

République Algérienne Démocratique et Populaire
Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique

Université Abdelhamid Ibn Badis de Mostaganem



Faculté des Sciences et de la Technologie
Département de Génie des Procédés

THESE

Présentée pour l'obtention du diplôme de

DOCTORAT EN SCIENCES

Spécialité : Chimie

Par

TERKHI SABRIA

Intitulée

**MODELISATION DE L'INFLUENCE DE LA COMPOSITION
CHIMIQUE « x » DES MATERIAUX ARSENIC SUR LES
PROPRIETES DE TRANSPORT ELECTRONIQUE**

Le 17/04/2013

Le Jury composé de

Président	Pr. A. GHOMARI	Université Abdelhamid Ibn Badis de Mostaganem
Examineurs	Pr. B. BOUHAFS	Université Djillali liabes de Sidi Belabbés
	Pr. A. ZANOUN	ENSET d'Oran
	Pr. F. HAMZAOUI	Université Abdelhamid Ibn Badis de Mostaganem
Rapporteur	Pr. B. ABBAR	Université Djillali liabes de Sidi Belabbés
	Pr. S. BENTATA	Université Abdelhamid Ibn Badis de Mostaganem

Modélisation de l'influence de la composition chimique « x » des matériaux arsenic sur les propriétés de transport électronique

Résumé : Ce travail prolonge l'étude de l'effet de la variation de la fraction molaire « x » sur les propriétés optoélectroniques des superréseaux générés par des séquences spécifiques et superréseaux désordonnés. Nous avons étudié la nature des états électroniques dans ces structures au moyen de la fonction exacte d'Airy et le formalisme de la matrice de transfert. Concernant les structures générées par des séquences spécifiques, le défaut du potentiel introduit, induit dans le spectre de la transmission, une fragmentation de la minibande principale en plusieurs subminibandes séparées par des minigaps. Le nombre de minigaps créé est égal au nombre de défauts introduits. Les phénomènes observés sont les résultats des interférences destructives des fonctions d'onde électronique dus à la différence de phase, causée par les distances provoquées par les séquences des séries propres à chaque superréseau. Par contre les résultats trouvés pour les structures désordonnées en dimer et trimer en hauteur de barrières montrent la présence des états étendus situés au voisinage des résonances et possédant une grande valeur de transmission. En effet, l'existence des états étendus est due à la cellule élémentaire (Dimer/Trimer) introduite.

Mots clés : Superréseau; Fraction molaire; Matrice de transfert ; Minigaps.

Abstract: This work extends the studies of the effect of the variation of the molar fraction “ x ” on the properties optoelectronics of superlattices generated by specific sequences and disordered superlattices. We numerically studied the nature of the states of these structures by exact airy function formalism and transfer-matrix technique. Concerning Structures generated by specific sequences the fault of the potentiel introduced induced into the spectrum of the transmission a fragmentation of the principal minibande in several subminibandes separated by minigaps. The number of minigaps created equal to the number of defects introduced. The observed phenomena are the results of destructive interference of the electronic wave functions due to the phase difference caused by the distance caused by the sequences of each of the series superlattice. Against the results for the disordered structures in dimer and trimer height barriers show the presence of extended states located in the vicinity of resonances and having a high transmission value. Indeed, the existence of extended states is due to the cell (Dimer / Trimer) introduced.

Keywords: Superlattices; Transfer-matrix; molar fraction; Minigaps.

A
mon honorable Maman

Remerciements

J'aimerais tout d'abord remercier mon directeur de thèse, Monsieur *Bentata Samir*, pour m'avoir brillamment guidé au travers de cette merveilleuse aventure. Son aide dans la réalisation de ce travail a été considérable, promotrice et efficace. La confiance qu'il m'a témoignée et sa présence tout le long de ce travail ont été des soutiens dans l'accomplissement de ce mémoire. Je l'en remercie sincèrement.

Je suis particulièrement honoré par la présence de monsieur *Abdelhamid Ghomari*, Professeur à l'université de Mostaganem qui a bien accepté de présider ce jury de thèse. Qu'il soit assuré de ma profonde gratitude et de mes respects les plus distingués.

Je suis honoré aussi par la présence au jury de Monsieur *Zenoun Abdelouahed* Professeur à l'université d'Oran ENST, Monsieur *Bouhafis Bachir* Professeur à l'université de Sidi Belabbés et Monsieur *Abbar bousif* Professeur à l'université de Sidi Belabbés pour avoir accepté de se déplacer de si loin et venir examiner et scruter de si près le contenu de ma thèse de Doctorat.

Merci à Monsieur *HAMZAOUI Fodil* Professeur à l'université de Mostaganem d'avoir accepté d'examiner ce travail, et d'autre part pour leurs conseils et critiques constructives.

Cette thèse est aussi le fruit d'un travail de groupe, je souhaiterais remercier les quelques personnes qui y ont activement participé, en particulier : *R. Djelti, Z. AZIZ, M.C. Terkhi, S. Goual, Z. F. Meghoufel et A. Sefir*.

Mes remerciements vont aussi aux membres de ma famille qui m'ont toujours marqué leur soutien.

Enfin, je remercie toute l'équipe de recherche de notre laboratoire.

Sommaire

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

CHAPITRE I LES MATERIAUX SEMICONDUCTEURS III-V ET LES SUPERRESEAUX

I.1. INTRODUCTION	6
I.2. SEMICONDUCTEURS III-V	7
I.2.1. Définition	7
I.2.2. Les composés binaires, ternaires et quaternaires des semi-conducteurs III-V	8
I.2.2.1. Les composés binaires	8
I.2.2.2. Les composés ternaires et quaternaires	8
I.2.3. Structure cristalline	9
I.2.3.1. Géométrie du réseau cristallin	9
I.2.3.2. Réseau réciproque. La zone Brillouin	10
I.2.4. Etat électronique dans les semiconducteurs	11
I.2.4.1. Bande interdite	11
I.2.4.2. Notion de gap direct et gap indirect	13
I.2.4.3. Structure des bandes d'énergie des semi-conducteurs III - V	13
I.2.5. Bandes interdites et Intérêt des semiconducteurs III-V	15
I.2.6. Dopage	17
I.2.6.1. Semi-conducteur dopé n	17
I.2.6.2. Semi-conducteur dopé p	18
I.2.6.3. Technologies de dopage dans la microélectronique	18
I.2.6.3.1 Dopage par diffusion	18
I.2.6.3.2. Dopage par implantation ionique	19
I.2.7. Masse effective des porteurs de charge	19
I.2.8. Interaction lumière-semiconducteur	20
I.3. SUPERRESEAUX	20
I.3.1. Historique des superréseaux	20
I.3.2. Définition d'un superréseau	21
I.3.3. Techniques de fabrication	22
I.3.3.1. Epitaxie par jets moléculaires	22
I.3.3.2. Epitaxie en phase vapeur des organométalliques	23
I.3.4. Types de superréseaux	24
I.3.4.1. Superréseaux à puits et à barrières rectangulaires	24
I.3.4.2. Superréseaux à puits quantiques paraboliques	25
I.3.4.3. Superréseaux polytypes	25
I.3.4.4. Superréseaux à dents de scie	26
I.3.4.5 Superréseaux à masse effective	26
I.3.4.6 Superréseaux quasipériodiques	27
I.3.4.7. Superréseaux à potentiel de MATHIEU	28
I.3.4.8. Superréseaux à modulation de dopage	28
I.3.5. Classes de superréseaux	29
I.3.5.1. Superréseaux de type I	29
I.3.5.2. superréseaux de type II	29
I.3.6. Phénomène de transport électronique dans les superréseaux	29
I.3.6.1. Effet tunnel résonnant	29

I.3.6.2. Coefficient de transmission	31
I.3.6.3. Structure de minibande	32
I.3.6.4. Temps de l'effet tunnel résonnant	34
I.3.7. Application lasers	34
I.3.7.1. Diode laser	36
I.3.7.1.1. Composés GaAs/GaAlAs	37
I.3.7.1.2. Composés GaInAs/GaAlAs	38
I.3.7.2. Le laser à cascade quantique	39
I.4. CONCLUSION	40
I.5. REFERENCES	41

CHAPITRE II

LES SYSTEMES UNIDIMENSIONNELS DESORDONNES

II.1. INTRODUCTION	47
II.2. SYSTEME ORDONNÉ	48
II.2.1. Etats électroniques d'un système Ordonné	48
II.3. SYSTEMES DESORDONNÉS	49
II.3.1. Types de désordre dans les systèmes désordonnés	49
II.3.2. Etats électroniques d'un système désordonné	49
II.3.2.1. La localisation d'Anderson	49
II.3.2.2. Critère de la localisation d'Anderson	52
II.3.2.3. La théorie d'échelle de la localisation d'Anderson	54
II.3.2.4. La suppression de la localisation d'Anderson dans les systèmes Unidimensionnels	56
II.3.2.4.1. Constats des études analytiques et numériques	57
II.3.2.4.2. Constats de l'étude expérimentale	58
II.4. CONCLUSION	58
II.5. REFERENCES	59

CHAPITRE III

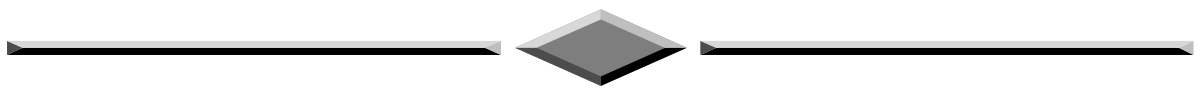
FORMALISME DE MODELISATION DE CALCULS ET SIMULATION

III.1. INTRODUCTION	62
III.2. APPROXIMATIONS DE BASE	63
III.2.1. Approximation de la masse effective	63
III.2.2. Fonction enveloppe et Conditions de continuité	64
III.3. MODELES ET METHODES THEORIQUES	65
III.3.1. Calcul de la structure de minibande	66
III.3.1.1. Modèle de Kronig-Penney	66
III.3.1.2. Méthode de la matrice de transfert	69
III.3.2. Calcul du coefficient de transmission	71
III.3.2.1. Méthode exacte « fonction d'Airy »	72
III.3.2.2. Méthode approché « des ondes planes »	75
III.4. CONCLUSION	77
III.5. REFERENCES	78

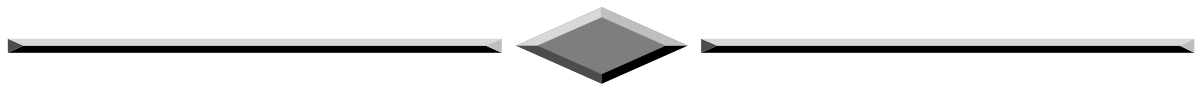
**CHAPITRE IV
RESULTATS ET DISCUSSIONS**

IV.1. INTRODUCTION	82
IV.2. SUPERRESEaux GaAs/Al _x Ga _{1-x} As	82
IV.2.1. Structures ordonnées	82
IV.2.2. Structure de séquences Monomer, dimer et trimer	84
IV.2.2.1. Structures de séquence Monomère	85
IV.2.2.2. Structures de séquence dimer	87
IV.2.2.3. Structures de séquence trimer	89
IV.2.2.3. Discussions	92
IV.2.3. Influence de la tension appliquée	93
IV.2.3.1. Structures ordonnées	95
IV.2.3.2. Structure de séquences monomer, dimer et trimer	95
IV.2.3.2.1. Structure à séquence monomer	95
IV.2.3.2.2. Structure à séquence dimer	97
IV.2.3.2.3. Structure à séquence trimer	98
IV.2.3.2.4. Discussions	100
IV.3. SUPERRESEaux InAs/Ga _{1-x} In _x As	101
IV.3.1. Paramétrisations	101
IV.3.2. Structures ordonnées à N barrières rectangulaires	101
IV.3.3. Structures désordonnées	102
IV.3.3.1. Dimer en hauteur barrières (D.H.B)	102
IV.3.3.2. Trimer en hauteur barrières (T.H.B)	104
IV.3.3.3. Effet de la concentration du désordre	105
IV.3.3.4. Influence du degré de désordre sur la position des énergies de résonance	108
IV.3.3.5. Calcul de l'exposant de Lyapunov	108
IV.3.3.6. Influence de la taille du système	109
IV.3.3.7. Influence de la tension appliquée sur les états électroniques des structures désordonnés D.H.B et T.H.B	112
IV.3.3. Longueur d'onde laser	116
IV.5. REFERENCES	118

CONCLUSION GENERALE	121
TRAVAUX LIES A CETTE THESE	125



INTRODUCTION GENERALE



INTRODUCTION GENERALE

Les techniques modernes de croissance de matériaux semiconducteurs ont permis le développement de nouveaux concepts utilisant les propriétés de structures quantiques dans ces matériaux. Cette maîtrise du dépôt de monocouches de composés semiconducteurs a contribué à l'émergence du génie quantique qui voit ces domaines d'applications variés et diffusants.

En particulier, les propriétés optiques de telle structures permettent d'entrevoir aujourd'hui des applications dans plusieurs domaines scientifiques allant de la physique, chimie, en passant par la science des matériaux jusqu'aux nouvelles applications en biologie.

En effet, avec les méthodes de croissances utilisant l'épitaxie par jets moléculaires ("Molecular Beam Epitaxy") [1-3] ou l'épitaxie en phase vapeur à partir de composé organométallique ("Metal Organic Chemical Vapor Deposition") [4-6], il est possible de réaliser des structures à puits quantiques complexes et à compositions variées aboutissant à des matériaux artificiels tel que les superréseaux ayant de nouvelles propriétés optiques et électroniques remarquable. Ces matériaux contribuent largement à l'amélioration des caractéristiques des composants optoélectroniques [7-8]. Ils sont désormais utilisés dans les télécommunications [9], diodes électroluminescentes, diodes laser [10] les détecteurs [11],...etc. Dans le cas des diodes laser, des enjeux économiques et scientifiques importants sont à l'origine d'une compétition pour obtenir une longueur d'onde toujours plus courte et des seuils sans cesse plus bas.

En 1970, les premiers superréseaux à semi conducteurs ont été réalisés par Esaki et Tsu [12]. Ils sont constitués de l'alternance périodique des couches de deux matériaux A et B. L'introduction de cette super périodicité d , généralement très grande devant la période des matériaux de départ, modifie la structure de bande initiale. Ainsi des minizones de Brillouin et de minibandes de quelques meV sont formées [13].

L'avantage de ces systèmes est que leurs propriétés optiques peuvent être modifiées en changeant leurs paramètres structuraux, plus précisément la largeur et la composition. En plus grâce à leur structure de bande transformée en mini-bandes par effet tunnel résonnant [14], les porteurs excités du système sont mieux protégés contre les relaxations par les phonons optiques considérés comme des éléments réducteurs de la transmission électronique [15].

L'effet tunnel, est un phénomène quantique de transport, désignant la capacité pour une particule d'énergie inférieure à un seuil de franchir ce dernier. Alors qu'en mécanique classique ce phénomène est inexplicable, en mécanique quantique une particule d'énergie inférieure à la hauteur de la barrière possède une probabilité très faible, mais non nulle, de passer au travers. Cet effet est interprété analytiquement par la détermination du coefficient de transmission qui est un paramètre essentiel à travers lequel plusieurs paramètres physiques peuvent être calculées, notamment : la conductivité, la résistivité... etc.

Le coefficient de transmission est calculé suite à la résolution de l'équation de Schrödinger. Pour ce faire les théoriciens ont appliqué plusieurs modèles et approximations étudiant différents types de profil de potentiel. L'efficacité de ces méthodes dépend de trois critères essentiels : la simplicité, la rapidité et la généralité.

Dans ce contexte, notre travail consiste à étudier le transport électronique dans des superréseaux unidimensionnel désordonnés. Nous nous sommes en particulier intéressés au transport électronique à travers ces systèmes pour un seul électron à température nulle. Nous avons tenté en étudiant numériquement la propagation des ondes électroniques et la nature des états électroniques dans des structures de superréseaux à puits et barrières rectangulaires en se basant sur le calcul du coefficient de transmission, à l'aide de mises au point de méthodes numériques. Nous avons, à cet effet, organisé notre travail selon le canevas suivant :

Le chapitre I a pour objet de mettre en exergue des rappels sur les semi-conducteurs III-V qui sont à la base des hétéro-structures étudiées. Il inclut une description et une étude détaillée des caractéristiques spécifiques, des propriétés physiques, des techniques de fabrication et des applications des superréseaux.

Le chapitre II est une introduction aux généralités sur les systèmes électroniques unidimensionnels ordonnés et désordonnés. Un aperçu sur l'évolution des connaissances de base vers la nature des différents états électroniques responsable du transport dans ces systèmes est ainsi présenté.

Le chapitre III présente les différentes approximations et modèles théoriques. En premier lieu, on décrit le modèle de Kronig-Penney et la méthode de Matrice de transfert pour le calcul de la structure de minibande. En seconde lieu, en exposant l'étude de l'effet tunnel résonant par le calcul du coefficient de transmission reposant sur la résolution de l'équation de Schrodinger. Deux méthodes sont présentées pour ce calcul ; l'une exacte

reposant sur la résolution de l'équation de Schrödinger pour les profils de potentiel linéaire utilisant les fonctions d'Airy et l'autre approche adaptée à toute forme du potentiel en le subdivisant en plusieurs paliers rectangulaires. Les solutions sont données par le biais des ondes planes. Ensuite en calculant le coefficient de transmission en utilisant le logiciel « SUPERRESEAUX » élaboré par notre équipe de recherche.

Le chapitre IV fait l'objet des résultats obtenus lors de la simulation en étudiant le comportement du coefficient de transmission pour des structures périodiques et aperiodiques ayant différentes configurations afin d'analyser la nature des états électroniques avec les interprétations adéquates. En étudiant ainsi des systèmes désordonnés où le désordre présente une certaine corrélation. Nous donnerons une interprétation des résultats, de l'effet du dimer et du trimer sur les propriétés de transport des différents superréseaux étudiés.

Afin de pouvoir expliquer la nature des états propres dans un superréseau désordonné en dimer et trimer, plusieurs quantités physiques ont été déterminées telles que: la transmission électronique, l'énergie de résonance, l'exposant de Lyapunov, ...etc.

Enfin, l'ensemble des résultats obtenus sur les propriétés de transmission de ces structures unidimensionnels aléatoires à désordre corrélé est présentée dans la conclusion générale ainsi que les perspectives envisagées.

RÉFÉRENCES

- [1]. Voir, Semic. Tech. 10, 606 (1995).
- [2]. A.Y. Cho and J. Arthur, Progr. Solid Stat. Chem. 30, 157 (1975).
- [3]. M. Hennini, Alg. J. Adv. Mat. 1, 2 (1998).
- [4]. R. E. Ruhrwein, U. S. Patent. 33, 64084 (1968)
- [5]. A. E. Blakeslee and C. F. Alliorra, IBM. J. Res. Dev. 14, 686 (1970).
- [6]. M. Manaserit, App. Phs. Lett. 12, 156 (1968)
- [7]. B. F. Levine, Quantum-well infrared photodetectors. Jour. App. Phy. 74 (8) 15 (1993).
- [8]. E. Rosencher, les puits quantiques et la détection infrarouge, la recherche 248, vol. 23, 1270 (1992).
- [9]. J.W. Scott, Laser Focus World 34(10) 75-78 (1998).
- [10]. L. Marshall, Laser Focus World 34(7) 139-143 (1998).
- [11]. R. Ignatius, M. Ignatius Laser Focus World 34(7) 139-143 (1998).
- [12]. L. Esaki and R. Tsu, IBM J. Res. Develop. **14**, 61(1970).
- [13]. E. Gohar, Thèse de doctorat Université Paris 07 (1992).
- [14]. B. Sapoval et C. Harmann, Physique des semiconducteurs (2006).
- [15]. T. N. Quang, Effet de spin dans les nanostructures semiconductrice : modélisation et expériences de magneto-transport. Thèse de doctorat. CNRS Marcoussis (2006).



CHAPITRE I



LES MATERIAUX
SEMICONDUCTEURS III-V
ET LES SUPERRESEAUX

CHAPITRE I

LES MATERIAUX SEMICONDUCTEURS III-V ET LES SUPERRESEAUX

I.1. INTRODUCTION

Dans l'ensemble des matériaux, les semi-conducteurs constituent une classe bien définie, avec des propriétés physiques particulières qui sont sources d'intérêt sur le plan de la connaissance fondamentale et de celui des applications. Ces deux facteurs indissociables font l'importance de ces matériaux. Principalement remarquables par leurs propriétés électroniques, les semiconducteurs interviennent dans presque tous les équipements électriques et optiques tel que les transistors, diodes, et ce qu'on appelle de manière générale circuit intégré.

Les premières hétéro-structures à basses de semi conducteurs ont été développées durant les années 1970 [I.1]. Ces dernières constituent la base de la plupart des composants opto-électroniques 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 [I.2].

Les premiers superréseaux de semi conducteurs ont été réalisés par Esaki et Tsu et consistaient en un empilement de couches ultrafines dont la période était inférieure au libre parcours moyen des électrons [I.3].

En 1985 les superréseaux métalliques et semiconducteurs ont été réalisés par Chang et Giessen [I.4]. Au début des années 1990, Lijima et al [I.5] ont réalisé les premiers superréseaux d'oxydes ferroélectriques.

Plusieurs techniques de croissance ont été utilisées pour réaliser ces superréseaux . Parmi elles, nous pouvons peut citer l'épitaxie par jets moléculaires (MBE en anglais) ou le dépôt de vapeur chimique métal-organique (MOVCD en anglais) qui ont révolutionné la technologie des semi-conducteurs [I.6].

L'objectif de ce chapitre est de définir et de présenter les caractéristiques, les classes et les modes de fabrication des superréseaux. Un aperçu sur ces différents types a

CHAPITRE I : LES MATERIAUX SEMICONDUCTEURS III-V ET LES SUPERRESEAUX

également été présenté. Mais avant d'entamer ces points une théorie générale simplifiée des semiconducteurs III-V est nécessaire.

I.2. SEMICONDUCTEURS III-V

I.2.1. Définition

Les matériaux semi-conducteurs III-V sont des semi-conducteurs composite fabriqué à partir d'un ou plusieurs éléments de la colonne III du tableau périodique des éléments (bore, aluminium, gallium, ...), et d'un ou plusieurs éléments de la colonne V (azote, phosphore, arsenic, antimoine, ...)[I.7]. Le tableau I-1 regroupe un extrait de la classification périodique de Mendeliev de certains éléments des colonnes III et V.

Tableau I.1. Extrait de la classification périodique des éléments [I.7].

Groupes Périodes	III	IV	V
II	$^{10,81}_{5}B$	$^{12,01}_{6}C$	$^{14,01}_{7}N$
III	$^{26,98}_{13}Al$	$^{28,09}_{14}Si$	$^{30,97}_{15}P$
IV	$^{69,74}_{31}Ga$	$^{72,59}_{32}Ge$	$^{74,92}_{33}As$
V	$^{114,82}_{49}In$	$^{118,69}_{50}Sn$	$^{121,75}_{51}Sb$

Les semi-conducteurs III-V sont presque tous à **gap direct** et sont les plus importants dans la conception des dispositifs optoélectroniques. Leur grande force réside dans le nombre quasi illimité d'alliages possibles entre Ga, As, Al, In et P. Cette particularité essentielle a donné aux semi-conducteurs III-V la première place pour l'optoélectronique et notamment pour les lasers semi-conducteurs [I.7]. On peu distinguer des semi-conducteurs III-V : binaires, ternaires et quaternaires.

I.2.2. Les composés binaires, ternaires et quaternaires des semi-conducteurs III-V

I.2.2.1. Les composés binaires

Les composés binaires possibles n'ont pas le même intérêt potentiel. L'étude de leurs propriétés, et en particulier de la structure de bandes montre que les éléments les plus légers donnent des composés dont lesquels la bande interdite est large et indirecte, et dans lesquels la masse effective des électrons est élevée. Les composés contenant du bore, de l'aluminium ou de l'azote entrent dans cette catégorie. Ils ont en général peu d'intérêt pour l'électronique rapide [I.8], qui demande des semi-conducteurs à forte mobilité de porteurs. Pour l'optoélectronique, une structure de bande directe est nécessaire pour que les transitions optiques soient efficaces [I.9]. A l'autre extrémité, les éléments lourds comme le thalium ($_{81}\text{Ti}$) ou le bismuth ($_{83}\text{Bi}$) donnent des composés à base de Galium (GaAs, GaSb) ou d'indium (InP, InAs, InSb) dont les propriétés sont les plus intéressantes. Le tableau (I-2) résume quelques paramètres pour différents matériaux de la famille III-V.

Tableau I.2. Paramètres des principaux composés binaires III-V [I.10-11].

Composé III-V	Eg (eV)	m^*/m_0	a(Å)
BN	7,5		3,6150
AlP	2,45	0,2	5,4510
AlAs	2,16	0,19	5,6605
AlSb	1,58	0,12	6,1355
BP	2,0		4,5380
GaN	3,36	0,19	a=3,189 (b=5,185)
GaP	2,26	0,82	5,4512
GaAs	1,42	0,067	5,6533
GaSb	0,72	0,042	6,0959
InP	1,35	0,077	5,8686
InAs	0,36	0,023	6,0584
InSb	0,17	0,0145	6,4794

I.2.2.2. Les composés ternaires et quaternaires

L'intérêt pratique des semi-conducteurs III-V est encore considérablement renforcé par la possibilité de réaliser des alliages par substitution partielle de l'un des éléments par un autre élément de la même colonne. On sait par exemple obtenir des alliages ternaires, ou quaternaires qui sont identifiés de la façon suivante :

CHAPITRE I : LES MATERIAUX SEMICONDUCTEURS III-V ET LES SUPERRESEAUX

▪ **Ternaires** : S'il y a substitution de 2 atomes sur l'un des sous réseaux, soit : $A_x A_{(1-x)} B$ Exemple: $Ga_x In_{(1-x)} P$, lorsque la composition exacte compte peu, on écrit tout court GaInP.

▪ **Quaternaires 1+3** : S'il y a substitution de 3 atomes sur des sous réseaux soit : $A_x A_y A_{(1-x-y)} B$. Exemple $Ga_x In_y Al_{(1-x-y)} As$.

▪ **Quaternaires 2+2** : S'il y a substitution de 2 atomes sur chacun des deux sous réseaux, soit : $A_x A_{(1-x)} B_y B_{(1-y)}$. Exemple $Ga_x In_{(1-x)} P_y As_{(1-y)}$.

La plupart des solution solides ainsi réalisées sont complètes, la loi de Vegar (relation linéaire entre le paramètre de réseau et la composition) est approximativement suivie, et on observe une évolution progressive et régulière des propriétés (dont la bande interdite et les paramètres cristallins) en fonction du taux de substitution.

I.2.3. Structure cristalline

I.2.3.1. Géométrie du réseau cristallin

Un cristal est construit à partir d'un groupe de "n" particules, qui constituent la cellule de base. Ce groupe est répété périodiquement en un réseau défini par, trois vecteurs de translation \vec{a} , \vec{b} et \vec{c} appelés vecteurs primitifs. La position de chaque cellule du cristal est définie par un vecteur du réseau :

$$\vec{r} = n_1 \vec{a} + n_2 \vec{b} + n_3 \vec{c} \quad (I.1)$$

Où n_1 , n_2 et n_3 sont des nombres entiers.

L'ensemble des points défini par les vecteurs \vec{r} pour toutes les valeurs de n_1, n_2, n_3 constituent le réseau. Le parallélépipède construit sur les trois vecteurs primitifs constitue la maille primitive ou maille élémentaire. Cette dernière est le plus petit élément de volume contenant toute l'information du composé ainsi étudié. Le volume de la maille élémentaire est défini par :

$$V = | \vec{a} \wedge \vec{b} \cdot \vec{c} | \quad (I.2)$$

La plupart des matériaux III-V cristallisent dans la structure sphalérite dite "Zinc Blende" présentée sur la figure (I.1). Cette structure, qui s'apparente à celle du diamant, est constituée de deux sous-réseaux cubiques à faces centrées, l'un étant constitué des atomes de l'élément III, l'autre des atomes de l'élément V [I.12-15] . Ces deux sous-réseaux sont décalés l'un par rapport à l'autre le long de la diagonale du cube, d'une quantité $(a/4, a/4, a/4)$, a étant le paramètre cristallin, c'est-à-dire la longueur de l'arête du cube élémentaire. De ce fait dans les matériaux III-V, les liaisons ne sont pas simplement covalentes comme dans le Silicium. Elles reposent sur le transfert d'électrons des atomes du groupe V sur ceux du groupe III. Cette répartition est à l'origine du caractère

partiellement covalent des liaisons (semi-conducteur polaires). Cette composante ionique de la liaison est importante, elle se manifeste par la présence de moments dipolaires électriques qui interagissent avec le rayonnement électromagnétique de grande longueur d'onde, au même titre qu'il y a interaction entre les cristaux ioniques et la lumière infrarouge [I.15]. Cette propriété est en particulier responsable de l'anisotropie optique dans les hétérostructures semi-conductrices III-V qui a été mise en évidence expérimentalement par Krebs et Voisin [I.13].

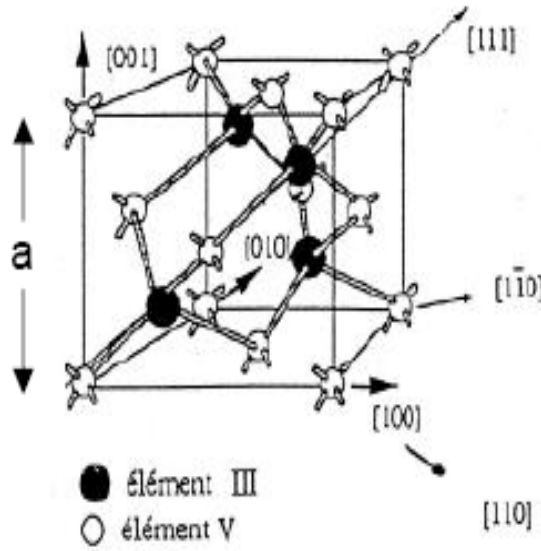


Fig. I.1. Maille élémentaire de la structure Zinc-Blende

I.2.3.2. Réseau réciproque. La zone Brillouin

A partir du réseau cristallin, on définit le réseau réciproque, qui est le système de coordonnées [énergie -vecteur d'onde] dans lequel on représente les variations des fréquences de vibrations du réseau cristallin ou de l'énergie des états électroniques en fonction du vecteur d'onde \vec{k} caractérisant la propagation de l'onde considérée [I.16]. Le réseau réciproque associé au vecteur d'onde \vec{k} de la structure de type zinc-blende est cubique centré. Sa maille élémentaire qui correspond à la première zone de Brillouin a la forme d'un octaèdre tronqué par les six faces d'un cube (Figure I.2). Elle présente un centre de symétrie à l'origine ($\vec{k} = \vec{0}$) noté Γ et des axes de symétrie:

Les axes $\langle 100 \rangle$ à symétrie d'ordre 4(Δ)

Les axes $\langle 111 \rangle$ à symétrie d'ordre 6(Λ)

Les axes $\langle 011 \rangle$ à symétrie d'ordre 2(Σ)

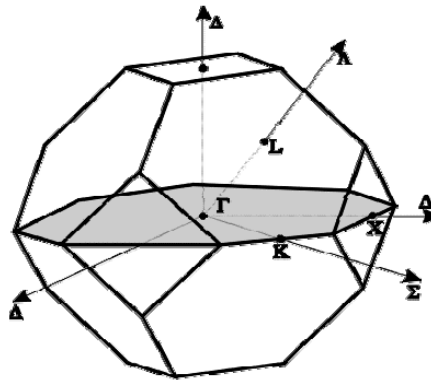


Fig. I.2. Première zone de Brillouin d'un cristal Zinc blende [I.12-14].

Les points de rencontre de chacun de ces axes avec les frontières de la zone de Brillouin jouent un rôle essentiel dans la théorie des bandes. On les note généralement de la manière suivante:

Points X de coordonnées $(2\pi/a, 0, 0)$ sur les axes $\langle 100 \rangle$.

Points L de coordonnées $(\pi/a, \pi/a, \pi/a)$ sur les axes $\langle 111 \rangle$.

Points K de coordonnées $(0, 3\pi/2a, 3\pi/2a)$ sur les axes $\langle 011 \rangle$.

La forme et le volume de la zone de Brillouin ne dépendent que de la géométrie du réseau de Bravais, sans égard à la composition chimique ou au nombre d'atomes dans la cellule unitaire. La zone de Brillouin est une cellule unitaire primitive du réseau réciproque d'importance fondamentale pour l'étude des propriétés électroniques des cristaux, en particulier dans les semi-conducteurs [I.14-15].

I.2.4. Etat électronique dans les semiconducteurs

I.2.4.1. Bande interdite

Les semi-conducteurs sont caractérisés par un écart en énergie entre la bande de conduction et la bande de valence appelée bande interdite ou gap. Le gap (E_g) est la largeur de la bande interdite, c'est-à-dire la différence d'énergie entre le minimum absolu de la bande de conduction E_c et le maximum absolu de la bande de valence E_v (figure I.3). Plus cette bande interdite est importante plus le matériau devient isolant. Ce gap correspond à l'énergie nécessaire au système pour faire passer un électron de la bande de valence à la bande de conduction.

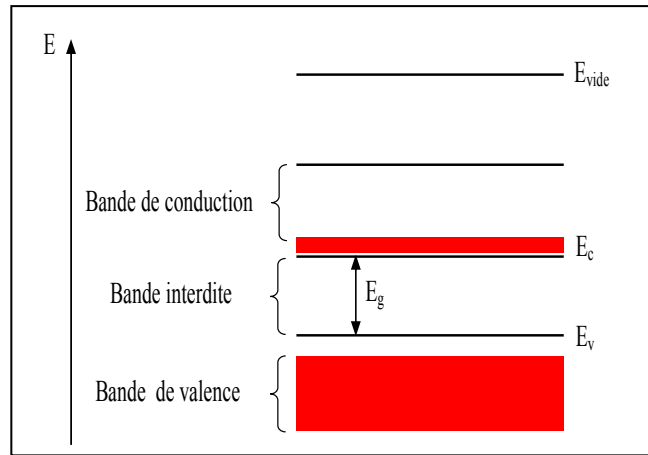


Fig.I.3. Structure de bandes d'énergie d'un semi-conducteur.

La largeur de la bande interdite E_g fournit des caractéristiques électriques importantes à chaque semi-conducteur. Ses variations en fonction de la température peuvent être décrites approximativement par la fonction universelle ci-dessous [I.16]:

$$E_g(T) = E_g(0) - \frac{AT^2}{T+B} \quad (\text{I.3})$$

Où A et B sont des constantes.

La largeur de la bande interdite ainsi que les valeurs des constantes A et B pour quelques semi-conducteurs à $T=0\text{K}$, sont présentés dans le tableau suivant :

Tableau I.3. Bande interdite en fonction de la température.

Semi-conducteur	$E_g(0)$	A	B
Si	1.170 eV	$4.73 \cdot 10^{-4} \text{ eV/K}^2$	636 K
Ge	0.7437 eV	$4.77 \cdot 10^{-4} \text{ eV/K}^2$	235 K
GaAs	1.519 eV	$5.405 \cdot 10^{-4} \text{ eV/K}^2$	204 K

Au voisinage de chacune 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 [I.17]:

$$\begin{cases} N_c = K_c (E - E_c)^{1/2} \\ N_v = K_v (E_v - E)^{1/2} \end{cases} \quad (\text{I.4})$$

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

I.2.4.2. 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 semiconducteur c'est-à-dire du diagramme $E = f(k)$ (figure I.2). Ce diagramme permet de définir spatialement les extremas des bandes de conduction et de valence. Ces extremas représentent, dans un semiconducteur à l'équilibre, des domaines énergétiques où les densités de porteurs de charges de type p dans la bande de valence et de type n dans la bande de conduction sont importantes [I.13].

Le semiconducteur à gap direct est un semiconducteur dont 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 $E(k)$ (figure I.4.a). Pour un semiconducteur dont le maximum de bande de valence et le minimum de la bande de conduction se situent à des valeurs distinctes du vecteur d'onde \vec{k} sur le diagramme $E(k)$, constitue un semiconducteur à gap indirect (figure I.4.b).

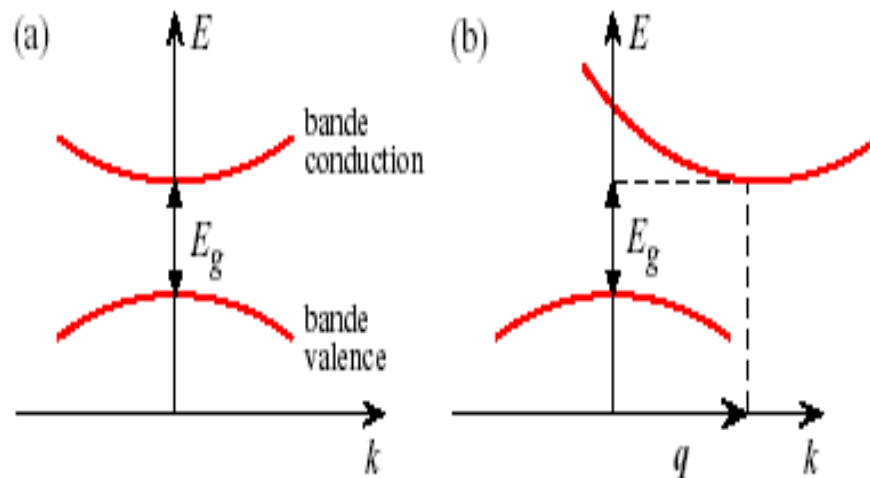


Fig.I.4. Structure de bande schématique d'un semiconducteur à gap direct (a) et à gap indirect (b) [I.13]).

I.2.4.3. Structure de bandes des semi-conducteurs III-V

Les bandes d'énergie donnent les états d'énergie permis pour les électrons en fonction de leurs vecteurs d'onde. On les représente donc dans l'espace réciproque, et pour simplifier, dans les directions de plus hautes symétries de la première zone de Brillouin. Elles se décomposent en bande de conduction la plus haute, la bande de valence la plus

basse, et la bande interdite qui les sépare, elle détermine principalement les propriétés de transport du semi-conducteur.

a. Structure de bande du GaAs

Pour le GaAs, le maximum de la bande de valence est en $K=0$ et celle-ci est doublement dégénérée avec deux branches confondues au centre de la zone de Brillouin (Figure I.5 (a)).

Les deux bandes décrivent la disposition de porteurs de masses effectives différentes, la masse des trous lourds est de $0.68m_0$, celle des trous légers de $0,12m_0$ où m_0 est la masse de l'électron au repos. Une troisième branche de la bande de valence est abaissée par rapport aux deux premières d'une énergie, égale à $0,33$ eV.

La bande de conduction présente, au centre de la zone de Brillouin ($K=0$) un minimum non dégénérée, qui est une vallée à symétrie (Γ) appelée vallée centrale.

Il existe également d'autres minima à des niveaux d'énergie plus élevés, les 4 vallées à symétrie L dans la direction $\langle 111 \rangle$ et les directions équivalentes.

D'après la courbure des différentes vallées, à la quelle est reliée la masse effective des électrons beaucoup plus légers et donc beaucoup plus mobiles que dans les vallées X et L. Cette propriété est en partie responsable de certaines caractéristiques des phénomènes de transport dans le semi-conducteur GaAs.

L'arséniure de gallium étant un composé à gap direct, les transitions électroniques les moins énergétiques entre la bande de valence et la bande de conduction peuvent se faire avec conversation du vecteur d'onde K (sans l'intervention des phonons) [9-11].

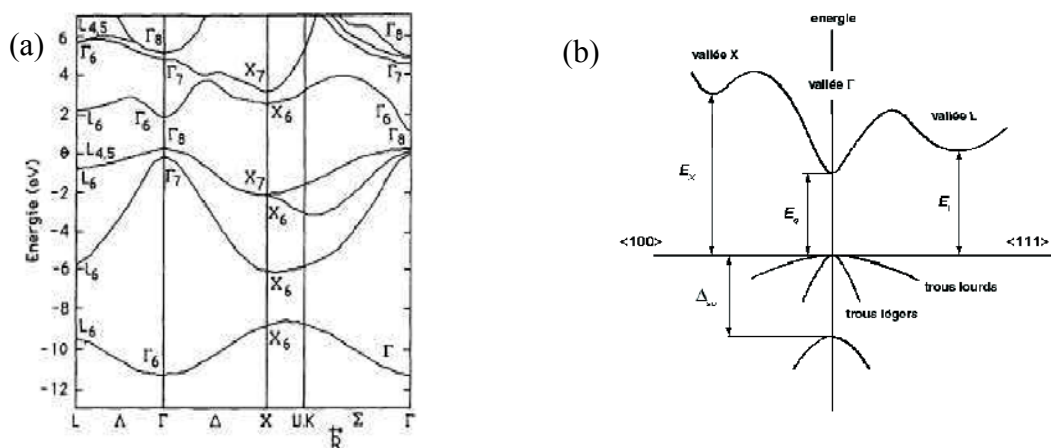


Figure I.5. Structure de bande de : (a) GaAs, (b) InAs [8,9, 13-14].

b. Structure de bande de In As

Le InAs est un composé III-V à transition direct. Cela signifie que l'énergie minimale

(Γ 15) de la bande de conduction et l'énergie maximale (Γ 15) de la bande de valence sont localisées au centre de la zone de Brillouin (figure I.5(b)). Ceci a des conséquences importantes du point de vue des propriétés électroniques et optiques. La bande de conduction présente par ailleurs une courbure généralement très accentuée au voisinage de son minimum (Γ). L'allure générale des bandes est la même pour tous les composés III-V dont la structure de bande est directe (InP, InSb, GaAs, GaSb,...).

La masse effective des électrons étant inversement proportionnelle à cette courbure, ceci explique pourquoi dans les semiconducteur III-V à bande interdite directe comme GaAs, InP, GaInAs,...etc, la masse effective des électrons en (Γ) est très faible, et par conséquent, la mobilité électronique élevée [9-11].

I.2.5. Bandes interdites et Intérêt des semiconducteurs III-V

Si l'on considère les applications à l'optoélectronique, les alliages semiconducteurs III-V couvrent un très large domaine de compositions et donc de bandes interdites et de longueurs d'onde associées. Les semiconducteurs III-V apparaissent plus adaptés à l'émission de lumière, grâce à leur gap direct et à leur fort rendement radiatif. De plus, la fabrication d'hétérojonctions présentant des états confinés en bande de conduction et en bande de valence

est possible. Enfin, la maturité des technologies III-V pour les télécoms et le savoir faire développé en épitaxie de ces matériaux rendent leur utilisation largement répandue dans les composants optoélectroniques. La figure I.6 donne l'énergie de bande interdite en fonction du paramètre de maille pour les matériaux composés III-V binaires (points) et ternaires (lignes). Chaque filière, identifiée sur le diagramme, regroupe les matériaux qui peuvent être épitaxiés en accord de maille sur un substrat donné [I.18]. En continu bandes interdites directes et en tirets bandes interdites indirectes; les discontinuités sont dues au changement de structures. Ce diagramme montre qu'il est possible d'obtenir des matériaux dont la largeur de bande interdite, et donc les propriétés optiques, varient dans une large gamme.

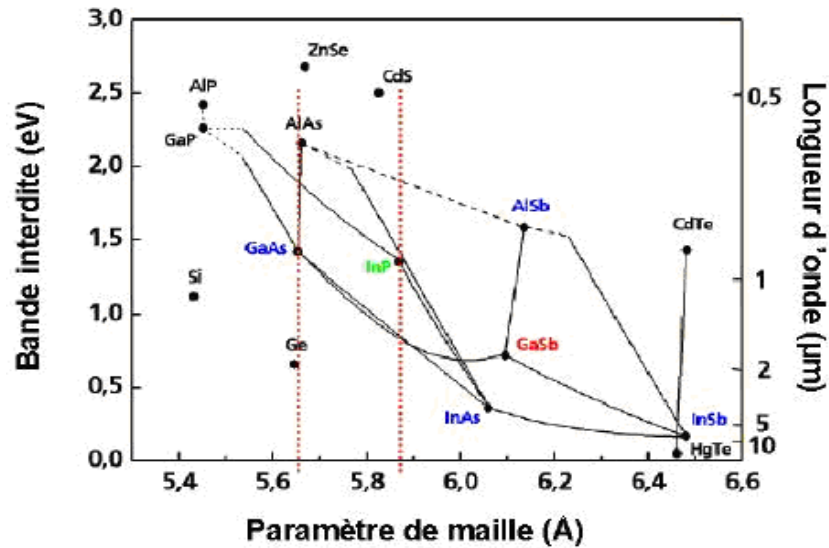


Fig.I.6. Bandes interdites des principaux composés III-V en fonction des paramètres cristallins [1.18].

L'hétéro-épitaxie de films minces des matériaux semi-conducteurs sur des substrats monocristallins est actuellement une des techniques clés de la microélectronique d'optique et de l'optoélectronique. L'épitaxie permet l'obtention à l'échelle atomique d'interfaces cristallographiquement parfaites et chimiquement abruptes. La plupart des composants de l'optoélectronique sont fabriqués à partir d'hétéro-structures d'alliages III-V binaires, ternaires ou quaternaires de Gallium, Indium, Aluminium, Phosphore ou Arsenic, épitaxiés sur des substrats de GaAs ou InP. Les matériaux semi-conducteurs III-V possèdent une énergie de bande interdite directe. Ils sont donc particulièrement bien adaptés pour l'émission ou l'absorption de photons. Comme les substrats imposent leur paramètre de maille à la couche épitaxiée, seules les couches parfaitement accordées en maille avec ceux-ci, ont une qualité morphologique acceptable pour les applications en optoélectronique. C'est pourquoi la combinaison de matériaux présentant des paramètres de mailles intrinsèques trop différents est en général prohibée car engendrant, lors de la croissance cristalline en épitaxie (croissance pseudo-morphique), trop de contraintes mécaniques et donc trop de défauts.

En effet, une différence de paramètre de maille même très faible en pourcentage entre la couche et le substrat est suffisante pour provoquer une forte densité de dislocations diminuant par la suite les performances électroniques du composant fabriqué. Une des conséquences est qu'un grand nombre de composants qui pourraient être potentiellement très performants ne peuvent être fabriqués faute de substrat approprié. En conséquence, même si les alliages semi-conducteurs III-V peuvent potentiellement couvrir un très large domaine de longueurs d'onde, seuls d'étroits domaines de composition de ces alliages

peuvent être exploités, les autres domaines présentant un désaccord de maille trop fort vis à vis des substrats disponibles (figure I.6).

Dans ce travail, nous nous sommes intéressés plus particulièrement aux alliages ternaires $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ et $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ sur substrat GaAs (100). En pratique, les techniques de croissance en EJM permettent un ajustement précis de la composition x à partir du simple rapport des flux des éléments III (Al, Ga et In) et V (As) mis en jeu. Une modulation de la largeur du gap et par conséquent de la longueur d'onde correspondante peut ainsi être obtenue par un ajustement de la composition x de ces pseudobinaires $\text{X}_x\text{Y}_{1-x} \equiv (\text{InAs})_x(\text{GaAs})_{1-x}$, [I.19]. Le paramètre de maille a_x de X_xY_{1-x} varie en fonction de x comme $a_{XY} = x a_X + (1-x) a_Y$ et donc diffère de celui a_0 du substrat.

I.2.6. Dopage

Afin d'améliorer la conduction d'un semi-conducteur, Le dopage est indispensable. Ce dernier est défini par la substitution d'atomes du cristal semi-conducteur par des atomes contenant un nombre d'électrons de valence immédiatement supérieur ou inférieur. Il existe deux types de dopage [I.20]:

- le dopage de type n , qui consiste à produire un excès d'électrons, qui sont négativement chargés ;
- le dopage de type p , qui consiste à produire une carence en électrons, donc un excès de trous, considérés comme positivement chargés.

I.2.6.1. Semi-conducteur dopé n

Le Silicium ou le Germanium cristallise dans une structure où chaque atome est relié à 4 atomes voisins par des liaisons covalentes impliquant deux électrons pour chaque liaison.

Si on introduit un atome ayant 5 électrons de valence (Phosphore, Arsenic), cet atome prend la place d'un atome du cristal, 4 des électrons de l'impureté participeront aux 4 liaisons avec les 4 atomes voisins du cristal, le 5^{ème} électron restera célibataire. A cet atome d'impureté est associé un niveau d'énergie appelé niveau donneur qui se situe juste en dessous de la bande de conduction (figure I.7). L'écart entre ce niveau et la bande de conduction étant faible, un électron d'un niveau donneur peut facilement passer dans la bande de conduction sous l'action de l'agitation thermique et augmenter la conductivité électrique. A température ambiante, presque toutes les impuretés sont ionisées et la conductivité devient une conductivité de type n lorsqu'on augmente le dopage.

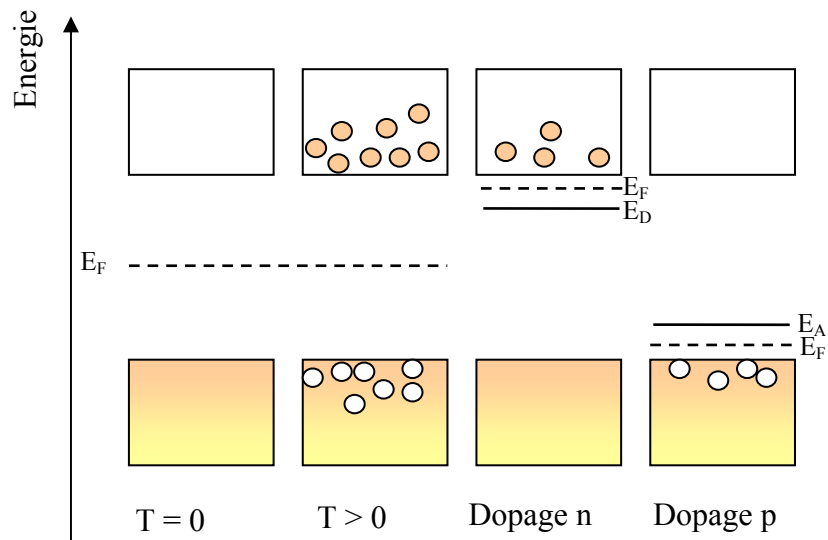


Fig.I.7. Du semi-conducteur au conducteur (le trait discontinu représente le niveau de Fermi).

I.2.6.2. Semi-conducteur dopé p

Si on introduit un atome d'impureté trivalent (Bore, Aluminium ou Gallium), cet atome en se plaçant dans le réseau ne peut saturer que 3 liaisons sur 4. Il manque donc une liaison par atome d'impureté auquel correspond un niveau d'énergie situé juste au dessus de la bande de valence. Ce niveau est appelé niveau accepteur. A $T=0K$, les niveaux accepteurs sont vides (figure I.7). Lorsqu'on augmente la température, ils peuvent être occupés par des électrons provenant de la bande de valence. Les niveaux libres de cette dernière engendrent des trous et la conductivité devient de type p lorsqu'on augmente le dopage.

I.2.6.3. Technologies de dopage dans la microélectronique

Il existe plusieurs méthodes pour effectuer le dopage d'un matériau. Parmi elles :

- le dopage par diffusion ;
- l'implantation ionique.

I.2.6.3.1 Dopage par diffusion

Le dopage par diffusion peut être fait à partir :

- d'une source solide : l'échantillon à doper est placé dans l'enceinte. L'impureté est transportée jusqu'au matériau par un gaz vecteur inerte, à partir d'un composé solide qui se sublime. Exemple : P_2O_5 (dopage *n* du Silicium).

CHAPITRE I : LES MATERIAUX SEMICONDUCTEURS III-V ET LES SUPERRESEAUX

- d'une source liquide : le gaz vecteur barbote dans le liquide ou frôle sa surface à une température choisie. La pression partielle du composé dans le gaz est égale à la tension de vapeur du liquide. Exemple : POCl_3 (dopage n du Silicium).
- d'une source gazeuse : le gaz contenant l'espèce dopante est introduit dans l'atmosphère. Exemples : PH_3 (dopage n du Silicium), B_2H_6 (dopage p du Silicium), AsH_3 (dopage n du Silicium).

Le dopage se fait dans un four à diffusion, à une température comprise entre 850 et 1150 °C, afin de permettre la diffusion des espèces dopantes dans le matériau.

I.2.6.3.2. Dopage par implantation ionique

Le dopage par implantation ionique consiste à accélérer des impuretés ionisées avec un champ électrique, afin de leur conférer l'énergie nécessaire pour rentrer dans le matériau à doper. Cette méthode permet d'utiliser une grande variété d'éléments dopants. Le faisceau mono énergétique et la chambre sous vide rendent possible une grande reproductibilité et des dopages localisés.

Plus un ion est accéléré, plus son énergie cinétique est grande, et donc plus il s'enfoncera profondément dans le réseau cristallin du substrat que l'on dope. Ainsi, en contrôlant la dose et l'énergie, on détermine le profil de dopage.

L'un des inconvénients du dopage par implantation ionique est le fort désordre cristallin engendré par les chocs entre les ions incidents et les atomes du matériau. Cela engendre des défauts qui augmentent les probabilités de collision, et diminuent la mobilité des porteurs de charge.

I.2.7. Masse effective des porteurs de charge

La masse effective est une notion utilisée en physique du solide pour étudier le transport des électrons. La masse effective " m^* " contient en quelque sorte l'inertie additionnelle que donne le potentiel cristallin à l'électron, c-à-d, qu'elle contient l'effet global du potentiel cristallin sur l'électron. Cette masse effective peut être positive ou négative, supérieur ou inférieur à la masse de l'électron m_0 dans le vide [I.21].

La masse effective est définie par le tenseur d'ordre 2 des dérivées secondes de l'énergie E par rapport au vecteur d'onde (équation I.5). Pour un électron libre, la masse effective est constante et égale à la masse réelle de l'électron.

$$m^* = \frac{\hbar^2}{\partial^2 E / \partial K^2} \quad (\text{I.5})$$

I.2.8. Interaction lumière-semiconducteur

Les propriétés optiques des semi-conducteurs font intervenir non seulement la répartition des états permis pour les électrons, mais également les divers processus par lesquels les électrons peuvent changer de niveaux d'énergie. On distingue des transitions radiatives dans lesquels l'énergie gagnée (ou perdue) par un électron est amenée (ou emportée) sous forme de rayonnement donnant lieu à une absorption (ou émission) de photon, et des transitions non radiatives dans lesquels l'énergie est échangée avec le réseau cristallin sous forme de phonons (quantum de vibration du réseau), ou avec d'autres porteurs libres.

La création d'une paire électron-trou dans un semi-conducteur peut être obtenue en éclairant le matériau avec une lumière de longueur d'onde suffisamment courte. L'énergie des photons doit être :

$$h \nu > E_g \quad (I.6)$$

d'où
$$\lambda < h c / E_g \quad (I.7)$$

E_g : énergie du gap ;

ν : fréquence ;

λ : longueur d'onde ;

c : vitesse de la lumière.

Les semi-conducteurs utilisés le plus souvent pour l'électronique des circuits sont le germanium et le silicium dont les bandes interdites ont pour largeurs respectives 0.7 et 1.1 eV. Ils sont très utilisés pour l'élaboration des détecteurs mais on ne sait pas en faire des émetteurs à bon rendement (qui de toute manière émettent dans l'infrarouge).

L'adjonction d'aluminium ou de phosphore dans les dérivés de l'arséniure de galium, permet d'augmenter la largeur de la bande interdite et d'élaborer ainsi des émetteurs de radiations visible.

I.3. SUPERRESEAUX

1.3.1. Historique des superréseaux

Les premiers travaux portant sur des couches empilées artificiellement furent produits par DuMond et Youtz (1940) sur des matériaux métalliques dans le but de produire des structures en couches pour réaliser des réseaux de diffraction des rayons X [I.22]. Dans le cadre du transport électronique, l'idée d'une structure à basse dimension a

été initialement proposée par L. Esaki et al. en 1970 [I.1]: En juxtaposant deux matériaux semi conducteur différents, les discontinuités aux bords des bandes ont permis l'apparition d'états quasi-liés de nature quantique, confinés à l'interface. L'exploitation de ces niveaux d'énergie a suscité un intérêt immense dans la transmission électronique. Depuis l'avènement de la structure double barrière, les propriétés de transmission dans de tels dispositifs électroniques se sont retrouvées nettement améliorées.

Les avancées dans les techniques de dépôt ont ensuite permis le développement de matériaux artificiellement empilés présentant des propriétés physiques différentes des matériaux homogènes de départ.

Les premiers superréseaux de semi-conducteurs réalisés par Esaki et Tsu [I.1] et consistaient en un empilement de couches ultrafines dont la période était inférieure au libre parcours moyen des électrons. Chang et Giessen [I.4] ont édité une synthèse des travaux réalisés sur les superréseaux métalliques et semi-conducteurs en 1985.

I.3.2. Définition d'un superréseau

Un superréseau (SR) est un empilement de couches ultrafines de semi-conducteurs (quelques dizaines d'Angstrom d'épaisseurs) alternées périodiquement suivant l'axe de croissance (figure (1.8)).

L'idée d'une structure de basse dimension a été proposée pour la première fois en 1969 par Esaki et al. [I.23]. Son avantage est de présenter une discontinuité de bords de bandes de conduction et de valence à l'interface des deux semiconducteurs. 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. Ainsi un profil de potentiel périodique résultant d'une succession de puits et de barrières est obtenu. La période d [I.24] du potentiel permet de faire la différence entre un puits quantique, qui présente des états isolés, et un SR, où se forme une structure de minibandes. L'ordre de grandeur généralement admis est 200\AA .

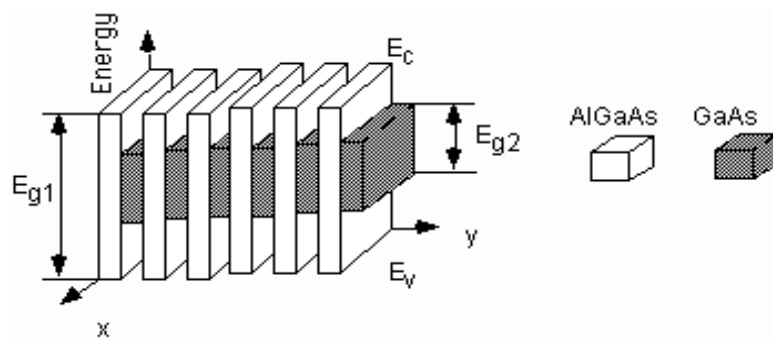


Fig.I.8. Superréseau à puits et à barrières rectangulaire (AlGaAs/GaAs) [I.25].

I.3.3. Techniques de fabrication

Depuis ces dernières années, les SR sont très utilisés dans les systèmes optoélectroniques tels que les diodes laser et les photodétecteurs. Ceci a permis le développement de plusieurs techniques modernes de croissance, à savoir l'épithaxie.

L'épithaxie est une étape technologique consistant à faire croître du cristal sur du cristal [I.26]. Etymologiquement : « epi » signifie « sur » et « taxis » signifie « arrangement ». On distingue l'épithaxie par jet moléculaire MBE (Molecular Beam Epitaxy) et épithaxie en phase vapeur MOCVD (Metal Organic Chemical Vapor Deposition) qui permettent de réaliser des couches de semiconducteurs exceptionnelles de composition chimique rigoureusement contrôlée.

I.3.3.1. Epithaxie par jets moléculaires

L'épithaxie par jets moléculaires (EJM) perfectionnée par Arthur et al. [I.26-27] dans les années soixante après son apparition au début du siècle, est une technique de dépôt sous vide permettant d'obtenir des matériaux semiconducteurs avec une grande précision (composition, épaisseur) et une grande qualité structurale. Le schéma de principe présenté sur la figure (I.9) décrit les principaux éléments d'un bâti d'épithaxie par jet moléculaire.

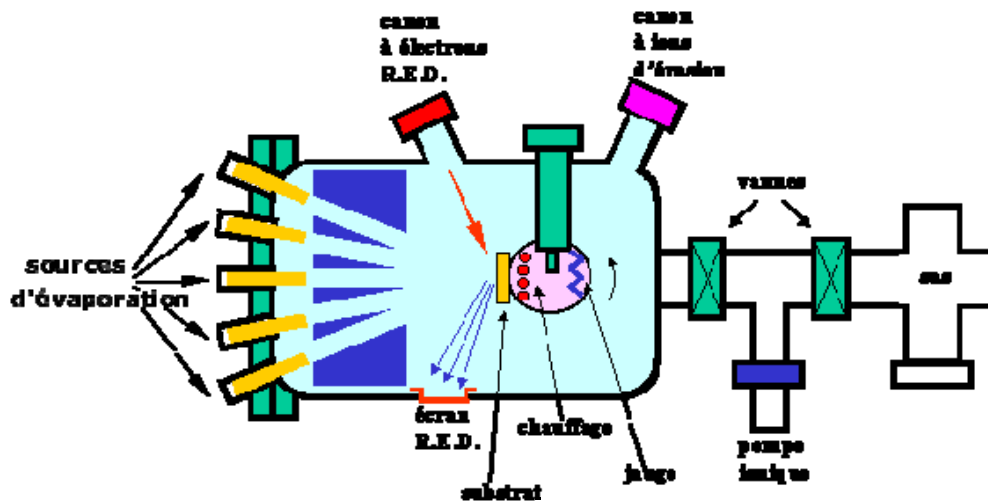


Fig.I.9. Bâti d'épithaxie par jet moléculaire [I.28].

L'EJM 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 peut ainsi réaliser

CHAPITRE I : LES MATERIAUX SEMICONDUCTEURS III-V ET LES SUPERRESEaux

couche par couche des structures très complexes telles que les superréseaux, les diodes laser, les transistors à forte mobilité d'électron, 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 1mm par minute. Cette technique est aussi très coûteuse. Le système ultravide, 10^{-10} Torr, permet, en permanence, de vérifier la cristallinité du cristal en cours de croissances.

L'EJM contrôle rigoureusement la composition chimique des interfaces et le profil de dopage. Les multicouches peuvent être réalisées avec des épaisseurs de l'ordre de la monocouche atomique (2,8 à 2,9 Å), des vitesses de croissance extrêmement faibles (inférieur à 100Å/min) et des températures de croissance allant de 400°C jusqu'à 1000°C [I.28]. La technique EJM appliquée pour la fabrication d'hétérojonctions de haute mobilité a été décrite en détail par Witkowsky et al. [I.29].

I.3.3.2.Epitaxie en phase vapeur organométalliques

Cette technique nommée MOCVD (Metal Organic Chemical Vapor Deposition) à injection, développé dans les années 90 au LMGP [I.30], est basée sur l'utilisation d'injecteurs de moteurs thermiques. Elle permet de synthétiser des couches minces de matériaux complexes avec un très bon contrôle de la stoechiométrie, de la vitesse de croissance et de la qualité cristalline des films. Son principe repose sur l'utilisation d'une micro-vanne à commande électronique qui permet d'introduire des quantités très précisément contrôlées d'une solution composée de précurseurs organométalliques et d'un solvant.

L'injection des précurseurs dissous dans un solvant est réalisée sous forme de gouttelettes contrôlées par une micro-vanne. La taille et le nombre de ces gouttelettes déterminent l'apport de matière dans le réacteur et par la suite, l'épaisseur de la couche déposée. La calibration de l'injecteur est réalisée lors de l'élaboration d'une série de multicouches $(A/B)_N$ en faisant varier le nombre de gouttes du matériau A pour un nombre de gouttes de matériau B fixe. Le procédé MOCVD breveté par le LMGP en 1993 est actuellement exploité industriellement. La figure (I.10) présente le schéma d'une installation de réacteur MOCVD.

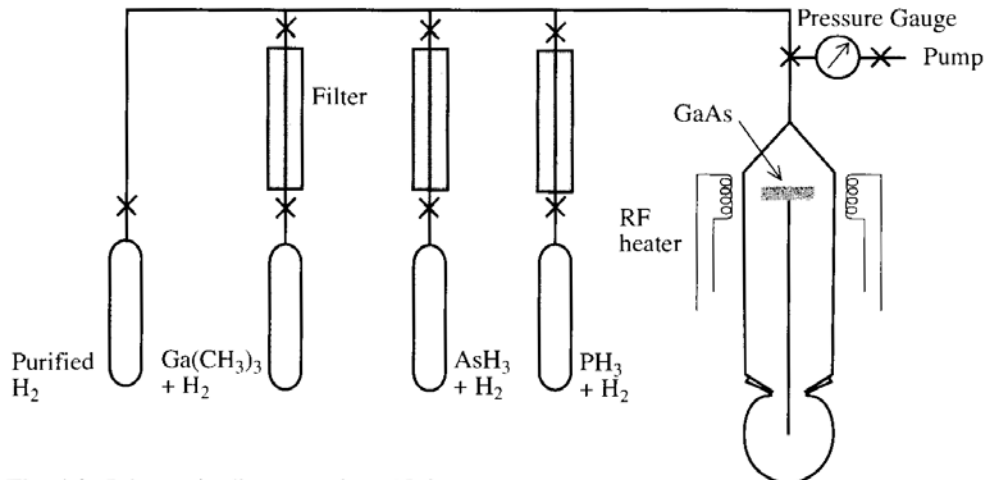


Fig. I.10. Schéma d'une installation de MOCV [I.31].

I.3.4. Types de superréseaux

Plusieurs types de superréseaux ont été rapportés dans la littérature, et ceci en faisant contribuer à la fois les propriétés des matériaux semi-conducteurs utilisés, et les techniques de croissance.

I.3.4.1. Superréseaux 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 GaAs/Al_xGa_{1-x}As (figure (I.11)). Ce type de superréseaux est le plus utilisé, car son profil de potentiel est très simple à étudier.

Les superréseaux à puits et à barrières rectangulaires constituent un élément de base dans l'élaboration de plusieurs composants, tels que les photodétecteurs [I.24] et les diodes laser [I.32].

Les superréseaux ont des propriétés fascinantes résidant dans leur capacité de confinement des états électroniques.

Dans notre travail, on s'intéresse particulièrement à ce genre de superréseaux, car dans ce cas les ondes planes décrivent assez bien les fonctions d'ondes électroniques.

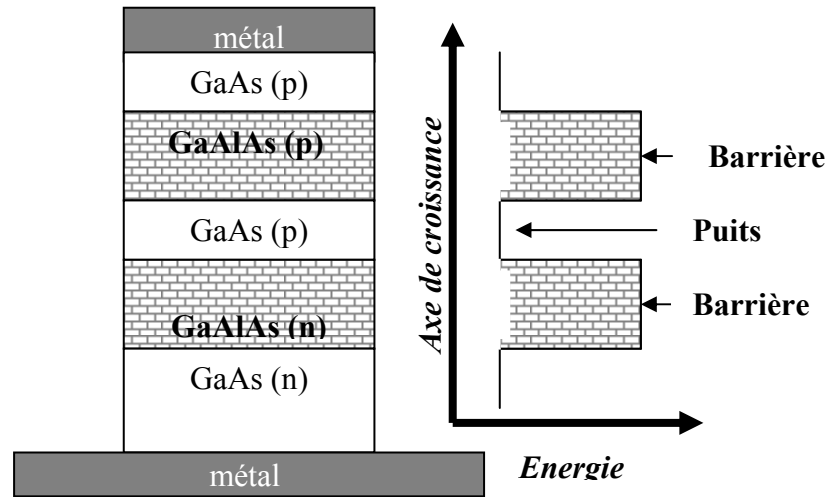


Fig.I.11. Superréseaux à puits et à barrières rectangulaires.

I.3.4.2. Superréseaux à puits quantiques paraboliques

Ce type de superréseau est constitué d'un empilement de puits et de barrières rectangulaires très minces. Il existe deux méthodes pour fabriquer un tel profil :

- a- la hauteur de la barrière varie tout en conservant la composition du matériau [I.33].
- b- la composition du matériau varie tout en conservant la hauteur de la barrière [I.34].

Ces deux variantes se font d'une manière quadratique du centre du puits jusqu'au bord de celui ci (figure I.12). Capasso et al [I.35] sont basés sur ce type de SR pour présenter un transistor à effet tunnel résonant.

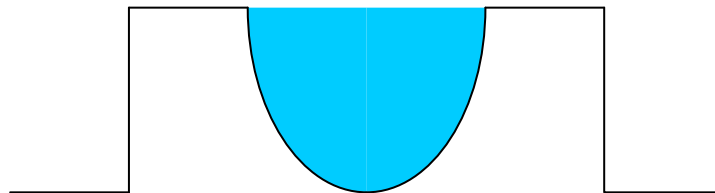


Fig.I.12. Schéma d'un superréseaux à puit parabolique .

I.3.4.3. Superréseaux polytypes

Leur profil est obtenu par introduction d'un troisième constituant **C** dans la structure [I.36-37], et à partir de ce triplet (**A**, **B** et **C**), plusieurs formes de potentiel sont obtenues (figure (I.12)). Elles sont dues à la différence existante entre leurs bandes de conduction, comme la structure AlSb/GaSb/InAs.

Les SR polytypes sont appliqués dans la fabrication des dispositifs à hautes fréquences.

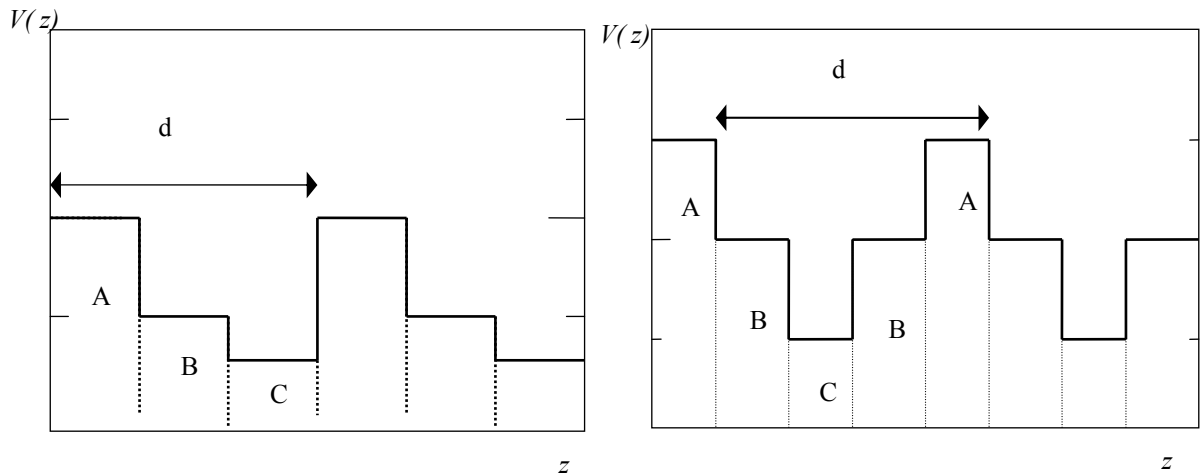


Fig. I.13. Profil de potentiel d'un SR. polytype

I.3.4.4. Superréseaux à dents de scie

Cette structure est obtenue à partir d'une modulation de la composition du matériau utilisé, tel que le $Al_xGa_{1-x}As$, dans chaque période pour obtenir un gap dégradé linéairement allant d'une valeur maximale qui forme le grand gap, jusqu'à une valeur minimale qui donne le petit gap [I.38-39]. Ainsi plusieurs formes de profil sont obtenues selon la modulation utilisée (figure I.14). Ces systèmes présentent des propriétés physiques très intéressantes, d'où viennent leurs applications technologiques dans la fabrication des rectificateurs [I.40] et les photomultiplicateurs [I.41].

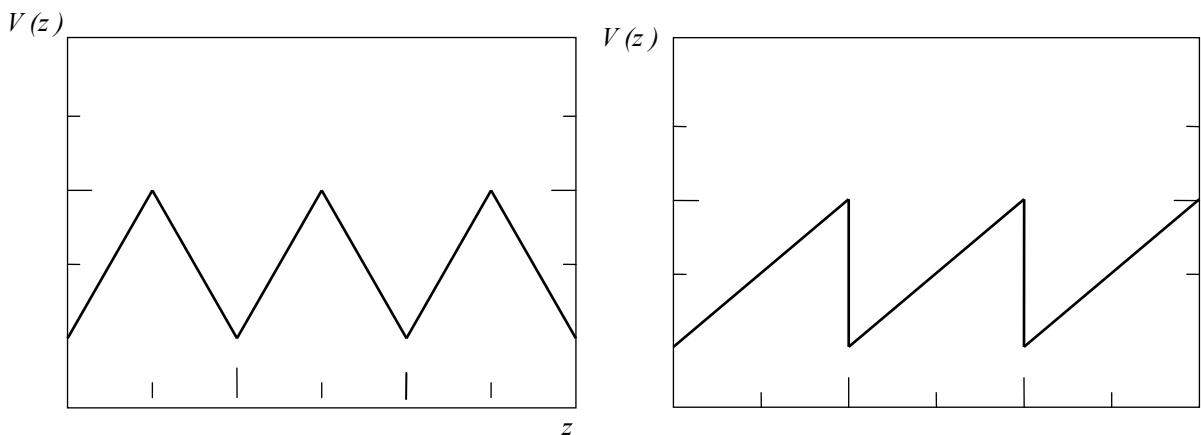


Fig.I.14. Profils de potentiel d'un SR à dents de scie

I.3.4.5 Superréseaux à masse effective

Ce type de SR est construit par une modulation périodique de la masse effective [I.42] (figure I.15). Il est difficile de choisir les constituants semiconducteurs utilisés pour

CHAPITRE I : LES MATERIAUX SEMICONDUCTEURS III-V ET LES SUPERRESEAUX

la réalisation d'un tel profil, car ces derniers doivent avoir les mêmes paramètres a du réseau ainsi que la même affinité électronique. Dans ce contexte, quelques exemples de SR à masse effective ont été suggérés : $\text{Al}_{0.23}\text{Ga}_{0.3}\text{In}_{0.47}\text{P}/\text{GaAs}$, $\text{Ga}_{0.86}\text{In}_{0.14}\text{P}_{0.78}\text{Sb}_{0.22}/\text{GaAs}$ et le $\text{Al}_{0.5}\text{In}_{0.5}\text{As}_{0.49}\text{Sb}_{0.51}/\text{GaSb}$.

Le tableau [I.4] regroupe quelques matériaux dont les propriétés comme la constante du réseau a , l'affinité électronique κ , l'énergie du gap E_g , la masse effective du premier matériau m_1 du deuxième m_2 et la masse de l'électron libre m_0 [I.43] dont les propriétés permettent de constituer ce type de SR [I.44].

Tableau I. 4. Propriétés de quelques matériaux.

Matériaux	a (Å)	κ (eV)	E_g (eV)	$m_{2,1}^r/m_0$	m_2/m_1
$\text{Al}_{0.23}\text{Ga}_{0.3}\text{In}_{0.47}\text{P}$	5.653	4.07	2.13	0.13	5.7
$\text{Ga}_{0.86}\text{In}_{0.14}\text{P}_{0.78}\text{Sb}_{0.22}$	5.653	4.07	1.89	0.4	5.7
GaAs	5.653	4.07	1.43	0.07	
$\text{Al}_{0.5}\text{In}_{0.5}\text{As}_{0.49}\text{Sb}_{0.51}$	6.094	4.07	1.3	0.067	1.4
GaSb	6.094	4.07	0.721	0.049	

I.3.4.6 Superréseaux quasipériodiques

Il est bâti à partir de la série de Fibonacci, puis habiller chaque site avec une base. Cette construction exige deux éléments différents A et B, de longueur respective l_A et l_B .

A et B suivent une certaine récurrence, et le rapport (l_A/l_B) doit être égal au nombre d'or

$$\left(\phi = \frac{1 + \sqrt{5}}{\sqrt{5} - 1} \right).$$

En prenant B comme première séquence et en appliquant la loi de récurrence suivante :

$$A \rightarrow AB \quad \text{et} \quad B \rightarrow A$$

Les structures quasipériodiques sont bâties suivant les séquences générées par la série de Fibonacci qui a comme terme général:

$$S_n = S_{n-1}S_{n-2} \quad \text{avec} \quad S_0=B \text{ et } S_1=A$$

En 1984 Levine et al. [I.45] ont décrit une nouvelle classe de réseaux quasipériodiques à 1, 2 et 3 dimensions, nommée, les quasi-cristaux. Merlin [I.46] a réalisé

un nouveau type d'hétérostructures en prenant le système hétérostructures/AlAs, dit mono énergétique de Fibonacci.

I.3.4.7. Superréseaux à potentiel de MATHIEU

Ce type de SR à une allure sinusoïdale. Son profil de potentiel est donné par la relation :

$$V(z) = -Va \cos(2\pi z/a) \quad (I.4)$$

où Va est l'amplitude du potentiel et a représente le paramètre de maille du réseau cristallin. L'intérêt d'étudier ces types de SR réside dans la résolution théorique de l'équation de Mathieu ainsi que dans l'apparition des états particuliers à l'intérieur du profil de potentiel considéré.

I.3.4.8. Superréseaux à modulation de dopage:

Les SRs à modulation de dopage, proposés par Esaki et al [I.47], sont obtenus à partir d'un empilement périodique et alterné de couches d'un même matériau dopées n et p . Ces SRs dits à dopage conventionnel réalisés par Ploog et al [I.48], présentent un inconvénient : en effet, une forte modulation de dopage ne peut-être réalisée en une faible période ($\approx 200 \text{ \AA}$) [I.49].

Ce problème a été surmonté par une nouvelle technique de dopage. Elle consiste à empiler des monocouches atomiques dopées n et p , alternées périodiquement ($d \leq 200 \text{ \AA}$), et séparées par quelques unes du matériau non dopé.

Ainsi le profil de dopage est décrit par la relation :

$$N_D(z) = N^{2D} \delta(z) \quad (I.8)$$

où $\delta(z)$ présente la fonction de Dirac et N^{2D} la concentration des atomes dopants à deux dimensions.

Le profil de potentiel est donné par la relation:

$$V(z) = N^{2D} d (e/4\epsilon) \quad (I.9)$$

où d : la période ;

e : la charge de l'électron ;

ϵ : la permittivité du matériau.

I.3.5. Classes de superréseaux

Selon la nature des discontinuités des bandes interdites à l'interface puits-barrière, les superréseaux peuvent être classés en deux types [I.50] :

I.3.5.1. Superréseaux de type I

Dans le SR type I, les extrema des bandes de valence (BV) et de conduction (BC) sont situés dans la même région de l'espace (le gap dans ce cas est un 'gap direct'). Les électrons et les trous sont confinés, respectivement, dans la bande de conduction et de valence du même matériau semi-conducteur (figure (I.16)). Tels que $GaAlAs/GaAs$ et $GaSb/AlSb$.

I.3.5.2. Superréseau de type II

Dans ce genre de superréseau, l'extrema des (BV) et (BC) sont spatialement séparés, (le gap dans ce cas d'au moins d'un des semi-conducteur est 'indirect'). Les électrons et les trous sont confinés dans deux matériaux semi-conducteurs adjacents (figure (I.16)). exemples : $InP/Al_{0,48}In_{0,25}As$.

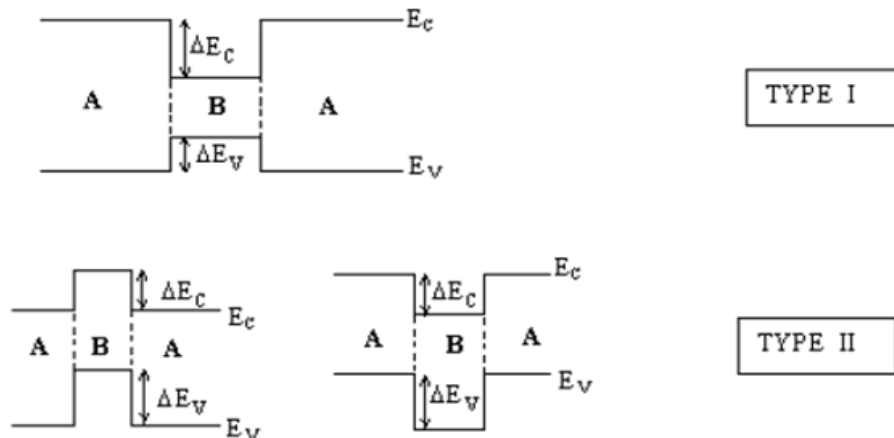


Fig. I.16. Diagrammes schématiques de deux arrangements de confinement des électrons et trous dans les superréseaux [I.51].

I.3.6. Phénomène de transport électronique dans les superréseaux

I.3.6.1. Effet tunnel résonnant

L'effet tunnel résonnant (ETR) reste l'intérêt de nombreuse étude, aussi bien théorique qu'expérimentales [1.52-53]. Il a été découvert dès 1926 par R. Oppenheimer et n'apparut dans la littérature qu'en 1928. En 1970 Tsu et Esaki ont démontré ETR par étude d'une structure multi-barrières confinant un puits rectangulaire, mise entre deux contacts ohmiques produisant une faible différence de potentiel V_a .

L'effet tunnel résonnant se manifeste lorsqu'une particule doit traverser successivement deux barrières de potentiel 'pontée' par un ou plusieurs états permis discrets. En mécanique classique une particule d'énergie cinétique E inférieure à V_0 ne traverse pas la barrière, mais en mécanique quantique la particule possède une probabilité non nulle de traverser cette barrière sous la forme d'une onde évanescente d'après les solutions d'équation de schrodinger (figure (I.17)). La particule peut passer de l'autre coté comme par un petit tunnel [I.54]. Donc la probabilité de trouver la particule de l'autre coté n'est pas nulle.

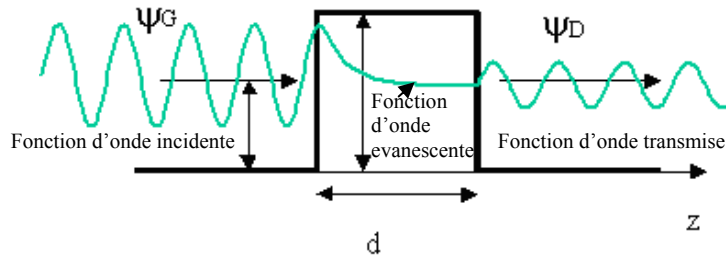


Fig. I.17. Illustration de l'effet tunnel.

L'effet tunnel est décrit par deux paramètres. Le premier est le coefficient de réflexion R qui désigne la probabilité de la particule quantique d'être réfléchi par la barrière de potentiel et le seconde le coefficient de transmission T désignant la probabilité de la particule quantique d'être transmise à travers celle-ci. Ces deux processus sont les deux seuls possibles, la somme de leur probabilité est donc égale à l'unité: $R + T = 1$.

L'ETR est un phénomène intrabande, ceci signifie que les porteurs de charges restent dans la même bande avant et après leur passage. Physiquement, il traduit un comportement ondulatoire des électrons en fonction des énergies présentant des résonances. En effet, le coefficient de transmission $T(E)$ atteint l'unité en intensité indépendamment des paramètres du SR, en absence de champ électrique externe. Cette caractéristique importante a permis plusieurs applications technologiques dans le domaine optoélectronique et surtout dans les systèmes électroniques à réponse rapide, où des oscillateurs à fréquences atteignant 700 GHz ont été élaborés [I.55].

En conséquence du développement de la technologie de croissance, notamment la EJM, la littérature est devenue très riche en étude des structures explicitant l'ETR.

En 1983 Vassel et al [I.56] ont utilisé le formalisme de la matrice de transfert dérivée de la résolution de l'équation de Schrödinger d'un électron de masse effective m^* , traversant une multitude de barrières pour étudier la variation de la transmission T . la

discontinuité des masses effectives aux bords de chaque interface a été prise en compte. En 1987, Brennan et al [I.57] ont étudié l'effet tunnel résonnant dans une structure GaAs/Al_xGa_{1-x}As. Ils ont résolu l'équation de Schrödinger utilisant les fonctions d'Airy. En utilisant la matrice de transfert obtenue à partir des conditions de continuité pour deux paramétrisations de la masse, constante et différente à l'interface. Allen et al. [I.58-59] ont confirmé les résultats de Vassel et al [I.56]. Avec les C.C de Bastard aux interfaces, ils ont généralisé la résolution de l'équation de Schrödinger pour une multitude de barrières asymétriques. Leurs résultats sont en accord avec ceux d'Esaki et al. [I.23] et ceux de Vassel et al. [I.56]. Ces études ont permis de développer des techniques pour résoudre l'équation de Schrödinger avec un potentiel arbitraire : Khondker et al. [I.60] ont introduit une nouvelle méthode numérique pour calculer le coefficient T à travers un potentiel arbitraire. Zebda et al [I.61] ont étudié une structure double barrières, utilisant une méthode itérative basée sur une analogie avec un circuit électronique quadripolaire. Les solutions de l'équation de Schrödinger sont données par les ondes planes. Les résultats obtenus sont en parfait accord avec ceux mentionnés plus haut [I.56].

I.3.6.2.Coefficient de transmission

La transmission électronique est caractérisée par le coefficient de transmission T . A une dimension, ce coefficient est donné par le module du rapport du courant de probabilité de l'onde transmise sur le courant de probabilité de l'onde incidente [I.62-63]:

$$T = \left| \frac{j_t}{j_i} \right| \quad (\text{I.10})$$

Il peut être aussi calculé en utilisant les amplitudes des ondes incidentes et transmises :

$$T = |t|^2 = \frac{k_t}{k_i} \left| \frac{A_t}{A_i} \right|^2 \quad (\text{I.11})$$

Ou k_t et k_i sont respectivement les vecteurs d'onde de l'électron dans des ondes transmise et incidente. Ce rapport définit la probabilité d'un électron de traverser la barrière. La détermination de la fonction d'onde ψ de l'électron soumis à une barrière de potentiel passe par la résolution de l'équation de Schrödinger stationnaire [I.64]:

$$H\psi = E\psi \quad (\text{I.12})$$

Le calcul dans le cas d'une barrière rectangulaire conduit au résultat suivant :

$$T = \frac{4E\phi}{4E\phi + (E + \phi)^2 \sinh(kd)^2} \quad (\text{I.13})$$

Où :

$$k^2 = \frac{2m\phi}{\hbar^2}$$

$\phi = V_0 - E$ est la différence entre la hauteur de la barrière de potentiel et l'énergie E de la particule, d est la largeur de la barrière.

Dans le cas d'une barrière rectangulaire, le calcul peut s'effectuer de façon analytique, mais ce n'est pas toujours le cas pour d'autres formes de potentiel.

Différentes méthodes permettant le calcul numérique du coefficient de transmission existent dans la littérature [I.65]. Les plus importantes sont la méthode de la matrice de transfert [I.66-67] et la méthode WKB [I.68-69].

I.3.6.3. Structure de minibande

Quand le libre parcours moyen des électrons est supérieur à la période de SR, ceux ci traversent les barrières par effet tunnel. L'effet tunnel transforme les niveaux d'énergie discrets qu'occupent les électrons de la bande de conduction (ou les trous de la bande de valence), dans des puits quantiques isolés, en "minibandes" qui sont des intervalles continus d'énergies permises. Ces minibandes sont à peu près centrées sur les niveaux discret d'énergie qui existants.

La largeur de la minibande dépend principalement de la somme des épaisseurs des puits et des barrières c'est-à-dire de la superpériode. Cette largeur mesure le couplage entre puits, qui est la plus importante caractéristique d'un SR [I.70-71].

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.

Plusieurs modèles théoriques ont été développés, pour obtenir la relation de dispersion des minibandes en fonction des paramètres du SR.

Mukherdji et al [I.72] ont appliqué le modèle de Kronig-Penney pour développer un calcul de structure de bande sur le GaAs/Al_xGa_{1-x}As. Ils ont obtenu une relation de dispersion dépendant de d la période du SR, a la largeur du puits et b celle de la barrière :

$$\cos(qd) = \cos(k_a a) \cosh(k_b b) - (1/2) (\delta - 1/\delta) \sin(k_a a) \sinh(k_b b) \quad (I.14)$$

avec:
$$\delta = \frac{k_a}{k_b} \quad (I.15)$$

tels que q , k_a et k_b mesurent respectivement les vecteurs d'onde du SR, du puits et de la barrière.

Par sa nouvelle forme de conditions de continuité, Bastard [I.73] a présenté un résultat similaire à celui de Mukhidji et al. [I.72] sauf que le facteur δ dépend des masses des deux matériaux :

$$\delta = \frac{k_b m_a}{k_a m_b} \quad (I.16)$$

Où m_a et m_b sont les masses effectives de l'électron dans le puits et la barrière. Le fait d'introduire la masse dans cette relation permet le confinement des états d'où la diminution de la largeur des minibandes.

Sachant que le $\cos(qd)$ est compris entre -1 et $+1$. La formation de la structure de minibandes à l'intérieur du puits ($E < V_0$) est obtenue en traçant la courbe à partir de la relation (I.7) en fonction de l'énergie de la particule.

L'ordre de grandeur des minibandes est de quelques dizaines de meV . Elles sont séparées par des minigaps.

Cho et al. [I.74] ont proposé un nouveau formalisme en terme de parité, des fonctions d'onde aux bords de bande, en utilisant les conditions de continuités de Bastard. Ce modèle donne en plus de la structure de minibande, les fonctions enveloppes au bord de chaque bande du SR.

Pan et al. [I.75] ont montré la distinction entre les SRs et les puits quantiques. Ils ont utilisé un modèle généralisant la théorie $\vec{k} \cdot \vec{p}$ avec les mêmes conditions de continuité précédentes.

Tous ces modèles utilisés avec les différentes approximations convergent vers le même résultat, c.à.d. la largeur des minibandes augmente dans les SRs avec:

- la diminution de la largeur des puits.
- la diminution de la largeur des barrières.
- la diminution de la hauteur des barrières.

La largeur des minibandes ΔE est le facteur prédominant dans la rapidité de réponse des dispositifs électroniques car le temps t del'ETR est inversement proportionnel à ΔE .

Cette largeur commande aussi l'effet laser dans les SRs en contrôlant le phénomène d'inversement de population [I.76-78] entre les minibandes existantes à l'intérieur des puits.

I.3.6.4. Temps de l'effet tunnel résonnant

Le temps de l'effet tunnel résonnant t est une entité physique très fondamentale pour l'interprétation des caractéristiques courant-tension.

Juang et al. [I.79] ont présenté des résultats de l'effet tunnel résonnant en intégrant l'équation de Schrödinger par rapport au temps.

Fisher et al. [I.80] ont utilisé une méthode plus élégante basée sur la détermination de la fonction " Lorentzienne " qui correspond au pic de résonance du coefficient de transmission, obtenu à partir de la matrice de transfert. Cette méthode est la généralisation de Breit-Wigner, et elle donne un seul temps unifiant t_r et t_l , les temps de l'ETR à droite et à gauche respectivement. t est donné par la relation:

$$t = \frac{\hbar}{\Delta E} \quad (\text{I.17})$$

où : ΔE : la largeur à mi-hauteur de la Lorentzienne.

L'optimisation de temps de passage du transport résonnant a permis plusieurs applications technologiques, surtout après l'idée ingénieuse de l'inversement de population dans les Lasers.

I.3.7. Application lasers

Un semi-conducteur peut absorber un photon au passage à un état excité, il peut également en émettre s'il possède un électron dans sa bande de conduction. En 1917, Albert Einstein établit le concept d'émission stimulée, dans lequel l'émission d'un photon par un atome est déclenchée par la présence du rayonnement incident. Dans ce cas, l'instant où ce produit l'émission est dicté par le champ exciteur, auquel elle se superpose en phase. Il s'agit donc d'un processus cohérent, qui constitue le cœur même du mécanisme laser.

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

$$\lambda = \frac{h.c}{\Delta E} \quad (\text{I.18})$$

où

CHAPITRE I : LES MATERIAUX SEMICONDUCTEURS III-V ET LES SUPERRESEAUX

ΔE : la valeur du saut d'énergie (Joules) ;

c : la vitesse de la lumière (m/s) ;

h : constante de planck (J.s)

L'observation d'une émission laser est autorisée par les transitions intrabandes dans les structures à puits quantiques dans les composés III-V. En fonction des composés semiconducteurs, l'énergie de bande interdite (donc l'émission laser) peut couvrir le domaine du visible (ZnS, ZnSe, GaN, GaP...), du proche infrarouge (GaAlAs/GaAs, GaInAs/GaAlAs, InP, GaInAsP) du moyen infrarouge (GaSb, InAs, InAsSb...) ou de l'infrarouge (PbSe, PbS, HgCdTe...) [I.81].

Les lasers sont utilisés dans l'industrie pour la découpe, la soudure, l'ablation de petites quantités de matière. En médecine, ils sont utilisés pour les affections ophtalmologiques et en chirurgie cérébrale. Le laser sert dans les télécommunications optiques, les mesures de distance et les contrôles de vitesse. Le laser est aussi utilisé dans le stockage et la lecture de l'information sur des disques optiques. L'holographie a en particulier, des applications dans le stockage de données.

L'idée ingénieuse de l'inversement de population a permis l'élaboration d'un dispositif laser à base de SR, comme paramètre libre la longueur d'onde, car le processus de génération du rayonnement est lié à la différence existante entre les bords de bandes de conduction et de valence des matériaux constituant le SR.

L'étude des LASER remonte à 1971, quand Kazarinov et al. [I.82] ont présenté une étude théorique sur le processus de génération et d'amplification de la lumière infrarouge dans les SRs à semiconducteurs.

Depuis, plusieurs efforts ont été consacrés à leurs réalisations, avec le développement des techniques de croissance des monocristaux telles que la MBE et la MOCVD. Après, quelques applications ont suivi, comme l'étude des modulateurs de lumière infrarouge, des détecteurs infrarouges [I.83-85] et des diodes lasers [I.86-88].

En 1989, Helm et al. [I.90] ont démontré pour la première fois, l'émission de radiations infrarouge de 110, 70 et 50 μm , basée sur des structures avec 5 à 6 minibandes dans les puits quantiques. En s'inspirant de cette expérience Choe et al [I.91] ont proposé la possibilité d'avoir des émissions Lasers dont la longueur d'onde est de l'ordre de 3 à 5 μm .

En 1991 Yang et al. [I.76] ont montré que l'inversement de population peut-être réalisé à travers un ETR entre inter-bande, le concept de ce phénomène a été proposé pour

la première fois, par Sweeny et al. [I.92], deux configurations basées sur des hétérostructures polytypes ont été présentées à cet effet, donnant une estimation de l'inversement de population égale à $3 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ avec une densité de courant de 10 A/cm^2 .

I.3.7.1. Diode laser

Les diodes laser sont des composants émetteurs de lumière compacts qui présentent un rendement de conversion optique/électrique élevé. Ces diodes laser étendent aujourd'hui leurs domaines d'application et la fenêtre spectrale couverte avec l'accroissement de la diversité de structure, de composés semi-conducteurs employés et la maîtrise technologique des procédés de dépôt de couches.

Les domaines d'application de la diode laser sont importants et couvrent un large domaine spectral qui ne cesse de s'étendre. De telles sources optiques, par leur caractère miniature, accordable, et/ou monofréquence associé à un rendement électro-optique important, explique leur bonne insertion dans les systèmes optiques actuels.

Une diode laser est constituée d'un milieu générateur et amplificateur de lumière (zone à gain) et d'une cavité optique résonnante.

Le milieu amplificateur est constitué d'une jonction PN qui était initialement composée d'une homojonction et qui est actuellement représenté par une (ou plusieurs) hétérojonction de composés semiconducteurs à bandes interdites directes.

Dans ces hétérojonctions, on injecte en direct un courant; une recombinaison radiative des paires électron-trou s'y développe et se manifeste par la création de photons dans les matériaux actifs qui sont à l'origine de l'émission laser. Une double hétérojonction est composée de deux jonctions séparées par une couche active de faible épaisseur de type puits quantique dans ce cas.

Les recombinaisons radiatives ont lieu dans cette couche qui est donc elle-même insérée entre deux couches de confinement qui font office de guide optique. La structure élémentaire est représentée sur la figure (I.18).

Ces couches actives ont une composition qui présente une énergie de bande interdite supérieure à celle caractérisant le matériau constituant la couche active.

A titre d'exemple, pour les matériaux $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$, il suffit de modifier la composition en aluminium pour modifier cette énergie de la bande interdite. Ainsi

l'insertion du milieu actif du type GaAs, entre deux couches de GaAlAs qui présente une énergie de bande interdite plus grande, permet de réaliser un guide optique puisque l'indice de réfraction de ces couches est inférieur à celui du composé binaire GaAs. Cette propriété a permis de réaliser un grand nombre de structures ayant pour objectif d'optimiser le confinement du mode optique.

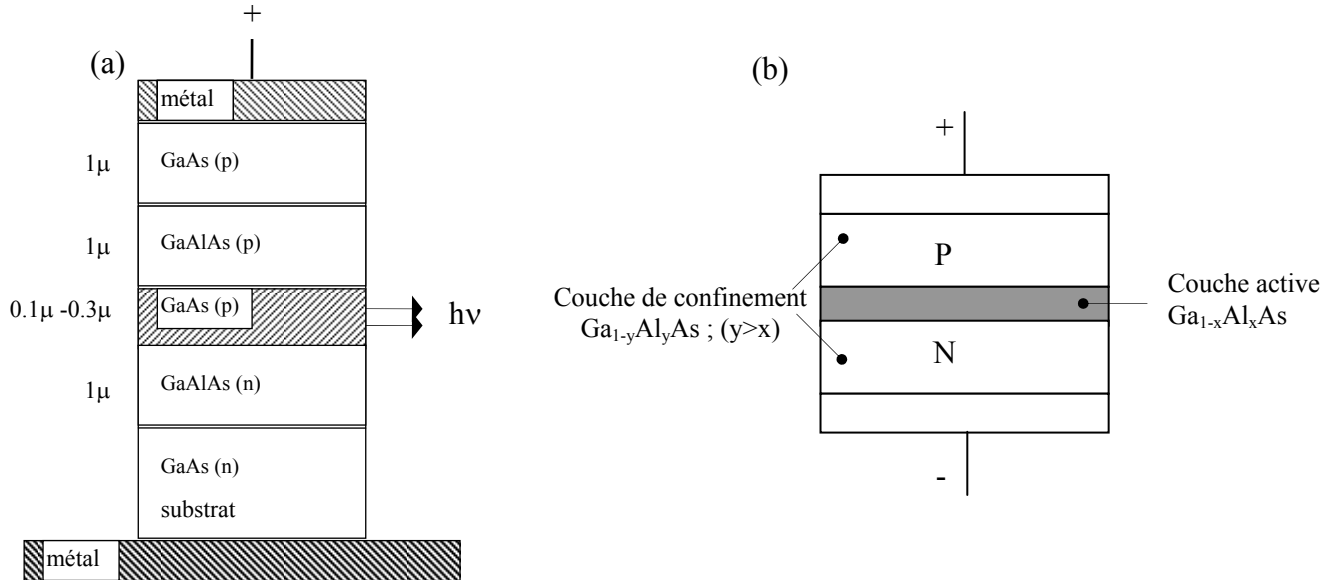


Fig.I.18. (a) Structure d'une diode laser au GaAs avec (b) Représentation élémentaire d'une diode hétérojonction.

L'emploi de structures à puits quantique dans les diodes laser permet de réaliser ou d'obtenir des propriétés spécifiques à l'émission :

- ✓ accord possible de la longueur d'onde d'émission en adaptant à la croissance les paramètres géométriques de la structure et les compositions de matériaux ;
- ✓ réduction du courant de seuil et de son accroissement avec la température.

Ce sont pour l'essentiel ces propriétés qui ont permise de réaliser des diodes laser à faible consommation, à haut rendement électro-optique travaillant à température ambiante en régime continu, en émettant un rayonnement monomode transverse.

I.3.7.1.1. Composé GaAs/GaAlAs

Les diodes laser peuvent être assemblées pour réaliser des barrettes commandées électriquement d'une façon collective. La multiplication des diodes sur un même substrat permet d'obtenir de fortes puissances à partir de composants miniatures. Ces laser ont été initialement étudiés et développés aux Etats-Unis. Selon la structure les diodes peuvent

travailler en régime continu ou en régime impulsionnel. Les barrettes peuvent être empilées avec une commande électrique série. Les niveaux de puissance délivrés atteignent le kilowatt. Un tel arrangement efficace pour exciter des laser solides délivrant de fortes énergies ou réaliser des commandes optiques de circuits électriques. La diode laser du type GaAs-GaAlAs émet un rayonnement centré à $\lambda=0.9 \mu m$, or, les télécommunications par fibres optiques nécessitent l'utilisation de diodes lasers émettant dans la gamme spectrale $1.1-1.6 \mu m$, où les fibres optiques actuelles présentent un minimum d'absorption et de dispersion. Ces diodes lasers sont réalisées à partir du composé quaternaire $Ga_xIn_{1-x}P_yAs_{1-y}$. Un choix judicieux des paramètres x et y permet de réaliser un accord de maille parfait avec le substrat de InP, et par suite d'obtenir une hétérostructure libre de toute contrainte.

I.3.7.1.2. Composés GaInAs/GaAlAs

L'hétéroépitaxie de composés pseudomorphiques contraints par désadaptation de maille, de type GaInAs/GaAlAs, permet de réaliser des composants lasers semiconducteurs dont la longueur d'onde d'émission est comprise entre celles pouvant être délivrées par les composés à base de GaAs et de InP. Des densités de courant de seuil inférieures à $100mA/cm^2$ et rendement quantique différentielle externe de 62% ont été rapportés sur ce type de composant à température ambiante émettant à $0,98\mu m$. Une faible dépendance du courant de seuil avec la température a été observée. Par ailleurs, le mécanisme de dégradation de ces composés diffère de celui observé sur les composés à base de GaAs (pas de ligne noire), ce qui laisse présager une meilleure fiabilité. La source de pompe adaptée est obtenue à partir de l'alliage semiconducteur GaInAs/GaAlAs. Des considérations liées à l'emploi de structures à puits quantiques et/ou au contrôle des contraintes permettent d'optimiser la structure de diode vis-à-vis de la longueur d'onde devant être émise. Ces composés sont particulièrement adaptés pour exciter la terre rare Er^{3+} insérée dans des fibres optiques à base de silice afin de réaliser des amplificateurs optiques. Les avantages liés à l'emploi d'une telle source d'excitation sont la fiabilité de la pompe GaInAs/GaAlAs ; la puissance optique délivrée relativement élevée et le faible courant de seuil. Deux grandeurs définissent les caractéristiques d'un amplificateur le coefficient de gain et la puissance de saturation.

Ces deux grandeurs dépendent de la longueur d'onde du dispositif de pompage, de la composition (concentration en ions actifs) et des paramètres optogéométriques de la fibre. Par exemple il a été obtenu des coefficients de gain de l'ordre de 10dB/mW en

utilisant une diode GaInAs/GaAlAs pompant une fibre dopée. L'emploi d'une source de pompe à $1,493\mu\text{m}$ permettait d'obtenir 6dB/mW.

Dans ces applications, les caractères spécifiques aux diodes laser (rendement optique/électrique, fiabilité, faible coût, facilité de mise en œuvre) sont à terme les critères qui gouverneront le choix de l'intégration d'amplificateurs optiques dans les systèmes de télécommunications. De ces points de vue, les composés GaInAs/GaAlAs répondent entièrement à ceux-là.

I.3.7.2. Le laser à cascade quantique

Le laser unipolaire à cascade quantique développé aux Bell-Laboratories dans l'équipe de F. Capasso ($\lambda_{\text{émission}} = 5\mu\text{m}$) [I.93]. Le laser à cascade quantique est un laser semiconducteur utilisant un seul type de porteurs, basé sur deux phénomènes fondamentaux de la mécanique quantique; l'effet tunnel et le confinement quantique. Bien que le concept de base ait été proposé en 1971, il fallut plus de vingt ans avant qu'un tel dispositif soit finalement réalisé en 1994 [I.94].

Le laser à cascade quantique, ou laser QC, est basé sur une approche complètement différente de celle de la diode Laser. Dans un laser QC (figure I.19), les électrons font des transitions entre des états liés, créés par confinement quantique dans des couches alternées ultraminces de matériaux semiconducteurs. Ces dernières, appelées puits quantiques, ont une taille comparable à la longueur d'onde de Debroglie de l'électron, elles restreignent son mouvement dans la direction perpendiculaire au plan des couches. A cause de cet effet, appelé confinement quantique, l'électron ne peut passer d'un état d'énergie à l'autre que par pas discrets, en émettant des photons de lumière. L'espacement entre les états dépend de la largeur du puit, et augmente quand la taille du puits diminue.

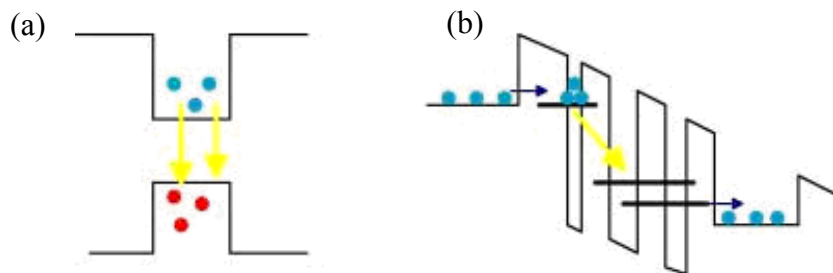


Fig.I.19. *Laser à cascade quantique [I.95]: (a) Laser interbande ; (b) Laser intersousbande*

Il est important de souligner l'agilité de ces structures qui permet d'obtenir des longueurs d'onde d'émission différentes en jouant sur les paramètres géométriques de la couche active.

Dans le système InGaAs/InAlAs, il a été démontré la possibilité d'obtenir des longueurs d'onde d'émission allant de 3.5 μm [I.96] à 24 μm [I.97]. Les lasers à cascade quantique délivrent une puissance crête de l'ordre de quelques dizaines à quelques centaines de milliwatts [I.98-99] et leur fonctionnement à température ambiante a été obtenu en régime d'impulsions comme en régime continu à des longueurs d'onde au-delà de 16 μm [I.100]. L'un des grands champs d'applications industrielles de ces sources infrarouges est la détection d'effluents liquides ou gazeux à l'état de trace [I.101].

I.4. CONCLUSION

Dans ce chapitre nous avons présenté en premier lieu les propriétés générales et les principales caractéristiques des semiconducteurs III-V et puis nous avons en seconde lieu, donné un aperçu sur la classification, les types, les propriétés, les modes de fabrication ainsi que l'application de superréseaux à base de semi conducteur III-V.

La fabrication de telles structures est rendue possible avec le développement des techniques moderne d'épitaxie: MOCVD (Metal Organic Chemical Vapour Deposition), EJM (Epitaxie par Jet Moléculaires) qui permettent d'ajuster le dépôt et l'épaisseur de couches monocristallines de matériaux semiconducteurs à une distance intratomique près.

Ces techniques de croissance permettent l'élaboration de plusieurs types de superréseaux. En particulier les superréseaux à puits et à barrières, qui font l'objet de notre travail dans ce manuscrit, vue la facilité de sa croissance et la simplicité de son étude tout en exposant des propriétés fascinantes résidant dans sa capacité de confinement des états électroniques.

Les superréseaux sont caractérisés par deux phénomènes spectaculaires:

- ✓ **L'effet tunnel interbande** où les porteurs de charges passent d'une bande à l'autre.
- ✓ **L'effet tunnel intrabande** où le transport de charges s'effectue dans la même bande.

Par conséquent ces structures trouvent des applications technologiques intéressantes, comme les lasers à longueurs d'onde variables et les diodes à effet tunnel résonnant interbandes. Pour ces différentes applications et élargissement de l'utilisation des superréseaux à base de semiconducteurs III-V, une étude de comportement et de transport de l'électron à l'intérieur de ces structures est nécessaire. Ceci fait l'objet du chapitre suivant.

I.5. REFERENCES

- [1]. L. Esaki and R. Tsu, IBM J. Res. Develop. 14, 61(1970).
- [2]. G.Renaud, Surf. Sci. Rep.,32, Nos 1 et 2, pp. 1-90, (1998).
- [3]. Gressen et al.
- [4]. L. L. Chang and B. C. Giessen, "Synthetic Modulated Structures" edited by I. Academic Press, (1985).
- [5]. K. Iijima, T. Terashima, Y. Bando, K. Kamigaki and H. Terauchi, App Phys. 72.. 2840-2845 (1992).
- [6]. S.M. Sze, "Semiconductor devices: Physics and technology", 2n edition, John Wiley and Sons (2001).
- [7]. P. Kiréev, « la physique des semiconducteurs », 2^{ième} Edition Mir, Moscou (1975)
- [8]. R. Castagné et all. « Circuits Intégrés en arséniure de Gallium ». Physique, technologie et règles de conception. Masson et CINET ENST Paris, (1989).
- [9]. S.Laval . « Physique des semi-conducteurs III-V », Ecole d'été d'optoélectronique(2002).
- [10]. H. Mathieu. « Physique des semi-conducteurs et des composants électroniques », Masson, (1987).
- [11]. G. Bastard, "Wave mechanics applied to semiconductor heterostructures", Les éditions de physique, Paris, (1988).
- [12]. P.Y.YU, "Fundamentals of semiconductors Physics and materials properties ». Manuel Cardona, Springer (2001).
- [13]. C. Kittel, « Introduction a la physique de l'état solide », Dunode (1972)
- [14]. J.S.Blakemore,"Semiconducting and other major properties of gallium arsenide", J.Appl.phys.53(10) October (1982).
- [15]. F. Levy, « Traité des matériaux (18).Physique et technologie des semiconducteurs ». Pres.poly. et univ. Romandes (1995)
- [16]. O. Krebs and P. Voisin, Phys. Rev. Lett. 77, 1829 (1996).
- [17]. H.Mathieu, « Physique des semi-conducteurs et composants électroniques », édition Masson,(1996).
- [18]. J. H. Davies. The physics of low-dimensional semiconductors, Cambridge University Press, (1998).
- [19]. R. E. Nahory, M. A. Pollack, W. D. Johnston, R. L. Barns, Appl. Phys. Lett. 33, 659 (1978).

- [20]. A.Beiser, Physique Appliquée Cours et Problèmes. McGrawHill, série Schaum (1987).
- [21]. H.Mathieu, « Physique des semi-conducteurs et composants électroniques », 5ième édition Dunod,(2001).
- [22]. D. W. M. DuMond and J. P. Youtz. App. Phys. 11, 357 (1940).
- [23]. R. Tsu and L. Esaki, App. Phys. Lett. 22, 562 (1973).
- [24]. A. Chomatte, B. Devraud, P. Auvray, A. Regreny, J. App. Phys. 59, 3835 (1986).
- [25]. Cyrille Barreteau, Physique de solide, "cyrille.barreteau@cea.fr
http://www-dream.cea.fr/spcsi/cbarreteau/physiaue_du_solid/physol.htm
- [26]. F.Rinaldi, Annuel Report, Optoelectronics Department, University of Ulm (2002).
- [27]. Y.Cho and J.Arthur, Progr. Solid Stat.Chem. 30, 157 (1975).
- [28]. D.V.Morgan and K.Boar, "An introduction to semiconductor technology", 2nd edition, John Wiley & sons, (1990)
- [29]. L.C.Witkowsky, T.J.Drummond, C.M.S.Stanchak, H.Morkoç, Applied Physics Letters 37, 1033 (1980).
- [30]. M. van Schilfgaarde, A. Sher and A. B. Chen. InTlSb. Phys. Lett. 62 (16), 1857-1859, (1993).
- [31]. R.E.Ruhrwein, U.S.Patent.33, 64084(1986)
- [32]. R. Q. Yang and J. M. Xu, App. Phys. Lett. 59, 181 (1991).
- [33]. R. C. Miller, A. C. Grossard, D. A. Kleiman, and O. Munteana, Phys. Rev. B 29, 3740 (1984).
- [34]. S. Sen, F. Capasso, A. C. Grossard, R. A. Spah, A. L. Hutchinson, and S. N. G. Chu, App. Phys. Lett. 51, 1428 (1987).
- [35]. F. Capasso and A. Kiehl, J. App. Phys. 58, 1366 (1985).
- [36]. L. Esaki, L. L. Chang, and E. E. Mendez, Jpn. J. App. Phys. 20, L529 (1981).
- [37]. N. Navel and B. Laikhtman, Phys. Rev. B 49, 16 829 (1994).
- [38]. F. Capasso, S. Luryi, W. T. Sang, C. G. Bethea, and B. F. Levine, Phys. Rev. Lett. 51, 2318 (1983).
- [39]. J. A. Brum, P. Voisin and G. Bastard, Phys. Rev. B 33, 1063 (1986).
- [40]. C. L. Allyn, A. C. Gossard and W. Wiegmann, App. Phys. Lett. 36, 373 (1980).
- [41]. F. Capasso, W. T. Sang, and G. F. Williams, IEEE, Trans. Electron. Devices 30, 381 (1983).
- [42]. A. K. Sasaki, Phys. Rev. B 30, 7016 (1984).

CHAPITRE I : LES MATERIAUX SEMICONDUCTEURS III-V ET LES SUPERRESEAUX

- [43]. Y. Bennabi, Mémoire de magister « effets d'interfaces dégradées sur la structure de bandes et les propriétés de transport par effet tunnel résonnant dans les semiconducteurs ». USTO (juin 1996).
- [44]. B. Simon, *Adv. App. Math.* 3, 463 (1982).
- [45]. D. Levine, P. J. Steinhard, and R. Clark, *Phys. Rev. Lett.* 53, 2477 (1984).
- [46]. R. Merlin, K. Bajema, and R. Clark, *Phys. Rev. Lett.* 55, 1768 (1985).
- [47]. L. Esaki and R. Tsu, *IBM J. Res. Note*, Rc, 2418 (1969).
- [48]. H. C. Casey Jr. And M. K. Ploog, A. Fisher, and H. Kunzel, *J. Electrochem. Soc.* 1281, 400 (1981).
- [49]. E. F. Shubert, J. E. Cunningham, and W. T. Sang, *Phys. Rev. B* 36, 1348 (1987).
- [50]. D. L. Smith and C. Mailhot, *Rev. Mod. Phys.* 62, 173 (1990).
- [51]. M. Wolony et D. Selle. Introduction aux composants à hétérostructures l'onde électrique, mai-juin, vol 70, 3 (1990) pp.59-74.
- [52]. L. L. Chang, L. Esaki, and R. Tsu, *App. Phys. Lett.* 24, 593 (1974).
- [53]. S. Luryi, *App. Phys. Lett.* 47, 490 (1985).
- [54]. G. Binning, H. Rohrer, C. Gerber, et al., *Phy. Rev. Lett.* 49, 57 (1982).
- [55]. E. B. Brown, *App. Phys. Lett.* 58, 2291 (1991).
- [56]. M. O. Vassell, J. Lee, and H. F. Lokwood, *J. App. Phys.* 54, 5206 (1983).
- [57]. K. F. Brennan and C. J. Summers, *J. App. Phys.* 61, 614 (1987).
- [58]. S. S. Allen and S. L. Richardson, *Phys. Rev. B* 50, 11 693 (1994).
- [59]. S. S. Allen and S. L. Richardson, *J. App. Phys.* 79, 886 (1996).
- [60]. A. N. Khonder, M. R. Khan, and A. F. N. Anwar, *J. App. Phys.* 63, 5192 (1988).
- [61]. Y. Zebda and A. M. Kan'an, *J. App. Phys.* 72, 559 (1992).
- [62]. G. Binning, H. Rohrer, C. Gerber, et al., *Phy. Rev. Lett.* 49, 57 (1982).
- [63]. H. T. Grahn, H. Schneider, et K. V. Klitzing, *Phy. Rev. B* 41, 2890 (1990).
- [64]. E. O. Kane. Basic concept of tunnelling, *Tunnelling phenomena in solids*, P1-12. Plenum Press, (1969).
- [65]. C. B. Duke. *Tunnelling in solids. Solid state physics.* Academic Press, New York, (1969).
- [66]. A. K. Ghatak, K. Thyagarajan, and M. R. Shenoy. *IEEE J. Quant. Elect.* 24(8), P1524-1531, (1988).
- [67]. B. Jonsson and T. Sverre. *IEEE J. Quant. Elect.* 26(11), P 2025-2035, (1990).
- [68]. E. Merzbacher. « *Quantum Mechanics* », P113-134. Joh, Wiley et Sons, 3rd édition, (1998).
- [69]. A. Messiah. *Mécanique Quantique*, volume I, P194-203. Dunod, (1965).

CHAPITRE I : LES MATERIAUX SEMICONDUCTEURS III-V ET LES SUPERRESEAUX

- [70]. L. Esaki and L. L. Chang, *Phy.Rev. Lett.* 33, 493 (1974).
- [71]. K. K. Choi and B. F. Levine, *Phy. Rev. B* 35, 4172 (1987).
- [72]. D. Mukherdji and B. R. Nag, *Phys. Rev. B* 12, 4338 (1975).
- [73]. G. Bastard « wave mechanics applied to semiconductor heterostructures », les Editions de Physique, Paris (1988).
- [74]. H. S. Cho and P. R. Prucnal, *Phys. Rev. B* 36, 3237 (1987).
- [75]. S. H. Pan and S. Feng, *Phys. Rev. B* 44, 5668 (1991).
- [76]. R. Q. Yang and J. M. Xu, *App. Phys. Lett.* 59, 181 (1991).
- [77]. R. Q. Yang and J. M. Xu, *App. Phys. B* 46, 6969 (1992).
- [78]. R. Q. Yang, J. M. Xu and Sweeny, *Phy. Rev. B* 50, 7474 (1994).
- [79]. Juang, *Phys. Rev. B* 44, 10706 (1991).
- [80]. J. Fisher and C. Zhang, *J. App. Phys.* 76, 606 (1994).
- [81]. G. Brassart, J. L. Meyzonnette et J. P. Pocholle, « Sources laser », *Tech. Ing. E* 4020 (1996)
- [82]. R. F. Kazarinov and R. A. Suris, *Sov. Semicond.* 5, 707 (1971); 6, 120 (1972).
- [83]. S. Smith, L. C. Chiu, S. Margalit, A. Yariv, and A. Y. Cho, *J. Vac. Sci. Technol. B* 1, 376 (1983).
- [84]. D. Coon and R. P. G. Karunasiri, *App. Phys. Lett.* 45, 649 (1984).
- [85]. B. F. Levin, K. K. Choi, C. G. Bethea, J. Walker, and R. J. Malik, *App. Phys. Lett.* 50, 1092 (1987).
- [86]. F. Capasso, K. Mohammed, and A. Y Cho, *App. Phys. Lett.* 48, 478 (1986).
- [87]. P. F. Yuh and K. L. Wang, *App. Phys. Lett.* 51, 1404 (1987).
- [88]. H. C. Liu, *J. App. Phys.* 63, 2856 (1988).
- [89]. S. Brenstain and J. Katz, *Phys. Rev. B* 39, 10 852 (1989).
- [90]. M. Helm, P. England, E. Colas, F. De Rosa, and S. J. Allen, Jr. *Phys. Rev. Lett.* 63, 74 (1989).
- [91]. J. W. Choe, A. G. U. Perera, M. H. Francombe, and D. D. Coon, *App. Phys. Lett.* 59, 54 (1991).
- [92]. M. Sweeny and J. M. Xu, *App. Phys. Lett.* 54, 546 (1989).
- [93]. J. Faist, F. Capasso "Quantum Cascade Laser" *Mc Graw-Hill Yearbook of Science and Technology* 1997, p265-267
- [94]. J. Faist, F. Capasso, D. L. Sivco, C. Sirtori, A. L. Hutchinson, and A. Y. Cho "Quantum Cascade Laser", *Science*, 264, 553, (1994)
- [95]. Romuald Hourdé, *Dispositifs Eelctronique et optique à semiconducteurs. Science et génie des matériaux -2006-2007.*

CHAPITRE I : LES MATERIAUX SEMICONDUCTEURS III-V ET LES SUPERRESEAUX

- [96]. J. Faist et al. App. Phys. Lett. Vol 72, N° 6, 680 (1996).
- [97]. R. Colombelli et al. App. Phys. Lett. 78, 2620 (2001).
- [98]. C. Gmachl et al. App. Phys. Letters, 72, N° 24, 3130 (1998).
- [99]. C. Gmachl et al, Recent results in quantum cascade lasers and intersubband transitions in GaN/AlGaN multiple quantum wells, à paraître dans Physica E (2002).
- [100]. D. Hofstetter et al. App. Phys. Lett, 78, 1964 (2001).
- [101]. D. Soinnenfroh et al. Applied Optics, **40**, 812 (2001).



CHAPITRE II



LES SYSTEMES
UNIDIMENSIONNELS
DES ORDONNES

CHAPITRE II

LES SYSTEMES UNIDIMENSIONNELS DESORDONNES

II.1. INTRODUCTION

Peu après la découverte de la mécanique quantique, les physiciens ont commencé à appliquer cette théorie aux électrons dans les solides. Ils se sont intéressés en premier lieu aux cristaux comportant peu de défauts structuraux, dans lesquels, les électrons sont soumis en première approximation à un potentiel ayant la même périodicité de translation que le cristal. Grâce au théorème de Bloch [II.1], les états électroniques sont classés selon une structure de bandes, ce qui a permis d'expliquer le caractère isolant ou métallique de nombreux cristaux en fonction de l'appartenance ou pas du niveau de Fermi à la bande interdite [II.2]. Ceci a conduit à une approche du transport électronique semi-classique qui permet aussi de considérer les électrons analogues à des particules classiques libres subissant des collisions avec les défauts structuraux du cristal [II.3].

L'absence de la périodicité est due à la présence de défauts dans la structure. Lorsqu'il y a peu de défauts dans le cristal, les paquets d'ondes électroniques peuvent être considérés entre deux collisions consécutives comme des particules classiques. Mais, ce n'est plus le cas lorsque la densité de défauts augmente : la nature ondulatoire de l'électron se manifeste sur des distances de propagation supérieures à la distance moyenne entre défauts. Ces effets d'interférences quantiques ralentissent la propagation et peuvent même arrêter totalement la propagation de l'onde électronique si le taux du désordre est suffisamment important. La probabilité d'avoir un confinement d'électrons, dû au désordre a été démontrée par Anderson en 1958 [II.4]. Depuis, la théorie du transport dans les systèmes électroniques désordonnés s'est beaucoup développée et a permis de décrire la physique fondamentale de la propagation des ondes dans les structures aléatoires [II.5-6].

Dans ce chapitre nous discutons les différents types des systèmes ordonnés, désordonnés à une dimension pour mieux comprendre le phénomène de transport électronique dans ces systèmes et de décrire la nature des états correspondants. D'autre part, ce chapitre reprend les approches de base établies dans le modèle d'Anderson relatif

au phénomène de la localisation dans les systèmes désordonnés. Nous discuterons l'évolution des notions fondamentales vers la théorie d'échelle de la localisation et plus particulièrement vers le phénomène de la localisation dans les systèmes unidimensionnels (1d) désordonnés.

II.2. SYSTÈME ORDONNÉ

La principale caractéristique d'un système ordonné est la périodicité, une propriété permettant l'application du théorème de Bloch qui est un moyen très précieux pour l'étude des propriétés électroniques de tels systèmes [II.1].

Un état de Bloch est exprimé sous la forme :

$$\Psi_k(\vec{r}) = U_k(\vec{r}) e^{i\vec{k}\vec{r}}$$

(II.1)

Où $U_k(\vec{r})$ est une fonction vérifiant la périodicité du réseau, c.à.d. $U_k(\vec{r} + \vec{R}) = U_k(\vec{r})$ avec \vec{R} le vecteur de translation du réseau cristallin. Ainsi, 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 . Donc le théorème de Bloch permet de démontrer que les états électroniques permis (qui reproduisent la périodicité du potentiel) sont étendus (figure II.1). Par suite Les objets quantiques sont des ondes de Bloch pouvant se déplacer librement, sans restriction dans toute structure ordonnée

II.2.1. Etats électroniques d'un système Ordonné

Dans les systèmes périodiques, il est bien connu que les états propres sont étendus et les fonctions d'onde sont des fonctions de Bloch. Donc la probabilité de présence de l'électron aux extrémités du système n'est pas nulle.

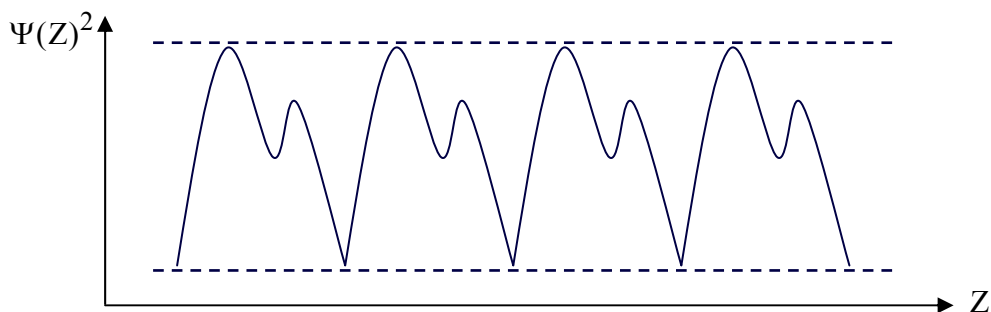


Fig.II.1. Représentation d'état étendu de Bloch d'un système ordonné.

II.3. SYSTEMES DESORDONNÉS

En réalité, un système idéalement ordonné ne peut exister. Il se trouve que des distorsions apparaissent dans la structure ordonnée par la présence d'impuretés, de dislocations, de lacunes ou de défauts.

II.3.1. types de désordre dans les systèmes désordonnés

En partant d'un cristal idéal, les modèles de désordre peuvent être construits de façons différentes (Voir Fig. II.2). On distingue:

- **Le désordre spatial (topologique)**: vient du positionnement aléatoire des atomes hors des sites cristallins : verre, polymères et matériaux amorphes. Il forme ainsi des états localisés.
- **Le désordre structural**: est dû à des dopants, des impuretés et des défauts chimiques intrinsèques au matériau.
- **Le désordre compositionnel**: les alliages sont obtenus à partir de la distribution aléatoire de plusieurs types d'atomes sur un réseau.

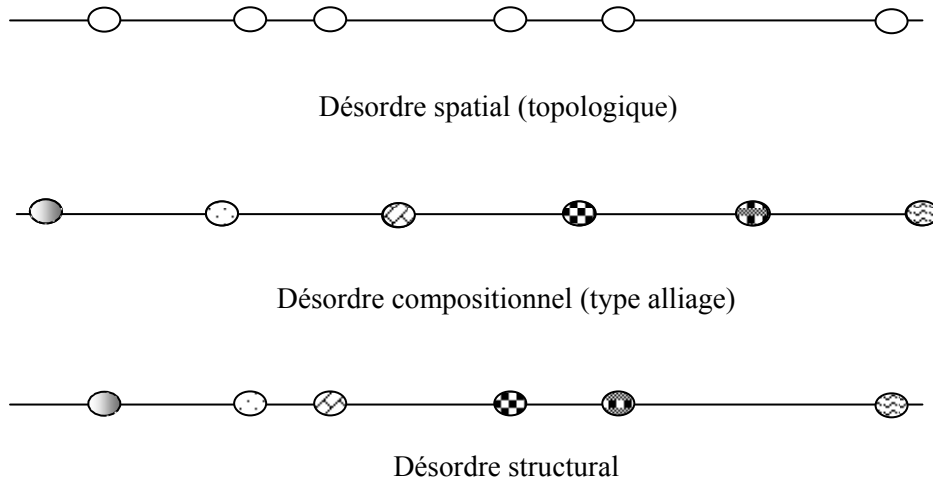


Fig. II.2. Types de désordre dans un système unidimensionnel

II.3.2. Etats électroniques d'un système désordonné

II.3.2.1. La localisation d'Anderson

Quand le désordre est introduit dans le système, le théorème de Bloch n'est plus vérifié et les fonctions d'onde perdent leur périodicité. Dans ce cas deux types d'états se présentent selon le degré de désordre.

Pour autant que ce degré reste faible, le principe de développement de la symétrie de translation reste valable dans le cadre de la théorie des faibles perturbations

(approximation du potentiel cohérent) [II.7]. Les états propres restent étendus, mais non périodiques, l'enveloppe de la fonction d'onde demeure horizontale et la propagation de ces ondes prend un caractère diffusif conformément à la théorie de Bloch-Boltzmann dans les matériaux (Voir Figure. II.3) [II.2-3].

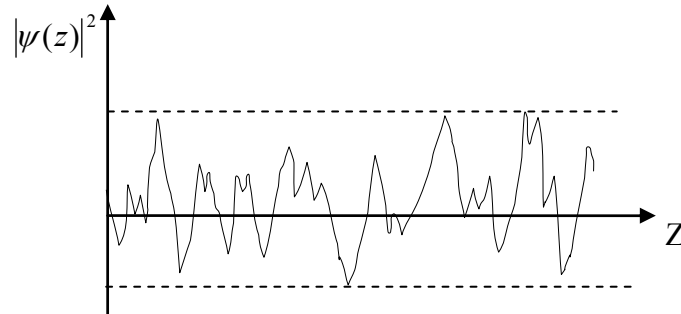


Fig.II.3. Représentation d'état étendu d'un système faiblement désordonné

Par contre, dès que la concentration de ces perturbations devient importante, il n'est plus question d'aborder l'aspect perturbation de la symétrie de translation. Une nouvelle approche pour les systèmes désordonnés est donc nécessaire [II.8].

Anderson a montré qu'en présence d'un désordre suffisamment fort, tous les états électroniques devenaient localisés et présentaient par conséquent une propagation limitée [II.5]. Contrairement aux considérations précédentes (pour lesquelles une onde dans un milieu désordonné était vue comme une onde de Bloch ayant perdu sa cohérence spatiale sur des longueurs de l'ordre du libre parcours moyen), ces états propres ont une probabilité de présence importante dans une région finie de l'espace. La fonction enveloppe décroît exponentiellement à partir de certaines positions et devient négligeable au delà d'une longueur caractéristique ξ , appelée longueur de localisation, liée à la configuration du désordre (voir Figure. II.4). Dans ces conditions, la fonction enveloppe s'écrit :

$$f(r) \propto e^{-\frac{|r-r_0|}{\xi}} \quad (II.2)$$

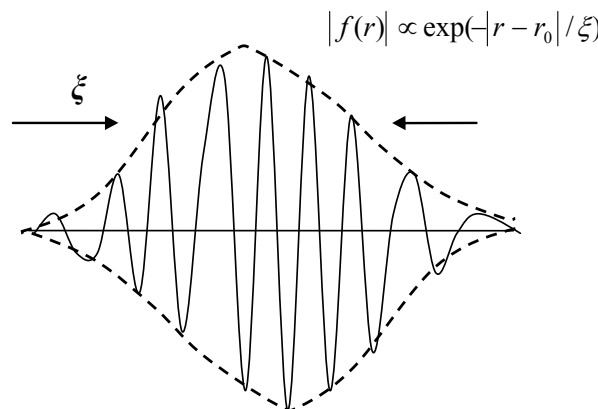


Fig.II.4. Représentation d'état localisé d'un système suffisamment désordonné. La fonction enveloppe est confinée dans une région finie de l'espace.

Plus ξ est petit, plus l'état est localisé. L'existence de ces états localisés peut s'expliquer physiquement en termes de puits de potentiel desquels les électrons ne peuvent pas sortir. Le caractère étendu ou localisé des états dépend de trois paramètres : la dimension d du modèle, la force V_d du désordre et l'énergie de la particule ε_i .

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. II.5) :

- 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 .

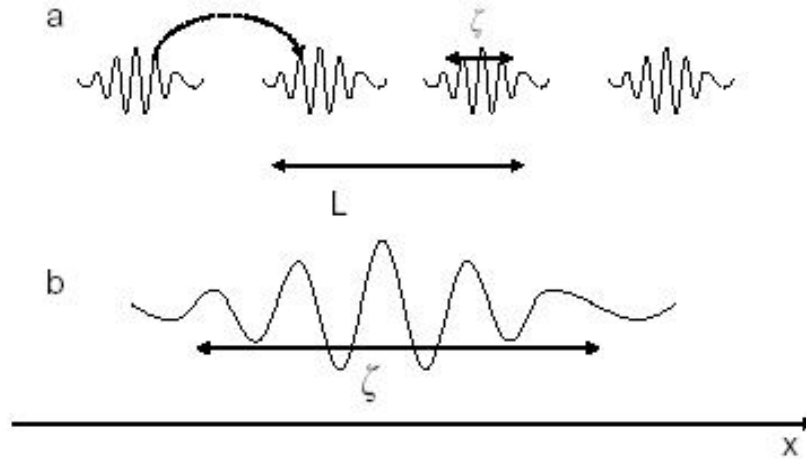


Fig.II.5. (a) Localisation forte, lorsque la longueur de localisation ξ est plus petite que la taille de l'échantillon L . La conduction se fait par sauts entre différents états localisés. (b) Régime délocalisé.

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

$$g(L) \propto e^{-\frac{L}{\xi}} \quad (\text{II.3})$$

Pour traverser l'échantillon, les électrons doivent "sauter" d'état localisé en état localisé.

La conductance du système est reliée à la probabilité $e^{-\frac{L}{\xi}}$ de ces sauts.

Ces considérations simples montrent que 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.

II.3.2.2. Critère de la localisation d'Anderson

La localisation d'Anderson est un phénomène de propagation caractérisé par la présence d'un désordre statique. En 1958, Anderson a montré dans son papier original intitulé : *Absence of diffusion in certain random lattices*, que la fonction d'onde d'un électron dans un réseau unidimensionnel non périodique, ne peut pas être du type fonction de Bloch, mais elle est plutôt limitée dans l'espace. Les fonctions propres étaient confinées sur des régions finies de l'espace [II.4].

En 1968 Mott et al [II.9] ont étudié la localisation et les propriétés de transport dans les semi-conducteurs amorphes, ils ont proposé le concept de front de mobilité (l'augmentation de la conductance vers la valeur σ_{\min}), une énergie séparant les états électroniques localisés des états étendus (voir Figure II.6), ainsi à la température nulle, la conductivité s'annule à partir d'un certain degré de désordre rendant le système isolant.

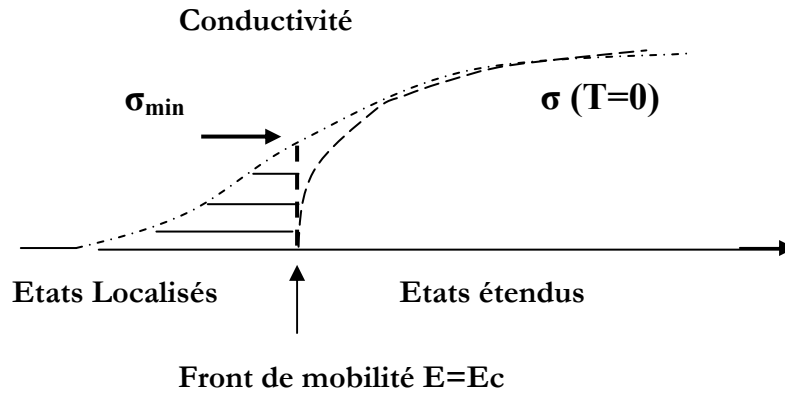


Fig.II.6. Schéma représentant la notion de front de mobilité [9,10]

Dans les systèmes 3d,

$$\sigma_{\min}^{3D} \approx \left(\frac{1}{3\pi^2} \frac{e^2}{\hbar} \frac{1}{a} \right) \quad (\text{II.4})$$

où a est un paramètre de longueur microscopique, proche de l'inverse du vecteur d'onde de Fermi ($a \approx k_f^{-1}$). Quant aux systèmes bidimensionnels (2d), l'observation intéressante a consisté sur l'universalité du seuil de mobilité [II.10] :

$$\sigma_{\min}^{2D} \approx 0.1 \frac{e^2}{\hbar} \quad (\text{II.5})$$

où \hbar est la constante de Planck et e la charge de l'électron.

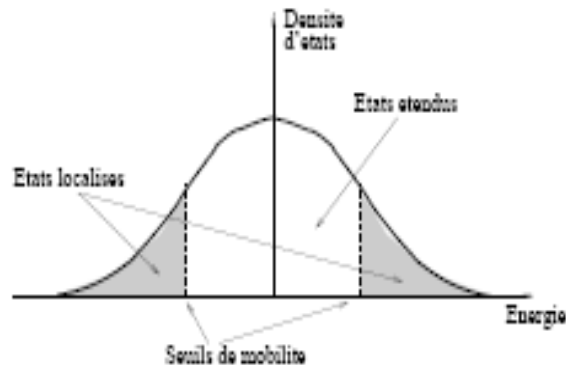


Fig. II.7. Schéma représentant les seuils de mobilité dans un système désordonné 3D [8]

Dans les systèmes tridimensionnels (3d), un taux de désordre critique $V_c \approx 16.3$ a été obtenu : Lorsque $V_d < V_c$, états localisés et états étendus coexistent. Sur le spectre de la densité d'états, ces états sont séparés par des seuils de mobilités: Les états de bords de bande étant localisés et les états du centre de la bande étendus (figure II.7). Quand V_d augmente, les bords de bande se rapprochent vers le centre de la bande et l'atteignent pour $V_d = V_c$. Au delà, tous les états deviennent localisés. La notion de seuil de mobilité introduite par Mott et al a permis de comprendre les transitions métal-isolant observées dans certains conducteurs dopés désordonnés [II.9] : par changement de la concentration du dopant, le niveau de Fermi peut franchir le seuil de mobilité, d'où la transition.

Landauer en 1970 [II.10] 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 unidimensionnels en fonction des coefficients de transmission T , et de réflexion R .

$$G = \frac{2e^2}{h} \frac{T}{R} \quad (\text{II.6})$$

Cette formule a fourni un point de vue puissant pour l'étude du transport dans les systèmes mésoscopiques [II.11].

Au milieu des années 1970 Thouless et al [II.12] ont commencé à formuler une théorie d'échelle. Ils 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 II.7) s'applique:

$$G(L) = \frac{n_S e^2 \tau}{m^* L^{d-2}} \quad (\text{II.7})$$

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

- La conductance est faible on s'attend à se trouver dans le régime fortement localisé (équation (II.3)).

$$g(L) \propto e^{-\frac{L}{\xi}} \quad (\text{II.3})$$

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

II.3.2.3. La théorie d'échelle de la localisation d'Anderson

La théorie d'échelle de la localisation [II.13] a permis de mieux comprendre le rôle de la dimension d du système. Elle est basée sur la dépendance de la conductance avec la taille du système. On s'intéresse à la conductance $G(L)$ d'un système désordonné « cubique » de longueur L , donc de taille L^d . La question est de savoir comment la conductance varie si l'on augmente un peu la taille du système. L'hypothèse de la théorie d'échelle est que cette variation dépend d'un seul paramètre, la conductance du système de taille L^d . Cette hypothèse est fondée en particulier sur les travaux de Thouless [II.12] et de Wegner [II.14]. Thouless a défini la conductance sans dimension,

$$g = \frac{\hbar}{e^2} G, \quad (\text{II.8})$$

et a remarqué que ce paramètre était relié à la manière dont les états propres du système de taille L^d seraient couplés à des systèmes voisins accolés.

Dans cette théorie d'échelle, la variation de la conductance g avec la longueur L du système ne dépend donc que de g . Tout est décrit par une seule fonction $\beta(g)$, définie par :

$$\beta[g(L)] = \frac{d \ln g(L)}{d \ln L} \quad (\text{II.9})$$

La forme de cette fonction dépend de la dimension du système. L'allure de $\beta(g)$ est représentée sur la figure (II.8) pour $d=1,2$ et 3 . pour déterminer l'allure de $\beta(g)$, Abrahams et al. [13] ont supposé qu'elle était continue et croissante, et ils se sont basés sur les comportements asymptotiques suivants :

- Si le système est faiblement désordonné, l'approximation de Bloch Boltzmann est bonne et les lois d'addition des conductances dans le régime métallique (loi d'Ohm) s'appliquent lorsque l'on accole plusieurs systèmes de longueur L pour en former un plus grand. La conductance varie donc comme L^{d-2} , et en a $\beta(g) = d - 2$.
- Lorsque le désordre est un peu plus fort, cette approximation n'est plus valable. Il y a des effets d'interférences quantiques qui rendent la propagation moins rapide et diminuent la conductance par rapport à celle de Bloch Boltzmann : se sont les corrections de *localisation faible*. Ces corrections sont calculables de manière perturbative à partir de la formule de Kubo-Greenwood [II.15], et elles vérifient l'hypothèse de la théorie d'échelle.
- Dans le cas inverse d'un système fortement désordonné, les états sont exponentiellement localisés et les lois d'addition des résistances ne s'appliquent plus du tout. g décroît exponentiellement avec la taille du système (équation (II.3)). Dans ce cas la fonction d'échelle s'écrit: $\beta(g) = \ln(g)$

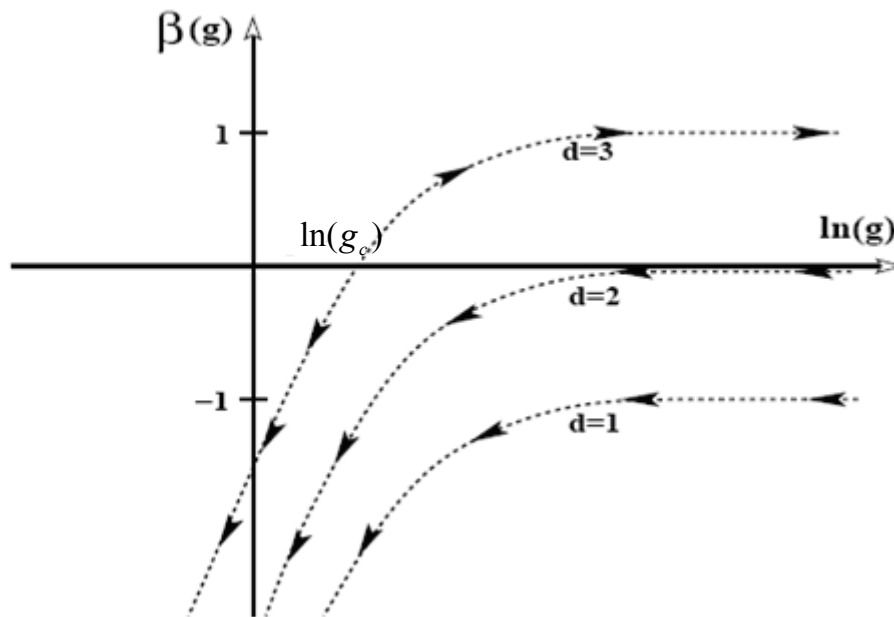


Fig II.8. Fonction d'échelle $\beta(g) = d \ln(g) / d \ln(L)$. Le signe de $\beta(g)$ donne le sens de l'évolution (flèches) de la conductance adimensionnée g lorsque la taille du système L augmente.

L'étude de la fonction d'échelle β a permis de mettre en évidence l'existence d'une dimension critique $d^* = 2$ à $g = g_c$ [II.13] au-delà de laquelle la transition de phase métal-isolant est réalisée.

En effet, de la figure (II.8) on peut déduire beaucoup de choses. En dimension 1 et 2, $\beta(g) < 0$. Donc g tend vers 0 quand L augmente, ce qui signifie que tous les états sont localisés, quelle que soit la force de désordre. En dimension 3, $\beta(g)$ change de signe pour une valeur critique $g_c = 1$, c'est-à-dire une conductance G_c de l'ordre de e^2/h . Si $g > g_c$ pour un système fini, en augmentant la taille du système, on tend vers un système métallique avec des états étendus et un comportement ohmique. Si $g < g_c$, on tend vers un système isolant avec des états localisés.

Donc la théorie d'échelle de la localisation à un seul paramètre g a présenté des arguments pour décrire les propriétés de transmission dans les systèmes désordonnés. En se basant sur l'approche de Landauer dans la description de la conductance à partir des propriétés de la transmission des ondes [II.10], d'autres travaux ont appuyé les résultats universels de la théorie d'échelle de la localisation d'Anderson à un paramètre (g) dans les systèmes désordonnés 1d. [II.16].

II.3.2.4. La suppression de la localisation d'Anderson dans les systèmes unidimensionnels

Dans les systèmes désordonnés, les états étendus n'existent que pour les structures à 3-D selon Anderson. Or, il a été démontré récemment, que quelques fonctions d'onde peuvent devenir étendues dans des systèmes dimers aléatoires d'une structure unidimensionnelle [II.17], correspondant à des intervalles étroits d'énergie. Cette constatation a conduit au développement de sujets très pointus sur la possibilité de suppression de localisation dans les systèmes à 1d induite par des effets de non linéarité, de corrélation ou d'interaction à longue portée.

La localisation des états est due aux interférences destructives des ondes électroniques. Donc la fonction d'onde est bien définie dans une région bien précise et la probabilité de présence devient très négligeable aux extrémités du système. Dans les systèmes désordonnés à 1d et à 2d, tous les états sont localisés même pour des valeurs infinitésimales de désordre. Par contre, il existe les deux types d'états (étendus et localisés) à 3-D mais séparés par des fronts de mobilité.

Or en présence de corrélation de désordre, des propriétés constructives peuvent y apparaître. Cette violation des règles établies dans la théorie d'échelle de la localisation est présentée à travers la description de l'effet dimer sur les modèles mathématiques des liaisons fortes et de Kronig-Penney respectivement. Une simulation numérique dans le

dernier cas permettra de décrire les réponses de transmission conventionnelles dans le modèle du dimer aléatoires.

Les études analytiques, numériques et expérimentale ont permis d'observer que les processus de délocalisation ont lieu quand le désordre dimer ou trimer est introduit d'où La suppression de la localisation d'Anderson dans les systèmes unidimensionnels.

II.3.2.4.1. Constats des études analytiques et numériques

Un nombre important de modèles unidimensionnels désordonnés a été proposé ces vingt dernières années, montrant des états prolongés non triviaux [II.18-20]. Ce phénomène est dû à une corrélation spatiale particulière du désordre. Plusieurs recherches dans ce contexte régi par des modèles théoriques ont soutenu ce résultat intéressant [II.21-25].

Cette constatation a conduit au développement de sujets très pointus sur la possibilité de suppression de localisation dans les systèmes à 1d induite par des effets de non linéarité [II.26], de corrélation [II.27-29] ou d'interaction à longue portée [II.30].

Dominguez et al [II.31] ont démontré analytiquement et numériquement dans une série de d'articles l'existence d'un ensemble d'états prolongés pour des systèmes 1ds désordonnés

S. Bentata [II.17] T.Hakobyan et al [II.32], A.Parisini [II.33], I.Gomez et al [II.34] ont étudiés numériquement l'influence du désordre corrélé à courte portée sur les propriétés de transport dans des superréseaux GaAs /Al_xGa_{1-x}As. Ils ont considérés des couches ayant l'épaisseur identique où la concentration x en Al prend au hasard deux valeurs différentes avec la condition que l'une d'entre elles apparaisse seulement en doublet (dimer aléatoire), ainsi un travail similaire réalisé par R.Djelti [II.35] utilisant cette fois ci un trimer désordonné. Ils ont observé que le processus de la délocalisation existe quand le désordre est corrélé et Les énergies des états délocalisés peuvent être changées en prenant des paramètres appropriés pour les puits et barrières.

Diverses grandeurs physiques telles que la conductance, la fluctuation universelle de la conductance, la longueur de localisation, la résistance et sa probabilité de distribution ont été calculées [II.28-29] au moyen du formalisme de la matrice de transfert [II.36-38] et du modèle de Kronig-Penny [II.39], afin de distinguer la nature des états électroniques. Ces calculs numériques montrent qu'avec la présence du désordre, le système présente des états fortement localisés (aux bords de bande) et des états étendus (proche de la résonance), ainsi qu'une région intermédiaire séparant les deux.

II.3.2.4.2. Constats de l'étude expérimentale

Des résultats expérimentaux [II.40] indiquent qu'une corrélation dans le désordre conduit à l'existence d'états délocalisés par simple distribution des éléments constituant le superréseau.

Bellani et al [II.41] ont étudiés expérimentalement les superréseaux GaAs/Al_{0,3}Ga_{0,7}As à base de semi-conducteur désordonnés intentionnellement avec ou sans corrélation du désordre. Ils ont caractérisé par diffraction aux rayons X et par spectroscopie photovoltaïque les états électroniques des systèmes étudiés. Les résultats obtenus sont comparés par la suite au calcul théorique du coefficients de transmission et du structure de minibande. Ils ont observé que les processus de délocalisation ont lieu quand le désordre est introduit, est à dire la probabilité de la délocalisation au niveau du désordre n'est pas nulle, ce qui est en accord avec les travaux théoriques publiés par Dominguez et al [II.42-45].

II.4. CONCLUSION

Nous avons présenté dans ce chapitre une synthèse bibliographique concernant les états électroniques dans les systèmes ordonnés et désordonnés.

Les états électroniques dans les systèmes ordonnés sont des états étendus régissant du théorème de Bloch.

Dans les systèmes désordonnés, en se basant sur la théorème d'Anderson de la localisation il a été postulé que dans la limite thermodynamique, tous les modes de transmission à une dimension (1d) sont localisés.

Or avec l'apparition de mini-bandes d'états délocalisés dans le modèle du dimer et trimer aléatoire, des états étendus sont restaurés autour de résonances dont les énergies sont caractéristiques au motif défaut considéré. A la résonance dimer et trimer, des états semblables aux ondes de Bloch sont ainsi obtenus.

Pour mieux comprendre les phénomènes physiques intervenant dans le transport de ces systèmes, on va présenter différents modèles et formalismes utilisant plusieurs approche et hypothèses dans l'étude de ces systèmes.

II.5. REFERENCES

- [1]. F. Bloch, Z. phys. 52, 555 (1928)
- [2]. M.P. Marder, Condensed Matter physics, Wiley Interscience publication, New York (1999)
- [3]. M. Di Vantra , Electrical transport in Nanoscale systems, Cambridge university press, New York (2008)
- [4]. P.W. Anderson, Phys. Rev. 109, 1492 (1958)
- [5]. I. M. Lifchitz, S.A. Gradeskul, L.A. Pastur , Introduction to the theory of disordered systems, Wiley interscience publication, New York (1988)
- [6]. P. Sheng, Scattering and localization of classical waves in random media, World Scientific, Singapore, (1990).
- [7]. R.Elliot, J.A. Krumhansl and P.L.Leath, Rev. Mod. Phys. 46, 465 (1974)
- [8]. P.A. Lee, and T.V. Ramakrishnan , Rev. Mod. Phys. 57, 287 (1985); B. Kramer and A. MacKinnon, Rep. Prog. Phys. 56, 1469 (1993)
- [9]. N. F .Mott, J. Non-Crys. Solids 1, 1(1968); in Electronics and Structural Properties of Amorphous Semi Conductors, p1, Academic Press, London (1973). N.F. Mott and E.A.Davids, Electrical Process in Non-Crystalline Materials , 2nd Ed., Calrendon, Oxford (1979)
- [10]. R. Landauer, Philo. Mag. 21, 863 (1970); A. Douglas Stone and A. Szafer, IBM J. Res. Develop.33, 384 (1988); Y. Imry and R. Landauer, Rev. Mod. Phys. 71, 306 (1999).
- [11]. S.Datta, Cambridge University Press,(1997).
- [12]. D.J.Thouless. Physics Reports, 13 P 93,(1974).
- [13]. E. Abrahams, P.W. Anderson, D.C. Licciardello et T.V. Ramakrishnan, Phy. Rev. Lett. 42, 673 (1979)
- [14]. F. J. Wegner, Z. Phy. B 25, 327 (1976).
- [15]. J. S. Langer et T. Neal, Phy. Rev. Lett. 16, 984 (1966).
- [16]. P. W. Anderson, D.J. Thouless, E. Abrahams and D. S. Fisher, Phys. Rev. B 22, 351 (1980) , P. W. Anderson, Phys. Rev. B 23, 4828 (1981).
- [17]. S. Bentata, Superlattices and Microstructures, 37. 297-303 (2005), S. Bentata, B. Ait Saidi and H. Sediki, Superlattices and Microstructures, 30. 301-308 (2001), S. Bentata, thèse de doctorat d'état «Etudes des propriétés de transport dans les systèmes unidimensionnels ». USTO (2002).
- [18]. J. C. Flores, J.Phys., Condens. Matter 1 8479 (1989).
- [19]. D. H. Dunlap, H. L. Wu, P.Phillips, Phys.Rev.Lett, 65 88 (1990).
- [20]. P. Phillips, H. L. Wu, Science 252 1805 (1991).

- [21]. H. L. Wu, W. Go, P. Phillips, Phys. Rev.B 45 1623 (1992).
- [22]. P. K. Datta, D. Giri, K. Kundu, Phys.Rev.B 47 10 727 (1994).
- [23]. A. Sanchez, E. Macia, F. Dominguez-Adame, Phys.Rev.B 49 147 (1994).
- [24]. A. Chakrabarti, S.N.Kamakar, R.K.Moitra, Phys.Rev.Lett.74 1403 (1995).
- [25]. E. Diez, A. Sanchez, F. Dominguez-Adame, Phys.Rev.B 50 14 359 (1994).
- [26]. Yu. S. Kivshar, S. A. Gredeskul, A. Sanchez, and L. Vazquez, Phys. Rev.Lett. 64 1693 (1990).
- [27]. E. Diez, A. Sachez and F. Dominguez -Adame, IEEE J.Quantum Electron. 31 1919 (1995).
- [28]. F. A. B. de Mora and M. L. Lyra, Phys.Rev.Lett. 81 3735 (1998).
- [29]. F. M. Izrailev and A. A. Krokhin, Phys.Rev.Lett. 82 4062 (1999).
- [30]. A. Rodriguez, V. A. Malyshev, and F. Dominguez-Adame, J.Phys.A.Math.Gen. 33, L161 (2000).
- [31]. F. Dominguez-Adame, I. Gomez, A. Avakyan, D. Sedrakyan, A. Sedrakyan, Physica status solidi B. vol.221, no2, P 633-639 (2000).
- [32]. T. Hakobyan, D. Sedrakyan, A. Sedrakyan, I. Gómez And F. Domínguez-Adame, Phys.Rev B 61, 11432-11436 (2000).
- [33]. A. Parisini, L. Tarricone, V. Bellani, G. B. Parravicini, E. Diez, F. Domínguez-Adame, and R. Hey Phys.Rev B 63, 165321 (2001).
- [34]. I. Gomez, F. Dominguez-Adame, E. Diez Physica B 324 235–239 (2002).
- [35]. R. Djelti, S. Bentata et Z. Aziz Lebanese Science Journal, Vol.8, N°1 (2007).
- [36]. M. O. Vassel, J. Lee and H. F. Lockwood, J.Appl.Phy. 54, 5206 (1983).
- [37]. S. S. Allen and S. L. Richardson, J.Appl.Phy. 79, 886 (1996)
- [38]. Y. Guo, B. L. Gu, Z. Q. Li and Y. Kawazoe, Eur.Phy.J. B3,257 (1998).
- [39]. R. deKronig and W. G. Penney, Proc.R.Soc.A130,499 (1931)
- [40]. Xiaoshuang Chen Physics Letters A 257 317–324 (1999).
- [41]. V. Bellani, E. Diez, A. Parisini, L. Tarricone, R. Hey, G. B. P arravicini, F. Dominguez-Adame Physic E 7 823-826(2000).
- [42]. A. Sachez, E. Macia and F. Dominguez-Adame, Phys.Rev B 49, 147 (1994).
- [43]. F. Dominguez-Adame, A. Sachez and E. Diez, Phys.Rev B 50, 17736 (1994).
- [44]. E. Macia and F. Dominguez-Adame, Phys.Rev.Lett.76,2957 (1996).
- [45]. G. P. Berman, F. Dominguez-Adame and A. Sachez, Phys.D 107, 166 (1997).



CHAPITRE III



FORMALISME DE
MODELISATION DE CALCULS
ET SIMULATION

CHAPITRE III

FORMALISME DE MODELISATION DE CALCULS ET SIMULATION

III.1. INTRODUCTION

La modélisation est fondée sur la résolution des formalismes et des équations mathématiques établis par une description des phénomènes physiques complexes. Ces formalismes permettent de décrire, dans notre cas l'évolution de grandeurs caractéristiques telles que la structure de minibandes, le coefficient de transmission et le temps de l'effet tunnel résonnant. Les quantités citées nous aide à prédire la nature de transport électronique pour différents types de systèmes étudiés.

La modélisation fait également appel à des modèles et corrélations annexes qui permettent la description d'autres phénomènes physiques complémentaires tels que les énergies de résonances, le temps de transit, la densité de courant etc....

De même la simulation peut être définie comme l'utilisation d'un modèle mathématique pour générer une description du comportement d'un système physique. Son avantage majeur est la fourniture d'un bon aperçu du comportement du système réel.

Les progrès des méthodes numériques et l'augmentation des performances des ordinateurs permettent, grâce à des simulations de plus en plus détaillées, de prédire le comportement des systèmes complexes. L'industrie utilise de plus en plus la simulation numérique, validée par des expériences, pour raccourcir le cycle de développement de nouveaux composants qui se traduit par le gain des millions de dollars.

Pour cette grande importance de la simulation dans le domaine scientifique, on a voulu créer un modèle pour déterminer le facteur de transmission. Ce chapitre traite les différents formalismes utilisés pour la détermination de la structure de minibandes et le calcul du coefficient de transmission. A cet effet les approximations considérées et les modèles mis en jeu sont les suivants [III.1-3] :

III.2. APPROXIMATIONS DE BASE

Pour simplifier le formalisme permettant le calcul de la structure de minibande ainsi que le coefficient de transmission, deux approximations majeures ont été considérées [III.2-4]:

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

III.2.1. Approximation de la masse effective

L'approche quantique la plus fréquemment utilisée en microélectronique est l'approximation de la masse effective. La validité de cette méthode macroscopique repose sur la parabolicité des bas de bandes d'énergie. Considérant un système unidimensionnel, l'approximation de la masse effective représente la propagation d'électrons dans un matériau homogène via des ondes planes.

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

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

où $V(\vec{r})$ représente le potentiel cristallin, $W(\vec{r})$ la perturbation extérieure et \hbar la constante de Planck réduite.

Vu la complexité de la résolution de l'équation de Schrödinger, due au potentiel cristallin $V(\vec{r})$, l'approximation de la masse effective (AME) permet 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 au mouvement 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 m^* la masse effective est définie par:

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

Ainsi 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 iso-énergétique [III.5]. 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'explicitier les propriétés importantes des superréseaux, L'application de

l'approximation de la masse effective associée à quelques modèles théoriques [III.6] est utilisée pour déterminer la structure de minibandes, l'effet tunnel résonant (ETR), etc...

III.2.2. Fonction enveloppe et Conditions de continuité

Les conditions de continuité jouent un rôle fondamental, car elles sont nécessaires dans la détermination des solutions des équations différentielles.

Avec l'avènement des 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 [III.5, 7]:

Ben Daniel et al. [III.6] ont démontré l'invalidité des C.C. (conditions de continuité) conventionnelles, c.à.d. celle qui décrivent le superréseau comme un bloc de semiconducteurs et ne prenant pas compte la discontinuité de la masse effective aux interfaces.

Bastard [III.8] a proposé une forme intuitive plus simple de C.C. vérifiée par la fonction enveloppe $f(z)$ et sa première dérivée:

$$f(z^-) = f(z^+) \quad \text{(III.3.a)}$$

$$(1/m_a) \frac{\partial}{\partial z} f(z^-) = (1/m_b) \frac{\partial}{\partial z} f(z^+) \quad \text{(III.3.b)}$$

avec la relation (III.3.b) basée sur l'hypothèse physique de la continuité du flux du courant $j(z)$.

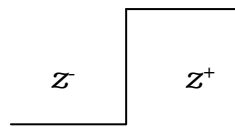


Fig. III.2. Interface abrupte

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 :

$$u_A(\vec{r}_0) \approx u_B(\vec{r}_0) \quad \text{(III.4)}$$

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. [III.9]. L'application de cette forme empirique de C.C. a apporté des corrections importantes dans l'étude de l'Effet tunnel résonnant [III.9-15].

III.3. MODELES ET METHODES THEORIQUES

L'expression de l'équation de Schrödinger suivant l'axe de croissance (oz) d'un électron ayant une énergie incidente E et une masse effective $m^*(z)$, traversant un profil de potentiel $V(z)$ dans un état stationnaire [III.2, 16-17] est donnée par:

$$\frac{1}{m^*(z)} \frac{\partial^2}{\partial z^2} \psi(z) + \frac{2}{\hbar^2} [E - V(z)]\psi(z) = 0 \quad (\text{III.5})$$

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 (voir Fig. III.2)

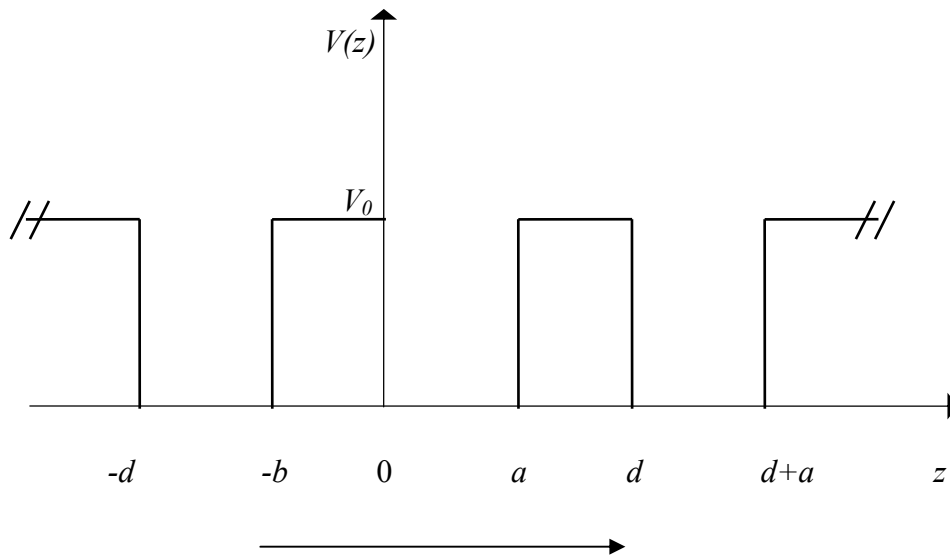


Fig. III. 2. Profil de potentiel d'un SR à puits et à barrières rectangulaires.

La résolution de l'équation (III.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 l'utilisation du modèle de Kronig-Penney [III.16] et le formalisme de la matrice de transfert [III.17-19],
- de déterminer le coefficient de transmission T en se basant sur les fonctions d'ondes [III.18,20-21]
- de déterminer le temps de l'ETR en utilisant le modèle de la Lorentzienne

Les énergies sont généralement considérées inférieures à la hauteur des barrières et l'étude se restreint au SR de type I selon l'axe de croissance [001] [III.22-23]. Ce choix justifie le fait de pouvoir uniquement considérer la bande de conduction dû aux larges gaps dans les deux matériaux.

III.3.1. Calcul de la structure de minibande

Il existe deux formalismes dans la littérature permettant l'obtention de la structure de minibande :

- ✓ Le formalisme de Kronig Penney [III.16]
- ✓ Le formalisme de la matrice de transfert [III.17-19].

III.3.1.1. Modèle de Kronig-Penney

Ce modèle simple permet de bien comprendre la notion de bandes d'énergie permises et de bandes interdites. Dans l'approximation de Born-Oppenheimer les électrons du réseau cristallin voient un arrangement périodique d'ions. Toutefois, il reste difficile, en dépit des différentes approximations, d'évaluer la forme du potentiel cristallin $V(\vec{r})$. Dans le modèle de Kronig-Penney, on simplifie largement le problème en prenant une succession périodique de puits de potentiel (figure III.2). Chacun de ces puits représente un arrangement d'ions du réseau.

La période du potentiel dans le SR décrit une répétition de la différence du gap des couches superposées. Par conséquent, les bandes d'énergie du SR sont composées d'une série discrète de minibandes, induite par le potentiel du SR, à l'intérieure des bandes principales.

Le profil de potentiel $V(z)$ est défini dans chaque région par l'expression :

$$V(z) = \begin{cases} 0 & 0 \leq z \leq a \\ V_0 & a \leq z \leq d \end{cases} \quad (\text{III.6})$$

ainsi que la masse effective

$$m^*(z) = \begin{cases} m_a & 0 \leq z \leq a \\ m_b & a \leq z \leq d \end{cases} \quad (\text{III.7})$$

Les fonctions d'onde dans les différentes régions du potentiel (figure III.2) obtenues à partir de la résolution de l'eq. (III.5), sont données par :

$$\psi(z) = \begin{cases} \psi_I(z) \equiv A e^{ik_1(z-a/2)} + B e^{-ik_1(z-a/2)} & 0 \leq z \leq a \\ \psi_{II}(z) \equiv C e^{ik_2(z+b/2)} + D e^{-ik_2(z-a/2)} & -b \leq z \leq 0 \\ \psi_{IV}(z) \equiv e^{i\phi} [C e^{ik_1(z-d-a/2)} + D e^{-ik_1(z-d-a/2)}] & a \leq z \leq l \\ \psi_{III}(z) \equiv e^{i\phi} [C e^{ik_2(z-d+b/2)} + D e^{-ik_2(z-d+b/2)}] & a \leq z \leq d \end{cases} \quad (III.8)$$

avec

$$k_1 = \sqrt{\frac{2m_a E}{\hbar^2}} \quad \text{et} \quad k_2 = \sqrt{\frac{2m_b(E - V_0)}{\hbar^2}} \quad (III.9)$$

tel que $d=a+b$ et $l=d+a$

où : d présente la période du SR,

E l'énergie de la particule,

A, B, C et D sont des nombres complexes,

$e^{i\phi}$ est un facteur de phase.

Les fonctions $\psi_I, \psi_{II}, \psi_{III}$ et ψ_{IV} sont définies à l'intérieur du puits et de la barrière et vérifient les relations suivantes:

$$|\psi_I(0)| = |\psi_I(a)| \quad \text{et} \quad |\psi_I(-b)| = |\psi_I(0)| \quad (III.10)$$

$$|\psi_I(z+d)| = |\psi_I(z)| \quad (III.11)$$

L'équation (III.10) est une conséquence de la symétrie du puits ou de la barrière et l'équation (III.11) de la périodicité du SR.

Les conditions de continuité de Bastard en $z = 0$ et $z = a$ s'écrivent :

$$\begin{cases} \psi_I(0) = \psi_{II}(0) \\ \psi_I(a) = \psi_{III}(a) \end{cases} \quad (III.12)$$

$$\begin{cases} \frac{1}{m_a} \psi'_I(z)|_{z=0} = \frac{1}{m_b} \psi'_{II}(z)|_{z=0} \\ \frac{1}{m_a} \psi'_I(z)|_{z=a} = \frac{1}{m_b} \psi'_{III}(z)|_{z=a} \end{cases} \quad (III.13)$$

Elles permettent d'obtenir des solutions pour les coefficients A, B, C et D si le déterminant est nul:

$$\begin{vmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ \frac{k_1}{m_a} & -\frac{k_1}{m_a} & \frac{k_2}{m_a} & -\frac{k_2}{m_a} \\ e^{iak_1} & e^{-iak_1} & e^{i(\phi-bk_2)} & e^{i(\phi-bk_2)} \\ \frac{k_1}{m_a} e^{iak_1} & -\frac{k_1}{m_a} e^{-iak_1} & \frac{k_2}{m_b} e^{i(\phi-bk_2)} & -\frac{k_2}{m_b} e^{i(\phi+bk_2)} \end{vmatrix} = 0 \quad (\text{III.14})$$

Le potentiel étant périodique, la fonction d'onde obéit au théorème de Bloch [III.15]:

$$\psi(z) = e^{iqz} u(z) \quad (\text{III.15})$$

où $u(z)$ décrit la périodicité du potentiel

$$u(z+d) = u(z) \quad (\text{III.16})$$

La périodicité se traduit également au niveau de la fonction d'onde

$$\psi(z+d) = e^{iqd} \psi(z) \quad (\text{III.17})$$

ainsi

$$e^{i\phi} \equiv e^{iqd} \quad (\text{III.18})$$

donc

$$\phi = qd \quad (\text{III.19})$$

où q s'interprète comme le vecteur d'onde du SR.

Des expressions (III.14) et (III.19) la relation de dispersion du SR, peut-être exprimée:

✓ Pour $E < V_0$:

$$\cos(qd) = \cos(k_1 a) \cosh(k_2 b) - \frac{1}{2} \left(\frac{k_1 m_b}{k_2 m_a} + \frac{k_2 m_a}{k_1 m_b} \right) \sin(k_1 a) \sinh(k_2 b) \quad (\text{III.20})$$

✓ Pour $E > V_0$:

$$\cos(qd) = \cos(k_1 a) \cos(k_2 b) - \frac{1}{2} \left(\frac{k_1 m_b}{k_2 m_a} - \frac{k_2 m_a}{k_1 m_b} \right) \sin(k_1 a) \sin(k_2 b) \quad (\text{III.21})$$

Dans la mesure où le cosinus est toujours compris entre -1 et +1, les expressions (III.20) et (III.21) déterminent les valeurs permises de l'énergie par la simple condition $|\cos(qd)| \leq 1$. Cette condition délimite les bandes permises dans lesquelles q est réel. Au contraire les bandes d'énergies correspondant à $|\cos(qd)| > 1$ sont des bandes interdites dans lesquelles q est imaginaire.

III.3.1.2. Méthode de la matrice de transfert

La méthode de matrice de transfert consiste à déterminer les fonctions enveloppes, donc leur amplitude dans le dernier matériau du multipuits quantique en fonction de ceux du premier.

Cette méthode permet d'avoir, dans le cas d'une bande pour un superréseau de N puits quantiques entre $(N+1)$ barrières de potentiel, à ne manipuler que des matrices carrées 2×2 . L'efficacité de cette méthode est plus ressentie lors de la réduction de la dimension des matrices.

L'interprétation physique de cette technique est également directe, elle introduit la réponse du système en terme de matrice obtenue à partir d'une relation linéaire liant les fonctions d'onde et leur première dérivée au niveau des interfaces [III.24-25] :

$$\begin{pmatrix} \psi(0) \\ \frac{1}{m_a} \nabla \psi_a(0) \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} \psi(0) \\ \frac{1}{m_b} \nabla \psi_b(0) \end{pmatrix} \quad (\text{III.22})$$

M est une matrice (2×2) appelée matrice de transfert. Les coefficients (M_{ij}) contiennent toutes les informations de la structure du SR au niveau des interfaces provenant des C.C. de Bastard.

La résolution de l'équation (III.5) donne les fonctions enveloppes dans chaque région de la figure (III.3).

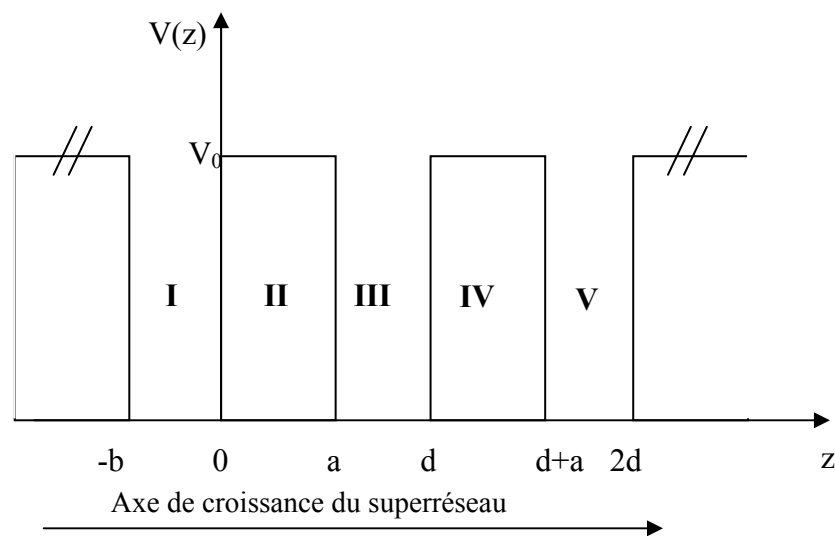


Fig.III.3. Profil de potentiel d'un SR à puits et à barrières rectangulaires

CHAPITRE III : FORMALISME DE MODELISATION DE CALCULS ET SIMULATION

Région (I) : $V(z) = 0 ; m^*(z) = m_a$ (III.23)

$$\psi_I(z) = A e^{ik_1z} + B e^{-ik_1z} \quad (III.24)$$

Région (II): $V(z) = V_0 ; m^*(z) = m_b$ (III.25)

$$\psi_{II}(z) = C e^{ik_2z} + D e^{-ik_2z} \quad (III.26)$$

Région (III) : $V(z) = 0 ; m^*(z) = m_a$ (III.27)

$$\psi_{III}(z) = E e^{ik_1z} + F e^{-ik_1z} \quad (III.28)$$

avec

$$k_1 = \sqrt{\frac{2m_a E}{\hbar^2}} \quad \text{et} \quad k_2 = \sqrt{\frac{2m_b(E - V_0)}{\hbar^2}} \quad (III.29)$$

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 $z=0$

$$\psi_I(0) = \psi_{II}(0) \quad (III.30)$$

$$\frac{1}{m_a} \psi_I'(z)|_{z=0} = \frac{1}{m_b} \psi_{II}'(z)|_{z=0} \quad (III.31)$$

Impliquent:

$$S_I(0) \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = S_{II}(0) \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} \quad (III.32)$$

avec

$$S_I(z) = \begin{pmatrix} e^{ik_1z} & e^{-ik_1z} \\ \frac{ik_1}{m_a} e^{ik_1z} & \frac{-ik_1}{m_a} e^{-ik_1z} \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad S_{II}(z) = \begin{pmatrix} e^{ik_2z} & e^{-ik_2z} \\ \frac{ik_2}{m_b} e^{ik_2z} & \frac{-ik_2}{m_b} e^{-ik_2z} \end{pmatrix} \quad (III.33)$$

d'où:

$$\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = S_I^{-1}(0) S_{II}(0) \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} \quad (III.34)$$

en $z=b$ le résultat obtenu est similaire

$$\begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} = S_{II}^{-1}(b) S_{II}(b) \begin{pmatrix} E \\ F \end{pmatrix} \quad (\text{III.35})$$

en remplaçant (III.35) dans (III.34), l'expression devient

$$\begin{pmatrix} E \\ F \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} \quad (\text{III.36})$$

avec

$$M = S_{II}^{-1}(b) S_{II}(b) S_I^{-1}(0) S_I(0) \quad (\text{III.37})$$

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

A partir de l'équation :

$$\text{Tr}(M) = 2 \cos(qd) \quad (\text{III.38})$$

décrivant la conservation de l'énergie dans le système à travers la conservation de la trace (Tr), la relation de dispersion est directement obtenue (voir eq.III.20 et eq.III.21).

Sachant que le $\cos(qd)$ est compris entre -1 et +1, les courbes des équations (III.20) et (III.21), exprimées en fonction de l'énergie de la particule explicitent la structure de minibandes caractérisant le SR.

III.3.2. Calcul du coefficient de transmission

Le coefficient de transmission est le facteur le plus déterminant dans l'effet tunnel résonnant, car il le mesure quantitativement. En traçant la courbe du coefficient de transmission en fonction de l'énergie de la particule, plusieurs grandeurs physiques peuvent être déterminées, 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 ($\rho = \frac{1}{\sigma}$).

La forme des pics du coefficient de transmission T révèle la nature des états responsables de ceux là, car plus le pic est étroit, l'énergie lui correspondant est celle d'un état lié. Donc le calcul du coefficient T pour les structures à ETR présente un intérêt physique considérable. C'est pourquoi deux méthodes sont présentées dans ce paragraphe pour déterminer T pour une structure soumise à un champ électrique. Ces méthodes procure des solutions exactes et approchées de l'équation de Schrödinger, la première est basée sur les fonctions d'Airy et la deuxième sur la méthode des ondes planes [III.26-34].

III.3.2.1. Méthode exacte « fonction d'Airy »

Soit une structure double barrière et un puits rectangulaire à interface abrupte, soumise à une tension extérieure V_a . Pour calculer le coefficient de transmission T , l'équation de Schrödinger est résolue d'une façon exacte en utilisant les 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:

$$\frac{1}{m^*(z)} \frac{\partial^2}{\partial z^2} \psi(z) + \frac{2}{\hbar^2} [E - V(z)] \psi(z) = 0 \quad \text{(III.39)}$$

Les solutions de l'équation (III.39) dans chaque région du potentiel sont données par les relations suivantes:

Région (I) : $V(z) = 0$ et $m^*(z) = m_a$
(III.40)

$$\psi_I(z) = 1 e^{ikz} + R e^{-ikz} \quad \text{(III.41)}$$

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

Région (II) : $V(z) = V_0 - \frac{eV_a}{L} z$ et $m^*(z) = m_b$ (III.42)

Soit le changement de variable,

$$\rho(z) = \left(\frac{2em_b V_a}{L\hbar^2} \right)^{1/3} \left(\frac{V_0 - E}{eV_a/L} - z \right) = Z(\eta - z) \quad \text{(III.43)}$$

l'équation (III.39) devient,

$$\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} \psi_2(\rho) - \rho \psi_2(\rho) = 0 \quad (\text{III.44})$$

la solution de l'équation (III.39) en utilisant les fonctions d'Airy est donnée par:

$$\psi_2(\rho) = C_2^+ A_i(\rho) + C_2^- B_i(\rho) \quad (\text{III.45})$$

où A_i et B_i représentent les fonctions d'Airy.

Région (III) :

$$V(z) = -\frac{eV_a}{L} (z+b) \quad \text{et} \quad m^*(z) = m_a \quad (\text{III.46})$$

En effectuant ce changement de variable

$$\rho'(z) = \left(\frac{2em_a V_a}{L \hbar^2} \right)^{1/3} \left(-\frac{beV_a - E}{eV_a/L} - z \right) = Z'(\eta' - z) \quad (\text{III.47})$$

la résolution de l'équation (III.39) dans cette région est formulée par

$$\psi_2(\rho) = C_3^+ A_i(\rho') + C_3^- B_i(\rho') \quad (\text{III.48})$$

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 (VI)

$$V(z) = 0 \quad \text{et} \quad m^*(z) = m_a \quad (\text{III.49})$$

$$\psi_5(z) = 0 \quad e^{-ik'z + \tau} \quad e^{ik'z} \quad (\text{III.50})$$

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

La première amplitude dans la relation (III.50) est nulle, car la particule est supposée venir de z coté gauche.

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 :

$$\begin{pmatrix} 1 \\ R \end{pmatrix} = -\frac{m_a}{2ik} \begin{pmatrix} -\frac{ik}{m_a} & -1 \\ \frac{ik}{m_a} & 1 \end{pmatrix} S(0, l) \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ \frac{ik'}{m_a} & -\frac{ik'}{m_a} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tau \\ 0 \end{pmatrix} \quad (\text{III.51})$$

avec $S(\theta, l) = S_p(0) S_p^{-1}(b) \cdot S_b(0) S_b^{-1}(a) \cdot S_p(0) S_p^{-1}(b)$ (III.52)

où $S_p(\rho) = \begin{pmatrix} A_i(\rho) & B_i(\rho) \\ \frac{A'_i(\rho)}{m_b} & \frac{B'_i(\rho)}{m_b} \end{pmatrix}$ et $S_b(\rho') = \begin{pmatrix} A_i(\rho') & B_i(\rho') \\ \frac{A'_i(\rho')}{m_a} & \frac{B'_i(\rho')}{m_a} \end{pmatrix}$ (III.53)

représentent respectivement les matrices de diffusion au niveau du puits et de la barrière.

La relation finale est donc donnée par :

$$\begin{pmatrix} 1 \\ R \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} \tau \\ 0 \end{pmatrix} \quad (\text{III.54})$$

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 :

$$T = \frac{k'}{k} \tau^* \tau \quad \text{avec} \quad \tau = \frac{1}{M_{11}} \quad (\text{III.55})$$

Soient A, B, C et D les éléments de la matrice $S(0, l)$, des relations (III.51) et (III.54),

$$M_{11} = \frac{1}{2} \left[\left(A + \frac{k'}{k} D \right) + i \left(\frac{k' B}{m_a} - \frac{C m_a}{k} \right) \right] \quad (\text{III.56})$$

avec
$$T = \frac{\left(4 \frac{k'}{k} \right)}{\left(A + \frac{k'}{k} D \right)^2 + \left(\frac{k' B}{m_a} - \frac{C m_a}{k} \right)^2} \quad (\text{III.57})$$

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' .

III.3.2.2. Méthode approchée « des ondes planes »

La méthode des ondes planes est présentée calculant le coefficient de transmission T à travers un profil de potentiel arbitraire. Celle ci procède par un calcul approché des solutions de l'équation de Schrödinger par le biais des ondes planes. 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 (**voir figure III.5**). 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 :

$$V(z) \equiv V_j = V\left(\frac{z_{j-1} + z_j}{2}\right); \quad m(z) \equiv m_j = m\left(\frac{z_{j-1} + z_j}{2}\right) \quad (\text{III.58})$$

et

$$\psi_j(z) = A_j \exp(ik_j z) + B_j \exp(-ik_j z) \quad (\text{III.59})$$

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 .

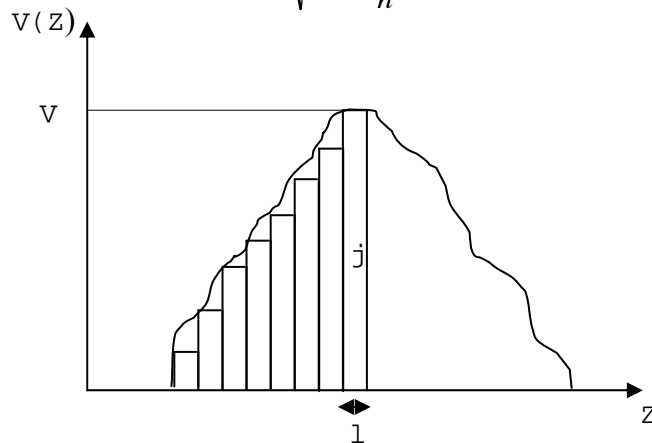


Fig.III.5. Profil arbitraire

Utilisant le modèle de matrice de transfert et les conditions de continuité de Bastard au niveau de chaque palier, on obtient une relation reliant le coefficient de réflexion avec celui de transmission :

$$\begin{pmatrix} 1 \\ R \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} \tau \\ 0 \end{pmatrix} \quad (\text{III.60})$$

Une algèbre simple conduit à la matrice de transfert

$$M = \frac{m_a}{2ik} \begin{bmatrix} \frac{ik}{m_a} & 1 \\ \frac{ik}{m_a} & 1 \end{bmatrix} S(0, L) \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ \frac{ik'}{m_a} & \frac{ik'}{m_a} \end{bmatrix} \quad (\text{III.61})$$

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

$$S(0, L) = \prod_{j=0}^n D_j(l) = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{pmatrix} \quad (\text{III.62})$$

avec

$$D_j(l) = \begin{pmatrix} \cos[k_j l] & -\frac{m_j}{k_j} \sin[k_j l] \\ \frac{k_j}{m_j} \sin[k_j l] & \cos[k_j l] \end{pmatrix} \quad \text{pour } E - V_j \geq 0 \quad (\text{III.63})$$

et

$$D_j(l) = \begin{pmatrix} \text{ch}[\rho_j l] & -\frac{m_j}{\rho_j} \text{sh}[\rho_j l] \\ \frac{\rho_j}{m_j} \text{sh}[\rho_j l] & \text{ch}[\rho_j l] \end{pmatrix} \quad \text{pour } E - V_j < 0 \quad (\text{III.64})$$

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 :

$$T = \frac{\left(4 \frac{k'}{k}\right)}{\left(S_{11} + \frac{k'}{k} S_{22}\right)^2 + \left(\frac{k'}{m_a} S_{12} - \frac{m_a}{k} S_{21}\right)^2} \quad (\text{III.65})$$

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

III.4. CONCLUSION

Dans ce chapitre, différents formalismes ont été présentés traitant les caractéristiques des SR utilisant l'approximation de la masse effective et de la fonction enveloppe.

La résolution de l'équation de Schrödinger a permis le calcul de la relation de dispersion des énergies en fonctions des vecteurs d'onde du SR procédant par deux méthodes : le modèle de Kronig-Penny et la matrice de transfert ainsi que la détermination du coefficient de transmission à partir d'une résolution basée sur les fonctions d'Airy et les ondes plane a été présenté.

Le coefficient de transmission T décrivant l'interaction de la particule avec le système à travers les éléments de la matrice du transfert et les masses effectives. Elle comporte aussi la manifestation de la nature ondulatoire de la particule représentée dans les vecteurs d'onde.

Chaque modèle présenté dans ce chapitre expose au moins une propriété importante du SR. Ces formalismes sont appliqués dans le chapitre suivant pour discuter et interpréter les phénomènes physiques observés.

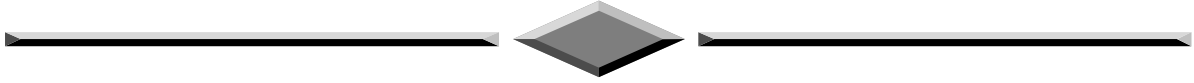
III.5. REFERENCES

- [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]. G. Bastard. "*Wave Mechanics Applied to Semiconductors Heterostructures*" Edition de Physique (1989).
- [5]. T. Ando and S. Moris, *Phys. Rev. B* **40**, 11609 (1989).
- [6]. Q. G. Zhu and H. Kroemer, *Phys. Rev. B* **27**, 3519 (1989).
- [7]. R. D. Kronig and W. J. Penney, *Proc. R.Soc. London Ser. A.* 130 499, (1931). H. Pruszkarski, *Physica B.* **125**, 179 (1984).
- [8]. G. Bastard, *Phys. Rev. B* **24**, 5693 (1981).
- [9]. Galbraith and G. Duggan, *Phys. Rev. B* **38**, 10057 (1988).
- [10]. K. F. Brennan and C. J. Summers, *J. App. Phys.* **61**, 614 (1987).
- [11]. J. P. Peng, H. Chen, and S. X. Zhou, *J. Phys. Cond. Matter I* 5451 (1989).
- [12]. S. S. Allen and S. L. Richardson, *Phys. Rev. B* **50**, 11 693 (1994).
- [13]. S. S. Allen and S. L. Richardson, *J. App. Phys.* **79**, 886 (1996).
- [14]. A. N. Khonder, M. R. Khan, and A. F. N. Anwar, *J. App. Phys.* **63**, 5192 (1988).
- [15]. Y. Zebda and A. M. Kan'an, *J. App. Phys.* **72**, 559 (1992).
- [16]. A. M. Tan, J. M. Xu, and S. Zukotynski, *J. App. Phys.* **67**, 3011 (1990).
- [17]. A. Nogaret, L. A. Cury, D. K. Maude, J. C. Portal, and D. L. Sivco, *Semi. Sci. Tech.* **8**, 1819 (1993).
- [18]. T. Ando, S. Wakara, and H. Akera, *Phys. Rev. B* **40**, 11 610 (1989).
- [19]. N. Sekkal, H. Aourag, N. Amrane, and B. Soudini, *Phys. Rev. B* **215**, 171 (1995).
- [20]. D. L. Smith and C. Mailhiot, *Rev. Mod. Phys.* **62**, 173 (1990).
- [21]. F. Bechstedt, H. Geecke, and H. Grille, *Phys. Rev. B* **47**, 13 540 (1993).
- [22]. Tsung L. Li and Keln J. Kuhn, *Phys. Rev. B* **49**, 2608 (1994).
- [23]. A. C. Gossard, W. Brown, C. L. Allyn, and W. Wiegmann, *J. Vac. Sci. Tech.* **20**, 694 (1982).
- [24]. F. Capasso, S. Luryi, W. T. Tsang, C. G. Bethea, and B. F. Levine, *Phys. Rev. Lett.* **51**, 2318 (1983).
- [25]. R. C. Miller, A. C. Grossard, D. A. Kleinman, and O. Munteanu, *Phys. Rev. B* **29**, 3740 (1984).
- [26]. J. Leo and J. A. Toombs, *Phys. Rev. B* **43**, 1944 (1994).

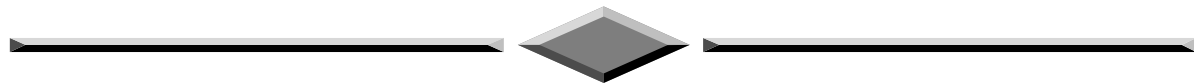
CHAPITRE III : FORMALISME DE MODELISATION DE CALCULS ET SIMULATION

- [27]. H. A. Antosiewicz, *Handbook of Mathematical Functions* “Eds M. Abramowitz and I. A. Stegun (Dover, New York)” ,446 (1972).
- [28]. F. Berz, *Semi. Sci. Tech.* **8**, (1993).
- [29]. M. O. Vassell, J. Lee, and H. F. Lokwood, *J. App. Phys.* **54**, 5206 (1983).
- [30]. K. F. Brennan and C. J. Summers, *J. App. Phys.* **61**, 614 (1987).
- [31]. J. P. Peng, H. Chen, and S. X. Zhou, *J. Phys. Cond. Matter* **I** 5451 (1989).
- [32]. S. S. Allen and S. L. Richardson, *Phys. Rev. B* **50**, 11 693 (1994).
- [33]. S. S. Allen and S. L. Richardson, *J. App. Phys.* **79**, 886 (1996).
- [34]. D. J. Fisher and C. Zhang, *J. App. Phys.* **76**, 606 (1994)

:



CHAPITRE IV



RESULTATS ET DICUSSIONS

CHAPITRE IV

RESULTATS ET DISCUSSIONS

IV.1. INTRODUCTION

L'objet de ce chapitre est d'aborder l'aspect numérique des différentes méthodes et approximations présentées dans le chapitre précédent. L'équation de Schrödinger, associée au potentiel des systèmes étudiés a été résolue pour l'étude des différentes hétérostructures à profil de potentiel rectangulaire, ce qui nous permet d'avoir un aperçu général sur la nature des différents états électroniques dans ces systèmes.

Ce chapitre est divisé en deux parties. La première concerne l'étude des superréseaux $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ ordonnés et désordonnés avec un désordre spécifique. La deuxième partie traite les superréseaux $InAs/GaInAs$ à potentiel désordonnés avec un désordre corrélé en dimer et trimer en hauteur de barrières.

IV.2. SUPERRESEAUX $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$

L'expression du potentiel de ce superréseau en fonction de la concentration x de l'Aluminium, utilisant la règle des 60% des queues de bande de conduction, est donnée par la relation :

$$V_{SR}(x) = 0.6(1.247x) \quad \text{Pour } 0 < x < 0.45 \quad (\text{IV.1})$$

L'intervalle de x dans (IV.1) délimite la région du gap direct du $Al_xGa_{1-x}As$. De même la masse effective dans cette région est donnée par :

$$m(x) = (0.067 + 0.083x) m_0 \quad \text{Pour } 0 < x < 0.45 \quad (\text{IV.2})$$

m_0 étant la masse de l'électron libre.

IV.2.1. Structures ordonnées

Avant d'aborder les propriétés de transport des superréseaux générés par des séquences spécifiques en monomer, dimer et trimer, il est indispensable de bien comprendre le comportement des structures ordonnées. Le profil du superréseau ordonné

avec une hauteur de potentiel constante, tout en conservant la période spatial suivant la direction de croissance, contenant N barrières rectangulaires est représenté dans la figure (IV.1).

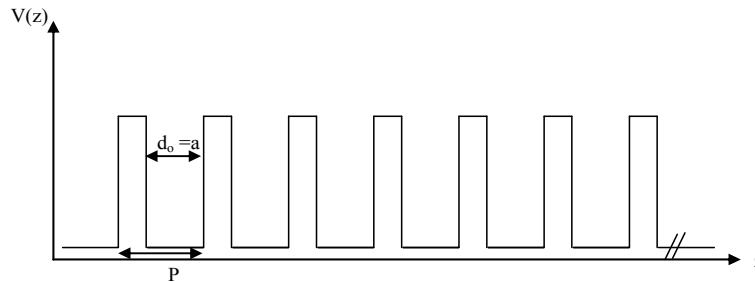


Fig. IV.1. Structure à N barrières rectangulaires.

Les paramètres physiques utilisés pour calculer le coefficient de transmission de cette structure sont : $N=300$ barrières rectangulaires périodiques de période $P = a + b$ constante le long de la structure, $a=20 \text{ \AA}$, $b=10 \text{ \AA}$, $V_1=329,29\text{meV}$ et $V_2=112,23\text{meV}$; où a et b représentent respectivement la largeur du puits et l'épaisseur de barrière.

Les masses effectives correspondantes à chaque région du potentiel sont : $m_p=0,067m_0$, $m_1=0,10352m_0$ et $m_2=0,07945m_0$ respectivement du puits, de barrière de hauteur V_1 et de barrière de hauteur V_2 .

Ces paramètres sont choisis de telle sorte que la minibande obtenue sera inférieure aux hauteurs des barrières.

La figure (IV.2) montre la variation du coefficient de transmission en fonction de l'énergie d'électron pour deux structures ordonnées.

L'électron dans ces structures de potentiel possède $N-1$ états permis confinés à l'intérieur du puits lui permettant de transpercer les N barrières, c'est le phénomène d'effet tunnel résonnant (ETR). En effet chaque puits de potentiel procure un état permis de transmission exploité par l'électron pour passer par ETR. Donc pour une structure à N barrières de potentiel on a $N-1$ pics de transmission très proches les uns des autres, ce qui donne naissance à une structure de minibande permise.

Les positions des bords inférieurs et supérieurs de la minibande des deux hauteurs de barrières V_1 et V_2 sont aussi observées dans la figure (IV.2).

Pour $V_1=329,29\text{meV}$ la minibande s'étend de 101.41meV jusqu'à 492.28meV et de $36,31\text{meV}$ jusqu'à $567,29\text{meV}$ pour $V_2=112,23\text{meV}$. Nous constatons ainsi que pour la faible hauteur de barrière ($112,23\text{meV}$) l'épaisseur de la minibande est plus significative ($\Delta E=455\text{meV}$), le temps de réponse du système dans ce cas est très rapide.

Ces résultats sont en bon accord avec celles trouvées par Bentata et al. [IV.1], Gomez et al. [IV.2], Aziz et al. [IV.3] et Djelti [IV.4] pour des conditions comparables.

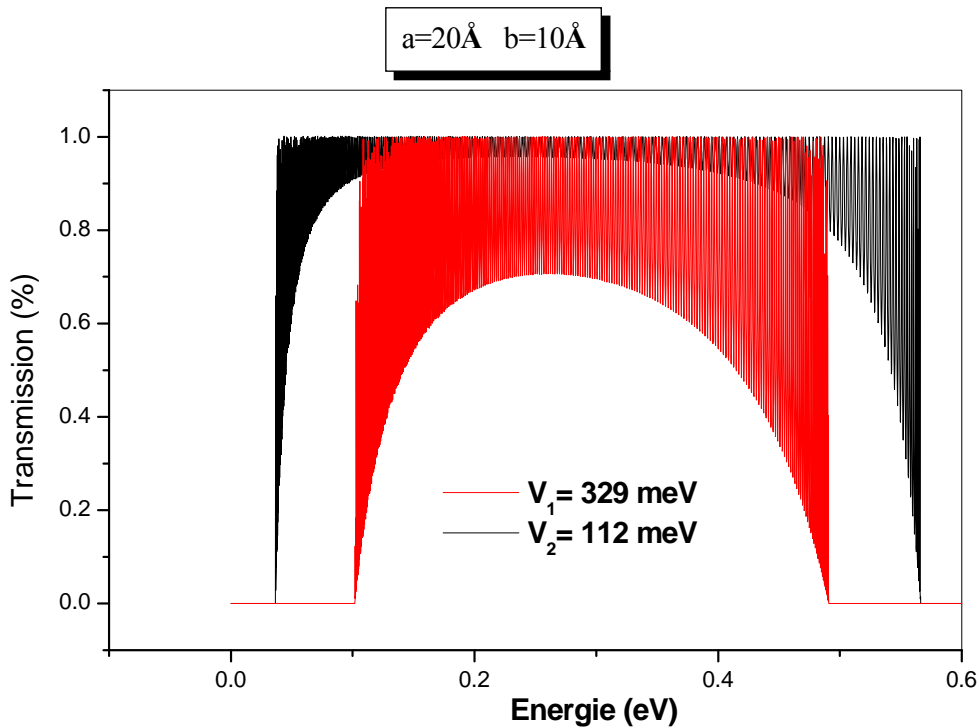


Fig.IV.2. Coefficient de transmission en fonction de l'énergie d'électron pour deux structures ordonnées.

IV.2.2. Structure de séquences Monomer, dimer et trimer

Après avoir décrit le formalisme de calcul des structures de minibandes dans le chapitre III suivi par l'analyse de la transmission électronique pour les structures ordonnées dans le point précédent, on va maintenant aborder le problème de la transmission dans des systèmes aperiodique avec une séquence spécifique.

Depuis le travail original d'Anderson [IV.5], Il a été montré que la présence du désordre peut localiser les fonctions d'onde d'un système sans interaction grâce aux interférences quantiques, les électrons ne peuvent plus être décrits par les fonctions de Bloch mais par des fonction d'onde localisée.

Des recherches effectuées ont précisé la suppression possible de la localisation pour les systèmes désordonnés unidimensionnels induits par la non linéarité [IV.6], la corrélation dans le désordre [IV.7] ou les interactions à longue portée [IV.8].

IV.2.2.1. Structures de séquence Monomère

Ce modèle consiste à introduire un défaut de potentiel V_2 dans la structure ordonné de hauteur de barrière V_1 selon la séquence suivante : $S_i=S_{i-1}+2$ avec $S_1=2$, i varie de 1 à N avec N le nombre de barrières. Le superréseau étudié est montré dans la figure (IV.3).

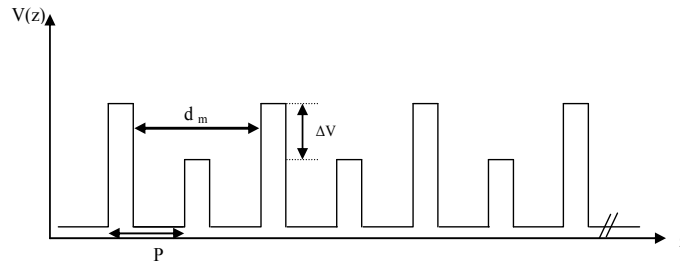


Fig. IV.3. Structure de superréseau aperiodique de séquence monomère.

La variation du coefficient de transmission en fonction de l'énergie d'électron pour le superréseau de séquence monomère à différentes valeurs de fractions molaires x est montrée dans la figure (IV.4). On observe l'existence de deux minibandes séparées par un minigap. L'apparition du minigap est due à la subdivision de la minibande citée précédemment dans le cas de superréseau ordonné (Voir Fig. IV.2). Ceci est provoqué par la substitution de barrière de hauteur V_1 de la structure ordonné par un défaut de potentiel en hauteur V_2 selon la séquence monomère. On constate aussi que la largeur de minigap est fonction de la fraction molaire d'aluminium (x_2) qui détermine le défaut en hauteur de barrière V_2 dans la structure étudiée. On remarque que la largeur de minigap augmente avec le décroissement de x_2 .

Pour bien illustrer cette variation on a tracé $\Delta x = x_1 - x_2$ en fonction de la largeur de minigap (voir Fig. IV.5).

On remarque dans la figure (IV.5) un accroissement linéaire de minigap de 0 à 72 meV lors de l'augmentation de Δx de 0 à 0,3.

La relation reliant la largeur de minigap à la différence de fraction molaire Δx est obtenue par un simple fit linéaire de courbe de la figure (IV.5). En effet, $\Delta E = 253,86 \Delta x - 2,95$.

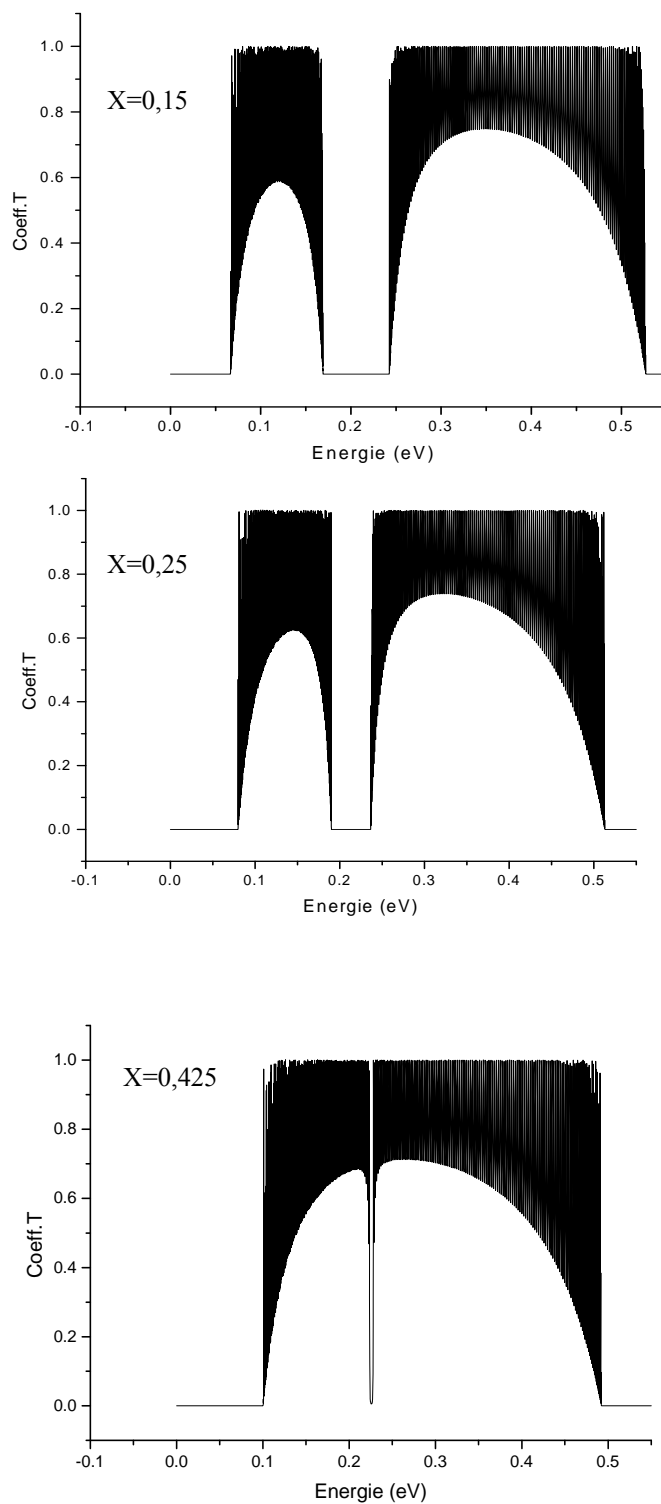


Fig.IV.4. Coefficient de transmission en fonction de l'énergie d'électron pour les structures de monomer à différentes valeurs de x .

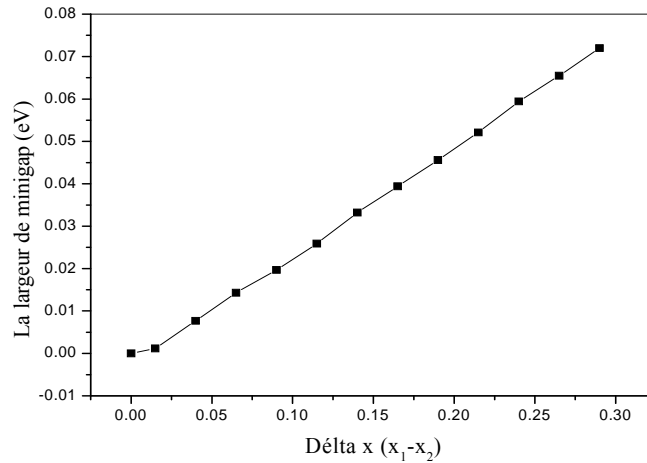


Fig. IV.5. La largeur de minigap en fonction de la différence de fraction molaire d'aluminium Δx

IV.2.2.2. Structures de séquence dimer

Dans ce modèle on introduit un défaut de potentiel V_2 en dimer dans la structure ordonné de hauteur de barrière V_1 selon la séquence suivante : $S_i=S_{i-1}+3$ avec $S_1=2$, i varie de 1 à N avec N le nombre de barrières. Comme est montré dans la figure (IV.6).

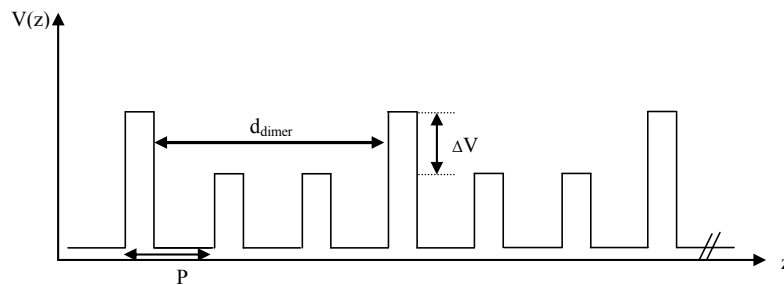


Fig. IV.6. Structure de superréseau apériodique de séquence dimer

Sur la figure (IV.7) une représentation de la variation du coefficient de transmission en fonction de l'énergie d'électron pour la structure de séquence dimer à différentes valeurs de fractions molaires x est donnée.

D'après la figure (IV.7), on remarque l'apparition de trois minibandes séparées par deux minigaps. La création de ces deux minigaps est due à l'introduction de défaut en hauteur de barrière V_2 en dimer dans la structure ordonnée. On note aussi que les largeurs de trois minibandes ainsi que de deux minigaps varie avec la variation de x . Cette variation est illustrée dans la figure (IV.8).

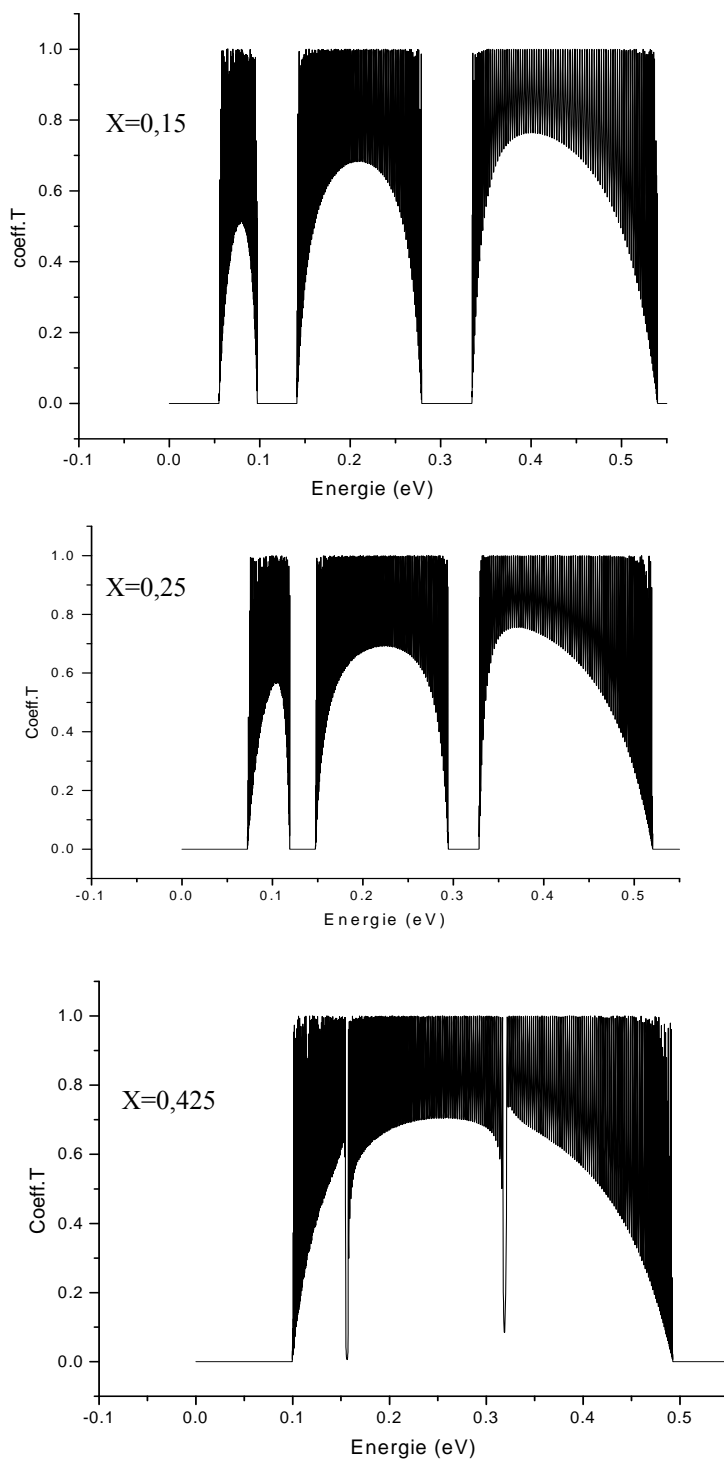


Fig.IV.7. Coefficient de transmission en fonction de l'énergie d'électron pour les structures de dimer à différentes valeurs de x .

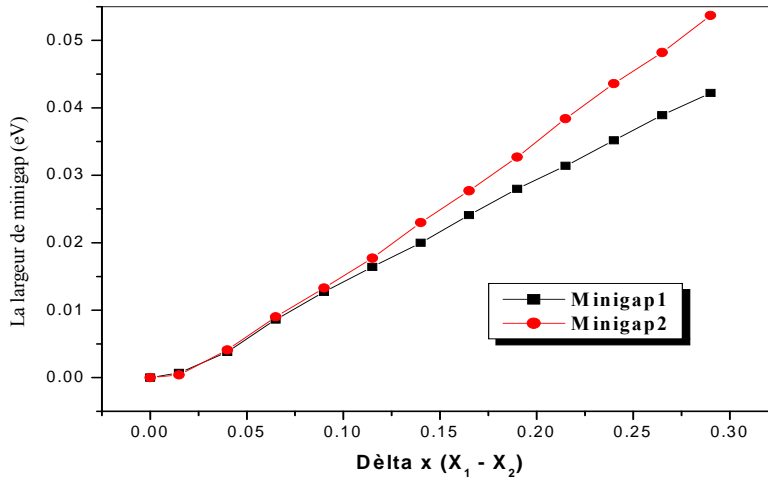


Fig. IV.8. La largeur de minigap en fonction de la différence de fraction molaire d'aluminium Δx .

La variation de la largeur de minigaps en fonction de Δx présenté dans la figure (IV.8) montre une allure linéaire de ΔE pour les deux largeurs de minigaps. Le fit simple linéaire de deux droites est le suivant :

Pour le 1^{ier} Minigap : $\text{Minigap}_1 = 152,58 \Delta x - 1,44$

Pour le 2^{ième} Minigap : $\text{Minigap}_2 = 195,88 \Delta x - 3,89$

IV.2.2.3. Structures de séquence trimer

Le défaut de potentiel V_2 dans la structure de trimer est introduit, selon la séquence suivante $S_i = S_{i-1} + 4$ avec $S_1 = 2$, i varie de 1 à N avec N le nombre de barrières, dans la structure ordonné de hauteur de barrière V_1 . Cette structure est montrée dans la figure (IV.9).

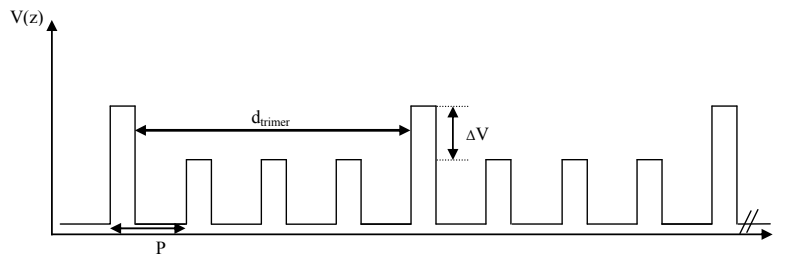


Fig. IV.9. Structure de superréseau aperiodique de séquence trimer

La figure (IV.10) reporte les résultats du coefficient de transmission en fonction de l'énergie de l'électron pour différentes fractions x .

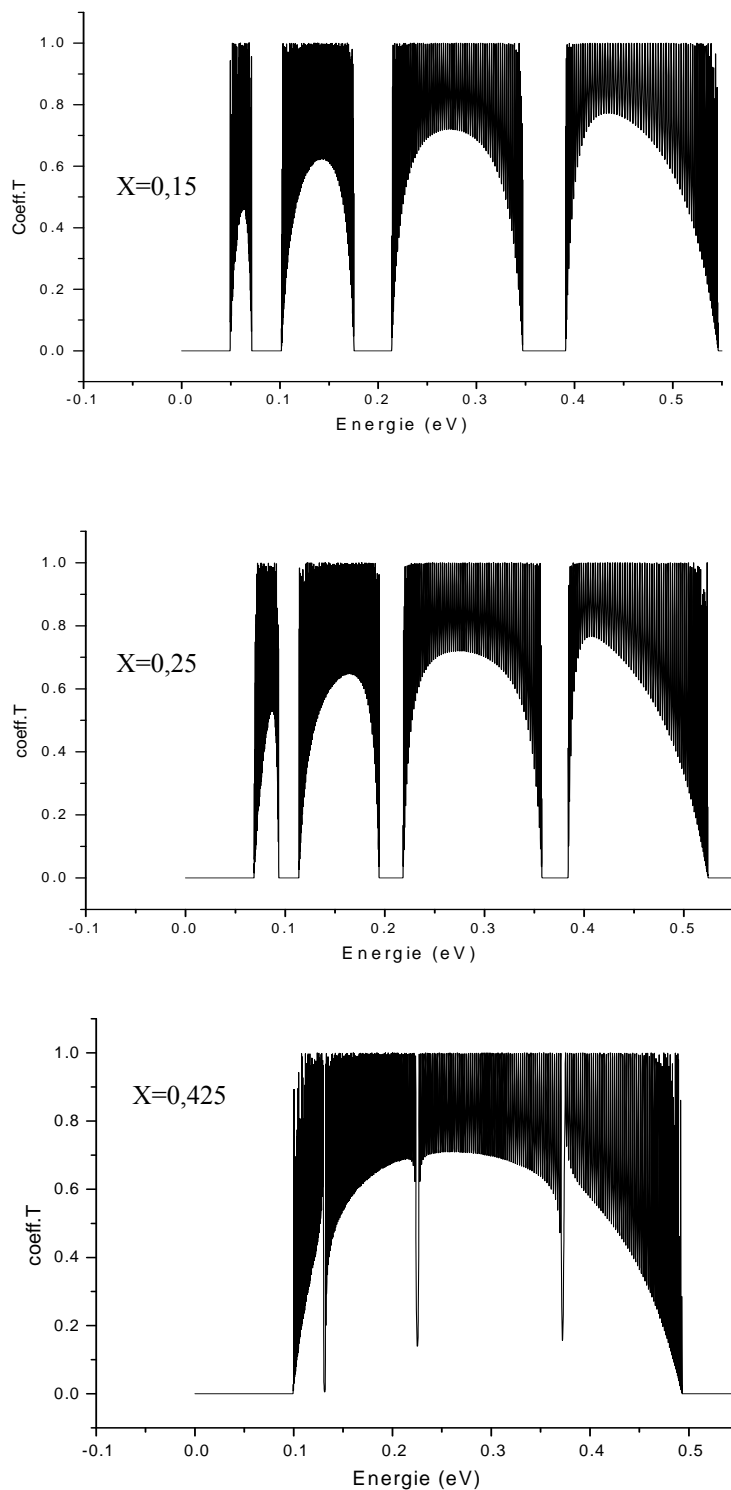


Fig.IV.10. Coefficient de transmission en fonction de l'énergie d'électron pour les structures de trimer à différentes valeurs de x .

D'après la figure (IV.10), on remarque que le profil de transmission de la structure de séquence trimer diffère nettement de celui de la structure ordonnée. On constate l'apparition de quatre minibandes séparées par trois minigaps. Les trois minigaps présent décrit le défaut en potentiel en hauteur de barrière V_2 en trimer introduit dans la structure ordonné provoque ainsi une division de la minibande initialement présente dans la structure ordonné (Figure. IV.2).

On note aussi que les largeurs de minigaps augmentes avec l'augmentation de la différence de fractions molaires x (voir Fig. IV.11).

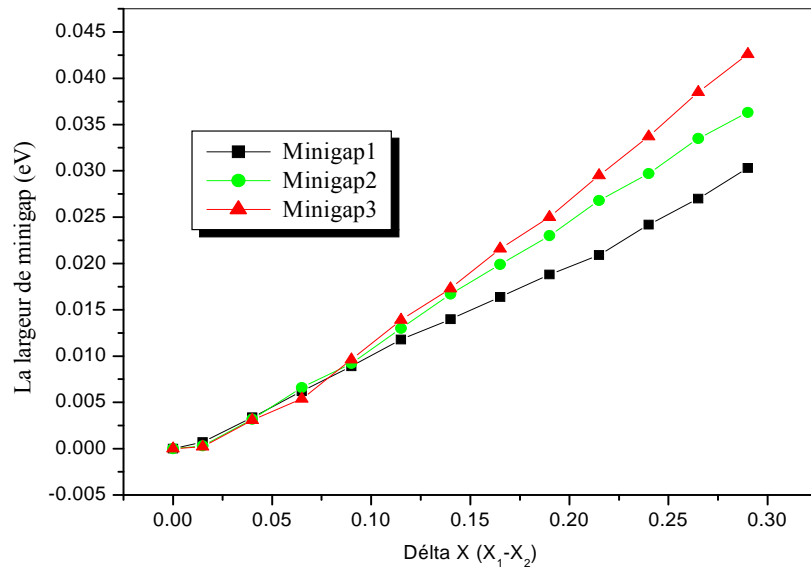


Fig. IV.11. La largeur de minigap en fonction de la différence de fraction molaire d'aluminium Δx .

On peut déduire de la figure (IV.11) que la largeur de trois minigaps varie linéairement avec l'augmentation de Δx . Le fit linéaire de ces droites nous donne :

Pour le 1^{er} Minigap : $\text{Minigap}_1 = 104,54 \Delta x - 7275,00$

Pour le 2^{ième} Minigap : $\text{Minigap}_2 = 133,07 \Delta x - 2,11$

Pour le 3^{ième} Minigap : $\text{Minigap}_3 = 156,65 \Delta x - 3,86$

IV.2.2.3. Discussions

Les phénomènes observés dans les figures (IV.4), (IV.10) et (IV.7) sont les résultats des interférences destructives des fonctions d'onde électronique dus à la différence de phase causés par les distances d_m , d_d et d_t provoqué par les séquences des séries propre a chaque superréseau.

A partir de ce qui précède on peut constater que lorsque le défaut de potentiel en hauteur de barrière V_2 est introduit dans la structure de superréseau ordonné provoque la création des minigaps. Le nombre des minigaps créé est lié au nombre de défaut introduit dans la structure ordonnée. Pour un superréseau en défaut de monomère V_2 , on a remarqué l'apparition d'une seule minigap, mais pour un superréseau en défaut dimer (V_2, V_2) on a une création de deux minigaps, par contre dans un superréseau en défaut trimer (V_2, V_2, V_2), on a constaté trois minigaps. Donc on peut généraliser que pour n défauts introduits en potentiel en hauteur de barrière dans le superréseau ordonné suivant une série S_i tel que $S_i = S_{i-1} + (n+1)$ avec $S_1 = 2$ et $i = 1 \dots N$ le nombre de minigaps créé sera égale à n .

La largeur de minigap ΔE créé augmente linéairement en fonction de la différence de fraction molaire Δx pour les différentes structures étudiés : $\Delta E = a \cdot \Delta x + b$. Cette relation permet d'extraire la longueur d'onde λ pour n'importe quelle valeur de fraction molaire x_2 .

IV.2.3. Influence de la tension appliquée

IV.2.3.1. Structures ordonnées avec tension

L'application d'un champ électrique au puits de potentiel a pour conséquence de modifier son profil. Cet effet est illustré sur la figure (IV.12).

Ainsi, sous l'effet d'une tension appliquée à la structure, l'écart d'énergie entre les niveaux sera modifié, ainsi que la distribution de la fonction d'onde. Le champ électrique induit directement une variation de la bande interdite du matériau et par conséquence modifie le profil de la structure de minibande ce qui va engendrer une modification des propriétés optoélectroniques du système.

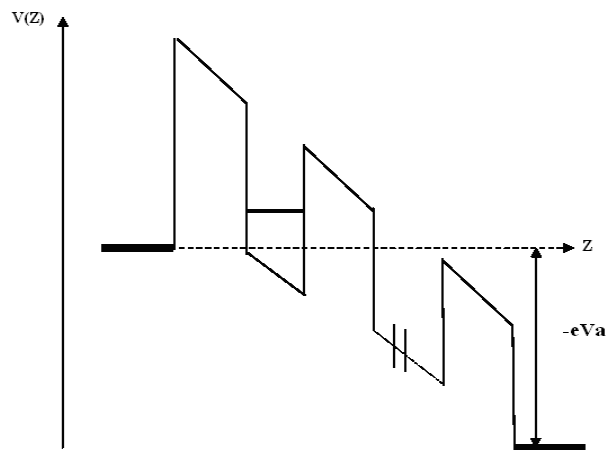


Fig.IV.12. Profil de potentiel d'un superréseau soumis à la tension V_a .

L'évolution du coefficient de transmission $T(E)$ en fonction de la tension appliquée V_a pour une structures unidimensionnelles ordonnées à N barrières est représenté par la figure (IV.13).

On voit clairement qu'une augmentation de la tension appliquée V_a entraîne une:

- Destruction et une translation des minibandes, vers les basses énergies ($E < V_0$), due

principalement à la pente de la barrière du potentiel, qui devient de plus en plus grande

$v(z) = v_0 - \frac{eV_a}{L}z$. Ce résultat est en parfait accord avec celui obtenu par Consuelo et al

[IV.9].

- Diminution de la largeur de la minibande jusqu'à la disparition totale pour V_a supérieure à 0.4Volts.

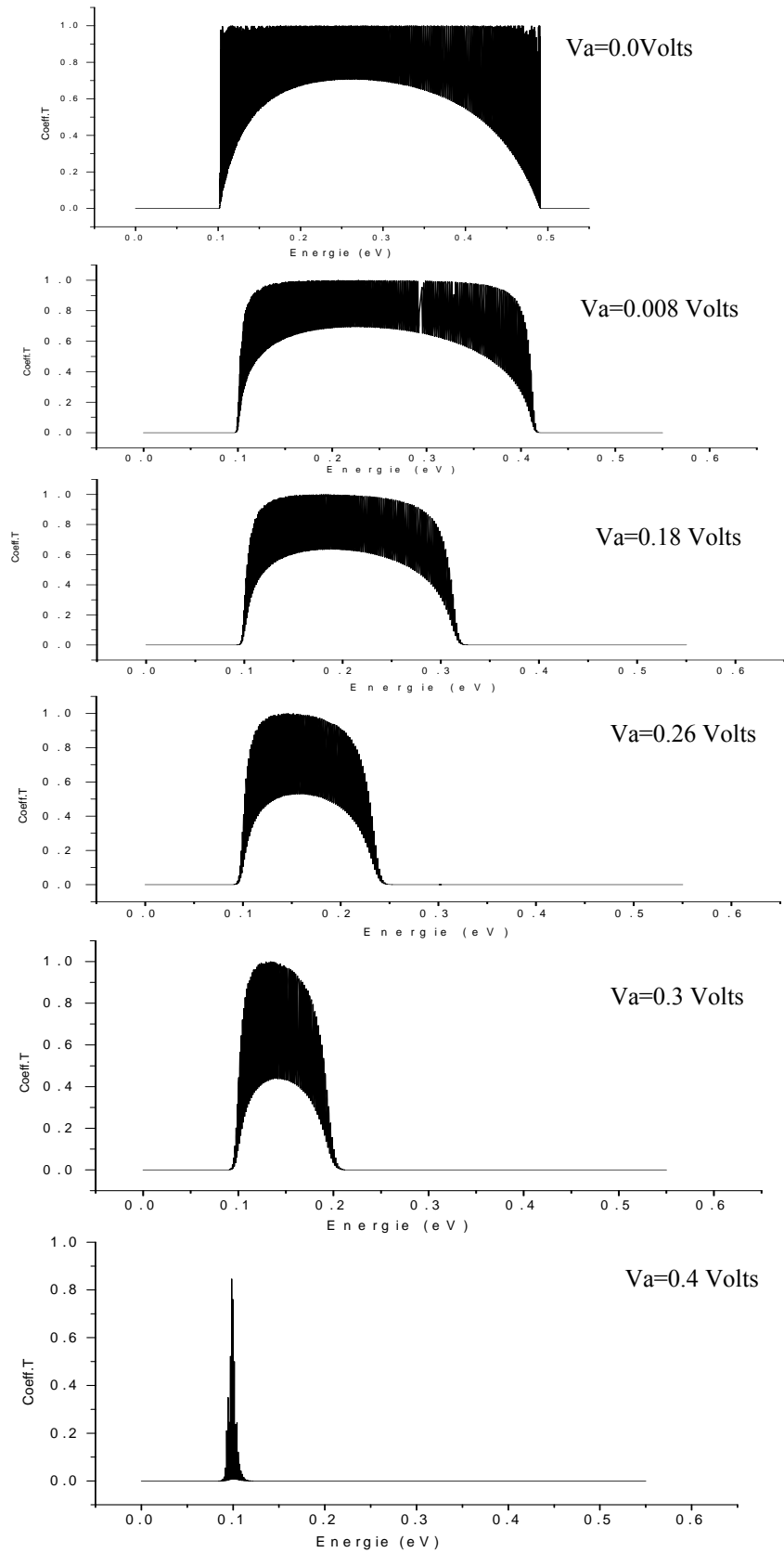


Fig.IV.13. Coefficient de transmission d'une structure à N barrières en fonction de l'énergie pour différentes tensions appliquées

Ce phénomène peut être expliqué par le fait qu'un champ électrique localise les fonctions d'onde. Les puits pourront être considérés comme découplés puisque les extensions des fonctions d'onde ne permettront pas le couplage entre niveaux consécutifs (Figure IV.14), par contre en absence du champ électrique, les fonctions d'onde sont délocalisées. Les électrons subissent des diffusions associées aux deux puits adjacents.

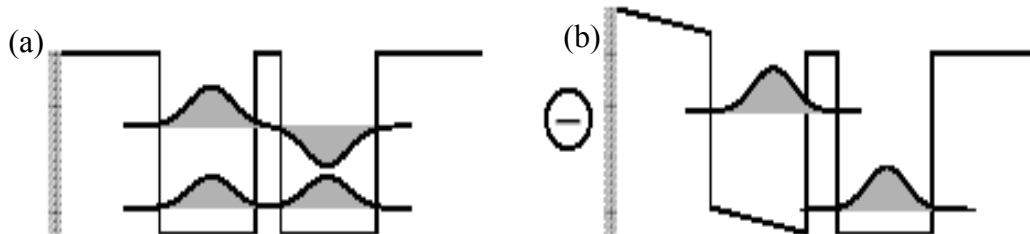


Fig.IV.14. schéma de deux puits : (a) couplés (b) découplés

IV.2.3.2. Structure de séquences monomer, dimer et trimer

Dans ce point on s'intéresse à la nature des états électroniques sous l'effet de la tension appliqué sur des structures à séquence monomer, dimer et trimer.

IV.2.3.2.1. Structure à séquence monomer

La figure (IV.15) montre l'effet d'une tension de polarisation appliquée sur la structure à séquence monomer.

On voit clairement qu'une augmentation de la tension appliquée V_a entraîne une translation des minibandes vers les énergie les plus basses. On note aussi que la première minibande disparaît lorsque la tension est supérieure à $V_a=0.1$ Volts.

On remarque ainsi qu'en fonction de la tension appliquée la largeur de minigap est nettement différent d'une tension à l'autre, pour cela on a tracé la variation des largeurs de minigaps en fonction des valeurs croissantes de V_a (voir Fig. IV.16). La relation reliant la largeur de minigap à la tension appliquée V_a est obtenues par un simple fit linéaire de la courbe de cette figure : $\Delta E_g = 0.84744 V_a + 0.07072$. Cette translation linéaire des résonances sous l'effet de V_a est expliquée par le déplacement des états permis dans chaque puits vers les basses énergies jusqu'à la disparition totale (c-à-d passage en dessous du bas de l'énergie de conduction du GaAs qui est pris comme référence).

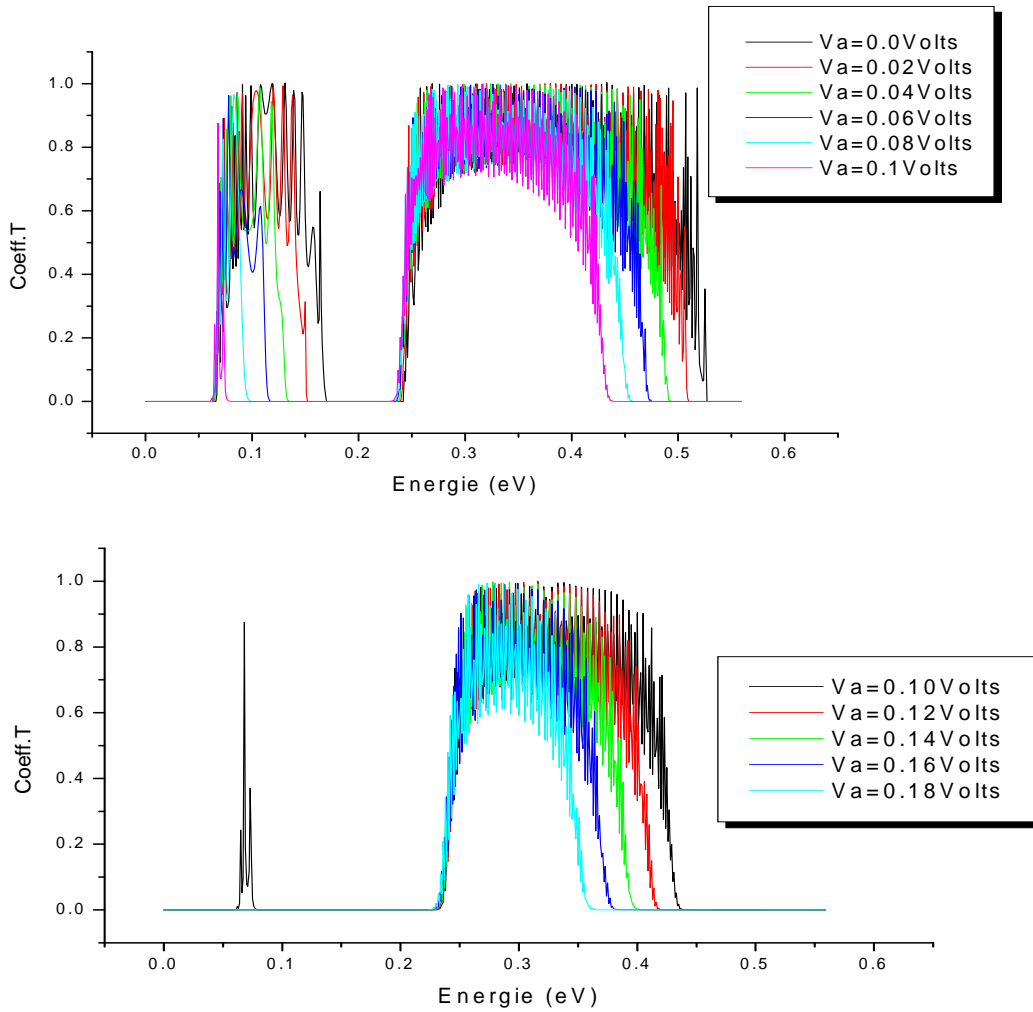


Fig.IV.15. Coefficient de transmission d'une structure de séquence monomer en fonction de l'énergie pour différentes tensions appliquées.

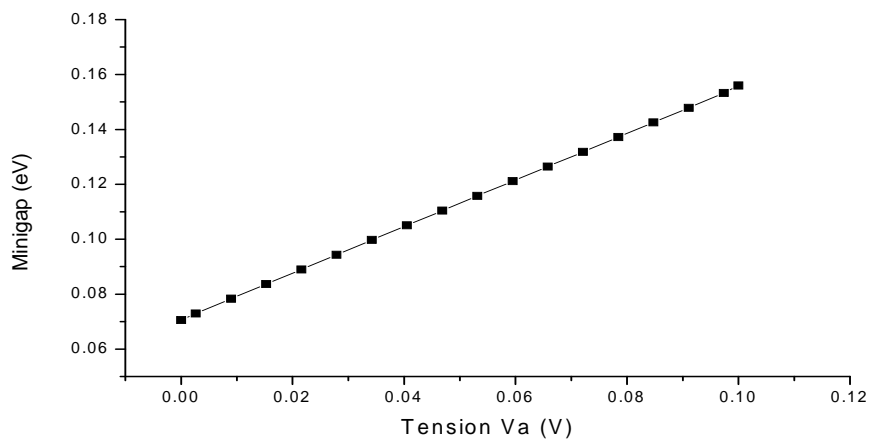


Fig.IV.16. La largeur de minigap de la structure à séquence monomer en fonction de la tension appliquée.

IV.2.3.2.2. Structure à séquence dimer

Le profil de transmission d'une structure à séquence dimer présenté dans la figure (IV.17) montre le déplacement et le rétrécissement de trois minibandes avec l'augmentation de la tension V_a . On note que la première minibande disparaît pour une tension supérieure à 0.04Volts et la deuxième minibande s'annule pour une tension supérieure à 0.14Volts. On constate aussi que la largeur des deux minigaps de la figure (IV.17) augmente avec l'augmentation de V_a jusqu'à sa disparition.

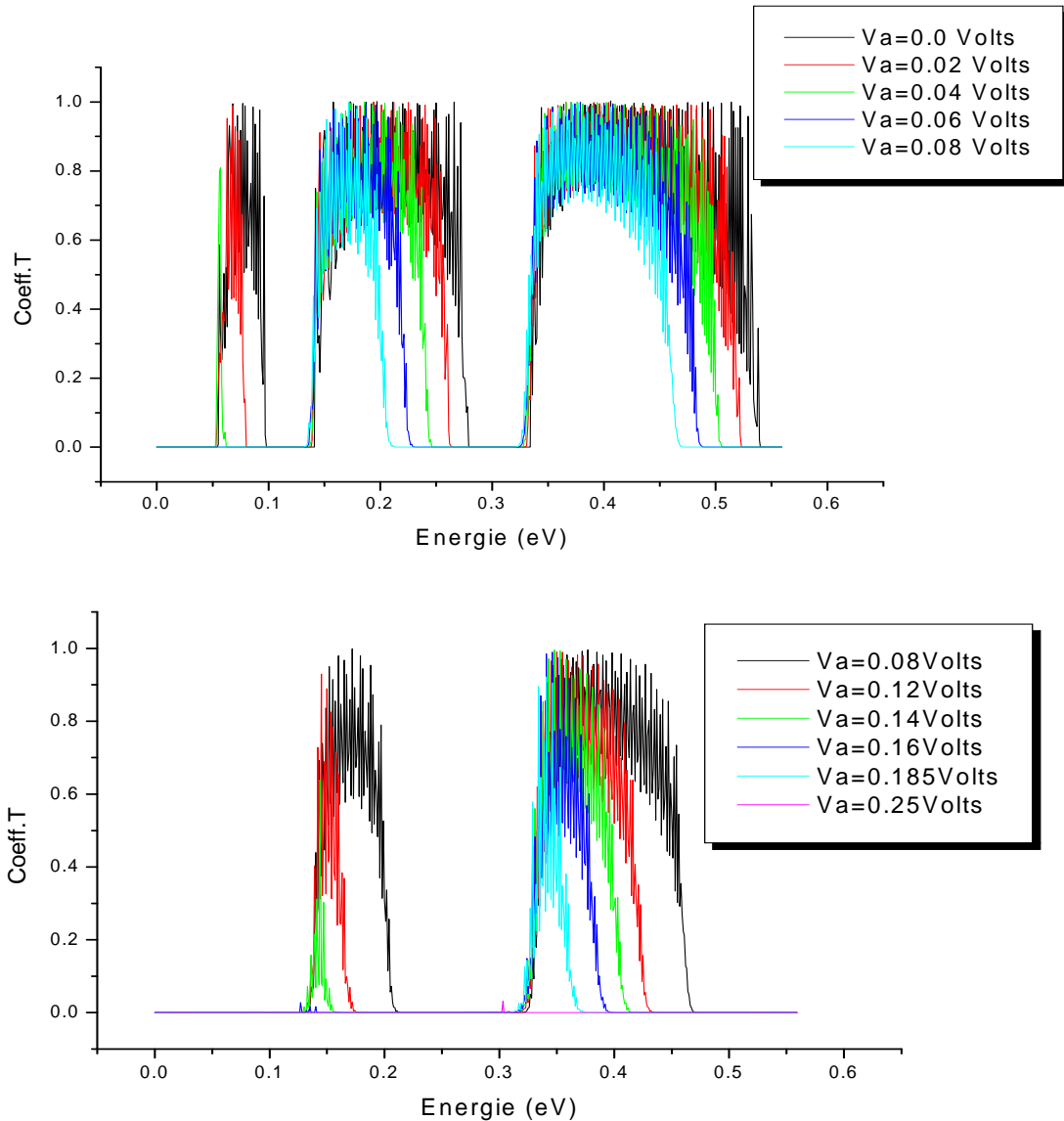


Fig.IV.17. Coefficient de transmission d'une structure de séquence dimer en fonction de l'énergie pour différentes tensions appliquées.

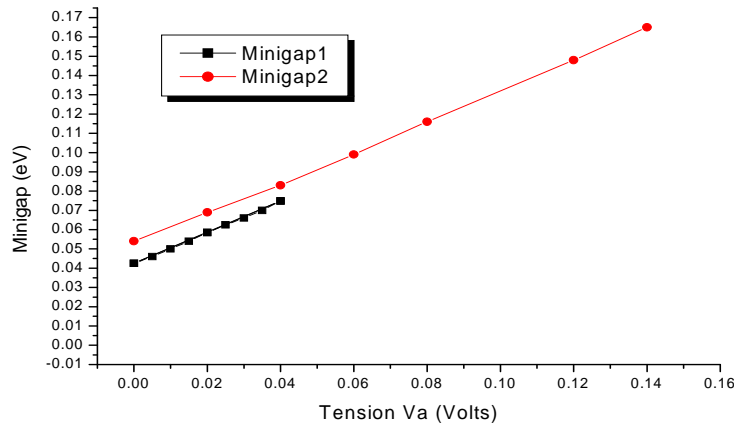


Fig.IV.18. La largeur de minigap de structure à séquence dimer en fonction de la tension appliquée.

La figure (IV.18) montre l'augmentation linéaire de la largeur des minigaps en fonction de la tension appliqué V_a . Le fit de deux droite donne les relations suivantes :

- Pour le 1^{ier} Minigap : $Minigap_1 = 0.80700 V_a + 0.04213$
- Pour le 2^{ième} Minigap : $Minigap_2 = 0.79547 V_a + 0.05258$

IV.2.3.2.3. Structure à séquence trimer

Les réponses de la transmission de structure à séquence trimer, correspondant à différentes tensions appliquées V_a sont représentées dans la Figure (IV.19). Nous constatons une translation et une diminution de la largeur des minibandes avec l'augmentation de la tension V_a . On note que la première minibande disparaît pour une valeur de tension supérieur à $V_a=0,02\text{Volt}$, la deuxième à une tension supérieure à $V_a=0.08\text{Volt}$ et la troisième à V_a supérieure à 0.14Volt .

La largeur des trois minigaps augmente avec l'augmentation de la tension appliquée (voir Fig. IV.20). Cette augmentation est linéaire pour tous les minigaps. Le fit de trois droite donne les relations suivantes :

- Pour le 1^{ier} Minigap : $Minigap_1 = 0.82861 V_a + 0.02847$;
- Pour le 2^{ième} Minigap : $Minigap_2 = 0.77577 V_a + 0.03600$;
- Pour le 3^{ième} Minigap : $Minigap_3 = 0.74345 V_a + 0.04004$.

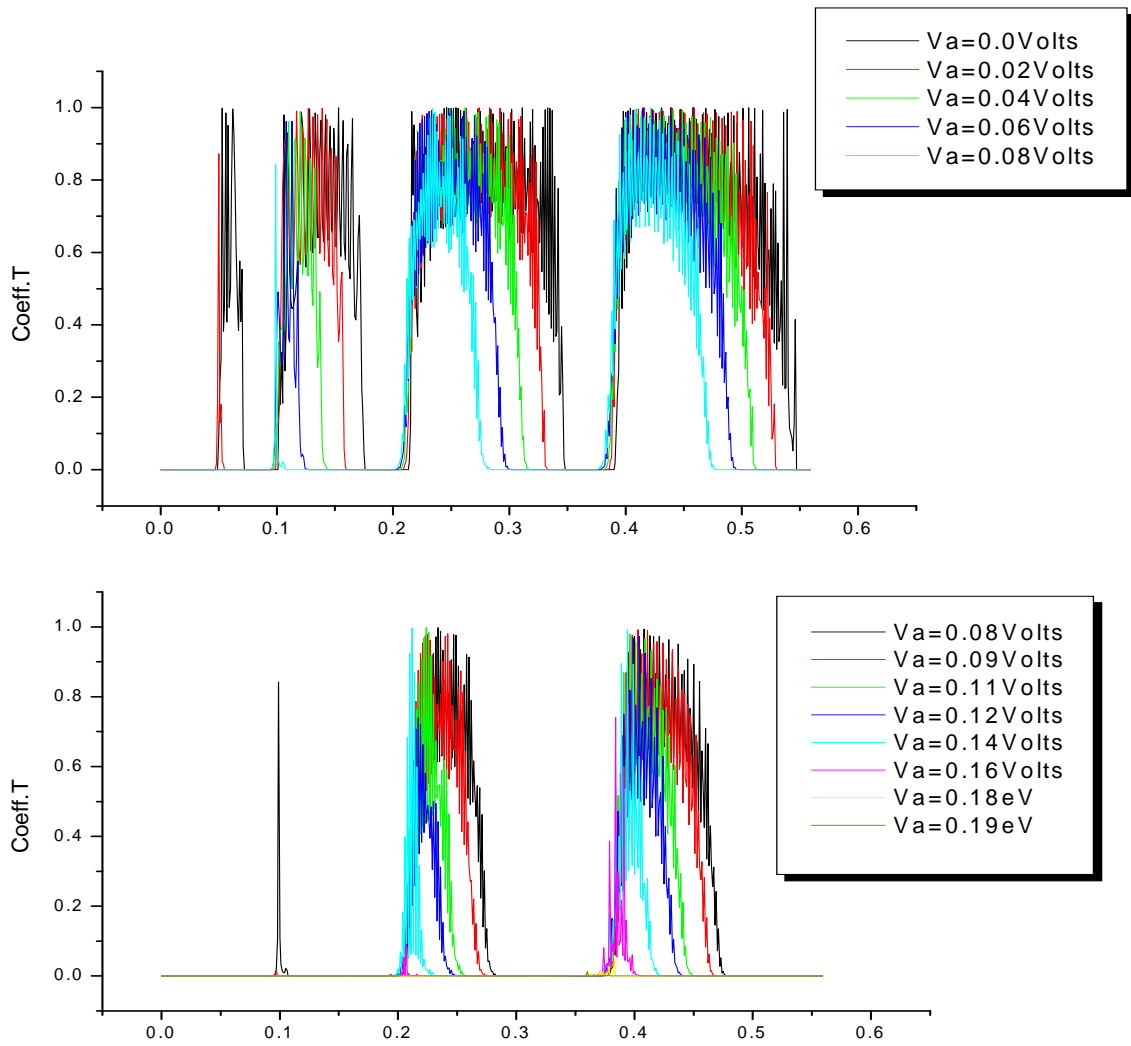


Fig.IV.19. Coefficient de transmission d'une structure de séquence trimer en fonction de l'énergie pour différentes tensions appliquées

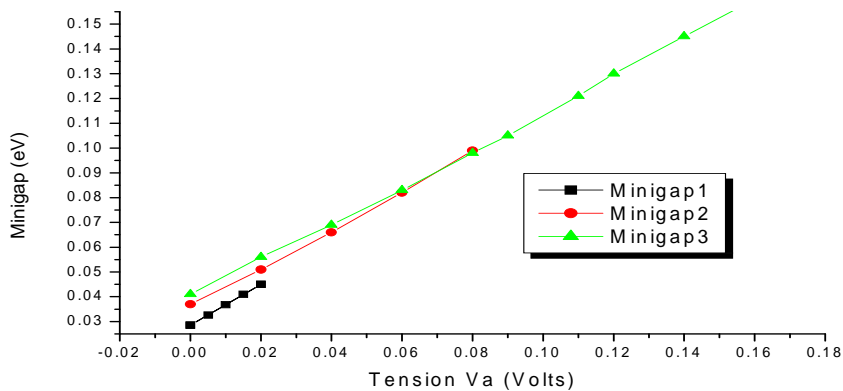


Fig.IV.20. La largeur de minigap de structure à séquence trimer en fonction de la tension appliquée.

IV.2.3.2.4. Discussions

L'application d'une tension V_a sur les structures à séquence monomer, dimer et trimer donne à la structure des propriétés de transmission intéressantes:

- Une translation de minibandes vers les basses énergies et sa destruction remarquable

avec augmentant de la tension V_a .

- pour des faibles tensions, la conduction est ohmique et l'électron passe par effet tunnel.
- les états deviennent localisés sur les différents puits, ceci peut être expliqué par l'effet

Stark signifiant la modification des états électroniques sous l'action d'un champ électrique [IV.10-IV.11].

- les largeurs de minigaps augmentent linéairement sous l'effet de V_a . Ceci est expliqué

par le déplacement des états permis dans chaque puits vers les basses énergies jusqu'à la disparition totale.

IV.3. SUPERRESEAUX InAs/Ga_{1-x}In_xAs

IV.3.1. Paramétrisations

Dans cette partie, nous considérons un superréseau constitué de deux semi conducteur ayant une largeur de puits $a=25\text{Å}$, une épaisseur de barrière $b=15\text{Å}$. Le superréseau se compose de 300 barrières rectangulaires périodiques de période $P = a + b$ constante le long de la structure.

Dans ce modèle désordonné de S.R nous considérons que la hauteur des barrières prend deux valeurs d'énergie, à savoir V_1 et V_2 aléatoirement réparties dans la structure du superréseau.

Les potentiels sont $V_1=0.2394\text{eV}$ et $V_2=0.6612\text{eV}$ respectivement pour le réseau hôte et le Dimer.

Les masses effectives correspondantes à chaque région du potentiel sont $m_a = 0.026m_0$, $m_b = 0.041m_0$ et $\overline{m_b} = 0.067m_0$.

m_b et $\overline{m_b}$ 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.

Afin d'obtenir un meilleur fit des courbes, le coefficient de transmission est calculé pour une moyenne de 10000 échantillons.

IV.3.2. Structures ordonnées à N barrières rectangulaires

Avant d'étudier les structures désordonnées, il est nécessaire de voir l'allure du coefficient de transmission de la structures ordonnées de hauteur de barrière V_1 et V_2 séparément. Ceci est illustré dans la figure (IV.21)

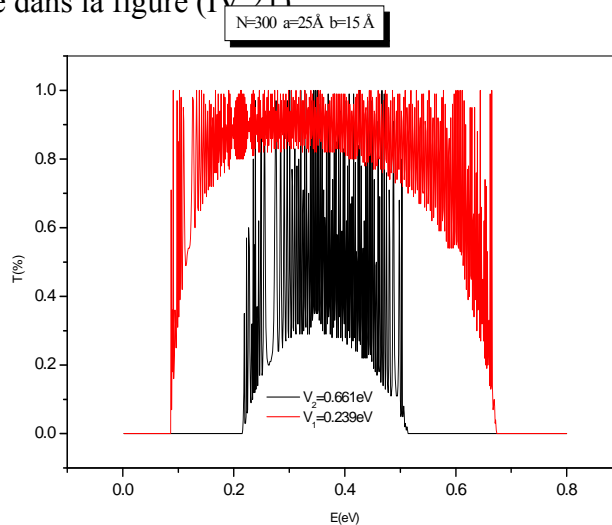


Fig.IV.21. Coefficient de transmission en fonction de l'énergie d'électron pour deux structures ordonnées à N barrières rectangulaires.

Dans la figure (IV.21), le coefficient de transmission est tracé en fonction de l'énergie de l'électron pour deux structures ordonnées, la première de potentiels $V_2=239,4\text{meV}$ et la deuxième de potentiel $V_1=661,2\text{ meV}$.

On observe dans cette figure le processus de la formation de la structure de minibande à l'intérieur du puits, cela est dû à l'existence des $(N-1)$ états permis dans les $(N-1)$ puits compris entre les barrières. La largeur de minibande s'étend de 86 jusqu'à 674 meV pour V_1 et de 215 jusqu'à 514 meV pour V_2 .

IV.3.3. Structures désordonnées

IV.3.3.1. Dimer en hauteur barrières (D.H.B)

Mott et Twose [IV.12] ont prouvé que tous les états sont localisés dans un système unidimensionnel, aléatoirement désordonné. Par ailleurs, les années 90 ont vu l'émergence d'un nombre important de travaux sur les phénomènes de délocalisation dans les systèmes unidimensionnels désordonnés. Faisant suite aux résultats originaux de P. Philips sur la suppression de la localisation d'Anderson dans les chaînes linéaires [VI.13-15], ces études ont été étendues aux hétérostructures électroniques unidimensionnelles: L'effet dimer qui consiste à introduire intentionnellement des paires de défauts d'une manière aléatoire (Voir Fig. IV.22) le long du sous système hôte, brise la symétrie de translation mais fournit au système à des énergies particulières un ensemble d'états délocalisés disposés autour de minibandes permises [IV.16-27].

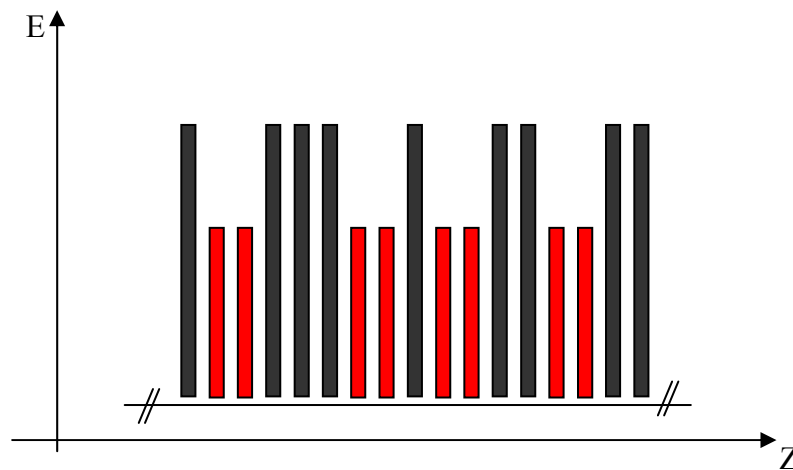


Fig. IV.22. Superréseau en dimer hauteur de barrière

La Figure (IV.23) montre la variation de la transmission en fonction de l'énergie d'électron pour la structure dimer en hauteur de barrières avec un degré de désordre C égale à 30%. Cette concentration est définie par le rapport du nombre de barrières de hauteur V_2 sur le nombre de barrières total du superréseau N .

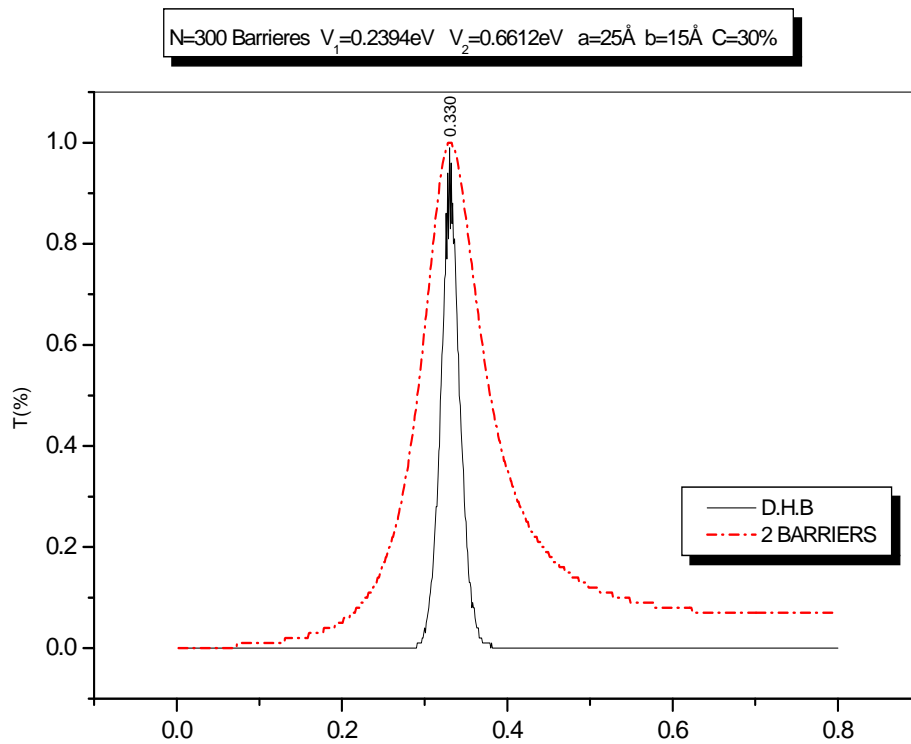


Fig.IV.23. Coefficient de transmission en fonction de l'énergie pour la structure désordonnée en dimer en hauteur de barrière

On remarque dans la figure (IV.23) que le profil de la transmission du D.H.B diffère

nettement de celui de la structure ordonnée. Un seul pic localisé à une énergie 0.330eV à l'intérieur du puits. Cet état étendu est dit état de résonance possédant une valeur de transmission égale à 1. L'existence de l'état étendu est due à la cellule élémentaire dimer (c-à-d $N=2$ barrières) comme est montré sur la figure (IV.23).

Ce résultat est en parfait accord avec ceux trouvés par Dominguez [IV.22] et Bentata [IV.26] où ils ont montré, dans le modèle conventionnel du dimer aléatoire introduit dans les systèmes électroniques GaAs/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ la suppression de la localisation d'Anderson du motif défaut dimer.

Ainsi que les récentes expériences sur l'étude des propriétés de transport électroniques du GaAs/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ avec l'introduction d'un désordre intentionnellement corrèle au moyen de la photoluminescence ont soutenu l'existence d'une délocalisation des états en dimer aléatoire [IV.28].

IV.3.3.2. Trimer en hauteur barrières (T.H.B)

D’après la synthèse bibliographique effectuée, un désordre corrélé en trimer hauteur de barrière (Voir Figure IV.24) a été étudié dans le cas de suprréseau GaAs/Al_xGa_{1-x}As. Les résultats obtenus montrent que la localisation d’Anderson est supprimée par l’introduction de défaut trimer [IV.29,30]. Par contre, il n’y a pas de travaux réalisés jusqu’à présent étudiant le superréseau InAs/Ga_{1-x}In_xAs à désordre corrélé en trimer. Ce point fait l’objet de la partie suivante.

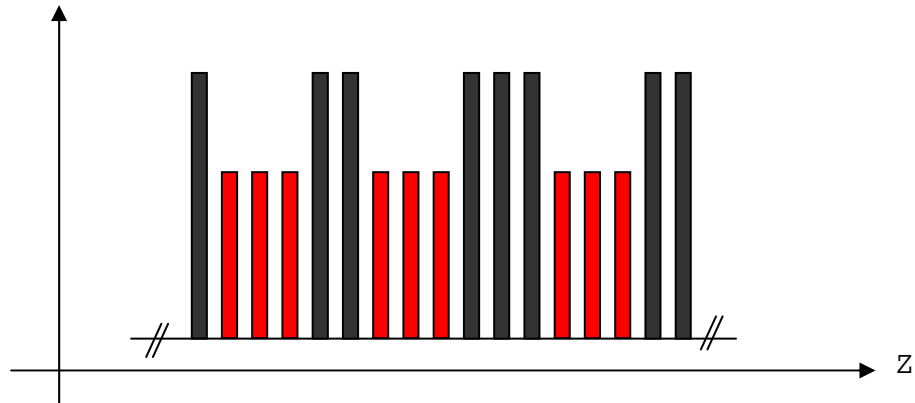


Fig.IV.24. Superréseau en trimer hauteur de barrière

La Figure (IV.25) montre la variation de la transmission en fonction de l’énergie d’électron pour la structure trimer en hauteur de barrières avec un degré de désordre C = 30%.

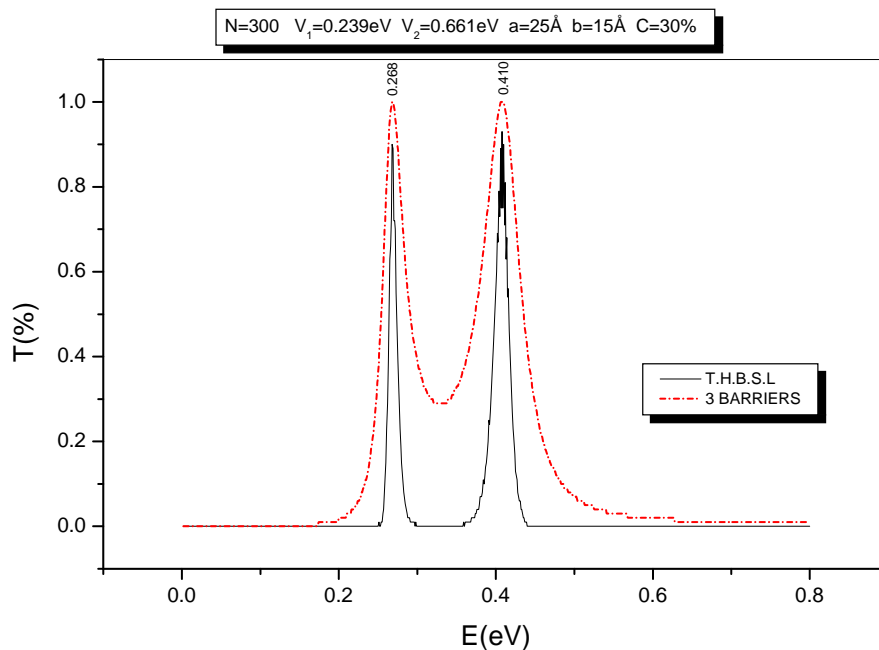


Fig.IV.25. Coefficient de transmission en fonction de l’énergie pour la structure désordonnée en trimer en hauteur de barrière

Une seule minibande, s'étendant de 0.250 eV à 0.440eV à l'intérieur du puits, confiné par le potentiel du trimer est observée.

La minibande est subdivisée en trois régions deux pics localisés aux deux résonances $E_{r1}=268\text{meV}$ et $E_{r2}=410\text{meV}$ et une vallée.

On constate aussi l'existence de deux états propres à l'intérieur de la minibande :

- ✓ états étendus situés au voisinage des résonances et possédant une valeur de transmission égale à 1.
- ✓ états fortement localisés proche des bords de bande et ayant une faible transmission.

Afin de déterminer l'origine de ces états on a confronté les résultats du tracé trimer en hauteur de barrière avec celui de sa cellule élémentaire c.à.d du système ordonné triple barrière (Voir Figure IV.24).

On remarque que la position des deux pics se confond parfaitement avec ceux observés dans la structure élémentaire, cela nous conduit à dire que ces deux pics sont originaires du trimer, en tant que désordre corrélé, introduit dans la structure ordonné.

IV.3.3.3. Effet de la concentration du désordre

L'effet du degré du désordre sur la transmission électronique du superréseau InAs/Ga_{1-x}In_xAs est représenté par les figures (IV.26) et (IV.27). D'après ces figures on constate que:

- la largeur de chacune des sub-minibandes est sensible au degré du désordre, elle diminue avec son augmentation.
- Ces positions des énergies de résonances et des énergies des vallées sont indépendantes de la concentration du désordre C , elles sont identiques pour toutes les valeurs allant de $C=0.05\%$ à $C=40\%$. On conclure que ces énergies dépendent seulement des paramètres de la structure du superréseau, c.à.d l'épaisseur de barrière, largeur du puits et hauteur du potentiel.

On remarque aussi que pour les faibles concentrations du désordre les courbes de la transmission présentent une fluctuation appréciable contrairement aux fortes valeurs du désordre où les courbes sont plus fines, ceci peut être expliqué par le nombre d'échantillon étudié et la moyennisation de T .

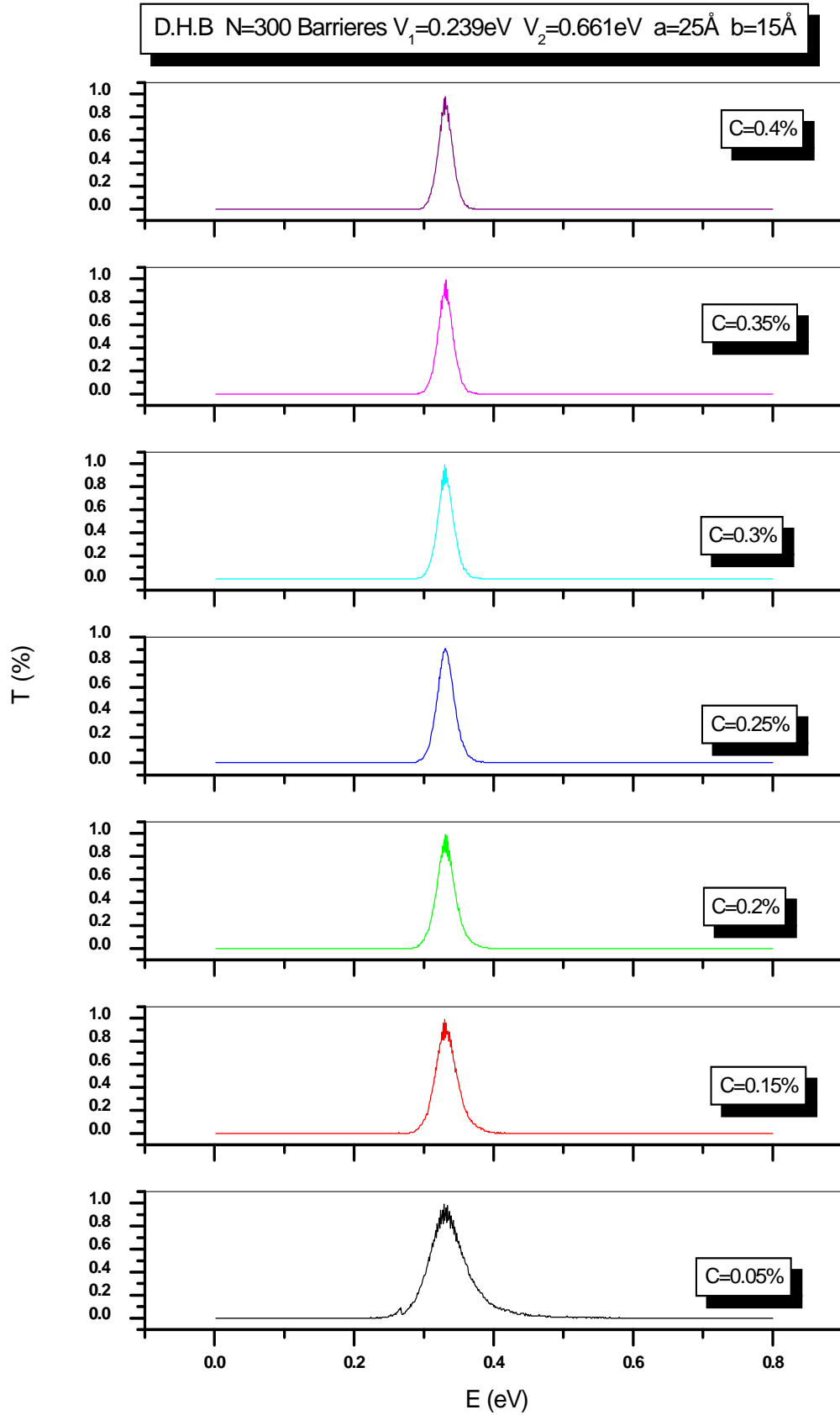


Fig.IV.26. Coefficient de transmission en fonction de l'énergie pour différentes concentrations de désordre du dimer en hauteur de barrière (D.H.B).

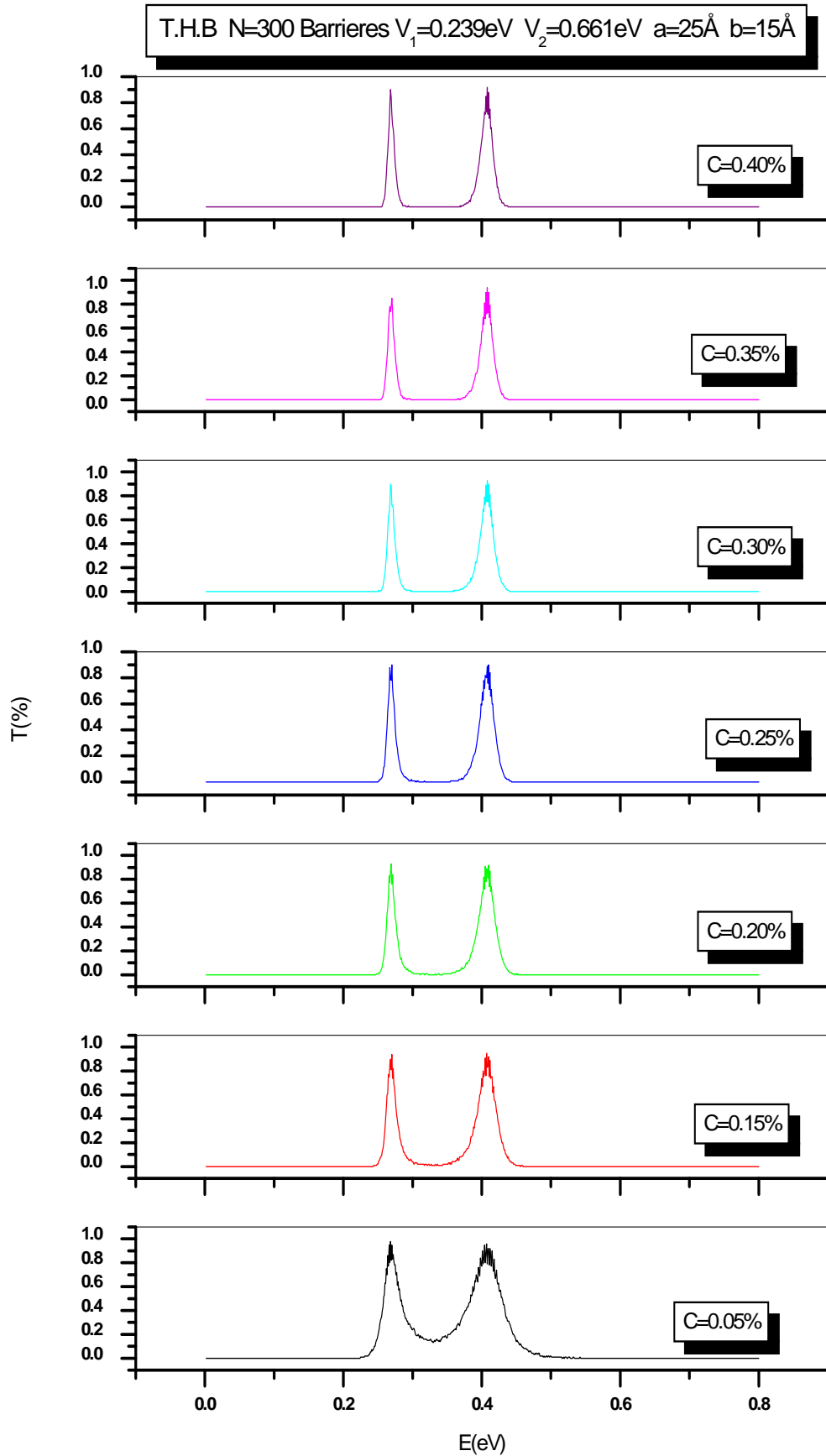


Fig.IV.27. Coefficient de transmission en fonction de l'énergie pour différentes concentrations de désordre du dimer en hauteur de barrière (D.H.B).

IV.3.3.4. Influence du degré de désordre sur la position des énergies de résonance

La figure (IV.28) montre l'influence du degré de désordre sur la position des énergies de résonance pour les deux structures DHB et THB.

Nous constatons que la position des énergies de résonances ne dépend pas du degré de désordre, elles sont identiques quelle que soit la concentration, ainsi on peut déduire que la position des E_r est directement liée aux paramètres structuraux du superréseau. Les résultats obtenus sont en accord avec ceux trouvés dans la littérature [IV. 31-33].

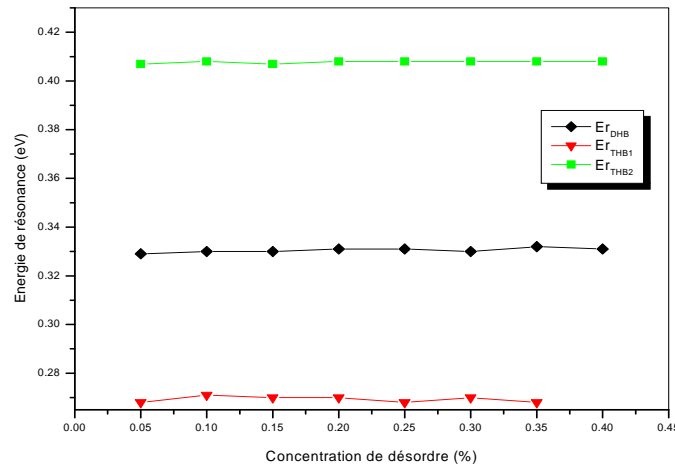


Fig.IV.28. *Energie de résonance en fonction de la concentration du désordre pour les structures désordonnés D.H.B et T.H.B.*

IV.3.3.5. Calcul de l'exposant de Lyapunov

L'exposant de Lyapunov est défini comme l'inverse de la longueur de localisation (ξ). Il mesure la nature des états électroniques dans un système dynamique.

L'exposant de Lyapunov est donné par la relation :

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

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

La Figure (IV.29) présente la variation de l'exposant de Lyapunov en fonction de l'énergie d'électron pour les structures D.H.B (Figure IV.29.a) et T.H.B (Figure IV.29.b) avec C=30%.

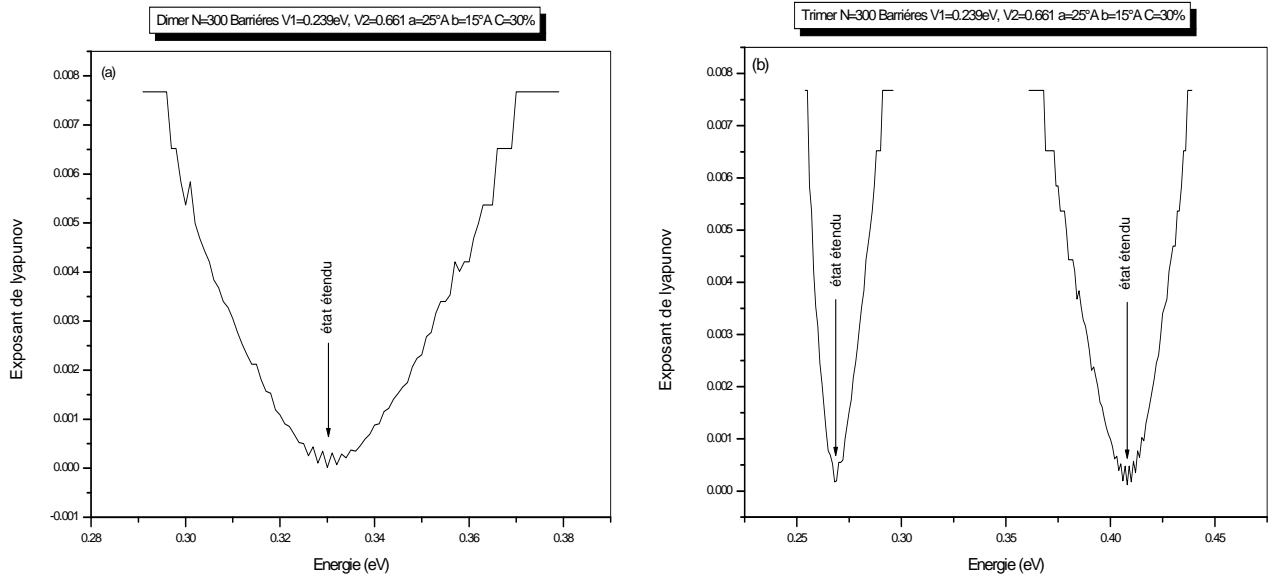


Fig.IV.29. *Exposant de Lyapunov en fonction de l'énergie incidente d'électron*
a) Dimer (D.H.B) b) Trimer (T.H.B)

Nous constatons que l'exposant de Lyapunov tend vers zéro près des énergies de résonance et s'annule complètement pour les énergies d'électron égales à E_r .

Les états électroniques correspondant aux énergies de résonances sont étendus du fait que la longueur de localisation tend vers l'infini (γ tend vers zéro).

Les travaux expérimentaux concernant l'étude du dimer effectué [IV.35-37] ont confirmé la suppression de la localisation pour les systèmes désordonnés présentant une certaine corrélation du désordre. Cela est en parfait accord avec nos résultats. En plus on vient de démontrer ici que le Dimer procure un seul état étendu par contre le Trimer assure deux états étendus.

IV.3.3.6. Influence de la taille du système

L'effet de la taille de système sur la transmission électronique des superréseaux ordonné et désordonnés sont représenté par les figures (IV.30) et (IV.31). On remarque que pour la structure ordonnée ($N=1000$ Barrières) le coefficient de transmission présente un comportement oscillatoire. Cette oscillation est pondérée par une enveloppe périodique (figure IV.30.a et figure IV.31.a). L'allure de ces deux courbes montre clairement que les états correspondants sont des états étendus de Bloch du fait de la périodicité du système.

Pour la structure désordonnée cas du dimer et trimer en hauteur de barrières, deux cas d'allure sont présents :

- Pour des énergies de la résonance $E_r=330\text{meV}$ pour le dimer et $E_r=268\text{meV}$ et

$E_r=410\text{meV}$ pour le trimer, la transmission garde son comportement oscillatoire mais sous une enveloppe non périodique d'où les états électroniques correspondants à ces énergies sont étendus mais pas de Bloch, cela est dû à la corrélation du désordre [IV. 25].

- Pour les énergies loin des énergies de résonances (Figure IV.30b et IV.31.b), le coefficient de transmission à un comportement oscillatoire avec une diminution en exponentiel de la fonction enveloppe jusqu'à son annulation d'où les états correspondants à ces énergies sont localisés.

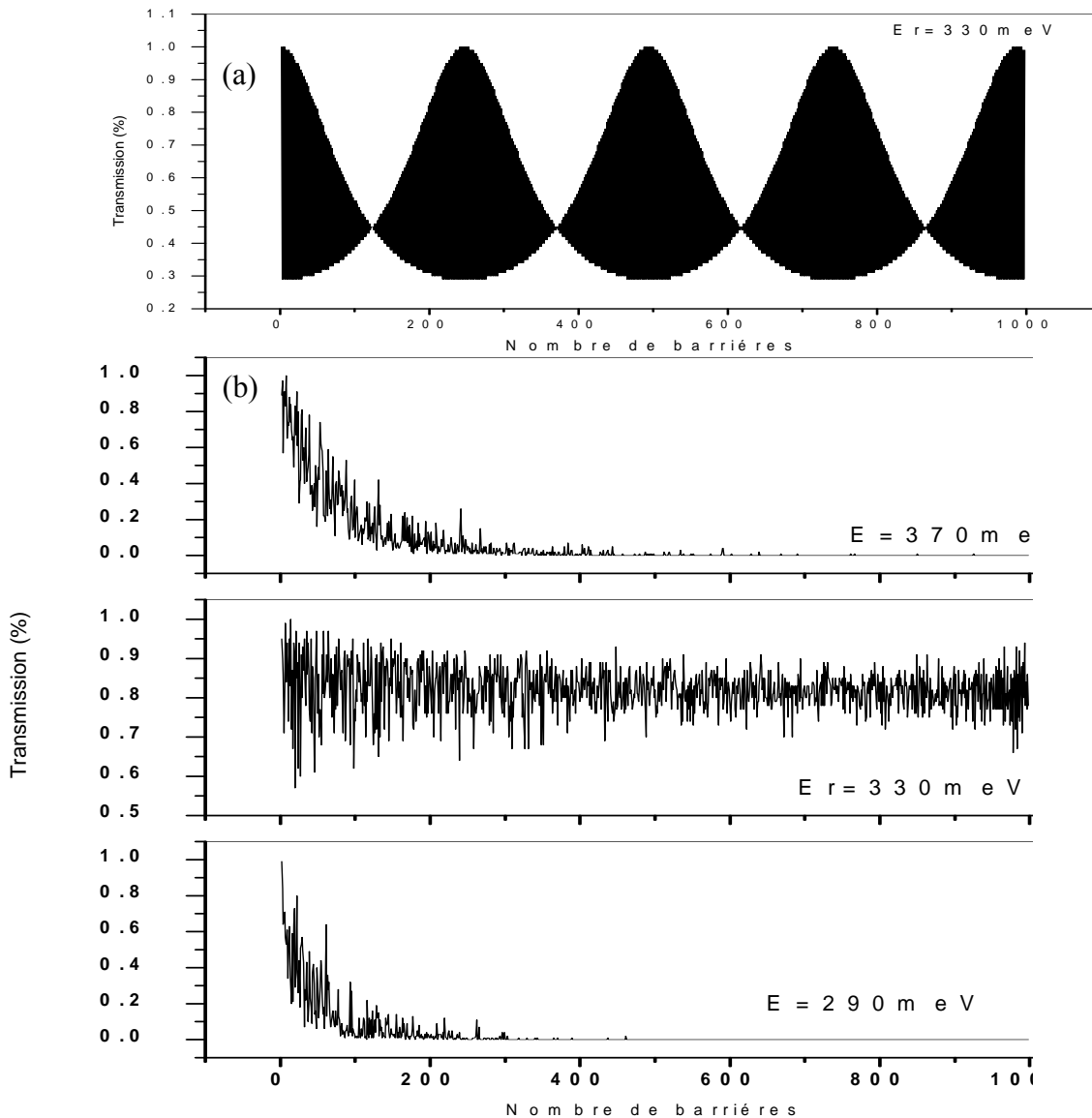


Fig.IV.30. Coefficient de transmission en fonction du nombre de barrière pour une structure :
 a) ordonnée ; b) désordonnée en (D.H.B) à différentes énergies.

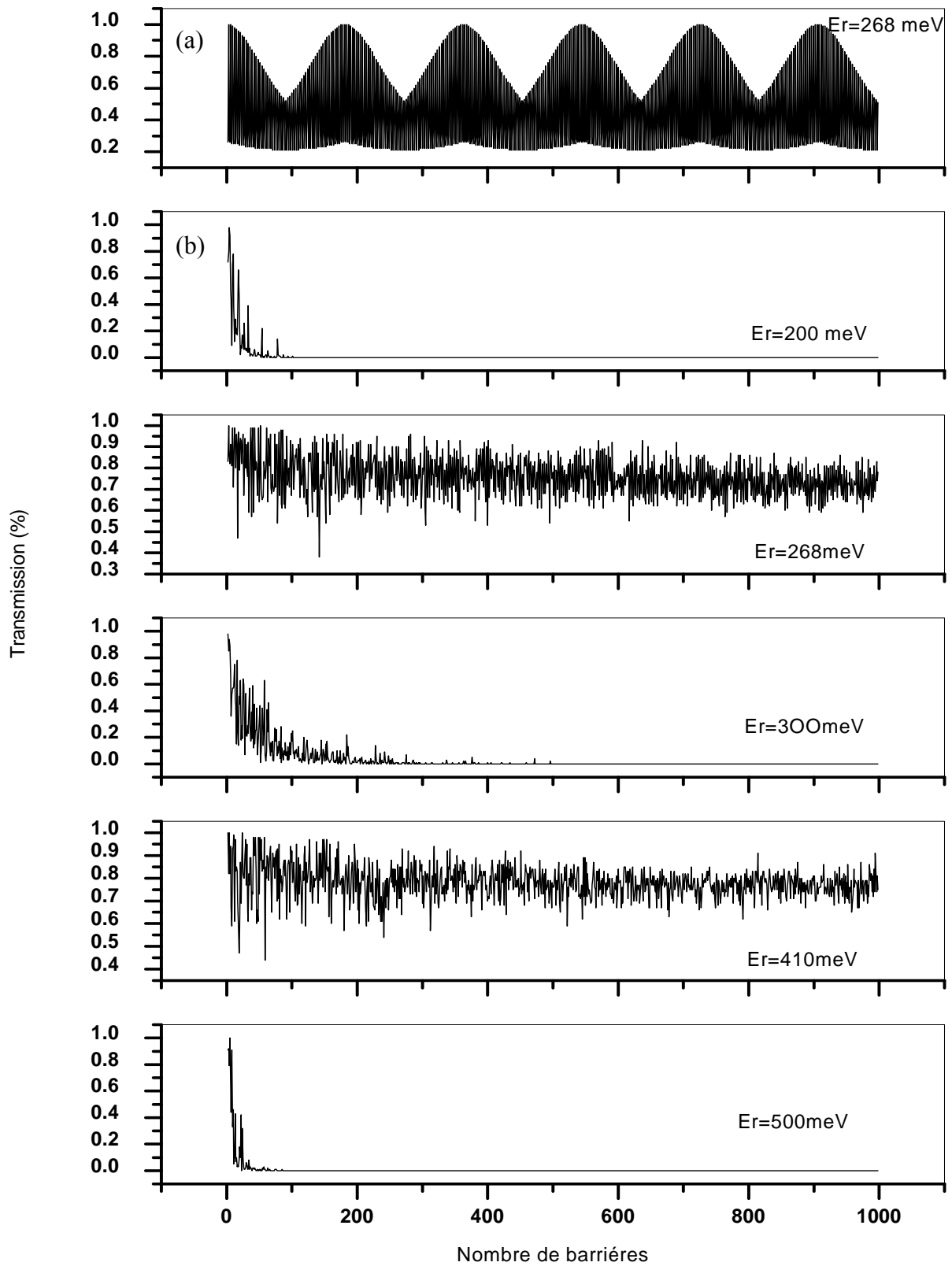


Fig.IV.31. Coefficient de transmission en fonction du nombre de barrière pour une structure :
 a) ordonnée ; b) désordonnée en T.H.B à différentes énergies.

IV.3.3.7. Influence de la tension appliquée sur les états électroniques des structures désordonnés D.H.B et T.H.B

Les transmissions électroniques des deux profils des structures à désordre corrélé, en dimer et trimer hauteur de barrière en fonction d'énergie d'électron incident sous une tension appliquée sont présentées par les figures (IV.32) et (IV.33). D'après ces figures on constate :

- ✓ Une translation de la minibande vers les basses énergies lors de l'augmentation de la tension appliquée.

- ✓ Pour des faibles tensions, la conduction est ohmique et l'électron passe par effet tunnel.

- ✓ Une disparition des résonances originaires des cellules élémentaires pour les grandes valeurs de V_a .

- ✓ Pour une valeur critique de $V_a=1.0$ Volts, la probabilité tunnel décroît considérablement et la structure de minibande est détruite, les états deviennent localisés sur les différents puits, ceci peut être expliqué par l'effet Stark signifiant la modification des états électroniques sous l'action d'un champ électrique [IV.38].

- ✓ Pour la transmission tunnel entre les niveaux d'énergies de deux puits consécutifs, elle est très fortement limitée quand les états permis des puits ne sont pas à la même position d'énergie. Cela peut être expliqué par le fait que l'électron au sein de cette structure polarisée voit le puits suivant plus profond que le premier et une hauteur de barrière plus grande.

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 et tous les états deviennent localisés.

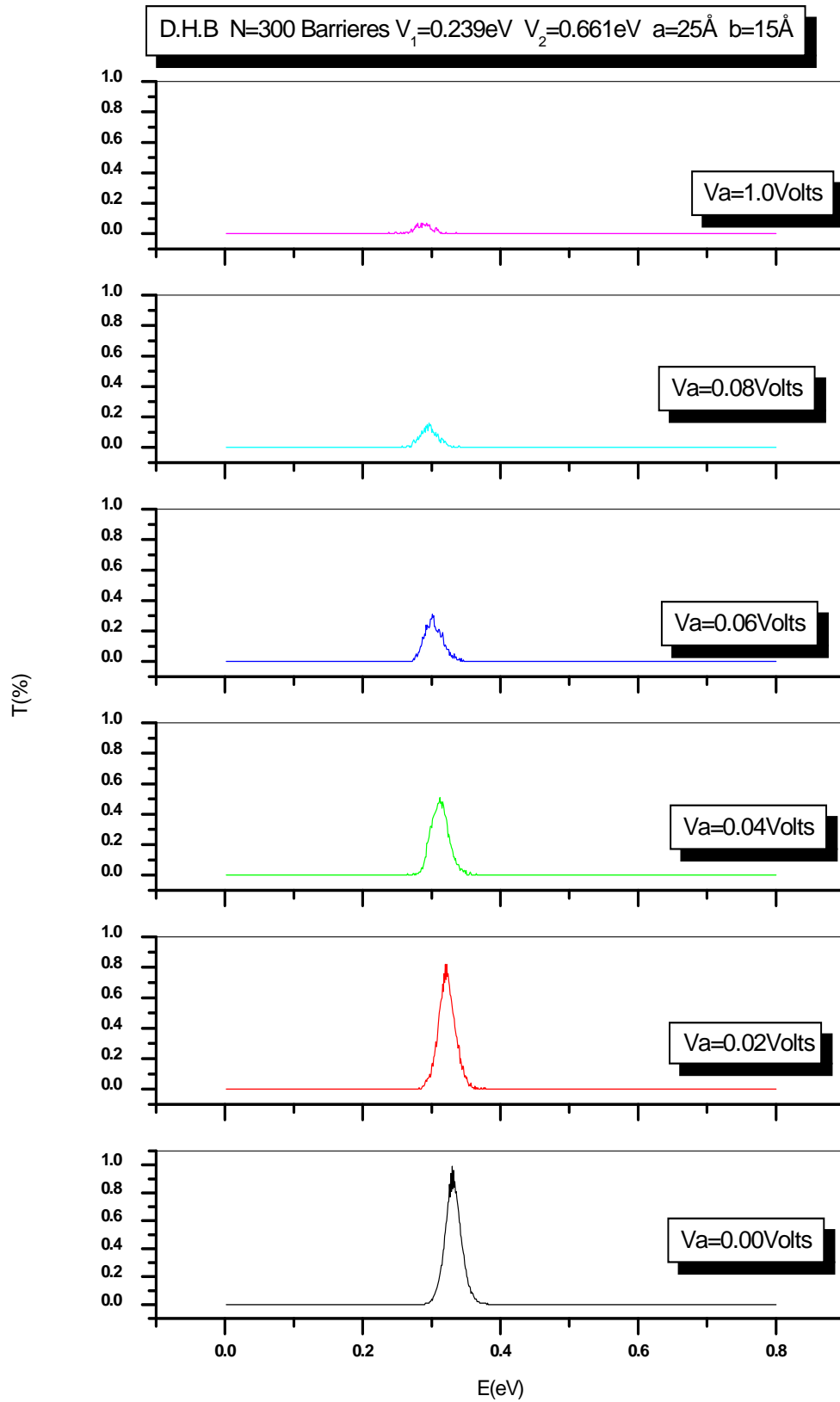


Fig.IV.32. Transmission électronique en fonction de l'énergie pour différentes tensions appliquées cas d'un superréseau en Dimer hauteur de barrière.

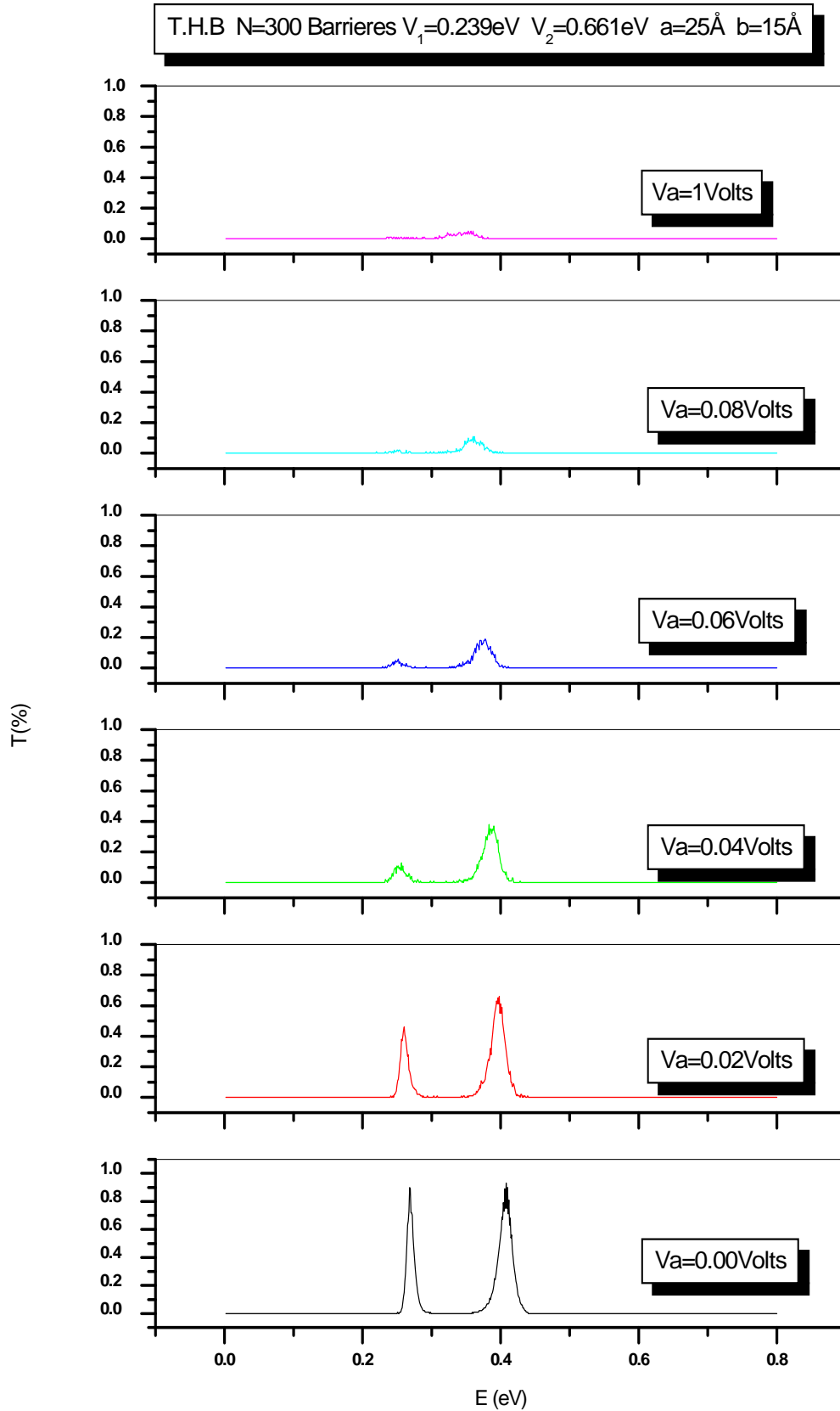


Fig.IV.33. Transmission électronique en fonction de l'énergie pour différentes tensions appliquées cas d'un superréseau en trimer hauteur de barrière.

Pour bien illustrer la translation de la minibande vers les basses énergies lors de l'augmentation de la tension appliquée on a tracé l'énergie de résonance en fonction de V_a comme est montré sur la figure (IV.34).

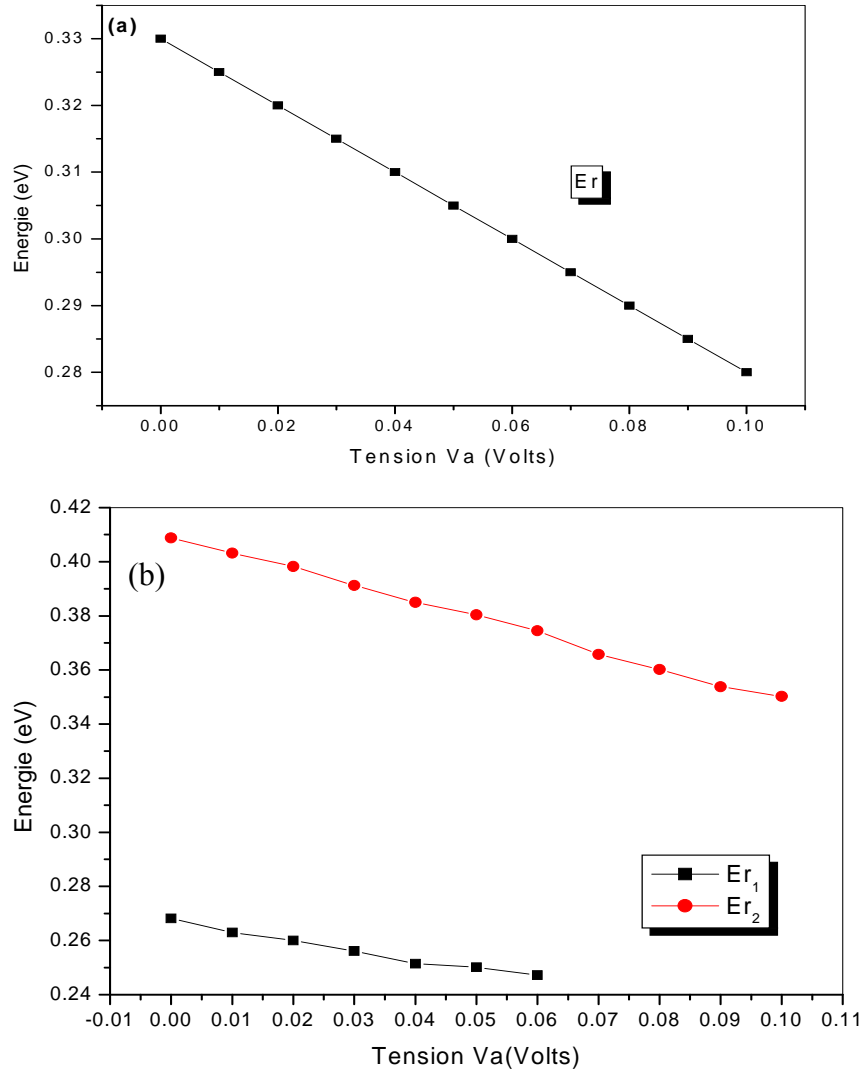


Fig.IV.34. Energie de résonance en fonction de la tension appliquée.

a) structure D.H.B b) Structure T.H.B.

Il ressort de la figure (IV.34) qu'une augmentation de la tension V_a entraîne une décroissance à profil linéaire de l'énergie de résonance des états dans les puits, et qu'au-delà d'une certaine valeur critique de la tension, une disparition totale de la résonance du repère de la gamme d'énergie est observée.

Les relations reliant l'énergie de résonance à la tension appliquée V_a sont obtenues par un simple fit linéaire des courbes de la figure (IV.34).

- Pour la structure DHB

$$E_r = 0.33 - 0.5 V_a$$

- Pour la structure THB

$$E_{r_1} = 0.26698 - 0.34727 V_a$$

$$E_{r_2} = 0.40949 - 0.60540 V_a$$

Cette translation linéaire des résonances sous l'effet de V_a est expliquée par le déplacement des états permis dans chaque puits vers les basses énergies jusqu'à la disparition totale (Voire Figure. IV. 12 et l'équation III.42).

IV.3.3. Longueur d'onde laser

Le calcul des longueurs d'onde laser λ permet de décrire le domaine d'utilisation de superréseaux InAs/Ga_{1-x}In_xAs. Nous allons étudier en particulier, l'influence de la variation de la largeur de puits et l'épaisseur de barrière sur ces valeurs de longueur d'onde laser.

La longueur d'onde laser est calculée par la relation :

$$\lambda = \frac{h.c}{\Delta E} \quad (IV.3)$$

Où ΔE est la valeur du saut d'énergie (en joules), c vitesse de la lumière (3.10^{+8} m/sec) et h la constante de Planck ($6,62.10^{-34}$ J.s).

La figure (IV.35) montre que l'augmentation de l'épaisseur de barrière ainsi que la largeur du puits dans un désordre en trimer conduit à une augmentation de la gamme des longueurs d'onde mais toujours dans le domaine de l'infrarouge sachant que le domaine de l'infrarouge se subdivise en 3 régions [IV.39]:

- Proche-IR 0,8-2,5 μ 13300-4000 cm^{-1}
- IR moyen 2,5-25 μ 4000-400 cm^{-1}
- IR-lointain 25-1000 μ 400-10 cm^{-1}

L'augmentation de λ peut être expliquée par la diminution de la différence d'énergie entre les deux pics de résonance.

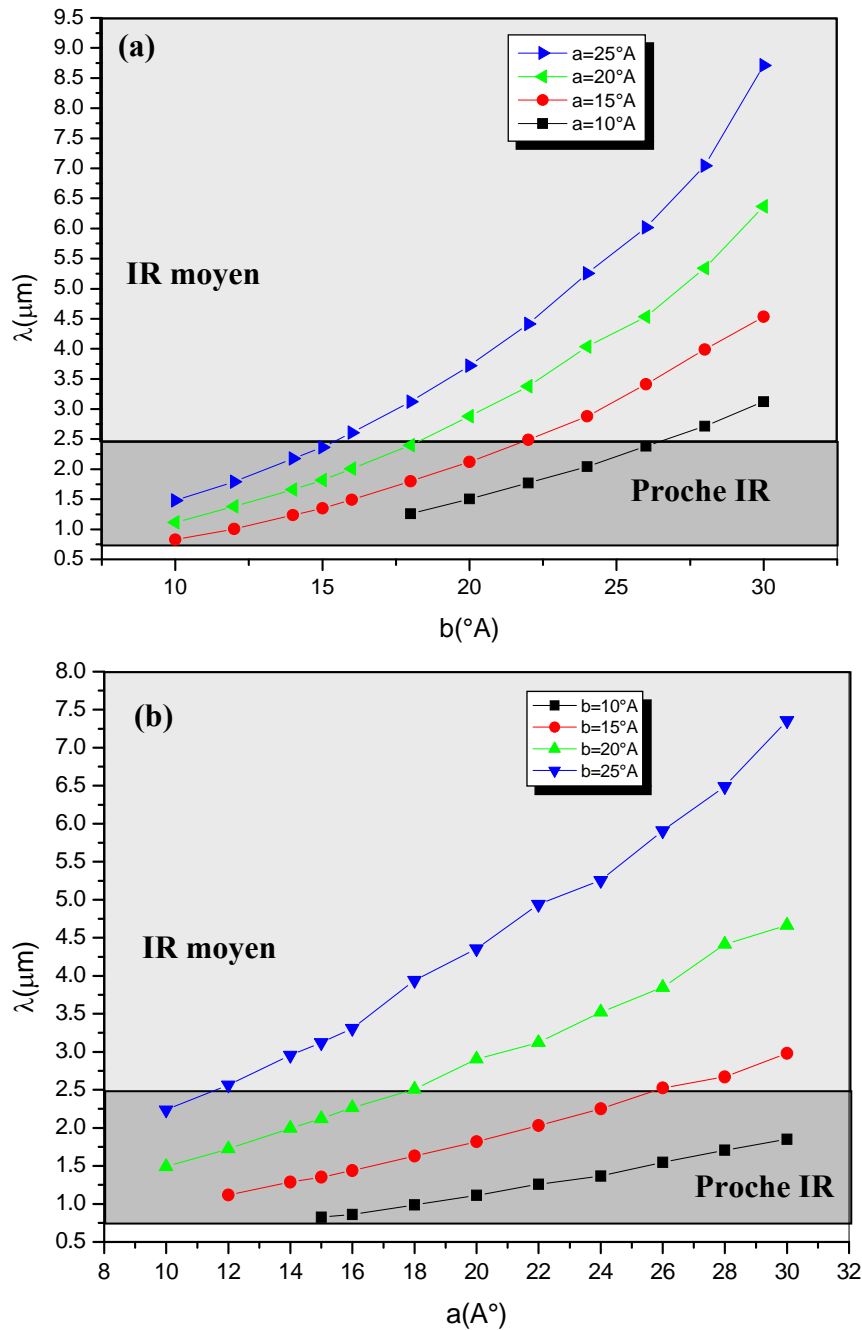


Fig.IV.35. Longueur d'onde laser en fonction (a) d'épaisseur de barrière
(b) de largeur du puits

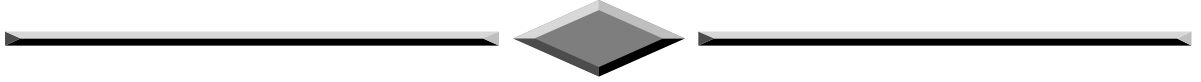
La plage de longueurs d'onde observée est la partie du spectre infrarouge la plus utilisée. Les télécommunications optiques fibrées en ont fait leur terrain de prédilection, en choisissant notamment les longueurs d'onde de transmission de 1,312 et 1,55 μm .

Les sources émettant dans le proche infrarouge ont aussi trouvé leur application dans des domaines très variés tels que la chirurgie, la métrologie, l'enregistrement et la lecture optique de données, la découpe de matériaux...etc.

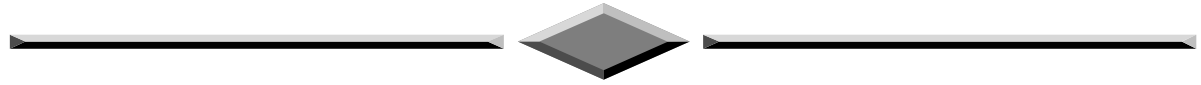
IV.5. REFERENCES

- [1]. S. Bentata, *Superlattices and Microstructures*, 37: 297 (2005).
- [2]. I. Gomez, F.Dominguez-Adame, E. Diez, *Physica. B*324: 235 (2002).
- [3]. Z. Aziz, S. Bentata, R. Djelti, *J. App. Sci.* 7(3) 3140, 2006.
- [4]. R. Djelti, S. Bentata, Z. Aziz, *Lebanese Science journal*, vol.8, N° 01 (2007)
- [5]. P. W. Anderson, *Phys.Rev.B* 23 (1981) 4828.
- [6]. Yu. S. Kivshar, S. A. Gredeskul, A. Sanchez, L. Vazquez, *Phys. Rev. Lett*, 64 (1990) 1693.
- [7]. D. Dunlap, H. L. Wu, P. Phillips, *Phys. Rev. Lett*, 65 88(1990).
- [8]. A. Rodriguez, V. A. Malyshev, F. Dominguez-Adame, *J. Phys. A: Math. Gen*, 33 L161 (2000).
- [9]. M. Consuelo, A.Lima, G.A.Farias, and V.N.Freire, *Superlattices and Microstructures* 17, 235 (1995).
- [10]. J.S.Walker, J.Gathright, *Amer.J.Phys*, 62 408(1994).
- [11]. I.Gomez, F.Dominguez-Adame, E.Diez, *Phys.Rev.B*, 324 238(2002).
- [12]. N.F.Mott, W.D.Twose, *Adv.Phys*, 10 107(1961).
- [13]. H. Dunlap, H. L. Wu and P. Phillips, *Phys. Rev.Lett.***65**, 88 (1990).
- [14]. P. Phillips, H.L. Wu, *Sciences* **252**, 1805 (1992).
- [15]. H. L. Wu, W. Goff and P. Phillips, *Phys. Rev. B* **45**, 1623 (1992).
- [16]. A. Sánchez and F. Domínguez-Adame, *J. Phys. A: Math. and Gen.* **27**, 3725 (1994).
- [17]. E. Diez, A. Sánchez and F. Domínguez-Adame, *Phys. Rev. B* **50**, 14359 (1994).
- [18]. F.Domínguez-Adame, A. Sánchez, and E. Diez, *Phys. Rev. B* **50**, 17736 (1994).
- [19]. A. Sánchez, F. Domínguez-Adame, G. Berman, and F. Izrailev ; *Phys. Rev. B* **51**, R6769 (1995).
- [20]. E. Diez, A. Sanchez and F. Domínguez-Adame; *IEEE J. of Quantum Elect.* **31**, 1919 (1995).
- [21]. E. Diez, A. Sánchez and F. Domínguez-Adame, *Solid State Elect.* **40**, 433 (1996).
- [22]. F. Domínguez-Adame, E.Diez and A. Sánchez; *J. Appl. Phys.* **81**, 777 (1997).
- [23]. T. Hakobyan, D. Sedrakyan, A. Sedrakyan, I.Gómez and F. Domínguez-Adame. *Phys. Rev. B* **61**, 11432 (2000).
- [24]. A. Parsini, L. Tarricone, V. Bellani, G. B. Parravicini, E. Diez, F. Domínguez-Adame, *R. Hey. Phys. Rev. B* **63**, 165321 (2001).
- [25]. I. Gómez, F. Domínguez-Adame and E. Diez; *Physica B* **324**, 235 (2002).
- [26]. S. Bentata, B. Ait Saadi and H. Sediki, *Superlatt. and Microstruct.* **30**, 297 (2001).

- [27]. M. Hilke, J. C. Flores and F. Domínguez-Adame; Phys. Rev.B 58, 8837 (1998).
- [28]. 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).
- [29]. Djelti.R, Bentata.S, Aziz.Z. J. of Applied Sciences 7(3), 417-420 (2007).
- [30]. Djelti.R, Bentata.S, Aziz.Z. American Institute of Physics AIP conference proceedings, Nanotechnology and its applications, 929, 6-11, (2007).
- [31]. Z.Zhao, F.Gao, R.W.Peng, L.S.Cao, D.Li, Z.Wang, X.P.Hao, Mu. Wang and C.Ferrari, Phys. Rev. B 75, 165117 (2007).
- [32]. Adenilson.J.Chiquito, Phys.Rev.B 69,113310 (2007).
- [33]. R.Djelti, Z.Aziz, S.Bentata, FIZIKA A 154,219-226(2006).
- [34]. J.S.Walker, J.Gathright, Amer.J.Phys, 62 408(1994).
- [35]. E.Diez, A.Sanchez, F.Dominguez-Adame, Solid State Electronics 40 433 (1996).
- [36]. V.Bellani, E.Diez, A.Parisini, L.Tarrione, R.Hey,G. B. Parravicini, F.Dominguez-Adame,Physica, A7823(2000).
- [37]. A.Parisini, L.Tarricone, V.Bellani, G.B.Parravicini, E.Diez, F.Dominuez-Adame, R. Hey, Phys.Rev.B 63 : 165321 (2001).
- [38]. M. Castro and F. Dominguez-Adame, Phys. Lett. A 225, 321 (1997)
- [39]. D. Bertrand, E. Dufour, «La spectroscopie infrarouge et ses applications analytiques», Tec et Doc, Paris, 2000.



CONCLUSION
GENERALE



CONCLUSION GENERALE

Notre étude a eu pour vocation de décrire les propriétés optoélectroniques des superréseaux $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ et $\text{InAs}/\text{Ga}_{1-x}\text{In}_x\text{As}$. Le choix de ces deux systèmes unidimensionnels désordonnés est justifié dans la mesure d'obtention de matériaux dont la longueur d'onde d'émission se situe dans la gamme du proche et moyen infrarouge. En effet, l'obtention de photodétecteurs réceptionnant dans cette gamme est très recherchée dans le contexte actuel. Ceux-ci sont utilisés par exemple dans la spectroscopie d'absorption des gaz qui permet de surveiller la pollution atmosphérique (CO_2 , CO , N_2O et H_2O ont des bandes d'absorption caractéristiques dans le proche infrarouge) ou dans la télédétection (analyse des spectres de réflectivité). La télédétection permet entre autres de réaliser des analyses à distance (qualité des eaux, état de la végétation).

Cette étude a clairement montré différents formalismes traitant l'effet tunnel résonant en utilisant l'approximation de la masse effective, et celle de la fonction enveloppe ainsi que les conditions de continuité de Bastard dans le modèle de la matrice du transfert.

En premier lieu, on a appliqué ces formalismes sur des structures obéissant à des séquences spécifiques tel que $S_i = S_{i-1} + (n+1)$ avec $S_1=2$ et $i = 1 \dots N$ où N : nombre de barrières et n : nombre de défaut introduit. Les phénomènes observés sont les résultats des interférences destructives des fonctions d'onde électronique dus à la différence de phase causés par les distances provoqué par les séquences des séries propre à chaque superréseau. Ainsi on a constaté que lorsque le défaut de potentiel en hauteur de barrière V_2 est introduit dans la structure du superréseau ordonné provoque la création des minigaps. Le nombre des minigaps créé est lié au nombre de défaut introduit dans la structure ordonnée. Pour un superréseau en défaut de monomère, on a remarqué l'apparition d'un seul minigap, mais pour un superréseau en défaut dimer on a l'apparition de deux minigaps, par contre dans un superréseau en défaut trimer, on a trouvé trois minigaps. Donc on a généralisé ces constatations pour n défauts introduits en potentiel en hauteur de barrière le nombre de minigaps sera égal à n .

La largeur de minigap créé varie linéairement en fonction de la différence de la fraction molaire pour les différentes structures étudiés : $\Delta E = a \cdot \Delta x + b$. Cette relation permet d'extraire la longueur d'onde λ pour n'importe quelle valeur de fraction molaire.

L'étude de l'effet de la tension sur les structures étudiées à fournit à ces dernier des propriétés de transmission intéressantes:

- Une translation de la minibande vers les basses énergies et une destruction remarquable de la structure de minibande tout en augmentant la tension 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.
- les largeurs de minigaps augmentent linéairement sous l'effet de V_a . Ceci est expliqué par le déplacement des états permis dans chaque puits vers les basses énergies jusqu'à la disparition totale.

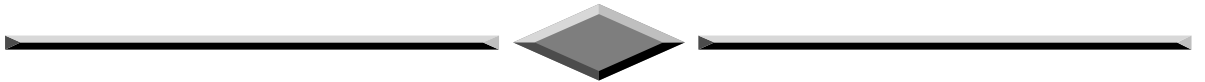
En deuxième lieu, le superréseau InAs/Ga_{1-x}In_xAs a été étudié pour les deux types de désordre dimer et trimer en hauteur de barrières. Le désordre consiste à introduire par doublet et triplet des barrières de hauteur V_2 différentes de V_1 , distribuées aléatoirement dans la structure du superréseau. Les résultats trouvés pour ces structures désordonnées montrent la présence des états étendus situés au voisinage des résonances et possédant une valeur de transmission égale à 1. En effet, l'existence des états étendus est due à la cellule élémentaire (Dimer/Trimer) introduite. Le calcul de l'exposant de Lyapunov a permis de prouver la nature des états électroniques. Aux niveaux des énergies de résonances ces états sont étendus du fait que la longueur de localisation tend vers l'infini. Concernant l'étude de l'effet de l'influence de la taille de système pour les deux structures dimer et trimer en hauteur de barrières, deux natures des états électroniques sont prouvées. Pour des énergies égale aux valeurs des résonances, les états électroniques correspondants sont étendus mais pas de Bloch, cela est dû à la corrélation du désordre, par contre pour les énergies loin des énergies de résonances le coefficient de transmission à un comportement oscillatoire avec une diminution en exponentiel de la fonction enveloppe jusqu'à son annulation, d'où les états correspondants à ces énergies sont fortement localisés.

Par conséquent, ce travail a permis de confirmer les résultats expérimentaux trouvés dans la littérature, montrant la présence des états étendus (délocalisés) dans les systèmes unidimensionnels, ce qui est en contradiction totale avec ce qu'a prédit Anderson.

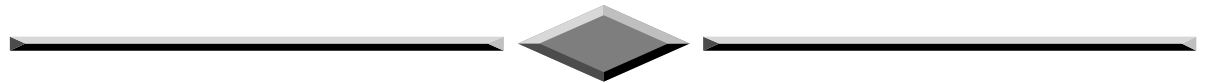
Concernant l'application de champ électrique à ces deux structures, on a prouvé la disparition des résonances originaires des cellules élémentaires, aussi bien pour le dimer que pour le trimer. Les états deviennent localisés sur les différents puits rendant ainsi les puits adjacents découplés. Ceci peut être expliqué par l'effet Stark signifiant la modification des états électroniques sous l'action d'un champ électrique.

Enfin, on a calculé toutes les longueurs d'ondes laser pouvant être émis par les structures étudiées dans ce travail. La gamme des longueurs d'onde obtenue pour les structures GaAs/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ et InAs/ $\text{Ga}_{1-x}\text{In}_x\text{As}$ permet d'envisager des dispositifs très prometteurs dans la conception des laser à longueur d'onde contrôlable dans le domaine de l'infrarouge.

Suite à ces travaux, de nombreuses perspectives sont offertes tels que l'étude de l'effet de la température, de champ magnétique et des différents types d'interactions électron-électron, électron-phonon, etc...sur les propriétés de transport électronique de superréseaux étudiés.



**TRAVAUX LIÉS
A CETTE THESE**



TRAVAUX LIES A CETTE THESE

1-PUBLICATION

- **S. Terkhi**, S. Bentata, R. Djelti, B. Bouadjemi « *Electronic transmission in random trimer InAs/In_xGa_{1-x}As superlattices* » Results in Physics. 2, 198–202 (2012).
- **S. Terkhi**, Z. Aziz , B. Bouadjemi, S. Bentata « *Study of transmission properties in GaAs/Al_xGa_{1-x}As superlattices generated by a specific sequences* » Superlattices and Microstructures. 56, 16–26 (2013).

2-COMMUNICATIONS

- **S. Terkhi**, S. Bentata, Taiba international chemistry conference, Taiba university, Al_Madina Al_Munawarah, Saudi Arabia, March 23-25, 2009 « *The effect of molar fraction in transport properties of In_xGa_{1-x}As and Al_xGa_{1-x}As Superlattices* ».
- **S. Terkhi**, S. Bentata, Z.Aziz and R.Djelti, Fourth Saudi Science Conference, Contribution of Science Faculties in the Development Process of KSA Al-Madinah Al-Munawwarah, Saudi Arabia, March 21 - 24, 2010 « *Effect of applied bias in transmission properties of monomer, dimer and trimer GaAs/Al_xGa_{1-x}As superlattices* ».
- **S. Terkhi**, S. Bentata, Z.Aziz and R.Djelti, 1^{ière} colloque international de Tribologie et matériaux, Université USTO d'Oran, Algérie, 05-07 Décembre, 2010 « *study the influence of the applied bias in transmission properties of monomer, dimer and trimer GaAs/Al_xGa_{1-x}As SUPERLATTICE* ».
- B.Bouadjemi, S.Bentata, A.Zitouni, **S.Terkhi**, 4th International Symposium on Structure-Property Relationships in Solid State Materials, Bordeaux, France, from June 24 to June 29, 2012 « *Study of transmission current-voltage characteristic and resonant tunnelling time of GaAs/Al_xGa_{1-x}As superlattices with nonabrupt interfaces* ».
- **S. Terkhi**, S. Bentata, Z. F. Meghoufel and B.Bouadjemi, Deuxième journée scientifique de genie des procédés, Mostaganem, 13 Avril 2011 « *Electronic* ».

transmission of correlated disorder InAs/InxGa1-xAs superlattices with applied bias».

- **S. Terkhi**, S. Bentata, Z. F. Meghoufel and B.Bouadjemi, Deuxième journée scientifique de la faculté des Sciences exactes et des sciences de la nature et de la vie, Mostaganem, 25-26 mai 2011 «*Electronic states nature of monomer, dimer and trimer barrier GaAs/AlxGa1-xAs superlattices*».
- **S. Terkhi**, S. Bentata, Z. F. Meghoufel, B.Bouadjemi, F. Bendahma et Y. Sefir Première journée scientifique des doctorants, Mostaganem, 14 Mai 2012 «*Effet de la fraction molaire “x” sur les propriétés de transport électronique des superréseaux générés par des séquences spécifiques*».
- B.Bouadjemi, **S.Terkhi**, Z. F. Meghoufel et S. Bentata, Première journée scientifique des doctorants, Mostaganem, 14 Mai 2012 «*Etude de la transmission électronique et la densité de courant dans les superréseaux a profil de potentiel aléatoire type AlxGa1-xAs* ».
- Y. Sefir, Z.AZIZ, S. Bentata, F. Bendahma, **S. Terkhi** et Z. F. Meghoufel, Première journée scientifique des doctorants, Mostaganem, 14 Mai 2012 «*Etude des propriétés optoélectroniques des superréseaux quasipériodiques*»
- F. Bendahma, S. Bentata, Y. Sefir, **S. Terkhi** et Z. F. Meghoufel, Première journée scientifique des doctorants, Mostaganem, 14 Mai 2012 «*influence des paramètres structuraux sur les propriétés optoélectronique d'un superréseau désordonné*».
- **S.Terkhi**, S.Bentata, Z. F. Meghoufel, B. Bouadjemi, Z.Aziz et Y.Sefir, 10ème Congrès National de la Physique et de ses Applications ` CNPA 2012 `Mostaganem, 20-21-22 Novembre 2012 «*Effet de la fraction molaire « x » sur les propriétés de transport électronique des superréseaux quasi périodiques InAs/InxGa1-xAs* ».
- F.Bendahma, Y.Sefir, **S.Terkhi**, Z.F.Meghoufel et S.Bentata, 10ème Congrès National de la Physique et de ses Applications ` CNPA 2012 `Mostaganem, 20-21-22 Novembre 2012 «*Emission laser dans un superréseau désordonné* ».
- Z. F. Meghoufel, S. Bentata, **S.Terkhi**, B. Bouadjemi, F.Bendahma et Y. Sefir, 10ème Congrès National de la Physique et de ses Applications ` CNPA 2012 `Mostaganem, 20-21-22 Novembre 2012 «*Effet de la nonlinéarité sur la transmission électronique d'un superréseau GaAs/AlxGa1-xAs* ».