

Sommaire

Introduction	5
Références	7
Chapitre 1: Semi-conducteurs et superréseaux.....	8
1.1 Semi-conducteurs.....	9
1.1.1 Définition	9
1.1.2 Types de semi-conducteurs	10
1.1.2.1 Semi-conducteurs intrinsèques	10
1.1.2.2 Semi-conducteurs extrinsèques	10
1.1.3 Notion de dopage.....	10
1.1.3.1 Semi-conducteur dopé n	11
1.1.3.2 Semi-conducteur dopé p	11
1.1.4 Structure de bande	12
1.1.4.1 Notion de gap direct et gap indirect.....	15
1.1.5 Masse effective des porteurs de charge.....	16
1.1.6 Semi-conducteurs GaAs et AlGaAs.....	17
1.1.6.1 Propriétés cristallines.....	17
1.1.6.2 Propriétés électroniques	18
1.2 Superréseaux.....	19
1.2.1 Définition.....	20
1.2.2 Technique de fabrication.....	20
1.2.2.1 L'épitaxie par jet moléculaire.....	20
1.2.3 Types de superréseau	22
1.2.3.1 Superréseau à puits et à barrières rectangulaires	22
1.2.3.2 Superréseau à puits quantiques paraboliques	23
1.2.3.3 Superréseau à dents de scie	23
1.2.3.4 Superréseau poly- types	23
1.2.3.5 Superréseau à modulation de dopage.....	24
1.2.4 Classes de superréseau	24
1.2.4.1 Superréseau de type I	24

1.2.4.2 Superréseau de type II	24
1.2.5 Propriétés des superréseaux	25
1.2.5.1 Propriétés de transport	25
1.2.5.2 Propriétés optiques (L'effet laser)	27
1.2.5.2.1 Diode laser	28
1.2.5.2.2 Principe de fonctionnement d'une diode laser	29
1.2.5.2.3 Applications des lasers à superréseaux.....	31
Références	32
Chapitre 2: Système unidimensionnel désordonné	34
2.1 Les systèmes désordonnés et le problème de localisation	35
2.1.1 Définition	35
2.1.2 Localisation d'Anderson	35
2.1.3 Les états électroniques dans un système ordonné et désordonné	36
2.1.3.1 Système ordonné	36
2.1.3.2 Système désordonné	36
2.2 Types de désordre	37
2.2.1 Désordre structural	37
2.2.2 Désordre spatial.....	37
2.3 Transport électronique dans les systèmes désordonnés.....	37
2.3.1 Critères de la localisation	38
2.3.2 Théorie d'échelle.....	39
2.4 Corrélation et délocalisation des systèmes désordonnés	40
2.4.1 Études expérimentales.....	40
2.4.2 Études analytiques et numériques.....	41
Références	42
Chapitre 3: Simulation et modélisation	44
3.1 Introduction	45
3.2 Approximations de base.....	45
3.2.1 Approximations de la masse effective.....	45
3.2.2 Fonction enveloppe et Conditions de continuité.....	46
3.3 Modèles et méthodes théoriques.....	47

3.3.1	Calcul de la structure de minibande.....	48
3.3.1.1	Modèle de la matrice de transfert	49
3.3.2	Calcul du coefficient de transmission.....	50
3.3.2.1	Fonctions d'Airy	51
3.3.2.2	Méthode des ondes planes	54
3.3.3	L'intérêt du coefficient de transmission.....	56
	Références	57
	Chapitre 4: Résultats et discussions	59
4.1	Introduction	60
4.2	Superréseau Ordonné	60
4.2.1	Double barrière rectangulaire.....	60
4.2.2	Triple barrière rectangulaire	61
4.2.3	Structure à N barrière rectangulaire	62
4.3	Superréseau à désordre structural	63
4.3.1	Paramétrisations	63
4.3.2	Dimer en hauteur de barrières (D.H.B).....	63
4.3.3	Trimer en hauteur de barrières (T.H.B)	65
4.3.4	Effet des paramètres de superréseau sur la transmission électronique	68
4.3.4.1	Largeur de puits	68
4.3.4.2	Épaisseur de la barrière	68
4.3.4.3	Hauteur de barrière.....	71
4.3.5	Exposant de Lyapunov	75
4.3.6	Longueur d'onde laser.....	76
4.3.7	Influence de la tension externe	78
4.3.7.1	Structure ordonnée.....	78
4.3.7.2	Structure désordonnée en dimer et trimer	81
4.3.8	Influence de la taille du système	84
4.3.8.1	Structures ordonnées	84
4.3.8.2	Structures désordonnées	85
4.4	Superréseau à désordre spatial.....	87
4.4.1	Effet de l'épaisseur de barrière.....	87

4.4.1.1 Cas du dimer et trimer pour $V=0.24\text{eV}$	87
4.4.1.2 Cas du dimer et trimer pour $V=0.33\text{eV}$	87
4.4.2 Effet de la largeur de puits	89
4.4.2.1 Cas du dimer et trimer pour $V=0.24\text{eV}$	89
4.4.2.2 Cas du dimer et trimer pour $V=0.33\text{eV}$	90
4.5 Temps de l'effet tunnel résonant.....	91
4.5.1 Méthode de la Lorentzienne	92
Références	94
Conclusion générale	96

Introduction

Grâce aux travaux amorcés dans les années 70 par Tsu et Esaki, les physiciens sont arrivés à élaborer les premières couches minces semi-conductrices. Cette traversée scientifique a ouvert un vaste champ de recherche sur les hétérostructures semi-conductrices [1].

Les puits quantiques et les superréseaux furent les premières structures réalisées. Elles se distinguent du matériau massif par leur caractère bidimensionnel et la quantification partielle des excitations électroniques induite par le confinement. L'effet de ce dernier modifie totalement les propriétés physiques du semi-conducteur [2].

Les semi-conducteurs III-V à gap direct utilisés au cours de ce travail, sont devenus le pilier de l'optoélectronique moderne pour la réalisation de lasers [3] et de photodétecteurs à base de puits quantiques de plus performants [4].

Ce développement a été en partie rendu possible grâce à l'utilisation des techniques de la croissance épitaxiale, comme l'épitaxie par jets moléculaires (EJM) ou l'épitaxie en phase vapeur sur les organométalliques (EPVOM). Ces techniques ont permis la fabrication de très grandes variétés d'hétérostructures semi-conductrices à puits quantiques très performantes en termes de rendement quantiques [5].

Ces hétérostructures constituent la base de la plupart des composants optoélectroniques actuellement sur le marché et leur importance a été reconnue par l'attribution du prix Nobel 2000 de physique à Zhores Alferov et Herbert Kroemer.

L'avantage de ces systèmes est que leurs propriétés optiques puissent être modifiées en changeant leurs paramètres structuraux, typiquement la largeur et la composition. En plus, grâce à leur structure de bande transformée en mini-bandes par effet tunnel résonnant [6], les porteurs excités du système sont mieux protégés contre les relaxations par les phonons optiques considérés comme des éléments réducteurs de la transmission électronique[7].

Dans un système désordonné, les impuretés présentes à des positions aléatoires, rend difficile le déplacement des électrons, ce qui pose le problème de la conduction de l'électricité.

Dans ce contexte, notre travail consiste à étudier la nature des états électroniques d'un superréseau GaAs-Al_xGa_{1-x}As à désordre corrélé. L'étude de la transmission électronique permet de déterminer les différents états existants dans ces matériaux et prévoir la possibilité ou non de la conduction électrique.

Pour cela, nous présentons brièvement dans le premier chapitre, un rappel sur les semi-conducteurs à base des systèmes étudiés, et des généralités sur les superréseaux.

Le second chapitre traite le problème de la localisation dans les systèmes désordonnés et présente une synthèse bibliographique des études théoriques et expérimentales effectuées jusqu'à présent, sur ces structures.

Le troisième chapitre présente les différentes méthodes de calcul de la structure de minibande grâce au modèle de la matrice de transfert, tandis que le coefficient de transmission est déterminé à l'aide des fonctions d'Airy et la méthode des ondes planes.

Le quatrième chapitre est consacré à l'étude de la nature des états électroniques dans les superréseaux à désordre corrélé et l'effet de plusieurs paramètres tels que la tension externe appliquée, la largeur du puits, l'épaisseur et la hauteur de la barrière sur la transmission électronique.

Enfin, les résultats de notre étude sont obtenus à l'aide du logiciel «**SUPERRÉSEAUX**» capable de grouper tous nos programmes de calcul et faciliter la tâche des chercheurs dans ce domaine.

Références

- [1] D.P. Nguyen, Confinements non usuels dans les boites quantiques semi-conductrices. Thèse de doctorat. Année 2005.
- [2] G. Renaud, Surf. Sci. Rep., 32, Nos 1 et 2, pp. 1-90, 1998.
- [3] L. Marshall, Laser Focus World **34**(7) 139-143 (1998).
- [4] R. Ignatius, M. Ignatius Laser Focus World **34**(7) 139-143(1998).
- [5] B. Salem, Spectroscopie optique des ilots quantiques d'In As/In P(001) pour la réalisation de composants optoelectroniques émettant à 1.55 μm , Institut national des sciences appliquées de LYON, (2003).
- [6] B. Sapoval et C. Hermann, Physique des semi-conducteurs (2006).
- [7] T.N. Quang, Effet de spin dans les nanostructures semi-conductrices: modélisation et expériences de magneto-transport, Thèse, CNRS Marcoussis (2006).

Chapitre 1

Semi-conducteurs et superréseaux

Dans ce chapitre nous présentons une vue générale sur les semi-conducteurs III-V qui sont à la base des hétérostructures étudiées puis un aperçu sur la classification, les propriétés et l'utilité des superréseaux.

1.1 Les semi-conducteurs

1.1.1 Définition

Les semi-conducteurs (SC) sont des matériaux présentant une conductivité électrique intermédiaire entre les métaux et les isolants, elle est aussi directement proportionnelle à la température. Lorsque $T=0^{\circ}\text{K}$ la bande de valence est saturée, toutes les places sont occupées alors que la bande de conduction qui offre des places vides et le semi-conducteur devient un isolant. Tandis que la température s'élève, l'agitation thermique désordonne la configuration du SC et provoque des porteurs de charges libres capables de se déplacer dans le cristal et autorisant la circulation d'un courant électrique, le SC devient alors un conducteur. Les semi-conducteurs sont primordiaux en électronique, car ils offrent la possibilité de contrôler, par divers moyens, la quantité de courant électrique favorisé par deux types de porteurs : les électrons et les trous susceptibles de les traversé ainsi que la direction que peut prendre ce courant.

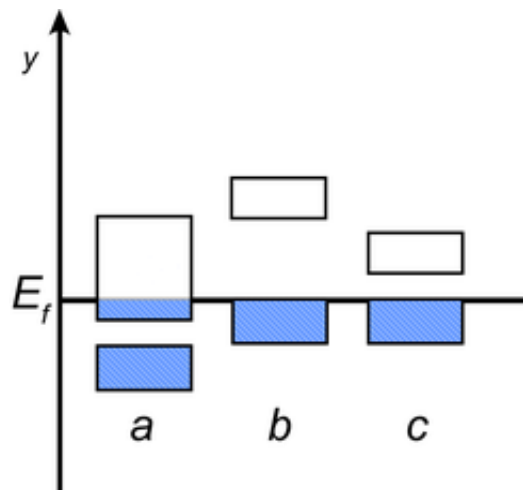


Figure 1.1: a) Métal ; b) Isolant ; c) Semi-conducteur ;
y) Énergie ; E_f) Niveau de Fermi.

1.1.2 Types de semi-conducteurs

1.1.2.1 Semi-conducteurs intrinsèques

Un semi-conducteur est dit intrinsèque lorsqu'il est pur, bien cristallisé (périodique). Il est possible de le produire avec un haut degré de pureté (moins d'un atome étranger pour 10^{13} atomes de semi-conducteurs).

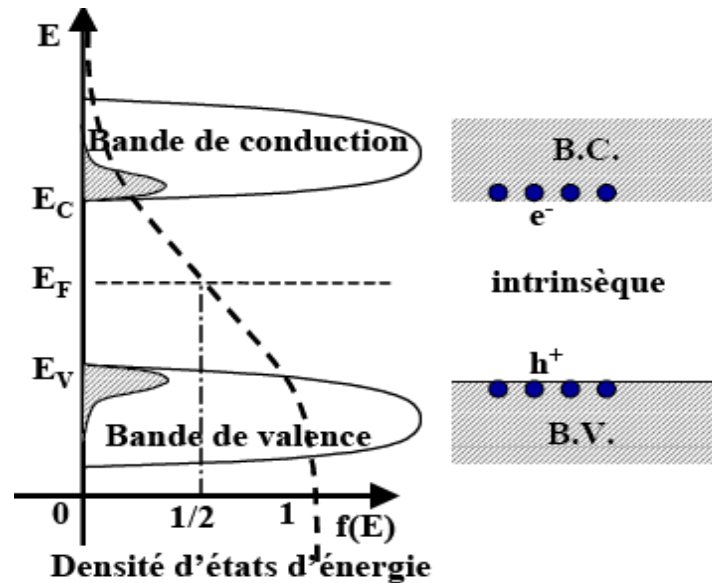


Figure 1.2: Schéma d'un semi-conducteur intrinsèque.

1.1.2.2 Semi-conducteurs extrinsèques

On peut modifier de façon considérable la concentration de porteurs de charge d'un semi-conducteur intrinsèque en lui ajoutant de faibles quantités d'atomes astucieusement choisis appelés impuretés dopantes ou tout simplement dopants. On obtient alors un semi-conducteur extrinsèque ou dopé.

1.1.3 Notion de dopage

Un dopant, dans le domaine des semi-conducteurs, est une impureté ajoutée en petites quantités à une substance pure afin de modifier ses propriétés de conductivité.

Le dopage d'un matériau consiste à introduire dans sa matrice des atomes d'un autre matériau. Ces atomes vont se substituer à certains atomes initiaux et ainsi introduire davantage d'électrons ou de trous.

1.1.3.1 Semi-conducteur dopé n

Les semi-conducteurs de type N sont appelés semi-conducteurs extrinsèques. Le but d'un dopage N est de produire un excès d'électrons porteurs dans le semi-conducteur. Les électrons sont des porteurs majoritaires et les trous des porteurs minoritaires.

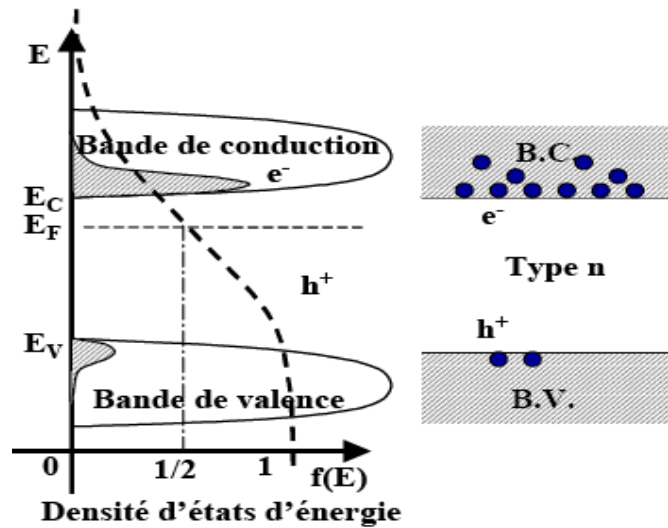


Figure 1.3: Un semi-conducteur dopé n.

1.1.3.2 Semi-conducteur dopé p

Les semi-conducteurs de type p sont également des semi-conducteurs extrinsèques. Le but d'un dopage p est de créer un excès de trous qui sont alors des porteurs majoritaires et les électrons des porteurs minoritaires.

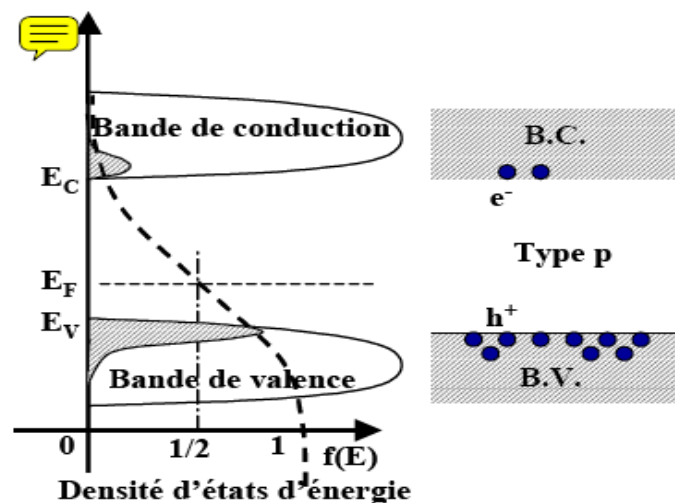


Figure 1.4: Un semi-conducteur dopé p

1.1.4 Structure de bande

Dans un solide, l'énergie d'un électron peut avoir des valeurs comprises dans certains intervalles. On parle alors de bandes d'énergies permises. Elles sont séparées par des bandes interdites. Cette représentation en bandes d'énergie est simplifiée et partielle de la densité d'états électroniques.

Les électrons du solide se répartissent dans les niveaux d'énergie permis. Cette répartition dépend de la température.

Dans la limite où la température tend vers 0°K, deux bandes d'énergie permises jouent un rôle particulier dans la détermination des propriétés du solide. La dernière bande complètement remplie est appelée bande de valence. La bande d'énergie permise au-dessus est appelée bande de conduction. Elle peut être vide ou partiellement remplie. L'énergie qui sépare la bande de valence de la bande de conduction est appelée le gap.

Le gap dépend de la température selon l'expression suivante [1]:

$$Eg(T) = Eg(0) - \frac{AT^2}{T+B} \quad (1.1)$$

où Eg est La taille de la bande interdite et A, B sont des constantes.

Les électrons de la bande de valence contribuent à la cohésion locale du cristal (entre atomes voisins). Ces électrons sont dans des états localisés. Ils ne peuvent pas participer aux phénomènes de conduction. À l'inverse, les états de la bande de conduction sont délocalisés. Ce sont ces électrons qui participent à la conduction électronique. Les propriétés électroniques du solide dépendent donc essentiellement de la répartition des électrons dans ces deux bandes, ainsi que de la valeur du gap.

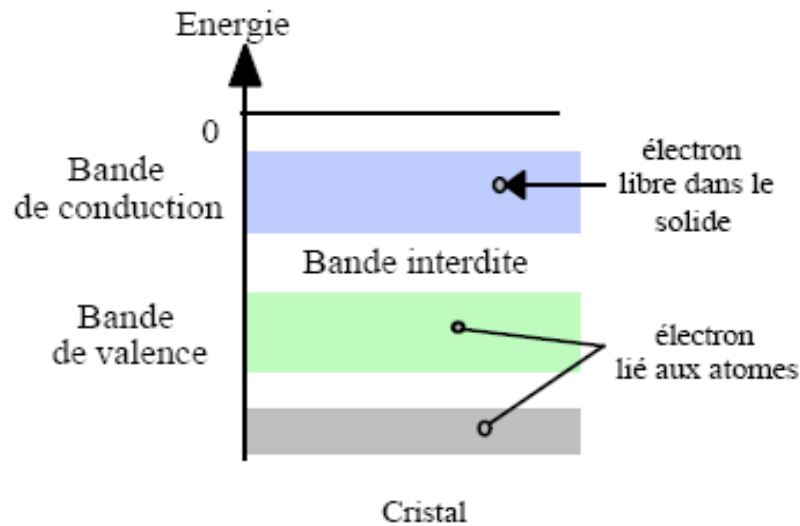


Figure 1.5: Structure de bande d'un semi-conducteur

Au voisinage des limites E_c et E_v , respectivement de la bande de conduction et de la bande de valence, la densité d'états permis $N(E)$ peut être estimée avec l'approximation parabolique suivante [2]:

$$N_V = K_V(E - E_V)^{1/2} \quad N_C = K_C(E - E_C)^{1/2} \quad (1.2)$$

Où K_c et K_v étant des constantes pratiquement indépendantes de la température.

Les matériaux semi-conducteurs à bande interdite de l'ordre de 1 eV, peuvent être caractérisés par deux familles. Les matériaux à gap direct, comme la plupart des composés issus des colonnes III et V du tableau périodique des éléments chimiques et les matériaux à gap indirect comme le silicium (colonne IV).

Les éléments de la colonne III et ceux de la colonne V permettent de faire des composés ternaires comme le $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ qui peut être considéré comme un alliage de GaAs et AlAs.

La variation de la concentration «x» change radicalement les propriétés du matériau, comme la valeur du gap, la masse effective et son paramètre de maille.

Tableau 1.1: Les principaux éléments des semi-conducteurs

II	III	IV	V
	Bore B (Z=5)	Carbone C (Z=6)	Azote N (Z=7)
	Aluminium Al (Z=13)	Silicium Si (Z=14)	Phosphore P (Z=15)
Zinc Zn (Z=30)	Gallium Ga (Z=31)	Germanium Ge (Z=32)	Arsenic As (Z=33)
Cadmium Cd (Z=48)	Indium In (Z=49)	Etain Sn (Z=50)	Antimoine Sb (Z=51)

La figure 1.6 représente les principaux matériaux disponibles pour la croissance en fonction de l'énergie de bande interdite et du paramètre de maille donnant une idée des combinaisons possibles.

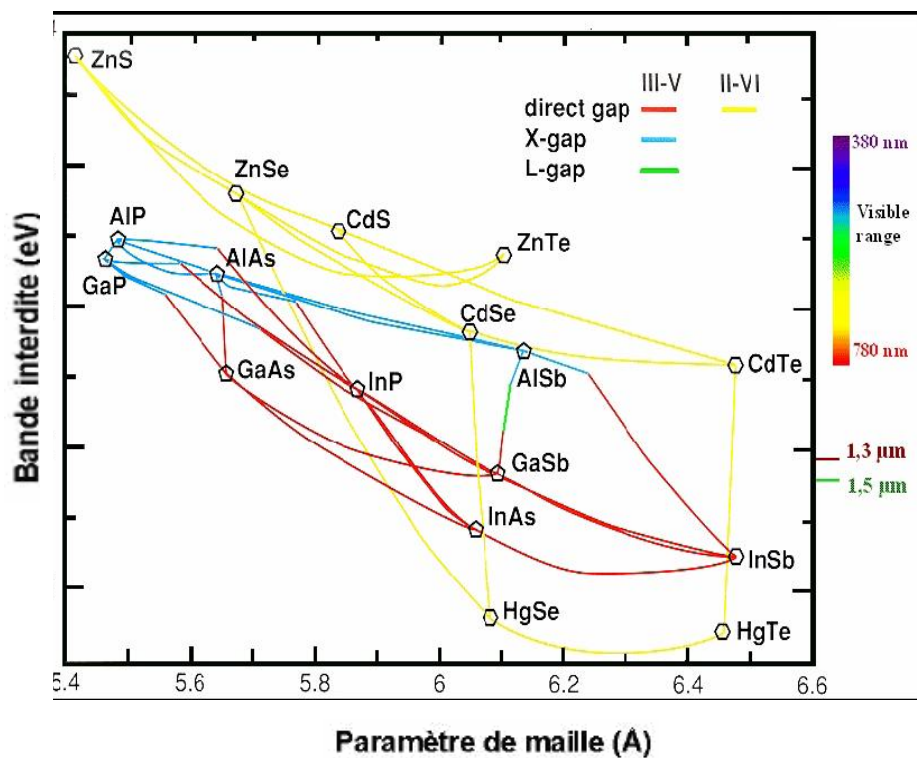


Figure 1.6: Relation entre matériaux, structure atomique, paramètres de maille et gap électronique.

Deux matériaux différents n'ont pas la même valeur de bande interdite. Par exemple le gap dans GaAs est 1,42 eV, alors que dans $\text{Al}_{0,4}\text{Ga}_{0,6}\text{As}$, il est de 2eV [3].

Les techniques de croissance, comme l'épitaxie par jets moléculaires (EJM) ont permis d'élaborer une grande variété de structures combinant des semi-conducteurs à gaps différents. Au sein de chaque filière (IV-IV, III-V) l'accord des paramètres de maille entre une couche épitaxiée et son substrat constitue une condition importante dans les choix des couples envisagés. En effet, lors d'une croissance épitaxiale, le matériau épitaxié doit avoir un paramètre de maille le plus voisin possible de celui du substrat. Il faut que les paramètres de maille et les structures cristallines soient relativement proches. Mais lorsque les couches sont "compatibles", on peut faire varier à volonté leur épaisseur. Un système très répandu est GaAs/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ pour lequel le désaccord de maille est faible.

Particulièrement, dans cette étude nous sommes intéressés aux alliages ternaires $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ sur substrat GaAs.

Tableau 1.2: Energie de la bande interdite et paramètre de maille de GaAs et AlAs.

	GaAs	AlAs
Paramètre de maille (Å)	5.65325	5.661
Energie de bande interdite (ev)	1.424	2.13
Masse effective de l'électron	0.067 m_0	0.092 m_0

1.1.4.1 Notion de gap direct et gap indirect

La notion de gap direct et indirect est liée à la représentation de la dispersion énergétique d'un semi-conducteur c.à.d Diagramme E (Énergie) - \vec{k} (Vecteur d'onde). Ce diagramme permet de définir spatialement les extremas des bandes de conduction et de valence. Ces extremas représentent, dans un semi-conducteur à l'équilibre, des domaines énergétiques où la densité de porteurs type p pour la bande de valence et type n pour la bande de conduction sont importantes [4].

a) Semi-conducteur à gap direct

Le maximum de la bande de valence et le minimum de la bande de conduction se situent à valeur voisine du vecteur d'onde \vec{k} sur le diagramme $E(\vec{k})$.

b) Semi-conducteur à gap indirect

Le maximum de bande de valence et le minimum de la bande de conduction se situe à des valeurs distinctes du vecteur d'onde \vec{k} sur le diagramme $E(\vec{k})$.

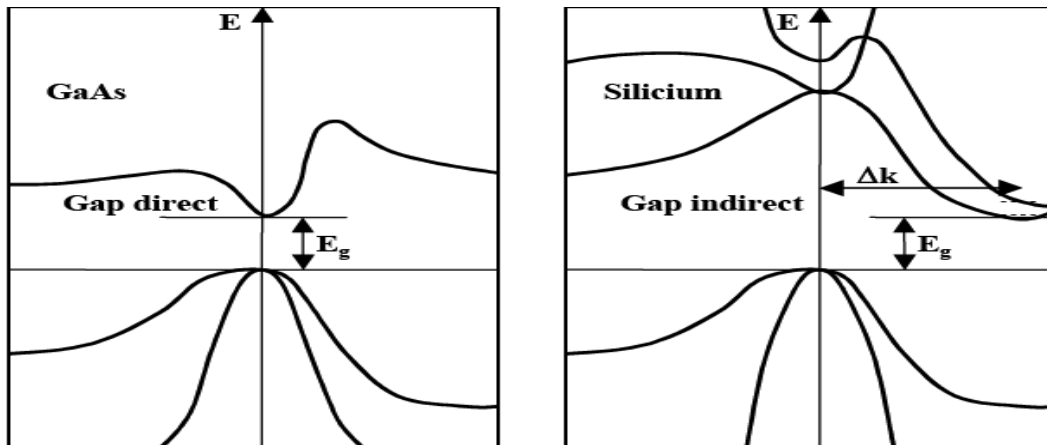


Figure 1.7: Représentation d'un gap direct (GaAs), gap indirect (Si).

1.1.5 Masse effective des porteurs de charge

La masse effective est une notion utilisée en physique du solide pour étudier le transport des électrons. On les décrit comme des électrons libres dont la masse effective varie. Cette masse effective peut-être positive ou négative, supérieure ou inférieure à la masse réelle de l'électron.

La masse effective est définie par le tenseur d'ordre 2 des dérivées secondes de l'énergie E par rapport au vecteur d'onde. Pour un électron libre, la masse effective est bien entendu constante et égale à la masse réelle de l'électron.

$$m^* = \frac{\hbar^2}{\partial^2 E / \partial k^2} \quad (1.3)$$

Les électrons ou les trous qui participent à la conduction doivent se déplacer dans le matériau. Intuitivement, le déplacement dans le matériau ne pourra se faire de la même façon que dans le vide en raison de l'interaction des porteurs avec les différents atomes constituant le réseau cristallin. Il apparaît aussi intuitif que suivant les directions de déplacement à l'intérieur du cristal les interactions seront

différentes (pas la même périodicité des atomes par exemple) et donc que le comportement électrique sera différent.

1.1.6 Les semi-conducteurs GaAs et AlGaAs.

1.1.6.1 Propriétés cristallines

L'arséniure de gallium possède une structure cristalline de type blende. Si l'on considère que les atomes de gallium suivent une structure de type cubique face centrée, les atomes d'arsenic occupent quant à eux 4 des 8 sites tétraédriques de cette maille (et vice-versa) (figure 1.8).

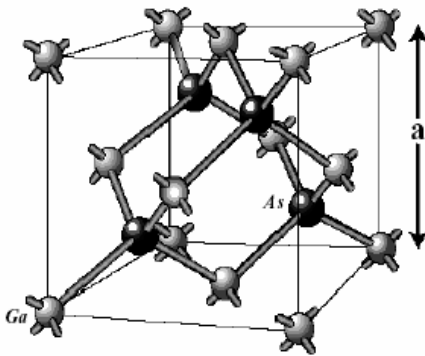


Figure 1.8: Structure du GaAs.

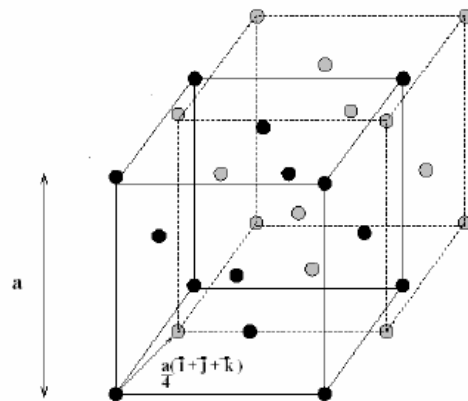


Figure 1.9: Structure d'AlGaAs.

La structure de l'alliage $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ est formée de deux réseaux cubiques à faces centrées (CFC) décalés l'un par rapport à l'autre d'un quart de diagonale du cube (figure 1.9), les atomes d'Arsenic occupant un des réseaux CFC les atomes d'Aluminium et de Gallium occupant l'autre réseau. Les points noirs représentent les atomes d'Arsenic, le réseau formé par les points gris est occupé par des atomes de Gallium et d'Aluminium. L'alliage ternaire AlGaAs est un mélange des deux composés binaires GaAs et AlAs avec une composition en Aluminium variant de 0 à 1. Le faible désaccord de maille que présentent les composés GaAs et AlAs permet d'obtenir un alliage de bonne qualité.

Le paramètre de maille de l'alliage $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ est obtenu par interpolation linéaire en utilisant les paramètres de maille de GaAs et de AlAs. Il est donné par la loi de Végard [5]:

$$a_{\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}} = xa_{\text{AlAs}} + (1-x)a_{\text{GaAs}} \quad (1.4)$$

$$a_{\text{AlAs}} = 5.6611 \text{ \AA} \quad \text{et} \quad a_{\text{GaAs}} = 5.6533 \text{ \AA}$$

1.1.6.2 Propriétés électroniques

La relation de dispersion $E(\vec{k})$, donnant l'énergie en fonction du vecteur d'onde, montre que contrairement au AlAs où la transition est indirecte, le GaAs est un semi-conducteur à transition directe, cela signifie que l'énergie minimale de la bande de conduction et l'énergie maximale de la bande de valence sont localisées au centre de la zone de Brillouin (figure 1.10).

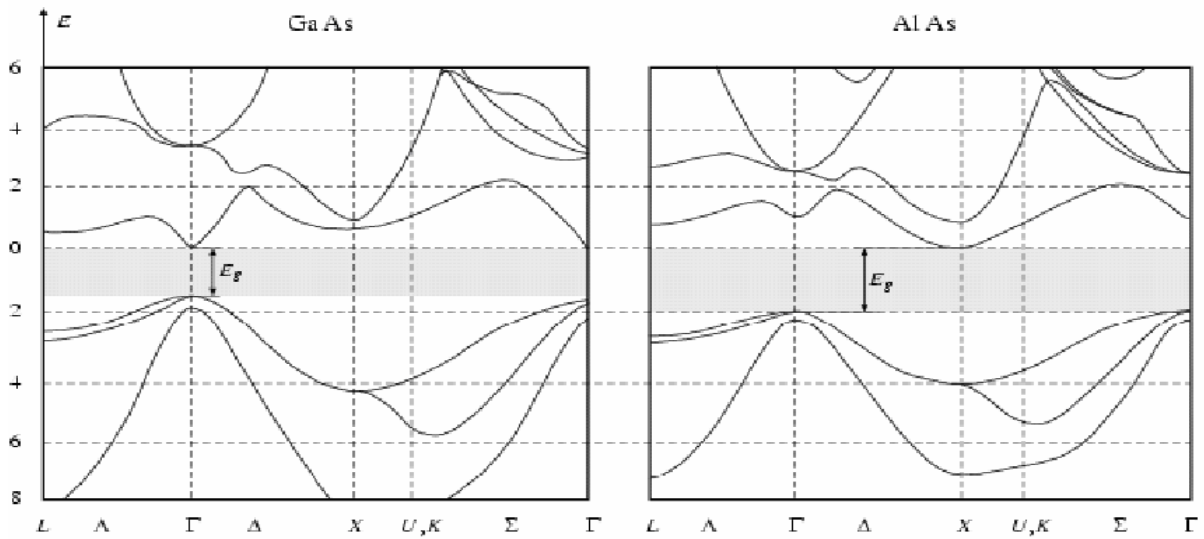


Figure 1.10: Structure de bandes du GaAs et AlAs au centre de la zone de Brillouin.

Une transition électronique entre ces deux bandes nécessite donc un changement de l'énergie, mais non un changement de vecteur d'onde [6]. Pour cette raison, le GaAs se prête à la fabrication de composants optiques tels que les diodes luminescentes ou des lasers. La réalisation de puits quantiques sur GaAs qui puissent émettre aux longueurs d'ondes des télécommunications optiques, c'est à dire $1,3\mu\text{m}$ et $1,55\mu\text{m}$ [7].

La bande de conduction présente par ailleurs une courbure généralement très accentuée au voisinage de son minimum. La masse effective des électrons étant inversement proportionnelle à cette courbure, ceci explique pourquoi, dans les semi-conducteurs III-V à bande interdite directe comme GaAs, InP, AlGaAs, GaInAs, etc., la masse effective des électrons est très faible et, par conséquent, la mobilité électronique est élevée. La résistivité du GaAs peut atteindre les $10^8 \Omega\text{cm}$ (résistivité du silicium $100\Omega\text{cm}$) il est presque isolant et peut par conséquent servir de substrat. Son utilisation réduit sensiblement les capacités parasites, très nuisibles à haute

fréquence. Le GaAs a toutefois le désavantage de ne pas posséder d'oxyde naturel, tel que le SiO₂ pour le silicium. Les propriétés du GaAs et Al_xGa_{1-x}As sont résumées dans le tableau 1.3.

Tableau 1.3: Le gap et la masse effective du GaAs et Al_xGa_{1-x}As à 300 °K

	m_e / m_0	Eg (eV)
GaAs	0.067	1.424 gap direct
Al_xGa_{1-x}As	0.067+0.083x	1.414+1.247x gap direct (0<x<0.45) 1.90+0.125x+0.143x ² gap indirect (0.45<x<1)

Pour l'alliage Al_xGa_{1-x}As, la nature de la transition énergétique change selon le taux d'aluminium x, où 0 < x < 1 [8-9].

- Pour x < 0,45 le matériau est dit à bande interdite directe et la probabilité de transition radiative est élevée.
- Pour x > 0,45 le matériau est à bande interdite indirecte et ne permet pas de faire des émetteurs électroluminescents efficaces.

Avec ces limitations, ces matériaux peuvent donc être obtenus avec des gaps directs compris entre 1,42 et 1,9 eV susceptibles d'émettre des photons de longueurs d'ondes comprises respectivement entre 870 et 650 nm.

1.2 Les superréseaux

Depuis les premiers travaux en 1970 de L. Esaki et R. Tsu [10] sur les couches minces semi-conductrices, grâce à l'évolution de la nanotechnologie, la recherche fondamentale et appliquée sur les hétérostructures semi-conductrices a bien avancé.

Les puits quantiques sont les premières structures réalisées. En 1978, pour la première fois la technique de dopage sélectif a été appliquée dans les hétérojonctions GaAs/Al_xGa_{1-x}As par Dingle et Störmer [11]. Les multipuits quantiques et l'hétérojonction à dopage modulé font l'objet de nombreuses études dans la physique mésoscopique.

1.2.1 Définition

Les superréseaux sont des empilements de couches ultrafines de semi-conducteurs alternées suivant l'axe de croissance, pouvant être aussi minces que quelques monocouches atomiques de compositions chimiques différentes. Ils peuvent être assimilés à un système périodique. La période du superréseau est égale à la somme de la largeur de puits et de l'épaisseur de la barrière [12].

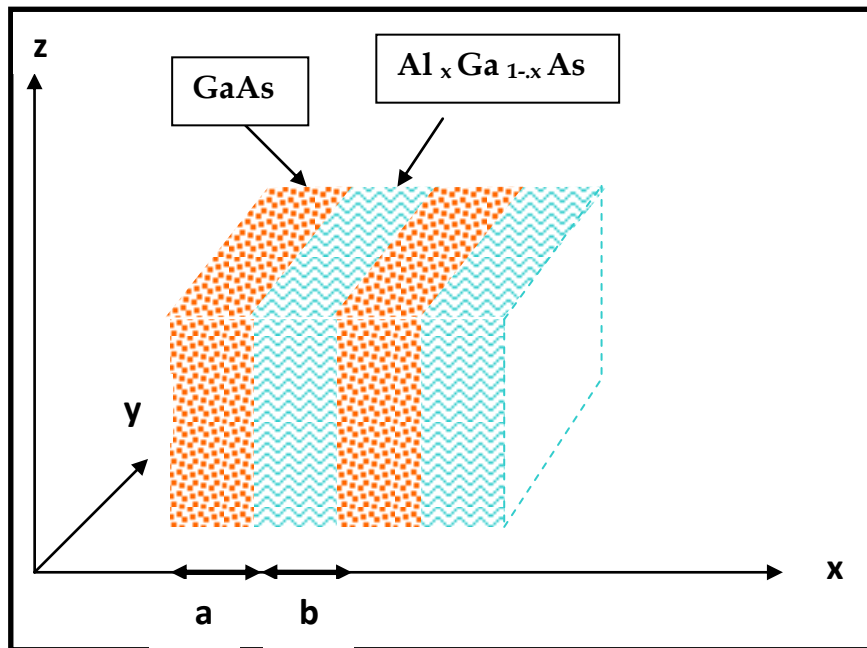


Figure 1.11 : Constitution d'un superréseau de période $a+b$, de GaAs / $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$

1.2.2 Technique de fabrication

La diversité des applications de superréseaux dans les systèmes optiques et électroniques tels que les diodes laser et les photo-détecteurs ont permis le développement de plusieurs techniques de fabrication de tels matériaux. On cite principalement la plus utilisée.

1.2.2.1 Epitaxie par jet moléculaire

Cette technique dite d'«épitaxie par jets moléculaires » en anglais «molecular beam epitaxy» M.B.E. L'épitaxie est une étape technologique consistant à faire croître du cristal sur du cristal [13]. Etymologiquement, "épi" signifie "sur" et "taxis",

"arrangement". La technique va donc consister à utiliser le substrat comme germe cristallin de croissance et à faire croître la couche par un apport d'éléments constituant la nouvelle couche. La couche épitaxiée peut être dopée ou non dopée (figure 1.12).

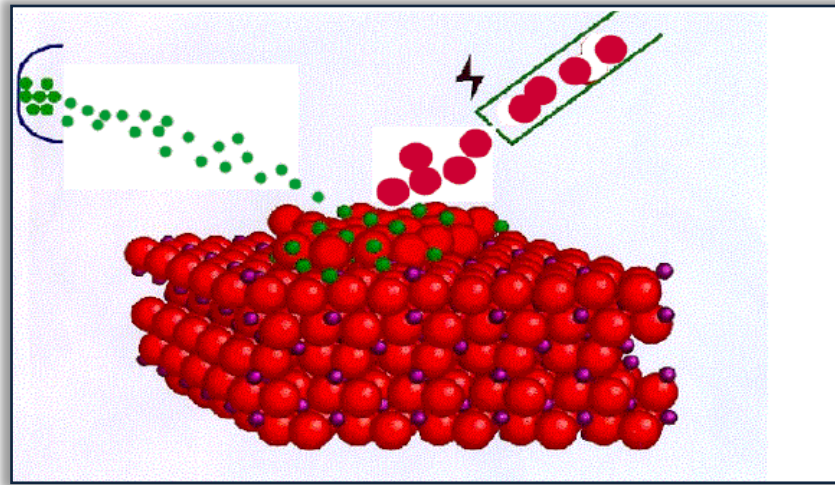


Figure 1.12: Principe d'épitaxie par jet moléculaire

Cette technique consiste à envoyer des molécules à la surface d'un substrat dans un vide très poussé afin d'éviter tout choc ou contamination sur le parcours. Par le contrôle des cellules d'évaporation, on crée un jet de molécules en direction du substrat. On obtient ainsi une très grande précision de croissance, mais cette opération est très lente et ne concerne qu'un seul substrat à la fois. La vitesse de croissance est de l'ordre de 1 nm par minute. Cette technique est donc très coûteuse et ne concerne que des dispositifs à très forte valeur ajoutée. Ce système ultravide, 10^{-10} Torr, permet ainsi, en permanence, de vérifier la cristallinité du cristal en cours de croissance (figure 1.13).

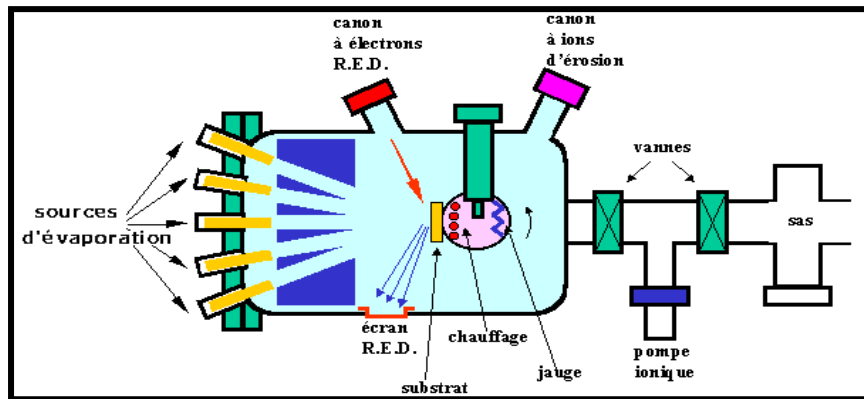


Figure 1.13: Bâti d'épitaxie par jet moléculaire, EJM.

L'EJM contrôle rigoureusement la composition chimique des interfaces et le profil de dopage des structures cristallines. Les multicouches peuvent être réalisées avec les épaisseurs de l'ordre de la monocouche atomique (2.8 \AA à 2.9 \AA) avec des vitesses de croissance extrêmement faibles (inférieur à $100 \text{ \AA}/\text{min}$) et des températures de croissance allant de 400°C Jusqu'à 1000°C [14].

1.2.3 Types de superréseau

1.2.3.1 Superréseau à puits et à barrières rectangulaires

Cette structure constitue la superposition de deux matériaux possédant des mailles presque idéales et de structures de bandes différentes telles que $\text{GaAs}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$. Ce type de superréseau constitue un élément de base dans la fabrication des diodes laser [15] et photodétecteurs [16].

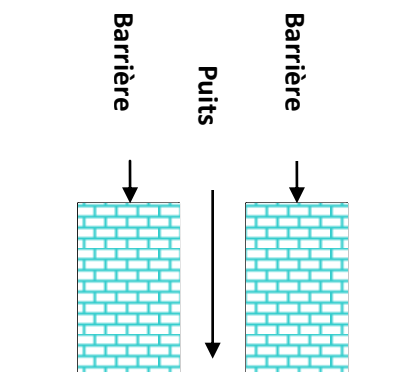


Figure 1.14: SR à puits et à barrières rectangulaires.

1.2.3.2 Superréseau à puits quantiques paraboliques

Ce type de superréseau est constitué d'un empilement de puits et de barrières rectangulaires très minces. La fabrication d'un tel réseau prend en charge l'alternance entre la hauteur de la barrière et la composition du matériau [17-18]. Le transistor présenté par Capasso et al [19] est basé sur ce type de SR.

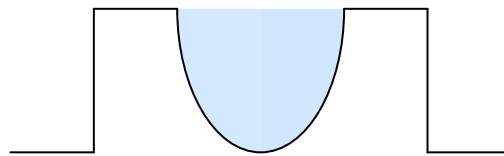


Figure 1.15: Schéma d'une structure double barrière à puits parabolique.

1.2.3.3 Superréseau à dents de scie

Cette structure est caractérisée par une variation linéaire du gap d'une valeur maximale (grand gap) à une valeur minimale (petit gap) [20], elle est obtenue à partir d'une variation de la composition du matériau utilisé. Ces systèmes présentent des propriétés physiques très intéressantes, ils entrent dans la réalisation des rectificateurs [21] et photomultiplicateurs [22].

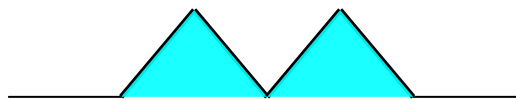


Figure 1.16: Schéma d'une structure double barrière dent de scie.

1.2.3.4 Superréseau poly- types

Ce profil consiste à introduire en contact un troisième constituant C dans la structure [23] et à partir du triplet (A, B et C), plusieurs formes de potentiel sont obtenues. Elles sont dues à la différence existante entre leurs bandes de conduction, comme la structure AlSb/GaSb/InAs. Ce type de superréseau trouve son application dans les dispositifs à haute fréquence [24-26].

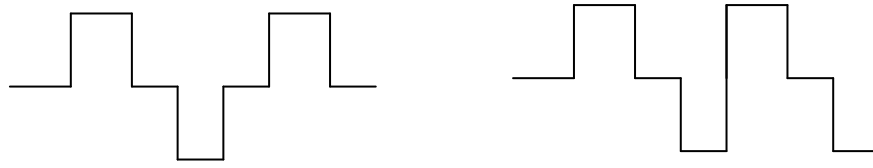


Figure 1.17: Schéma d'une structure de SR polytypes

1.2.3.5 Superréseau à modulation de dopage

Ce type de superréseau est constitué d'un empilement périodique de couches alternées obtenues à partir d'un même matériau dopées différemment en n et p. Ces types de SR, proposés par Esaki et al [27], puis sont réalisés par Ploog et al [28].

1.2.4 Classes de superréseau

Selon la nature de la discontinuité de bandes interdites à l'interface puits-barrière, les superréseaux peuvent être classés en deux types [29]:

1.2.4.1 Superréseau de type I

Les superréseaux de type I où électrons et trous sont confinés dans le même matériau constituant le puits ex. AlGaSb/GaAs et GaSb/AlSb.

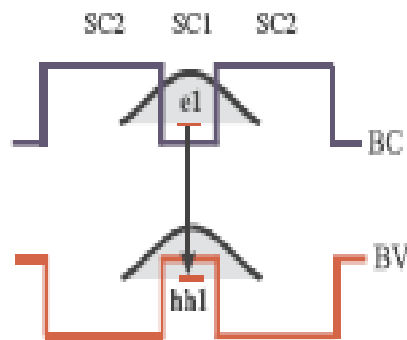


Figure 1.18: Superréseau de type I

1.2.4.2 Superréseau de type II

Les superréseaux de type II où les porteurs sont confinés dans deux matériaux adjacents, au moins un des semi-conducteurs constituant le super-réseau possède un gap indirect, tels que GaSb/InAs et InP/Al_{0.48}In_{0.52}As [30].

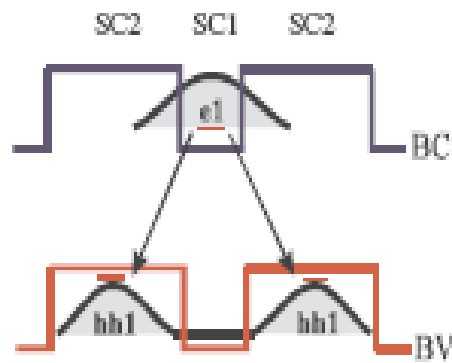


Figure 1.19: Superréseau de type II

1.2.5 Propriétés des superréseaux

1.2.5.1 Propriétés de transport

Les superréseaux présentent des propriétés qui ont fait l'intérêt de plusieurs applications dans le domaine optoélectronique. Parmi ces propriétés on cite:

1. La diversité existante dans le désalignement des bords de bandes de conduction et de valence (band offset). Cette diversité est une conséquence des différentes valeurs du gap des matériaux constituant le superréseau.
2. La masse effective varie en fonction de la direction de croissance du SR.
3. L'existence d'une structure de minibandes, induite par la périodicité du potentiel des superréseaux, à l'intérieur des bandes principales.
4. L'apparition d'un phénomène intéressant appelé effet tunnel résonant (ETR).

- **Effet tunnel**

La physique quantique prédit des comportements inhabituels et difficiles à accepter par notre intuition immédiate, comme l'effet tunnel. Découvert dès 1926 par R. Oppenheimer, l'effet tunnel n'apparut dans la littérature qu'en 1928.

Ce phénomène a fait l'objet d'une multitude de recherches depuis sa prédiction. Malgré cela, il reste un phénomène complexe, tant pour son interprétation théorique que pour l'analyse des données expérimentales qui en résultent.

En physique classique, si l'énergie communiquée à une particule est insuffisante, elle ne peut pas franchir la barrière de potentiel dont la hauteur v_0 est supérieure à son énergie et retombe vers son point de départ. En physique quantique

on décrit la particule par une énergie E dont la fonction d'onde est ψ . La particule peut franchir la barrière, même si son énergie initiale E est inférieure à v_0 : elle peut passer de l'autre côté comme par un petit tunnel [31]. Donc la probabilité de retrouver la particule de l'autre côté n'est pas nulle.

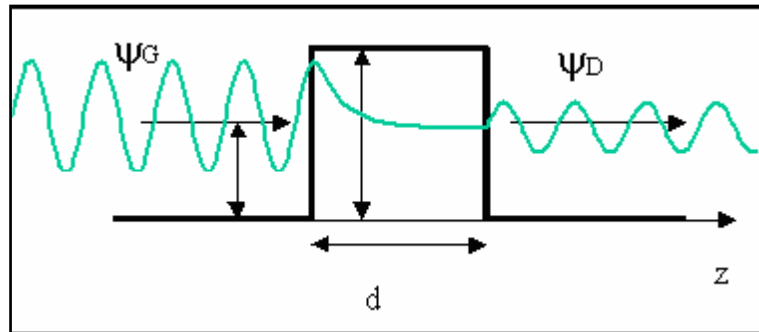


Figure 1.20: Barrière de potentiel dans un modèle unidimensionnel.

- **Structure de minibande**

Les minibandes sont des intervalles continus d'énergies, causés par l'effet tunnel qui transforme les niveaux d'énergie discrets qu'occupent les électrons de la bande de conduction (ou les trous de la bande de valence) [32].

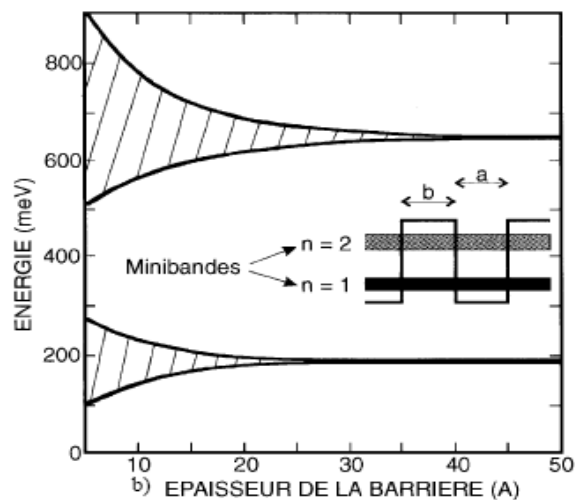


Figure 1.21: Schéma de structure des minibandes d'un superréseau.

Ces minibandes sont à peu près centrées sur les niveaux discrets d'énergies qui existeraient. La largeur de la minibande de transmission qui dépend principalement de la somme des épaisseurs des puits et des barrières (la

superpériode). Cette largeur mesure le couplage entre puits, qui est la plus importante caractéristique d'un superréseau.

Un exemple du GaAs / AlAs est donné:

Si le couplage est fort, $\Delta E = 5 \text{ meV}$ [33]

Si le couplage est faible, $\Delta E = 0.4 \text{ meV}$ [34]

La structure de bande complète du superréseau peut comporter d'autres minibandes, à des énergies plus élevées, mais qui n'ont pas d'intérêt pratique car elles contribuent au spectre d'absorption dans un domaine spectral où le superréseau est déjà assez fortement absorbant, il est donc entendu que les caractéristiques données ici se réfèrent aux minibandes fondamentales de conduction et de valence.

- **Coefficient de transmission**

Le coefficient de transmission est donné par le module du rapport du courant de probabilité de l'onde transmise sur le courant de probabilité de l'onde incidente [35-36]:

$$T = \left| \frac{j_t}{j_i} \right| \quad (1.5)$$

Où avec les amplitudes des ondes incidentes et transmises :

$$\tau = |t|^2 = \frac{K_t}{K_i} \left| \frac{A_t}{A_i} \right|^2 \quad (1.6)$$

Où k_t et k_i sont respectivement les vecteurs d'onde de l'électron dans la zone transmises et incidente. Ce rapport définit la probabilité d'un l'électron de traverser la barrière.

1.2.5.2 Propriétés optiques (L'effet laser)

Le laser à superréseaux fut découvert dans les années 70, il repose sur un empilement de couches semi-conductrices dont l'indice de réfraction n et la largeur de bande interdite E_g sont ajustés. De cette façon, la zone active constitue un puits de potentiel pour les porteurs (E_g barrières $>$ E_g zone active), tandis que les couches barrières adjacentes forment un guide d'onde optique (n barrières $<$ n zones actives). Une concentration simultanée des porteurs et de la lumière dans la zone active centrale est ainsi obtenue [37]. La figure 1.22 montre la structure de bande d'un laser

à superréseau en GaAs/AlGaAs/GaAs. Les électrons, injectés depuis la couche n-AlGaAs vers la zone p-GaAs, rencontrent une barrière de potentiel, au moment où ils voudraient pénétrer dans la couche p-AlGaAs. En revanche, les trous provenant du p-AlGaAs sont bloqués par la barrière de potentiel due à la différence de bande interdite entre le n-AlGaAs et le p-GaAs.

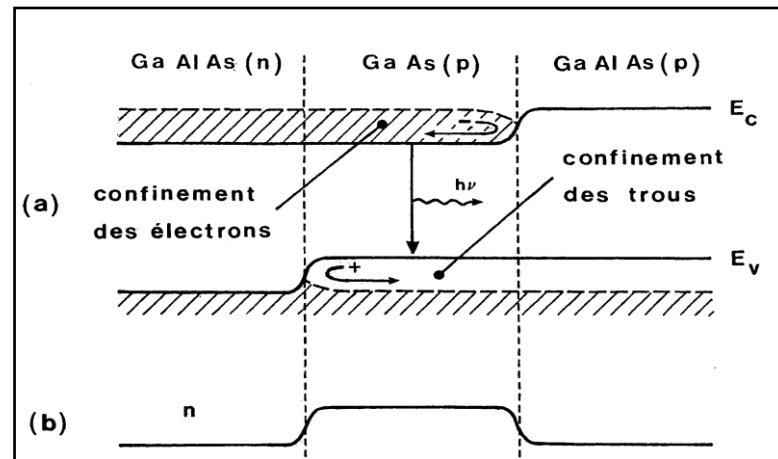


Figure 1.22: Diagramme énergétique d'un laser à SR.

Les électrons et trous injectés sont confinés dans la zone active du laser de p-GaAs. Les deux couches d'AlGaAs de part et d'autre de la zone active s'appellent les couches de confinement.

1.2.5.2.1 La diode laser

Une diode laser est un composant opto-électronique à base de matériaux semi-conducteurs. Elle est utilisée pour réaliser l'effet laser, conçue pour la première fois en 1962 [38-39], et devenue un dispositif très important avec des différents types en 1994 [40-41].

La figure 1.23 représente la structure d'une diode laser à base GaAs. Les dimensions de la couche active de type p sont de 200 μm de longueur, 2 à 10 μm de largeur et 0.1 μm d'épaisseur, est prise en sandwich entre deux couches de $\text{Ga}_{0,7}\text{Al}_{0,3}\text{As}$, dopées respectivement n et p. Ce sandwich confine dans la région active, à la fois les électrons et les photons.

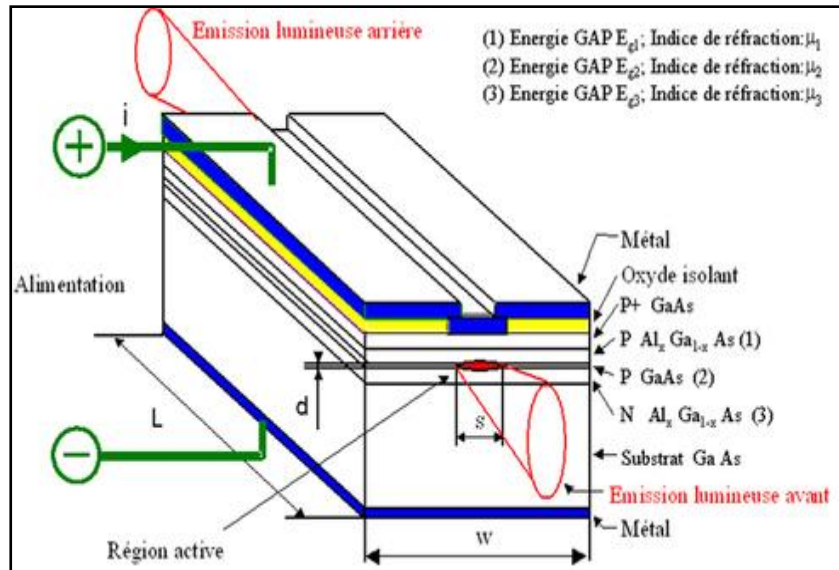


Figure 1.23: Structure d'une diode Laser au GaAs.

Les photons sont confinés dans la couche active de GaAs (p) par la différence d'indice qui existe entre GaAs et AlGaAs. Les réflexions totales à l'interface des deux matériaux évitent l'étalement des photons dans le GaAlAs. Les électrons sont confinés dans la couche active en raison de la différence de gap qui existe entre $\text{Ga}_{0,7}\text{Al}_{0,3}\text{As}$ ($E_g \approx 1,9 \text{ eV}$) et GaAs ($E_g \approx 1,4 \text{ eV}$). Les deux couches de GaAlAs constituent des barrières de potentiel qui empêchent les électrons et les trous de diffuser au-delà du GaAs.

1.2.5.2.2 Principe de fonctionnement d'une diode laser

Les lasers à semi-conducteurs sont des diodes qui émettent une lumière cohérente par émission stimulée (figure 1.24). Ils consistent dans une jonction p-n, composée des éléments III-V semi-conducteurs de type GaAs dont les dimensions sont inférieures, en général, à 1mm.

- **Absorption**

L'électron initialement sur le niveau inférieur E_1 passe sur le niveau supérieur E_2 après avoir absorbé un photon d'énergie:

$$h\nu = E_2 - E_1 \quad (1.7)$$

- **Emission**

Lorsqu'un un électron est présent sur le niveau E_2 il peut redescendre sur le niveau fondamental E_1 en émettant un photon de deux façons distinctes:

1) Emission spontanée:

La transition électronique est aléatoire et se produit en moyenne après un temps τ_{21} appelé durée de vie d'émission spontanée.

2) Emission stimulée:

L'émission stimulée (ou émission induite) d'un photon est prévue par Albert Einstein en 1917. Il a démontré qu'une particule (atome, ion ou molécule) excitée émet un photon grâce à la stimulation que provoque l'arrivée d'un photon de même énergie que celui qu'il pourrait potentiellement émettre. L'un de ces photons peut induire un électron se trouvant dans le niveau supérieur E_2 à redescendre vers l'état E_1 . La particularité de ce type d'émission est que le photon stimulé prend strictement les mêmes caractéristiques (couleur, direction de la trajectoire et phase) que le photon incident, comme si le second était la photocopie du premier.

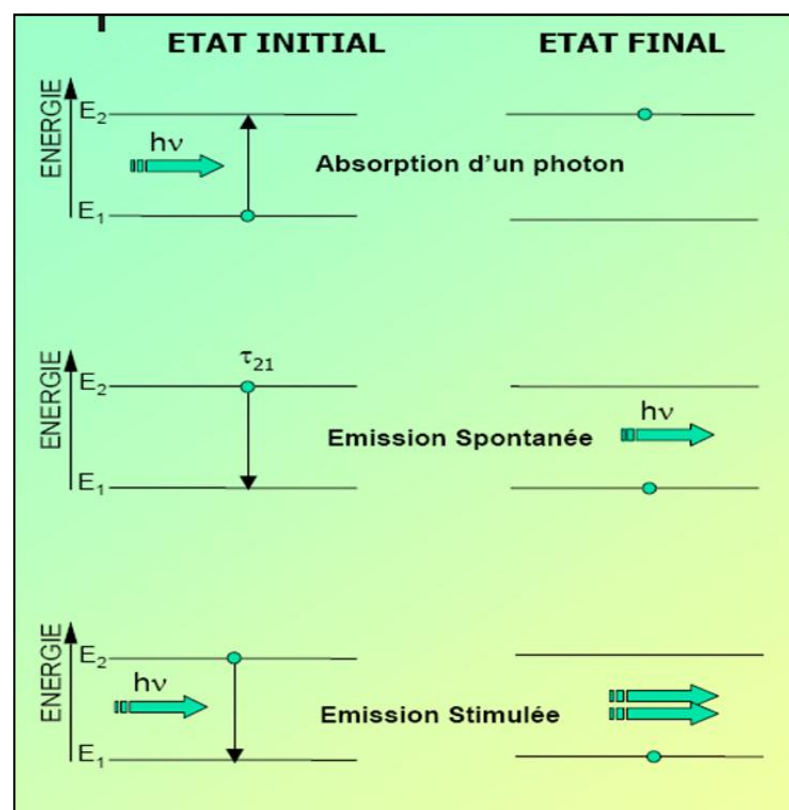


Figure 1.24: Principe de l'effet laser.

1.2.5.2.3 Applications des lasers à superréseaux

Les lasers à superréseaux avec leur lumière magique ont trouvé de multiples applications dans notre vie quotidienne. Ces diodes laser sont largement utilisés dans les télécommunications car ils sont facilement modulés et deviennent des sources lumineuses couplées pour des fibres optiques de communication. Des diodes laser infrarouge et rouge sont courantes dans les lecteurs de CD, DVD, HD-DVD et disques Blu-ray [42]. Un autre usage est en lecteur de code-barres. Ils sont utilisés pour produire des impulsions de la lumière qui se déplace par laser pour relier les réseaux d'ordinateurs ensemble. Les imprimantes laser utilisent des diodes laser pour créer les charges statiques qui attirent les particules de toner à imprimer leurs tambours. Les pointeurs laser sont utilisés dans des dispositifs qui mesurent les distances et le contrôle des niveaux dans le domaine militaire. Les plus puissantes diodes laser sont utilisées en chirurgie précisément pour brûler les tissus, et dans le traitement des matériaux (Soudure, Perçage, Découpage, Gravure) [43].

Références

- [1] S.M.SZE, *Physics of Semiconductor Devices*, John Wiley & Son (1981).
- [2] H.Mathieu, *Physique des semi-conducteurs et composants électroniques*, edt Masson(1996).
- [3] S.M.SZE, *Physics of Semiconductor Devices*, John Wiley & Sons, (1981).
- [4] O.Bonnaud, *physique des solides, des semiconducteurs et dispositifs*(2003).
- [5] S.Tiwari, D.J.Frank, *Appl.phys.Lett*, **60**(5), (1992).
- [6] *Semiconductor parameters. Volume II Ternary and quaternary III-V compounds.* Edit. M Levinshtein, M Shur (1998).
- [7] Vurgaftman (I.), Felix (C.L.), Bewley (W.W.), Stokes (D.W.), Bartolo (R.E.), Meyer (J.R.), « Mid-infrared W lasers », *Phil. Trans. Roy. Soc. Lond. A* **359**, p. 489, 2001.
- [8] S.Adachi, *J.Appl.phys* **58**(3),(1985).
- [9] Thèse Rachid KHLIL, Université de Reims Champagne-Ardenne, P45-47, (2005).
- [10] H.Mathieu, *Physique des semiconducteurs et des composants électroniques*, edt Masson (1987).
- [11] D.P. Nguyen, *Confinements non usuels dans les boites quantiques semi-conductrices*.Thèse de doctorat. Année 2005.
- [12] L. Esaki, R. Tsu, *IBM J. Res. Dev.* **14** (1970) 61.
- [13] F.Rinaldi, *Annual Report, Optoelectronics Department, University of Ulm* (2002).
- [14] D.V.Morgan and K.Boar, "An introduction to semiconductor technology", 2nd edition, John Wiley & sons, (1990).
- [15] R.Q.Yang and J.M.Xu, *App.Phys.Lett.* **59**, 181 (1991).
- [16] A. Fiore, E. Rosencher, P. Bois, J. Nagle and N. Laurent *App.Phys.Lett.* **64**, 478 (1994).
- [17] R. C. Miller, A. C. Grossard, D. A. Kleiman, and O. Munteana, *Phys. Rev. B* **29**, 3740 (1984).
- [18] S. Sen, F. Capasso, A. C. Grossard, R. A. Spah, A. L. Hutchinson, and S. N. G. Chu, *App. Phys. Lett.* **51**, 1428 (1987).
- [19] F. Capasso and A. Kiehl, *J. App. Phys.* **58**, 1366 (1985)
- [20] J.A.Brum, P.Voisin and G.Bastard, *Phys.Rev.B* **33**, 1063 (1986).
- [21] C.L.Allyn, A.C.Gossard and W.Wiegmann, *App.Phys.Lett.* **36**, 373(1980).

- [22] F.Capasso, W.T.Sang, and G.F.Williams, *IEEE, Trans.Electron. Devices* **30**, 381 (1983).
- [23] N. Navel and B. Laikhtman, *Phys. Rev. B* **49**, 16 829 (1994).
- [24] H. Toyoshima, Y. Ando, A. Okamoto, and T. Itoh, *Jpn. J. App. Phys.* **25**, L786 (1986).
- [25] T. P. E. Broekaert, W. Lee, and C. G. Fonstad, *App. Phys. Lett.* **53**, 1545 (1988).
- [26] A. K. Sasaki, *Phys. Rev. B* **30**, 7016 (1984).
- [27] L. Esaki and R. Tsu, *IBM J. Res. Note, Rc*, 2418 (1969). H. C. Casey Jr. And M. B Panis «Heterostructure Laser » (Bell Laboratories, Murray Hill, New Jersey) Part A, B (Academic, Press) (1978).
- [28] K. Ploog, A. Fisher, and H. Kunzel, *J. Electrochem. Soc.* **1281**, 400 (1981).
- [29] D. L. Smith and C. Mailhiot, *Rev. Mod. Phys.* **62**, 173 (1990).
- [30] G. Bastard, « Wave Mechanics Applied to Semiconductor Heterostructures », Edition de Physique (1989).
- [31] G.Binning, H.Rohrer, C.Gerber, et al., *Physical ReviewLetters* **49**, 57 (1982).
- [32] H. T. Grahn, H. Shneider, and K. V. Klitzing, *Phys. Rev. B* **41**, 2890 (1990).
- [33] L. Esaki and L. L. Chang, *Phys. Rev. Lett.* **33**, 493 (1974).
- [34] K. K. Choi and B. F. Levine, *Phys. Rev. B* **35**, 4172 (1987).
- [35] C.C.Tannoudji,B.Diu,and F.Laloe.« Mécanique quantique» volume I, P32-40, Hermann, Paris, (1996)
- [36] E.Merzbacher. « Quantum Mechanics », Joh, Wiley et Sons, 3rd édition, P 92-112 (1998).
- [37] Christelle Monat, Thèse, Ecole centrale de Lyon (2003).
- [38] Dupuis R.D, *IEEE J.Quantum Electron.*, QE-**23**, 651-657, (1987).
- [39] Redike R.H., *IEEE J.Quantum Electron.*, QE-**23**,692-695,(1987).
- [40] Anderson S.G., *Laser Focus World*, **30**, 62-76, (1994).
- [41] N.L.Thomas, R.Houdré, M.V.Kotlyar, D.O'Brien, and T.F.Krauss *J.Opt.Soc.Am.B* **24**, No.12 (2007).
- [42] Robert V. Steele, « Diode-laser market grows at a slower rate », dans *Laser Focus World*, vol. 41, n° 2, 2005.
- [43] Kathy Kincade, Stephen Anderson, « Laser Marketplace 2005: Consumer applications boost laser sales 10% », dans *Laser Focus World*, vol. 41, n° 1, 2005.

Chapitre 2
Systeme unidimensionnel
désordonné

2.1 Systèmes désordonnés et le problème de localisation

2.1.1 Définition

Les systèmes désordonnés sont des systèmes à différentes variables qui évoluent avec des échelles de temps différentes. Un exemple est celui des électrons qui se déplacent dans un milieu avec des impuretés à des positions aléatoires dans le matériau. Cela a l'air d'être un problème académique mais en fait, c'est le problème de la conduction de l'électricité, de la loi d'Ohm. On sait quand on fait passer du courant à l'intérieur d'un conducteur, qu'il y a une certaine résistance, mais si on essaye de comprendre cette résistance à partir des interactions microscopiques entre les atomes, c'est une affaire beaucoup plus compliquée qui demande des outils théoriques beaucoup plus approfondis [1].

2.1.2 Localisation d'Anderson

En 1958, Anderson [2] ouvrit tout un champ de recherche en montrant que les ondes associées à des électrons soumis à un potentiel aléatoire décrivant leur interaction avec un milieu désordonné, ne se propageaient plus d'une région quelconque de l'espace à une autre, mais sous certaines conditions, elles demeuraient localisées dans une région finie de l'espace [3].

Les ondes électroniques dans un milieu fortement désordonné ne peuvent pas se propager du fait des interférences destructives : c'est la "localisation d'Anderson". Le blocage des électrons dans le matériau, empêchant ainsi le courant de circuler.

Cette idée de la localisation a eu des répercussions dans des domaines variés comme pour le transport radiatif, la sismologie, la physique atomique qui en sont quelques exemples. Cette approche a initié une nouvelle physique mésoscopique, qui a permis la découverte de phénomènes nouveaux tels que la rétrodiffusion cohérente, la localisation faible, les fluctuations universelles de conductance, etc. Cela a ouvert aussi les portes d'une physique des ondes en milieu désordonné très riche [4] avec des applications concrètes actuelles dans de nombreux domaines concernant entre autres les télécommunications, l'acoustique sous-marine, les atomes froids ou encore l'imagerie médicale [5].

2.1.3 Etats électroniques dans un système ordonné et désordonné

2.1.3.1 Système ordonné

Dans un cristal périodique parfait, les états sont ceux de Bloch donnés par la relation:

$$\Phi(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\vec{r}} u(\vec{r}) \quad (2.1)$$

Où $u(\vec{r})$ est une fonction vérifiant la périodicité du réseau, $u(\vec{r} + \vec{T}) = u(\vec{r})$ où T est le vecteur de translation du réseau cristallin.

Les états de Bloch sont dits des états étendus (figure 2.1), car la probabilité de trouver un électron de Bloch dans un site i du réseau est identique à celle dans n'importe quelle autre position équivalente dans un site j .

2.1.3.2 Système désordonné

Si le désordre est plus important, la propagation de la fonction d'onde associée à l'électron forme un réseau d'interférence particulièrement complexe. Des interférences constructives peuvent alors piéger l'électron. Il peut ainsi exister des états électroniques localisés, malgré le fait que l'électron ne soit pas enfermé dans un puits de potentiel. On parle dans ce cas de localisation forte.

Remarque:

Dans un système faiblement désordonné, les fonctions d'onde sont considérées comme étant plus ou moins aléatoires, tout en demeurant étendues à longue portée mais non périodiques.

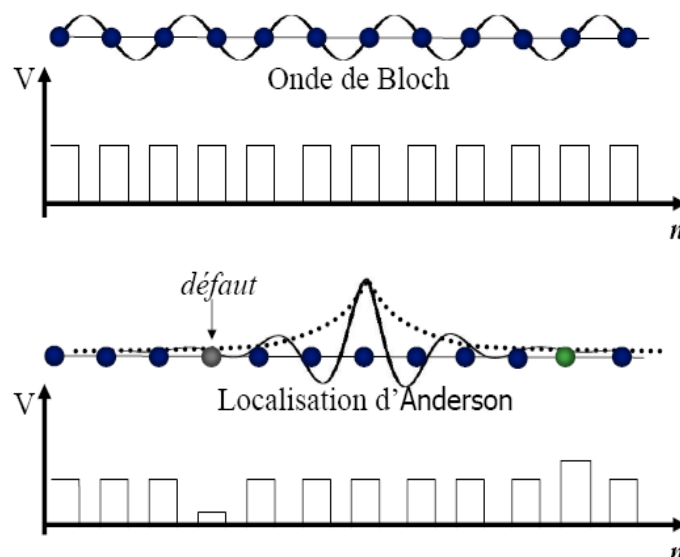


Figure 2.1: Comparaison entre état étendu de Bloch et état localisée d'Anderson.

2.2 Types de désordre

Dans les matériaux, Il existe deux types de désordre :

2.2.1 Désordre structural

Il est dû à des dopants, des impuretés et des défauts chimiques intrinsèques au niveau de la structure d'un matériau.

2.2.2 Désordre spatial

Il vient du positionnement aléatoire des atomes hors des sites cristallins (verre, polymères et matériaux amorphes).

2.3 Transport électronique dans les systèmes désordonnés

Pour les électrons dans un métal, Anderson et Mott se sont basés sur le phénomène de la localisation pour expliquer la transition métal-isolant dans les métaux désordonnés tridimensionnels [6].

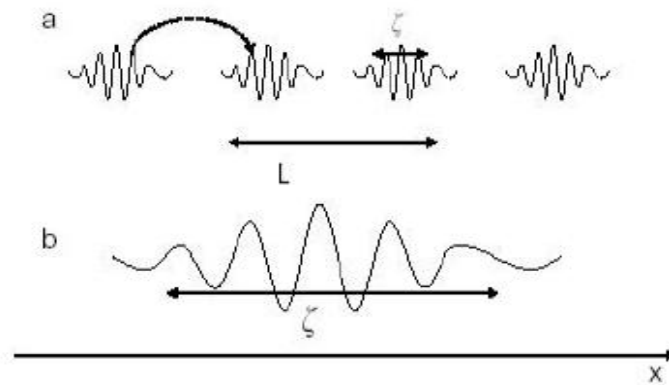


Figure 2.2: (a) Localisation forte, lorsque la longueur de la localisation ξ est plus petite que la taille de l'échantillon L . La conduction se fait par sauts entre différents états localisés. (b) Régime délocalisé.

En comparant la taille de l'échantillon L à la longueur de localisation ξ on peut différencier deux régimes dépendant du niveau de désordre (figure 2.2) :

- Pour un faible désordre (délocalisation $\xi > L$), la théorie de Drude Boltzman s'applique.
- Pour un fort désordre (localisation $\xi < L$), le système est qualifié d'isolant (théorie d'Anderson). La conductance décroît de façon exponentielle avec L .

La taille de référence étant la longueur de localisation (ξ). La conductance s'écrit :

$$g(L) = \alpha e^{-\frac{L}{\xi}} \quad (2.2)$$

Pour traverser l'échantillon, les électrons doivent "sauter" d'état localisé en état localisé. La conductance du système est reliée à la probabilité de ces sauts.

2.3.1 Critères de la localisation

Le travail remarquable de P. Anderson en 1958 [2], montre que la fonction d'onde d'un électron dans un réseau unidimensionnel non périodique ne peut pas être du type fonction de Bloch. Elle reste donc limitée dans l'espace (localisation d'Anderson).

Mott et al en 1968 [7], dans une étude sur la localisation dans les semi-conducteurs amorphes, ont proposé le concept de front de mobilité, une énergie séparant les états électroniques localisés des états étendus, ainsi à la température nulle, la conductivité s'annule à partir d'un certain degré de désordre rendant le système isolant.

En 1970 Landauer [8] avança l'idée que le transport dans les solides, à très basse température, où les événements inélastiques sont très rares, peut être conçu comme un problème de diffusion élastique des électrons de conduction. Cette idée lui a permis alors d'exprimer la conductance G , d'un fil unidimensionnel en fonction des coefficients de transmission T , et de réflexion R .

$$G = \frac{2e^2}{h} \frac{T}{R} \quad (2.3)$$

En 1970 Thouless et al [9] ont montré en effet que pour les systèmes unidimensionnels, il existe un paramètre unique qui contrôle le comportement du système quand il change de taille, c'est sa conductance G .

Deux limites sont exposées :

- La conductance est grande, la théorie de Drude (Equation) s'applique:

$$G(L) = \frac{n_s e^2 \tau}{m^* L^{d-2}} \quad (2.4)$$

Où n_s est la densité de porteurs, τ le temps de relaxation, m^* la masse d'électron, d la dimensionnalité et L la taille du système.

- La conductance est faible, on s'attend à se trouver dans le régime fortement localisé

$$g(L) = e^{\frac{L}{\xi}} \quad (2.5)$$

Dans ces deux limites la conductance du système apparaît clairement liée à sa taille.

2.3.2 Théorie d'échelle

Le comportement de la conductivité d'un système dépend du niveau de désordre et de sa taille. C'est le but de la théorie d'échelle qui essaye de comprendre la localisation en tenant compte des considérations faites.

En 1979, Abrahams et al introduisent une théorie d'échelle de la localisation [10] qui fournit une vision de l'effet du désordre selon la dimensionnalité d de l'espace considéré. Dans cette théorie on s'intéresse au coefficient β :

$$\beta = L \frac{d \ln g}{dL} \quad (2.6)$$

Où g est la conductance G en unités de e^2/h . Il est possible de déterminer β dans deux cas limites : $g \gg 1$ et $g \ll 1$.

Dans le cas $g \gg 1$, le désordre est faible et la loi d'Ohm est vérifiée. Dans le cas d'un hyper-cube de dimension d :

$$G = \sigma L^{d-2} \quad (2.7)$$

Ce qui donne dans cette limite $\beta = d - 2$.

Dans la limite $g \ll 1$, on est dans le régime localisé et la conductance décroît exponentiellement avec L , de sorte que $\beta = \text{const} + \ln g$.

En supposant qu'aucun autre effet ne se passe dans le régime intermédiaire et en sachant que la correction de localisation faible est négative et proportionnelle à $1/g$, on arrive au comportement schématisé sur la figure 2.3.

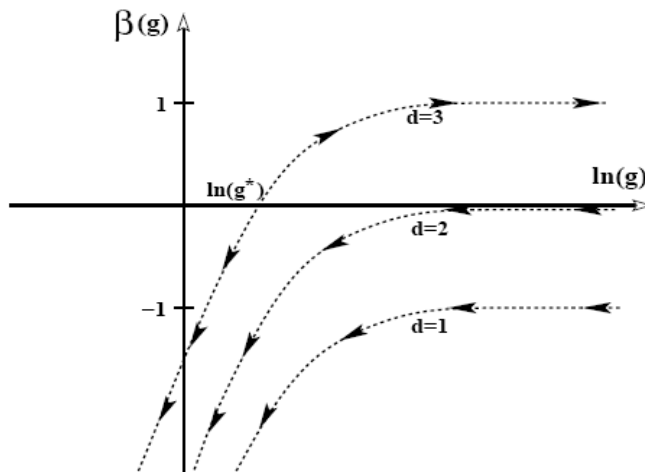


Figure 2.3: Evolution du coefficient $\beta(g)$ en fonction de la conductance à différentes dimensions.

Les conclusions qu'on peut tirer de cette figure sont les suivantes :

Pour $d \leq 2$, $\beta(g)$ est toujours négatif, et donc dans la limite thermodynamique, le système ne peut être qu'un isolant. En revanche, pour $d = 3$, il existe une transition métal-isolant, dite transition d'Anderson, dictée par l'importance du désordre.

2.4 Corrélacion et délocalisation des systèmes désordonnés

Depuis le travail remarquable d'Anderson [3], l'échelle des grandeurs physiques telles que la conductance ou la résistance souffrent de troubles dans les systèmes électroniques dans la limite de basse température [11]. Ces systèmes mésoscopiques, contenant environ 10^{19} objets élémentaires comme des électrons ou des atomes, on s'attend à être prometteuses dans la prochaine génération des dispositifs électroniques. Dans ce contexte, de manière surprenante, l'évolution récente est de souligner la possibilité de suppression la localisation dans les systèmes unidimensionnels désordonnés induite par la non-linéarité [12], la corrélation spatiale particulière dans le désordre [13-14] ou des interactions à longue distance [15].

2.4.1 Études expérimentales

Les études et les résultats expérimentaux restent toujours très limités devant les recherches théoriques, ceci est dû à la complexité des expériences ce qui mène toujours à des résultats approximatifs ou faux. Des résultats expérimentaux [16] indiquent qu'une corrélation dans le désordre conduit à l'existence d'états délocalisés par simple distribution des éléments constituant le superréseau.

Les superréseaux de types GaAs-Al_{0.3}Ga_{0.7}As de semi-conducteur désordonnés intentionnellement avec ou sans corrélation du désordre, ont été étudiés expérimentalement par Bellami et al [17]. Ils ont déterminé les propriétés structurales de ce système par diffraction aux rayons X et ses états électroniques par spectroscopie photovoltaïque. Ces derniers ont été comparés à la suite d'un calcul théorique basé sur le coefficient de transmission et la structure de minibande. Ils ont noté que la probabilité de la délocalisation au niveau du désordre n'est pas nulle, ce qui en accord avec les travaux théoriques de Dominguez et al [18-21].

2.4.2 Études analytiques et numériques

Dominguez et al [22] ont démontré analytiquement et numériquement dans une série d'articles, l'existence d'un ensemble d'états prolongés pour des systèmes unidimensionnel désordonnés.

S.Bentata [23], T.Hakobyan et al [24], I.Gomez et al [25] A.Parisini [26] et R.Djelti [27] ont étudié numériquement l'influence du désordre corrélé sur les propriétés de transport dans des superréseaux GaAs-Al_xGa_{1-x}As. Ils ont pris au hasard une concentration x en aluminium à deux valeurs différentes, avec la condition que l'une d'entre elles apparaît seulement en doublée (dimer). Les états électroniques du SR ont été étudiés par le calcul théorique du coefficient de transmission de la structure de minibande. Ils ont observé que le processus de la délocalisation existe quand le désordre est corrélé [28].

Les énergies des états délocalisés peuvent être changées par la variation des paramètres appropriés du système étudié pour les puits et barrières. Au moyen du formalisme de la matrice de transfert [29-31] et du modèle de Kronig Penny [32], Plusieurs grandeurs physiques ont été calculées telles que la conductance, la fluctuation universelle de la conductance, la longueur de localisation, la résistance et sa probabilité de distribution [33-34].

Références

- [1] P. Sheng, Introduction to Wave Scattering, Localization, and Mesoscopic Phenomena (Springer, New York, 2006).
- [2] P.W.Anderson. Absence of diffusion in certain random lattices. Physical Review, 109, page 1492, March 1958.
- [3] P. W. Anderson, Phys. Rev. **B23**, 4828 (1981)
- [4] P.Sebbah, editor. Waves and Imaging through Complex Media. Kluwer Academic Publishers, 2001. (2006).
- [5] S. KAWKA. Modélisation de la localisation faible et forte dans une géométrie confinée, (2006).
- [6] K.Byczuk, W.Hofstetter, and D.Vollhardt, Phys.Rev.Lett. **94** 056404 (2005).
- [7] N.F.Mott, J.Non.Crystal.Solids **1** 1 (1968).
- [8] R.Landauer, Philos. Mag. **21** 863 (1970).
- [9] D.J.Thouless. Physics Reports, **13** P 93,(1974).
- [10] E. Abrahams, P. W. Anderson, D. C. Licciardello, and T. V. Ramakrishnan, Scaling theory of localisation : Absence of quantum diffusion in two dimensions, Phys.Rev. Lett. **42**, 673 (1979).
- [11] For a review see M. Janseen, Phys. Rep. 295 (1998) 1.
- [12] Yu.S. Kivshar, S.A. Gredeskul, A. S´anchez, L. V´azquez, Phys. Rev. Lett. **64** (1990).
- [13] D. Dunlap, H.L.Wu, P. Phillips, Phys. Rev. Lett. **65** (1990) 88.
- [14] F.A.B.F.Moura, M.M. Lyra, Phys. Rev. Lett. **81** (1998) 3735.
- [15] A. Rodr´ıguez, V.A. Malyshev, F. Dom´ınguez-Adame, J. Phys. A: Math. Gen. **33** (2000).
- [16] Xiaoshuang Chen Physics Letters A **257** 317–324 (1999).
- [17] V.Bellani, E.Diez, A.Parisini, L.Tarricone, R.Hey, G.B. Parravicini, F.Dominguez-Adame Physic E **7** 823-826(2000).
- [18] A.Sachez, E.Macia and F.Dominguez-Adame, Phys.Rev B **49**, 147 (1994).
- [19] F.Dominguez-Adame, A.Sachez and E.Diez, Phys.Rev B **50**, 17736 (1994).
- [20] E.Macia and F.Dominguez-Adame, Phys.Rev.Lett.**76**,2957 (1996).
- [21] G.P.Berman, F.Dominguez-Adame and A.Sachez, Phys.D **107**, 166 (1997).
- [22] F.Dominguez-Adame, I.Gomez, A.Avakyan, D.Sedrakyan,

- [23] S.Bentata, Superlattices and Microstructures **37** 292–303(2005).
- [24] T.Hakobyan, D.Sedrakyan, A.Sedrakyan, I.Gómez And F.Domínguez-Adame, Phys.Rev B **61**, 11432-11436 (2000).
- [25] I.Gomez, F.Dominguez-Adame, E.Diez Physica **B 324** 235–239 (2002).
- [26] A.Parisini, L.Tarricone, V.Bellani, G.B.Parravicini, E.Diez, F.Domínguez-Adame, and R.Hey Phys.Rev B **63**, 165321 (2001).
- [27] Djelti.R, Bentata.S, Aziz.Z «Nature des états Electroniques des superréseaux (Type Dimer/Trimer) désordonnés en hauteur de barriere » Lebanese Science journal, vol.8, N° 01, (2007).
- [28] V. Bellani, E. Diez, R. Hey, L. Toni, L. Tarricone, G. B. Parravicini, F. Dominguez-Adame, and R. Gomez-Alcala, Phys. Rev. Lett. **82**, 2159 (1999).
- [29] M. O. Vassel, J. Lee, and H. F. Lockwood, J. Appl. Phys. **54**, 5206 (1983).
- [30] S. S. Allen and S. L. Richardson, J. Appl. Phys. **79**, 886 (1996).
- [31] Y. Guo, B. L. Gu, Z. Q. Li, and Y. Kawazoe, Eur. Phys. J. **B3**, 257 (1998).
- [32] R. de Kronig and W. G. Penney, Proc. R. Soc. **A130**, 499 (1931).
- [33] F. A. B. de Mora and M. L. Lyra, Phys. Rev. Lett. **81**, 3735 (1998); Physica **A266**, (1999).
- [34] F. M. Izrailev and A. A. Krokhin, Phys. Rev. Lett. **82**, 4062 (1999).

Chapitre 3

Simulation et modélisation

3.1 Introduction

La naissance de la simulation numérique remonte aux débuts des années 1950 où les premiers ordinateurs purent être utilisés pour un usage civil.

Les simulations numériques jouent un rôle de plus en plus important dans différents domaines scientifiques en particulier la physique. Elles représentent un outil indispensable qui permet de comprendre les expériences et expliciter les résultats théoriques et repousser les limites de nos connaissances.

La simulation désigne un procédé selon lequel on exécute un programme informatique sur un ordinateur en guise de simuler des phénomènes physiques complexes. Les simulations reposent sur la mise en oeuvre de modèles théoriques. Elles sont donc une adaptation aux moyens numériques de la modélisation mathématiques et servent à étudier le fonctionnement, les propriétés et l'évolution d'un système modélisé. On parle également du calcul numérique.

La croissance rapide de la puissance d'ordinateur, étant couplé à la baisse régulière dans son prix, il est clair que les simulations sur ordinateur pourront augmenter rapidement la sophistication permettant des résultats plus subtils d'être trouvés.

Grâce à cette simulation et son grand succès dans le domaine scientifique, on a essayé d'élaborer un modèle en vue de déterminer le facteur de transmission et le temps de l'effet tunnel résonnant.

Ce chapitre présente les différents formalismes utilisés pour déterminer le coefficient de transmission. A cet effet les approximations considérées [1-3] et les modèles mis en jeu sont les suivants.

3.2 Approximations de base

Pour simplifier le formalisme permettant le calcul du coefficient de transmission, deux approximations importantes ont été considérées [4-6]:

- Approximation de la masse effective.
- Approximation de la fonction enveloppe et les conditions de continuité de Bastard.

3.2.1 Approximations de la masse effective

L'hamiltonien d'un électron dans un cristal soumis à un champ extérieur s'écrit:

$$H = \frac{-\hbar^2}{2m_0} \Delta + V(\vec{r}) + W(\vec{r}) \quad (3.1)$$

Où $V(\vec{r})$ représente le potentiel cristallin, $W(\vec{r})$ la perturbation extérieure et \hbar la constante de Planck réduite. La complexité de la résolution de l'équation de Schrödinger, due au potentiel cristallin $V(\vec{r})$ et l'approximation de la masse effective (AME) permettent d'obtenir des solutions approchées. Celle-ci consiste à remplacer l'électron quasi-libre par un quasi-électron libre, c.à.d. le mouvement d'une particule de masse m_0 dans un cristal de potentiel $V(\vec{r})$ est semblable à celui d'une particule libre de masse m^* dans le vide.

Théoriquement le terme $\frac{-\hbar^2}{2m_0} \Delta + V(\vec{r})$ est remplacé par $\frac{-\hbar^2}{2m^*} \Delta + E_c$ où E_c représente le minimum de la bande de conduction, et la masse effective est définie par:

$$m_{ij}^{*-1} = \frac{1}{\hbar^2} \left. \frac{\partial^2 E(\vec{k})}{\partial k_i \partial k_j} \right|_{\vec{k}_0} \quad (3.2)$$

m^* est une masse comportant toutes les complexités du potentiel $V(\vec{r})$, et définie par la dérivée seconde de l'énergie au voisinage d'un extremum \vec{k}_0 de la surface isoénergétique. Le domaine de validité de l'AME concerne des situations où la masse varie faiblement en fonction de la position, c.à.d. au voisinage de l'extremum \vec{k}_0 .

Afin d'expliciter les propriétés importantes des superréseaux, l'application de l'approximation de la masse effective associée à quelques modèles théoriques [7], est utilisée pour déterminer la structure de minibandes, l'effet tunnel résonant (ETR), etc...

3.2.2 Fonction enveloppe et Conditions de continuité

Dans les superréseaux, les propriétés de discontinuité de la masse effective au niveau des interfaces posent un problème, celui d'écrire les conditions de continuité de l'équation de Schrödinger à l'interface et de pouvoir appliquer l'AME, malgré sa dépendance de la position. Dans la littérature, plusieurs formes d'écritures ont été proposées [8-9].

Ben Daniel et al [10] décrivent le superréseau comme un bloc de semiconducteurs et ne tenant pas en compte la discontinuité de la masse effective aux interfaces.

Bastard [11] a proposé une forme plus simple de C.C. vérifiée par la fonction enveloppe $f(z)$ et sa première dérivée:

$$f(z^-) = f(z^+) \quad (3.3.a)$$

$$(1/m_a) \frac{\partial}{\partial z} f(z^-) = (1/m_b) \frac{\partial}{\partial z} f(z^+) \quad (3.3.b)$$

avec la relation (3.3.b) basée sur l'hypothèse physique de la continuité du flux du courant $j(z)$.

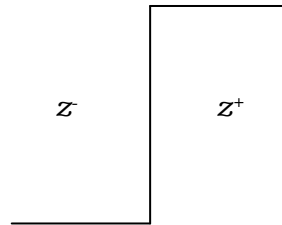


Figure 3.1: Interface abrupte

Cette forme de C.C. n'est applicable que pour des fonctions de Bloch dont la partie périodique varie très faiblement au niveau des interfaces :

$$u_A(\vec{r}_0) \approx u_B(\vec{r}_0) \quad (3.4)$$

Où $u_A(\vec{r}_0)$ et $u_B(\vec{r}_0)$ décrivent les parties périodiques des fonctions d'ondes des matériaux A et B à la position d'interface \vec{r}_0 . Cette nouvelle écriture a été confirmée expérimentalement par Galbraith et al. [12]. L'application de cette forme empirique de C.C. a apporté des corrections importantes dans l'étude de l'Effet tunnel résonnant [13-19].

3.3 Modèles et méthodes théoriques

L'équation d'onde de Schrödinger d'un électron d'énergie incidente E et une masse effective $m^*(z)$ traversant un profil de potentiel $V(z)$ dans un état stationnaire, s'écrit sous la forme suivante [20-22]:

$$\frac{1}{m^*(z)} \frac{\partial^2}{\partial z^2} \cdot \psi(z) + \frac{2}{\hbar^2} [E - V(z)] \cdot \psi(z) = 0 \quad (3.5)$$

Le profil $V(z)$ est considéré comme l'énergie du minimum de la bande de conduction par rapport à une origine supposée prise au niveau de la BC du matériau jouant le rôle du puits (figure 3.2).

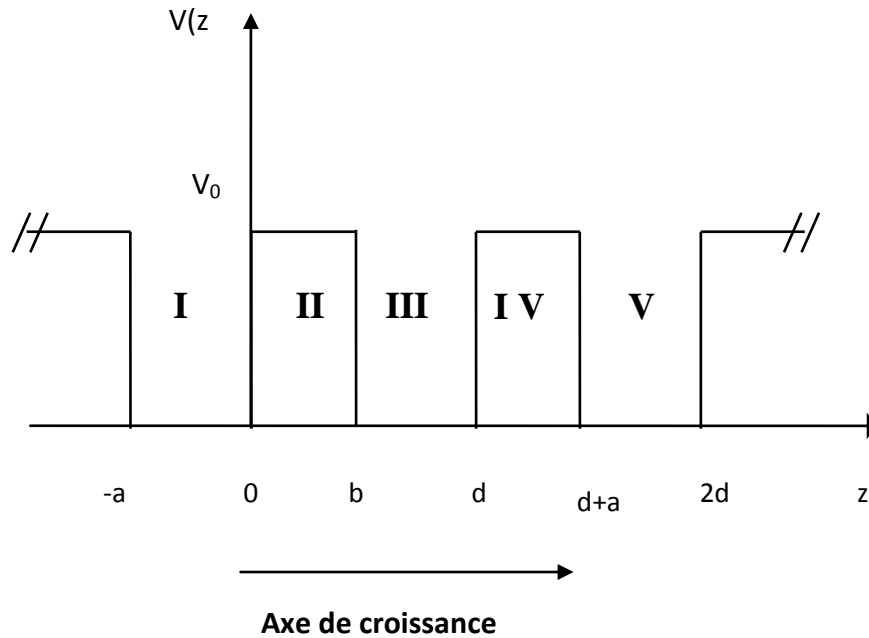


Figure 3.2: Profil de potentiel d'un SR à puits et barrières rectangulaires.

La résolution de l'équation (3.5) utilisant les approximations et les hypothèses citées précédemment permet:

- le calcul de la relation de dispersion des énergies en fonction du vecteur d'onde du SR par deux méthodes; le modèle de Kronig-Penney et celui de la matrice de transfert [23-24].
- la détermination du coefficient de transmission T , à partir des fonctions d'Airy [25-33], et des ondes planes [34-37].

Cette dernière est appliquée à différents profils de potentiel.

3.3.1 Calcul de la structure de minibande

Dans la littérature, il existe plusieurs formalismes permettant l'obtention de la structure de minibande, comme le modèle de Kronig Penney [38] et la méthode de la matrice de transfert [39-40]. Cette dernière fait l'objet de notre travail.

3.3.1.1 Modèle de la matrice de transfert

L'interprétation physique de cette technique est également directe, elle introduit la réponse du système en termes de matrice obtenue à partir d'une relation linéaire liant les fonctions d'onde et leurs premières dérivées au niveau des interfaces [41-42]:

$$\begin{pmatrix} \psi(0) \\ \frac{1}{m_a} \nabla \psi_a(0) \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} \psi(0) \\ \frac{1}{m_b} \nabla \psi_b(0) \end{pmatrix} \quad (3.6)$$

M est une matrice (2 x 2) appelée matrice de transfert.

La résolution de l'équation (3.5) donne les fonctions enveloppes dans chaque région (figure 3.3):

Région (I) : $V(z) = 0$; $m^*(z) = m_a$ (3.7)

$$\psi_I(z) = A e^{ik_1 z} + B e^{-ik_1 z} \quad (3.8)$$

Région (II): $V(z) = V_0$; $m^*(z) = m_b$ (3.9)

$$\psi_{II}(z) = C e^{ik_2 z} + D e^{-ik_2 z} \quad (3.10)$$

Région (III) : $V(z) = 0$; $m^*(z) = m_a$ (3.11)

$$\psi_{III}(z) = E e^{ik_1 z} + F e^{-ik_1 z} \quad (3.12)$$

Avec

$$k_1 = \sqrt{\frac{2m_a E}{\hbar^2}} \quad \text{et} \quad k_2 = \sqrt{\frac{2m_b(E - V_0)}{\hbar^2}} \quad (3.13)$$

Où A, B, C, D, E et F décrivent les amplitudes des fonctions d'onde.

Les conditions de continuité de Bastard utilisées aux points de discontinuité :

En $z=0$

$$\psi_I(0) = \psi_{II}(0) \quad (3.14)$$

$$\frac{1}{m_a} \Psi'_I(z)|_{z=0} = \frac{1}{m_b} \Psi'_II(z)|_{z=0} \quad (3.15)$$

impliquent:

$$S_I(0) \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = S_{II}(0) \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} \quad (3.16)$$

Avec

$$S_I(z) = \begin{pmatrix} e^{ik_1 z} & e^{-ik_1 z} \\ \frac{ik_1}{m_a} e^{ik_1 z} & \frac{-ik_1}{m_a} e^{-ik_1 z} \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad S_{II}(z) = \begin{pmatrix} e^{ik_2 z} & e^{-ik_2 z} \\ \frac{ik_2}{m_b} e^{ik_2 z} & \frac{-ik_2}{m_b} e^{-ik_2 z} \end{pmatrix} \quad (3.17)$$

$$\text{D'où} \quad \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = S_I^{-1}(0) S_{II}(0) \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} \quad (3.18)$$

En $z=b$ le résultat obtenu est similaire

$$\begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} = S_{II}^{-1}(b) S_{II}(b) \begin{pmatrix} E \\ F \end{pmatrix} \quad (3.19)$$

En remplaçant (3.19) dans (3.18), l'expression devient

$$\begin{pmatrix} E \\ F \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} \quad (3.20)$$

Avec

$$M = S_{II}^{-1}(b) S_{II}(b) S_I^{-1}(0) S_{II}(0) \quad (3.21)$$

A l'aide de M , toute relation entre les amplitudes peut-être déterminée indépendamment des périodes.

3.3.2 Calcul du coefficient de transmission

Pour calculer le coefficient de transmission T d'un superréseau double barrière rectangulaire soumis à une tension extérieure V_a (figure 3.3), l'équation de Schrödinger est résolue d'une façon exacte en utilisant les fonctions d'Airy et d'une manière approchée par la méthode des ondes planes.

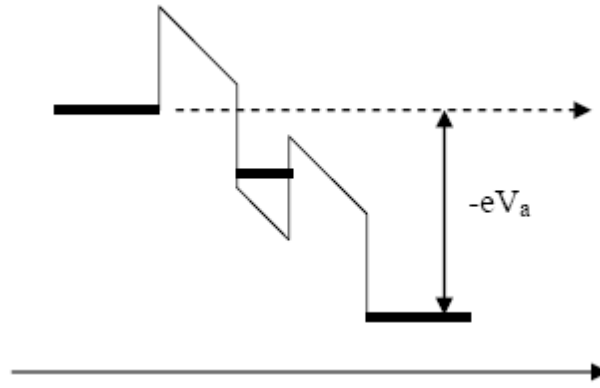


Figure 3.3: Structure soumise à une tension extérieure V_a .

3.3.2.1 Fonctions d’Airy

L’équation de Schrödinger d’un électron de masse effective $m^*(z)$, d’énergie E , traversant la structure double barrière s’écrit:

$$\frac{1}{m^*(z)} \frac{\partial^2}{\partial z^2} \cdot \psi(z) + \frac{2}{\hbar^2} [E - V(z)] \cdot \psi(z) = 0 \tag{3.22}$$

Les solutions de l’équation (3.22) dans chaque région du potentiel sont données par les relations suivantes:

Région (I): $V(z) = 0$ et $m^*(z) = m_a$ (3.23)

$$\psi_I(z) = 1 e^{ikz} + R e^{-ikz} \tag{3.24}$$

Avec $k = \sqrt{\frac{2m_a E}{\hbar^2}}$

Région (II): $V(z) = V_0 - \frac{eV_a}{L} z$ et $m^*(z) = m_b$ (3.25)

Soit le changement de variable,

$$\rho(z) = \left(\frac{2em_b V_a}{L\hbar^2} \right)^{1/3} \left(\frac{V_0 - E}{eV_a/L} - z \right) = Z(\eta - z) \tag{3.26}$$

L’équation (3.22) devient,

$$\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} \psi_2(\rho) - \rho \psi_2(\rho) = 0 \tag{3.27}$$

La solution de l'équation (3.22) en utilisant les fonctions d'Airy est donnée par:

$$\psi_2(\rho) = C_2^+ A_i(\rho) + C_2^- B_i(\rho) \quad (3.28)$$

Où A_i et B_i représentent les fonctions d'Airy.

Région (III):

$$V(z) = -\frac{eV_a}{L}(z+b) \quad \text{et} \quad m^*(z) = m_a \quad (3.29)$$

En effectuant ce changement de variable

$$\rho'(z) = \left(\frac{2em_a V_a}{L\hbar^2} \right)^{1/3} \left(-\frac{\frac{beV_a}{L} - E}{eV_a/L} - z \right) = Z'(\eta' - z) \quad (3.30)$$

La résolution de l'équation (3.22) dans cette région est formulée par

$$\psi_2(\rho) = C_3^+ A_i(\rho') + C_3^- B_i(\rho') \quad (3.31)$$

Pour des raisons de périodicité, les solutions dans les régions qui suivent sont les mêmes que celles dans les régions (II) et (III), sauf que l'amplitude change.

Région (IV)

$$V(z) = 0 \quad \text{et} \quad m^*(z) = m_a \quad (3.32)$$

$$\psi_5(z) = 0 e^{-ikz} + \tau e^{ikz} \quad (3.33)$$

Avec $k' = \sqrt{\frac{2m_a(E + eV_a)}{\hbar^2}}$ et τ représente l'amplitude de transmission.

La première amplitude dans la relation (3.33) est nulle, car la particule est supposée venir de $z = -\infty$.

En appliquant les conditions de continuité de Bastard aux interfaces et utilisant le modèle de matrice de transfert, les coefficients d'entrée sont exprimés en fonction des amplitudes de sortie par la relation suivante:

$$\begin{pmatrix} 1 \\ R \end{pmatrix} = -\frac{m_a}{2ik} \begin{pmatrix} -\frac{ik}{m_a} & -1 \\ \frac{ik}{m_a} & 1 \end{pmatrix} S(O,l) \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ \frac{ik'}{m_a} & -\frac{ik'}{m_a} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tau \\ 0 \end{pmatrix} \quad (3.34)$$

Avec
$$S(O,l) = S_p(0) S_p^{-1}(b) \cdot S_b(0) S_b^{-1}(a) \cdot S_p(0) S_p^{-1}(b) \quad (3.35)$$

Où
$$S_p(\rho) = \begin{pmatrix} A_i(\rho) & B_i(\rho) \\ \frac{A'_i(\rho)}{m_b} & \frac{B'_i(\rho)}{m_b} \end{pmatrix} \text{ et } S_b(\rho') = \begin{pmatrix} A_i(\rho') & B_i(\rho') \\ \frac{A'_i(\rho')}{m_a} & \frac{B'_i(\rho')}{m_a} \end{pmatrix} \quad (3.36)$$

Respectivement les matrices de transferts locales au niveau du puits et de la barrière. La relation finale est donc donnée par :

$$\begin{pmatrix} 1 \\ R \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} \tau \\ 0 \end{pmatrix} \quad (3.37)$$

M est la matrice de transfert, elle comporte toutes les informations physiques du système issues de l'application des C.C. de Bastard.

Le coefficient de transmission est obtenu à partir du rapport du flux transmis sur le flux incident :

$$T = \frac{k'}{k} \tau^* \tau \text{ avec } \tau = \frac{1}{M_{11}} \quad (3.38)$$

Soient A, B, C et D les éléments de la matrice $S(O,l)$, des relations (3.34) et (3.37),

$$M_{11} = \frac{1}{2} \left[\left(A + \frac{k'}{k} D \right) + i \left(\frac{k' B}{m_a} - \frac{C m_a}{k} \right) \right] \quad (3.39)$$

$$\text{Avec } T = \frac{\left(4 \frac{k'}{k} \right)}{\left(A + \frac{k'}{k} D \right)^2 + \left(\frac{k' B}{m_a} - \frac{C m_a}{k} \right)^2} \quad (3.40)$$

Cette relation du coefficient de transmission décrit l'interaction de la particule avec le système à travers les éléments A, B, C et D de la matrice de transfert et les masses effectives. Elle comporte aussi la manifestation de la nature ondulatoire de la particule représentée dans les vecteurs d'ondes k et k' .

3.3.2.2 Méthode des ondes planes

La méthode des ondes planes permet de donner des solutions approchées à l'équation de Schrödinger pour un profil de potentiel arbitraire. Soit $V(z)$ un profil arbitraire d'une structure connectée à un émetteur et un collecteur dont une tension V_a leur est appliquée. Le profil arbitraire est décomposé en n paliers équidistants de largeur l . Chaque palier j est caractérisé par une hauteur V_j , une masse effective m_j de l'électron et une fonction d'onde ψ_j (figure 3.4):

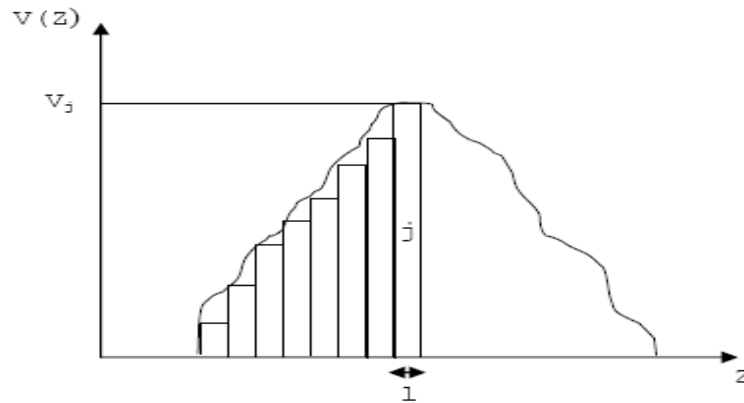


Figure 3.4: Profil arbitraire

$$V(Z) \equiv V_j = V \left[\frac{Z_{j-1} + Z_j}{2} \right] ; m(Z) \equiv m_j = m \left[\frac{Z_{j-1} + Z_j}{2} \right] \quad (3.41)$$

et

$$\psi_j(Z) = A_j \exp(iK_j Z) + B_j \exp(-iK_j Z) \quad (3.42)$$

Où $Z_{j-1} < Z < Z_j$, j varie de 0 à $N+1$ et $k_j = \sqrt{\frac{2m_j(E-V_j)}{\hbar^2}}$ est le vecteur d'onde dans

le palier j .

L'utilisation du modèle de la matrice de transfert et les conceptions de continuité de Bastard au niveau de chaque palier permet d'obtenir une relation reliant le coefficient de réflexion avec celui de transmission :

$$\begin{pmatrix} 1 \\ R \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} \tau \\ 0 \end{pmatrix} \quad (3.43)$$

$$M = \frac{m_a}{2iK} \begin{bmatrix} \frac{iK}{m_a} & 1 \\ \frac{iK}{m_a} & 1 \end{bmatrix} S(0, L) \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ \frac{1}{m_a} & \frac{1}{m_a} \end{bmatrix} \quad (3.44)$$

La matrice $S(0, L)$ peut être formulée en terme de produit de n matrices élémentaires de transfert $D_j(l)$ associée au palier j de largeur l :

$$S(0, L) = \prod_{j=0}^n D_j(L) = \begin{bmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{bmatrix} \quad (3.45)$$

Avec

$$D_j(l) = \begin{bmatrix} \cos[K_j l] & -\frac{m_j}{K_j} \sin[K_j l] \\ \frac{K_j}{m_j} \sin[K_j l] & \cos[K_j l] \end{bmatrix} \quad \text{Pour } E - V_j \geq 0 \quad (3.46)$$

Et

$$D_j(l) = \begin{bmatrix} ch[\rho_j l] & -\frac{m_j}{\rho_j} sh[\rho_j l] \\ \frac{\rho_j}{m_j} sh[\rho_j l] & ch[\rho_j l] \end{bmatrix} \quad \text{Pour } E - V_j < 0 \quad (3.47)$$

tel que

$$\rho_j = \sqrt{\frac{2m_j(V_j - E)}{\hbar^2}}$$

De même que dans le cas de la méthode exacte, le coefficient de transmission est donné par la relation suivante :

$$T = \frac{\left(\frac{4K'}{K}\right)}{\left(S_{11} + \frac{K'}{K}S_{22}\right)^2 + \left(\frac{K'}{m_a}S_{12} - \frac{m_a}{K}S_{21}\right)^2} \quad (3.48)$$

Avec S_{ij} les éléments de la matrice $S(0, L)$.

3.3.3 L'intérêt du coefficient de transmission

Le coefficient de transmission T est une entité physique très importante, la courbe des valeurs du T en fonction de l'énergie de la particule, nous permet de déterminer plusieurs grandeurs physiques, comme:

- ✓ Les énergies de résonances, pour lesquelles le coefficient de transmission décrit des pics caractérisant le passage de la particule par effet tunnel.
- ✓ Le temps de transit, c.à.d. temps de l'effet tunnel obtenu par l'inverse de la largeur à mi-hauteur du pic. Ce temps est très important car il permet l'application de ces dispositifs dans les systèmes électroniques à réponse rapide.
- ✓ La conductance de Landauer ($\sigma = \frac{\tau}{1 - \tau}$) décrivant la conductivité microscopique sans dimension du système.
- ✓ La résistance de Landauer ($\rho = \frac{1}{\sigma}$).

Références

- [1] Elateche Zahia, «Etude de l'interaction électron-matière par la méthode Monte Carlo Application sur Silicium ». Mémoire de magister, Université de Batna (2005).
- [2] L. N. Pandey, D. Sahu, and T. F. George, *App. Phys. Lett.* 56, 277 (1990).
- [3] A. Brezini and N. Zekri, *Solid. Stat. Comm.* 86, 613 (1993).
- [4] L.N.Pandey, D.Sahu, and T.F.George, *App.Phys.Lett.*56, 277 (1990).
- [5] A.Brezini and N.Zekri, *Solid.Stat.Comm.* 86, 613 (1993).
- [6] G.Bastard, *Wave Mechanics Applied to Semiconductors Heterostructures* « Edition de Physique (1989).
- [7] P. Kiréev, *La physique des semiconducteurs*, ed. Mir. Moscou (traduction Française) (1975).
- [8] R.D. Kronig and W. J. Penney, *Proc. R.Soc. London Ser. A.* 130 499, (1931).
H Pruszkarski, *Physica B.* 125, 179 (1984).
- [9] T. Ando and S. Moris, *Phys. Rev. B* 40, 11609 (1989).
- [10] Q. G. Zhu and H. Kroemer, *Phys. Rev. B* 27, 3519 (1989).
- [11] D. J. Ben Daniel and C. B. Duke, *Phys. Rev.* 152, 683 (1966).
- [12] G. Bastard, *Phys. Rev. B* 24, 5693 (1981).
- [13] Galbraith and G. Duggan, *Phys. Rev. B* 38, 10057 (1988).
- [14] K. F.Brennan and C. J. Summers, *J. App. Phys.* 61, 614 (1987).
- [15] J. P. Peng, H. Chen, and S. X. Zhou, *J. Phys. Cond. Matter* I 5451 (1989).
- [16] S. S. Allen and S. L. Richardson, *Phys. Rev. B* 50, 11 693 (1994).
- [17] S. S. Allen and S. L. Richardson, *J. App. Phys.* 79, 886 (1996).
- [18] A. N. Khonder, M. R. Khan, and A. F. N. Anwar, *J. App. Phys.* 63, 5192 (1988)
- [19] Y. Zebda and A. M. Kan'an, *J. App. Phys.* 72, 559 (1992).
- [20] H.S.Cho and P.R.Prucnal, *Phys.Rev.B* 36, 3237 (1987).
- [21] D.J.Ben Daniel and C.B.Duck, *Phys.Rev.* 152, 683 (1966).
- [22] A.Nogaret, L.A.Cury, D.K.Maude, J.C.Portal, and D.L.Sivco,*Semi.Sci.Tech.* 8,1819 (1993).
- [23] T.Ando, S.Wakara, and H.Akera, *Phys.Rev.B* 40, 11 610 (1989).
- [24] J.Leo and J.A.Toombs, *Phys.Rev.B* 43, 1944 (1994).

- [25] H.A.Antosiewicz, Handbook of Mathematical Functions « Eds M. Abramowitz and I.A.Stegun, (1972).
- [26] F.Berz, Semi.Sci.Tech. 8, (1993).
- [27] M.O.Vassell, J.Lee, and H.F.Lokwood, J.App.Phys. 54, 5206 (1983).
- [28] K.F.Brennan and C.J.Summers, J.App.Phys. 61, 614 (1987).
- [29] J.P.Peng, H.Chen and S.X.Zhou, J.Phys.Cond.Matter I 5451 (1989).
- [30] S.S.Allen and S.L.Richardson, Phys.Rev.B 50, 11 693 (1994).
- [31] S.S.Allen and S.L.Richardson, J.App.Phys. 79, 886 (1996).
- [32] D.J.Fisher and C.Zhang, J.App.Phys. 76, 606 (1994).
- [33] H.X.Jiang and J.Y.Lin, J.App.Phys. 61, 624 (1987).
- [34] Y.Ando and T.Itoh, J.App.Phys.61, 1497 (1987).
- [35] P.R.L.De Carvalho, V.N.Freire, M.M.Auto, and G.A.Farias, Super.Micros. 14, 221 (1993).
- [36] C.M.Tan, J.M.Xu and S.Zukotynski, J.App.Phys. 67, 3011 (1990).
- [37] N.Sekkal, H.Aourag, N.Amrane, and B.Soudini, Phys.Rev.B 215, 171 (1995).
- [38] A. M. Tan, J. M. Xu, and S. Zukotynski, J. App. Phys. 67, 3011 (1990).
- [39] A. Nogaret, L. A. Cury, D. K. Maude, J. C. Portal, and D. L. Sivco, Semi. Sci. Tech. 8, 1819 (1993).
- [40] T. Ando, S. Wakara, and H. Akeru, Phys. Rev. B 40, 11 610 (1989).
- [41] F. Capasso, S. Luryi, W. T. Tsang, C. G. Bethea, and B. F. Levine, Phys. Rev. Lett. 51, 2318 (1983).
- [42] R. C. Miller, A. C. Grossard, D. A. Kleinman, and O. Munteanu, Phys. Rev. B 29, 3740 (1984).

Chapitre 4

Résultats et discussions

4.1 Introduction

Ce chapitre traite les systèmes à potentiels désordonnés avec un désordre corrélé en dimer et trimer. Notre travail consiste à étudier la nature des états électroniques dans ces systèmes par la détermination de leurs coefficients de transmission.

4.2 Superréseau Ordonné

Un superréseau ordonné est un profil ayant une hauteur de potentiel constante tout en conservant la période spatiale suivant la direction de croissance.

4.2.1 Double barrière rectangulaire

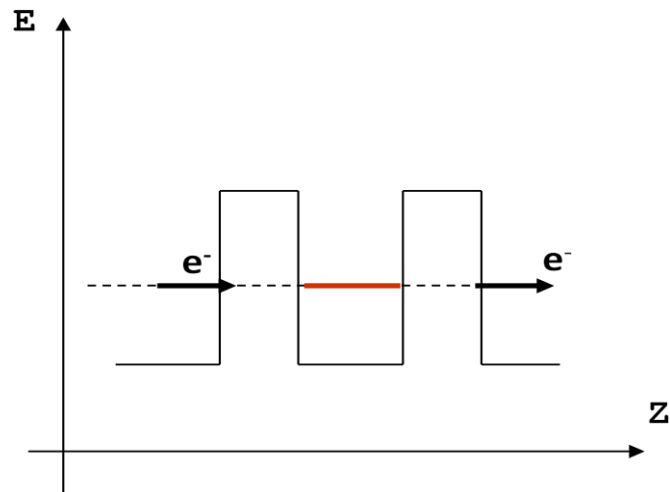


Figure 4.1: Structure d'une double barrière.

L'étude du coefficient de transmission en fonction de l'énergie incidente de l'électron pour une structure à double barrière schématisée par la figure 4.1, nous montre dans la figure 4.2 un pic de résonance d'amplitude égale à 1 localisé à une énergie E_r dont la position dépendant des paramètres de la double barrière. Ce pic est dû à l'existence d'un état permis confiné à l'intérieur du puits, permettant à l'électron de transpercer les deux barrières par le phénomène d'effet tunnel résonnant.

Ces états permis des électrons se confinent vers le bas du puits avec l'augmentation des largeurs des puits et l'augmentation de l'épaisseur de barrière "b" rend des pics moins larges.

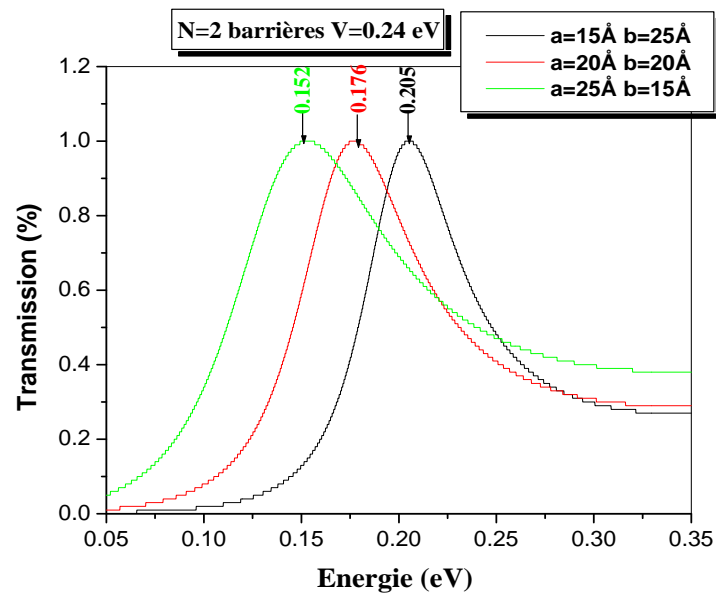


Figure 4.2: Coefficient de transmission d’une structure double barrière en fonction de l’énergie.

4.2.2 Triple barrière rectangulaire

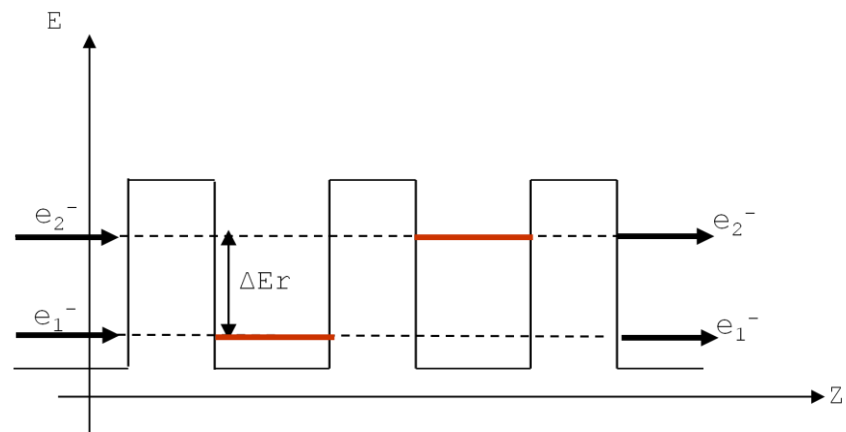


Figure 4.3: Structure d’une triple barrière.

Les mêmes phénomènes sont constatés pour la structure triple barrière sauf que celle-ci présente deux pics de résonance au lieu d’un seul (figure4.4).

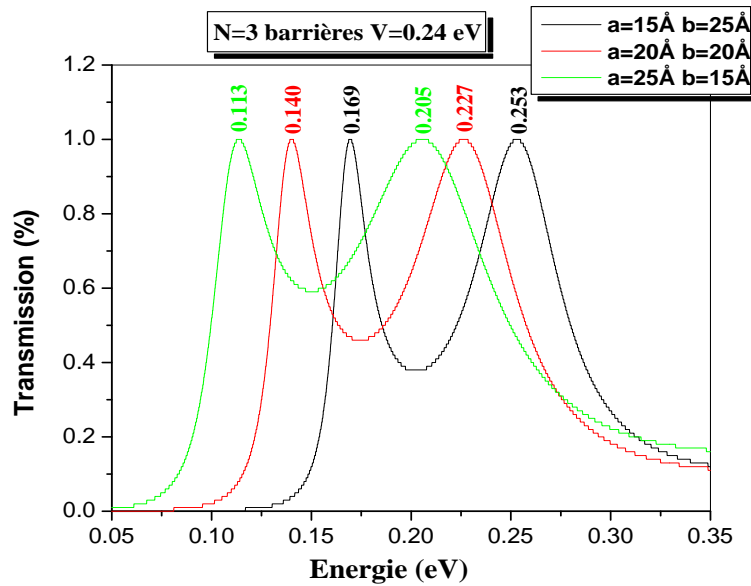


Figure 4.4: Coefficient de transmission en fonction de l'énergie pour une structure triple barrière.

4.2.3 Structure à N barrière rectangulaire

Pour une structure à N barrières on obtient N-1 pics très proches les uns des autres correspondant à N-1 puits, ce qui donne naissance à une structure de minibande permise (voir figure 4.5). La largeur de minibande dépend des paramètres structuraux du superréseau.

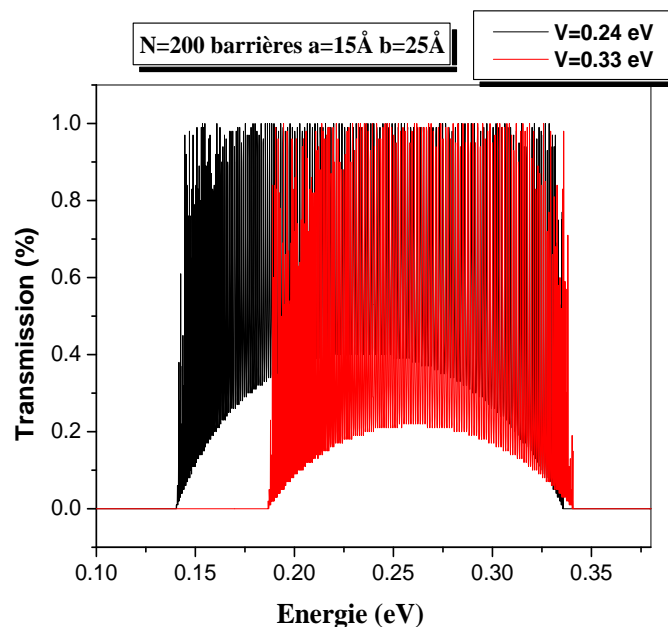


Figure 4.5: Structure à N barrière rectangulaire.

4.3 Superréseau à désordre structural

4.3.1 Paramétrisations:

Notre système se compose de 200 barrières rectangulaires périodiques de période $P = a + b$.

a et b représentent respectivement la largeur du puits et l'épaisseur de barrière.

Dans ce modèle désordonné de S.R nous considérons que la hauteur des barrières prend au hasard deux valeurs d'énergie, à savoir V_1 et V_2 aléatoirement réparties dans la structure du superréseau. V_1 et V_2 sont proportionnels aux deux valeurs de la concentration d'Al dans les barrières du superréseau GaAs/ $Al_xGa_{1-x}As$, avec $x \leq 0.45$.

Les potentiels choisis sont $V_1=0.22$ eV et $V_2=0.33$ eV. V_1 et V_2 désignent respectivement la hauteur de la barrière du système et le potentiel de la cellule élémentaire du Dimer ou Trimer.

Les masses effectives correspondantes dans chaque région du potentiel sont $m_a = 0.067m_0$, $m_b = 0.091m_0$ et $m_d = 0.103m_0$.

m_b et m_d correspondent respectivement aux masses effectives dans les barrières de hauteur V_1 et V_2 , m_a est la masse effective dans le puits et m_0 désigne la masse d'électron libre.

Le coefficient de transmission est calculé pour une moyenne de 500 réalisations et une concentration du Dimer/Trimer $C=0.2$. Cette concentration est définie comme le rapport entre le nombre de barrières de hauteur V_2 et le nombre total de barrières du superréseau.

4.3.2 Dimer en hauteur de barrières (D.H.B)

Ce modèle consiste à introduire un désordre par doublet de barrières de hauteur V_2 différente de V_1 , distribuées aléatoirement dans la structure du superréseau [1-3].

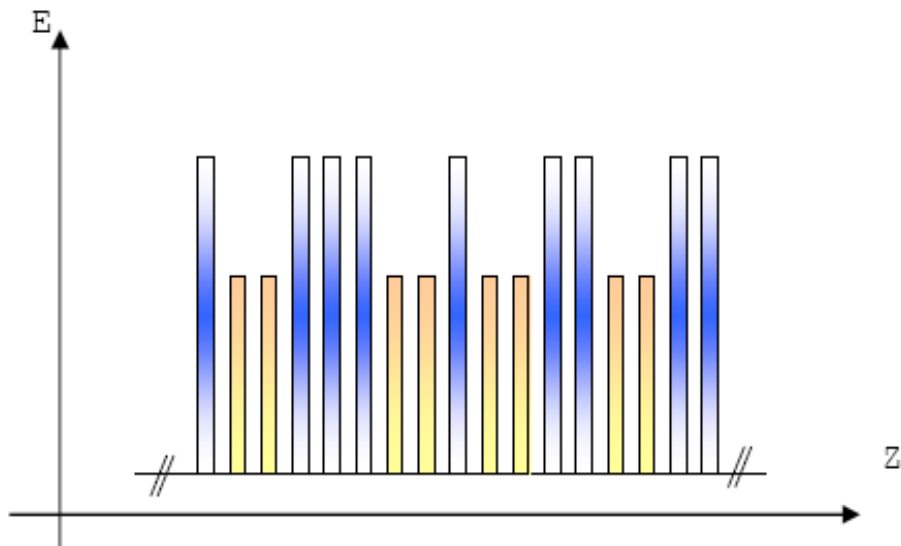


Figure 4.6: Superréseau en dimer hauteur de barrière.

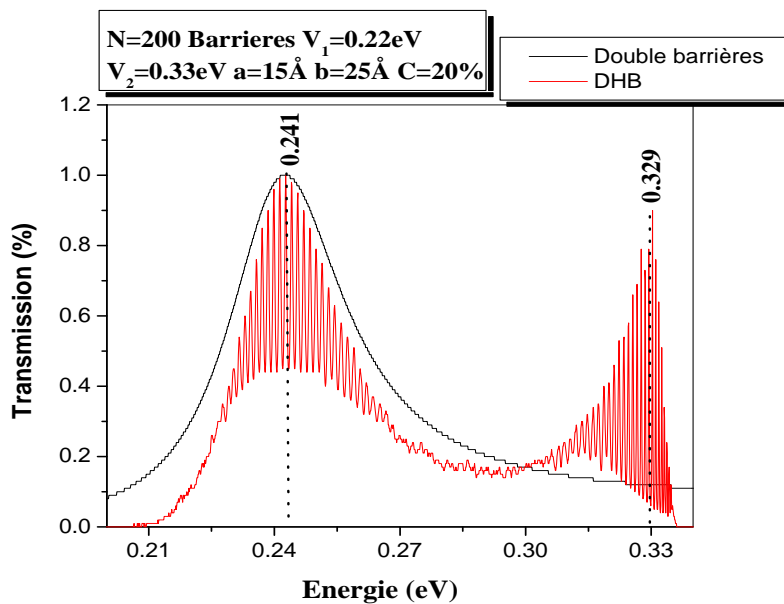


Figure 4.7: Coefficient de transmission d'une structure désordonnée en DHB en fonction de l'énergie.

D'après la figure 4.7, l'évolution du coefficient de transmission en fonction de l'énergie de l'électron, montre l'existence d'une seule minibande à l'intérieur du puits s'étendant de 0.209 eV à 0.335 eV, confiné par le potentiel du dimer. La minibande est subdivisée en trois régions désignées par deux pics localisés aux deux résonances

$E_{r1}=241\text{meV}$ et $E_{r2}=329\text{meV}$, séparées par une large vallée centrée en $E_v=295\text{meV}$. On constate aussi trois types d'états propres à l'intérieur de la minibande :

- Des états étendus situés au voisinage des résonances et possédant une grande valeur de transmission.
- Des états fortement localisés proches des bords de bande et ayant une faible transmission.
- Un état délocalisé (faiblement localisé) se trouvant au voisinage de la vallée.

Ce résultat est en parfait accord avec ceux trouvés de la littérature [4-6].

4.3.3 Trimer en hauteur de barrières (T.H.B)

La figure 4.8 montre une structure présentant un désordre corrélé en trimer hauteur de barrière.

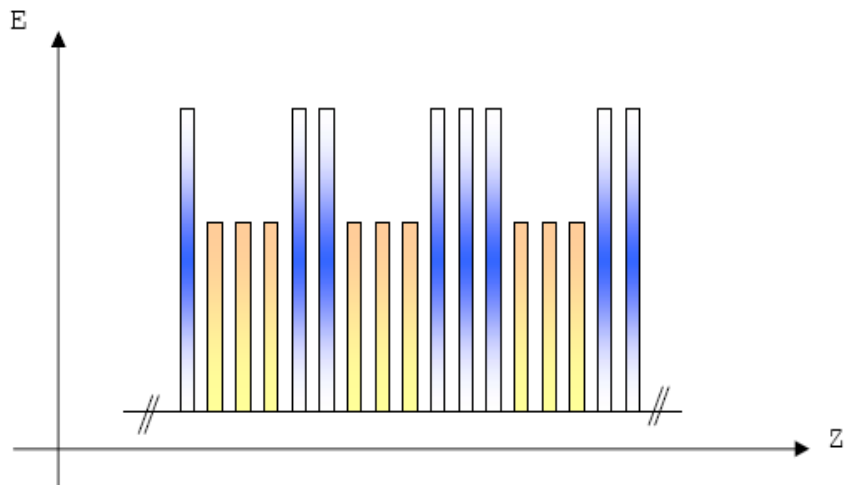


Figure 4.8: Schéma d'un superréseau en trimer hauteur de barrière

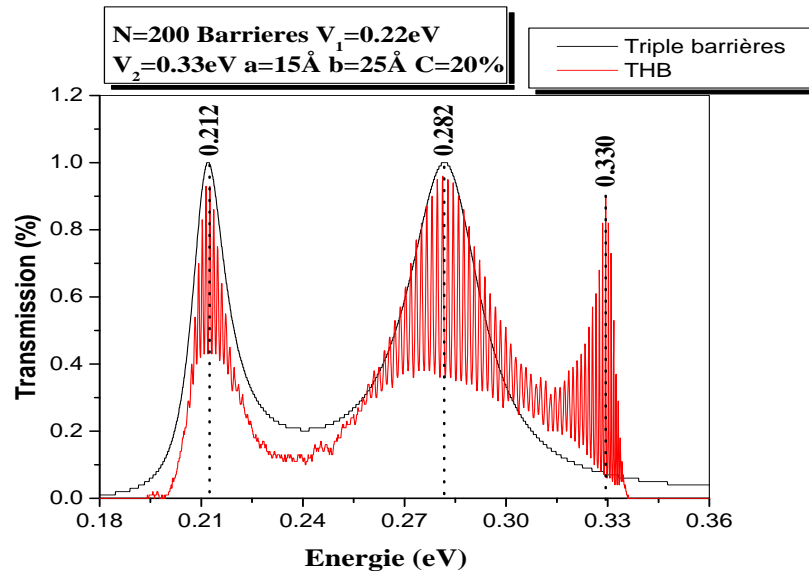


Figure 4.9: Coefficient de transmission d’une structure désordonnée en THB en fonction de l’énergie.

La variation du coefficient de transmission en fonction de l’énergie pour une structure désordonnée en THB (figure 4.9), montre l’existence d’une minibande s’étendant de 197 meV jusqu’à 336 meV, elle est subdivisée en cinq régions : trois pics situés aux énergies résonnantes $E_{r1}=212\text{meV}$, $E_{r2}=282\text{meV}$ et $E_{r3}=330\text{meV}$, séparés par deux vallées $E_{V1}=233\text{meV}$ et $E_{V2}=238\text{meV}$. Les deux premiers pics sont dus à la cellule trimer, l’autre à la commutation des deux potentiels (V_1 et V_2) [7].

• **Preuve de la résonance de commutation**

Les fonctions d’onde d’un électron traversant une structure de gauche à droite sont décrites par :

$$\Psi_j(z) = A_j \exp(ik_j z) + B_j \exp(-ik_j z) \tag{4.1}$$

Où $Z_{j-1} < Z < Z_j$, j varie de 0 à $N+1$ et $K_j = \sqrt{\frac{2m_j(E-V_j)}{\hbar^2}}$ est le vecteur d’onde dans le palier j .

La matrice $S(0, L)$ peut être formulée en terme de produit de n matrices élémentaires de transmission $D_j(l)$ associée au palier j de largeur l :

$$S(0, L) = \prod_{j=0}^n D_j(l) = \begin{bmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{bmatrix} \tag{4.2}$$

Dans notre étude on va considérer les électrons ayant une énergie inférieure à la hauteur V_j du potentiel, donc la valeur de la matrice $D_j(l)$ dans chaque région est donnée par:

$$D_j(l) = \begin{bmatrix} ch[\rho_j l] & -\frac{m_j}{\rho_j} sh[\rho_j l] \\ \frac{\rho_j}{m_j} sh[\rho_j l] & ch[\rho_j l] \end{bmatrix} \quad \text{pour } E - V_j < 0 \quad (4.3)$$

Avec
$$\rho_j = \sqrt{\frac{2m_j(V_j - E)}{\hbar^2}}$$

Dans notre cas le vecteur d'onde ρ_j peut prendre deux valeurs (k_b et k_d) avec deux masses m_1 et m_2 , suivant les deux hauteurs du potentiel V_1 et V_2 .

Prenons un système construit par deux blocs différents distribués aléatoirement dans le réseau. Il est évident que l'effet aléatoire disparaît quand, pour une énergie donnée de l'électron, les positions de deux blocs différents peuvent être inter-changées [8]. Dans ce cas ci, tous les blocs de chaque type sont déplacés vers une région des deux côtés. On peut présenter ce processus comme suit :

$$V_1 V_1 V_1 V_2 V_2 V_1 V_2 V_2 V_1 \longrightarrow V_1 V_1 V_1 V_1 V_2 V_2 V_2$$

Physiquement, l'électron voit deux réseaux entrain de commuter avec une conservation de la période d du SR ($d=a+b$), il ressort une autre périodicité celle de la coexistence des deux blocs.

Théoriquement, ce déplacement aléatoire des deux sous structures, peut être formulé par le commutateur des deux matrices de transmission élémentaires:

$$[D_1, D_2] = 0 \quad (4.4)$$

Cela conduit à l'équation suivante:

$$\frac{k_d^2 + m_d^2}{m_d k_d} sh k_d l . ch k_b l - \frac{k_b^2 + m_b^2}{m_b k_b} sh k_b l . ch k_d l + \frac{m_d^2 k_b^2 - m_b^2 k_d^2}{k_b k_d m_d m_b} sh k_b l . sh k_d l = 0 \quad (4.5)$$

La résolution de cette équation donne:

- $E_c=0.329$ eV pour le cas du Dimer.
- $E_c=0.330$ eV pour le cas du Trimer.

Les résonances Eri sont dues à l'introduction du dimer/trimer en tant que désordre corrélé, par contre E_c est liée à la commutation des deux blocs imbriqués tout en conservant la période du SR. Ainsi, on a pu démontrer l'origine de tous les pics dans la minibande de la structure désordonnée. Il faut noter qu'une structure en DHB ou en THB ne suffit pas pour obtenir tout ces pics à l'intérieur de la minibande, une condition importante doit être vérifiée simultanément :

- La région d'intersection des minibandes du réseau V_1 et V_2 est suffisamment large pour supporter l'existence de ces types de pic.

4.3.4 Effet des paramètres de superréseau sur la transmission électronique

4.3.4.1 Largeur de puits

a) Cas du dimer

La figure 4.10 montre une structure de minibande permise avec deux pics de résonance pour chaque valeur de a . Une translation vers les basses énergies est observée pour ces structures à large puits ($a=20, 30$ et 40 Å). La largeur des minibandes diminue tout en augmentant la largeur a . Ce phénomène est dû au confinement des états énergétiques à l'intérieur des puits. Pour $a=50$ Å, on remarque l'apparition d'un troisième pic correspondant à $E_r=0.325$ eV. Ceci peut être expliqué par l'existence des états d'énergie situés au dessus de la bande de conduction.

b) Cas du trimer

Le même phénomène est observé dans le cas du trimer que celui du dimer, mais avec trois pics de résonance (voir figure 4.10).

4.3.4.2 Épaisseur de la barrière

a) Cas du dimer

La courbe représentative de la transmission de l'électron en fonction de son énergie schématisée par la figure 4.11, présente toujours une structure de minibande avec deux pics de résonance comme la précédente, sauf que celle-ci montre un rétrécissement des minibandes vers le centre avec l'augmentation de b . La différence relative entre les deux pics devient de plus en plus faible jusqu'à son annulation pour $b=40$ Å. Pour une épaisseur de barrières atteignant la valeur de 50 Å, l'énergie électronique a aucun effet sur

la transmission qui reste toujours nulle ou la portée de l'onde diminue tout en augmentant l'épaisseur de la barrière. Ce phénomène s'explique par le fait que b est supérieur à la longueur d'onde λ de l'électron. Dans cette situation les puits sont découplés et les états deviennent liés dans les puits. La barrière se présente à la particule comme une marche de potentiel infinie.

b) Cas du trimer

Le graphe représentant le coefficient de transmission en fonction de l'énergie pour différentes épaisseurs de barrière b montre le même phénomène pour le trimer que celui du dimer.

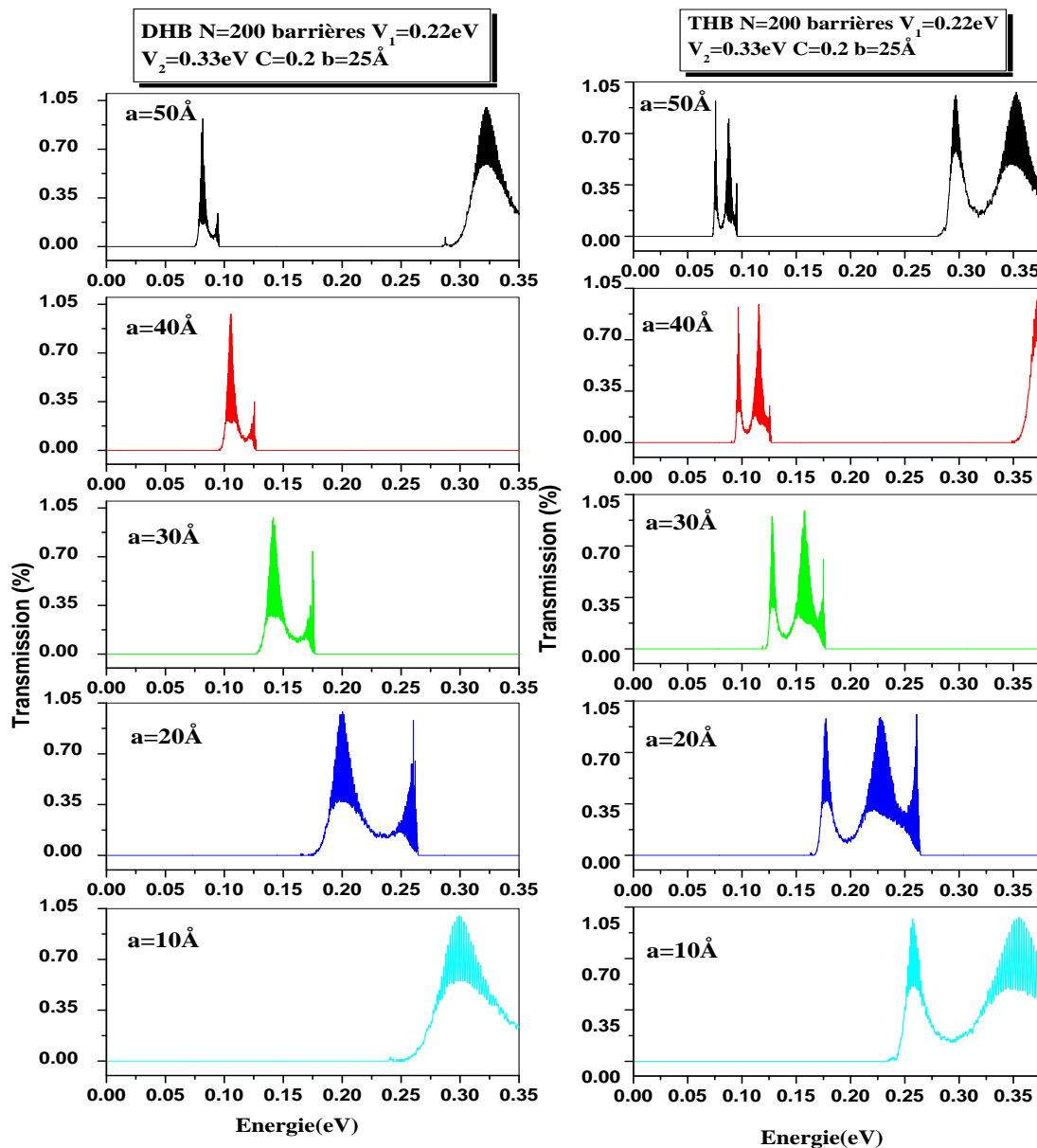


Figure 4.10: Coefficient de transmission en fonction de l'énergie des deux structures en DHB et THB.

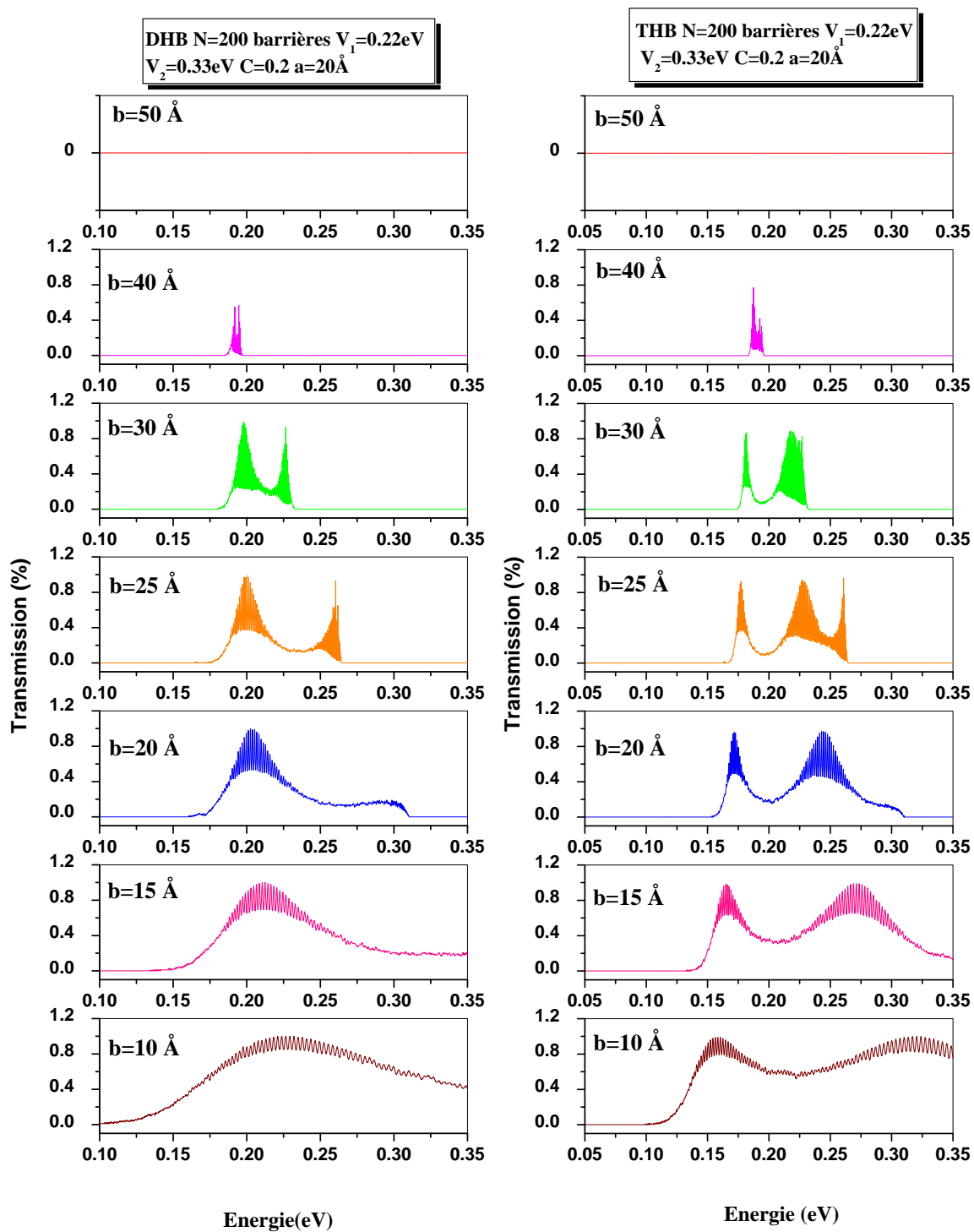


Figure 4.11 Transmission électronique du DHB et THB en fonction de l'énergie pour différentes épaisseurs de barrière.

4.3.4.3 Hauteur de barrière

a) Cas du dimer ($V_1 < V_2$)

Le graphe représenté sur la figure 4.12, montre la variation du coefficient de transmission (T) en fonction de l'énergie (E) de l'électron pour un potentiel constant du dimer $V_2 = 0.33$ eV et à différentes valeurs du potentiel de la barrière V_1 .

Pour toutes les valeurs de V_1 , on observe deux pics séparés jusqu'à où la différence ($V_2 - V_1$) devient approximativement nulle ($V_1 = 0.3$ eV). Ceci peut être expliqué par la disparition de l'effet du désordre où l'électron ne peut pas faire la différence entre les hauteurs de potentiel V_1 et V_2 , il franchit les barrières comme si c'était un système ordonné.

b) Cas du trimer ($V_1 < V_2$)

Les mêmes phénomènes sont observés dans le cas du trimer, c.-à-d. l'effet du désordre va disparaître lorsque la différence $V_2 - V_1$ devient nulle.

c) Cas du dimer ($V_1 > V_2$)

L'étude du coefficient de transmission du DHB en fonction de l'énergie de l'électron à différentes valeurs de potentiel V_2 représentée par la figure 4.13, nous montre:

- la disparition du pic relatif à la cellule dimer aux valeurs de V_2 correspondant à 0.1, 0.15 et 0.18 eV. Ce phénomène peut être expliqué par l'existence de ce pic en dehors de la zone d'intersection des minibandes des deux profils ordonnés de V_1 et V_2 (voir la figure 4.14).
- La présence d'une structure de minibande pour $V_2 = 0.3$ eV due à une différence presque nulle de $V_1 - V_2$.

d) Cas du trimer ($V_1 > V_2$)

Le même phénomène est observé pour la structure en THB (figure 4.15) que celui du DHB (figure 4.13), sauf que pour le trimer nous remarquons la disparition du premier pic résultant de la cellule trimer. Ce phénomène est dû à l'intersection des minibandes des deux profils ordonnés constituant une zone interdite pour l'électron à un tel état (figure 4.16). Ce pic n'apparaît qu'à partir de $V_2 = 0.28$ eV.

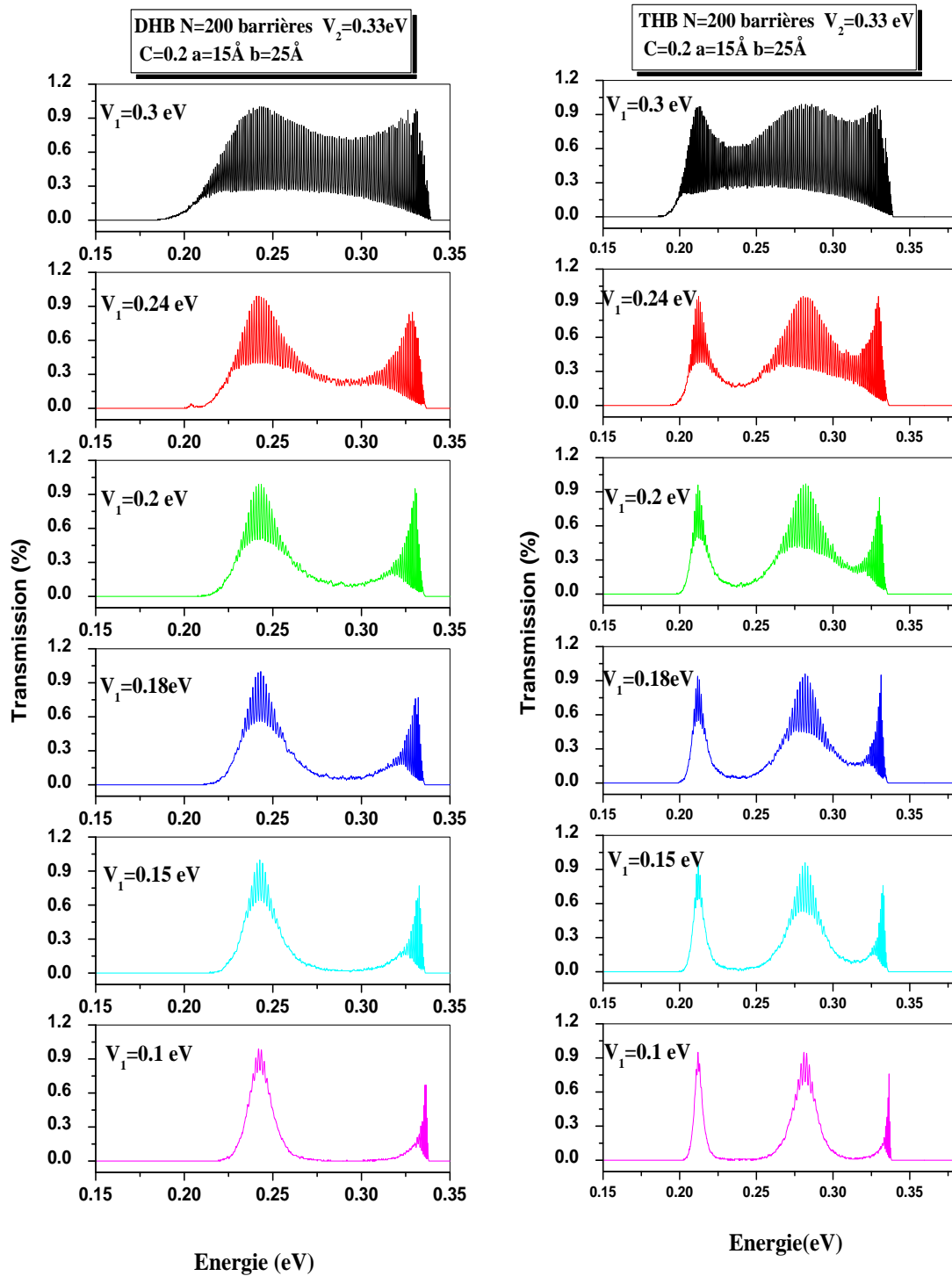


Figure 4.12: Coefficient de transmission des deux profils en DHB et THB en fonction de l'énergie pour différentes valeurs de potentiel de barrière.

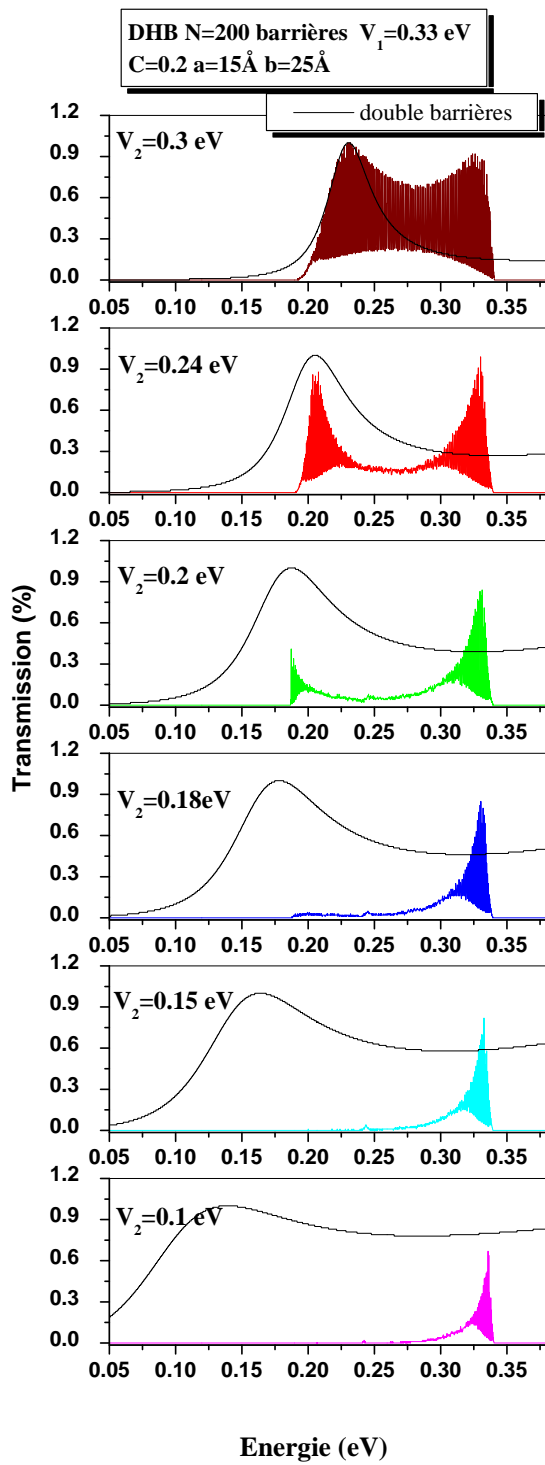


Figure 4.13: Coefficient de transmission en fonction l'énergie pour une structure en DHB.

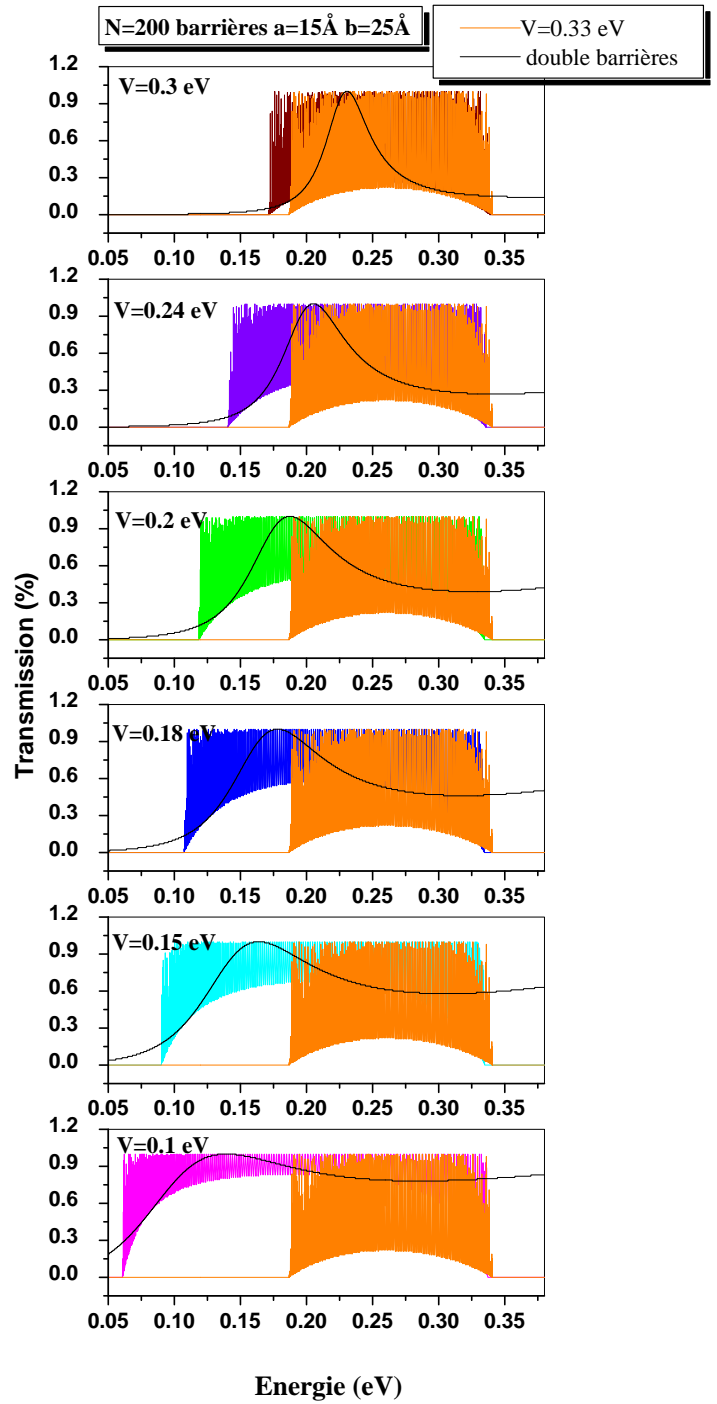


Figure 4.14: Structure de minibande pour deux profils Ordonné.

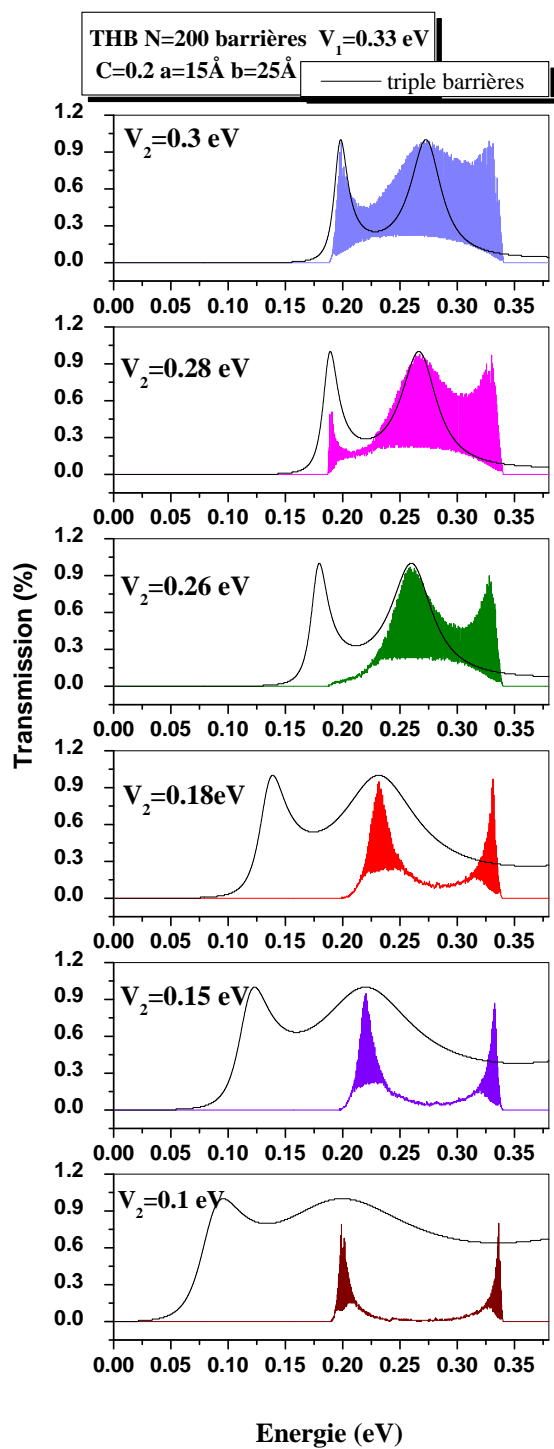


Figure 4.15: Coefficient de transmission du trimer en fonction de l'énergie à différentes valeurs du potentiel.

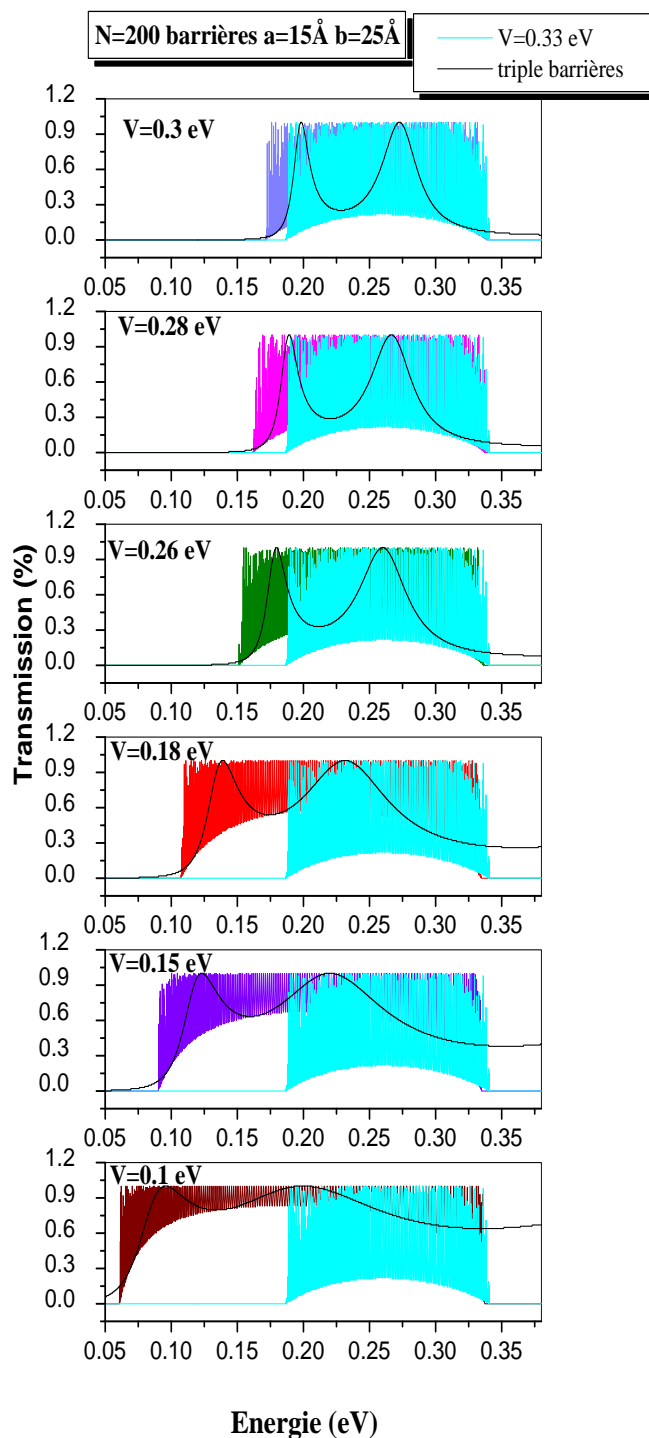


Figure 4.16: Structure de minibande pour deux profils ordonnés.

4.3.5 Exposant de Lyapunov

L'exposant de Lyapunov est donné par la relation :

$$\gamma = -\frac{1}{2N} \ln T \quad (4.6)$$

Où N représente le nombre de barrières et T indique le coefficient de transmission.

Celui ci nous permet de mesurer la nature des états dans un système dynamique.

La figure 4.17 représente la variation de l'exposant de Lyapunov en fonction de l'énergie incidente de l'électron pour des structures DHB et THB. A partir de ces courbes, on remarquant que :

- pour les énergies d'électron égales à E_r , L'exposant de Lyapunov s'annule complètement et tend vers zéro près des énergies de résonance. Puis il tend vers l'infinie dans les régions des états interdits.
- Les énergies de résonance correspondant aux états électroniques étendus pour γ tend vers zéro, c.-à-d. la longueur de localisation tend vers l'infini.
- l'existence d'un pont séparant la phase des états fortement localisés dans les queues de bande et la phase des états délocalisés voir étendus près des énergies de résonances [9-10].

Les études faites sur les structures en DHB présentant une certaine corrélation du désordre montre la disparition de la localisation [11-12]. Cela est en parfait accord avec les résultats de Djelti [13-14].

Remarque

Les mêmes phénomènes ont été observés pour le dimer et le trimer, sauf que ce dernier montre trois états étendus au lieu de deux pour le dimer.

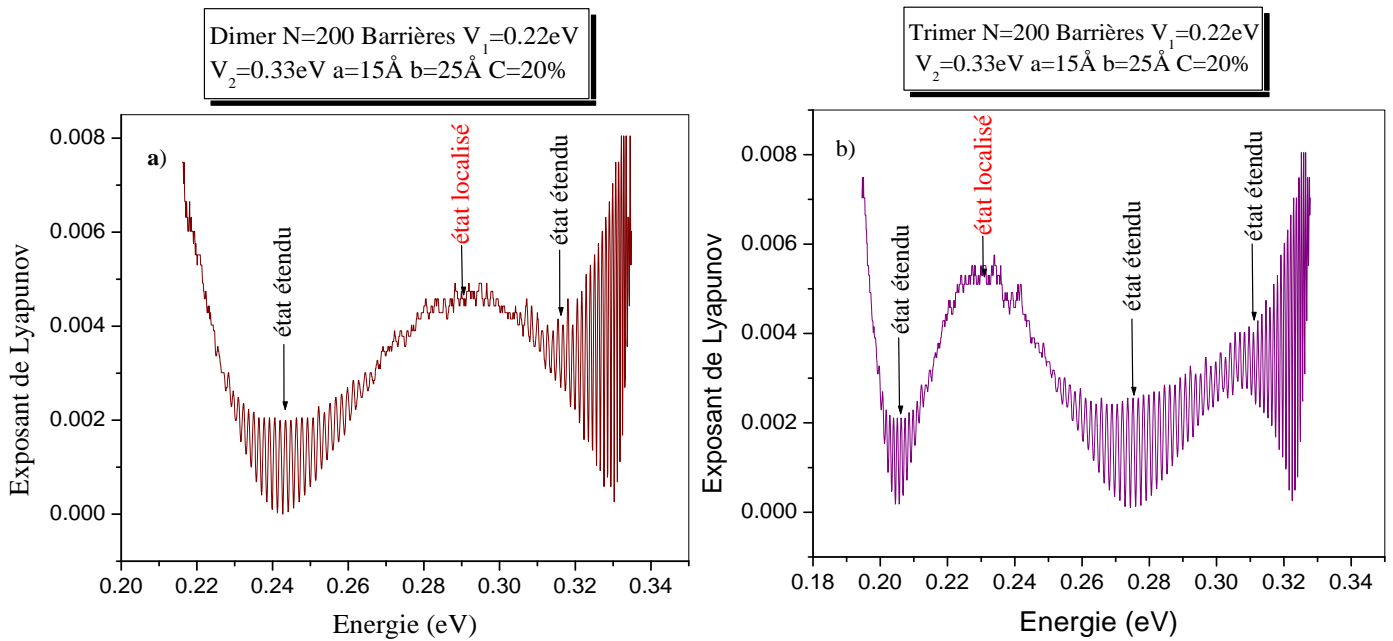


Figure 4.17: Exposant de Lyapunov en fonction de l'énergie pour : a) DHB b) THB.

4.3.6 Longueur d'onde laser

Pour développer des sources laser dans le domaine infrarouge, l'approche la plus courante a été d'étendre le fonctionnement des diodes laser à puits quantiques vers les plus grandes longueurs d'onde. Pour cela, notre travail consiste d'abord à faire varier la valeur du potentiel des barrières V_1 entre 0.1 à 0.3 eV tout en fixant le potentiel V_2 du DHB ou THB à 0.33 eV.

Les valeurs calculées de la longueur d'onde de l'électron à partir de l'équation (4.7) en fonction de V_1 sont schématisées par les figures 4.18.a et 4.18.b.

La longueur d'onde laser est donnée par la relation suivante:

$$\lambda = \frac{hc}{\Delta E} \quad (4.7)$$

Où ΔE est la valeur du saut d'énergie (en joules), C vitesse de la lumière et h constante de Planck.

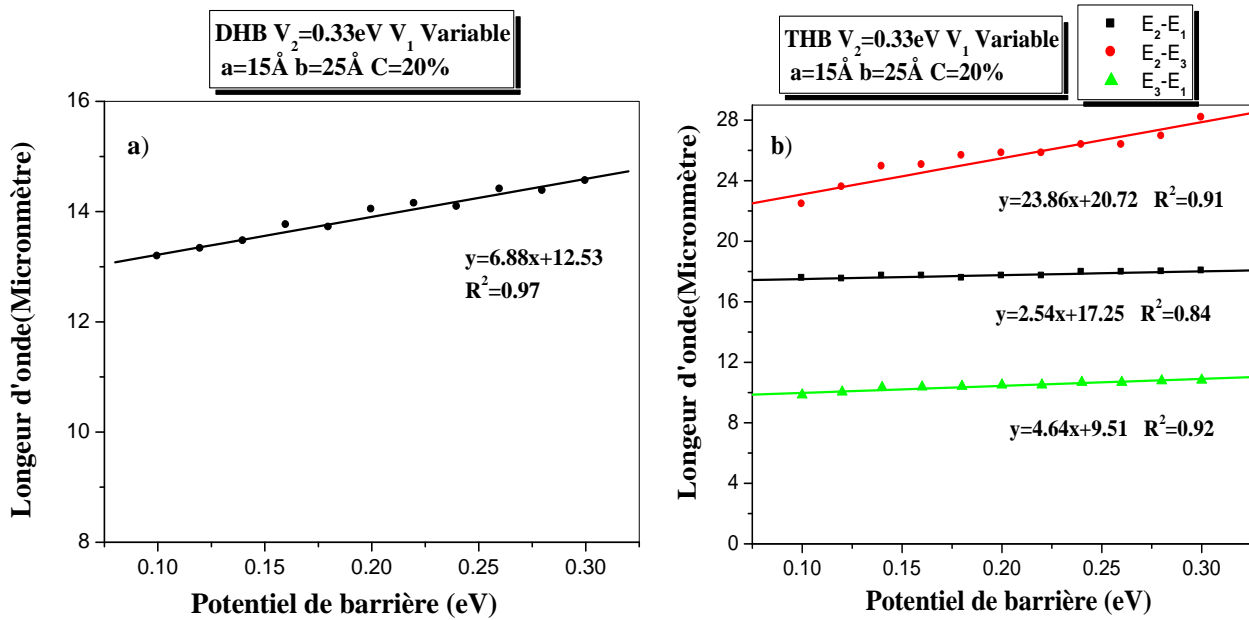


Figure 4.18: Longueur d'onde laser du DHB (a) et THB (b) en fonction de la hauteur de barrière.

Les figures 4.18.a et 4.18.b nous indiquent une augmentation des longueurs d'onde tout en restant dans le moyen infrarouge. Cette augmentation est le résultat d'une diminution de la différence d'énergie entre deux pics de résonance. Ce phénomène est dû à la corrélation du désordre en DHB ou en THB.

Pour $V_1=0.18$ eV et dans le cas du dimer, l'électron émet sur une longueur d'onde de $13.71\ \mu\text{m}$ correspondante au saut de 0.0904 eV, alors que pour la structure en trimer, il émet sur trois longueurs d'onde ($10.42\ \mu\text{m}$, $17.55\ \mu\text{m}$ et $25.65\ \mu\text{m}$) correspondant respectivement aux sauts de (0.1189 eV, 0.0706 eV et 0.0483 eV).

Cette plage de longueur d'onde correspond à celle des photodétecteurs à infrarouge (4 à 20 micromètres) et appareils photo infrarouges (entre 8 et 12 micromètres) [15-19].

Helm et al [20], ont démontré pour la première fois, l'émission des radiations infrarouge de 110, 70 et $50\ \mu\text{m}$, basée sur des structures avec 5 à 6 minibandes dans le puits. En s'inspirant de cette expérience, Choe et al [21] ont proposé la possibilité d'avoir des émissions de l'ordre de 3 à $5\ \mu\text{m}$.

4.3.7 Influence de la tension externe

4.3.7.1 Structure ordonnée

L'application d'une tension externe au bord d'un superréseau ordonné modifie directement le profil de la structure de minibande, ce qui va engendrer une modification des propriétés optoélectroniques du système (figure 4.19).

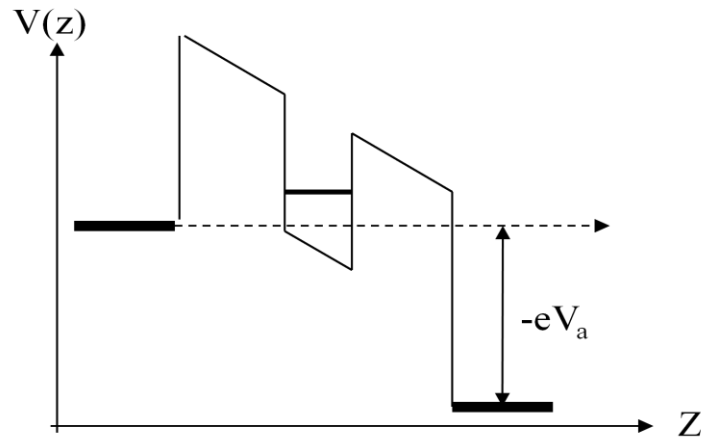


Figure 4.19: Un superréseau soumis à une tension externe V_a

a) Double et triple barrières rectangulaires

L'évolution du coefficient de transmission d'une structure double et triple barrières soumis à une tension appliquée V_a en fonction de l'énergie de l'électron, présentée par la figure 4.20 montre une:

- Translation des pics de résonance, vers les plus basses énergies avec l'augmentation de V_a . Ce résultat est en parfait accord avec celui obtenu par Consuelo et al [22].
- Diminution de l'amplitude de transmission ce qui implique une faible probabilité de transmission par effet tunnel.
- Largeur plus considérable du deuxième pic de la structure triple barrière que celui du premier), ce qui indique que les états lui correspondant sont moins confinés.

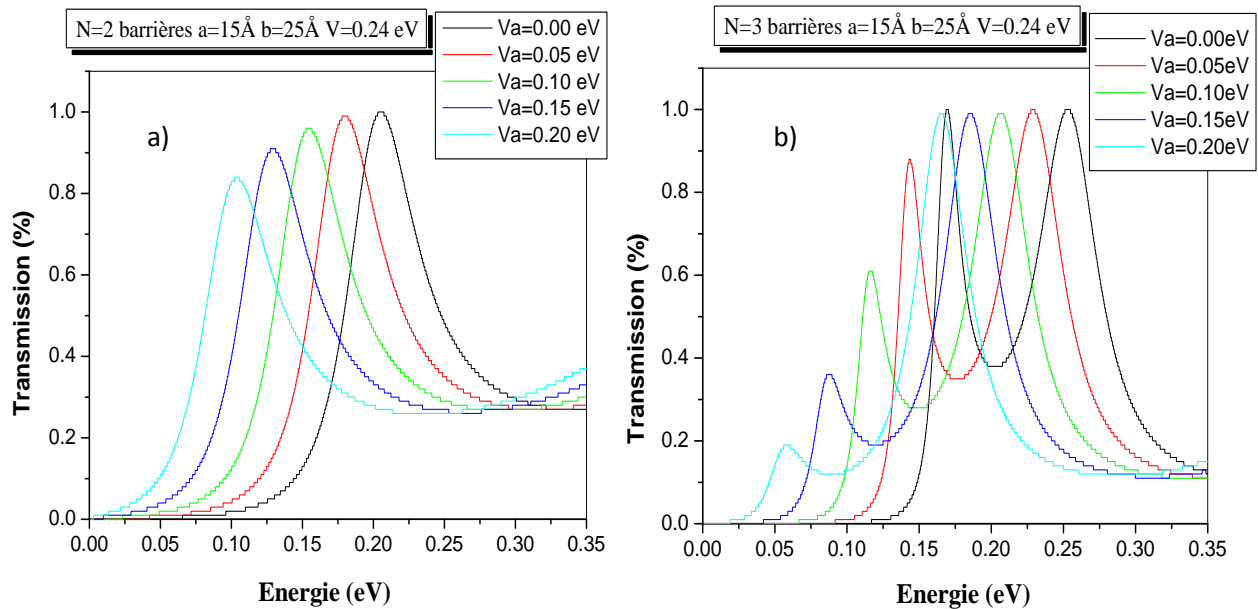


Figure 4.20: Coefficient de transmission en fonction de l'énergie des deux structures en double (a) et triple barrières (b) pour différentes tensions appliquées.

b) Structure à N barrières rectangulaires

La figure 4.21 représente une destruction et une translation des minibandes vers les basses énergies avec l'augmentation de la tension V_a , jusqu'à son annulation complète pour $V_a=0.2$ eV. Cela signifie que le champ électrique localise les fonctions d'onde. Les puits pourront être considérés comme découplés puisque les extensions des fonctions d'onde ne permettent pas le couplage entre niveaux consécutifs (figure 4.22), par contre en absence du champ électrique, les fonctions d'onde sont délocalisées. Les électrons subissent des diffusions associées aux deux puits adjacents.

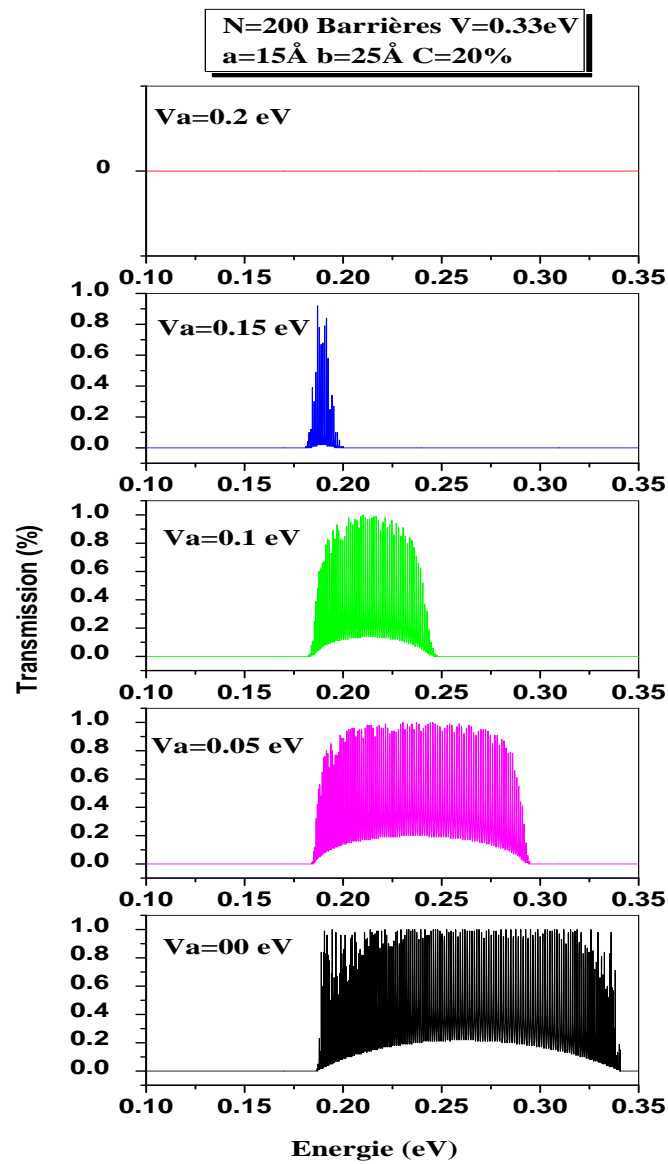


Figure.4.21: Coefficient de transmission d'une structure à N barrières en fonction de l'énergie à différentes tensions appliquées.

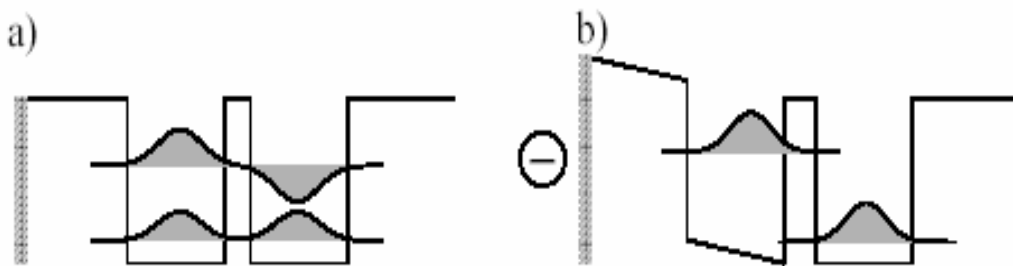


Figure 4.22: Schéma de 2 puits couplés (a) et découplés (b).

4.3.7.2 Structure désordonnée en dimer et trimer

a) $V_1 < V_2$

A travers la figure 4.23, l'effet d'une tension de polarisation appliquée V_a sur des structures à désordre corrélé, en dimer et trimer hauteur de barrière montre:

- Une translation de la minibande vers les basses énergies avec une augmentation de V_a .
- Pour des faibles tensions, la conduction est ohmique et l'électron passe par effet tunnel.
- Pour une valeur critique de V_a , la probabilité tunnel décroît considérablement et la structure de minibande est détruite.

Ceci peut être expliqué par l'effet Stark signifiant la modification des états électroniques sous l'action d'un champ électrique [23-24].

- Un décalage des deux états énergétiques correspondant à deux puits consécutifs rend la transmission tunnel fortement limitée.
- Une disparition du pic de commutation des deux structures désordonnées en Dimer et Trimer. Cela peut être expliqué par l'asymétrie de la structure par effet du champ électrique.
- Des pics de résonance provenant des cellules élémentaires qui résistent à la perturbation extérieure aux faibles valeurs de V_a .

b) $V_1 > V_2$

La transmission électronique des deux profils d'un superréseau en DHB et THB en fonction de l'énergie sous une tension appliquée est présentée par la figure 4.24. Cette dernière montre:

- Une translation vers les basses énergies et une destruction remarquable de la structure de minibande tout en augmentant la tension V_a , jusqu'à elle s'annule complètement pour les valeurs supérieures à 0.2 eV.
- Une disparition du pic de commutation du dimer ou trimer sous l'effet de la tension appliquée responsable de la destruction de la symétrie structurale.
- Une disparition du pic de la cellule élémentaire dû à la non résistance des pics à la perturbation extérieure pour les grandes valeurs de V_a .

En conclusion l'application d'un fort champ externe minimise la corrélation du désordre et rend les puits adjacents découplés, on assiste ainsi à la destruction de la structure de minibande où les états deviennent localisés.

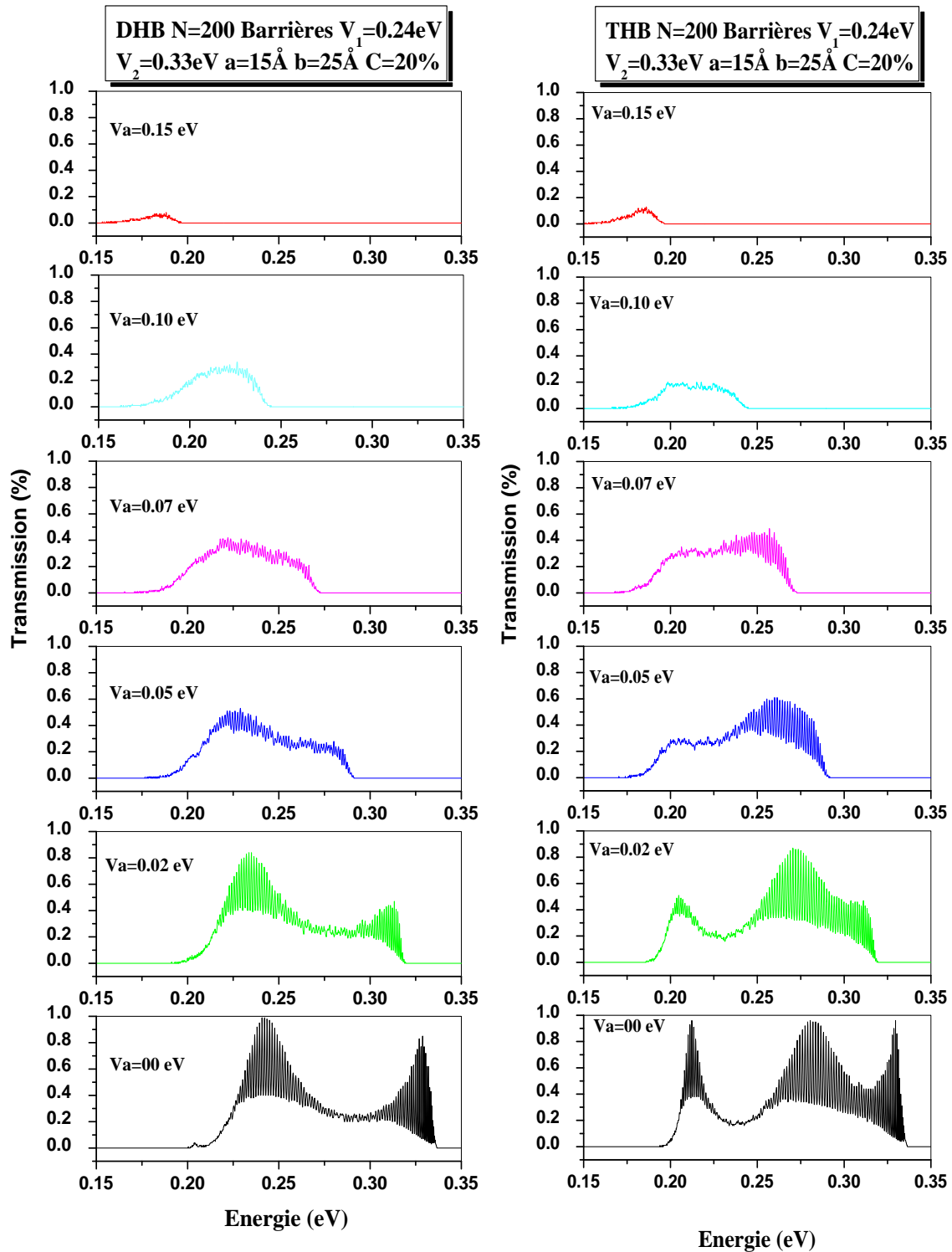


Figure 4.23: Transmission électronique d'un DHB et THB en fonction de l'énergie à différentes tensions appliquées.

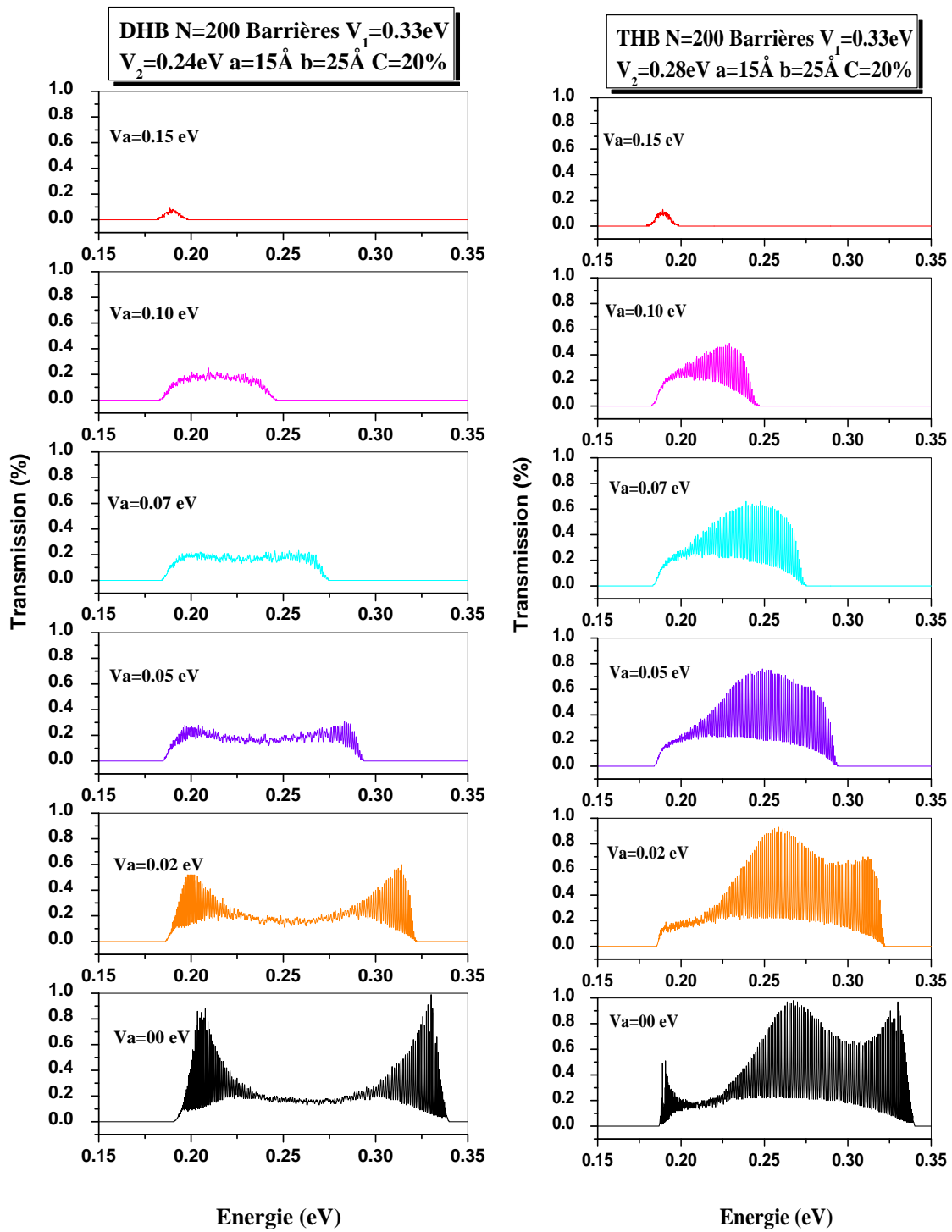


Figure 4.24: Transmission électronique d'un DHB et THB en fonction de l'énergie à différentes tensions appliquées.

4.3.8 Influence de la taille du système

4.3.8.1 Structures ordonnées

La figure 4.25 représente l'effet de la taille du système sur la transmission électronique du superréseau GaAs/Al_xGa_{1-x}As. On remarque que pour la structure ordonnée (N=1000 barrières), le coefficient de transmission pour E=0.328 eV, présente un comportement oscillatoire variant entre 0.1 et 1.

Cette oscillation est pondérée par une enveloppe périodique de période P=2545 Å. L'allure de cette courbe montre clairement que les états correspondants sont des états étendus de Bloch du fait de la périodicité du système. Pour E=0.290 et 0.242 eV l'oscillation varie respectivement de 0.3 à 1 et de 0.4 à 1. Ainsi, la période de l'enveloppe dépend de l'énergie de l'électron incident.

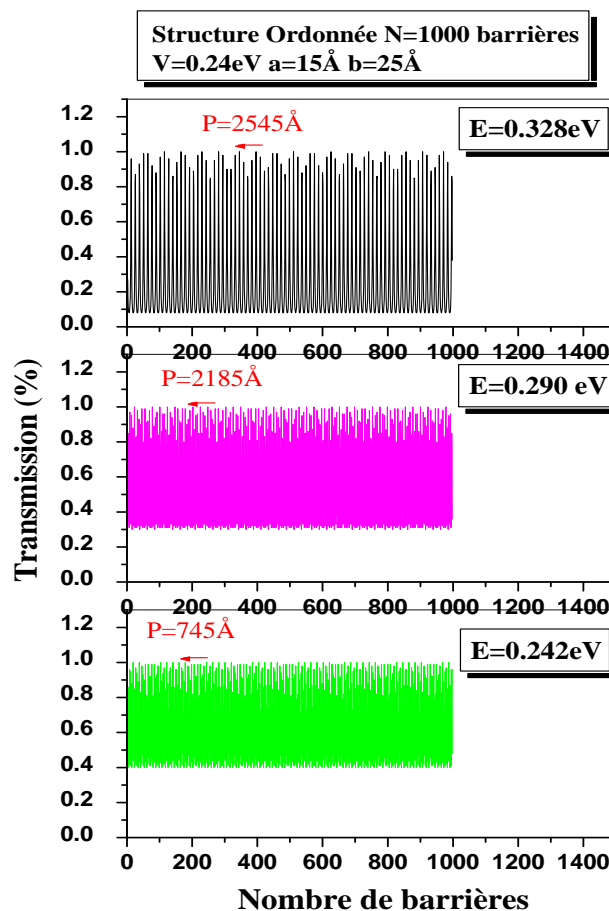


Figure 4.25: Coefficient de transmission d'une structure ordonné en fonction du nombre de barrière.

4.3.8.2 Structures désordonnées

- Cas du dimer

Pour la structure désordonnée en DHB, trois cas sont constatés (figure 4.26) :

1. Pour l'énergie proche de la résonance dimer $E_d=0.242\text{eV}$, la transmission garde son comportement oscillatoire mais sous une enveloppe non périodique d'où l'état électronique correspondant à cette énergie est étendu mais pas de Bloch, cela est dû à la corrélation du désordre [25-26].
2. L'énergie correspondante à la résonance de commutation ($E_C=0.328\text{ eV}$) montre une enveloppe périodique d'où l'état est de Bloch.
3. Pour les énergies loin de la résonance comme l'énergie de la vallée ($E_V=0.290\text{ eV}$), la transmission oscille sous une enveloppe qui s'atténue jusqu'à l'annulation complète pour un nombre de barrières très grand, d'où les états énergétiques sont fortement localisés.

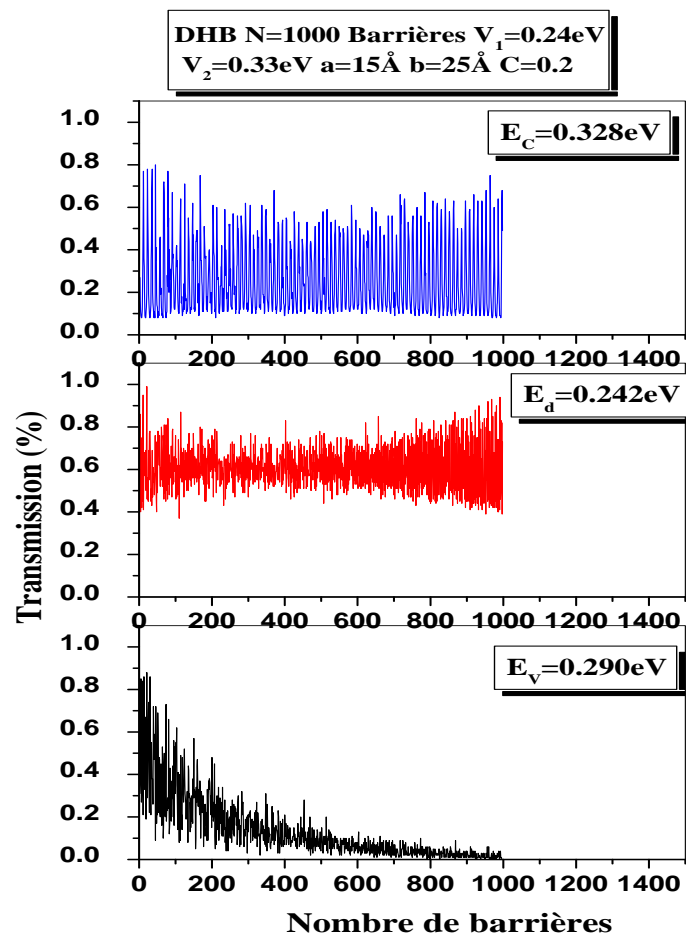


Figure 4.26: Coefficient de transmission d'une structure en DHB en fonction du nombre de barrière.

- Cas du trimer

A travers la figure 4.27, le phénomène observé pour le trimer est le même que celui du dimer, sauf que le premier (THB) présente trois états étendus au lieu de deux. Ces états correspondent aux énergies suivantes:

1. Pour les deux pics de résonance résultant de la cellule élémentaire en trimer, nous avons deux valeurs d'énergie: $E_{T1}=0.212$ eV et $E_{T2}=0.282$ eV ou les états sont étendus mais pas de Bloch.
2. Pour la résonance de commutation entre les deux potentiels structuraux V_1 et V_2 , l'énergie correspondante est $E_c=0.329$ eV ou l'état est de Bloch.
3. Un état fortement localisé est caractérisé par l'énergie de la vallée $E_v=0.238$ eV.

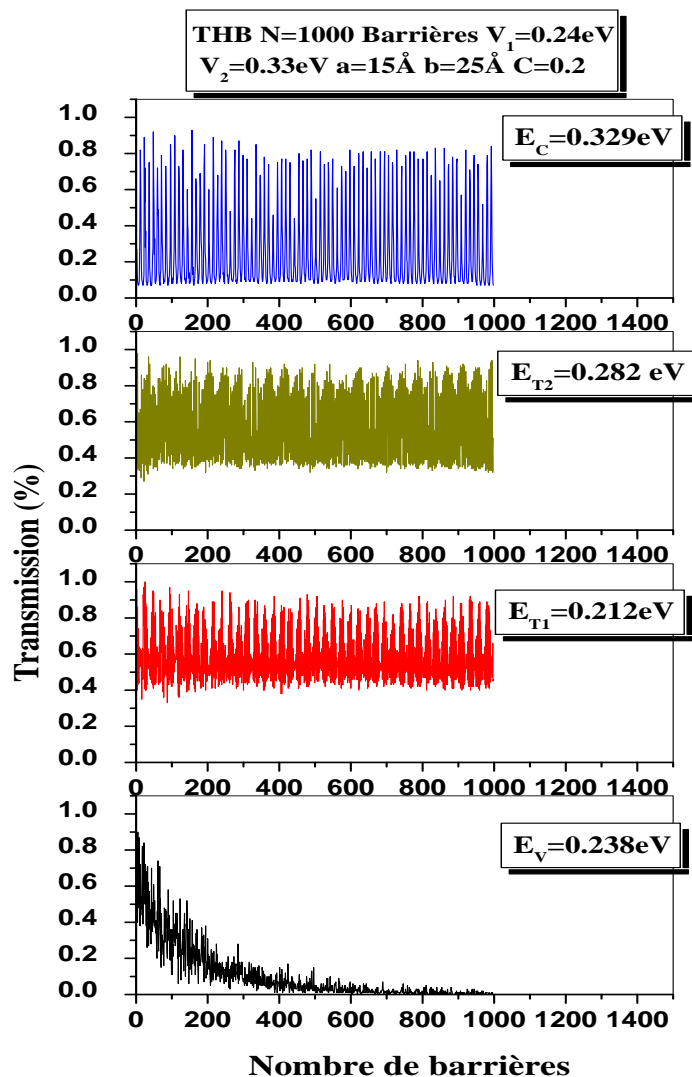


Figure 4.27: Coefficient de transmission d'une structure en THB en fonction du nombre de barrière.

4.4 Superréseau à désordre spatial

4.4.1 Effet de l'épaisseur de barrière

4.4.1.1 Cas du dimer et trimer pour $V=0.24$ eV

Pour les structures en dimer et trimer épaisseur de barrière, la figure 4.28 montre:

- Une disparition du pic correspondant à la résonance de commutation.
- L'existence des pics de résonance provenant de la cellule élémentaire du dimer ou du trimer (voir figure 4.29).
- Une translation des pics de résonance vers les basses énergies quand on augmente la largeur du puits.
- Les pics de transmission deviennent de plus en plus étroits pour le DEB et la distance diminue entre les deux pics de résonance pour le TEB avec l'augmentation de l'épaisseur de la barrière.

Interprétation :

- ❖ La disparition du pic de commutation est due à l'absence de la périodicité du superréseau.
- ❖ La translation des pics vers les basses énergies résulte du confinement des états à l'intérieur des puits (ce phénomène a été observé dans le cas du désordre structural).
- ❖ La limitation des pics en DEB et la diminution de la distance entre les deux pics de transmission pour le TEB ont eu lieu à cause des cellules élémentaires, car l'origine de ces pics est la cellule dimer/trimer où la portée de l'onde électronique diminue avec l'augmentation des épaisseurs des structures en double ou en triple barrière.

4.4.1.2 Cas du dimer et trimer pour $V=0.33$ eV

La figure 4.30 nous montre les mêmes observations pour un DEB possédant un potentiel d'une barrière $V=0.33$ eV que celui ayant $V=0.24$ eV, sauf que pour les profils en TEB ($V=0.33$ eV, $b_1=25\text{Å}$, $b_2=15\text{Å}$ $a=20\text{Å}$ et 15Å), nous remarquons la disparition du deuxième pic de la cellule trimer car ceci se trouve dans une zone interdite qui empêche la transmission électronique.

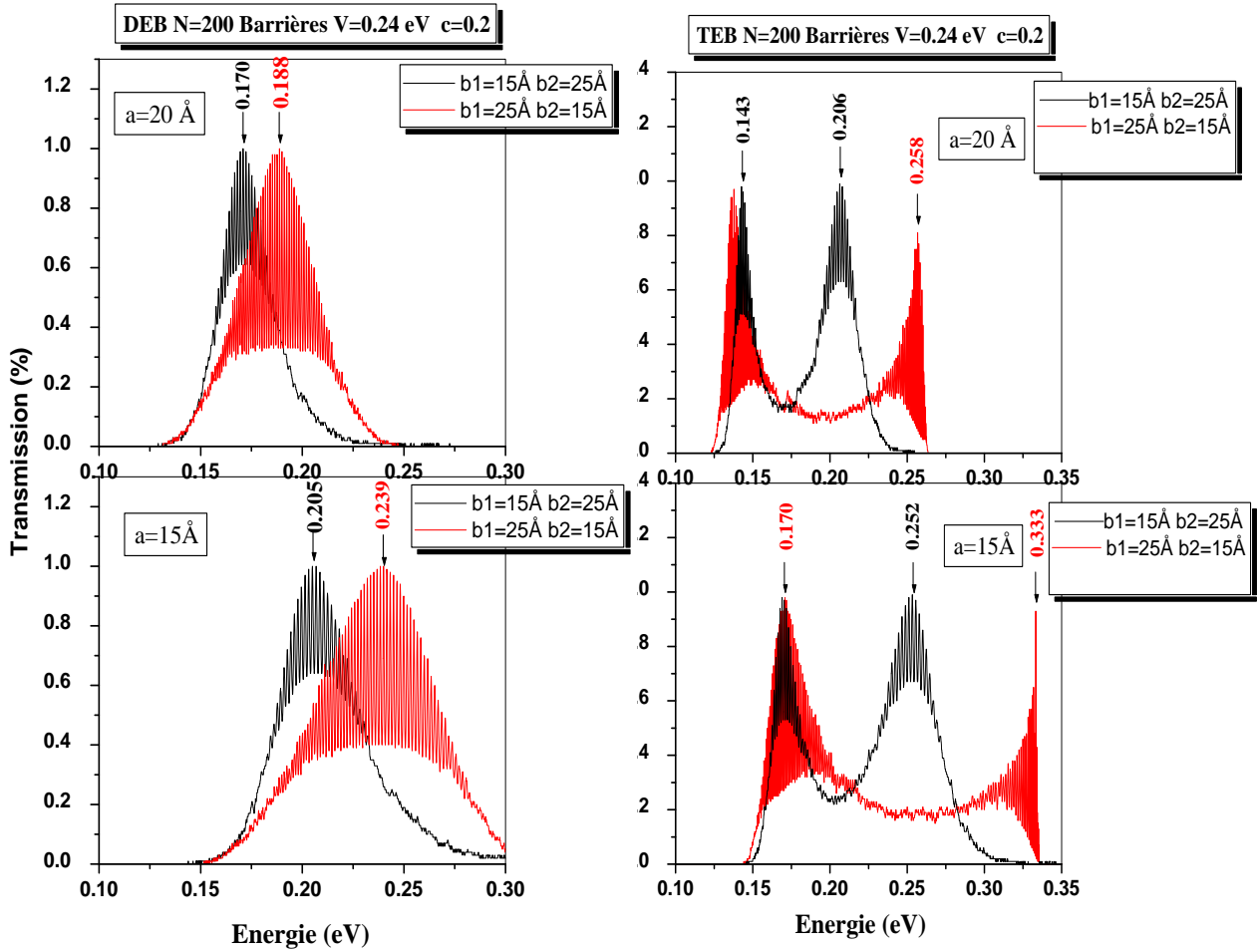


Figure 4.28: Transmission électronique des deux structures en DEB et en TEB.

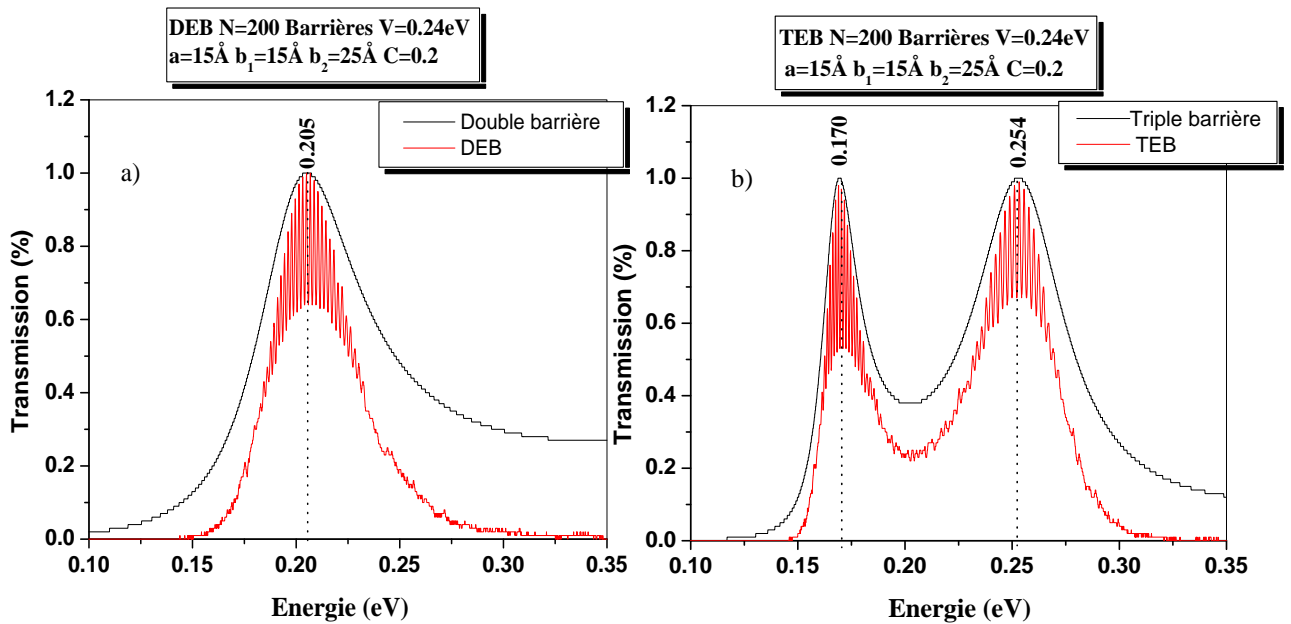


Figure 4.29: Comparaison entre deux structures :

a) en double barrière et en DEB.

b) en triple barrière et en TEB.

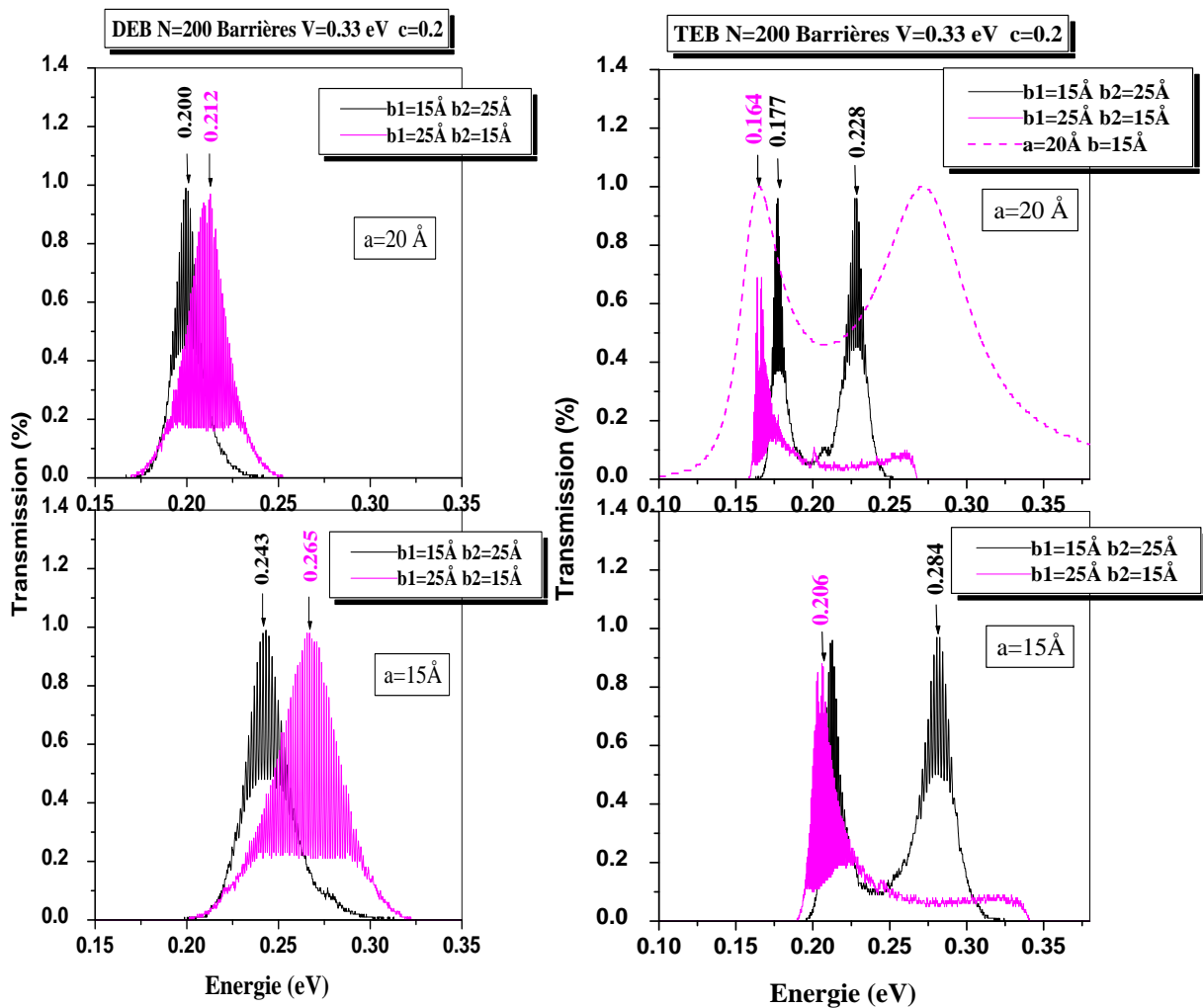


Figure 4.30: Transmission électronique des deux structures en DEB et en TEB.

4.4.2 Effet de la largeur de puits

4.4.2.1 Cas du dimer et trimer pour $V=0.24\text{eV}$

L'effet de la largeur de puits sur transmission électronique des structures en dimer et trimer est tracé sur la figure 4.31, on constate:

- La disparition du pic correspondant à la résonance de commutation.
- L'existence des pics de résonance originaires de la cellule élémentaire pour le dimer.
- La disparition du premier et du deuxième pic correspondant respectivement aux paramètres suivant: $a_1=15 \text{ \AA}$ $a_2=25 \text{ \AA}$ et $a_1=25 \text{ \AA}$ $a_2=15 \text{ \AA}$ pour le trimer. Cette absence des pics est due à leur position en dehors de la zone d'interférence permise.

- D'un côté une translation des pics vers les basses énergies quand on augmente a_2 et de l'autre côté les pics de résonance deviennent plus fines avec l'élévation de b (le même phénomène a été observé dans le cas du DEB et TEB).

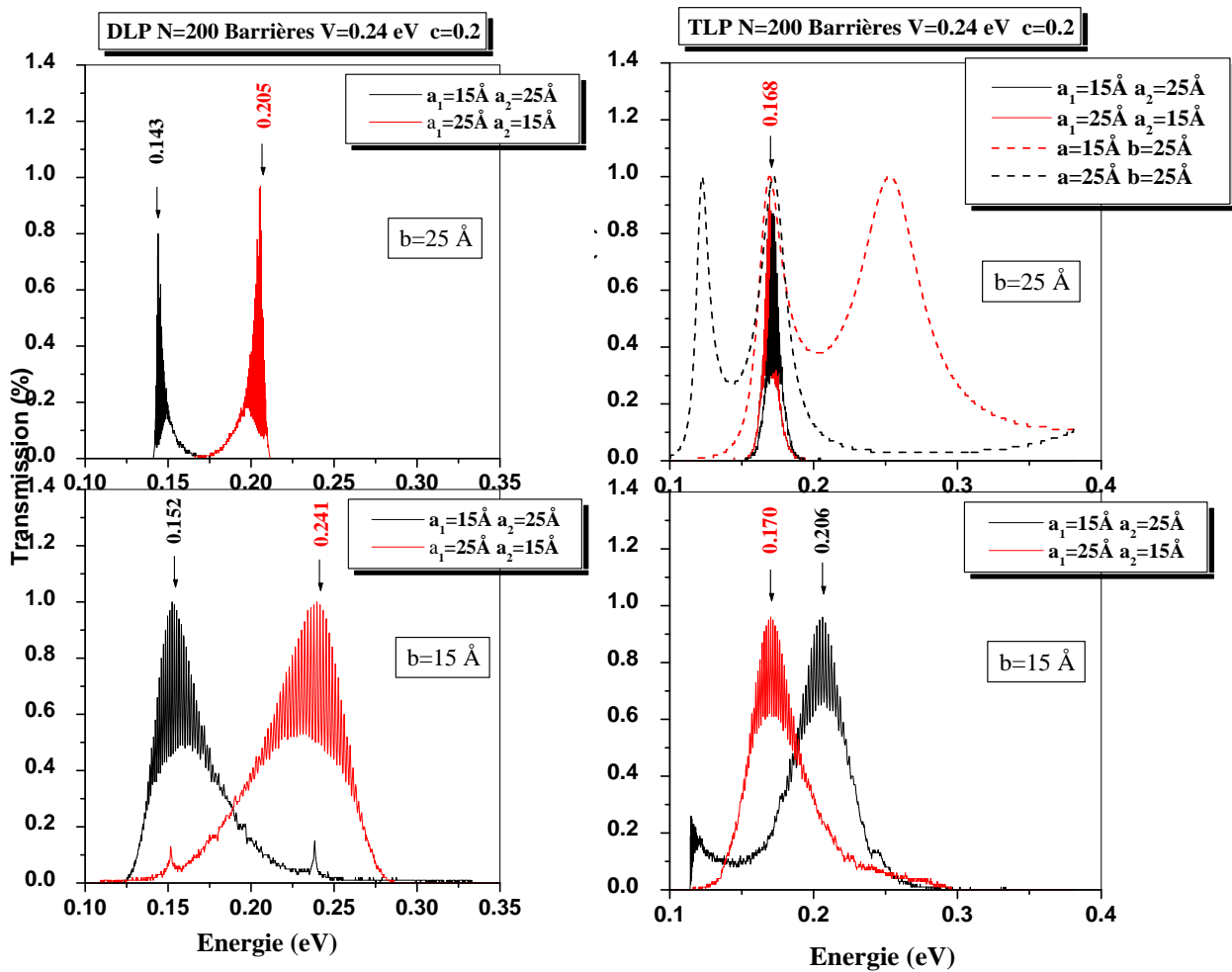


Figure 4.31: Coefficient de transmission en fonction de l'énergie des deux structures en DLP et en TLP.

4.4.2.2 Cas du dimer et trimer pour $V=0.33\text{eV}$

Pour le dimer en observant la disparition des pics de résonance correspondant à épaisseur de barrière $b=25 \text{ \AA}$ par le fait de l'existence de ces pics en dehors de la zone d'intersection des deux profils ordonné correspondant aux paramètres suivants : $a=25 \text{ \AA}$ $b=25 \text{ \AA}$ et $a=15 \text{ \AA}$ $b=25 \text{ \AA}$.

Pour le puits de largeur $a=25 \text{ \AA}$ du trimer contrairement à ce qui prévu, le pic apparait en deuxième position par rapport au puits à largeur $a=15 \text{ \AA}$. Ceci peut être expliqué grâce aux courbes de $T(E)$ relatives aux cellules élémentaires de trimer, car le

premier pic observé de la structure désordonnée est originaire du deuxième pic de la cellule trimer et le deuxième pic est celui du premier (voir figure4.32).

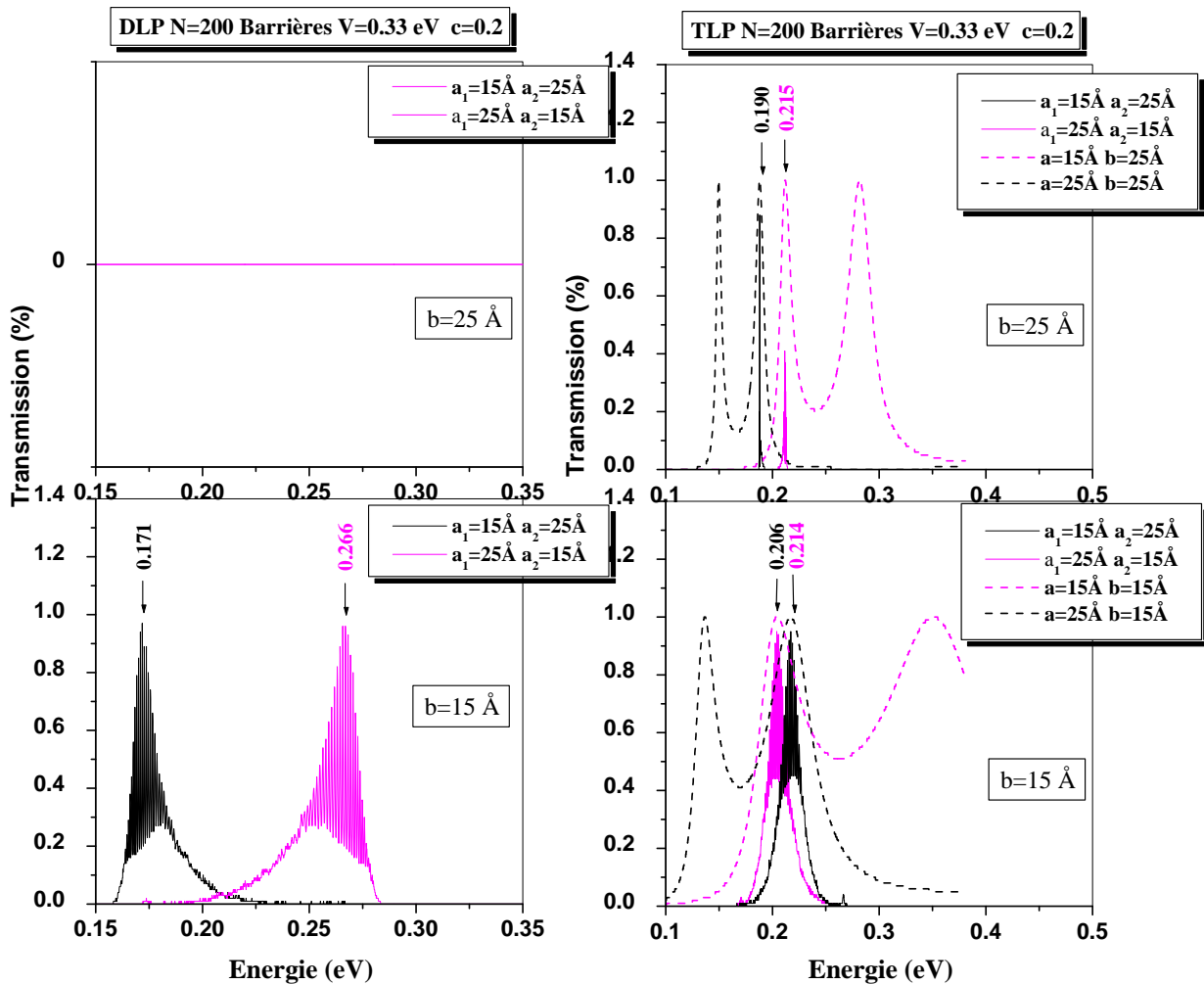


Figure 4.32: Transmission électronique des deux structures en DLP et en TLP.

4.5 Temps de l'effet tunnel résonant

Le temps mis par l'électron pour traverser une barrière de potentiel est appelé temps de l'effet tunnel résonant.

Plusieurs méthodes sont citées dans la littérature pour calculer le temps de l'effet tunnel résonant telles que la technique de l'hamiltonien, la méthode des valeurs propres complexes [27-34] et la méthode de la Lorentzienne que nous avons utilisé.

4.5.1 Méthode de la Lorentzienne

Celle ci est basée sur les valeurs du coefficient de transmission T obtenues à partir du formalisme de la matrice de transfert, où chaque pic de résonance de T est décrit par une Lorentzienne:

$$T(E) = \frac{\Delta E^2}{(E - E_r^2) + \Delta E^2} \quad (4.8)$$

E_r : Energie de résonance

ΔE : Largeur à mi-hauteur du pic de résonance du coefficient T [35].

En vertu du principe d'incertitude d' Heisenberg, le temps de l'ETR est inversement proportionnel à ΔE :

$$t = \frac{\hbar}{\Delta E} \quad (4.9)$$

Cette relation permet donc de calculer le temps de passage de l'électron pour tous les types de profil. Bien que cette méthode (Lorentzienne) présente des résultats permettant l'étude de ces structures, sauf que chaque valeur obtenue a une incertitude considérable. L'erreur relative revient à la détermination de la Lorentzienne $T(E)$ qui correspond réellement au pic.

Les tableaux 4.1 et 4.2, montrent une étude comparative des temps de l'effet tunnel résonnant entre les deux désordres structural et spatial pour les structures en dimer et trimer. Le temps est exprimé en Femtoseconde ($1\text{Fs}=10^{-15}\text{s}$). Ce temps dépend des paramètres structuraux choisis: $a=15\text{\AA}$, $b=25\text{\AA}$, $V_1=0.24$ eV et $V_2=0.33$ eV pour le désordre structural et $a=15\text{\AA}$, $b=25\text{\AA}$ pour $V=0.24$ et $V=0.33$ eV dans le cas du désordre spatial. Ce dernier en épaisseur de barrière compte un temps de passage de l'électron relativement court ($t_d=13.16$ F_s et $t_2=11.75$ F_s) soit pour le dimer ou trimer au potentiel $V=0.24$ eV.

Ceci permet de réaliser des composants électroniques ultrarapides dus à leurs temps de réponse très court.

Tableau 4.1: Comparaison entre les désordres structural et spatial du dimer.

		E_d (eV)	E_c (eV)	ΔE_d (eV)	ΔE_c (eV)	t_d (Fs)	t_c (Fs)
Désordre structural		0.241	0.329	0.040	0.038	16.45	17.38
Désordre spatial $V=0.24$ eV	DLP	0.205	-	0.014	-	47	-
	DEB	0.206	-	0.050	-	13.16	-
Désordre spatial $V=0.33$ eV	DLP	-	-	-	-	-	-
	DEB	0.243	-	0.030	-	22	-

Tableau 4.2: Comparaison entre les désordres structural et spatial du trimer.

		E_{T_1} (eV)	E_{T_2} (eV)	E_C (eV)	ΔE_{T_1} (eV)	ΔE_{T_2} (eV)	ΔE_C (eV)	t_1 (Fs)	t_2 (Fs)	t_c (Fs)
Désordre structural		0.211	0.280	0.330	0.016	0.038	0.012	41.12	17.31	54.83
Désordre spatial $V=0.24$ eV	TLP	0.168	-	-	0.040	-	-	16.45	-	-
	TEB	0.170	0.252	-	0.034	0.056	-	19.35	11.75	-
Désordre spatial $V=0.33$ eV	TLP	0.215	-	-	0.0025	-	-	263.2	-	-
	TEB	0.213	0.284	-	0.013	0.025	-	50.61	26.32	-

On peut conclure que les états électroniques originaires des cellules élémentaires sont présents quelque soit le type du désordre (structural ou spatial) mais à condition que les pics relatifs doivent exister dans la zone d'intersection des deux profils ordonnés. Par contre les états de commutation disparaissent dans le cas du désordre spatial par le fait de l'absence de la périodicité du superréseau.

Références

- [1] J.C.Flores, *J.Phys.Condens.Matter*, **1** 8471(1989).
- [2] K.Senouci, *J.Phys.Condens.Matter* **19** 076202 (2007).
- [3] V.Bellani, M.Amado E.Diez. C.Koerdt, M.Potemski and R.Hey, arXiv:070162.v1 Cond-mat.mes-hall,(2007).
- [4] F.Dominguez-Adame, V.A.Malyshev, *Am.J.Phys*,72 227(2004).
- [5] S.Bentata, *Superlattices and Microstructures*, **37** 297 (2005).
- [6] V.Bellani, E.Diez, R.Hey, L.Toni, L.Tarricone, G.B. Parravicini, F.Domínguez-Adame, R. Gómez-Alcalá,*Phys.Rev.Lett*, **82** 2159(1999).
- [7] S.Bentata, B.Ait Saadi, H.Sediki, *Superlattices and Microstructure*, **30** 300(2001).
- [8] G.Bastard, J.B.Leuse, R.Ferreira, and P.Voisin, *Superlattices and Microstructures* **6**, 77(1989).
- [9] R.Djelti, Z.Aziz, S.Bentata, *FIZIKA A* **154**,219-226(2006).
- [10] L.Zhenxing and Z.Weiyi *Phys.Rev.B* **75**, 064207 (2007).
- [11] E.Diez, A.Sanchez, F.Dominguez-Adame, *Solid State Electronics* **40** 433 (1996).
- [12] V.Bellani, E.Diez, A.Parisini, L.Tarrione, R.Hey,G. B. Parravicini, F.Dominguez-Adame,*Physica*, **A7823**(2000).
- [13] R.Djelti, S.Bentata, Z.Aziz, American Institute of Physics AIP conference proceedings, Nanotechnology and its applications, 929, 6-11, (2007).
- [14] R.Djelti, S.Bentata, Z.Aziz, *Lebanese Science journal*, vol.8, N° 01, (2007).
- [15] S. Smith, L. C. Chiu, S. Margalit, A. Yariv, and A. Y. Cho, *J. Vac. Sci. Technol. B* **1**, 376 (1983).
- [16] D. Coon and R. P. G. Karunasiri, *App. Phys. Lett.* **45**, 649 (1984).
- [17] I.Vurgaftman, C.L. Felix, W.W. Bewley, D.W. Stokes, R.E. Bartolo, J.R Meyer, «Mid-infraredW lasers », *Phil. Trans. Roy. Soc. Lond. A* **359**, p. 489, (2001).
- [18] J.Faist, F.Capasso, D. L. Sivco, C.Sirtori, A.L.Hutchinson, A. Y.Cho, « Quantum Cascade Laser », *Science* **264**, 553, (1994).
- [19] R.Teissier, D. Barate, A.Vicet, C.Alibert, A.N.Baranov, X.Maracadet, C.Renard, M.Garcia, C.Sirtori, D.Revin, J.Cockburn, « Room temperature operation of InAs/AlSb quantum cascade lasers », *Appl. Phys.Lett.* **85**, (2), 167, (2004).

- [20] M. Helm, P. England, E. Colas, F. De Rosa, and S. J. Allen, Jr. *Phys. Rev. Lett.* **63**, 74 (1989).
- [21] J. W. Choe, A. G. U. Perera, M. H. Francombe, and D. D. Coon, *App. Phys. Lett.* **59**, 54 (1991).
- [22] M. Consuelo, A. Lima, G. A. Farias, and V. N. Freire, *Superlattices and Microstructures* **17**, 235 (1995).
- [23] J. S. Walker, J. Gathright, *Amer. J. Phys.* **62** 408 (1994).
- [24] I. Gomez, F. Dominguez-Adame, E. Diez, *Phys. Rev. B*, **324** 238 (2002).
- [25] W. Zhang and S. E. Ulloa, *Phys. Rev. B* **74**, 115304 (2006).
- [26] T. Kaya, *Eur. phys. j, B: Cond. Matter. phys*, vol.55, no1, (2007).
- [27] T. G. C. Sollner, W. D. Goodhue, P. E. Tannanwald, C. D. Parker, and D. D. Peck, *App. Phys. Lett.* **43**, 588 (1985).
- [28] Luryi, *App. Phys. Lett.* **47**, 490 (1985).
- [29] T. B. Bahder, C. A. Morrison, and J. D. Bruno, *App. Phys. Lett.* **51**, 1089 (1987).
- [30] Zou, J. Rammer, and K. A. Chao, *Phys. Rev. B* **24**, 15 912 (1992).
- [31] Landauer and T. Martin, *Rev. Mod. Phys.* **66**, 217 (1994)
- [32] H. Hauge and J. A. Stonvneng, *Rev. Mod. Phys.* **61**, 917 (1989).
- [33] Jauho, in *Hot Carriers in Semiconductor Nanostructures*, edited by J. Shah (Academic, New York, (1992).
- [34] Juang, *Phys. Rev. B* **44**, 10706 (1991).
- [35] S. S. Allen and S. L. Richardson, *Phys. Rev. B* **50**, 11 693 (1994).

Conclusion générale

Cette thèse présente une étude qualitative sur la nature des états électroniques dans les superréseaux à désordre corrélé. Après avoir présenté les méthodes numériques de calcul utilisées, nous avons abordé l'étude de la transmission électronique dans les systèmes ordonnés. Les résultats trouvés montrent que chaque puits de potentiel correspond à un état permis de transmission pour les structures en double et triple barrière rectangulaire. Pour une structure à N barrières on obtient $N-1$ pics très proches les uns des autres correspondants à $N-1$ puits, ce qui donne naissance à une structure de minibande permise.

Les structures désordonnées ont été étudiées pour les deux types de désordre (structural et spatial). Le désordre structural consiste à introduire par doublet et triplet des barrières de hauteur V_2 différentes de V_1 , distribuées aléatoirement dans la structure du superréseau. Contrairement au désordre structural et dans le cas du désordre spatial on joue uniquement sur les largeurs des puits ou bien l'épaisseur de barrières.

L'évolution du coefficient de transmission en fonction de l'énergie électronique pour une structure dimer hauteur de barrière présente une structure de minibande à deux pics de résonance, l'un est dû à la cellule dimer et l'autre à la commutation entre les deux potentiels V_1 et V_2 . Une démonstration analytique utilisant les commutateurs quantiques est présentée comme preuve théorique de l'origine de cet état correspondant à ce pic. La structure en trimer hauteur de barrière montre une structure de minibande à trois pics de résonance, les deux premiers sont dûs à la cellule élémentaire trimer et le troisième résultant de la commutation des deux potentiels V_1 et V_2 . Ces résultats sont en parfait accord avec ceux trouvés par Dominguez, Bellani et Djelti.

L'élévation de la largeur de puits influe sur la transmission électronique dans les superréseaux désordonnés en provoquant une translation des pics de résonance vers les basses énergies à cause de l'effet de confinement des états électroniques à l'intérieur du puits du dimer ou trimer.

L'augmentation de l'épaisseur de la barrière b fait rétrécir la structure de la minibande vers le centre jusqu'à sa disparition complète à des valeurs dépassant 50 \AA du fait que b est supérieur à la longueur d'onde λ de l'électron. Dans cette situation les puits

sont découplés et les états deviennent liés dans les cas du dimer et trimer. La barrière se présente à la particule comme une marche de potentiel infinie. L'effet de la hauteur de la barrière sur la transmission a été étudié dans deux cas :

- Pour $V_1 < V_2$, tous les pics de résonance relatifs au dimer ou le trimer apparaissent jusqu'à ce que la différence ($V_2 - V_1$) devienne approximativement nulle, dans ce cas, ces pics se transforment en minibande, du fait que l'électron ne peut pas faire la différence entre les hauteurs de potentiel V_1 et V_2 . Il franchit les barrières comme si c'était un système ordonné
- Pour $V_1 > V_2$, on a constaté pour quelques valeurs de V_2 , la disparition des pics correspondants à la cellule du (dimer/trimer) du fait que la région d'intersection des minibandes du réseau V_1 et V_2 n'est pas suffisamment large pour supporter l'existence de tels types de pic.

Les résultats trouvés pour ces structures désordonnées montrent la présence de trois types d'états électroniques:

- Un état fortement localisé au bord de la bande.
- Un état étendu pas de Bloch (délocalisé), est dû à la cellule élémentaire (Dimer/Trimer) introduite.
- Un état étendu de Bloch résultant à la commutation des deux potentiels V_1 et V_2 . Les états de commutation disparaissent dans le cas du désordre spatial par le fait de l'absence de la périodicité du superréseau.

Ce travail a donc permis de confirmer les résultats expérimentaux et théoriques trouvés respectivement par Bellani et Djelti montrant la présence des états étendus (délocalisés) dans les systèmes désordonnés unidimensionnels. Celle-ci est en contradiction totale avec ce qui a été prédit par Anderson.

Les structures étudiées de GaAs- $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ possédant un désordre corrélé montrent une seule émission pour le dimer et trois pour le trimer, ce qui permet d'envisager des dispositifs très prometteurs dans la conception des lasers à longueur d'onde contrôlable dans le moyen infrarouge.

L'application d'un faible champ électrique fait disparaître l'état de commutation, cela est dû à la destruction de la symétrie provoquée par la diminution linéaire du profil

de potentiel. L'augmentation du champ externe minimise la corrélation du désordre et rend les puits adjacents découplés, où les états deviennent très localisés.

Finalement, par une étude comparative entre les deux types de désordre structural et spatial, nous avons montré que le temps de l'effet tunnel dépend des paramètres structuraux. Ce temps nous permet de réaliser des composants optoélectroniques ultrarapides dus à leurs temps de réponse très court.

