



**MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET DE LA
RECHERCHE SCIENTIFIQUE**

Université Abdelhamid Ibn Badis de Mostaganem

Faculté Des Sciences Exactes et de l'Informatique

Domaine des Sciences de la Matière

Département de physique

Projet de Fin d'Etudes

Pour obtenir le diplôme de Master en Physique

Option : Modélisation et Caractérisation des Matériaux

Présenté par

MOULAI Amina

Sujet :

**INFLUENCE DE L'INTERACTION ELECTRONIQUE SUR LES
PROPRIETES DE TRANSMISSION D'UN SUPERRESEAU**

Soutenu le : 01/06/2016

Devant le jury composé de :

Mr A. Aibout	Pr	Université de Mostaganem	Président
Mme H. Hentit	MCA	Université de Mostaganem	Examineur
Mlle Z.F Meghoufel	MCB	Université de Mostaganem	Encadreur

Année Universitaire: 2015/2016

Dédicaces

Je dédie ce modeste travail :

A mes très chers parents

A mes frères et mes sœurs

A mon mari

A Ma tante

Aux étudiants de la promotion 2^{ème} année master physique 2015/2016

Remerciements

Nous remercions ALLAH le tout puissant, pour le courage, la volonté et la patience pour mener à terme mon travail.

Je tiens à remercier sincèrement la directrice de ce mémoire Mlle Z.F. Meghoufel Maitre de conférences à l'université Abdelhamid Ibn Badis, Facultés des sciences exactes et de l'informatique, Mostaganem, Je lui exprime mes vifs remerciements pour l'aide constante durant la préparation de ce travail, J'avoue que j'ai eu le plaisir de travailler avec elle.

J'exprime ma profonde reconnaissance à Mr. A. Aibout, et Mme H. Hentit Maitres de conférences à l'université de Mostaganem, d'avoir accepté de juger mon travail.

Je remercie les membres de ma famille pour leurs encouragements.

Je remercie également mes enseignants et professeurs, ainsi qu'à tous mes amis et collègues.

Je tiens à remercier sincèrement, tous les membres de la faculté des sciences exactes et de l'informatique.

Table de matière

INTRODUCTION GENERALE.....	1
----------------------------	---

Chapitre I : **SEMICONDUCTEURS ET SUPERRESEAUX**

I.1.INTRODUCTION.....	3
I.2. LES SEMICONDUCTEURS.....	4
I.2.1.Définition.....	4
I.2.2.Les structures cristallines des semiconducteurs III-V.....	5
I.2.3.Les structures de bandes des semiconducteurs III-V.....	6
I.2.3.1 Transition directes et indirectes.....	7
a- Transition direct.....	7
b- Transitions indirectes.....	7
I.2.3.2. Strucure de bande du GaAs.....	8
I.3.SUPERRESEAU.....	9
I.3.1.Historique des superréseaux.....	9
I.3.2.Définition d'un superréseau.....	9
I.3.3.Technique de fabrication : l'épitaxie par jet moléculaire.....	11
I.3.4. Types de superréseaux.....	11
I.3.4.a. Superréseau à puits et à barrière rectangulaire.....	11
I.3.4.b.Superréseaux polytypes	12
I.3.4.c. Superreseau à dents de scie	12
I.3.4.d. Superreseau quasi-périodique	12
I.3.5.Classes des superréseaux.....	13
I.3.6.Transmissions dans superréseaux.....	14
-Effet tunnel résonant.....	14
I.3.7. Les applications.....	16
a-Laser à cascade quantique.....	16
b-Diode à effet tunnel.....	18
c- Diode laser.....	19
I.4. CONCLUSION.....	20

Chapitre II :

APPROXIMATIONS, MODELES ET FORMALISMES : APPLICATION AU CAS NONLINEAIRE

II.1.INTRODUCTION.....	21
II.2.APPROXIMATION DE BASE.....	21
II.2.1.Approximation de la masse effective(AME).....	21
II.2.1.Condition de continuité de Bastard.....	22
II.3.Calcul du coefficient de transmission.....	23
II.3.1.Modèle de la matrice de transfert.....	24
II.3.1.a. Matrice de transfert pour une barrière rectangulaire.....	24
II.3.1.b. Matrice de transfert pour un système à deux barrières.....	27
II.3.2.Méthode approchée : formalisme des ondes planes.....	29
II.4.L'interaction électron-électron.....	30
II.4.1.Equation de Schrödinger non linéaire.....	31
II.4.2. Notion de potentiel effectif.....	32
II.5.CONCLUSION.....	32

Chapitre III :

RESULTATS ET DISCUSSIONS

III.1.INTRODUCTION.....	33
III.2.NATURES DES ETATS DANS UN SOLIDE CRISTALLIN.....	33
III.2.1.Etats étendus.....	33
III.2.2.Etats localisés et délocalisés.....	34
a-localisation des états électroniques.....	35
b-Délocalisation des états électroniques.....	35
III.3.Résultats et discussions.....	35
III.3.1.Etude de structure dans le cas statique.....	35
a-Sans l'influence de l'interaction électronique.....	35
b- Avec l'influence de l'interaction électronique.....	38
III.4.CONCLUSION.....	39
CONCLUSION GENERALE.....	40
REFERENCES.....	41

Introduction générale

La recherche de nouveaux matériaux aux propriétés physiques ou chimiques spécifiques est un enjeu majeur de l'industrie actuelle, et ce, quels que soient les domaines d'application considérés (micro-électronique, énergétique, etc.). La conception et la fabrication des matériaux nouveaux aux propriétés souvent étonnantes (alliages spéciaux, matériaux composites très légers et très résistants, cristaux liquides, semiconducteurs...) constituent un domaine très actif de la recherche et de la technologie moderne.

La clé de cette révolution technologique est les semiconducteurs, matériaux avec une capacité de conduction entre de bons conducteurs (métaux) et des isolants.

De tels matériaux font l'objet d'une activité de recherche très intense depuis plusieurs décennies. Les plus répandus sont les hétérostructures semiconducteur formées par l'assemblage de fines couches de matériaux semiconducteurs dont l'épaisseur et la composition sont ajustées en fonction des propriétés électroniques ou optiques recherchées [1].

Depuis les premiers travaux en 1970 de L. Esaki et R. Tsu [2] sur les couches minces semiconductrices (GaAs, AlAs) et grâce à l'évolution de la nanotechnologie, la recherche fondamentale sur les propriétés de ces semiconducteurs et ses applications pour les hétérostructures semiconductrices III-V a bien avancé. La transmission électronique par les porteurs de charge dans la direction de croissance épitaxiale sont des domaines d'investigations prisés, en particuliers, pour les cas des interactions entre particules (électron-électron, électron-phonon) pour lesquelles diverses techniques mathématiques ont été développées.

Dans ce manuscrit, nous nous sommes penchés sur les problèmes d'interaction électroniques dans les structures quantiques à puits et à barrières de potentiel.

Ce mémoire comporte les chapitres suivants:

Le premier chapitre introduit des généralités sur les semiconducteurs. Nous exposons les intérêts, le principe de fonctionnement des hétérostructures III-V, essentiellement, le GaAs/ AlGaAs. La technique d'élaboration des structures superréseau semiconducteurs a été présentée. Nous exposons également les différents types et classes de superréseaux, leurs propriétés de transport via l'effet tunnel résonnant, ainsi que leurs domaines d'application.

Le deuxième chapitre porte sur la résolution de l'équation de Schrödinger utilisant les approximations de base, à savoir, l'approximation de la masse effective et les condition de continuité de Bastard [3], nous exposons aussi le calcul du coefficient de transmission à

travers une barrière puis une double barrière; en utilisant la méthode de la matrice de transfert, et le formalisme des ondes plans pour les potentiels arbitraires. Nous étudions par la suite, le cas de l'interaction entre deux électrons se propagent dans le même milieu en utilisant les mêmes techniques précédentes.

Dans le troisième et dernier chapitre, nous exposons les résultats de simulation d'une structure à double barrière dans le cas statique, incluant l'interaction électronique, ces résultats ayant été obtenus avec un programme élaboré en Fortran Power station. L'interprétation des résultats et des propriétés de transport électronique ont également été effectués, ce qui nous permet d'avoir un aperçu général sur le comportement de telles structures dans les cas nonlinéaire.

Enfin, nous terminerons par une conclusion générale.

Chapitre I:
Semiconducteurs et superréseaux

I.1. Introduction:

L'électronique moderne fait de plus en plus appel à des fonctions analogiques très hautes fréquences et de logiques ultra-rapides. Cette recherche constante vers une rapidité accrue des dispositifs passe nécessairement par une diminution des dimensions des zones actives des composants. Si au départ cette réduction n'est qu'un problème d'échelle, on se heurte très rapidement à des aspects plus fondamentaux lorsque les dimensions mises en jeu deviennent comparables à la longueur d'onde de l'onde associée aux porteurs de charge. L'exploitation de la nature ondulatoire des porteurs n'est pas nouvelle. La diode à effet tunnel, pour laquelle les phénomènes de conduction sont basés sur la pénétration de la fonction d'onde dans une zone classiquement interdite, constitue l'une des premières démonstrations des effets quantiques en électronique. Le moteur des développements récents sur ce sujet est incontestablement la technologie pour laquelle des progrès considérables ont été réalisés ces quinze dernières années [4].

Dans le domaine des semiconducteurs, c'est principalement les hétérostructures qui ont bénéficié de ces avancées. Pour être plus précis, on a pu, grâce à la maîtrise des techniques d'épitaxies par jets moléculaires faire croître en alternance différents matériaux dont les épaisseurs sont typiquement de quelques dizaines d'Angströms. Cette maîtrise de l'épitaxie a permis de développer un très grand nombre de composants à transport vertical tels que les transistors bipolaires à hétérojonctions ou les composants dipôles à hétérostructures.

Parmi les concepts généraux liés aux effets quantiques, nous nous sommes attachés dans ce travail à tirer profit de l'effet tunnel résonnant que l'on peut observer dans les hétérostructures de type puits-double barrière.

Le principe de fonctionnement ainsi que les caractéristique statique résultant pour un dipôle utilisant l'effet tunnel résonnant fascine les physiciens depuis la découverte de la mécanique quantique, aussi bien du point fondamental (Quantification de Wannier-Stark, résonateur d'ondes de De Broglie analogue de Bragg /Fabry –Perot optique), qu'en raison des applications extrêmement importantes en électronique ultra-rapide à très haute fréquence $f > 10$ GHz, et à la résistance différentiel négative (NDR)[5]. La zone active, constituée d'une double barrière et d'un puits, entraîne la localisation momentanée sur les niveaux quantiques des électrons supposés dans cet exemple majoritaires. Ces niveaux représentent des chemins privilégiés pour les électrons qui s'apprêtent à franchir la structure double barrière par effet tunnel résonnant. Ceci est démontré par les pics observés dans les spectres de probabilité de

transmission. La transmission électronique est donc étudiée par la résolution de l'équation de Schrödinger pour une structure à un seul électron qui se propage dans une région donnée.

La réalité en est tout autre. En effet dans un dispositif à effet tunnel, il n'y a pas qu'un seul électron qui se propage, mais plusieurs simultanément. Nous nous proposons dans ce travail d'étudier la transmission des porteurs de charge à travers une structure à double barrières incluant l'influence que pourrait avoir deux électrons qui se propagent en même temps dans la même région, et ceux, dans le cas statique.

I.2. Semiconducteur:

I.2.1. Définition:

Dans le modèle classique, un corps est isolant s'il ne contient pas d'électrons mobiles. Dans un conducteur, des électrons sont peu liés aux noyaux et peuvent se déplacer librement dans le réseau cristallin.

Le modèle classique a été remplacé par le modèle quantique des bandes d'énergie. Dans l'atome isolé, les électrons occupent des niveaux d'énergie discrets. Dans un cristal, par suite des interactions entre les atomes, ces niveaux discrets s'élargissent (on appelle des bandes d'énergie électronique) et les électrons occupent des bandes d'énergie permises séparées par des bandes interdites. La répartition des électrons dans les niveaux obéit aux lois de la thermodynamique statistique. Au zéro absolu, seuls sont peuplés les niveaux de plus basse énergie.

Dans les isolants, les bandes d'énergie les plus faibles sont entièrement pleines. La hauteur de la bande interdite est grande (en quelques eV). Il n'y a pas de niveaux d'énergie accessibles et pas de conduction. Exemples: Diamant (carbone) et Mica,.. etc.

Dans les conducteurs, la dernière bande occupée est partiellement remplie : Il existe beaucoup de niveaux disponibles puisque les bandes de valence et de conduction sont collées, on constate un chevauchement entre les deux bandes, la conduction est alors grande.

Les semiconducteurs sont des matériaux dont la conductivité électrique est intermédiaire entre celle des conducteurs et des isolants et varie dans une grande proportion sous l'effet de la température, l'éclairement et la présence d'impuretés (dopage, défauts du réseau).

Ils se comportent comme des métaux à haute température et comme isolants à basse température.

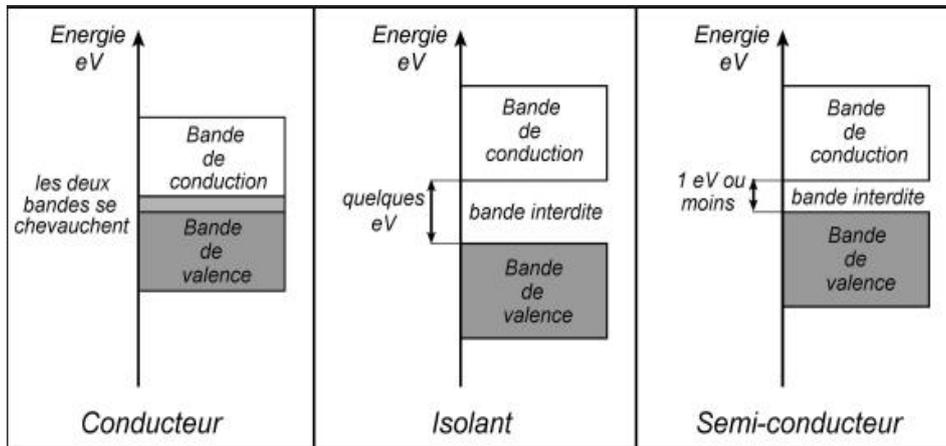


Figure I.1 : Caractéristique de la structure des bandes de matériaux.

I.2.2. Structure cristalline des semiconducteurs III-V:

Les semiconducteurs III-V sont des matériaux composés d'un ou plusieurs éléments de la colonne III (Bore, Gallium, Aluminium, Indium,.. etc.), et de la colonne V (Arsenic, Antimoniure, Phosphore,.. etc.) du tableau périodique :

III	IV	V
B Bore 10811	C Carbone 120107	N Azote 140078
Al Aluminium 269813	Si Silicium 280859	P Phosphore 309743
Ga Gallium 697231	Ge Germanium 7264	As Arsenic 749233
In Indium 1148115	Sn Etain 1187101	Sb Antimoine 121751

Tableau I.1: Exemples d'éléments du tableau périodique constituant les semiconducteurs.

La famille des semiconducteurs III-V cristallise dans la structure Zinc Blende. Son réseau cristallin peut se décomposer en deux sous réseaux cubiques à faces centrées interpénétrés, l'un étant constitué des atomes de l'élément du groupe III (par exemple Ga), l'autre des atomes de l'élément du-groupe V (par exemple As); Ces deux sous-réseaux sont décalés l'un par rapport à l'autre du quart de la diagonale principale, c'est-à-dire d'une quantité de $a_0/4 (1, 1, 1)$, a_0 étant le paramètre cristallin, où chaque atome se trouve donc au

centre d'un tétraèdre régulier dont les sommets sont occupés par un atome de l'autre espèce [6].

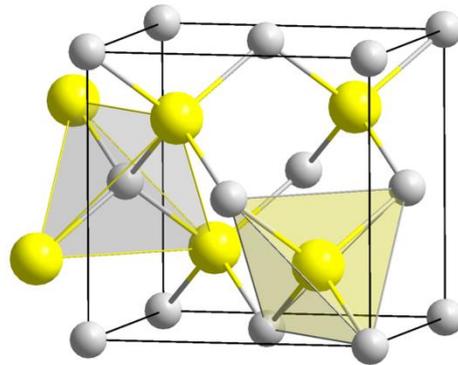


Figure I.2: Structure Cristalline de la Zinc Blende [6].

La formation d'alliages ternaires comme de type $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ ou $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ permet d'ajuster certaines propriétés comme la largeur de la bande interdite (pour les applications optoélectroniques), la mobilité des porteurs (pour les applications électroniques) ou encore la constance de réseau, importante pour la croissance épitaxiale sur des substrats en Silicium par exemple.

I.2.3. Structure de bandes des semiconducteurs:

Quand la température augmente, certains électrons de la bande de valence (BV) sautent vers la bande de conduction (BC), et laissent des trous dans la (BV), les électrons et trous établissent alors une conductibilité électrique différente de zéro.

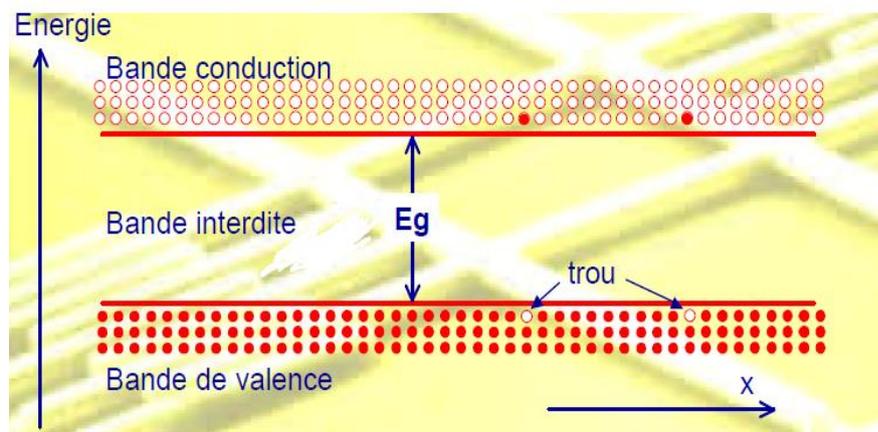


Figure I.3: Phénomène de génération des paires électrons et trous

I.2.3.1 Transition directes et indirectes:

Au sein d'un semiconducteur, on différencie les transitions radiatives de celles qui sont non radiatives. Une transition radiative implique l'absorption ou, au contraire, l'émission d'un photon pour passer d'un état à un autre, mais une transition non-radiative n'implique pas de photons et est due aux quanta de vibrations du réseau cristallin ou phonons.

Les transitions radiatives dites inter-bande sont, à leur tour, classifiées selon la configuration des bandes du semiconducteur en transitions directes et indirectes avec intervention des phonons [7].

a- Transitions directes:

Dans le processus d'absorption directe, un photon est absorbé par le cristal avec création d'un électron et d'un trou. Comme le minimum de la bande de conduction se trouve dans la même direction que le maximum de la bande de valence (Gap direct). La transition optique a lieu sans changement significatif du vecteur d'onde k .

b- Transitions indirectes:

Dans ce processus d'absorption, un photon est absorbé avec création de trois particules: Un électron, un trou et un phonon; ce type de processus est observé dans le cas du gap indirect: Le maximum de la bande de valence n'est pas aligné avec le minimum de la bande de conduction.

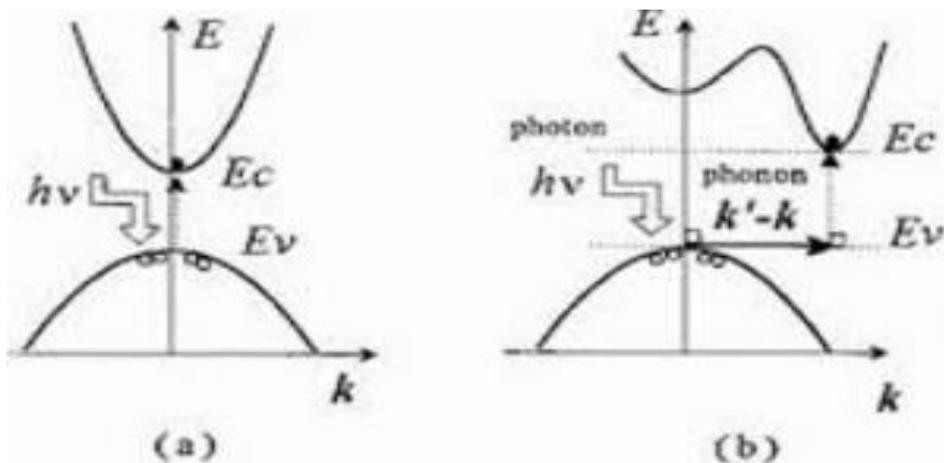


Figure I.4 : Transition (a) directe, et (b) indirecte.

I.2.3.2. Structure de bande du GaAs:

L'Arséniure de Gallium (GaAs) est un composé à gap direct, puisque le minimum de la bande de conduction et le maximum de la bande valence coïncide au point de plus haute symétrie Γ . Les semiconducteurs à gap direct sont appelés univalés.

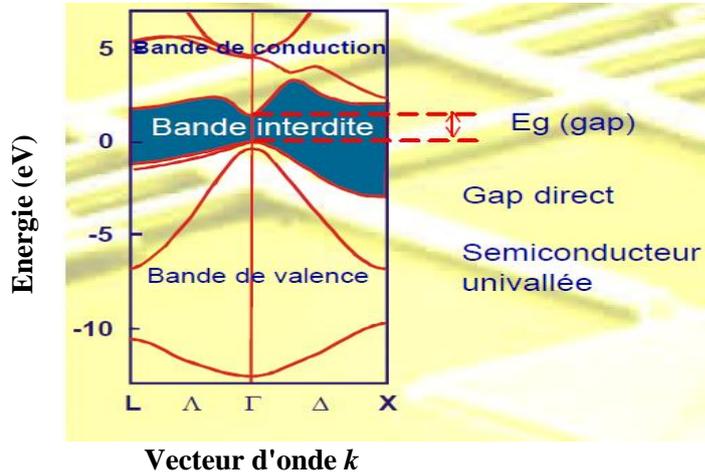


Figure I.5 : Gap direct du semiconducteur GaAs.

Parmi tous les composés semiconducteurs possibles, tous n'ont pas le même intérêt potentiel. L'étude de leurs propriétés, et en particulier de la structure de bandes montre notamment que les éléments les plus légers donnent des composés à large bande interdite, dont les propriétés se rapprochent de celles des isolants. Les composés incluant du Bore, de l'Aluminium, ou de l'Azote, et le Phosphore de Gallium entrent dans cette catégorie, ils ont en général peu d'intérêt pour l'électronique rapide qui demande des semiconducteurs à forte mobilité de porteurs, ou pour l'optoélectronique où une structure de bande directe est nécessaire pour que les transitions optiques soient efficaces. À l'autre extrémité, les éléments lourds, comme le Thallium ou le Bismuth, donnent des composés à caractère métallique. Pour des applications électroniques et optoélectroniques, on considérera donc essentiellement les composés à base de Gallium (GaAs, GaSb), ou d'Indium (InP, InAs, InSb), dont les propriétés sont les plus intéressantes.

I.3. Superréseaux:

I.3.1. Historique:

Depuis la première proposition d'Esaki et Tsu en 1970 [8], de nombreuses études, expérimentales et théoriques ont été menées sur les superréseaux à puits quantiques. Il s'agit d'hétérostructures semiconductrices périodiques, dont la période et la composition peuvent

être contrôlées avec une grande précision et ajustées suivant les propriétés recherchées. La cellule élémentaire d'un superréseau a une taille de quelques nanomètres, un à deux ordres de grandeur supérieure aux paramètres de maille des matériaux cristallins usuels. Cette propriété en fait un terrain d'expérimentation idéale pour explorer certains phénomènes quantiques inobservables dans les cristaux [9].

I.3.2. Définition:

Superréseau est une jonction formée par la juxtaposition de deux matériaux semiconducteurs de compositions différentes, possédant des valeurs différentes de l'énergie du gap, alternées périodiquement suivant l'axe de croissance (Figure I.6 et I.7). Le matériau à faible gap joue le rôle d'un puits de potentiel pour les électrons et l'autre à grand gap d'une barrière. Quand les deux semiconducteurs ont une conductivité du même type, l'hétérostructure est dite isotype. Dans le cas contraire elle est anisotype.

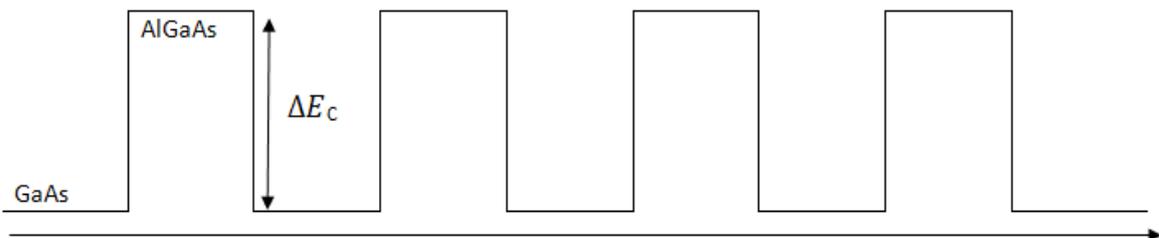


Figure I.6: Superposition des gaps dans un superréseau GaAs/ AlGaAs suivant la direction de croissance des couches.

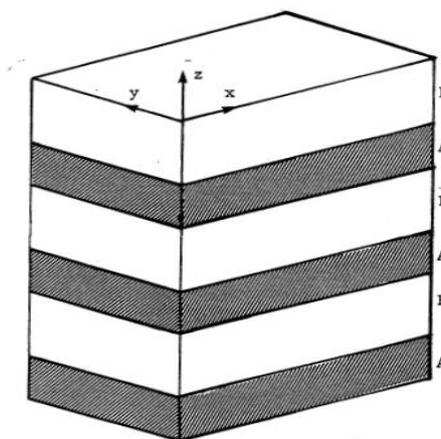


Figure I.7 : Configuration géométrique d'un superréseau de composition ABAB, où A représente le substrat de GaAs et B de AlGaAs.

Ce superréseau est formé d'un empilement périodique de couches assez fines de deux semiconducteurs GaAs /AlGaAs.

I.3.3. Technique de fabrication: l'Épitaxie

L'épitaxie est utilisée pour faire croître des couches minces (quelques nanomètres d'épaisseur). On utilise pour cela une surface parfaitement polie d'un monocristal, appelé substrat, sur lequel seront déposés d'autres atomes. Le substrat est choisi de façon à avoir des paramètres de maille proches de la couche de cristal à déposer. La technique d'épitaxie la plus connue et la plus utilisée est celle par jet moléculaire.

➤ **Épitaxie par jets moléculaires MEB** (Molecular Beam Epitaxy, EJM en français), est une technique qui consiste à envoyer un ou plusieurs jets moléculaires vers un substrat préalablement choisi pour réaliser une croissance épitaxiale. Elle permet de faire croître des échantillons nanostructurés de plusieurs cm^2 à une vitesse d'environ une monocouche atomique par seconde (Figure I.8) [9].

La croissance s'effectue sous ultra-vide pour éviter tout choc sur le parcours. Les éléments à déposer sont contenus dans des creusets à haute température, et sont évaporés et déposés par transport thermique sur la surface du substrat, plus froide mais de température assez élevée pour permettre le déplacement et le réarrangement des atomes.

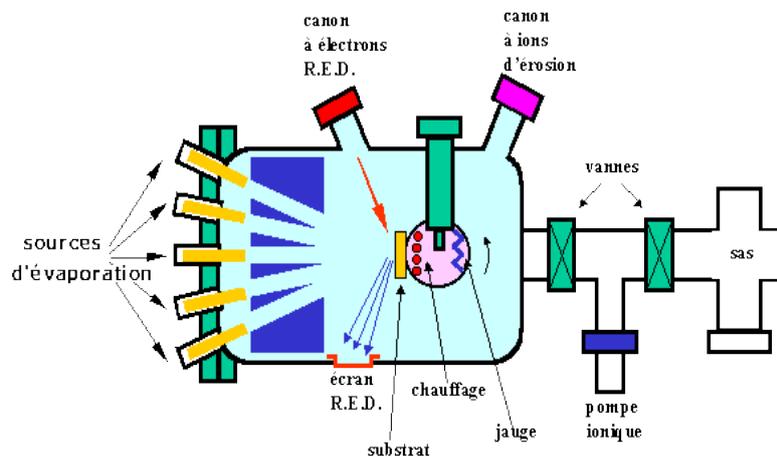


Figure I.8:Épitaxie par jet moléculaire.

I.3.4.Types de superréseau:

La maîtrise de l'épitaxie par jets moléculaire des semiconducteurs de l'alliage binaire et de l'alliage ternaire, etc, tous accordés en maille, permet par empilement de couches successives de ces matériaux, de créer des objets physique nouveaux dont la composition est modulée à l'échelle de quelques monocouches atomiques [10]:

I.3.4.a. Superréseaux à puits et à barrières rectangulaires:

Ce type de superreseau est le plus répandu car il constitue l'élément de base dans l'élaboration de plusieurs composants, telles que les diodes laser et laser à cascade quantique. Cette structure constitue la superposition de deux matériaux possédant des structure de bandes différent [11].

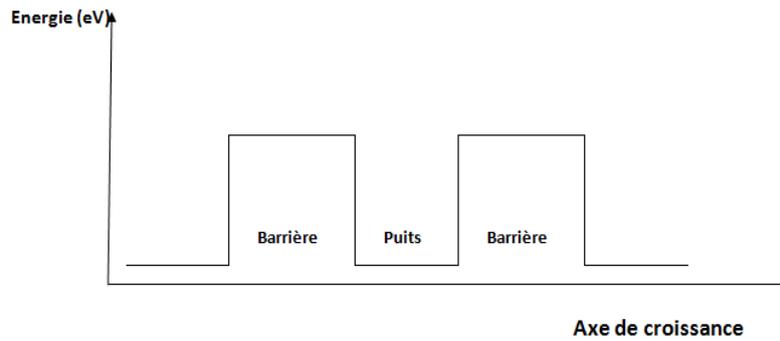


Figure I.9: Superréseau à puits et à barrières rectangulaires.

I.3.4.b. Superréseaux polytypes:

Leurs profil est obtenu par introduction d'un troisième constituant C dans la structure, elles sont dues à la différence existante entre leurs bandes de conduction, comme la structure AlSb/ GaSb/ InAs. Cette structure est utilisée dans les composants électroniques, d'où application dans les dispositifs à hauts fréquences.

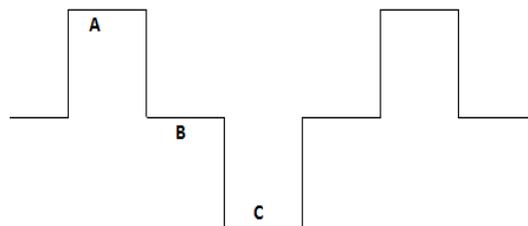


Figure I.10: Superréseau polytype.

I.3.4.c. Superreseau à dents de scie:

Cette structure est obtenue à partir d'une inflexion du matériau employée dans chaque période pour obtenir un gap dégradé linéairement jusqu'à une valeur maximale qui forme le grand gap, puis cette valeur revient à une valeur minimale qui donne le petit gap.

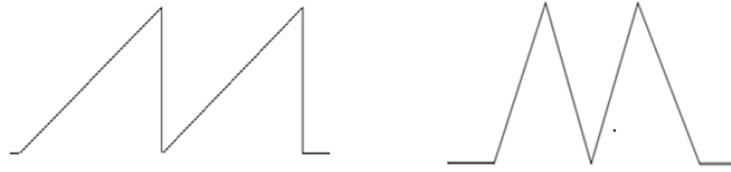


Figure I.11: Superréseaux à dents de scie.

I.3.4.d. Superreseau quasi-périodiques:

Ces superréseaux quasi-périodiques constituent une classe intermédiaire entre les structures périodiques aux états électroniques étendus et les structures à désordre aléatoire aux états exponentiellement localisés: Ils sont adaptés à l'étude de la localisation à une dimension. Ce sujet stimule de nombreux théoriciens qui voient quelques expériences confirmer les validités de leur analyse. Les théoriciens comme les expérimentateurs utilisent fréquemment la suite de fibonacci pour générer des superréseaux quasi-périodiques. Pour construire le superréseau quasi-périodique de fibonacci à partir deux briques de basse différents A et B, chacune composante monocouches et obéissant à la loi de récurrence:

$A \rightarrow AB$ et $B \rightarrow A$ on génère l'empilement suivant :AB,ABA,ABAAB,ABAABABA...[10].

I.3.5.Classes des superréseaux:

Par définition, une hétérojonction est obtenue lorsque deux matériaux semiconducteurs différents sont associés. Sa réalisation s'effectue par croissance cristalline d'un matériau sur l'autre et nécessite l'utilisation de semiconducteurs ayant des propriétés cristallines voisines (la taille des atomes doit être assez proche).

On peut distinguer trois types d'hétérojonctions, en fonction de l'alignement des bandes de conduction et de valence des matériaux utilisés. La figure suivante donne une description schématique des différents décalages des bandes de conduction et de valence pour trois types d'hétérojonction: Type I, II et III.

Dans le superréseau de type I, (Figure I.12 (a)), les offsets de bande pour la bande de conduction et de valence agissent comme des barrières de potentiel et gardent les électrons et les trous dans le matériau de plus petit gap. Les superréseaux de type II sont à gap décalé (Figure I.12 (b)), et les superréseaux de type III sont à gap brisé (Figure I.12 (c)). Dans ces situations, électrons et trous sont alors séparés dans l'espace, avec les électrons diffusant dans un matériau et les trous dans l'autre.

- Le superréseau de type I, Exemple: $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ (A)/GaAs (B) du groupe III-V
- Le superréseau de type II, Exemple: InAs (A)/GaSb (B) du groupe IV-IV
- Le superréseau de type III, Exemple: HgTe (A)/CdTe (B) du groupe II-VI

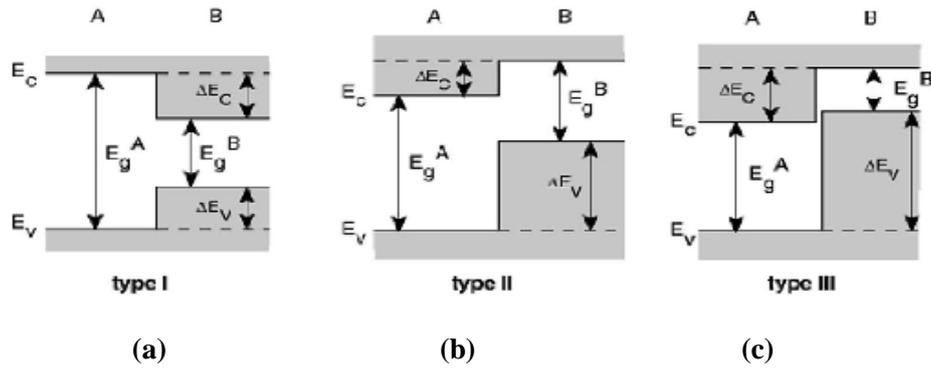


Figure I.12: Représentation des différents types de superréseaux: (a) Type I, (b) type II et (c) type III

I.3.6. Transmission dans les superréseaux :

On considère un système à deux puits quantiques plat et symétriques. Etudions le couplage et la transmission dans ces systèmes:

Si l'épaisseur de barrière $b > \lambda_{DB}$, où λ_{DB} est la longueur d'onde de De Broglie.

$$\lambda_{DB} = \frac{h}{p}$$

Où p est la quantité de mouvement et h la constante de Planck.

Dans ce cas là les deux puits quantiques sont complètement découplés et donc isolés l'un de l'autre. Les deux puits quantiques sont indépendants, les porteurs sont entièrement confinés dans le puits et seul le transport parallèle est possible; Les fonctions d'ondes sont localisées.

Si $b < \lambda_{DB}$, la situation est différente: Les deux puits quantiques sont couplés et donc dépendant l'un de l'autre. Les électrons ne sont pas complètement confinés dans le puits, car ils ont une probabilité non nulle de traverser la barrière. Il peut en résulter un effet tunnel résonant: un électron confiné dans le puits de gauche peut transiter par effet tunnel via la barrière centrale vers le puits de droite et vice-versa. On observe un recouvrement suffisant des fonctions d'ondes associées: Les fonctions d'ondes sont délocalisées (voir étendues) [5].

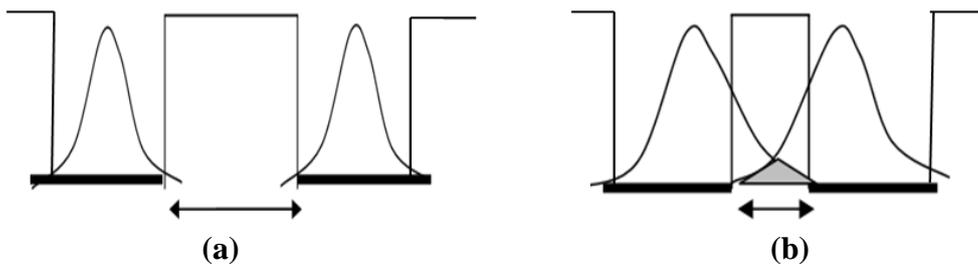


Figure III: Effet de l'élargissement de la barrière sur la structure barrière/double puits: (a) puits découplés, (b) puits couplés [5]

➤ **Effet tunnel résonant:**

L'effet tunnel désigne la propriété que possède une particule de franchir une barrière de potentiel même si son énergie est inférieure à l'énergie minimale requise pour franchir cette barrière. C'est un effet purement quantique qui ne peut pas s'expliquer par la mécanique classique. Donc, L'effet tunnel résonnant a pour origine le fait que les niveaux quantifiés représentent un chemin privilégié pour les électrons. Lorsque ces niveaux sont inaccessibles sous l'action de la polarisation, le courant chute, ce qui se traduit par une résistance différentielle négative [4].

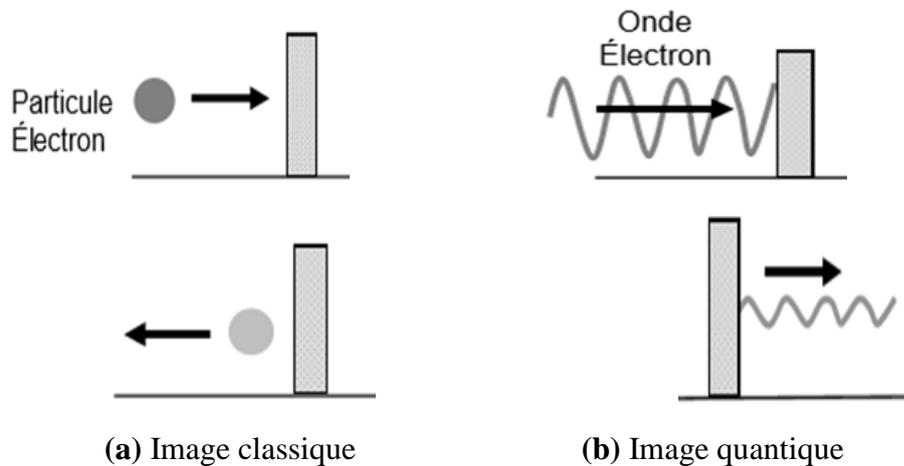


Figure I.13 : Interaction à une particule avec une barrière de potentiel, (a) image classique et (b) image quantique [5].

Pour une telle particule, la fonction d'onde, dont le carré du module représente la densité de probabilité de présence, ne s'annule pas au niveau de la barrière, mais s'atténue à l'intérieur de la barrière, pratiquement, exponentiellement. Si, à la sortie de la barrière de potentiel, la particule possède une probabilité de présence non nulle, elle peut traverser cette barrière. Cette probabilité dépend des états accessibles de part et d'autre de la barrière ainsi que de l'extension spatiale de la barrière, et de la profondeur des puits.

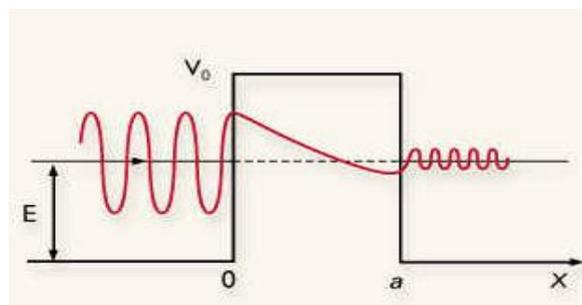


Figure I.13: Effet tunnel.

I.3.7. Les applications:

a- Laser à cascade quantique:

Les semiconducteurs à gaps direct et indirect sont devenus les piliers de l'optoélectronique pour la fabrication des lasers à cascade quantique à base de puits quantiques de plus en plus performants. Ils sont inventés en 1994.

Les lasers à cascade quantique sont des sources permettant l'émission de lumière cohérente dans l'infrarouge sur une plage très importante de longueur d'onde 3-300 μm . Ils sont construits à partir d'hétérostructures semiconductrices.

Ces Lasers sont basés sur deux phénomènes fondamentaux de la mécanique quantique qui sont le confinement quantique et effet tunnel.

Le confinement quantique signifie que le semiconducteur est placé entre deux autres semiconducteurs n'ayant pas la même structure de bande. Les bandes de valence et de conduction présentent alors des discontinuités à leurs jonctions [12].

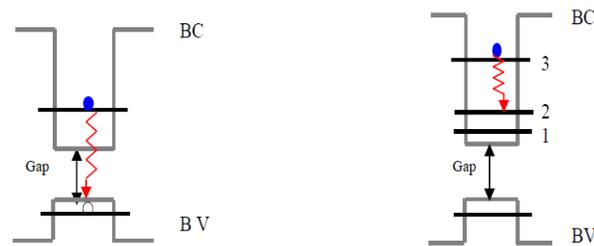


Figure I.14: Représentation schématique d'une transition radiative inter bandes (a) et inter-sous bandes (b) dans un puits quantique [12].

Dans les lasers inter-bandes qui mettent en jeu des recombinaisons inter-bandes (Figure I.14 (a)), les recombinaison d'électrons et de trous s'effectuent à travers la bande interdite du matériau semiconducteur, tandis que les lasers à cascade quantique exploitent des transitions radiatives intra-sous bandes s'effectuant entre différents niveaux quantiques dans la bande de conduction (Figure I.14 (b)).

L'effet tunnel est amplifié par l'application d'un champ électrique extérieur qui vient incliner le diagramme de bande. Un électron peut passer d'un niveau à l'autre par effet tunnel assisté par une émission de photon (Figure I.15).

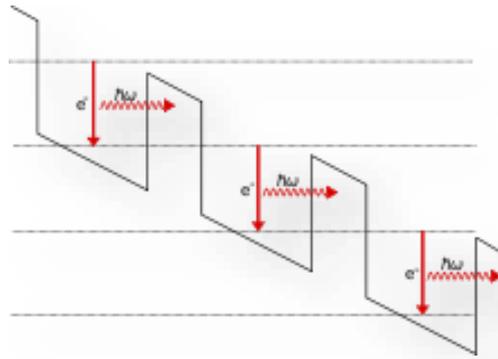


Figure I.15: La structure à puits quantiques.

Un semiconducteur est une structure à confinement quantique (un puits quantique). Ce confinement quantique est créé à l'intérieur de la structure des sous-bandes d'énergie. Un électron de haute énergie de la bande de conduction tombe alors dans le puits quantique, tout d'abord sur la sous-bande supérieure, puis est relaxé en retombant sur la sous-bande inférieure en émettant alors un photon d'énergie équivalente à l'énergie entre ces deux sous-bandes. On parle alors d'émission par transition inter-sous bande: C'est le laser cascade quantique. Afin de maximiser le rendement du laser à cascade quantique, celui-ci est constitué d'une multitude de puits quantiques. Une fois l'électron relaxé sur la sous-bande de plus basse énergie, il traverse la barrière entre deux puits quantiques par effet tunnel, et en raison de la polarisation du composé, se retrouve sur la sous-bande supérieure, d'où il pourra à nouveau se relaxer, et produire un nouveau photon, et ainsi de suite.

b- Diode à effet tunnel:

La diode à effet tunnel résonnant est un composant électronique basé sur une structure à double barrière. Ces deux barrières de potentiel sont séparées par un puits quantique de quelques nanomètres de largeur

Il est schématiquement représenté sur la figure (I.16):

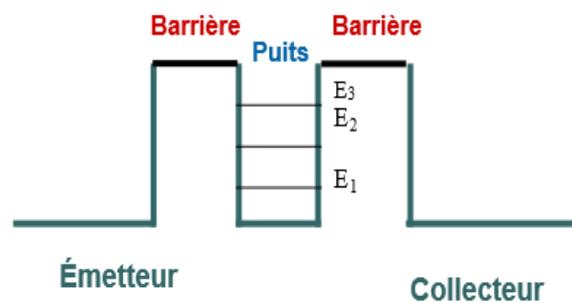


Figure I.16: Structure puits/ double barrière de la diode à effet tunnel résonnant.

La structure quantique puits/ double barrière semblable à un réservoir qui émet ou/et absorbe des électrons.

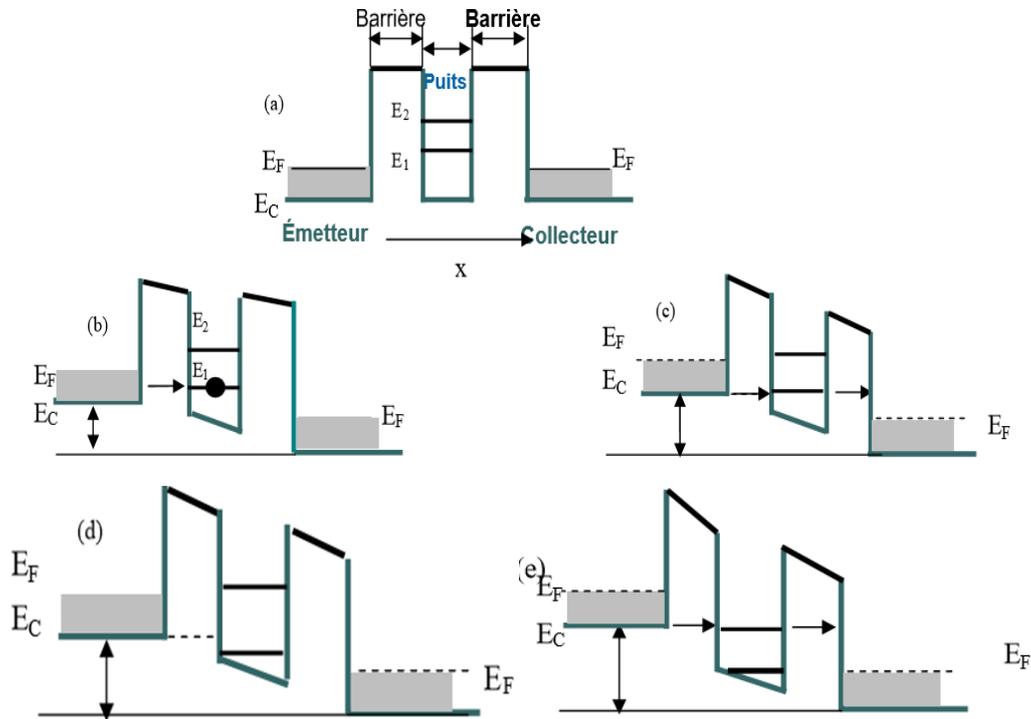


Figure I.17 : Représentation de la structure à DB, sans tension externe (a), avec une tension externe appliquée (b), (c), (d) et (e) [5].

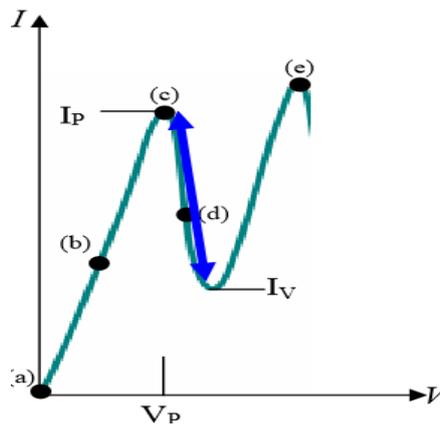


Figure I.18: Effet et courant tunnel résonnant dans la bande de conduction dans une structure à puits /double barrière [5].

Nous considérons la structure telle que le niveau d'énergie quantique E_1 dans le puits soit au-dessus du niveau de Fermi des électrodes pour une tension appliquée de 0 Volts (Le cas (a)), où le niveau permis dans le puits n'est pas aligné avec l'énergie de l'électron incident, donc aucun courant ne traverse la structure.

A plus forte tension, telle que le niveau d'énergie est proche du niveau de Fermi de l'électrode injectant (émetteur), l'amplitude du courant croit, jusqu'à ce qu'elle atteigne la valeur maximale du courant, noté I_{PIC} (Le cas (b) et (c)).

Dans le cas (d): En augmente encore la tension, il n'y a plus correspondance entre le niveau de Fermi et le niveau d'énergie, le courant diminue rapidement, jusqu'à ce qu'il atteigne une valeur minimal $I_{vallée}$: C'est une résistance différentielle négative [4].

Dans le cas (e): Pour une tension plus forte, le niveau d'énergie E_2 est proche du niveau de Fermi de l'électrode (émetteur), ainsi le courant augmente.

Quand le niveau de fermi coïncidé avec une des énergies de résonance pour une tension donnée, un pic de courant est observé.

c- Diode laser:

Une diode laser est un composant optoélectronique à base de matériaux semiconducteurs. Elle émet de la lumière monochromatique. L'émission lumineuse est basée sur le phénomène de l'électroluminescence qui comprend l'émission d'un photon par recombinaison d'une paire électron-trou et le peuplement de la bande de conduction par injection d'un courant

Elle possède trois zones caractéristiques: une couche de confinement de type n , une zone active et une couche de confinement de type p . Les couches de confinement permettent d'optimiser l'utilisation du courant dans la diode et d'augmenter le rendement.

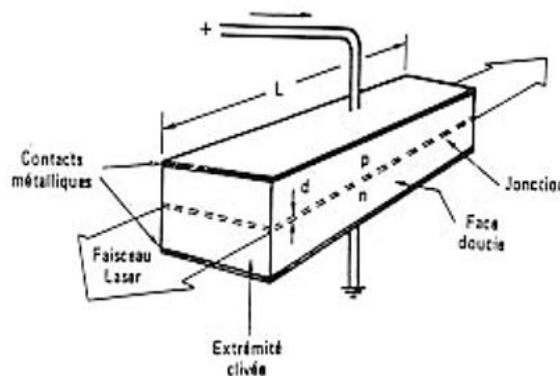


Figure I.19: Diode laser.

La faisabilité d'une émission laser au sein d'un semiconducteur fut démontrée expérimentalement dans l'arséniure de gallium (GaAs) en 1962 par R. N. Hall et al. [12].

Les caractéristiques importantes des diodes laser est la longueur d'onde d'émission qui dépend fortement de la température du semiconducteur et du courant d'injection. Ainsi, sur un

plan technique pour maintenir l'émission à une longueur d'onde centrale fixe, on devra maintenir la température et le courant d'injection constants aux valeurs requises.

I.4.Conclusion:

Les semiconducteurs III-V (GaAl, AlGaAs,.. etc.), et les superréseaux sont des composants importants de par leurs intérêts pratiques dans le domaine technologique telle que la télécommunication.

Nous avons présenté dans ce chapitre, une brève définition des composés semiconducteurs et superréseaux, une méthode efficace de leur fabrication (épitaxie par jets moléculaires (MBE)), et leurs différents types et classes. Nous avons mis le point sur la transmission électronique dans la structure à puits et barrières de potentiel, à savoir, l'effet tunnel résonant (ETR). Enfin, nous avons présenté quelques-uns des domaines de leurs applications.

Chapitre II:
Approximations, modèles et formalismes- Application au
cas nonlinéaire

II.1.Introduction:

Ces quinze dernières années, de nombreuses études basées sur diverses approches, ayant pour but la résolution de l'équation de Schrödinger indépendante du temps, ont été proposées dans la littérature par des formalismes matriciels pour déterminer les propriétés de transport électronique des structures à effet tunnel. Le formalisme utilisé étant celui de la matrice de transfert basé sur l'approximation de la masse effective est les conditions de continuité aux interfaces puits-barrière.

La méthode développée dans ce manuscrit prend en considération l'interaction électron-électron. La méthode de résolution choisie reste celle de la matrice de transfert couplée avec celle des ondes planes qui permet la résolution de l'équation de Schrödinger pour un potentiel arbitraire. Le point fort de cette approche est qu'elle peut prendre en compte la discrétisation en paliers, une forme de potentiel quelconque résultant soit des modulations structurales du matériau et de dopage soit des effets électrostatiques comme dans notre cas.

II.2.Approximation de base:

II.2.1. Approximation de la masse effective (AME):

La masse effective est une notion utilisée en physique du solide pour l'étude du transport des électrons. Plutôt que de décrire des électrons de masse fixe évoluant dans un potentiel donné, on les décrit comme des électrons libres dont la masse effective varie. L'approximation de la masse effective (AME) consiste à rechercher les solutions de l'équation de Schrodinger en tirant parti de la connaissance de la structure de bande des matériaux constituent les différentes couches du super réseau.

les fonctions enveloppes sont les solutions d'un Hamiltonien effectif où la masse est la masse effective des matériaux et le potentiel effectif résulte du décalage énergétique entre les bande des deux matériaux, l'Hamiltonien d'un électron s'écrit:

$$H = \frac{\hbar^2}{2m_0} \Delta + V(\vec{r}) + w(\vec{r}) \quad (\text{II.1})$$

$V(\vec{r})$ représente le potentiel cristallin, $w(\vec{r})$ la perturbation extérieure, \hbar la constante de Planck réduite et m_0 la masse d'un électron libre.

Lors d'un changement de matériau, la masse effective m_e^* change, ainsi que le profil de la bande de conduction: On parle de discontinuité de la bande de conduction. À priori pour obtenir la fonction d'onde finale, il faut résoudre cette équation dans chaque matériau et

utiliser les relations de continuités afin d'obtenir la solution finale. Afin de ne résoudre qu'une seule équation on va introduire une masse effective dépendant de la position. La masse effective est définie par le tenseur d'ordre 2 des dérivées secondes de l'énergie E par rapport au vecteur d'onde k :

$$\left(\frac{1}{m_e^*}\right) = \frac{1}{\hbar^2} \left(\frac{d^2E(k)}{dk^2}\right) \Big|_{k=k_0} \quad (\text{II.2})$$

II.2.1. Condition de continuité de Bastard:

Depuis le travail original d'Anderson en 1958 [17], le problème de la localisation d'une particule dans n'importe quel système est toujours d'intérêt continu pour des physiciens, Il a montré que la présence du désordre dans un système peut localiser les fonctions d'onde grâce aux interférences quantiques, utilisant l'approximation de la masse effective et profitant des conditions de continuité de Bastard [3]. Les propriétés de discontinuité de la masse effective au niveau des interfaces posent un problème, celui d'écrire la condition de continuité de Bastard (C.C.) [3] de l'équation de Schrödinger à l'interface et de pouvoir appliquer l'approximation de la masse effective.

La relation suivante traduit la continuité de la fonction d'onde électronique, ainsi que sa première dérivée à une interface abrupte [11]:

$$\psi(x^-) = \psi(x^+) \quad (\text{II.3})$$

$$\left(\frac{1}{m_a}\right) \frac{\partial\psi(x^-)}{\partial x} = \left(\frac{1}{m_b}\right) \frac{\partial\psi(x^+)}{\partial x} \quad (\text{II.4})$$

Où m_a et m_b sont respectivement les masses effectives de l'électron dans les deux régions adjacentes, notées a et b , $\psi(x^+)$ et $\psi(x^-)$ sont les fonctions d'ondes de l'électron dans les régions aussi (Figure II.1).

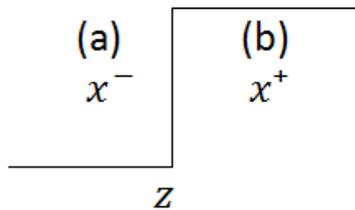


Figure II.1: Interface abrupte entre deux régions

Les électrons ne pouvant plus être décrits par les fonctions de Bloch dont la partie périodique varie très faiblement au niveau des interfaces pour cette forme de condition de continuité:

$$\psi_a(z) = \psi_b(z) \quad (\text{II.5})$$

Où $\psi_a(z)$ et $\psi_b(z)$ décrivent les parties périodiques des fonctions d'ondes des régions (a) et (b) respectivement à la position d'interface z .

II.3. Calcul du coefficient de transmission:

Le coefficient de transmission est le paramètre le plus utilisé dans l'étude des propriétés de transport électronique dans les superréseaux et le phénomène de localisation dans les systèmes. Cette quantité physique est définie comme la probabilité de transfert de l'onde électronique à l'autre extrémité du système. Il est le facteur le plus déterminant dans l'effet tunnel résonnant, car il le mesure quantitativement [13].

Nous nous sommes intéressés à un superréseau formé par un empilement de couche d'épaisseur constante du semiconducteur GaAs /Al_xGa_{1-x}As. Les états électroniques du SR ont été étudiés par le calcul théorique du coefficient de transmission de la structure de minibande.

On considère une particule d'énergie E incidente sur une ou plusieurs barrières de potentiel de hauteurs V_0 , son comportement est décrit par l'équation de Schrodinger utilisée pour décrire le mouvement de la particule par effet tunnel, et donnée par la relation suivante:

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*(x)} \cdot \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + [V(x) - E] \cdot \psi(x) = 0 \quad (\text{II.6})$$

Où $\psi(x)$ est la fonction d'onde de l'électron, x est la coordonnée le long de l'axe de croissance, $V(x)$ est le potentiel du milieu et $m^*(x)$ est la masse effective de l'électron incident suivant la direction de l'axe (Ox) pour chaque substrat qui constitue la structure (Figure II.5).

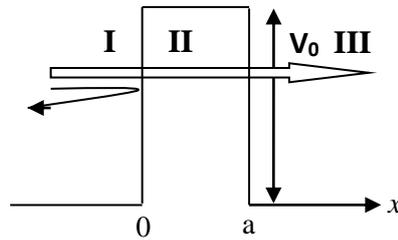


Figure II.2: Particule réfléchi et transmise sur une barrière de potentiel [5].

L'énergie de particule peut être inférieure ou supérieure à la hauteur de la barrière, dans le premier cas, la transmission se fait par effet tunnel. Notre étude se restreint au superréseau GaAs/ AlGaAs. Plus la barrière est épaisse, plus la transmission est faible, et vice versa.

II.3.1. Modèle de la matrice de transfert:

II.3.1.a. Matrice de transfert pour une barrière rectangulaire:

Plusieurs modèles théoriques permettent de décrire le phénomène de transmission électronique dans une structure double barrière. Le plus simple de ces modèles est celui de la matrice de transfert qui a été proposé et utilisé par Esaki et Tsu [14], dans le cas de la structure AlGaAs/ GaAs en 1973. Sur la figure (II.3), nous présentons la structure multipuits qui nous intéresse, à savoir, GaAs/ AlGaAs. Cette structure peut être vue comme une chaîne de transmission composée par une série de couche successive, où les fonctions d'ondes en sortie sont reliées aux fonctions d'ondes en entrée via une matrice de transfert décrivant la transmission et la réflexion sur chaque interface.

La méthode de la matrice de transfert donne une précision satisfaisante pour notre étude tout en étant plus facile à mettre en œuvre, elle est aussi plus adaptée à notre problème. Elle permet une description très élégante du phénomène permettant d'inclure l'ensemble des perturbations. Considérant un profil de potentiel périodique, constitué d'une succession de puits et de barrières de forme rectangulaire, comme il est montré sur la figure suivante:

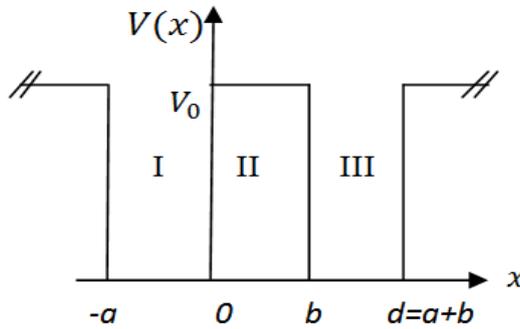


Figure II.3: Profil de potentiel d'un superréseau à puits et barrières rectangulaires, où a est la largeur de puits et b l'épaisseur de la barrière. d est la période du superréseau.

Région(I): Dans le puits, la solution de l'équation de Schrödinger est la superposition d'une fonction d'onde incidente et d'une autre réfléchie. L'équation de Schrödinger (II.6) s'écrit:

$$\psi_I''(x) + \frac{2m}{\hbar^2} E \cdot \psi_I(x) = 0 \quad (\text{II. 7})$$

$$\psi_I''(x) + k_1^2 \cdot \psi_I(x) = 0 \quad (\text{II. 8})$$

Dans cette région $V(x) = 0$ et $m_a = m_1$ Avec $k_1 = \sqrt{\frac{2m_1 E}{\hbar^2}}$ (II.9)

Où m_a est la masse effective de l'électron dans le puits, k_1 est le vecteur d'onde dans ce même puits.

La solution générale est toujours une onde plane de forme:

$$\psi_I(x) = Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x} \quad (\text{II. 10})$$

Région (II): Dans la barrière, l'équation de Schrödinger s'écrit:

$$\psi_{II}''(x) + \frac{2m_2}{\hbar^2} [E - V_0] \cdot \psi_{II}(x) = 0 \quad (\text{II. 11})$$

$$\psi_{II}''(x) + k_2^2 \cdot \psi_{II}(x) = 0 \quad (\text{II. 12})$$

Dans cette région $V(x) = V_0 \neq 0$ et $m_b = m_2$ avec $k_2 = \sqrt{\frac{2m_2[E-V_0]}{\hbar^2}}$ (II.13)

Où m_b est la masse effective de l'électron dans la barrière, k_2 est le vecteur d'onde dans cette même barrière.

Dans la barrière de potentiel, la fonction d'onde s'écrit donc comme la somme de deux exponentielles croissante et décroissante, la solution générale est de la forme:

$$\psi_{II}(x) = Ce^{ik_2x} + De^{-ik_2x} \quad (\text{II. 14})$$

Région(III): De même que pour la région I:

$$\psi_{III}''(x) + \frac{2m_3}{\hbar^2} E \cdot \psi_{III}(x) = 0 \quad (\text{II. 15})$$

$$\psi_{III}''(x) + k_1 \cdot \psi_{III}(x) = 0 \quad (\text{II. 16})$$

Et $V(x) = 0, m_a = m_1 = m_3$ avec $k_1=k_3=\sqrt{\frac{2m_3E}{\hbar^2}}$ (II.17)

La solution générale est toujours une onde plane de forme:

$$\psi_{III}(x) = Fe^{ik_3x} + Ge^{-ik_3x} \quad (\text{II. 18})$$

Les constantes d'amplitude ou coefficients C, D, F, G peuvent être déterminés en fonction des amplitudes d'entrée A, B par les conditions de continuité de la fonction d'onde aux différentes interfaces, dans notre cas, à $x = 0$ et $x = b$, la fonction d'onde ψ , et sa première dérivée ψ' doivent être continues.

➤ En $x = x_1 = 0$:

$$\psi_I(0) = \psi_{II}(0) \quad (\text{II. 19})$$

$$\frac{1}{m_a} \psi'_I(0) = \frac{1}{m_b} \psi'_{II}(0) \quad (\text{II. 20})$$

Ce qui donne:

$$S_I(0) \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = S_{II}(0) \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} \quad (\text{II. 21})$$

$$\text{Avec : } S_I(x) = \begin{pmatrix} e^{ik_1x} & e^{-ik_1x} \\ \frac{ik_1}{m_a} e^{ik_1x} & -\frac{ik_1}{m_a} e^{-ik_1x} \end{pmatrix} \text{ et } S_{II}(x) = \begin{pmatrix} e^{ik_2x} & e^{-ik_2x} \\ \frac{ik_2}{m_b} e^{ik_2x} & -\frac{ik_2}{m_b} e^{-ik_2x} \end{pmatrix} \quad (\text{II. 22})$$

$$\text{D'où : } \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = S_I^{-1}(0).Su(0). \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} \quad (\text{II. 23})$$

➤ En $x = x_2 = b$, nous obtenons un résultat similaire:

$$\begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} = Su^{-1}(b).Su(b). \begin{pmatrix} E \\ F \end{pmatrix} \quad (\text{II. 24})$$

En remplaçant (II. 24) dans (II. 23), il s'en suit que:

$$\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = M. \begin{pmatrix} E \\ F \end{pmatrix} \quad (\text{II. 25})$$

$$\text{Avec } M = S_I^{-1}(0).Su(0).Su^{-1}(b).Su(b) \quad (\text{II. 26})$$

Dans ce cas, $k_1 = k_3$ et $m_1 = m_3 = m_a$, ce qui impliquent que $S_{III}(b) = S_I(b)$, nous aurons:

$$M = S_I^{-1}(0).Su(0).Su^{-1}(b).S_I(b) \quad (\text{II. 27})$$

M est une matrice carrée (2x2) appelée *matrice de transfert*. Les coefficients (M_{ij}) contiennent toutes les informations de la structure du superréseau.

On définit une matrice de diffusion, notée $D_{II}(b-0)$, à travers la barrière (II) tel que :

$$D_{II}(b-0) = Su(0).Su^{-1}(b) = \begin{pmatrix} \cos[k_2b] & -\frac{m_b}{k_2} [k_2b] \\ \frac{k_2}{m_b} \sin[k_2b] & \cos[k_2b] \end{pmatrix} \quad (\text{II. 28})$$

L'équation (II.26) s'écrit alors sous la forme :

$$M = S_I^{-1}(0).D_{II}(b-0).Su(b) \quad (\text{II. 29})$$

En remplaçant les expressions de $S_I^{-1}(0)$ et $Su(b)$:

$$M = \frac{1}{2} \frac{m_1}{ik_1} \begin{pmatrix} -\frac{ik_1}{m_1} e^{-ik_1 x_1} & -e^{-ik_1 x_1} \\ -\frac{ik_1}{m_1} e^{ik_1 x_1} & e^{ik_1 x_1} \end{pmatrix} \cdot Du(b-0) \cdot \begin{pmatrix} e^{ik_3 x_2} & e^{-ik_3 x_2} \\ \frac{ik_1}{m_3} e^{ik_3 x_2} & -\frac{ik_1}{m_3} e^{ik_1 x} \end{pmatrix} \quad (\text{II. 30})$$

Par translation des x vers l'origine O , et puisque $k_1 = k_3$, et $m_1 = m_3 = m_a$ donc:

$$M = \frac{1}{2} \frac{m_a}{ik_1} \begin{pmatrix} -\frac{ik_1}{m_a} & -1 \\ -\frac{ik_1}{m_a} & 1 \end{pmatrix} \cdot Du(b-0) \cdot \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ \frac{ik_1}{m_a} & -\frac{ik_1}{m_a} \end{pmatrix} \quad (\text{II. 31})$$

L'équation obtenue en (II.31) est la matrice de transfert à travers la barrière de potentiel de forme rectangulaire d'épaisseur b .

II.3.1. Matrice de transfert pour un système à deux barrières:

Le profil de potentiel des structures étudiées, est résolu en employant le formalisme de la matrice de transfert (Gomez et al., 2002)[15], dans ce cas-ci, les amplitudes entrantes et sortantes sont reliées par une matrice complexe (2×2), son interprétation physique est directe: Elle introduit la réponse du système en terme de matrice obtenue à partir d'une relation linéaire liant les fonctions d'onde et leurs premières dérivées au niveau des interfaces (Nimour et al., 1998) [15].

La structure que nous étudierons est celle d'une double barrière (Figure II.4).

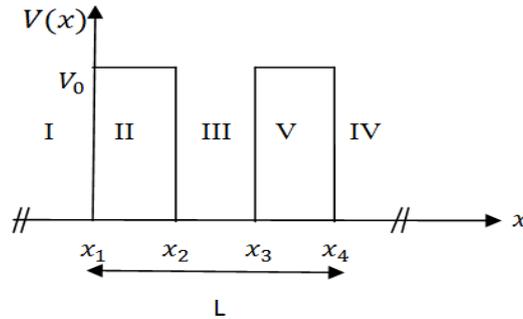


Figure II.4: Profil de potentiel d'un superréseau à deux barrières rectangulaires.

Dans chaque région, il existe une onde plane associée à l'électron qui se propage. L'équation de Schrödinger est définie pour chaque région comme suit:

Région I:

$$\begin{aligned} \psi_I(x) &= A_1 \cdot e^{ik_1 x} + B_1 \cdot e^{-ik_1 x} \\ &= 1 \cdot e^{ik_1 x} + R \cdot e^{-ik_1 x} \end{aligned} \quad (\text{II. 32})$$

Telle que 1 représente l'amplitude de l'onde incident et R celle de l'onde réfléchie.

$$\text{Région II:} \quad \psi_{II}(x) = A_2 \cdot e^{ik_2x} + B_2 \cdot e^{-ik_2x} \quad (\text{II. 33})$$

$$\text{Région III:} \quad \psi_{III}(x) = A_3 \cdot e^{ik_3x} + B_3 \cdot e^{-ik_3x} \quad (\text{II. 34})$$

$$\text{Région IV:} \quad \psi_{IV}(x) = A_4 \cdot e^{ik_4x} + B_4 \cdot e^{-ik_4x} \quad (\text{II. 35})$$

$$\text{Région V:} \quad \psi_V(x) = A_5 \cdot e^{ik_5x} + B_5 \cdot e^{-ik_5x} = \tau \cdot e^{ik_5x} + 0 \cdot e^{-ik_5x} \quad (\text{II. 36})$$

Nous avons:

$$V_1(x) = V_3(x) = V_5(x) = 0 \text{ et } m_1(x) = m_3(x) = m_5(x) = m_a$$

$$\text{Avec } k_1 = k_3 = k_5 = \sqrt{\frac{2m_a E}{\hbar^2}} \quad (\text{II.37})$$

$$\text{Et: } V_2(x) = V_4(x) = V_0 \text{ et } m_2(x) = m_4(x) = m_b \text{ Avec } k_2 = k_4 = \sqrt{\frac{2m_b(E-V_0)}{\hbar^2}} \quad (\text{II.38})$$

En utilisant les conditions de continuité de Bastard, pour un électron incident venant de la gauche à chaque interface, on obtient la relation entre d'amplitude réfléchie R et transmise τ . La relation reliant les coefficients de la région (I) à ceux de la région (V) s'écrit :

$$\begin{pmatrix} 1 \\ R \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} \tau \\ 0 \end{pmatrix} \quad (\text{II. 39})$$

Où M est la matrice de transfert de tout le système:

$$\begin{pmatrix} 1 \\ R \end{pmatrix} = S_{I \rightarrow II}^{-1}(x_1) \cdot S_{II \rightarrow III}(x_1) \cdot S_{III \rightarrow IV}^{-1}(x_2) \cdot S_{IV \rightarrow V}(x_2) \cdot S_{V \rightarrow IV}^{-1}(x_3) \cdot S_{IV \rightarrow III}(x_3) \cdot S_{III \rightarrow II}^{-1}(x_4) \cdot S_{II \rightarrow I}(x_4) \cdot \begin{pmatrix} \tau \\ 0 \end{pmatrix} \quad (\text{II.40})$$

Donc :

$$M = \begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{pmatrix} = -\frac{1}{2} \frac{m_1}{ik_1} \begin{pmatrix} -\frac{ik_1}{m_1} e^{-ik_1 x_1} & -e^{-ik_1 x_1} \\ -\frac{ik_1}{m_1} e^{ik_1 x_1} & e^{ik_1 x_1} \end{pmatrix} \cdot S(0, L) \cdot \begin{pmatrix} e^{ik_5 x_4} & e^{-ik_5 x_4} \\ \frac{ik_5}{m_5} e^{ik_5 x_4} & -\frac{ik_5}{m_5} e^{ik_5 x_4} \end{pmatrix} \quad (\text{II.41})$$

$$\text{Où:} \quad S(0, L) = S_{II \rightarrow I}(x_1) \cdot S_{III \rightarrow II}^{-1}(x_2) \cdot S_{IV \rightarrow III}(x_2) \cdot S_{V \rightarrow IV}^{-1}(x_3) \cdot S_{IV \rightarrow III}(x_3) \cdot S_{IV \rightarrow I}^{-1}(x_4) \quad (\text{II. 42})$$

Par translation du système vers l'origine 0, x_1 et x_4 tendent vers la valeur 0, on obtient :

$$M = -\frac{1}{2} \frac{m_1}{ik_1} \begin{pmatrix} -\frac{ik_1}{m_1} & -1 \\ -\frac{ik_1}{m_1} & 1 \end{pmatrix} \cdot S(0, L) \cdot \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ \frac{ik_5}{m_1} & -\frac{ik_5}{m_1} \end{pmatrix} \quad (\text{II. 43})$$

Où la matrices $S(0, L)$ peut être formulée en termes de matrices élémentaires de diffusion $D_j(l)$ associées à chaque région j du potentiel ayant une largeur l :

$$S(0, L) = \prod_{j=2}^4 D_j(l) = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{pmatrix} \quad (\text{II.44})$$

$$D_j(l) = \begin{pmatrix} \cos k_j l & \frac{m_j}{k_j} \sin k_j l \\ \frac{k_j}{m_j} \sin k_j l & \cos k_j l \end{pmatrix} \quad \text{pour } E - V_j \geq 0 \quad (\text{II.45})$$

$$D_j(l) = \begin{pmatrix} \text{ch } \rho_j l & \frac{m_j}{\rho_j} \text{sh } \rho_j l \\ \frac{\rho_j}{m_j} \text{sh } \rho_j l & \text{ch } \rho_j l \end{pmatrix} \quad \text{pour } E - V_j \leq 0 \quad (\text{II.46})$$

$$\rho_j = \sqrt{\frac{2m_j(V_j - E)}{\hbar^2}} \quad (\text{II.47})$$

Où $j=2, 3, 4$

Le coefficient de transmission est obtenu à partir du rapport du flux transmis (les fonctions d'onde de l'émetteur) sur le flux incident (des fonctions d'onde du collecteur):

$$T = \frac{k_5}{k_1} \cdot \tau^* \cdot \tau \quad \text{Avec } \tau = \frac{1}{M_{11}} \quad (\text{II.48})$$

Avec:

$$M_{11} = \frac{1}{2} \left[\left(S_{11} + \frac{k_5}{k_1} \cdot S_{22} \right) + i \left(\frac{k_5 S_{12}}{m_1} - \frac{S_{21} m_1}{k_1} \right) \right] \quad (\text{II.49})$$

Est le premier élément de la matrice de transfert M , donc:

$$T = \frac{\left(\frac{k_5}{k_1} \right)}{\left(S_{11} + \frac{k_5}{k_1} \cdot S_{22} \right)^2 + \left(\frac{k_5 S_{12}}{m_1} - \frac{S_{21} m_1}{k_1} \right)^2} \quad (\text{II.50})$$

II.3.2.Méthode approchée: Formalisme des ondes planes:

C'est une méthode générale calculant le coefficient de transmission T à travers un profil de potentiel arbitraire. Elle procède par un calcul approché des solutions de l'équation de Schrödinger par le biais des ondes planes: Le potentiel est discrétisé en plusieurs paliers, c'est-à-dire, approximé par une somme de potentiels constants dans toutes les cellules, comme il est montré sur la figure suivante.

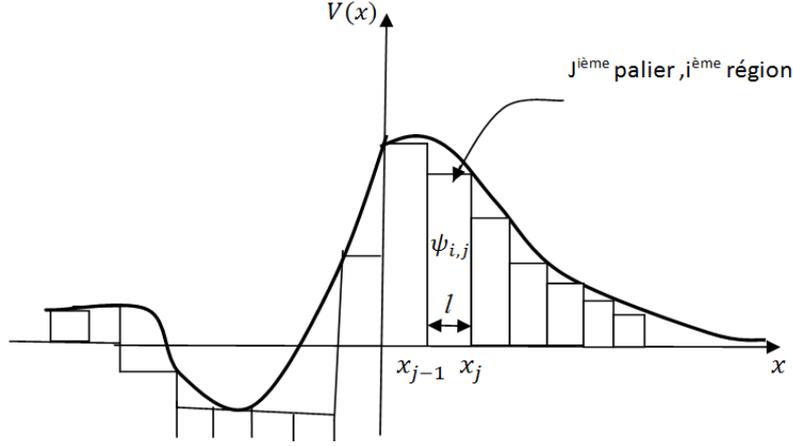


Figure II.5: Profil de potentiel arbitraire.

Lorsque le potentiel de la structure n'est pas constant, l'équation de Schrödinger, ne peut être résolue de façon directe. Le profil de potentiel est donc divisé en N palier rectangulaires d'épaisseurs l , dans chaque région i et palier j , le potentiel et la masse effective sont considérés constants. Les solutions de l'équation de Schrödinger pour chaque palier sont des ondes planes.

$$\psi_{i,j}(x) = A_{i,j} \cdot e^{ik_{i,j}x} + B_{i,j} \cdot e^{-ik_{i,j}x} \quad (\text{II.51})$$

Où $A_{i,j}$ et $B_{i,j}$ sont les amplitudes du $j^{\text{ième}}$ palier dans la $i^{\text{ième}}$ région. Les $k_{i,j}$ sont les vecteurs d'ondes correspondants aux mêmes paliers.

Donc en utilisant le modèle de la matrice de transfert et les conditions de continuité de Bastard au niveau de chaque palier, la relation entre l'amplitude réfléchiée R et transmise τ est donnée comme suit:

$$\begin{pmatrix} 1 \\ R \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} \tau \\ 0 \end{pmatrix} \text{ et } S(0, L) = \prod_{i,j=1}^N D_{i,j}(l) = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{pmatrix} \quad (\text{II.52})$$

$$D_{i,j}(l) = \begin{pmatrix} \cos k_{i,j}l & \frac{m_{i,j}}{k_{i,j}} \sin k_{i,j}l \\ \frac{k_{i,j}}{m_{i,j}} \sin k_{i,j}l & \cos k_{i,j}l \end{pmatrix} \quad (\text{II.53})$$

II.4. L'interaction électron-électron:

La dualité onde-corpuscule énoncée par De Broglie, implique que les électrons dans les structure sont décrits à la fois par des particules et par des ondes, lorsqu'une ou plusieurs dimensions sont comparables à la longueur d'onde électronique. Augmenter le confinement

dans ces structures a aussi pour effet d'augmenter les interactions entre électrons, ce qui peut bouleverser profondément la nature des états électroniques dans la structure.

II.4.1. Equation de Schrödinger nonlinéaire:

Dans les années vingt, est apparue la formalisation mathématique par Erwin Schrödinger du mouvement d'un ensemble d'électrons et d'atomes sous la forme d'une équation d'onde. Cette équation est la clef de voûte de la chimie quantique. Malheureusement, elle n'est soluble exactement que pour des systèmes atomiques ou moléculaires ne comprenant qu'un seul électron. Pour des systèmes possédant un nombre d'électrons plus important, on doit se contenter d'une solution approchée.

L'équation de Schrödinger a été utilisée pour résoudre et comprendre le problème de transmission dans les systèmes nonlinéaires, prenant en considération la propagation d'un second électron en même temps que le premier dans le milieu, de ce fait, on rajoute un troisième terme à l'équation, cette dernière devient nonlinéaire [11]:

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*(x)} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + [V(x) - E] \cdot \psi(x) + \alpha \cdot |\psi|^2 \cdot \psi(x) = 0 \quad (\text{II. 54})$$

α est le coefficient d'interaction électronique, ou encore le taux d'interaction électronique, il explique la possibilité d'une quelconque interaction entre les deux électrons. Il peut prendre les valeurs allant de 0 à 1. Lorsque $\alpha = 0$, il n'existe aucune interaction entre les électrons, il y a donc propagation d'un électron solitaire dans la structure: C'est le cas linéaire. Tandis que lorsque $\alpha=1$, il y a une complète interaction entre les deux électrons. Les valeurs comprises entre 0 et 1 correspondent à une interaction électronique plus ou moins forte dans l'état permis. α est positif dans le cas de l'interaction électron-électron, à l'inverse, il est négatif dans celui l'interaction électron-phonon.

Le terme $|\psi|^2$ est la probabilité de présence de l'électron. Ainsi, le terme $\alpha \cdot |\psi|^2$ traduit l'interaction coulombienne. Il est appelé aussi probabilité d'interaction électronique [16].

La prise en compte des interactions électron-électron dans les systèmes permet d'envisager une modification dans la fonction de distribution des électrons. Molina et al. [15] ont étudié l'équation de Schrödinger nonlinéaire discrète avec le modèle des liaisons fortes. Leurs résultats montrent que lorsque l'interaction électron-électron est prédominante par rapport à l'interaction électron-phonon, la probabilité de transition est différente de celle obtenue pour le transport avec une interaction électron-phonon. La localisation/délocalisation des fonctions d'ondes des électrons est induite selon le type de l'interaction et selon la nature

du potentiel (puits ou barrières) [11]. Afin de pouvoir résoudre une telle équation, il est nécessaire d'introduire la notion de potentiel effective.

II.4.2. Notion de potentiel effectif:

Le potentiel effectif est une expression mathématique de l'énergie d'un corps en interaction. Lorsqu'on peut réunir le potentiel $V(x)$ et la probabilité d'interaction électronique dans Schrödinger nonlinéaire en un seul terme, appelé potentiel effective V_{eff} , l'équation (II. 37) peut s'écrire alors sous la forme suivante:

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*(x)} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + [V_{eff} - E] \cdot \psi(x) = 0 \quad (\text{II. 55})$$

Le développement de l'expression donnant ce potentiel effectif dans les différentes régions (puits/ barrières) est donné dans ce qui suit:

$$V_{eff}(x) = \begin{cases} \alpha|\psi|^2 & x \leq 0 \\ V_0 + \alpha|\psi|^2 & m^* = m_b \text{ dans les barrières} \\ \alpha|\psi|^2 & m^* = m_a \text{ dans les puits} \\ \alpha|\psi|^2 & x \geq L \end{cases} \quad (\text{II. 56})$$

Où L est la longueur du système étudié.

Lorsqu'on additionne le terme de probabilité d'interaction électronique, le profil de potentiel devient aléatoire. Il s'agit ici de résoudre l'équation de Schrödinger ayant un potentiel variant rapidement. Pour ce faire, nous faisons appel à la technique de la matrice de transfert, ainsi qu'à celle des ondes planes, et réduire le problème au cas de petits paliers rectangulaires représentées ici par des petites barrières [11].

I.5.Conclusion:

Dans ce chapitre, le formalisme présentant la résolution de l'équation de Schrödinger associée au potentiel des systèmes considérés, a été réalisé pour l'étude d'hétérostructures, en introduisant l'approximation de la masse effective, ainsi que les conditions de continuité de Bastard. Cette résolution basée sur la technique de la matrice de transfert et celle des ondes planes permet de déterminer la transmission électronique à travers les différentes barrières, ce qui nous permet d'avoir un aperçu général sur les différents états électroniques de la structure (localisation, délocalisation...).

La nonlinéarité interprétant les interactions électroniques à été intégrée dans l'équation de Schrödinger via un potentiel effectif. La méthode de résolution adoptée reste la même.

Chapitre III:
Résultats et discussions

III.1.Introduction:

Dans les systèmes réels, la nonlinéarité traduit l'effet des interactions électron-électron qu'on modélise par un terme α dans l'équation de Schrödinger. L'origine de cette nonlinéarité peut correspondre à d'autres interactions physiques. Dans les systèmes électroniques, elle devrait correspondre à la répulsion Coulombienne entre électrons confinés. Plusieurs travaux ont été effectués sur ce phénomène car la transmission électronique change la décroissance exponentielle du coefficient de transmission, ce qui donne lieu à une délocalisation des états. Molina et al [15] en étudiant les propriétés de transport d'un alliage binaire nonlinéaire et en utilisant un Hamiltonien tight-binding (Liaison étroite), ont confirmé le comportement en loi de puissance de la transmission mais concluaient que la délocalisation disparaît quand la nonlinéarité devient faible.

Nous avons appliqué notre programme sur des structures ordonnées, linéaires, à double barrière, non soumises à un potentiel externe pour valider le calcul, puis nous avons intégré la nonlinéarité à traverses le coefficient d'interaction électronique, ce qui nous a permis d'observer un nouveau comportement de la structure étudiée.

La localisation est un phénomène qui peut apparaître lorsqu'une onde se propage dans un milieu désordonné (inhomogène). Ce phénomène a été découvert par Anderson [17] pour expliquer la transition métal-isolant. Cette idée de localisation a permis la découverte de nouveaux phénomènes et a ouvert la voie à une physique très riche dans les structures superréseaux. Il est utile donc d'avoir des notions sur les caractéristiques des phénomènes de localisation.

III.2. Nature des états dans un solide cristallin:

III.2.1. Etats étendus:

La répartition régulière, dans tout l'espace, d'unités structurales identiques décrit un cristal idéal. La conséquence de la périodicité du système en est que toute grandeur liée au système doit être périodique telle que l'énergie potentielle et la fonction d'onde. Les travaux de Bloch [18] donnent les fonctions d'onde des états électroniques étendus dans tout l'espace sous la forme d'onde de Bloch (Figure III.1) qui est le produit d'une onde plane: $\exp(i\vec{k} \cdot \vec{r})$ par une fonction périodique $U_n(\vec{r})$ c'est-à-dire:

$$U_n(\vec{r} + \vec{R})=U_n(\vec{r}) \text{ avec } \vec{R} \text{ le vecteur de translation du réseau, } \vec{k} \text{ le vecteur d'onde et } n \text{ l'indice de la bande, donc:} \quad \psi_{n, k}=U_n(\vec{r})\exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}) \quad (\text{III.1})$$

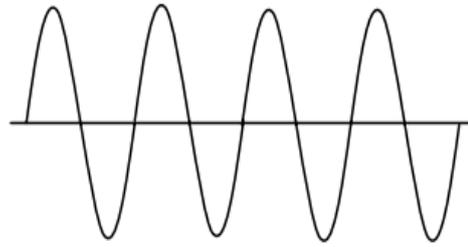


Figure III.1 : Représentation d'états étendus de Bloch d'un système ordonné [19].

III.2.2. Etats localisés et délocalisés:

En réalité, il n'y a pas de système idéalement ordonné, il y a toujours des déformations dues à la présence d'impuretés, dislocations, lacunes et d'autres défauts. A cause de l'existence de ces derniers dans les cristaux, le théorème de Bloch n'est plus vérifié, les fonctions d'onde perdent leur périodicité et le matériau devient désordonné. On distingue trois types d'états électroniques : Etat étendu, délocalisé et localisé.

a- Localisation des états électroniques:

Si le désordre est assez fort, le cristal perd toutes les symétries par translation et l'électron perd sa phase à cause des interférences destructives des ondes. Sa fonction d'onde devient localisée dans une région bien précise. Le comportement asymptotique des états localisés est décrit par une décroissance exponentielle en fonction de la taille du système sous la forme:

$$\psi(L) \propto \exp\left(-\frac{L}{\xi}\right) \quad (\text{III.2})$$

Où L est la taille du système et ξ la longueur de localisation, elle tend vers l'infinie lorsque les états sont étendus. Les états localisés peuvent s'expliquer physiquement par le fait que les électrons restent piégés dans les puits de potentiel.

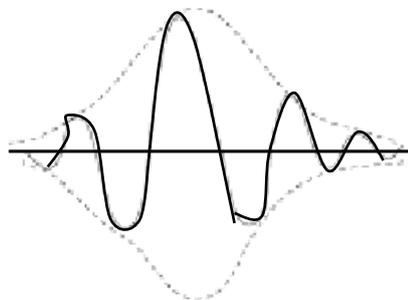


Figure III.2: Représentation d'un état localisé où la fonction enveloppe est confinée dans une région finie de l'espace [19].

b- Délocalisation des états électronique:

En présence d'un désordre faible, on peut utiliser les concepts de translation développés pour les systèmes ordonnés, les états propres restent sous la forme de fonction de Bloch étendues mais non périodiques:

$$\psi(r) \propto \exp(i\vec{k}\vec{r}) \quad (\text{III.3})$$

Nous allons, dans ce qui suit, examiner la transmission électronique ainsi que la nature des états lorsque l'interaction électronique prend place dans le système.

III.3. Résultats et discussions:

L'étude des propriétés de transmission des hétérostructures électroniques obtenues en juxtaposant des couches de matériaux différents avait donné un nouvel essor à la physique des semiconducteurs qui décrit le comportement d'un électron dans ces matériaux, quantifie son énergie, et le fait déplacer à l'intérieur des bandes permises appelées minibandes, et ceux le long d'un système multipuits et multibarrières. La richesse d'une telle structure réside dans l'apparition de ces minibandes permises.

Nous limitons notre étude sur une structure à double barrière de potentiel de hauteur V_0 , fabriquée à partir d'un substrat GaAs pour construire un système AlGaAs après avoir substitué quelques atomes de Gallium par des atomes d'Aluminium

III.3.1. Etude de la structure dans le cas statique:

a- Sans l'influence de l'interaction électronique:

Le système étudié est composé de deux barrières rectangulaires. Nous considérons un superréseau constitué de deux semiconducteurs ayant pour largeur de puits a et une épaisseur de barrière b , tout deux variables. La période du système $P = a + b$ est constante le long de la structure.

Pour le matériau ternaire $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, nous avons pris des concentrations d'Aluminium inférieures à 45%, afin d'exclure la complexité du transport. La concentration x de cet élément détermine de façon directe la hauteur de barrière V_0 à l'interface de l'hétérostructure. Au-delà de 45%, le gap devient indirect. L'expression du potentiel de ce superréseau utilisant la règle des 60% des queues de bande de conduction, est donnée par la relation ci-dessous [20]:

$$V_{str} = V_0 = 0,6 \cdot (1,247 \cdot x) \quad \text{Pour } 0 \leq x \leq 0,45 \quad (\text{III.4})$$

Par ailleurs, il nous faut conserver une hauteur de barrière suffisante pour observer l'effet tunnel. Compte tenu de ces contraintes, nous avons utilisé des concentrations de l'ordre de 35%, correspondant la hauteur de barrières $V_0=0,26\text{eV}$.

La masse effective varie en fonction de la position, plus exactement, dans la direction de croissance du superréseau. Dans une structure GaAs/ AlGaAs la masse effective est donnée par la relation (III.5):

$$m^*(x) = (0,067 + 0,083 \cdot x) \cdot m_0 \quad (\text{III.5})$$

Les masses effectives correspondantes dans chaque région du potentiel sont $m_a = 0,067m_0$ où m_a est la masse effective dans le puits, et $m_b = 0,1087m_0$ la masse effective dans les barrières de hauteur V_0 . m_0 est la masse de l'électron libre. Pour une concentration d'aluminium $x = 0,35$, Le fond du puits de GaAs a été choisi comme référence d'énergie. La masse effective se calcule dans tous les cas avec:

$$\left(\frac{1}{m_e^*}\right) = \frac{1}{\hbar^2} \left(\frac{d^2E(k)}{dk^2}\right) \quad (\text{III.6})$$

Un programme de simulation En Fortran Power Station V.4 basé sur le formalisme de l'équation de Schrödinger associée au potentiel des systèmes étudiés a été réalisé pour l'étude des hétérostructures, il permet de déterminer la transmission électronique à travers tous le système quantique.

Nous choisissons pour la structure à double barrière une hauteur de barrière $V_0=0,26\text{eV}$ correspondante à la concentration en Aluminium mentionnée plus haut, et en l'absence d'un champ externe. Nous faisons varier tour à tour les paramètres structuraux a et b , largeur de puits et épaisseur des barrières respectivement.

Sur la figure III.3, nous avons reporté les résultats de la probabilité de transmission électronique à travers la double barrière dans le cas statique. On observe un pic de transmission traduisant l'état résonant appelé état étendu puisque la valeur du coefficient de transmission ce cet état est égale à l'unité dans les deux cas. Par ailleurs, le comportement de ces états diffère avec la variation des paramètres de structure. En effet, en augmentant la largeur de puits de 15Å à 30Å , on remarque un décalage de la résonance vers les basses énergies signe du confinement des états vers le fond du puits plus celui-ci devient large. Le nombre des pics est lié au nombre de puits dans le superréseau.

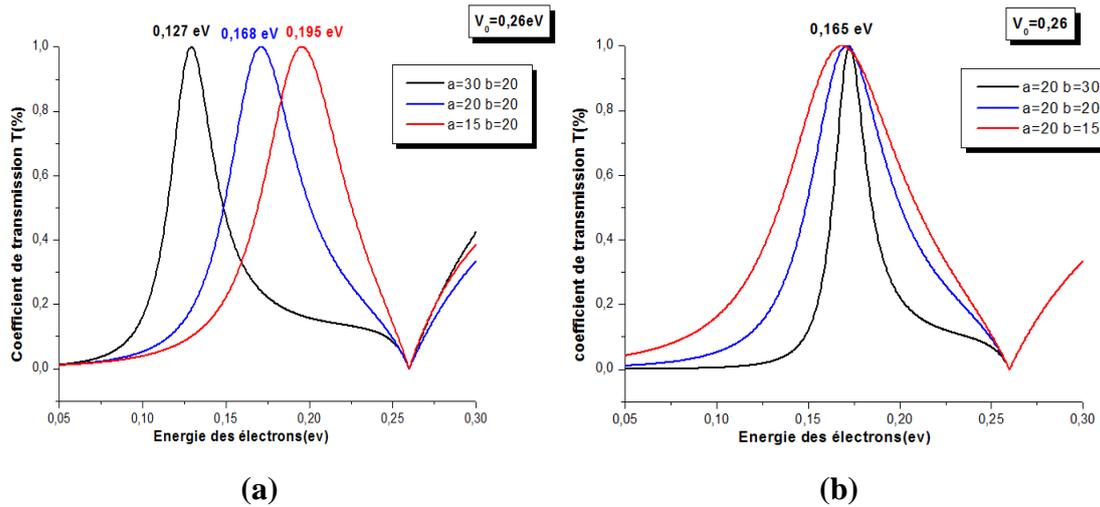


Figure III.3: Coefficient de transmission électronique en fonction de l'énergie de l'électron dans une structure à double barrière, (a) pour différents largeurs de puits, (b) pour différentes épaisseurs de barrière.

En augmentant l'épaisseur des barrières de 15Å jusqu'à 30Å tout en gardant une largeur de puits fixe, nous observons un état étendu dans le puits pour chaque structure, mais localisés à la même énergie de résonance $E = 0,165$ eV. La différence avec le cas précédent et que nous obtenons un rétrécissement des pics de transmission sans translation de ce dernier, ceci est dû au fait que les bandes permises deviennent plus étroites. Par conséquent, le recouvrement entre les ondes électroniques des différentes régions augmente lorsque l'épaisseur de barrière devient plus petite.

Pour les deux cas étudiés les d'états étendus sont singulièrement localisés aux valeurs $E = V_0$, l'énergie des électrons E prend alors les valeurs que V_0 . Dans ce cas là, la particule se trouve au sommet de la barrière, et nous observons une annulation de la transmission.

b- Influence de l'interaction électronique:

Nous étudions à présent le cas de l'influence de l'interaction électronique sur les propriétés de transmission du superréseau $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ ayant les mêmes caractéristiques choisies plus haut. Le coefficient d'interaction α représente la répulsion entre deux particules, il varie de 0 jusqu'à 1 suivant que l'interaction soit plus ou moins forte.

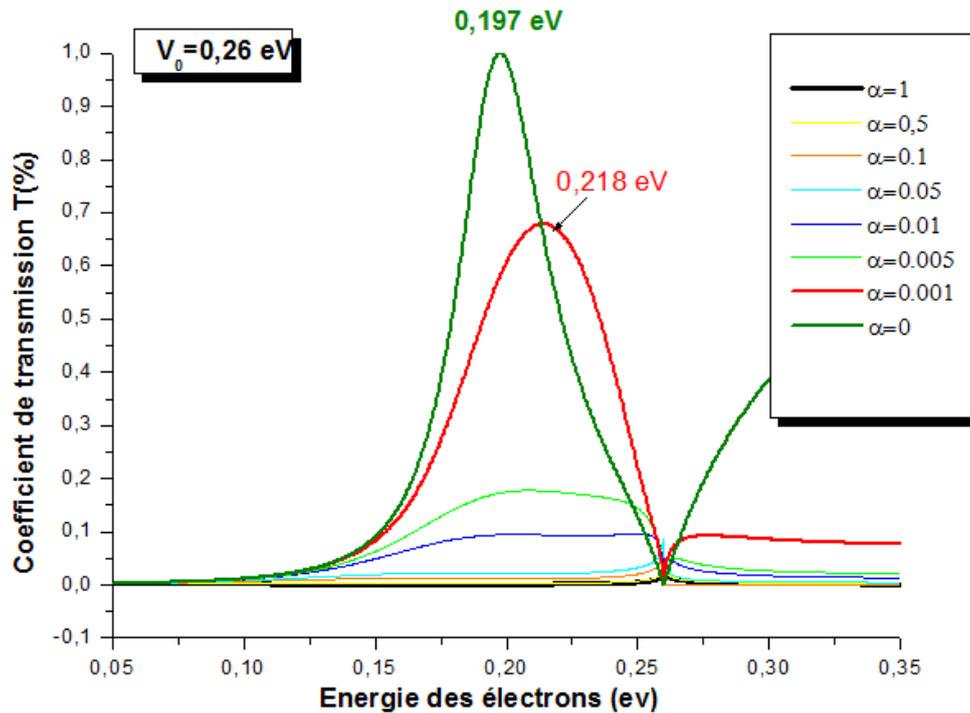


Figure III.4: Coefficient de transmission électronique en fonction de l'énergie des l'électron, pour plusieurs taux d'interaction α .

Nous observons sur la figure III.4, une diminution considérable de la transmission à travers la structure étudiée lors de l'introduction d'un second électron qui se propage en même temps que le premier; Cette diminution est due aux interférences destructives entre les fonctions d'onde électroniques des deux particules qui se propage au sein de la même région.

Pour des valeurs du taux d'interaction non nul, nous observons une transmission qui, cependant, n'atteint pas l'unité: C'est l'état délocalisé qui correspond à une transmission limitée.

Il n'existe pas de transmission dans la structure étudiée pour un taux d'interaction supérieur à 0,05, les électrons restent confinés au fond du puits de potentiel: On dit que les états sont localisés.

Nous observons également sur la même figure un autre phénomène, celui du décalage des états permis vers des énergies plus élevée. En effet, plus l'interaction Coulombienne est forte, plus l'énergie de résonance des états est grande, ce qui se traduit par un décalage des états permis vers le haut du puits. Ceci s'explique par le fait qu'en rajoutant le terme de la répulsion électronique dans l'équation de Schrödinger, nous obtenons un nouveau potentiel V_{eff} arbitraire qui augment et varie très rapidement d'où l'apparition d'une déformation vers le haut du puits. Ceci est illustré sur la figure III.5.

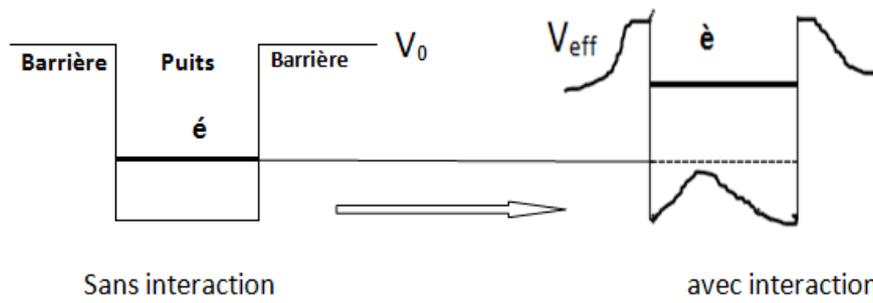


Figure III.5: Représentation qualitative du profil de potentiel et des états permis avec et sans interaction électron-électron à l'intérieur du puits quantique.

III.4.Conclusion:

Ce travail a pour but l'étude d'un système de matériaux promoteurs à base de GaAs– $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ sur substrat de GaAs. Nous avons étudié l'effet de l'interaction entre les électrons sur les propriétés de transmission électronique dans une structure à double barrière non soumise au potentiel externe. La nonlinéarité traduit l'interaction entre les deux électrons adjacents et introduit un potentiel effectif dans l'équation de Schrödinger. Nous avons montré, à partir des calculs de la transmission dans la structure tout en préservant la périodicité du système, que l'introduction d'une quelconque interaction au sein du superréseau procure des états électroniques délocalisés caractérisés par une probabilité de transmission inférieure à 1, et ce, pour de faibles interactions. Les états deviennent complètement localisés pour de fortes interactions. Cette diminution de la transmission électronique est due aux interférences destructives entre les fonctions d'ondes électroniques.

L'autre phénomène observé est la surélévation du potentiel à l'intérieur du puits quantique, ce qui entraîne le décalage des états permis vers des énergies supérieures.

Conclusion générale

Nous avons étudié dans ce travail les propriétés de transport électronique dans un superréseau GaAs/ AlGaAs incluant l'effet de l'interaction électronique. Cette interaction est introduite dans l'équation de Schrödinger par un terme, que nous reformulons en un nouveau potentiel appelé potentiel effectif. Ce dernier varie très rapidement et de manière aléatoire.

Pour résoudre une telle équation, nous avons fait appel à la technique de la matrice de transfert combinée à celle des ondes planes. Les résultats théoriques de la modélisation du coefficient de transport électronique dans le système à double barrières étudié $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ nous permet d'observer une délocalisation des états pour de faibles taux d'interaction, et des états fortement localisés pour des taux d'interaction relativement élevés. Les résultats obtenus dans ce travail sont en accords avec ceux trouvés dans la littérature [21] [22].

Références Bibliographiques:

- [1] S. HUPPERT, Transport non-linéaire et génération Térakertz dans des systèmes bidimensionnels sous forte irradiation optique, Thèse de doctorat, l'Université Pierre et Marie Curie, 2014.
- [2] I. ZORKANI, Préparation et propriétés dans l'infrarouge lointain de films épitaxiaux d'Arséniure de Galium, Thèse de Doctorat, Université de Nancy, 1985.
- [3] G. BASTARD, Phys, Rev. B 24, 5693 (1981)
- [4] P. MOUNAIX, Hétérostructures double barrière pour la réalisation de diodes et de transistors à effet tunnel résonnant, Thèse de Doctorat, à l'université des Sciences et Technologies de Lille, 1992.
- [5] N. TOURABI, Etude du courant tunnel résonant de trous dans les nanostructures de ZnO/ MgZnO, Mémoire de Magister, université d'Oran, 2008
- [6] I. MOUSSAOUI, A. RAHMOUNE, Etude par simulation des propriétés électriques des composants HEMTs à base d'hétérostructure AlGaAs/ GaAs, Mémoire de Master, université Djilali Bounaama, Khemis Miliana, 2014.
- [7] C. KITTEL, Physique de l'état solide, Dunod Paris, 1983.
- [8] L. ESAKI and R. TSU, Superlattice and negative differential conductivity in Semiconductors, IBM J. Res. Development, 61-65 (1970).
- [9] A.ELABIDI, Modélisation et caractérisation par le transport électronique des semiconducteurs II-VI: Application à l'alliage ternaire $Hg_{1-x}Cd_xTe$ et au superréseau $HgTe/CdTe$, Thèse de Doctorat, Université IBN ZOHR, Facultés des sciences d'Agadir, Maroc, 17/07/2010
- [10] F. LARUELLE, International workshop on aperiodic Crystal, B 47 (1986).
- [11] Z.F. MEGHOUFEL, Etude des effets non linéaires sur les propriétés de transport électroniques dans les superréseaux $Al_xGa_{1-x}As$, Thèse de Doctorat, université de Mostaganem, 2013.
- [12] A. HAMADOU, Etude physique des lasers à Semiconducteurs cas des laser à Cascades Quantiques, Thèse de Doctorat, université Farhat abbas sétif, 2010
- [13] M. DJELLOUL, Etudes statistiques de l'exposant de Lyapunov d'un système bidimensionnel désordonné, Mémoire de Magister, université d'Oran, 2009.
- [14] H. MATHIEU, Physique des semiconducteur, 5^{ème} édition, Dunod, 2004.
- [15] R. Djelti, S. Bentata, Z. Aziz, Nature des états électroniques des superréseaux (type dimer/trimer) désordonnés en hauteur de barrière, Université Abdelhamid Ibn Badis, Mostaganem, 2006.

- [16] F.Z. MEGHOUFEL, S. Bentata, S. Terkhi, F. Bendahma, S. Cherid, Electronic transmission in non-linear potential profile of GaAs/Al_xGa_{1-x}As biased quantum well structure, Superlattices and Microstructures, Volume **57**, 115-122 (2013).
- [17] P.W. Anderson, Phys. Rev.109, 1493 (1958).
- [18] F.Bloch, Z. Phys.52,555 (1928)
- [19] M. DJELLOUL, Etude statique de l'exposant de lyapunov d'un système bidimensionnel désordonné, Mémoire de Magister, université de science et de technologie, d'Oran, 2009.
- [20] R. DJELTI, S. BENTATA, Z. AZIZ et A. BESBES, Désordre structural et son effet sur les longueurs d'ondes lasers du superréseau GaAs/ Al_xGa_{1-x}As, Université Abdelhamid Ibn Badis, Mostaganem, 2009.
- [21] E. Diez, F. Domínguez-Adame, A. Sánchez, Phys. Lett. A 198, 403 (1995).
- [22] E. Diez, F. Domínguez-Adame, A. Sánchez, Phys. Lett. A 215, 103 (1996).