

Boîtes quantiques auto-organisées dans les nanofils : mécanismes de croissance

Des boîtes quantiques insérées dans des nanofils : telle est la géométrie explorée dans de nouveaux dispositifs d'optique quantique. Leur application va des « nano-détecteurs aux sources de photons uniques. Un nouveau mode de croissance de ces objets a été récemment révélé¹. Il correspond à l'auto-organisation de boîtes dans des nanofils de type cœur-coquille de semi-conducteurs AlGaAs. Elles présentent des propriétés optiques différentes des boîtes habituellement obtenues dans le mode de croissance Stranski-Krastanov.

La compréhension de la croissance de ces boîtes nécessite de revisiter les mécanismes d'évolution de ces hétérostructures. Tel a été l'objet d'un travail théorique associant l'équipe Physico-chimie et dynamique des surfaces de l'INSPI au Département de sciences de l'ingénieur et de mathématiques appliquées de Northwestern University². Les chercheurs ont montré que les morphologies obtenues dans les expériences pouvaient être reproduites dans un modèle thermodynamique décrivant la combinaison entre la capillarité et les anisotropies de diffusion de surface et de déposition. La cinétique peut ainsi favoriser la présence de facettes non décrites dans le diagramme d'équilibre dit de Wulff.

L'étude a porté sur un modèle à deux dimensions visant à décrire des nanofils d'AlGaAs obtenus par croissance par jet moléculaire. Ces nanofils sont caractérisés par une géométrie hexagonale avec des facettes {110} séparées par des facettes {112}. La dynamique de croissance de ces objets est dictée par la diffusion de surface et l'attachement sur les facettes. La description classique de ce phénomène (en termes de gradients de potentiel chimique) est mal définie sur des facettes qui sont des objets singuliers. On peut néanmoins dériver des équations d'évolution en fonction des moyennes du potentiel chimique sur les facettes. Les équations différentielles couplées résultantes peuvent être résolues analytiquement dans certains cas limites, ou numériquement. Les paramètres du modèle sont les énergies de surface, les coefficients de diffusion et flux de déposition sur les facettes, ainsi que la géométrie du cœur du nanofil qui est la condition initiale pour la croissance de la coquille.

Le modèle développé a permis de reproduire les géométries de la coquille observées expérimentalement. En particulier, ce modèle prédit l'apparition au cours de la croissance d'objets en forme de Y ou de bandes, séparant les facettes {110}, cf Figure 1. Ces structures résultent d'une évolution constante et continue de la forme du nanofil, et reproduisent les formes des boîtes quantiques obtenues expérimentalement. D'autres évolutions typiques ont aussi pu être caractérisées en fonction des paramètres du modèle, donnant lieu à différentes morphologies typiques de la coquille (en forme de V ou hexagonale), cf le diagramme des morphologies en Figure 2. On comprend ainsi que la compétition entre la cinétique de déposition et celle de diffusion, produit des formes intermédiaires entre la forme d'équilibre (liées aux énergies de surface) et les formes de croissance (liées aux coefficients d'attachement sur les facettes).

1 M. Heiss, Y. Fontana, A. Fontcuberta i Morral, et al, « Self-assembled quantum dots in a nanowire system for quantum photonics », Nature Materials, 12 (2013) 439

2 Q. Zhang, J.-N. Aqua, P. W. Voorhees, S. H. Davis, « Mechanisms of morphological evolution on faceted core-shell nanowire surfaces », Journal of the Mechanics and Physics of Solids, 91 (2016) 73

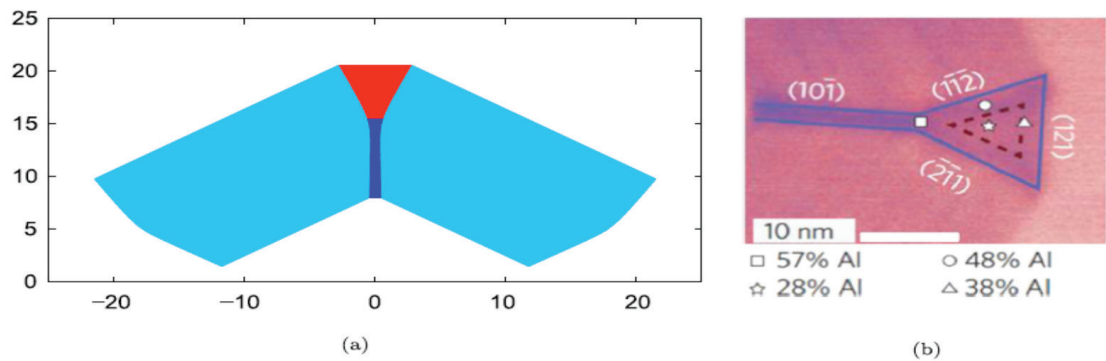


Figure 1

- (a) Modélisation de la croissance de la coquille d'un nanofil cœur-coquille avec des facettes $\{110\}$ (bleu clair) séparées par une facette $\{112\}$ (bleu foncé puis rouge) ; cette dernière évolue peu pendant un certain temps avant de suivre l'évolution auto-similaire de la construction de Wulff cinétique.
- (b) Image expérimentale d'une boîte quantique insérée dans un nanofil. Les différences de couleur sont liées à des différences de composition sur chacune des facettes.

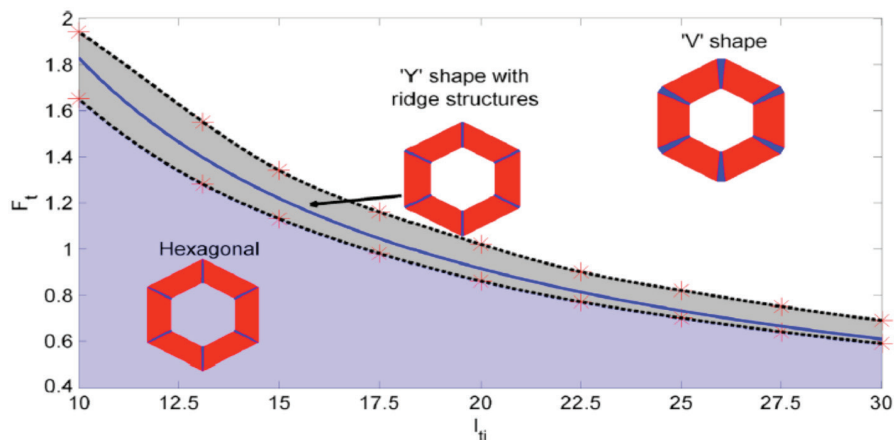


Figure 2

Diagramme de phase cinétique donnant les formes typiques de croissance en fonction de la taille des facettes $\{110\}$ et du flux d'attachement sur ces mêmes facettes.

Cette nouvelle modélisation permet d'appréhender les morphologies facettées de nanofils. Elle offre un cadre simple et généralisable d'analyse de ce type de système. Elle ouvre en particulier la voie à l'étude d'autres aspects du problème comme le couplage entre la géométrie et la composition. Elle vise ultimement à comprendre l'auto-organisation de ces systèmes afin d'optimiser le contrôle des objets formés et donc de leurs propriétés.

Référence

"Mechanisms of morphological evolution on faceted core-shell nanowire surfaces"
 Zhang, Q ; Aqua, JN ; Voorhees, PW ; Davis, SH
 Journal of the mechanics and physics of solids - Volume: 91, Pages: 73-93
 DOI: 10.1016/j.jmps.2016.02.033

Contact

Jean-Noël Aqua : jean-noel.aqua@insp.jussieu.fr