



Full Length Research Paper

Détermination des niveaux d'énergie et des états quantiques, pour une photopile à puits quantique avec une hétérojonction (InAs/GaAs), à partir de la résolution de l'équation de Schrödinger

Gaye KHARMA*, Mor NDIAYE, Ousmane THIAM, Pape Gueye NDIAYE, Issa DIAGNE

Laboratoire des Semi-conducteur et Energie Solaire, Département Physique, Faculté des Sciences et Techniques, Université Cheikh Anta Diop, Dakar, Sénégal

Received April 2024 – Accepted June 2024

*Corresponding author. gayekharma@gmail.com

Author(s) agree that this article remain permanently open access under the terms of the Creative Commons Attribution License 4.0 International License.

Résumé :

Dans ce travail, nous avons proposé une méthode de détermination de l'énergie de confinement et des états quantiques pour une photopile à puits quantique avec le couple de matériaux binaires (InAs/GaAs) dont la zone de charge d'espace est assimilée à puits de potentiel. La résolution de l'équation de Schrödinger, à une dimension pour les états stationnaires, a permis de déterminer les niveaux d'énergie pour les deux composés binaires et de tracer les fonctions d'onde des premiers états quantiques.

Mots clés: Photopile à puits quantique, équation de Schrödinger, fonction d'onde, énergie de confinement.

Cite this article:

Gaye KHARMA, Mor NDIAYE, Ousmane THIAM, Pape Gueye NDIAYE, Issa DIAGNE. (2024). Détermination des niveaux d'énergie et des états quantiques, pour une photopile à puits quantique avec une hétérojonction (InAs/GaAs), à partir de la résolution de l'équation de Schrödinger. Revue RAMReS – Sci. Appl. & de l'Ing., Vol. 6(1), pp. 1-5. ISSN 2630-1164.

1. Introduction

La recherche dans le domaine photovoltaïque est motivée principalement par l'amélioration du rendement de conversion énergétique et par la réduction du coût de la réalisation [1]. Même si le silicium reste le matériau de base le plus largement utilisé dans le secteur des semi-conducteurs. On constate l'émergence rapide de nouveaux marchés demandant des matériaux spécifiques. Le besoin de nouveaux composants pour les hyperfréquences et l'optoélectronique a poussé le développement des matériaux III-V dont les propriétés de transport électronique et les propriétés optiques ne sont pas accessibles au silicium. L'intensification des recherches sur les matériaux semi-conducteurs III-V a permis de recenser des couples de matériaux susceptibles de constituer des hétérojonctions présentant des interfaces de qualité tout à fait acceptable. Certaines hétérojonctions accumulent de nombreux avantages comme la largeur de bande interdite relativement importante qui autorise un fonctionnement à haute température, une mobilité électronique élevée qui permet d'atteindre de bonnes

performances, des mailles cristallines assez proche qui minimisent les recombinaisons parasites. Ainsi les cellules d'épaisseurs faibles obtenues avec les hétérojonctions ont des atouts réels pour améliorer le rendement des cellules solaires [2,3]. Dans cette optique, différentes structures sont successivement apparues, parmi lesquelles on trouve les cellules solaires à puits quantique [4,5].

Notre contribution dans ce travail consiste à déterminer l'énergie de confinement et les états quantiques dans le cas d'une photopile à puits quantique avec une hétérojonction formée par le couple de matériaux binaires (InAs/GaAs) dont la zone de charge d'espace est assimilée à un puits de potentiel.

2. Etude théorique

Dans ce modèle d'étude, la photopile quantique est de type **n-p**, elle est éclairée par sa face avant (par l'émetteur GaAs) d'une lumière monochromatique. La figure 1 présente la structure de la photopile suivant le modèle considéré.

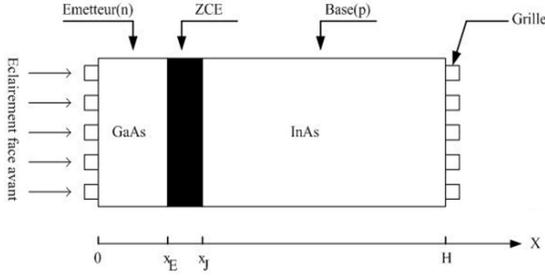


Figure 1 : Structure de la photopile quantique monofaciale de type n-p

2.1. Puits quantique carre fini

La zone de charge d'espace de la structure est assimilée à un puits de potentiel représenté à la figure 2. Il présente trois zones que sont : zone 1, zone 2, et la zone 3. [6,7]

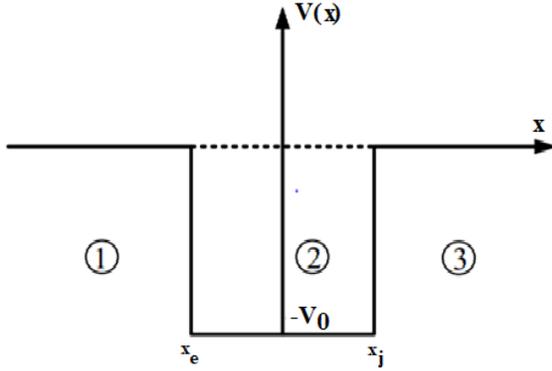


Figure 2 : Puits de potentiel carre symétrique fini

On a un puits de potentiel de profondeur finie et qui est délimité par x_e et x_j dont le milieu du puits correspond à l'origine des abscisses. Le potentiel est défini par:

$$V(x) = -V_0 \quad \text{Si} \quad x_e < x < x_j$$

$$V(x) = 0 \quad \text{Si} \quad x < x_e \quad \text{ou} \quad x > x_j$$

2.2. Résolution de l'équation de Schrödinger

Les états quantiques et les niveaux d'énergie sont déterminés à partir de la résolution de l'équation de Schrödinger.

L'équation de Schrödinger, à une dimension pour des états stationnaires, est donnée par la relation suivantes [8,9,10]:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \varphi(x)}{dx^2} + V(x) \varphi(x) = E \varphi(x) \quad (1)$$

Ou $\hbar = \frac{h}{2\pi}$ est la constante de Planck réduite ou constante de Dirac

Les états quantiques du système sont décrits par les fonctions d'onde $\varphi(x)$ solution de l'équation indépendante du temps.

- **Dans la zone 1**

La masse considérée est la masse effective de la particule dans les barrières GaAs qui sera m_1 et le potentiel est égal à la profondeur du puit, soit $V(x) = V_0 = 0$. L'équation s'écrit :

$$\frac{d^2 \varphi_1(x)}{dx^2} + \frac{2m_1 E}{\hbar^2} \varphi_1(x) = 0 \quad (2)$$

Avec $k_1 = k_3 = \sqrt{\frac{2m_1 E}{\hbar^2}}$ avec k_1 et k_3 les vecteurs d'onde dans la barrière

- **Dans la zone 2**

A l'intérieur du puits, la particule est soumise à un potentiel $V(x) = -V_0$ et l'énergie est uniquement cinétique. La masse est égale à la masse effective de la particule dans le InAs, note m_2 . L'équation de Schrödinger s'écrit :

$$\frac{d^2 \varphi_2(x)}{dx^2} + \frac{2m_2 E}{\hbar^2} (E + V_0) \varphi_2(x) = 0 \quad (3)$$

Et en posant $k_2 = \sqrt{\frac{2m_2}{\hbar^2} (E + V_0)}$ $k_0 = \sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2}}$

Pour résoudre l'équation c'est-à-dire trouver la fonction d'onde permet d'utiliser les méthodes de résolutions classiques des équations différentielles dont la solution est :

$$\begin{cases} \varphi_1(x) = A_1 e^{k_1 x} + B_1 e^{-k_1 x} \\ \varphi_2(x) = A_2 e^{ik_2 x} + B_2 e^{-ik_2 x} \\ \varphi_3(x) = A_3 e^{k_3 x} + B_3 e^{-k_3 x} \end{cases} \quad (4)$$

Après avoir obtenue les solutions des équations avec des constantes indéterminées que sont : A_1, B_1, A_2, B_2, A_3 et B_3 . Cela nous permettra d'éliminer certains d'entre eux et de déterminer les autres constantes par normalisations

✓ Fonctions paires (ou symétriques) $A_1 = B_3$

$$\begin{cases} \varphi_1(x) = A_1 e^{k_1 x} \\ \varphi_2(x) = A \cos(k_2 x) \\ \varphi_3(x) = A_1 e^{-k_1 x} \end{cases} \quad (5)$$

✓ Fonctions impaires (ou antisymétriques) $A_1 = -B_3$

$$\begin{cases} \varphi_1(x) = A_1 e^{k_1 x} \\ \varphi_2(x) = B \sin(k_2 x) \\ \varphi_3(x) = -A_1 e^{-k_1 x} \end{cases} \quad (6)$$

2.3. Détermination des énergies propres

Les solutions de ces équations donnent les valeurs de E pour les quelles l'équation de Schrödinger admet une solution.

✓ Solutions paires

$$\left| \cos\left(\frac{k_2 a}{2}\right) \right| = \frac{1}{\sqrt{1 + \left(\frac{2k_1}{k_2 a}\right)^2}} = Q\left(\frac{k_2 a}{2}\right) \quad (7)$$

✓ Solutions impaires

$$\left| \sin\left(\frac{k_2 a}{2}\right) \right| = \frac{1}{\sqrt{1 + \left(\frac{2k_1}{k_2 a}\right)^2}} = Y\left(\frac{k_2 a}{2}\right) \quad (8)$$

✓ Droite

$$T\left(\frac{k_2 a}{2}\right) = \frac{1}{\sqrt{1 + \left(\frac{2k_1}{k_2 a}\right)^2}} \quad (9)$$

Les intersections entre les courbes représentatives des fonctions sinusoidales et les droites $Q\left(\frac{k_2 a}{2}\right)$ et $T\left(\frac{k_2 a}{2}\right)$ pour les solutions paires, $Y\left(\frac{k_2 a}{2}\right)$ et $T\left(\frac{k_2 a}{2}\right)$ pour les solutions impaires donneront les valeurs de k_2 du vecteur d'onde. Par calcul, le niveau d'énergie correspondant à chaque valeur de k est déduit de la relation suivante :

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} \quad (10)$$

3. Résultats et discussions

3.1. Les niveaux d'énergies

Les variations des fonctions $Q\left(\frac{k_2 a}{2}\right)$, $Y\left(\frac{k_2 a}{2}\right)$ et $T\left(\frac{k_2 a}{2}\right)$ sont données par la figure ci-dessous :

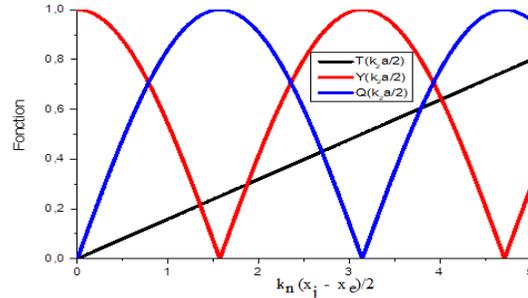


Figure 3 : Résolution graphique donnant les énergies des états quantifiés dans un puits quantique

Les états quantiques dans le puits quantique symétrique fini sont déterminés par la résolution graphique des équations pour $k_0 = 0,1595 \text{ nm}^{-1}$ et pour une largeur entre $x_e = 0,02 \text{ cm}$ et $x_j = 0,03 \text{ cm}$. Les solutions de l'équation Schrödinger dont les niveaux d'énergie sont donnés par l'intersection d'une droite et les courbes cosinus et sinus.

$\frac{\hbar^2 k_n(x_j - x_e)}{2}$ Correspond à la valeur trouvée en projetant sur l'axe des abscisses l'intersection de la droite et la courbe cosinus ou sinus. Or $a = x_j - x_e$

Nous obtenons 4 solutions, soient cinq valeurs de vecteurs d'onde: $k_0 = 2,274 \cdot 10^8 \text{ m}^{-1}$; $k_1 = 5,242 \cdot 10^8 \text{ m}^{-1}$; $k_2 = 8,722 \cdot 10^8 \text{ m}^{-1}$; $k_3 = 10,244 \cdot 10^8 \text{ m}^{-1}$.

Les valeurs d'énergies sont regroupées dans le tableau ci-dessus.

Tableau 1. – Valeurs des énergies dans un puits

Materials	Effective mass	E_0 (eV)	E_1 (eV)	E_2 (eV)	E_3 (eV)
GaAs	$0,067m_0$	$2,940 \cdot 10^{-2}$	$15,643 \cdot 10^{-2}$	$43,612 \cdot 10^{-2}$	$59,740 \cdot 10^{-2}$
InAs	$0,023m_0$	$8,575 \cdot 10^{-2}$	$45,612 \cdot 10^{-2}$	$126,280 \cdot 10^{-2}$	$174,193 \cdot 10^{-2}$

On constate que lorsque la masse effective du semi-conducteur est petite l'énergie devient de plus en plus élevée. L'intervalle entre les différents niveaux d'énergies varie beaucoup d'un semi-conducteur à l'autre ; cela s'explique par les différences de masse effective.

3.2. Représentation des fonctions d'onde.

Après le calcul des niveaux d'énergies, les fonctions d'onde associées, sont représentées graphiquement selon les équations pour les solutions paires et impaires sur les figures suivantes (Figures 4 et 5).

- a) Niveau fondamental ; b) Premier état excité ; c) Deuxième état excité ; d) Troisième état excité ; e) Quatrième état excité

• Matériau GaAs

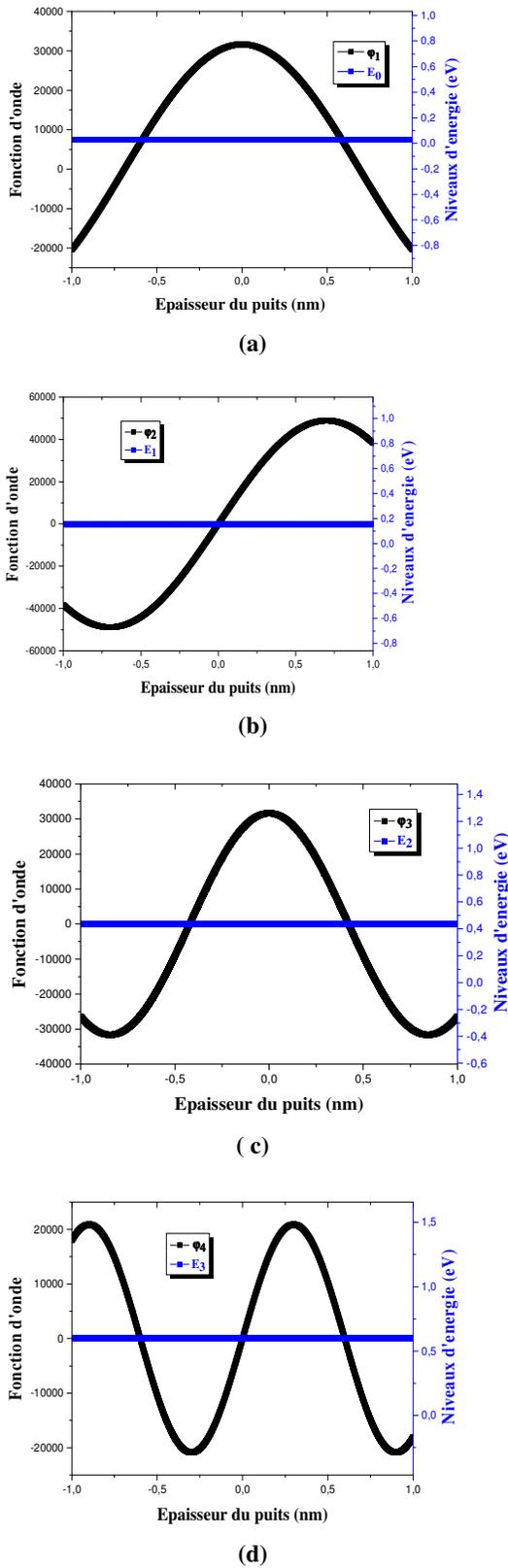


Figure 4 : Fonctions d'onde associées aux différents niveaux d'énergies dans le matériau GaAs

• Matériau GaAs

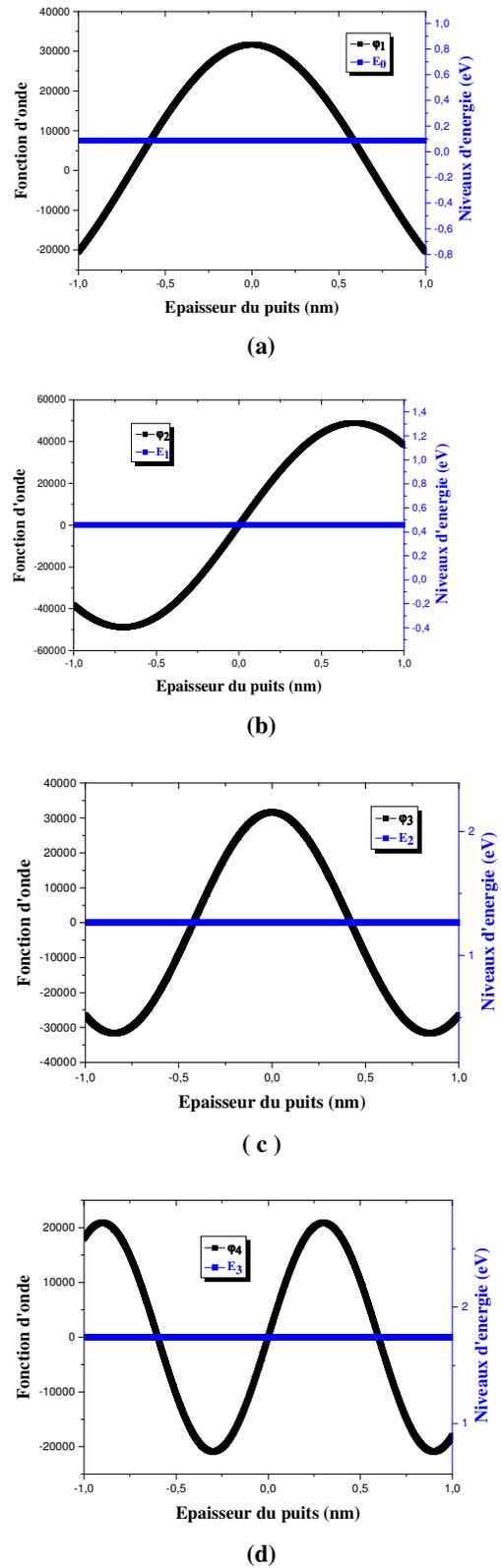


Figure 5 : Fonctions d'onde associées aux différents niveaux d'énergies dans le matériau InAs

Les fonctions d'onde associées aux états quantiques accessibles aux trous dans la bande de valence sont réparties en trois fonctions paires et deux fonctions impaires. Les figures a), b), c), d) et e) sont les représentations des fonctions d'ondes, respectivement pour l'état fondamental $n = 1$ et les premiers états excités.

4. Conclusion

En considérant une structure à puits quantique avec une hétérojonction formée par des composés binaires (InAs/GaAs), nous avons déterminé, pour chacun des matériaux, les états quantiques, discrets et autorisés pouvant être pris par les électrons et les trous, à partir de la résolution de l'équation de Schrödinger à une dimension pour des états stationnaires. Les niveaux d'énergie sont obtenus en considérant un modèle de puits de potentiel de profondeur finie. Ces composés binaires représentent une haute mobilité électronique et une bande interdite directe, et peuvent être utilisés dans les applications optoélectronique.

En observant le niveau fondamental la fonction d'onde est symétrique par rapport à l'origine et ne possède pas de nœud. Pour le premier état excité ; la fonction d'onde est antisymétrique ; par rapport à l'origine elle possède un nœud. Ainsi pour les autres niveaux on a une alternance de fonctions paires et impaires dont le nombre de nœud est donné par $(n-1)$ nœuds. Les fonctions d'onde prédisent la nature ondulatoire des particules dans l'infiniment petit c'est-à-dire au lieu que les électrons se comportent comme des particules classiques, ils se comportent comme des ondes. En se propageant ces dernières oscillent. Ces particules étant confinées et considérées comme des quanta d'énergie, ont leur fréquence d'oscillation qui augmente lorsque l'énergie augmente ce qui implique qu'il est difficile de les situer avec certitude cause pour laquelle on parle de probabilité de présence des électrons dans le domaine quantique.

REFERENCES

- [1] John A. Gil-Corrales, Alvaro L. Morales, Carlos A. Duque «Self-Consistent Study of GaAs/AlGaAs Quantum Wells with Modulated Doping», *Nanomatériaux* 2023 , 13, 913.
- [2] G. Gulyamov, A.B. Davlatov, S.T. Inoyatov, and S.A. Makhmudov «Calculation of the energy levels and wave functions of electrons in nanowires by the shooting method», *Journal of Applied Science and Engineering*, Vol. 25, No 1, Page 31-36(2021).
- [3] L. Chenini, A. Aissat, J.P. Vilcot, «Optimization of Inter-subband Absorption of InGaAsSb/GaAs Quantum Wells Structure», (2021).
- [4] A. Bouazra, S. Mnasri, S. Abdi-Ben Nasrallah, and M. Said «Numerical modeling of InAs quantum dot with application of coordinate transformation and finite difference method». (2014)
- [5] T.B. Boykin, and G. Klimeck, «The Discretized Schrodinger Equation and Simple Models for Semiconductor Quantum Wells». (2004)
- [6] J.M., Chauveau, M.Laügt, P.Vennegùes, M.Teisseire, Lo, B., C.Deparis, C. Morhain, and B.Vinter, « Semiconductor Science and technology» (2008)
- [7] W. J. Schaffer, M. D. Lind, S. P. Kowalczyk, and R. W. Grant, «Nucleation and strain relaxation at the InAs/GaAs(100) heterojunction,» *J. Vac. Sci. Technol. B* 1, 688 (1983).
- [8] L. Goldstein, F. Glas, M. N. Charasse J.-Y. Marzin, and G. LeRoux, «Growth by molecular beam epitaxy and characterization of InAs/GaAs strained-layer superlattices,» *Appl. Phys. Lett.* 47, 1099 (1985).
- [9] J. C. Rimada, L. M. Hernández, « A new approach to ideal AlGaAs MQW solar cells», *Modern physics letters B*, vol. 15, No.17n19, pp.778-781(2001).
- [10] S.J. Lade, A. Zahedi, «A revised ideal model for AlGaAs/GaAs quantum well solar cells», *Microelectronics Journal* 35 (2004) 401–410.