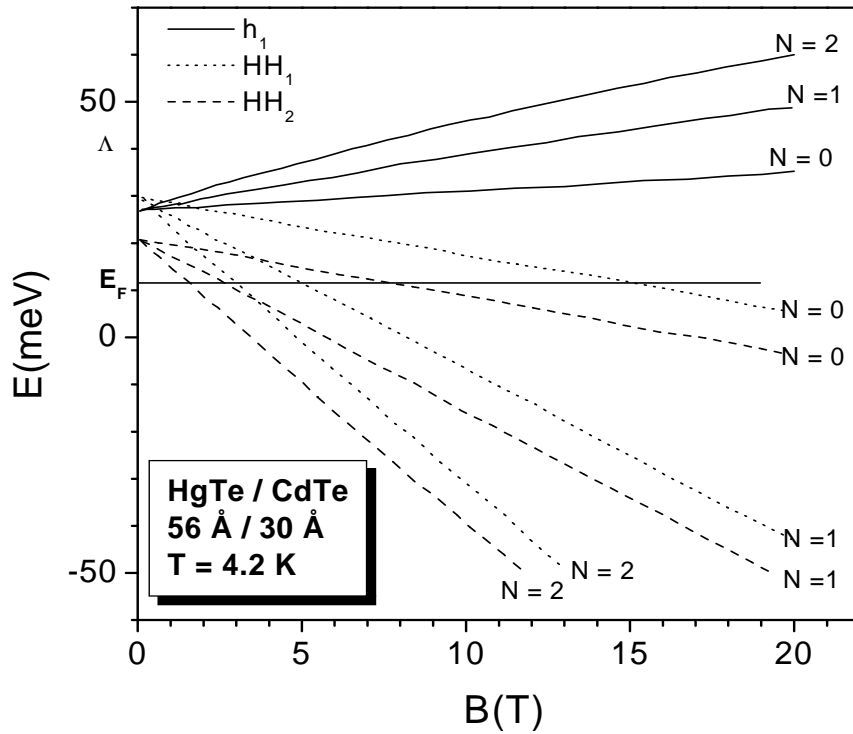
$$\frac{1}{B_m} = \Delta \left( \frac{1}{B} \right) \left( N + \frac{1}{2} \right)$$

Ceci montre que la pente de la droite représentant les valeurs des minima de  $B_m^{-1}$  en fonction d'une série d'entier consécutifs  $N$  (indices correspondant aux niveaux de Landau) n'est que la période des oscillations de la magnétorésistance (2D).

En encart dans la figure V.8, la mesure de la pente donne une valeur de période d'oscillation égale à :  $0,027 \text{ T}^{-1}$ , d'où :  $p = 1,80 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$  qui est en bon accord avec celle de l'effet Hall à champ faible [5.2]

Ici nous avons déduit la masse effective du gaz des trous lourds dégénéré à  $m^* = \frac{\hbar^2 \pi p}{E_F} = 0.308 m_0$ , qui est en accord avec  $m_{\text{HH}_1}^* = 0,297 m_0$  calculée à partir de la figure.V.6.

### V.C.5 Calcul des niveaux de Landau :



**Figure V.9:** Calcul du niveau de Landau en fonction du champ magnétique appliqué à HgTe/CdTe à 4,2K.  $E_F$  est l'énergie du niveau de Fermi.

A partir de l'équation (2.56) on déduit les expressions des énergie des niveaux de Landau (N.L) pour les trous légers  $h_1$  et les trous lourds  $HH_1$  et  $HH_2$ .

Le calcul de l'énergie des niveaux de Landau s'est effectué en transposant la règle de quantification du vecteur d'onde en :  $k_p^2 = (2N+1) \frac{eB}{\hbar}$  (où N désigne l'ordre quantique

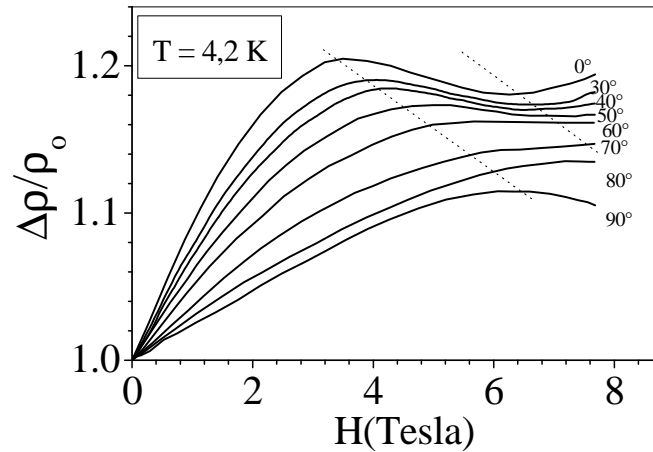
des niveaux de Landau) dans la relation de dispersion (2.69 ; 2.70 et 2.71) suivant  $k_p$  pour les trous légers et les trous lourds.

Nous avons calculé les niveaux de Landau en fonction du champ magnétique pour les valeurs  $N=0,1$  et  $2$  comme le montre la figure V.9.

Les intersections de  $E_F$  avec les NL sur la Figure V.9 indiquent les mêmes positions du champ magnétique que celles des minimums observées dans les oscillations Shubnikov-de Haas sur la Figure V. 8.

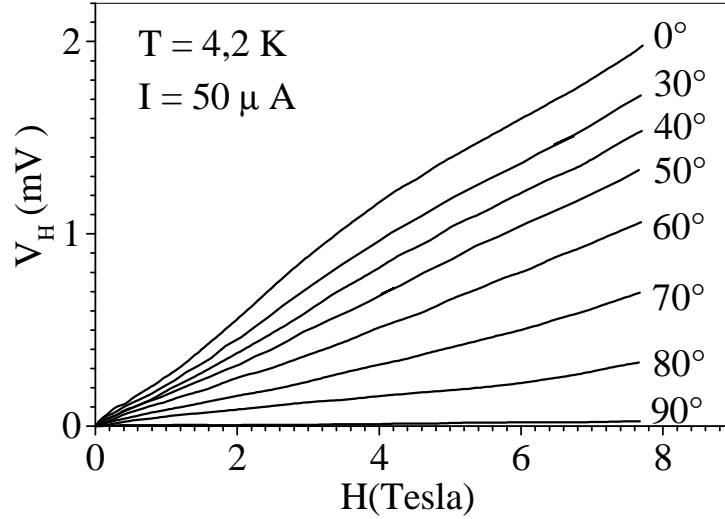
## V. D. APPLICAION AU SUPERRESEAU HgTe (180 Å)/ CdTe (44 Å)

### V. D.1 Analyse de la magnétorésistance et de la résistance de Hall



**Figure V.10:** Variation de la magnétorésistance transversale de l'échantillon en fonction du champ magnétique pour différentes valeurs de l'angle entre le champ magnétique et la normale à la surface du superréseau HgTe/CdTe à 4,2K.

La magnétorésistance transversale  $\Delta\rho/\rho_0$  (Figure V.10) suit une dépendance bidimensionnel (2D) avec un début d'apparition des oscillations de Shubnikov-de Haas dont les extrema sont indiqués par les droites en pointillé sur la figure V.10. Cependant, dans la totalité de la gamme du champ magnétique investie la magnétorésistance transversale ne s'annule pas quand le champ est parallèle au plan du superréseau ( $\theta = 90^\circ$ ). Ceci peut être dû à l'inter-diffusion aux interfaces entre les couches HgTe et CdTe ( $d_1/d_2 = 4,01$  et  $d_2 = 44$  Å) et/ ou à l'élargissement des sous-bandes de Landau sous l'influence du champ magnétique suivant  $E(k_p)$ . Alors que la tension de Hall  $V_H(H)$  sur la figure V.11 s'annule pour cette configuration !.



**Figure V.11:** Variation de la tension de Hall avec le champ magnétique pour différentes valeurs de l'angle entre le champ magnétique et la normale à la surface de superréseau HgTe/CdTe à 4,2K.

#### V. D.2 Conductivité, constante de Hall et mobilité de Hall

A basse température, l'échantillon présente une conductivité de type p avec une mobilité de trous  $\mu_t \approx 900 \text{ cm}^2/\text{V.s}$  sur la figure V.12. Une inversion du signe de la constante de Hall  $R_H$  à champ faible est observée à 25K sur la figure V.12.a.

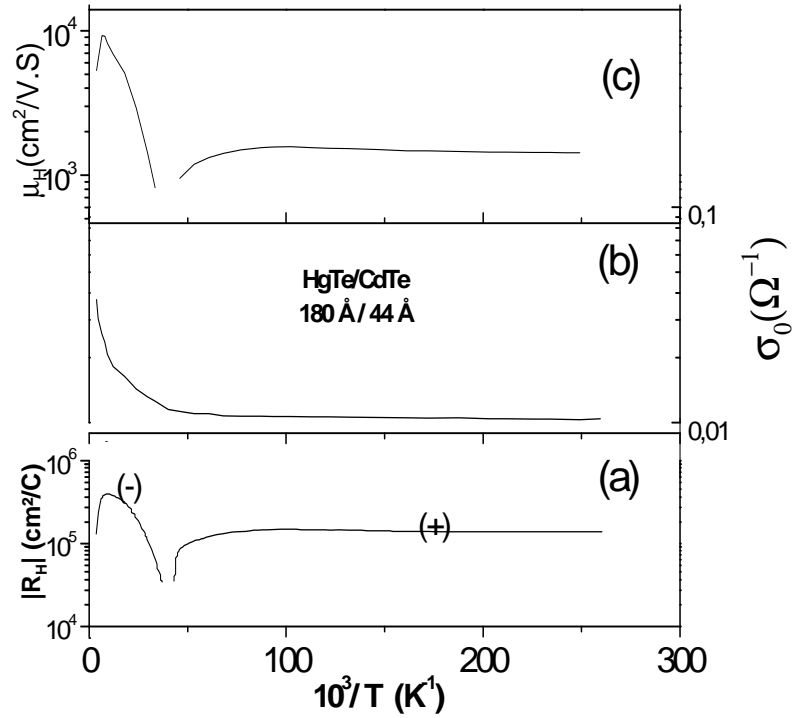
Cela peut être attribué au piégeage des porteurs de charges dans l'état résonnant intrinsèque  $E_1=34\text{meV}$  (figure II.15.c) et à la grande mobilité des électrons devant celle des trous ( $b = \mu_e/\mu_t = 39$ ). Un tel renversement de signe du  $R_H$  peut être inféré à l'existence d'au moins deux types de porteurs. Ce qui suggère un caractère semi-métallique au mécanisme de conduction.

La constante de Hall à champ faible s'écrit d'après la formule (2.26)

$$(R_H)_w = \frac{1}{|e|} \frac{p-nb^2}{(p+nb)^2} \text{ avec } b = \frac{\mu_e}{\mu_t} \quad (5.1)$$

Aux basses températures dans le régime de saturation, où la conductivité est du type p, l'équation (5.1) entraîne que :

$$(R_H)_{\text{sat}} = \frac{1}{|e|p} \quad (5.2)$$



**Figure V.12:** Variation de la constante de Hall (a) et la conductivité du superréseau HgTe/CdTe (b), en fonction de l'inverse de la température.

Près du régime intrinsèque, le maximum de la constante de Hall est donné par :

$$(R_H)_{\max} = \frac{(b-1)^2}{|e|4bp} \quad (5.3)$$

Ceci conduit au rapport:

$$\frac{4(R_H)_{\max}}{(R_H)_{\text{sat}}} = \frac{(b-1)^2}{b} \approx b=32 \gg 1 \quad (5.4)$$

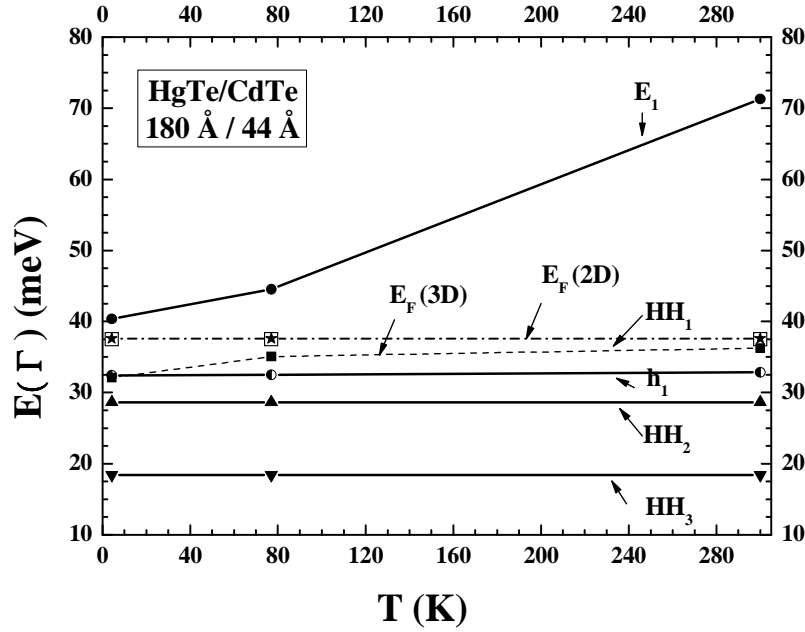
Ainsi  $\mu_e = 32\mu_t$  L'équation (5.1) implique pour  $R_H=0$  :

$$b^2 = 1024 = \frac{p}{n} \quad (5.5)$$

Soit une mobilité d'électrons de  $\mu_e \approx 32\mu_t \approx 3.10^4 \text{ cm}^2/\text{V.s}$  et une faible concentration d'électron. Une telle faible valeur de la mobilité des électrons peut être reliée d'une part à la masse effective de l'électron dans le superréseau qui est beaucoup plus

élevée que dans HgTe [5.3] et, d'autre part, à différents types d'imperfections dans l'échantillon.

### V. D.3 Variation avec la température de l'énergie de Fermi $E_F$ pour un transport bidimensionnel (2D) et tridimensionnel (3D)



**Figure V.13:** Variation de l'énergie de Fermi  $E_F$  pour un transport bidimensionnel (2D) et tridimensionnel (3D) en fonction de la température dans le superréseau HgTe/CdTe (180 Å / 44 Å).

L'équation (2.56) s'écrit au niveau de Fermi :

$$\frac{2}{3} P^2 \hbar^2 k_F^2 = E_F (E_F - E_g) \quad (5.6)$$

On extrait l'énergie du niveau de Fermi :

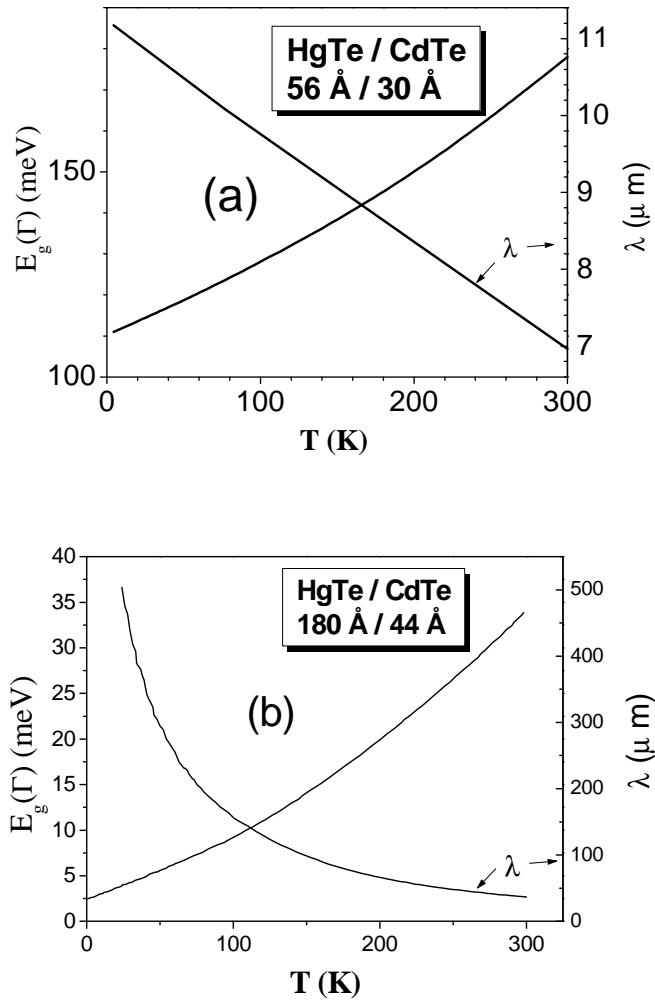
$$E_F = \frac{E_g}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{E_g}{2}\right)^2 + \frac{2}{3} P^2 \hbar^2 k_F^2} \quad (5.7)$$

Les vecteurs d'onde de Fermi sont :  $k_F = (2\pi p)^{1/2}$  et  $k_F = (3\pi^2 p)^{1/3}$ , respectivement pour un gaz de trous bidimensionnel (2D) et tridimensionnel (3D). Nous avons choisi le signe (-) dans l'expression (5.7) car l'échantillon est de type p à basse température. La figure V.13 montre que l'énergie de la bande interdite  $E_g = E_1 - HH_1$  et l'énergie de Fermi (3D) augmentent avec la température alors que l'énergie de Fermi (2D) et l'énergie



$HH_1$  des trous lourds reste constantes. Dans tout les cas, la conductivité est assumée par les trous légers et lourds. Notre échantillon présente une conduction semi métallique et quasi-bidimensionnelle entre 3D et 2D ce qui est en accord avec les prédictions théoriques de la figure II.15.c où  $d_1/d_2$  (grand) éloigne le superréseau d'un comportement bidimensionnel. Pour notre  $d_2 = 44 \text{ \AA}$  grand le superréseau est un ensemble de puits quantiques de HgTe isolés et accuse ainsi un caractère semimétallique comme celui de HgTe massif.

## V. E CONCLUSION



**Figure V.14:** L'énergie de la bande interdite  $E_g$  et la longueur d'onde de détection  $\lambda_c$  au centre de la première zone de Brillouin en fonction de la température des superréseaux HgTe/CdTe (56 Å / 30 Å et 180 Å / 44 Å)

Le formalisme utilisé au chapitre II prévoit que le système (56 Å /30 Å) est un semi-conducteur pour le rapport  $d_1/d_2 = 1.87$  lorsque  $d_2 < 140$  Å [4.7]. Dans notre cas,  $d_2 = 30$  Å et  $E_g(\Gamma, 4,2 \text{ K}) = 111 \text{ meV}$ . Dans la zone des températures utilisée, cet échantillon est un détecteur d'infrarouge moyen ( $7\mu\text{m} < \lambda_c < 11\mu\text{m}$ ) (figure V.14.a) à bande interdite étroite et semi-conducteur bidimensionnel nanostructuré de type p.

En utilisant la valeur de  $\varepsilon_1$  et  $\varepsilon_2$  à 4,2, 77 et 300 K [5.4] et en prenant la constante  $P$  indépendante de la température, cela est supporté par le fait que l'équation  $P \approx \varepsilon_G(T)/m^*(T) \approx \text{cte}$ , nous obtenons l'énergie de la bande interdite  $E_g$  en fonction de la température, au centre  $\Gamma$  de la première zone de Brillouin dans les figures V.14.a. et V.14.b. On note que pour le système (56 Å /30 Å)  $E_g$  augmente de 111 meV à 4,2K à 178 meV à 300K. et pour le système (180 Å /44 Å)  $E_g$  augmente de 3,6 meV à 4,2K à 34 meV à 300K.

Le formalisme prévoit que le système (180 Å /44 Å) est semi-métallique quand le rapport d'épaisseur de HgTe sur CdTe  $d_1/d_2$  est plus grand que 4. Dans notre cas,  $d_1/d_2 = 4,1$  et  $E_g(\Gamma, 4,2\text{K}) = 3,6 \text{ meV}$  correspond à l'activation thermique nécessaire au changement de signe de  $R_H(1/T)$ . Dans le régime intrinsèque, la mesure indique que  $E_g \approx 38 \text{ meV}$  est en bon accord avec la valeur calculée :  $E_g(\Gamma, 300\text{K}) = 34 \text{ meV} = E_F(4,2\text{K}) = E_1 - E_{HH1}$ .

Cependant, l'échantillon (180 Å /44 Å) montre les traits typiques du mécanisme de la conduction semi-métallique, qui est en bon accord avec le chevauchement entre sous-bandes suivant  $E(k_p)$ . Dans la zone des températures utilisée, cet échantillon est un détecteur d'infrarouge lointain ( $37\mu\text{m} < \lambda_c < 500\mu\text{m}$ ) (figure V.14b). Les paramètres du transport déduits de la structure des bandes et des mesures sont en très bon accord [5.5] et [5.6].

Finalement, les propriétés du transport des échantillons étudiées semblent être affectés fortement par la présence des états donneurs et accepteurs résultants d'une forte compensation. Les mesures que nous avons faites sur d'autres échantillons indiquent une amélioration de la qualité cristalline du superréseau, manifestée par des plus hautes mobilités.

## Références

- [5.1] D. K. Arch, J. Vac. Sci. Technol. A4, 2101 (1986).
- [5.2] A. El abidi, et al, the proceedings of the 27<sup>th</sup> International Conference on Physics of Semiconductors (ICPS27), AIP Conference Proceedings 772, New York: American Institute of Physics, 1001-1002, (2005).
- [5.3] D. L.Smith, T. C. McGill et j. N. Shulman, Appl.phys, Lett 43 (1980); J de physique 45 Suppl, 509. (1984).
- [5.4] M. H. Weiler, Semiconductors and Semimetals, édité par R. K. Willardson and A. C. Beer ,Academic, New York,6, 119, (1981).
- [5. 5] A. El Abidi, A. Nafidi, H. Chaib, A. El Kaaouachi, A. Toumanari; M. Braigue; I. Zorkani, J. Hemine, et M. Zazoui, Paper Number 70550C, , DOI: 10.1117/12.803320, 26 August (2008).
- [5. 6] A. El Abidi, A. Nafidi, H. Chaib, A. El Kaaouachi, A. Toumanari, M. Braigue, I. Zorkani, J. Hemine, et M. Zazoui, Présentation orale, Infrared Detectors and Focal Plane Arrays IX conference a part of SPIE Symposium on Photonic Devices + Applications, San Diego, CA.: 7055A-18, 10-14 August (2008).

## CONCLUSIONS ET PERSPECTIVES

---

Nous avons rapporté dans ce mémoire de thèse les propriétés du transport et des résultats théoriques de la modélisation de la mobilité des porteurs de charges dans  $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$  ( $x=0,22$ ). La conductivité et l'Effet de Hall ont été mesurés dans la gamme de température 4,2 - 300 K. Nos mesures indiquent que l'échantillon est un semi-conducteur de type n. Dans le régime intrinsèque, la tangente de la courbe  $R_H T^{3/2}$  indique une bande interdite de  $E_g=178$  meV qui est en bon accord avec  $E_g(x=0,22, 300\text{ K})=183$  meV théorique.

Nous avons montré que le gaz d'électrons est dégénéré à  $T=4,2$  K avec une haute mobilité de Hall  $\mu_H=2.10^5$  cm<sup>2</sup>/Vs, une concentration d'électrons de  $n=2,52 \cdot 10^{14}$  cm<sup>-3</sup> et une faible conductivité de  $\sigma_0=8,5$  Ω/cm en accord avec la faible bande interdite mesurée. Quand la température augmente vers l'ambiante, la mobilité des électrons décroît comme prévu par la diffusion par les phonons par contre la conductivité augmente. Ces résultats sont en accord avec le fait que pour une composition faible en Cadmium ( $x=0,20$ ) l'alliage  $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$  a des propriétés électroniques proches de celles du semimétal HgTe.

Nos calculs théoriques, basés sur le modèle de Kane, montrent que pour  $4,2\text{ K} \leq T \leq 76\text{ K}$ ,  $E_F$  est aux alentours de la bande de conduction de quelques  $k_B T$  : le gaz d'électrons est dégénéré. Ailleurs,  $E_F$  s'éloigne de  $E_c$  et le gaz d'électrons est non dégénéré.  $E_d$  augmente linéairement avec  $T$  et passe en dessous de  $E_c$  à  $T=30$  K. A  $T=4,2$  K, les donneurs commencent à s'ioniser et  $E_F=98$  meV augmente jusqu'à 100 meV à  $T=30$  K. Pour  $30\text{ K} \leq T \leq 130\text{ K}$ ,  $E_F=100$  meV = constante: tous les donneurs sont ionisés. Après  $E_F$  augmente jusqu'à 150 meV à l'ambiante, ceci est dû au passage des électrons de la bande de valence au niveau de Fermi. A  $T=4,2$  K, nos calculs montrent que  $E_d-E_c=2,8$  meV et  $E_d-E_F=1$  meV  $\approx 0,67$  meV déduite de nos mesures d'effet Hall. (càd  $E_d > E_F > E_c$ ). Un état résonnant de 6 meV au-dessus de la bande de conduction à 4,2K a été observé dans des mesures de l'effet Shubnikov de Hass dans  $\text{Hg}_{0,8}\text{Cd}_{0,2}\text{Te}$  [4.8]. Ce résultat est en accord avec notre  $E_d-E_c=2,8$  meV dans  $\text{Hg}_{0,8}\text{Cd}_{0,22}\text{Te}$  dégénéré à cette température.

Nos calculs théoriques de la mobilité montrent que la diffusion par impuretés ionisées domine au-dessous de 25 K, la diffusion par phonons optique domine à hautes températures

(>70K) et la mobilité est générée par les deux mécanismes de diffusion dans le domaine de température intermédiaire. À hautes températures, un excellent accord entre la mobilité expérimentale et la mobilité calculée est obtenu en introduisant une fonction d'essai. La longueur d'onde de détection correspondante est de :  $\lambda = 6,89 \mu\text{m}$ . L'échantillon est donc un détecteur d'infrarouge moyen (MIR) à la température ambiante. Et pour le domaine de températures investis,  $6,9 \mu\text{m} \leq \lambda_c \leq 13,3 \mu\text{m}$ , c'est un détecteur d'infrarouge lointain (LWIR).

Nous avons vu que les courants de diffusion des zones p du détecteur et le courant tunnel bande à bande sont très faibles dans le superréseau HgTe/CdTe. Donc ce dernier est une alternative à l'alliage ternaire  $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ . Nos calculs ont montré que sa bande interdite est ajustable par la variation de la période cristalline  $d=d_1+d_2$ , selon l'axe de croissance  $z$ , et qui est bien contrôlée grâce à la croissance par épitaxie par jet moléculaire à basse température du substrat.

Nos deux échantillons de superréseau fabriqués par épitaxie par jet moléculaire sur un substrat CdTe (111) à 180 °C, ont une période  $d=d_1+d_2$  (90 couches) de HgTe( $d_1=5,6 \text{ nm}$ ) / CdTe( $d_2=3 \text{ nm}$ ) et (100 couches) de HgTe( $d_1=18 \text{ nm}$ ) / CdTe ( $d_2=4,4 \text{ nm}$ ). Nos calculs des spectres d'énergie  $E(d_2)$ ,  $E(k_z)$  et  $E(k_p)$ , respectivement, suivant la direction de croissance et dans les plans du superréseau; ont été performés dans le formalisme de la fonction enveloppe.

L'énergie  $E$  en fonction de  $d_2$ , à 4,2 K, au centre  $\Gamma$  de la première zone de Brillouin a montré que pour un  $d_1/d_2$  donné, quand  $d_2$  augmente la bande interdite  $E_g$  décroît vers la transition de conductivité semiconducteur-semimétal et devient négative en accusant une conductivité semi métallique. Prés de la transition, la bande interdite est faible et la mobilité des porteurs de charge est grande. Pour un  $d_2$  faible l'échantillon est un semiconducteur avec un grand couplage entre les puits quantiques HgTe justifié par une grande largeur des bandes. Quand  $d_2$  augmente, les états  $E_1$  et  $h_1$  tombent dans la barrière d'énergie  $[0, \Lambda]$  et deviennent un état d'interface d'énergie  $E_1 = 34 \text{ meV}$  pour  $d_2$  infinie, alors le superréseau devient un ensemble de puits quantiques HgTe isolés et accuse une conduction semi métallique. Le rapport  $d_1/d_2$  gouverne la largeur des sousbandes d'énergie du superréseau (c'est à dire la masse effective des porteurs de charges). Un grand  $d_1/d_2$  déplace le matériau plus loin d'un comportement bidimensionnel (2D).

Dans le superréseau 5,6nm/3nm, la diffraction des rayons X, la conductivité, l'effet Hall, l'effet Seebeck, l'effet Subnikov-de Haas et la dépendance angulaire de la magnétorésistance transversale ont été mesurés. Le profile de la réflexion (222) de Bragg

indique une structure modulée abrupte aux interfaces. A 4,2 K l'échantillon montre une conductivité de type p avec une mobilité de Hall de  $8200 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ . Celle-ci nous a permis d'observer l'effet Shubnikov-de Haas avec une concentration de trous  $p = 1,80 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ . En utilisant la masse effective ( $m_{\text{HH}}^* = 0,297 m_0$ ), calculé théoriquement, du gaz de trous lourds dégénérée, l'énergie de Fermi (2D) calculée était  $E_F = 14 \text{ meV}$ . Elle est en accord avec  $12 \text{ meV}$  déduite du pouvoir thermoélectrique  $\alpha$  (effet Seebeck). Dans le régime intrinsèque,  $\alpha \sim T^{-3/2}$  et  $R_H T^{3/2}$  indique une bande interdite  $E_g = E_1 - HH_1 = 190 \text{ meV}$  en accord avec celle calculée, à partir de la structure des bandes d'énergie,  $E_g(\Gamma, 300 \text{ K}) = 178 \text{ meV}$ . Le formalisme utilisé ici prédit que le system est semiconducteur pour notre  $d_1/d_2 = 1,87$  et  $d_2 < 140 \text{ \AA}$ . Ici nous avons  $d_2 = 30 \text{ \AA}$  et  $E_g(\Gamma, 4.2 \text{ K}) = 111 \text{ meV}$  alors cet échantillon est un semiconducteur bidimensionnel, de structure modulée et nanostructurée et c'est un détecteur d'infrarouge moyen ( $7 \mu\text{m} < \lambda < 11 \mu\text{m}$ ). Ce superréseau est une alternative stable à notre alliage ternaire  $\text{Hg}_{0.78}\text{Cd}_{0.22}\text{Te}$  pour l'application en optoélectronique infrarouge moyenne car la faible composition  $x=0.22$ , avec  $E_g(\Gamma, 300 \text{ K}) = 183 \text{ meV}$ , est difficile à obtenir lors de la croissance de l'alliage et la masse effective des porteurs de charge dans le superréseau est deux fois plus grande que dans l'alliage. Alors la longueur Tunnel est faible dans le superréseau.

Dans le superréseau  $18\text{nm}/4,4\text{nm}$  la dépendance angulaire de la magnétorésistance suit un comportement bidimensionnel (2D) avec un début d'apparition d'oscillations Shubnikov-de Haas. Cependant, le voltage de Hall s'annule quand le champ magnétique est parallèle au plan. A basse température, la conductivité de l'échantillon est de type p avec une mobilité de Hall des trous de  $900 \text{ cm}^2/\text{V.s}$ . Une inversion du signe du coefficient de Hall à champ faible se manifeste à  $25 \text{ K}$  avec une mobilité des électrons de  $3 \cdot 10^4 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ . Dans le domaine intrinsèque, la bande interdite mesurée  $E_g \approx 38 \text{ meV}$  est en accord avec celle calculée  $E_g(\Gamma, 300\text{K}) = 34 \text{ meV}$  et qui coïncide avec l'énergie du niveau de Fermi. Le formalisme utilisé ici prédit que le system est semimétallique quand  $d_1/d_2$  est supérieur à 4. Dans notre cas  $d_1/d_2 = 4,1$  et la bande interdite  $E_g(\Gamma, 4,2\text{K}) = 3 \text{ meV}$ . Ainsi, cet échantillon à une conduction de type p semimétallique, avec un comportement quasi bidimensionnel et c'est un détecteur d'infrarouge lointain ( $50 \mu\text{m} < \lambda < 450 \mu\text{m}$ ). Les épaisseurs investies du superréseau  $18\text{nm}/4,4\text{nm}$  le situent à la transition de conductivité semiconducteur-semimétal.

En conclusion, le superréseau nanostructuré  $\text{HgTe}/\text{CdTe}$  est une alternative stable pour l'application en optoélectronique infrarouge à l'alliage ternaire  $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ .

Parmi nos perspectives, nous sommes entrain de modéliser la mobilité d'un échantillon  $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$  ( $x=0,204$ ) de type p et celles de plusieurs superréseaux. Nous calculerons les structures des bandes d'énergie d'autres échantillons II-VI ( $\text{HgTe/CdTe}$ ) et III-V ( $\text{AlGaAs/GaAs}$ ). Des mesures récentes sur d'autres échantillons nous ont révélé de hautes mobilités dues à la haute qualité cristalline des interfaces entre les deux matériaux et la pureté des échantillons.

---

**Mots clés :** Composés semiconducteurs II-VI, formalisme de la fonction enveloppe, magnétorésistance, conductivité, diffraction des rayons X, Effet Hall, Effet Seebeck, Effet Subnikov-de Hass, semiconducteur bidimensionnel nanostructurés à bande interdite étroite superréseau  $\text{HgTe/CdTe}$ .

**Keywords:** Group II-VI and compounds, theoretical band structure methods, envelope function formalism, magnetoresistance, conductivity. X-ray diffraction; Hall Effect, Seebeck effect, Shubnikov-de Haas effect, narrow gap and two-dimensional nanosemiconductor, superlattices  $\text{HgTe/CdTe}$ .

## **ANNEXES**



**Annexe (A) :****Résolution de l'équation de Boltzmann dans l'approximation du temps de relaxation et tenseurs de conductivité et résistivité**

On écrit l'équation de Boltzmann dans l'approximation du temps de relaxation :

$$\vec{v} \cdot \overrightarrow{\text{grad}}_{\vec{r}} f + \frac{1}{\hbar} \vec{F} \cdot \overrightarrow{\text{grad}}_{\vec{k}} f = - \frac{f - f_0}{\tau(\vec{k})} \quad (\text{A.1})$$

Dans les hypothèses suivantes :

- Régime stationnaire :  $\partial_t f = 0$ .
- Bande sphérique et parabolique :  $m^* = \text{constante}$ .
- Le champ électrique  $\vec{\varepsilon}$  faible :  $\vec{\varepsilon} = \varepsilon_x \vec{e}_x$
- Le champ magnétique  $\vec{B} = B_z \vec{e}_z$  d'amplitude arbitraire.

Pour un électron ( $q=-e$ ) ou un trou ( $q=+e$ ), sous champ magnétique  $\vec{B}$  et électrique  $\vec{\varepsilon}$  :

$$\vec{F} = q(\vec{\varepsilon} + \vec{v} \wedge \vec{B})$$

Avec l'hypothèse  $f \approx f_0$  nous avons seulement un gradient de température:

$$\overrightarrow{\text{grad}}_{\vec{r}} f \approx \overrightarrow{\text{grad}}_{\vec{r}} f_0 \approx \frac{\partial f_0}{\partial T} \overrightarrow{\text{grad}}_{\vec{r}} T$$

Soit  $f_0 = \frac{1}{e^{\frac{E-E_F}{K_B T}} + 1} = \frac{1}{e^x + 1}$  avec :  $x = \frac{E-E_F}{K_B T}$

$$\frac{\partial f_0}{\partial T} = \frac{\partial f_0}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial T} = \frac{\partial f_0}{\partial x} \frac{1}{K_B} \left( -\frac{E}{T^2} - \frac{\frac{dE_F}{dT} T - E_F}{T^2} \right) = \frac{\partial f_0}{\partial x} \frac{1}{K_B T} \left( \frac{E_F - E}{T} - \frac{dE_F}{dT} \right) \quad (\text{A.2})$$

Posons :  $D = \frac{E - E_F}{T} + \frac{dE_F}{dT}$  l'équation (A.2) s'écrit :  $\frac{\partial f_0}{\partial T} = - \frac{\partial f_0}{\partial x} \frac{D}{K_B T}$

Or  $\frac{\partial f_0}{\partial E} = \frac{\partial f_0}{\partial x} \frac{1}{K_B T} \Rightarrow \frac{\partial f_0}{\partial T} = -D \frac{\partial f_0}{\partial E}$

Le premier terme de l'équation de Boltzmann s'écrit :

$$\vec{v} \cdot \overrightarrow{\text{grad}}_{\vec{r}} f = - \vec{v} D \frac{\partial f_0}{\partial E} \overrightarrow{\text{grad}}_{\vec{r}} T \quad (\text{A.3})$$

En présence d'un champ électrique  $\vec{E}$  seulement :  $f = f_0 + f_1 = f_0 + \tau e (\vec{v} \cdot \vec{E}) \frac{\partial f_0}{\partial E}$

Par analogie on peut trouver une solution de même forme :

$$f = f_0 + f_1 = f_0 + (\vec{v} \cdot \vec{G}) \quad (\text{A.4})$$

En général,  $\vec{G}$  est un vecteur inconnu.

$$\begin{aligned} \frac{1}{\hbar} \text{grad}_{\vec{k}} f &= \frac{1}{\hbar} \text{grad}_{\vec{k}} f_0 + \frac{1}{\hbar} \text{grad}_{\vec{k}} (\vec{v} \cdot \vec{G}) \\ &= \frac{1}{\hbar} \frac{\partial f_0}{\partial E} \text{grad}_{\vec{k}} E + \frac{1}{\hbar} \nabla_{\vec{k}} (\vec{v} \cdot \vec{G}) \\ \text{d'où : } \frac{1}{\hbar} \text{grad}_{\vec{k}} f &= \frac{\partial f_0}{\partial E} \vec{v} + \frac{1}{\hbar} \nabla_{\vec{k}} (\vec{v} \cdot \vec{G}) \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$

Le 2<sup>ème</sup> terme de l'équation de Boltzmann s'écrit :

$$\begin{aligned} \frac{1}{\hbar} \vec{F} \cdot \overrightarrow{\text{grad}_{\vec{k}}} f &= q(\vec{E} + \vec{v} \wedge \vec{B}) \cdot \left[ \frac{\partial f_0}{\partial E} \vec{v} + \frac{1}{\hbar} \nabla_{\vec{k}} (\vec{v} \cdot \vec{G}) \right] \\ \frac{1}{\hbar} \vec{F} \cdot \overrightarrow{\text{grad}_{\vec{k}}} f &= \left[ q\vec{E} \frac{\partial f_0}{\partial E} \vec{v} + q\vec{E} \frac{1}{\hbar} \nabla_{\vec{k}} (\vec{v} \cdot \vec{G}) \right] + \left[ q(\vec{v} \wedge \vec{B}) \frac{\partial f_0}{\partial E} \vec{v} + q(\vec{v} \wedge \vec{B}) \frac{1}{\hbar} \nabla_{\vec{k}} (\vec{v} \cdot \vec{G}) \right] \end{aligned} \quad (\text{A.6})$$

Pour un champ électrique  $\vec{E}$  faible  $\vec{E} \cdot \vec{G} \approx \varepsilon^2 \approx 0$  et tenant compte du fait que :  $(\vec{v} \wedge \vec{B}) \cdot \vec{v} = 0$

$$q\vec{E} \frac{1}{\hbar} \nabla_{\vec{k}} (\vec{v} \cdot \vec{G}) \sim E^2 \sim 0 \text{ et } q(\vec{v} \wedge \vec{B}) \frac{\partial f_0}{\partial E} \vec{v} = 0$$

L'équation (A.6) s'écrit :

$$\frac{1}{\hbar} \vec{F} \cdot \overrightarrow{\text{grad}_{\vec{k}}} f = q\vec{E} \frac{\partial f_0}{\partial E} \vec{v} + \frac{q}{\hbar} (\vec{v} \wedge \vec{B}) \text{grad}_{\vec{k}} (\vec{v} \cdot \vec{G})$$

On montre que :  $\overrightarrow{\text{grad}_{\vec{k}}} (\vec{v} \cdot \vec{G}) = \vec{v} \cdot \overrightarrow{\text{grad}_{\vec{k}}} (\vec{G}) + \vec{G} \cdot \overrightarrow{\text{grad}_{\vec{k}}} (\vec{v})$

D'où :

$$\frac{q}{\hbar} (\vec{v} \wedge \vec{B}) \text{grad}_{\vec{k}} (\vec{v} \cdot \vec{G}) = \frac{q}{\hbar} (\vec{v} \wedge \vec{B}) (\vec{v} \cdot \overrightarrow{\text{grad}_{\vec{k}}} (\vec{G}) + \vec{G} \cdot \overrightarrow{\text{grad}_{\vec{k}}} (\vec{v})) = \frac{q}{\hbar} (\vec{v} \wedge \vec{B}) (\vec{G} \cdot \overrightarrow{\text{grad}_{\vec{k}}} (\vec{v})) \quad (\text{A.7})$$

Dans l'approximation de bande sphérique parabolique telle que :  $m^* \vec{v} = \hbar \vec{k}$

$$\overrightarrow{\text{grad}_{\vec{k}}} (\vec{v}) = \vec{\nabla}_{\vec{k}} (\vec{v}) = \vec{\nabla}_{\vec{k}} (\vec{\nabla}_{\vec{k}} (E)) = \frac{\partial^2 E}{\partial k^2} = \frac{\hbar^2}{m^*}$$

L'équation (A.7) s'écrit donc comme suit :

$$\frac{1}{\hbar} \vec{F} \cdot \overrightarrow{\text{grad}_{\vec{k}}} f = q\vec{E} \vec{v} \frac{\partial f_0}{\partial E} + q(\vec{v} \wedge \vec{B}) \cdot \vec{G} \frac{\hbar}{m^*} \quad (\text{A.8})$$

D'après les propriétés du produit mixte :  $(\vec{v} \wedge \vec{B}) \cdot \vec{G} = \vec{v} \cdot (\vec{B} \wedge \vec{G})$

Le 2<sup>ème</sup> terme de l'équation de Boltzmann s'écrit finalement :

$$\frac{1}{\hbar} \vec{F} \cdot \overrightarrow{\text{grad}}_{\vec{k}} f = q(\vec{\varepsilon} \cdot \vec{v}) \frac{\partial f_0}{\partial E} + q\vec{v} (\vec{B} \wedge \vec{G}) \frac{\hbar}{m^*} \quad (\text{A.9})$$

Le troisième terme de l'équation de Boltzmann s'écrit :

$$-\frac{f - f_0}{\tau} = -\frac{f_1}{\tau} = -\frac{\vec{v} \cdot \vec{G}}{\tau} \quad (\text{A.10})$$

En portant les expressions (A.3), (A.9) et (A.10) dans l'équation de Boltzmann ; on obtient :

$$-\vec{v} \cdot D \frac{\partial f_0}{\partial E} \text{grad}_{\vec{r}} T + q\vec{v} \cdot \vec{\varepsilon} \frac{\partial f_0}{\partial E} + \frac{q}{m^*} \vec{v} \cdot (\vec{B} \wedge \vec{G}) = -\frac{\vec{v} \cdot \vec{G}}{\tau} \quad (\text{A.11})$$

D'où :

$$\vec{v} \cdot [\vec{G} + \tau q \vec{\varepsilon} \frac{\partial f_0}{\partial E} + \frac{q\tau}{m^*} (\vec{B} \wedge \vec{G}) - D \tau \frac{\partial f_0}{\partial E} \text{grad}_{\vec{r}} T] = 0 \quad (\text{A.12})$$

$$\text{Posant : } \vec{G}_0 = \frac{\partial f_0}{\partial E} (\tau D \text{grad}_{\vec{r}} T - q \tau \vec{\varepsilon}) \quad (\text{cas } \vec{B} = \vec{0}) \quad (\text{A.13})$$

$$D'où : \vec{G} + \frac{q\tau}{m^*} (\vec{B} \wedge \vec{G}) = \vec{G}_0 \quad (\vec{B} = (0, 0, B); \vec{B} \wedge \vec{G} = (-BG_y, -BG_x, 0))$$

$$D'où : \begin{cases} G_x - \tau \frac{qB}{m^*} G_y = G_{0x} \\ G_y + \tau \frac{qB}{m^*} G_x = G_{0y} \\ G_z = G_{0z} \end{cases} \quad (\text{A.14})$$

En tenant compte de la pulsation cyclotron  $\omega_c = \frac{qB}{m^*}$  (A.14) peut s'écrire comme suit :

$$\begin{cases} G_x - \tau \omega_c G_y = G_{0x} \\ G_y + \tau \omega_c G_x = G_{0y} \\ G_z = G_{0z} \end{cases} \quad (\text{A.15})$$

(A.15) est un ensemble d'équations linéaires qu'on peut écrire sous forme tensorielle:

$$C'est \text{ à dire : } G_i = \sum_j g_{ij} G_{0j}$$

$$\hat{G} = \hat{g} \hat{G}_0 \text{ Avec : } \hat{g} = \begin{pmatrix} \frac{1}{1 + \omega_c^2 \tau^2} & \frac{\omega_c \tau}{1 + \omega_c^2 \tau^2} & 0 \\ \frac{-\omega_c \tau}{1 + \omega_c^2 \tau^2} & \frac{1}{1 + \omega_c^2 \tau^2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (\text{A.16})$$

### Tenseurs de conductivité et de résistivité

Le vecteur densité de courant est défini comme suit :

$$\vec{J} = \frac{2q}{(2\pi)^3} \int \vec{v} f d\vec{k} = \frac{2q}{(2\pi)^3} \int \vec{v} (f_0 + \vec{v} \cdot \vec{G}) d\vec{k} = \frac{2q}{(2\pi)^3} \int \vec{v} (\vec{v} \cdot \vec{G}) d\vec{k} \quad (\text{A.17})$$

(Car à l'équilibre la densité de courant est nulle :  $\int \vec{v} f_0 d\vec{k} = 0$ ).

Si  $\text{grad}_r T = 0$   $\vec{G}_0$  s'écrit :  $\vec{G}_0 = -q\tau \vec{E} \frac{\partial f_0}{\partial E}$

$$\vec{v} \cdot \vec{G} = \vec{v} \cdot \hat{g} \vec{G}_0 = (-q\tau \frac{\partial f_0}{\partial E}) [v_x (\frac{\epsilon_x}{1 + \omega_c^2 \tau^2} + \frac{\epsilon_y \omega_c \tau}{1 + \omega_c^2 \tau^2}) + v_y (-\frac{\epsilon_x \omega_c \tau}{1 + \omega_c^2 \tau^2} + \frac{\epsilon_y}{1 + \omega_c^2 \tau^2}) + v_z \epsilon_z] \quad (\text{A.18})$$

En remplaçant l'expression (A.18) dans (A.17) nous obtenons :

$$\vec{J} = \frac{2q}{(2\pi)^3} \int \vec{v} (\vec{v} \cdot \vec{G}) d\vec{k} = \frac{2q}{(2\pi)^3} \int \vec{v}_x (\vec{v} \cdot \vec{G}) d\vec{k} + \frac{2q}{(2\pi)^3} \int \vec{v}_y (\vec{v} \cdot \vec{G}) d\vec{k} + \frac{2q}{(2\pi)^3} \int \vec{v}_z (\vec{v} \cdot \vec{G}) d\vec{k} \quad (\text{A.19})$$

D'où :  $\vec{J} = \vec{J}_x + \vec{J}_y + \vec{J}_z$  avec :

$$\vec{J}_x = \frac{2q}{(2\pi)^3} \int \vec{v}_x (\vec{v} \cdot \vec{G}) d\vec{k}, \vec{J}_y = \frac{2q}{(2\pi)^3} \int \vec{v}_y (\vec{v} \cdot \vec{G}) d\vec{k} \text{ et } \vec{J}_z = \frac{2q}{(2\pi)^3} \int \vec{v}_z (\vec{v} \cdot \vec{G}) d\vec{k} \quad (\text{A.20})$$

Pour une bande sphérique ou isotrope :  $\int v_i v_j f d\vec{k} = \frac{1}{3} \delta_{ij} \int v^2 f d\vec{k}$  (avec  $f$  une fonction

quelconque), et Pour  $i \neq j$  en moyen on a :  $\int v_i v_j f d\vec{k} = 0$ . On trouve :

$$J_x = \frac{2q}{(2\pi)^3} \int v_x (\vec{v} \cdot \vec{G}) d\vec{k}$$

$$J_x = \frac{2q}{(2\pi)^3} \int v_x (-q\tau \frac{\partial f_0}{\partial E}) [v_x (\frac{\epsilon_x}{1 + \omega_c^2 \tau^2} + \frac{\epsilon_y \omega_c \tau}{1 + \omega_c^2 \tau^2}) + v_y (-\frac{\epsilon_x \omega_c \tau}{1 + \omega_c^2 \tau^2} + \frac{\epsilon_y}{1 + \omega_c^2 \tau^2}) + v_z \epsilon_z] d\vec{k} \quad (\text{A.21})$$

Et en utilisant le fait que :  $\langle X(E) \rangle = \frac{1}{3\pi^2} \int_0^\infty (-\frac{\partial f_0}{\partial E}) X(E) k^3 dE$  et que pour une bande sphérique :

$d\vec{k} = 4\pi k^2 dk$  et  $dk = \frac{m^*}{\hbar^2 k} dE$ , on obtient :

$$J_x = \frac{q^2 \epsilon_x}{m^*} \left\langle \frac{\tau}{1 + \omega_c^2 \tau^2} \right\rangle + \frac{q^2 \epsilon_y}{m^*} \left\langle \frac{\omega_c \tau^2}{1 + \omega_c^2 \tau^2} \right\rangle \quad (\text{A.22})$$

De la même façon on montre que :

$$J_y = -\frac{q^2 \varepsilon_x}{m^*} \left\langle \frac{\omega_c \tau}{1 + \omega_c^2 \tau^2} \right\rangle + \frac{q^2 \varepsilon_y}{m^*} \left\langle \frac{\tau}{1 + \omega_c^2 \tau^2} \right\rangle \quad (\text{A.23})$$

et :

$$J_z = \frac{q^2 \varepsilon_z}{m^*} \langle \tau \rangle \quad (\text{A.24})$$

Sous forme tensorielle on écrit  $\vec{J}$  comme :  $J_i = \sum_j \sigma_{ij} \varepsilon_j$  ; c'est-à-dire :  $\vec{J} = \hat{\sigma} \vec{\varepsilon}$

$\hat{\sigma}$  c'est le tenseur de la conductivité :

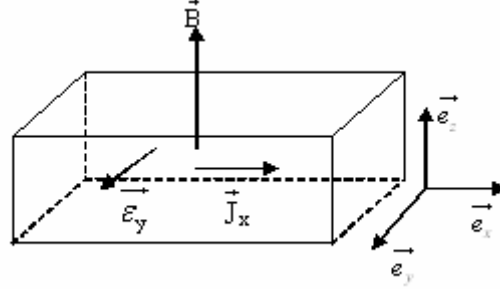
$$\begin{pmatrix} J_x \\ J_y \\ J_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} & 0 \\ \sigma_{yx} & \sigma_{yy} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varepsilon_x \\ \varepsilon_y \\ \varepsilon_z \end{pmatrix} \quad \text{Avec : } \begin{cases} \sigma_{xx} = \sigma_{yy} = \frac{q^2}{m^*} \left\langle \frac{\tau}{1 + \omega_c^2 \tau^2} \right\rangle \\ \sigma_{xy} = -\sigma_{yx} = \frac{q^2}{m^*} \left\langle \frac{\omega_c \tau^2}{1 + \omega_c^2 \tau^2} \right\rangle \\ \sigma_{zz} = \frac{q^2}{m^*} \langle \tau \rangle = \sigma_0 \end{cases} \quad (\text{A.25})$$

Ou en tenant compte de l'expression de  $\sigma_0$  :

$$\begin{cases} \sigma_{xx} = \sigma_{yy} = \sigma_0 \cdot \frac{\left\langle \frac{\tau}{1 + \omega_c^2 \tau^2} \right\rangle}{\langle \tau \rangle} \\ \sigma_{xy} = -\sigma_{yx} = \sigma_0 \cdot \frac{\left\langle \frac{\omega_c \tau^2}{1 + \omega_c^2 \tau^2} \right\rangle}{\langle \tau \rangle} \\ \sigma_{zz} = \sigma_0 \end{cases} \quad (\text{A.26})$$

A partir de ce résultat on peut déterminer le tenseur de résistivité  $\hat{\rho}$  telle que :  $\vec{\varepsilon} = \hat{\rho} \vec{J}$

$$\begin{cases} \rho_{xx} = \rho_{yy} = \frac{\sigma_{xx}}{\sigma_{xx}^2 + \sigma_{xy}^2} \\ \rho_{xy} = -\rho_{yx} = -\frac{\sigma_{xy}}{\sigma_{xx}^2 + \sigma_{xy}^2} \\ \rho_{zz} = \frac{1}{\sigma_{zz}} \end{cases} \quad (\text{A.27})$$

**Annexe B :****Effet Hall et formulation générale de la constante de Hall**

Considérons les expressions (A.25) de  $J_x$  et  $J_y$  :

$$\begin{cases} J_x = \sigma_{xx} \epsilon_x + \sigma_{xy} \epsilon_y \\ J_y = -\sigma_{xy} \epsilon_x + \sigma_{xx} \epsilon_y \end{cases}$$

A l'équilibre on a :  $\vec{J}_y = \vec{0}$

D'où :

$$J_y = 0 \Rightarrow -\sigma_{xy} \epsilon_x + \sigma_{xx} \epsilon_y = 0 \Rightarrow \epsilon_x = \frac{\sigma_{xx}}{\sigma_{xy}} \epsilon_y \quad (\text{B.1})$$

En remplaçant l'expression (B.1) dans l'expression de  $J_x$  on obtient :

$$J_x = \sigma_{xx} \frac{\sigma_{xx}}{\sigma_{xy}} \epsilon_y + \sigma_{xy} \epsilon_y = \left( \sigma_{xx} \frac{\sigma_{xx}}{\sigma_{xy}} + \sigma_{xy} \right) \epsilon_y = \frac{\sigma_{xx}^2 + \sigma_{xy}^2}{\sigma_{xy}} \epsilon_y \quad (\text{B.2})$$

La constante de Hall est:  $R_H = \frac{\epsilon_y}{J_x B} \Leftrightarrow R_H = \frac{1}{B} \frac{\sigma_{xy}}{\sigma_{xx}^2 + \sigma_{xy}^2} \quad (\text{B.3})$

En remplaçant les expressions (A.26) des conductivités  $\sigma_{xx}$  et  $\sigma_{xy}$  dans l'expression (B.3) :

$$R_H = \frac{1}{B} \frac{\sigma_{xy}}{\sigma_{xx}^2 + \sigma_{xy}^2} \Leftrightarrow R_H = \frac{1}{B} \frac{\sigma_0 \frac{\left\langle \frac{\omega_c \tau^2}{1 + \omega_c^2 \tau^2} \right\rangle}{\langle \tau \rangle}}{\sigma_0^2 \frac{\left\langle \frac{\tau}{1 + \omega_c^2 \tau^2} \right\rangle^2}{\langle \tau \rangle^2} + \sigma_0^2 \frac{\left\langle \frac{\omega_c \tau^2}{1 + \omega_c^2 \tau^2} \right\rangle^2}{\langle \tau \rangle^2}}$$

Avec  $\omega_c = \frac{qB}{m^*}$  : la pulsation cyclotron et  $\sigma_0 = \frac{q^2}{m^*} \langle \tau \rangle$

$$R_H = \frac{1}{B \cdot \sigma_0} \frac{\left\langle \frac{\omega_c \tau^2}{1 + \omega_c^2 \tau^2} \right\rangle \langle \tau \rangle}{\left( \left\langle \frac{\tau}{1 + \omega_c^2 \tau^2} \right\rangle^2 + \left\langle \frac{\omega_c \tau^2}{1 + \omega_c^2 \tau^2} \right\rangle^2 \right)} \quad (B.4)$$

On peut envisager deux cas :

- **Le cas d'un seul type de porteur (électron ou trou)**

➤ Dans le cas d'un champ magnétique faible ( $\omega_c \tau \ll 1$ ) :

$$R_H = \frac{1}{B \cdot \sigma_0} \frac{\left\langle \frac{\omega_c \tau^2}{1 + \omega_c^2 \tau^2} \right\rangle \langle \tau \rangle}{\left( \left\langle \frac{\tau}{1 + \omega_c^2 \tau^2} \right\rangle^2 + \left\langle \frac{\omega_c \tau^2}{1 + \omega_c^2 \tau^2} \right\rangle^2 \right)} \simeq \frac{1}{B \cdot \sigma_0} \frac{\langle \omega_c \tau^2 \rangle \langle \tau \rangle}{\langle \tau \rangle^2}$$

D'où :

$$R_H \simeq \frac{1}{q} \frac{\langle \tau^2 \rangle \langle 1 \rangle}{\langle \tau \rangle^2 \langle 1 \rangle} \quad (B.5)$$

On définit le facteur de diffusion comme :

$$r_H = \frac{\langle 1 \rangle \langle \tau^2 \rangle}{\langle \tau \rangle^2} \quad (B.6)$$

La constante de Hall s'écrit en fonction de  $r_H$  comme suit :

$$R_H = \frac{r_H}{q \langle 1 \rangle} \quad (B.7)$$

Or :  $\langle 1 \rangle = \frac{1}{3\pi^2} \int \left( -\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) k^3(E) dE = n$  (n est la densité des électrons)

Pour les électrons on écrit :

$$R_H = -\frac{r_H}{n \cdot e} \text{ Avec } 1 \leq r_H \leq 2 \quad (B.8)$$

Le facteur  $r_H$  dépend du mécanisme de diffusion. Dans le cas où :  $\tau = \tau_0 E^p$ , pour un semi-

conducteur non dégénéré, on a :  $\tau = \tau_0 E^p = \frac{\tau_0}{(K_B T)^p} x^p = \tau_0' x^p$  ( $\tau_0$  et  $\tau_0'$  étant des constantes).

On montre que :

$$\langle \tau^s \rangle = \frac{2}{3K_B T} (\tau_0')^s \frac{\int_0^\infty x^{(s,p)+1/2} e^{-x} dx}{\int_0^\infty x^{1/2} e^{-x} dx} \quad (B.9)$$

En fonction de la fonction d'Euler (  $\Gamma(n+1) = \int_0^\infty x^n e^{-x} dx$  ) : et en tenant en compte que :

$$\Gamma\left(\frac{3}{2}\right) = \frac{2}{3}\Gamma\left(\frac{5}{2}\right) \text{ on a : } \langle \tau^s \rangle = \frac{1}{K_B T} (\tau_0')^s \frac{\Gamma\left(sp + \frac{3}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{5}{2}\right)} \quad (B.10)$$

D'où :

$$\langle \tau^2 \rangle = \frac{1}{K_B T} (\tau_0')^2 \frac{\Gamma\left(2p + \frac{3}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{5}{2}\right)} ; \quad \langle \tau \rangle = \frac{1}{K_B T} (\tau_0') \frac{\Gamma\left(p + \frac{3}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{5}{2}\right)} \text{ et } \langle 1 \rangle = \frac{1}{K_B T} \frac{\Gamma\left(\frac{3}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{5}{2}\right)}$$

En remplaçant ces trois dernières expressions dans (B.6) on aura :

$$r_H = \frac{\frac{\Gamma\left(\frac{5}{2} + 2p\right)}{\Gamma\left(\frac{5}{2}\right)}}{\left[ \frac{\Gamma\left(\frac{5}{2} + p\right)}{\Gamma\left(\frac{5}{2}\right)} \right]^2} = \frac{\Gamma\left(\frac{5}{2} + 2p\right) \Gamma\left(\frac{5}{2}\right)}{\left[ \Gamma\left(\frac{5}{2} + p\right) \right]^2} \quad (B.11)$$

Dans le tableau ci-dessous on trouvera les valeurs de  $r_H$  pour différentes valeurs de  $p$  :

p	0	1/2	1	3/2	-1/2	-1	2
$r_H$	1	$\frac{45\pi}{128} = 1,13$	$\frac{7}{5} = 1,40$	$\frac{315\pi}{512} = 1,93$	$\frac{3\pi}{8} = 1,18$	$\frac{27\pi}{16} = 5,30$	$\frac{99}{35} = 2,83$

➤ Dans le cas d'un champ magnétique fort (  $(\omega_c \tau \gg 1)$  ) :

$$R_H = \frac{1}{B \cdot \sigma_0} \frac{\left\langle \frac{\omega_c \tau^2}{1 + \omega_c^2 \tau^2} \right\rangle \langle \tau \rangle}{\left( \left\langle \frac{\tau}{1 + \omega_c^2 \tau^2} \right\rangle^2 + \left\langle \frac{\omega_c \tau^2}{1 + \omega_c^2 \tau^2} \right\rangle^2 \right)} \approx \frac{1}{B \cdot \sigma_0} \frac{\left\langle \frac{1}{\omega_c} \right\rangle \langle \tau \rangle}{\left( \left\langle \frac{1}{\omega_c} \right\rangle^2 \right)} \approx \frac{1}{B \cdot \sigma_0} \frac{\omega_c \langle 1 \rangle \langle \tau \rangle}{\langle 1 \rangle^2} \quad (B.12)$$

or :  $\langle \tau \rangle = \langle 1 \rangle = n$  , cela entraîne :

$$R_H \approx \frac{\omega_c}{B \cdot \sigma_0} \approx \frac{1}{q \langle \tau \rangle} \quad (B.13)$$

Pour les électrons ( $q=-e$ ) on aura:



$$R_H = -\frac{1}{n.e} \quad (B.14)$$

• *Le cas de deux types de porteurs*

Les éléments du tenseur de conductivité totale sous champ magnétique s'écrivent :

$$\begin{cases} \sigma_{xx} = \sigma_{yy} = \sigma_{xx}^e + \sigma_{xx}^h \\ \sigma_{xy} = \sigma_{xy}^e + \sigma_{xy}^h = -\sigma_{yx} \\ \sigma_{zz} = \sigma_0 = \sigma_0^e + \sigma_0^h = ne\mu_e + pe\mu_h \end{cases} \quad (B.15)$$

La constante de Hall s'écrit :

$$R_H = \frac{1}{B} \frac{\sigma_{xy}^e + \sigma_{xy}^h}{(\sigma_{xx}^e + \sigma_{xx}^h)^2 + (\sigma_{xy}^e + \sigma_{xy}^h)^2} \quad (B.16)$$

Dans le cas d'un champ magnétique faible ( $\omega_c \tau \ll 1$ ) :

$$\begin{cases} \sigma_{xx}^e = \sigma_0^e \cdot \frac{\left\langle \frac{\tau}{1 + \omega_c^2 \tau^2} \right\rangle_e}{\langle \tau \rangle_e} \simeq \sigma_0^e \\ \sigma_{xy}^e = \sigma_0^e \cdot \frac{\left\langle \frac{\omega_c \tau^2}{1 + \omega_c^2 \tau^2} \right\rangle_e}{\langle \tau \rangle_e} \simeq \sigma_0^e \frac{\langle \omega_c \tau^2 \rangle_e}{\langle \tau \rangle_e} \end{cases} \quad (B.17)$$

Dans le dénominateur de l'expression (B.13) :  $(\sigma_{xx}^e + \sigma_{xx}^h)^2 \ll (\sigma_{xy}^e + \sigma_{xy}^h)^2$  car  $\omega_c \tau \ll 1$

D'où :

$$R_H \simeq \frac{1}{B} \frac{\sigma_0^e \frac{\langle \omega_c^e \tau^2 \rangle_e}{\langle \tau \rangle_e} + \sigma_0^h \frac{\langle \omega_c^h \tau^2 \rangle_h}{\langle \tau \rangle_h}}{(\sigma_0^e + \sigma_0^h)^2} \simeq \frac{1}{B} \frac{\sigma_0^e \frac{\langle \omega_c^e \tau^2 \rangle_e}{\langle \tau \rangle_e}}{(\sigma_0^e + \sigma_0^h)^2} + \frac{\sigma_0^h \frac{\langle \omega_c^h \tau^2 \rangle_h}{\langle \tau \rangle_h}}{(\sigma_0^e + \sigma_0^h)^2}$$

$$R_H \simeq \frac{1}{B\sigma_0} \left( \sigma_0^e \omega_c^e \frac{\langle \tau^2 \rangle_e}{\langle \tau \rangle_e} + \sigma_0^h \omega_c^h \frac{\langle \tau^2 \rangle_h}{\langle \tau \rangle_h} \right) \text{ Avec } \sigma_0 = \sigma_0^e + \sigma_0^h = ne\mu_e + pe\mu_h \quad (B.18)$$

Or :

$$\omega_c = \frac{q.B}{m^*} \Rightarrow \omega_c^e = -\frac{e.B}{m_e^*} \text{ et } \omega_c^h = \frac{e.B}{m_h^*} \quad (B.19)$$

Et

$$\mu = \frac{e}{m^*} \frac{\langle \tau \rangle}{\langle 1 \rangle} \Rightarrow \mu_e = \frac{e}{m_e^*} \frac{\langle \tau \rangle_e}{\langle 1 \rangle} \text{ et } \mu_h = \frac{e}{m_h^*} \frac{\langle \tau \rangle_h}{\langle 1 \rangle} \quad (\text{B.20})$$

Tenant compte de (B.19) et (B.20) on montre que :

$$R_H \simeq \frac{e}{\sigma_0^2} \left( p \mu_h^2 \frac{\langle 1 \rangle_h \langle \tau^2 \rangle_h}{\langle \tau \rangle_h^2} + n \mu_e^2 \frac{\langle 1 \rangle_e \langle \tau^2 \rangle_e}{\langle \tau \rangle_e^2} \right) \quad (\text{B.21})$$

Les facteurs de diffusion des électrons et des trous sont respectivement:

$$r_e = \frac{\langle 1 \rangle_e \langle \tau^2 \rangle_e}{\langle \tau \rangle_e^2} \text{ et } r_h = \frac{\langle 1 \rangle_h \langle \tau^2 \rangle_h}{\langle \tau \rangle_h^2}$$

D'où :

$$R_H \simeq \frac{e}{\sigma_0^2} (p r_h \mu_h^2 - n r_e \mu_e^2) \quad (\text{B.22})$$

Si on a :  $r_h = r_e = r_H$

$$R_H \simeq \frac{e r_H}{\sigma_0^2} (p \mu_h^2 - n \mu_e^2) \quad (\text{B.23})$$

Tenant compte du rapport des mobilités :  $b = \frac{\mu_e}{\mu_h}$

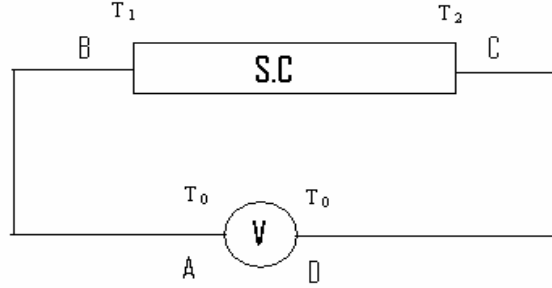
$$R_H \simeq \frac{r_H (p \mu_h^2 - n \mu_e^2)}{e (n \mu_e + p \mu_h)^2} \simeq \frac{r_H \mu_h^2 \left( p - n \frac{\mu_e^2}{\mu_h^2} \right)}{e \mu_h^2 \left( n \frac{\mu_e}{\mu_h} + p \right)^2} \simeq \frac{r_H (p - n b^2)}{e (nb + p)^2}$$

Finalement :

$$R_H \simeq \frac{r_H}{e} \frac{(p - n b^2)}{(p + nb)^2} \text{ avec : } b = \frac{\mu_e}{\mu_h} \quad (\text{B.24})$$

## Annexe C

### Effet Seebeck et formulation du coefficient thermoélectrique $\alpha$



Soit un semi-conducteur d'extrémités portées à des températures  $T_1$  et  $T_2=T_1+dT$  différentes, une différence de potentiel  $u$  apparaît aux bornes du voltmètre :

$$u = \oint \epsilon_x dx ; \epsilon_x : \text{champ électrique créée par le gradient de température.}$$

Dans la résolution de l'équation de Boltzmann (annexe B) nous avons montré que:

$$\vec{J} = \frac{2q}{(2\pi)^3} \int \vec{v} (\vec{v} \cdot \vec{G}) d\vec{k} \Rightarrow \vec{G} + \frac{q\tau}{m^*} (\vec{B} \wedge \vec{G}) = \vec{G}_0$$

$$\text{Avec : } \vec{G}_0 = \frac{\partial f_0}{\partial E} \tau (D \overrightarrow{\text{grad}_T T} - q\vec{\epsilon}) \text{ et } D = \frac{E-E_F}{T} + \frac{dE_F}{dT}$$

Si :  $\vec{B}=\vec{0}$  on a seulement un  $\overrightarrow{\text{grad}_T T}$  suivant Ox,  $\overrightarrow{\text{grad}_T T} = \frac{\partial T}{\partial x} \vec{e}_x$  d'où :

$$G = G_0 x = \frac{\partial f_0}{\partial E} \tau (D \frac{\partial T}{\partial x} - q\epsilon_x) \quad (C.1)$$

D'où :

$$J_x = \frac{2q}{(2\pi)^3} \int v_x^2 \frac{\partial f_0}{\partial E} \tau (D \frac{dT}{dx} - qE_x) d\vec{k} \quad (C.2)$$

$$\Leftrightarrow J_x = -\frac{2q^2 \epsilon_x}{(2\pi)^3} \int \frac{\partial f_0}{\partial E} \tau v_x^2 d\vec{k} + \frac{2q}{(2\pi)^3} \int \frac{\partial f_0}{\partial E} v_x^2 \tau \left( \frac{E-E_F}{T} + \frac{dE_F}{dT} \right) \frac{dT}{dx} d\vec{k}$$

$$\Leftrightarrow J_x = \frac{q^2}{m^*} \langle \tau \rangle \epsilon_x - \frac{q}{m^* T} \langle E \cdot \tau \rangle \frac{dT}{dx} + \frac{q}{m^* T} E_F \langle \tau \rangle \frac{dT}{dx} - \frac{q}{m^*} \frac{dE_F}{dT} \langle \tau \rangle \frac{dT}{dx}$$

Puisque le voltmètre possède une impédance infiniment grande on a donc :  $J_x = 0$

$$\text{C'est à dire : } J_x = \frac{q^2}{m^*} \langle \tau \rangle \epsilon_x - \frac{q}{m^* T} \langle E \cdot \tau \rangle \frac{dT}{dx} + \frac{q}{m^* T} E_F \langle \tau \rangle \frac{dT}{dx} - \frac{q}{m^*} \langle \tau \rangle \frac{dE_F}{dT} = 0 \quad (C.3)$$

D'où :

$$\varepsilon_x = \frac{1}{qT} \left[ \frac{\langle E \cdot \tau \rangle}{\langle \tau \rangle} - E_F \right] \frac{dT}{dx} + \frac{1}{q} \frac{dE_F}{dx} \quad (q = \pm e) \quad (C.4)$$

On définit le coefficient thermoélectrique  $\alpha$  comme :

$$\alpha = \frac{1}{qT} \left[ \frac{\langle E \cdot \tau \rangle}{\langle \tau \rangle} - E_F \right] \quad (C.5)$$

Posons :  $X = \frac{E}{K_B T}$  ;  $\eta = \frac{E_F}{K_B T}$ , l'expression de  $\alpha$  peut s'écrire :

$$\alpha = \pm \frac{k_B}{e} \left[ \frac{\langle X \cdot \tau \rangle}{\langle \tau \rangle} - \eta \right] \quad (q = \pm e) \quad (C.6)$$

- **Cas de non dégénérescence :** ( $E_F \ll K_B T$ )

Dans le cas de la non dégénérescence, la fonction de distribution de Fermi-Dirac tend vers la fonction de distribution de Maxwell-Boltzmann :

$$f_0^{F-D} \longrightarrow f_0^{M-B} \sim e^{-(E/K_B T)}$$

et:

$$\langle A \rangle = \frac{1}{3\pi^2} \int \left( -\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) A k^3 dE$$

Dans un semi-conducteur non dégénéré on a :  $\tau \sim E^{s-\frac{1}{2}}$

$$\langle \tau \rangle = \frac{1}{3\pi^2} \int \left( -\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) \tau k^3 dE$$

Or :  $k \sim E^{1/2}$ , on montre que le temps moyen de relaxation  $\langle \tau \rangle$  peut s'exprimer au moyen de la fonction d'Euler  $\Gamma$

$$\langle \tau \rangle \sim \Gamma(s+2) \text{ et } \langle E \cdot \tau \rangle \sim \Gamma(s+3) = (s+2) \Gamma(s+2) \quad (C.7)$$

(La fonction d'Euler  $\Gamma$  est tel que :  $\Gamma(n+1) = \int_0^\infty x^n e^{-x} dx$ )

$$\text{D'où : } \alpha = \pm \frac{k_B}{e} [s+2-\eta] \quad ; \eta = \frac{E_F}{K_B T} \quad (C.8)$$

La mesure de  $\alpha = \Delta u / \Delta T$  nous permet de remonter à la valeur de  $s$  ( $s = 0, 1, 2, \dots$ ) ce qui nous permet de déterminer le mécanisme de diffusion dans le semi-conducteur.

• **Cas de dégénérescence forte :** ( $E_F \gg K_B T$ )

En 1<sup>ère</sup> approximation à basse température ( $T \rightarrow 0$ ), la dérivée  $\left(-\frac{\partial f_0}{\partial E}\right)$  tend vers la fonction de Dirac :  $\sigma(E-E_F)$ . On montre que :

$$\langle E \cdot \tau \rangle = E_F \tau(E_F) \Rightarrow \alpha = 0 \quad (C.9)$$

Pour un ordre plus élevé on a :

$$\int_0^\infty \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E}\right) F(E) dE = F(E_F) + \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 \frac{d^2 F}{dE^2}(E_F) + \dots \quad (C.10)$$

F étant une fonction quelconque.

Or :  $\tau \sim E^{s-\frac{1}{2}}$  et  $k^3 \sim E^{3/2}$  pour une bande sphérique parabolique,

$$\frac{\langle E \tau \rangle}{\langle \tau \rangle} = \frac{\int -\left(\frac{\partial f_0}{\partial E}\right) E E^{s-1/2} E^{3/2} dE}{\int -\left(\frac{\partial f_0}{\partial E}\right) E^{s-1/2} E^{3/2} dE} \quad (C.11)$$

$$\text{Au numérateur : } F = E^{s+2} \quad \frac{d^2 F}{dE^2} = (2+s)(1+s) E^s$$

$$\text{Au dénominateur : } F = E^{s+1} \quad \frac{d^2 F}{dE^2} = (1+s) s E^{s-1}$$

$$\frac{\langle E \cdot \tau \rangle}{\langle \tau \rangle} = \frac{E_F^{s+2} + \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 (2+s)(1+s) E_F^s}{E_F^{s+1} + \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 (s+1) s E_F^{s-1}}$$

$$\alpha = \pm \frac{1}{eT} \frac{E_F^s \left[ E_F^2 + \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 (2+s)(1+s) \right] - E_F^s \left[ E_F^2 + \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 (1+s)s \right]}{E_F^{s-1} \left[ E_F^2 + \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 (1+s)s \right]}$$

$$\Leftrightarrow \alpha = \pm \frac{\pi^2 k_B}{3 e} \frac{\frac{k_B T}{E_F} (s+1)}{1 + \frac{\pi^2}{6} \left( \frac{k_B T}{E_F} \right)^2 s(s+1)}$$

$$\text{Finalement : } \alpha = \pm \frac{E_F}{eT} \frac{\frac{\pi^2}{3} (k_B T)^2 (1+s)}{E_F^2 + \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 (1+s)s} \quad (C.12)$$

Or dégénérescence forte  $\frac{E_F}{K_B T} \gg 1$  d'où :

$$\alpha = \pm \frac{\pi^2 k_B^2 T}{3 e E_F} (s+1) \quad (\text{C.13})$$

Comme avant, La mesure de  $\alpha$  va nous permettre d'avoir une information sur le mécanisme de diffusion.

Type de diffusion	s
Diffusion par les phonons acoustiques	0
Diffusion par les phonons optiques	1
Diffusion par les ions d'impuretés.	2

## Annexe D

### Quantification de l'énergie et singularités de la densité d'états d'un gaz d'électrons 3D sous champ magnétique

Le semi-conducteur est soumis à un champ magnétique  $\vec{B}=(0,0,B_z)$ . Dans la description quantique, l'hamiltonien des électrons sous champ magnétique s'écrit :

$$H = \frac{(\vec{p} - e\vec{A})^2}{m^*} \quad (D.1)$$

Avec  $\vec{A}$  le vecteur potentiel (défini par rapport à l'induction magnétique  $\vec{B}$  par la relation :  $\vec{B} = \vec{\nabla} \wedge \vec{A}$ ). Ici  $e$  est la charge élémentaire.

On peut choisir pour le vecteur potentiel la jauge :

$$\vec{A}=(A_x, A_y, A_z) = (-yB_z, 0, 0) \quad (D.2)$$

En effet :

$$\vec{\nabla} \wedge \vec{A} = \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x} \\ \frac{\partial}{\partial y} \\ \frac{\partial}{\partial z} \end{pmatrix} \wedge \begin{pmatrix} A_x \\ A_y \\ A_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x} \\ \frac{\partial}{\partial y} \\ \frac{\partial}{\partial z} \end{pmatrix} \wedge \begin{pmatrix} -yB_z \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ B_z \end{pmatrix} = \vec{B}$$

Posons :  $\vec{\pi} = \vec{p} - e\vec{A}$

D'où :

$$\begin{cases} \pi_x = p_x - eA_x = -i\hbar \left( \frac{\partial}{\partial x} - \frac{ie}{\hbar} A_x \right) \\ \pi_y = p_y - eA_y = -i\hbar \frac{\partial}{\partial y} \\ \pi_z = p_z - eA_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial z} \end{cases} \quad (D.3)$$

Le calcul des commutateurs  $[\pi_x, \pi_y]$  ;  $[\pi_x, \pi_z]$  et  $[\pi_y, \pi_z]$  donne :

$$\begin{aligned} [\pi_x, \pi_y] &= \pi_x \pi_y - \pi_y \pi_x = -\hbar^2 \left( \frac{\partial}{\partial x} - \frac{ie}{\hbar} A_x \right) \frac{\partial}{\partial y} - \hbar^2 \frac{\partial}{\partial y} \left( \frac{\partial}{\partial x} - \frac{ie}{\hbar} A_x \right) \\ &= -\hbar^2 \left( \frac{\partial}{\partial x} + \frac{ie}{\hbar} yB_z \right) \frac{\partial}{\partial y} - \hbar^2 \frac{\partial}{\partial y} \left( \frac{\partial}{\partial x} + \frac{ie}{\hbar} yB_z \right) \\ &= eB_z (y p_y - p_y y) \\ &= eB_z [y, p_y] \end{aligned}$$

Or,  $[p_y, y] = -i\hbar$  donc :  $[\pi_x, \pi_y] = i\hbar e B_z$

On montre aussi que :

$$[\pi_x, \pi_z] = \pi_x \pi_z - \pi_z \pi_x = 0 \text{ et } [\pi_y, \pi_z] = \pi_y \pi_z - \pi_z \pi_y = 0.$$

Finalement on a :  $[\pi_x, \pi_y] = i\hbar e B_z$  ;  $[\pi_x, \pi_z] = 0$  et  $[\pi_y, \pi_z] = 0$  (D.4)

L'hamiltonien H s'écrit alors :

$$H = \frac{(\vec{p} - e\vec{A})^2}{m^*} = \frac{(\vec{\pi})^2}{m^*} = \frac{(\pi_x^2 + \pi_y^2 + \pi_z^2)}{m^*} = \frac{(\pi_x^2 + \pi_y^2)}{m^*} + \frac{\pi_z^2}{m^*} \quad (D.5)$$

Posons :  $H_{\perp} = \frac{(\pi_x^2 + \pi_y^2)}{m^*}$  et  $H_z = \frac{\pi_z^2}{m^*}$ , nous obtenons :

$$H = H_{\perp} + H_z \quad (D.6)$$

Le calcul du commutateur :

$$[H_z, H_{\perp}] = H_z H_{\perp} - H_{\perp} H_z = \frac{1}{4m^*} ((\pi_z \pi_x)^2 + (\pi_z \pi_y)^2 - (\pi_x \pi_z)^2 - (\pi_y \pi_z)^2)$$

D'après (D.3) et (D.4) :  $[H_z, H_{\perp}] = 0$

De ce fait que :  $H_z$  commute avec  $H_{\perp}$ . Nous déduisons que le mouvement selon Oz est découplé du mouvement transversal dans le plan (xOy).

L'équation de Schrödinger s'écrit :

$$H\psi = E \psi \text{ Avec : } \psi(x, y, z) = A \phi(x, y) e^{ik_z z} \quad (D.7)$$

L'équation (D.7) s'écrit :

$$(H_z + H_{\perp})\psi = (H_z \psi + H_{\perp} \psi) = E_z \psi + E_{\perp} \psi = (E_z + E_{\perp}) \psi \quad (D.8)$$

Puisque le mouvement selon Oz est découplé du mouvement transversal, on peut découpler l'équation (D.8) en un système de deux équations :

$$\begin{cases} H_z \psi = E_z \psi \\ H_{\perp} \psi = E_{\perp} \psi \end{cases} \quad (D.9)$$

Avec l'énergie totale de l'électron est :

$$E = (E_z + E_{\perp}) \quad (D.10)$$

$$H_z \psi = \frac{\pi_z^2}{2m^*} \psi = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{\partial^2}{\partial z^2} \psi(x, y, z) = E_z \psi(x, y, z)$$

$$\text{D'où : } E_z = \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m^*} \quad (D.11)$$



Posons l'opérateur  $T$  tel que :  $T = -\frac{\pi_y}{eB_z}$  on a donc :

$$\frac{\pi_y^2}{2m^*} = \frac{(eBT)^2}{2m^*} = \frac{1}{2} m^* T^2 \left( \frac{eB}{m^*} \right)^2 = \frac{1}{2} m^* \omega_c^2 T^2 \quad (D.12)$$

$$H_{\perp} = \frac{(\pi_x^2 + \pi_y^2)}{m^*} = \frac{\pi_x^2}{m^*} + \frac{\pi_y^2}{m^*} = \frac{\pi_x^2}{m^*} + \frac{1}{2} m^* \omega_c^2 T^2 \quad (D.13)$$

$$\text{Or : } [\pi_x, T] = -\frac{1}{eB_z} [\pi_x, \pi_y] = -\frac{ie\hbar B_z}{eB_z} = -i\hbar$$

Par analogie avec l'oscillateur harmonique :

$$E_{\perp} = E_n = \left( n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega_c \text{ avec } n \text{ est un entier } (n=0 ; 1 ; 2 ; \dots) \quad (D.14)$$

Finalement l'énergie des électrons dans le cristal, sous  $\vec{B}$  est quantifié en niveaux de Landau et on a :

$$E = E(k_z, n, \omega_c) = \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m^*} + \left( n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega_c \quad (n=0 ; 1 ; 2 ; \dots) \quad (D.15)$$

$\omega_c = eB/m^*$  est la pulsation cyclotron.

Le mouvement des électrons est libre suivant (Oz) mais dans le plan (xOy) il est circulaire à vitesse angulaire cyclotron  $\omega_c$ .

$E$  est quantifié et prend des valeurs discrètes espacées de  $\hbar \omega_c$

La densité d'état  $D_B(E)$  sous  $B$  s'écrit :  $D_B(E) = \sum_{n=0}^N D_B^{(n)}(E)$  avec :

$$D_B^{(n)}(E) = \frac{\theta' |e| B}{\sqrt{E - \left( n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega_c}} \text{ et } \theta' = \frac{2V \sqrt{2m^*}}{(2\pi\hbar)^2} \quad (D.16)$$

Montrons brièvement que :  $D_B^{(n)}(E) \sim \frac{1}{\sqrt{E - \left( n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega_c}} \quad (D.17)$

$$E_z = \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m^*} \Rightarrow dE_z = \frac{\hbar^2 k_z}{m^*} dk_z \Rightarrow \frac{dk_z}{dE_z} = \frac{m^*}{\hbar^2 k_z} = \frac{\sqrt{2m^*}}{\sqrt{2\hbar E_z}}$$

$$\rho(k_z) dk_z = \rho(k_z) \frac{dk_z}{dE_z} dE_z = \frac{L_z}{2\pi} \frac{\sqrt{2m^*}}{\sqrt{2\hbar E_z}} dE_z = D(E_z) dE_z$$

D'où :

$$D_B(E_z) \sim \frac{1}{\sqrt{E_z}} \sim \frac{1}{\sqrt{E - (n + \frac{1}{2})\hbar\omega_c}}$$

C'est une densité d'état à une dimension ( $\sim 1/\sqrt{E_z}$ ) le mouvement est libre suivant (Oz).

Pour  $k_z=0$  :  $E=(n+1/2)\hbar\omega_c \Rightarrow D_B^{(n)}(E)$  diverge.

On a des singularités de  $D_B(E)$  aux points d'énergies:  $E = \frac{\hbar\omega_c}{2}, \frac{3}{2}\hbar\omega_c, \frac{5}{2}\hbar\omega_c \dots$

Les oscillations de la magnétorésistance de l'effet Subnikov de Hass sont dues aux singularités de la densité d'états  $D_B(E)$  sous le champ magnétique  $\vec{B}$ .

**Annexe (E)****Formalisme de la fonction enveloppe et relations de dispersion  
des sous bandes d'énergie des superréseaux HgTe/CdTe****1- Approximation de la fonction enveloppe**

Considérons le superréseau HgTe/CdTe formé des matériaux dénotés 1 et 2 dans la suite indiquée sur la figure II.15. Dans chaque couche 1 et 2 le mouvement transverse aux couches est décrit par les vecteurs d'onde  $k_1$  et  $k_2$  (de direction Oz). Le mouvement dans le plan des couches est décrit par le vecteur  $k_p = (k_x, k_y)$  conservé aux interfaces.

Considérons la matrice 6x6 de Kane décrivant l'hamiltonien d'interaction  $k.p$  des bandes  $\Gamma_6$  et  $\Gamma_8$ . Dans la base  $|S, M_j = \pm 1/2\rangle$ ,  $|P, M_j = \pm 1/2\rangle$ , et  $|P, M_j = \pm 3/2\rangle$ ,

L'indice courant  $i$  s'applique aux matériaux 1 et 2, cette matrice s'écrit en  $k_p = 0$  :

$$H = \begin{matrix} & |S, M_j = -1/2\rangle & |S, M_j = 1/2\rangle & |P, M_j = 3/2\rangle & |P, M_j = 1/2\rangle & |P, M_j = -1/2\rangle & |P, M_j = -3/2\rangle \\ \left[ \begin{array}{cccccc} E_{6i} & 0 & 0 & 0 & P_i \sqrt{\frac{2}{3}} \hbar k_i & 0 \\ 0 & E_{6i} & 0 & P_i \sqrt{\frac{2}{3}} \hbar k_i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & E_{8i} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & P_i \sqrt{\frac{2}{3}} \hbar k_i & 0 & E_{8i} & 0 & 0 \\ P_i \sqrt{\frac{2}{3}} \hbar k_i & 0 & 0 & 0 & E_{8i} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & E_{8i} \end{array} \right] & (E.1) \end{matrix}$$

$P_i$  est l'élément de matrice de Kane,  $E_{6i}$  et  $E_{8i}$  les énergies des sommets de bandes  $\Gamma_6$  et  $\Gamma_8$  par rapport à une origine arbitraire.

L'examen de l'hamiltonien montre que les états de particules légères (électrons  $s$  et trou  $p$ ) n'ont pas de composantes sur les états de trous lourds  $|P, M_j = \pm 3/2\rangle$ . En ( $k_p=0$ ), il y a découplage total des deux types de particules.

Pour un superréseau 1-2 donné, la fonction d'onde dans chaque matériau s'écrit [E.1] :

$$\Psi = \sum_{j=1}^6 e^{i\vec{k}_p \cdot \vec{r}_p} f_j(z) \cdot u_j(\vec{r}_p, z) \quad \vec{r}_p = (x, y) \quad (E.2)$$

La sommation s'étend sur les sommets de bandes.  $u_j$  représente les parties périodiques des fonctions de Bloch, supposées identiques dans les 2 composants du superréseau. L'élément de matrice  $P$  de Kane sera pris identique dans HgTe et CdTe.

L'hamiltonien  $H$  agira sur les fonctions enveloppes  $f_j(z)$  qui varient lentement car la périodicité du superréseau, grande, intègre les effets locaux rapides qui apparaîtront au travers de la bande interdite et l'élément de matrice  $P$ .

Les fonctions enveloppes, solutions du système différentiel 6x6 seront obtenus en remplaçant  $\hbar k_i$  par l'opérateur impulsion  $P_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial z}$ . Avec  $E_6$  et  $E_8$  dépendent de  $z$  et en diagonalisant  $H$

## 2 Détermination des relations de dispersion des bandes d'énergie du superréseau HgTe/CdTe.

### 2.1 Relation de dispersion des particules légères.

En se maintenant dans le plan des couches c'est-à-dire pour  $k_p=0$  ; le système 6x6 se simplifie en deux systèmes 2x2 décrivant le couplage des fonctions enveloppes  $f_s(z)$  et  $f_p(z)$  associées respectivement aux états  $|S, M_j = \pm 1/2\rangle$  et  $|P, M_j = \pm 1/2\rangle$ .

Dans chaque matériau 1 ou 2, on a :

$$\begin{matrix} |S, M_j = \pm 1/2\rangle & |P, M_j = \pm 1/2\rangle \\ \begin{bmatrix} E_6(z) - E & P\sqrt{\frac{2}{3}}P_z \\ P\sqrt{\frac{2}{3}}P_z & E_8(z) - E \end{bmatrix} & \begin{bmatrix} f_s(z) \\ f_p(z) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix} \end{matrix} \quad (E.3)$$

Les valeurs propres de l'énergie  $E$  sont données par :

$$\frac{2}{3} P^2 \hbar^2 k_i^2 = [E - E_6(z)]_i [E - E_8(z)]_i \quad (E.4)$$

En assumant que  $E_6(z)$  et  $E_8(z)$  sont constants dans HgTe et CdTe ( ce qui revient à négliger d'éventuels effets de courbure de bande sur lesquels nous ne pouvons avoir d'indications) les équations déduites de (E.3) donnent pour les particules légères une équation pour la fonction enveloppe, identique pour les deux matériaux :

$$\frac{d^2 f_i(z)}{dz^2} + \frac{3}{2} \frac{(E - E_6)_i (E - E_8)_i}{\hbar^2 P^2} f_i(z) = 0 \quad (\text{E.5})$$

Compte tenu que (voir figure II.13) :

$$\begin{cases} (E_6) = \Lambda - |\varepsilon_1| & (E_g)_1 = \Lambda \\ (E_6) = |\varepsilon_2| & (E_g)_2 = 0 \end{cases} \quad (\text{E.6})$$

L'équation précédente s'écrira dans 1 (HgTe) et 2 (CdTe)

$$\begin{cases} f_1''(z) + k_1^2 f_1(z) = 0 & \text{avec : } k_1^2 = \frac{3}{2} \frac{(E - \Lambda)(E + |\varepsilon_1| - \Lambda)}{\hbar^2 P^2} \\ f_2''(z) + k_2^2 f_2(z) = 0 & \text{avec : } k_2^2 = \frac{3}{2} \frac{E(E - \varepsilon_2)}{\hbar^2 P^2} \end{cases} \quad (\text{E.7})$$

Les équations précédentes conduisent aux relations de dispersion des particules légères dans HgTe et CdTe. Elles ont la forme suivante :

$$\frac{2}{3} P^2 \hbar^2 k^2 = E (E + \varepsilon_G) \quad \text{où : } \varepsilon_G \text{ est la bande interdite} \quad (\text{E.8})$$

$$\text{En posant : } \frac{1}{2m^*} = \frac{2}{3} \frac{P^2}{\varepsilon_G} \quad \text{on obtient : } \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} = E \left(1 + \frac{E}{\varepsilon_G}\right) \quad (\text{E.9})$$

Le caractère principal de ces bandes est la non parabolicité.

Les fonctions d'onde propres  $f_1(z)$  et  $f_2(z)$  sont des combinaisons linéaires de deux ondes planes de vecteurs d'onde opposés.

$$\begin{cases} f_1(z) = A e^{ik_1 z} + B e^{-ik_1 z} \\ f_2(z) = C e^{ik_2 z} + D e^{-ik_2 z} \end{cases} \quad (\text{E.10})$$

Les fonctions enveloppes  $f$  doivent satisfaire à plusieurs conditions :

\* Les fonctions enveloppes doivent vérifier la condition de périodicité de Bloch :

$$f_{s,p}(z + md) = e^{ikmd} f_{s,p}(z) \quad (\text{E.11})$$

$m$  : entier,  $d$  : pas du superréseau

\* Aux interfaces entre deux matériaux, la fonction doit être continue ainsi que le courant [E.2].

Les conditions de continuité en  $z = 0$  donnent le système d'équation :

$$\begin{cases} f_1(0) = f_2(0) \Rightarrow A + B = C + D \\ \frac{f_1'(0)}{E + |\varepsilon_1| - \Lambda} = \frac{f_2'(0)}{E - \varepsilon_2} \Rightarrow \xi(A - B) = C - D \quad \text{avec } \xi = \frac{k_1}{k_2} \frac{E - \varepsilon_2}{E + |\varepsilon_1| - \Lambda} \end{cases} \quad (\text{E.12})$$

$$\text{La condition de continuité en } z = d_1 \Rightarrow f_1(d_1) = f_2(d_1) \quad (\text{E.13})$$

Si on tient compte des conditions de périodicité en  $-d_2$  conduisent à :

$$f_2(d_1) = f_2(-d_2 + d) = e^{ik_z d} f_2(-d_2)$$

D'où :

$$f_1(d_1) = f_2(-d_2)\gamma \quad \text{avec } \gamma = e^{ik_z d} \quad \text{et } d = d_1 + d_2$$

Soit :

$$Ae^{ik_1 d_1} + Be^{-ik_1 d_1} = \gamma (Ce^{-ik_2 d_2} + De^{ik_2 d_2}) \quad (\text{E.14})$$

$$\frac{f_1'(d_1)}{E + |\varepsilon_1| - \Lambda} = \frac{f_2'(-d_2)e^{ik_z d}}{E - \varepsilon_2} \quad \text{Donne :}$$

$$\xi (Ae^{ik_1 d_1} - Be^{-ik_1 d_1}) = \gamma (Ce^{-ik_2 d_2} - De^{ik_2 d_2}) \quad (\text{E.15})$$

$$\begin{cases} A + B = C + D \\ \xi(A - B) = C - D \\ Ae^{ik_1 d_1} + Be^{-ik_1 d_1} = \gamma(Ce^{-ik_2 d_2} + De^{ik_2 d_2}) \\ \xi(Ae^{ik_1 d_1} - Be^{-ik_1 d_1}) = \gamma(Ce^{-ik_2 d_2} - De^{ik_2 d_2}) \end{cases} \quad (\text{E.16})$$

Le traitement des 4 équations à 4 inconnues s'effectue sous forme matricielle.

$$\begin{cases} A + B - C - D = 0 \\ \xi A - \xi B - C + D = 0 \\ Ae^{ik_1 d_1} + Be^{-ik_1 d_1} - \gamma Ce^{-ik_2 d_2} - \gamma De^{ik_2 d_2} = 0 \\ \xi Ae^{ik_1 d_1} - \xi Be^{-ik_1 d_1} - \gamma Ce^{-ik_2 d_2} + \gamma De^{ik_2 d_2} = 0 \end{cases}$$

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & -1 & -1 \\ \xi & -\xi & -1 & 1 \\ e^{ik_1 d_1} & e^{-ik_1 d_1} & -\gamma e^{-ik_2 d_2} & -\gamma e^{ik_2 d_2} \\ \xi e^{ik_1 d_1} & -\xi e^{-ik_1 d_1} & -\gamma e^{-ik_2 d_2} & \gamma e^{ik_2 d_2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \\ C \\ D \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (\text{E.17})$$

La nullité du déterminant s'écrit, relation de dispersion des particules légères dans la direction de croissance :

$$\cos[k_z(d_1 + d_2)] = \cos(k_1 d_1) \cos(k_2 d_2) - \frac{1}{2} \left[ \left( \xi + \frac{1}{\xi} \right) \right] \sin(k_1 d_1) \sin(k_2 d_2) \quad (\text{D.18})$$

$$\text{Avec : } \xi = \frac{k_1}{k_2} \frac{E - \varepsilon_2}{E + |\varepsilon_1| - \Lambda} \quad \text{et } -\pi/d \leq k_z \leq +\pi/d$$

C'est une relation de type Kronig- Penney dans le cas où les constituants du superréseau ont une structure de bandes du type modèle de Kane.

## 2.2 Relation de dispersion des particules lourdes.

Du fait que l'écart  $\Lambda$  entre les bandes de valence  $\Gamma_8$  est positif, les couches de HgTe se comportent comme des puits de potentiel pour les trous lourds.

Les bandes  $\Gamma_8$  de HgTe et CdTe sont décrites par l'hamiltonien 4x4 de Luttinger écrit dans la base.

$$H(k_p, k_z) = \begin{matrix} \begin{matrix} |P, M_j = 3/2\rangle & |P, M_j = 1/2\rangle & |P, M_j = -1/2\rangle & |P, M_j = -3/2\rangle \end{matrix} \\ \begin{bmatrix} P_+Q & -S & R & 0 \\ -S^+ & P_-Q & 0 & R \\ R^+ & 0 & P_-Q & S \\ 0 & R^+ & S^+ & P_+Q \end{bmatrix} \end{matrix} \quad (E.19)$$

Les paramètres P, Q, R, S sont donnés dans la référence [2.3]. En  $k_p \neq 0$ , la présence des termes R et S notent le couplage des trous légers  $|P, \pm 1/2\rangle$  et lourds  $|P, \pm 3/2\rangle$ .

Dans le cas simple de  $k_p=0$ , c'est-à-dire correspondant à la direction parallèle aux plans de croissance cristalline.  $H(0, k_z)$  devient diagonal.

$$H(k_p, k_z) = \begin{bmatrix} P_+Q & 0 & 0 & 0 \\ 0 & P_-Q & 0 & 0 \\ 0 & 0 & P_-Q & 0 \\ 0 & 0 & 0 & P_+Q \end{bmatrix} \quad (E.20)$$

L'interaction des trous lourds est :

$$\begin{aligned} \left\langle P, \pm \frac{3}{2} \right| H(0, k_z) \left| P, \pm \frac{3}{2} \right\rangle &= P + Q = E_8(z) + \frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dz} (\gamma_1 - 2\gamma)^{-1} \frac{d}{dz} \\ &= E_8(z) + \frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dz} (m_{hh}^*(z))^{-1} \frac{d}{dz} \end{aligned} \quad (E.21)$$

Où :  $m_{hh}^*(z) = (\gamma_1 - 2\gamma)^{-1} = M_i$  = masse des trous lourds dans HgTe et /ou CdTe  $\gamma_1$  et  $\gamma$  sont les paramètres de Luttinger décrivant l'interaction des trous lourds.

L'indépendance de  $m_{hh}^*(z)$  et  $E_8(z)$  en fonction de la position z conduit à l'ensemble d'équations de type :

$$(P+Q)f_i(z) = E f_i(z) \quad (E.22)$$

Soit :

$$\text{Dans 1 (HgTe) :} \quad f_1''(z) + k_1^2 f_1(z) = 0 \quad \text{avec } k_1^2 = -\frac{2M_1}{\hbar^2} (E - \Lambda) \quad (E.23)$$

$$\text{Dans 2 (CdTe) :} \quad f_2''(z) + k_2^2 f_2(z) = 0 \quad \text{avec } k_2^2 = -\frac{2M_2}{\hbar^2} E \quad (E.24)$$

Les équations précédentes montrent que les bandes de trous lourds sont paraboliques ( $E=k^2$ ), le signe (-) des masses tenant compte de la concavité des bandes  $\Gamma_8^{hh}$ .

Les conditions de continuité des fonctions et courants aux interfaces conduisent à la relation de dispersion des trous lourds :

$$\cos[k_z(d_1+d_2)] = \cos(k_1'd_1)\cos(k_2'd_2) - \frac{1}{2} \left[ \left( \xi' + \frac{1}{\xi'} \right) \right] \sin(k_1'd_1)\sin(k_2'd_2)$$

Avec :  $\xi' = \frac{k_1'}{k_2'} \frac{M_2}{M_1}$

Ce qui est similaire au cas des particules légères, dans un cas parabolique.

## Références

- [E.1] M. Altarelli physics, 117B et 118B, p. 747 (1983).
- [E.2] C. Cohen- Tannoudji , Mécanique quantique. Tome I, p.69 Herman (1973).
- [E.3] Y. R. Lin-Liu and L. T. Sham Phys. Rev. B, 32, (8), 5561 (1985).



## Résumé de la thèse

---

L'objectif de ce travail de thèse est la modélisation et la caractérisation par le transport électronique des semi-conducteurs II-VI :  $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$  ( $x=0.22$ ) alliage ternaire et  $\text{HgTe}(5.6 \text{ nm}) / \text{CdTe}(3 \text{ nm})$  superréseau, tout les deux semiconducteurs à bandes interdite étroite utilisés pour la fabrication des photodétecteurs opérant dans la fenêtre atmosphérique (LWIR) et  $\text{HgTe}(18 \text{ nm}) / \text{CdTe}(4.4 \text{ nm})$  superréseau utilisé pour la photodétection de l'infrarouge lointain.

Nous rapportons dans ce travail de thèse les mesures des propriétés électroniques de transport, les mécanismes de diffusion et les résultats théoriques du niveau de Fermi, de l'énergie de l'état donneur et la modélisation de la mobilité des porteurs de charges dans l'alliage ternaire  $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$  ( $x = 0.22$ ) semiconducteur de type n dégénéré à  $T = 4,2 \text{ K}$  avec une haute mobilité de Hall  $\mu_H = 2.10^5 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ . Nous rapportons aussi les résultats du Calcul des bandes d'énergie fait dans le formalisme de la fonction enveloppe (EFA), les résultats des mesures de l'effet Hall, la diffraction des rayons X, la magnétorésistance, l'effet Seebeck et l'effet Shubnikov-de Haas (SDH) dans le superréseau  $\text{HgTe}(5.6 \text{ nm}) / \text{CdTe}(3 \text{ nm})$  semiconducteur à bande interdite étroite, bidimensionnel (2D), modulée et nanostructuré de type p avec une mobilité de Hall relativement élevée de  $8200 \text{ cm}^2/\text{Vs}$  à basse température (4.2K).

Vu la limitation des courants nuisant à la photodéfectivité, l'échantillon de  $\text{HgTe}(5.6 \text{ nm}) / \text{CdTe}(3 \text{ nm})$  peut être considéré comme une alternative stable de l'alliage  $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$  ( $x=0.22$ ) pour la photodétection de l'infrarouge moyen.

Nous rapportons aussi dans ce travail les propriétés de transport et les résultats de structure des bandes du superréseau HgTe(18 nm)/CdTe(4.4 nm) faits dans le même formalisme (EFA). Ce dernier prévoit que cet échantillon est semimétallique. Des mesures de la magnéto-résistance et du voltage de Hall indiquent un comportement de conduction quasi bidimensionnel. A basse température, la conductivité de l'échantillon est de type p avec une mobilité de Hall des trous de  $900 \text{ cm}^2/\text{V.s}$ . Une inversion du signe du coefficient de Hall à champ faible se manifeste à 25 K avec une mobilité des électrons de  $3.10^4 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ .

---

**Mots-clés :** Semiconducteurs II-VI, photodétection infrarouge, formalisme de la fonction enveloppe, magnéto-résistance, conductivité, mobilité, diffraction des rayons X, Effet Hall, Effet Seebeck, Effet Subnikov-de Hass, mécanismes de diffusion, alliage ternaire  $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ , superréseau HgTe/CdTe.