

THESE

En vue de l'obtention du diplôme de

DOCTORAT EN SCIENCES

Spécialité: Physique

Présentée par

Bendahma Fatima

Intitulée

***Propriétés optoélectroniques des superréseaux
ordonnés et désordonnés types (III-V)
à base d'Arsenic***

Soutenue le devant le jury composé de :

A. Aibout	Professeur	U. Abdelhamid Ibn Badis-Mostaganem	Président
H. Ait kaci	Professeur	U. Mohamed Boudiaf-Oran	Examineur
F. Hamdeche	Professeur	U. Mohamed Boudiaf-Oran	Examineur
S. Bentata	Professeur	U. Abdelhamid Ibn Badis-Mostaganem	Rapporteur

Propriétés optoélectroniques des superréseaux ordonnés et désordonnés types (III-V) à base d'Arсениc

Résumé

Au cours de ce travail, l'étude a été focalisée sur les propriétés optoélectroniques des superréseaux (SR's) à base d'Arсениc ordonnés et désordonnés de types (III-V). L'effet de la concentration de l'aluminium sur la longueur d'onde laser et le temps d'effet tunnel résonnant (TETR) des superréseaux $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ en dimer et trimer hauteur de barrière a été discuté. De tels systèmes sont constitués de deux structures différentes distribuées d'une manière aléatoire en double ou triple, le long de la direction de croissance. Plusieurs méthodes de calcul ont été utilisées pour évaluer le coefficient de transmission du SR à désordre corrélé. La méthode de calcul est basée sur le formalisme de la fonction d'Airy et la technique de matrice de transfert. En augmentant la concentration d'aluminium, les deux profils proposés pour cette étude s'avèrent capables d'améliorer les performances des dispositifs basés sur ces structures. Ceci nous permet de réaliser des dispositifs optoélectroniques à grande vitesse en raison de leur temps de réponse très court de l'ordre de la femtoseconde. En plus notre étude montre que la modulation de la longueur d'onde peut être obtenue par la variation de la concentration en aluminium. Les longueurs d'onde émises par ces structures permettent d'obtenir des dispositifs très prometteurs opérant dans le domaine du moyen infrarouge.

Mots clés : Superréseau; dimer; trimer ; Matrice de transfert; laser.

Abstract

During this work, the study was focused on the optoelectronic properties of ordered and disordered superlattices (SR's) based Arсениc types (III-V). We discuss the impact of the aluminium concentration on the laser wave length and the resonant tunnelling time (RTT) of random dimer and trimer barrier $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ superlattices. Such systems consist of two different structures randomly distributed along the growth direction, with the additional constraint that the barriers of one kind appear in doubly or triply. An explicit formula is given for evaluating the transmission coefficient of (SL's) with intentional correlated disorder. The method is based on Airy function formalism and the transfer-matrix technique. The two proposed profiles improve the devices performance by increasing electron concentration, which allows us to perform high-speed optoelectronic devices due to their very short response time on the order of femtosecond. Our study shows that the modulation of the wavelength can be obtained by the variation of aluminium concentration. The obtained wavelengths of the studied structures allow to have very promising devices operating in the mid- infrared domain.

Keywords: Superlattices; dimer; trimer; Transfer-matrix; laser.

ملخص

خلال هذا العمل، تركزت الدراسة على الخصائص الالكتروضوئية للشبكات الطبقيّة المنظمة وغير المنظمة المبنية على الزرنيخ من النوع (V-III). تمت مناقشة تأثير تركيز الألومنيوم على طول موجة الليزر والوقت النفقي الرنان لمادة $GaAs/Al_xGa_{1-x}$ الثنائي والثلاثي في ارتفاع طول الحاجز. تتألف هذه النظم من هيكلين مختلفين موزعين بشكل عشوائي في ضعفين أو ثلاثة أضعاف، على طول اتجاه نمو. وقد استخدمت عدة أساليب لقياس معامل النفاذية للشبكات الطبقيّة ذات توزيع مراقب. وتستند طريقة الحساب على دالة إيرري وتقنية المصفوفة المنقولة. عن زيادة تركيز الألومنيوم، النمطين المقترحين لهذه الدراسة يكونا قادرين على تحسين أداء الأجهزة القائمة على هذه الهياكل. وهذا ما يسمح بتحقيق الأجهزة البصرية الالكترونية عالية السرعة بسبب وقت استجابتها القصير جدا من رتبة فمتوثانية. بالإضافة فان هذه الدراسة تبين أن تشكيل طول موجي مرن يمكن ان يكون بتغيير تركيز الألومنيوم. الهوجات المنبعثة من هذه الهياكل تسمح بالحصول على أجهزة جد واعدة تعمل في مجال منتصف الأشعة تحت الحمراء.

الكلمات المفاتيح :

الشبكات الطبقيّة، الثنائي، الثلاثي، المصفوفة المنقولة، الليزر.

Remerciements

Tout d'abord, je remercie chaleureusement le professeur **Bentata Samir** pour m'avoir accueilli au sein du laboratoire « Technologie et propriétés des solides » à l'université de Mostaganem et assuré la direction de cette thèse. Ses conseils en extrême rigueur et ses intuitions sur ce travail ont été précieux, ils ont porté leurs fruits. Merci pour tout.

Je suis particulièrement honoré par la présence de monsieur **Aibout Abdellah**, professeur à l'université Abdelhamid Ibn Badis de Mostaganem qui a bien accepté de présider ce jury de thèse. Un grand merci pour lui.

Mes vifs remerciements s'adressent à monsieur **Ait Kaci Hocine** professeur à l'université Mohamed Boudiaf d'Oran pour l'intérêt qu'il a porté à ce travail et d'avoir accepté d'examiner ce travail.

J'exprime également toute ma gratitude à madame **Hamdeche fatima**, professeur à l'université Mohamed Boudiaf d'Oran pour sa disponibilité et d'avoir accepté de faire partie du jury de cette thèse. J'associe à mes remerciements l'ensemble des membres de l'équipe du laboratoire, enseignants et doctorants en particulier monsieur Djelti Redouane et monsieur azziz Zoubir pour l'ambiance chaleureuse de travail et pour nos échanges scientifiques.

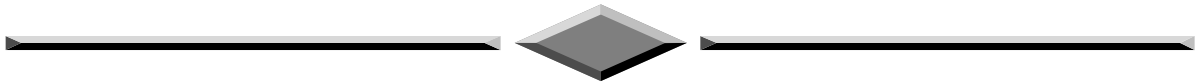
Je ne saurais oublier de remercier toutes les personnes qui me sont chères, en particulier mes collègues, mademoiselle Meghoufel Zahira et Madame Cherid Samira, pour l'aide, la confiance et le soutien dont elles ont fait preuve tout au long de ces dernières années.

Sommaire

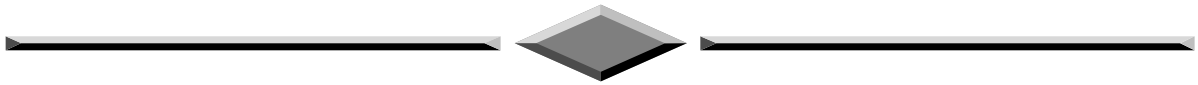
Introduction.....	1
Références	4
Chapitre 1: Superréseaux à base de semiconducteurs	5
1.1 Généralités sur les semi-conducteurs	6
1.1.1 Historique	6
1.1.2 Définition	6
1.1.3 Notion de dopage	7
1.1.3.1 Semi-conducteur dopé n.....	7
1.1.3.2 Semi-conducteur dopé p.....	7
1.1.3.3 Technologies de dopage dans la microélectronique.....	7
1.1.4 Structure de bande.....	8
1.1.4.1 Notion de gap direct et gap indirect	11
1.1.5 Masse effective des porteurs de charge.....	12
1.1.6 Semi-conducteurs GaAs et AlGaAs.....	12
1.1.6.1 Propriétés cristallines	12
1.1.6.2 Propriétés électroniques	13
1.1.7 Intérêt des semiconducteurs III-V	15
1.2 Superréseaux	16
1.2.1 Définition	16
1.2.2 Techniques de fabrication	17
1.2.2.1 Epitaxie par jet moléculaire.....	17
1.2.2.2 Epitaxie en phase vapeur organométalliques	20
1.2.3 Types de superréseaux	20
1.2.3.1 Superréseau à puits et à barrières rectangulaires.....	20
1.2.3.2 Superréseau à puits quantiques paraboliques	21
1.2.3.3 Superréseau à dents de scie	22
1.2.3.4 Superréseau à masse effective.....	22
1.2.3.5 Superréseau à modulation de dopage	23
1.2.4 Propriétés optoélectroniques des superréseaux.....	23
1.2.4.1 Effet tunnel.....	23
1.2.4.2 Structure de minibande	24

1.2.4.3	Transmission électronique	25
1.2.4.4	Effet laser	27
1.2.5	Lasers à superréseaux et applications.....	29
1.3	Systèmes ordonnés et désordonnés.....	30
1.3.1	Localisation d'Anderson	31
1.3.2	Système ordonné	31
1.3.3	Système désordonné.....	32
1.3.4	États électroniques dans un système ordonné et désordonné	32
1.3.5	Types de désordre.....	33
1.3.5.1	Désordre spatial.....	33
1.3.5.2	Désordre structural	33
1.3.5.3	Désordre compositionnel.....	33
1.3.6	Transport électronique dans les systèmes désordonnés	34
1.3.7	Critères de la localisation	35
1.3.8	Délocalisation des systèmes désordonnés	36
1.3.8.1	Constats des études expérimentales	37
1.3.8.2	Constats des études analytiques et numériques.....	37
1.4	Conclusion.....	38
	Références	39
	Chapitre 2: Formalisme et méthodes de calcul.....	44
2.1	Approximations de base	45
2.1.1	Approximations de la masse effective	45
2.1.2	Fonction enveloppe et Conditions de continuité	46
2.2	Modèles et méthodes théoriques	47
2.2.1	Calcul de la structure de minibande-Modèle de la matrice de transfert.....	48
2.2.2	Calcul du coefficient de transmission	50
2.2.2.1	Fonctions d'Airy	50
2.2.2.2	Méthode des ondes planes.....	53
2.2.3	Intérêt du coefficient de transmission	55
2.3	Logiciel Superréseaux	55
2.3.1	Principe de fonctionnement.....	55
2.3.2	Implémentation	56

2.4 Conclusion	62
Références	63
Chapitre 3: Résultats et discussions	65
3.1 Introduction	66
3.2 Superréseau ordonné	66
3.2.1 Double barrière rectangulaire	66
3.2.2 Triple barrière rectangulaire	67
3.2.3 Structure à N barrières rectangulaires	69
3.3 Superréseau à désordre structural.....	70
3.3.1 Paramétrisation.....	70
3.3.2 Dimer en hauteur de barrières (D.H.B)	71
3.3.3 Trimer en hauteur de barrières (T.H.B)	73
3.3.4 Influence des paramètres structuraux sur la transmission électronique	75
3.3.4.1 Largeur de puits.....	75
3.3.4.2 Épaisseur de la barrière	77
3.3.4.3 Hauteur de barrière.....	77
3.3.5 Exposant de Lyapunov	82
3.3.6 Influence de la tension appliquée	83
3.3.6.1 Structure ordonnée	83
3.3.6.2 Structure désordonnée en dimer et trimer	85
3.3.7 Influence de la taille du système	88
3.3.7.1 Structures ordonnées	88
3.3.7.2 Structures désordonnées	89
3.4 Superréseau à désordre spatial	91
3.4.1 Effet de l'épaisseur de barrière.....	92
3.4.2 Effet de la largeur de puits	93
3.5 Longueur d'onde laser.....	95
3.6 Temps de l'effet tunnel résonant.....	97
3.6.1 Méthode de la Lorentzienne	98
3.7 Conclusion.....	100
Références	102
Conclusion générale	104



Introduction



Les semi-conducteurs cristallisés bénéficient d'un intérêt tout particulier dans la communauté scientifique. Ce sont des matériaux à haute valeur ajoutée dont l'importance stratégique dans la technologie moderne est unanimement reconnue. Le développement des d'une variété de dispositifs basés sur les semiconducteurs cristallins - silicium et composés III-V - s'est traduit par une orientation presque exclusive des recherches sur les cristaux.

Il semble bien ainsi, dans les années 70, Esaki a réalisé la première hétérostructure de semiconducteurs, il a réussi à faire passer le monde des basses dimensionnalités d'hypothèse de théoricien à l'une des physiques les plus riches de la fin du XX^{ème} siècle. Il a ainsi pavé la route à la fabrication contrôlée de nanostructures, réalisant ainsi le fantasme de Feynman.

Cette traversée scientifique a ouvert un vaste champ de recherche sur les hétérostructures semi-conductrices [1].

Une quinzaine d'années plus tard, ces hétérostructures ont commencé à apparaître dans le marché international par le biais de leur utilisation dans l'émission et la détection du rayonnement infrarouge.

Particulièrement, les semi-conducteurs III-V à gap direct étudiés au cours de ce travail, sont devenus un élément fondamental de l'optoélectronique moderne pour la réalisation de lasers [2] et de photodétecteurs à base de puits quantiques les plus performants [3].

Par ailleurs, la plupart de ces composants optoélectroniques sont actuellement sur le marché, leur importance a été mondialement reconnue par l'attribution du prix Nobel 2000 de physique aux chercheurs Zhores Alferov et Herbert Kroemer. Aujourd'hui les semiconducteurs sont très loin d'avoir épuisé leur potentiel d'innovation et d'avoir démontré toutes leurs possibilités.

Ce développement a été en partie rendu possible grâce à l'utilisation des techniques de la croissance épitaxiale, comme l'épitaxie par jets moléculaires (EJM) ou l'épitaxie en phase vapeur sur les organométalliques (EPVOM). Ces techniques ont permis la fabrication de superréseaux constitués de l'alternance périodique des couches de deux matériaux A et B. L'introduction de cette super périodicité a entraîné l'apparition d'une très grande variété d'hétérostructures semi-conductrices à puits quantiques très performantes en termes de rendement quantiques [4].

En plus, ces puits quantiques, briques de base de ces dispositifs, se distinguent du matériau massif par leur caractère bidimensionnel et la quantification partielle des excitations électroniques induite par le confinement permet alors un contrôle des propriétés physiques

plus particulièrement optiques via des propriétés géométriques du semi-conducteur [5], ce qui constitue une véritable révolution industrielle.

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

Ces systèmes ordonnés sont un modèle fort d'application rigoureuse et simple de la théorie de Bloch, dans la description du transport électronique. 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 . La notion d'états localisés dans l'espace situés dans la bande interdite ou en bordure d'une autre bande, par opposition à celles d'états délocalisés représentent la voie prépondérante et classique de transport des électrons dans les milieux organisés.

Par contre, dans un système désordonné, les impuretés présentes à des positions aléatoires, rend difficile le déplacement des électrons. Si le désordre est plus important, la propagation de la fonction d'onde associée à l'électron forme un réseau d'interférences constructives pouvant alors piéger l'électron. Il peut ainsi exister des états électroniques localisés, malgré le fait que l'électron ne soit pas enfermé dans un puits de potentiel. On parle dans ce cas de localisation forte. Ce phénomène entraîne un problème de conduction électrique.

Il nous a semblé utile d'étudier l'effet de l'introduction du désordre dans un milieu initialement structuré sur ces états électroniques et ces bandes d'énergie. Le travail exposé dans les lignes qui suivent se résume dans l'étude des propriétés optoélectroniques d'un superréseau GaAs/Al_xGa_{1-x}As à désordre corrélé. L'étude de la transmission électronique permet de déterminer les différents états existants dans ces matériaux et prévoir la possibilité ou non de la conduction électrique.

Le matériau à base des composés III-V a été choisi grâce à sa disposition d'un large domaine d'applications optiques et son émission ou son absorption de la lumière dans un large domaine spectral débutant de l'infrarouge [8]. Parallèlement, les technologies utilisant les matériaux III-V (comme le GaAs) sont devenues matures. Ceux-ci permettent en effet une mobilité des électrons cinq fois plus grande que dans le silicium, propriété fondamentale pour la réalisation par exemple de transistors hyperfréquences pour les télécommunications à haut

débit. De plus, les matériaux III-V possèdent, contrairement au silicium, un gap direct permettant l'émission et l'absorption de photons avec des très bons rendements d'émission de photons et de conversion de photons en électrons.

Pour mener fort et bien cette étude, nous avons envisagé un contenu de trois chapitres. Le premier chapitre commence par des notions fondamentales à propos des semi-conducteurs à base des systèmes étudiés. Des généralités sur les superréseaux telles que types, propriétés électroniques et applications sont passées aussi en revue.

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

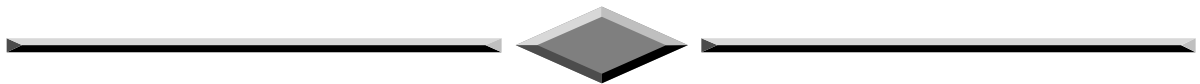
Le deuxième chapitre développe les différentes méthodes de calcul de la structure de minibande grâce au modèle de la matrice de transfert, tandis que le coefficient de transmission est déterminé à l'aide des fonctions d'Airy et la méthode des ondes planes.

Le troisième chapitre est consacré à l'étude de la nature des états électroniques dans les superréseaux à désordre corrélé. L'un des enjeux de ce chapitre est aussi de pouvoir expliquer les propriétés optoélectroniques dans un superréseau en dimer et trimer. A cet effet, plusieurs grandeurs physiques ont été déterminées telles que: la transmission électronique, l'exposant de Lyapunov, la longueur d'onde laser et le temps de l'effet tunnel résonnant.

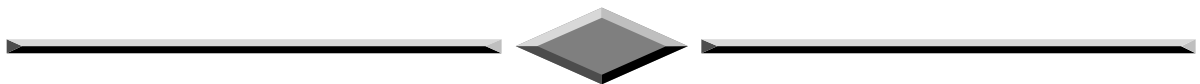
Enfin, l'ensemble de ces résultats obtenus sur les propriétés de transmission de ces structures unidimensionnels à désordre corrélé est présenté dans une conclusion générale. Finalement, ce travail a abouti à des perspectives envisagées qu'on souhaite réaliser dans un futur proche.

Références

- [1] D.P. Nguyen, Confinements non usuels dans les boites quantiques semi-conductrices. Thèse de doctorat. Année 2005.
- [2] L. Marshall, Laser Focus World **34**(7) 139-143 (1998).
- [3] R. Ignatius, M. Ignatius Laser Focus World **34**(7) 139-143(1998).
- [4] B. Salem, Spectroscopie optique des îlots quantiques d'In As/In P(001) pour la réalisation de composants optoelectroniques émettant à 1.55 μm , Institut national des sciences appliquées de LYON, (2003).
- [5] G. Renaud, Surf. Sci. Rep., 32, Nos 1 et 2, pp. 1-90, 1998.
- [6] B. Sapoval et C. Hermann, Physique des semi-conducteurs (2006).
- [7] T.N. Quang, Effet de spin dans les nanostructures semi-conductrices: modélisation et expériences de magneto-transport, Thèse, CNRS Marcoussis (2006).
- [8] Bastard G 1988 *Wave Mechanics Applied to Semiconductor Heterostructures* (Les Ulis: Les Editions de Physique).



Chapitre 1
Superréseaux à base de
semiconducteurs



1.1 Généralités sur les semi-conducteurs

1.1.1 Historique

Les premiers dispositifs industriels à base de semi-conducteurs ont été réalisés en germanium (Ge) depuis les années 50 jusqu'aux années 70. Ensuite, le secteur s'est orienté vers l'utilisation du silicium (Si) qui possède de meilleures qualités électriques, mais qui nécessite une très grande pureté monocristalline. Puis, des matériaux hybrides comme les alliages silicium/carbone (SiC) ou de façon plus importante les alliages silicium-germanium (SiGe) ont fait leur apparition ces dernières années dans le milieu industriel pour toujours améliorer les performances. Les avancées dans les techniques de dépôt de films minces ont ensuite permis le développement de matériaux artificiellement empilés présentant des propriétés physiques différentes des matériaux homogènes de départ. Les premiers superréseaux semiconducteurs ont été réalisés par Esaki et Tsu [1] et consistaient en un empilement de couches ultrafines dont la période était inférieure au libre parcours moyen des électrons. Chang et Giessen [2] ont étudié une synthèse des travaux réalisés sur les superréseaux métalliques et semiconducteurs en 1985. Les premiers superréseaux d'oxydes ferroélectriques ont été réalisés par Iijima et al. [3] au début des années 90.

1.1.2 Définition

Un semi-conducteur est un matériau dont la conductivité électrique est intermédiaire entre celle du métal et de l'isolant. Les propriétés de conduction électrique sont déterminées par deux bandes d'énergie particulières : d'une part, la bande de valence, qui correspond aux électrons impliqués dans les liaisons covalentes ; d'autre part, la bande de conduction, comprenant les électrons dans un état excité, qui peuvent se déplacer librement dans le cristal.

Les semi-conducteurs sont primordiaux en électronique, car ils offrent la possibilité de contrôler, par divers moyens, la quantité de courant électrique favorisé par deux types de porteurs : les électrons et les trous susceptibles de les traverser ainsi que la direction que peut prendre ce courant.

1.1.3 Notion de dopage

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

Le dopage d'un matériau consiste à introduire dans sa matrice des atomes d'un autre matériau. Ces atomes vont se substituer à certains atomes initiaux et ainsi introduire davantage d'électrons ou de trous. Il existe deux types de dopage (figure 1.1) [4]:

1.1.3.1 Semi-conducteur dopé n

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

1.1.3.2 Semi-conducteur dopé p

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

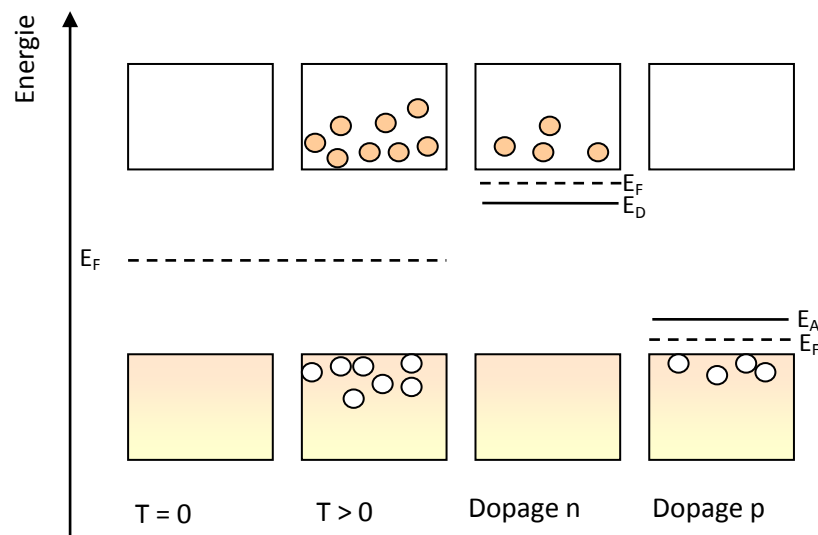


Figure 1.1: Un semi-conducteur dopé p et n.

1.1.3.3 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.

a) 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).
- 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.

b) 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 des dopages localisés avec une grande reproductibilité.

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.

1.1.4 Structure de bande

Dans un solide, l'énergie d'un électron peut avoir des valeurs comprises dans certains intervalles. On parle alors de bandes d'énergies permises. Elles sont séparées par des bandes interdites. Cette représentation en bandes d'énergie est simplifiée et partielle de la densité d'états électroniques (figure 1.2).

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

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

Le gap dépend de la température selon l'expression suivante [5]:

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

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

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

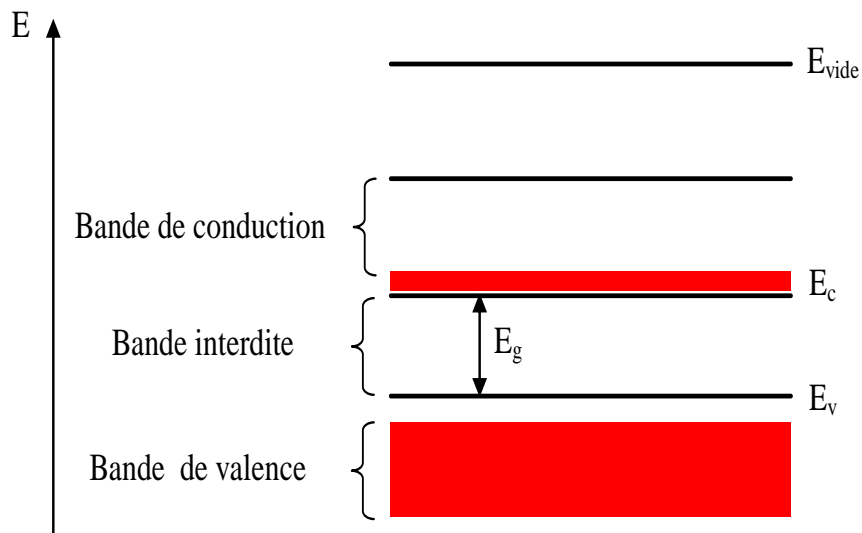


Figure 1.2: Structure de bandes d'un solide.

Au voisinage des limites E_c et E_v , respectivement de la bande de conduction et de la bande de valence, la densité d'états permis $N(E)$ peut être estimée avec l'approximation parabolique suivante [6]:

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

où K_c et K_v sont des constantes pratiquement indépendantes de la température.

Les éléments de la colonne III et ceux de la colonne V permettent de formuler des composés ternaires comme le $Ga_{1-x}Al_xAs$ qui peut être considéré comme un alliage de GaAs et AlAs. La variation de la concentration «x» change radicalement les propriétés du matériau, telles que la valeur du gap, la masse effective et son paramètre de maille.

Tableau 1.1: Principaux éléments des semi-conducteurs

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

La figure 1.3 représente les principaux matériaux disponibles pour la croissance d'un superreseau en fonction de l'énergie de bande interdite et du paramètre de maille donnant une idée des combinaisons possibles.

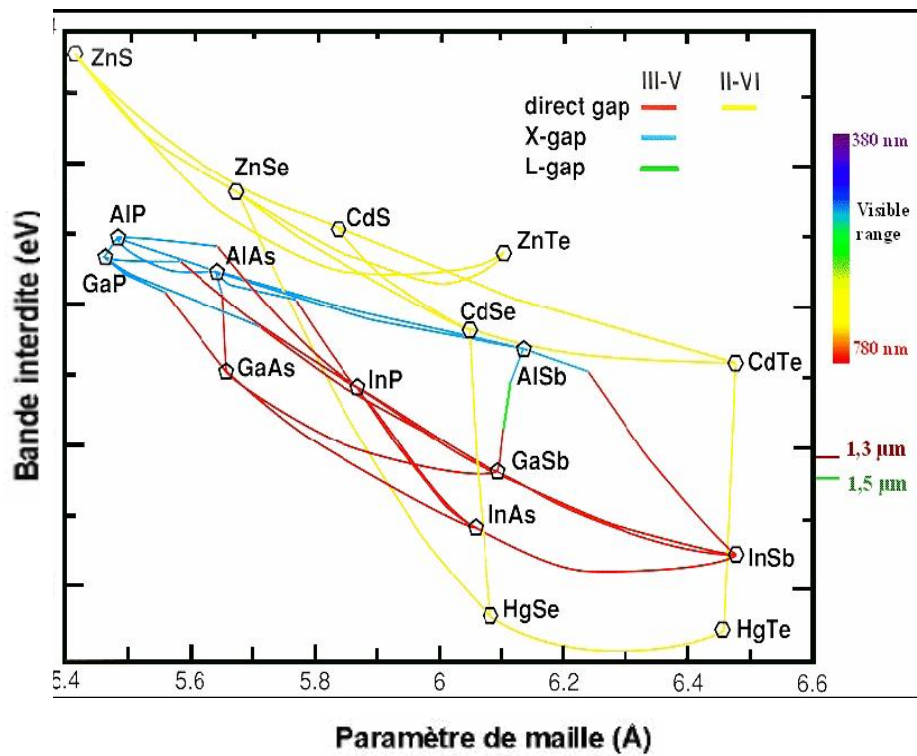


Figure 1.3: Relation entre matériaux, structure atomique, paramètres de maille et gap électronique.

Deux matériaux différents n'ont pas la même valeur énergétique de la bande interdite. Par exemple le gap dans GaAs est 1,42 eV, alors que dans $\text{Al}_{0,4}\text{Ga}_{0,6}\text{As}$, est de 2eV [7].

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

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

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

	GaAs	AlAs
Paramètre de maille (Å)	5.653	5.661
Energie de bande interdite (ev)	1.42	2.13
Masse effective de l'électron	$0.067m_0$	$0.092m_0$

1.1.4.1 Notion de gap direct et gap indirect

La notion de gap direct et indirect est liée à la représentation de la dispersion énergétique d'un semi-conducteur c.à.d diagramme E (Énergie) vs \vec{k} (Vecteur d'onde). Ce diagramme permet de définir spatialement les extremas des bandes de conduction et de valence. Ces extremas représentent, dans un semi-conducteur à l'équilibre, des domaines énergétiques où la densité de porteurs type p pour la bande de valence et type n pour la bande de conduction sont importantes [8].

a) Semi-conducteur à gap direct

Le maximum de la bande de valence et le minimum de la bande de conduction se situent à une valeur voisine du vecteur d'onde \vec{k} sur le diagramme E(k) (figure 1.4a).

b) Semi-conducteur à gap indirect

Le maximum de bande de valence et le minimum de la bande de conduction se situe à des valeurs distinctes du vecteur d'onde \vec{k} sur le diagramme E(k) (figure 1.4b).

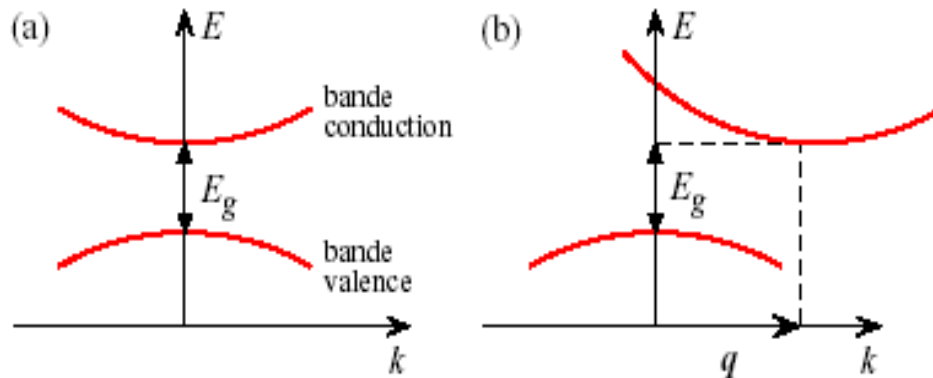


Figure 1.4: Représentation de bandes d'un semiconducteur à gap direct (a) et à gap indirect (b).

1.1.5 Masse effective des porteurs de charge

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

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

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

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

1.1.6 Semi-conducteurs GaAs et AlGaAs

1.1.6.1 Propriétés cristallines

L'arséniure de gallium possède une structure cristalline de type blende. Si l'on considère que les atomes de gallium suivent une structure de type cubique face centrée, les atomes

d'arsenic occupent quant à eux 4 des 8 sites tétraédriques de cette maille (et vice-versa) (figure 1.5).

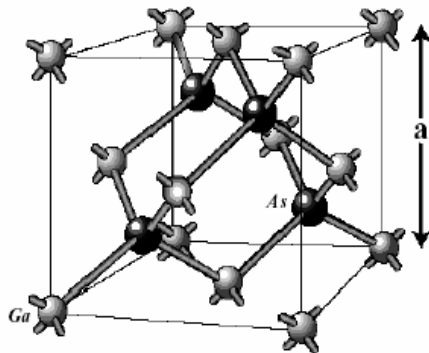


Figure 1.5: Structure du GaAs.

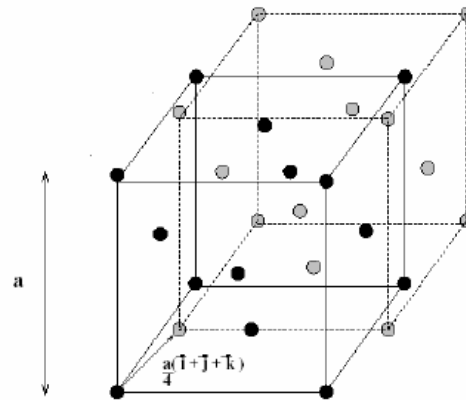


Figure 1.6: Structure d'AlGaAs.

La structure de l'alliage $Al_xGa_{1-x}As$ est formée de deux réseaux cubiques à faces centrées (CFC) décalés l'un par rapport à l'autre d'un quart de diagonale du cube (figure 1.6), les atomes d'Arsenic occupent un des réseaux CFC les atomes d'aluminium et de gallium occupent l'autre réseau. Les points noirs représentent les atomes d'arsenic, le réseau formé par les points gris est occupé par des atomes de gallium et d'aluminium. L'alliage ternaire AlGaAs est un mélange des deux composés binaires GaAs et AlAs avec une composition en aluminium variant de 0 à 1. Le paramètre de maille de l'alliage $Al_xGa_{1-x}As$ est obtenu par interpolation linéaire en utilisant les paramètres de maille de GaAs et de AlAs. Il est donné par la loi de Végard [9]:

$$a_{Al_xGa_{1-x}} = xa_{AlAs} + (1 - x)a_{GaAs} \quad (1.4)$$

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

1.1.6.2 Propriétés électroniques

La relation de dispersion $E(k)$, donnant l'énergie en fonction du vecteur d'onde, montre que contrairement au AlAs où la transition est indirecte, le GaAs est un semi-conducteur à transition directe, cela signifie que l'énergie minimale de la bande de conduction et l'énergie maximale de la bande de valence sont localisées au centre de la zone de Brillouin (figure 1.7).

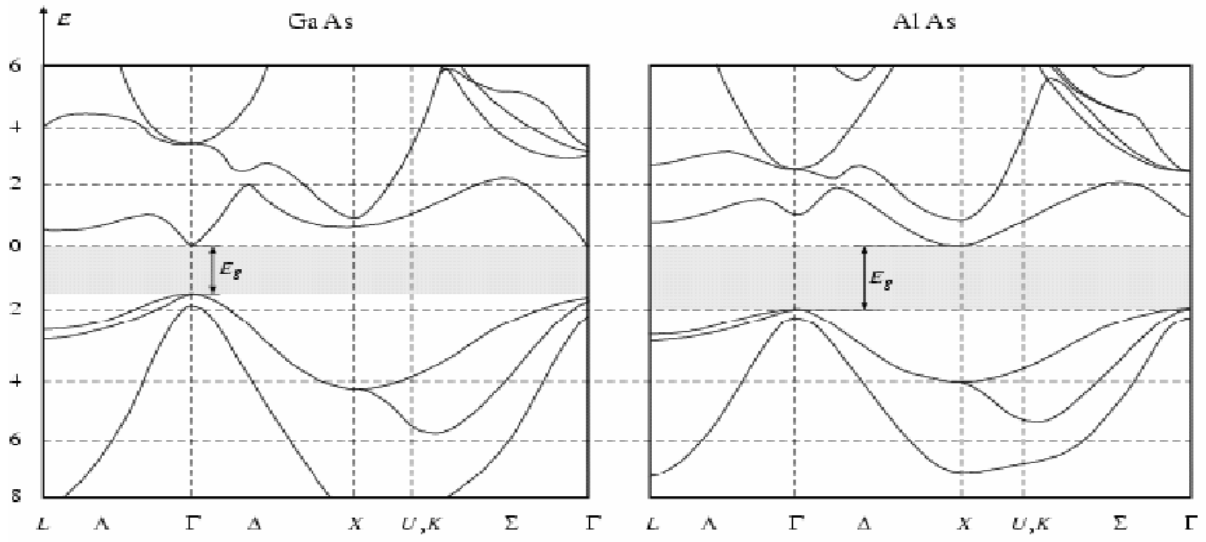


Figure 1.7: Structure des bandes du GaAs et AlAs au centre de la zone de Brillouin.

Une transition électronique entre ces deux bandes nécessite donc un changement de l'énergie, avec conservation de vecteur d'onde [10]. Pour cette raison, le GaAs se prête à la fabrication des composants optiques tels que les diodes lumineuses ou des lasers. La réalisation des puits quantiques sur GaAs peuvent émettre des longueurs d'ondes 1,3μm et 1,55μm utiles dans le domaine des télécommunications optiques [11].

La bande de conduction présente par ailleurs une courbure généralement très accentuée au voisinage de son minimum. La masse effective des électrons étant inversement proportionnelle à cette courbure, ceci explique pourquoi, dans les semi-conducteurs III-V à bande interdite directe comme GaAs, InP, AlGaAs, GaInAs, etc., la masse effective des électrons est très faible et, par conséquent, la mobilité électronique est élevée. La résistivité du GaAs peut atteindre les 108 Ωcm (résistivité du silicium 100 Ωcm) il est presque isolant et peut par conséquent servir de substrat. Son utilisation réduit sensiblement les capacités parasites, très nuisibles à haute fréquence. Le GaAs a toutefois le désavantage de ne pas posséder d'oxyde naturel, tel que le SiO₂ pour le silicium. Les propriétés du GaAs et Al_xGa_{1-x}As sont résumées dans le tableau 1.3.

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

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

Pour l'alliage $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, la nature de la transition énergétique change selon le taux d'aluminium x , où $0 < x < 1$ [12-13].

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

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

1.1.7 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 dont la largeur de bande interdite, et donc les propriétés optiques, varient dans une large gamme.

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 est 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 [14].

Dans ce travail, nous nous sommes intéressés plus particulièrement aux alliages ternaires $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ 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 V (As) mis en jeu.

1.2 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 [15]. Grâce aux travaux amorcés en 1970 de L. Esaki et R. Tsu [16] sur les couches minces semi-conductrices, l'évolution de la nanotechnologie, la recherche fondamentale et appliquée sur les hétérostructures semi-conductrices ont bien avancé.

Les puits quantiques sont les premières structures réalisées. En 1978, pour la première fois la technique du dopage sélectif a été appliquée dans les hétérojonctions GaAs/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ par Dingle et Störmer [17]. Les multipuits quantiques et l'hétérojonction à dopage modulé font l'objet de nombreuses études dans la physique mésoscopique.

1.2.1 Définition

Les superréseaux sont des empilements de couches ultrafines de semi-conducteurs alternées suivant l'axe de croissance, pouvant être aussi minces que quelques monocouches atomiques de compositions chimiques différentes. Ils peuvent être assimilés à un système périodique. La période du superréseau est égale à la somme de la largeur de puits et de l'épaisseur de la barrière (figure 1.8) [18].

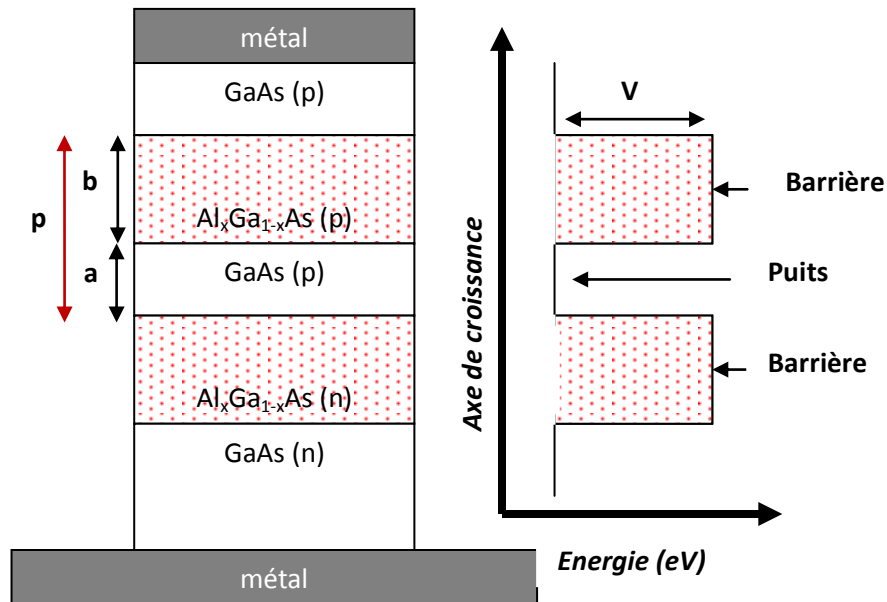


Figure 1.8: Constitution d'un superréseau GaAs / Al_x Ga_{1-x} As de période a+b

1.2.2 Techniques de fabrication

Les techniques modernes de croissance des superréseaux, à savoir l'épithaxie par jet moléculaire MBE (Molecular Beam Epitaxy) et le dépôt en phase vapeur à partir d'organométalliques MOCVD (Metal Organic Chemical Vapor Deposition), permettent de réaliser des couches de semiconducteurs exceptionnels de la composition chimique.

1.2.2.1 Epithaxie par jet moléculaire

L'épithaxie par jets moléculaires (EJM) est une technique de dépôt sous vide permettant d'obtenir des matériaux semiconducteurs avec une grande précision (composition, épaisseur) et une grande qualité structurale. L'EJM est une technique puissante tant pour la recherche que pour la production de composants de haute performance. Les matériaux produits grâce à l'EJM s'avèrent aujourd'hui indispensables à de nombreuses applications industrielles, telles que les systèmes de transfert de données à haut débit par réseau hertzien terrestre, par satellite et par réseau optique, les systèmes de défense, l'industrie automobile et l'électronique grand public (par exemple les téléphones portables, les lecteurs de CD, etc)

Cette technique dite d'«épithaxie par jets moléculaires » en anglais «molecular beam epitaxy» M.B.E. L'épithaxie est une étape technologique consistant à faire croître du cristal sur du cristal [19]. Etymologiquement, "épi" signifie "sur" et "taxis", "arrangement". La technique va donc consister à utiliser le substrat comme germe cristallin de croissance et à faire croître

la couche par un apport d'éléments constituant la nouvelle couche. La couche épitaxiée peut être dopée ou non dopée (figure 1.9).

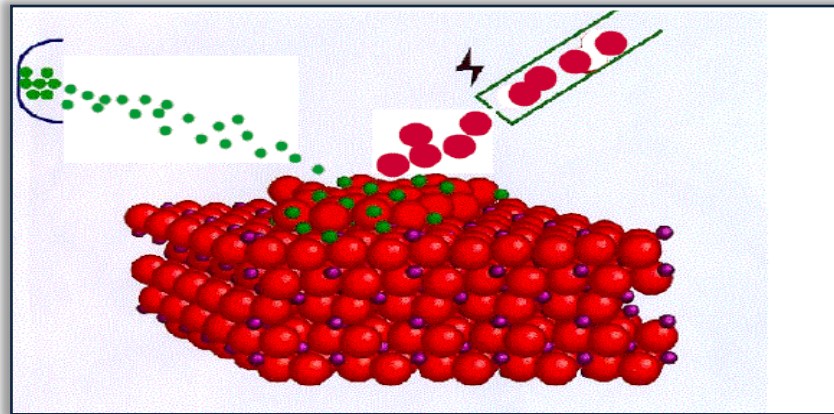


Figure 1.9: Principe d'épitaxie par jet moléculaire.

Cette technique consiste à envoyer des molécules à la surface d'un substrat dans un vide très poussé afin d'éviter tout choc ou contamination sur le parcours. Par le contrôle des cellules d'évaporation, on crée un jet de molécules en direction du substrat. On obtient ainsi une très grande précision de croissance, mais cette opération est très lente et ne concerne qu'un seul substrat à la fois. La vitesse de croissance est de l'ordre de 1 nm par minute. Cette technique est donc très coûteuse et ne concerne que des dispositifs à très forte valeur ajoutée. Ce système ultravide, 10^{-10} Torr, permet ainsi, en permanence, de vérifier la cristallinité du cristal en cours de croissance (figure 1.10).

Les multicouches peuvent être réalisées avec les épaisseurs de l'ordre de la monocouche atomique (2.8 à 2.9Å) avec des vitesses de croissance extrêmement faibles (inférieur à 100Å/min) et des températures de croissance allant de 400°C Jusqu'à 1000°C [20].

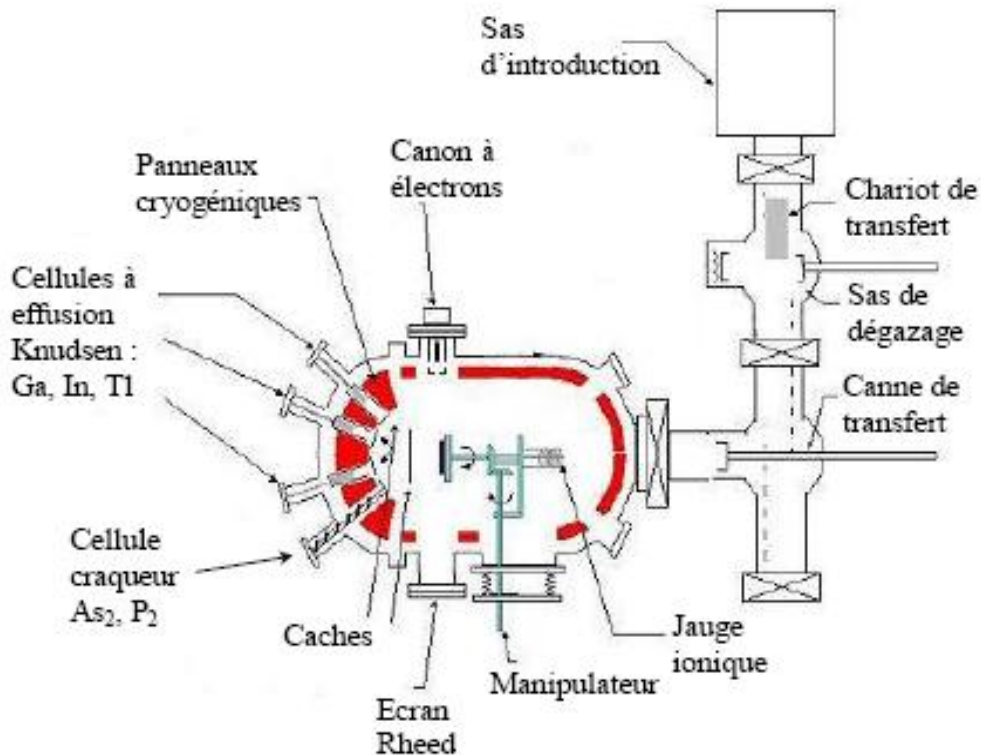


Figure 1.10: Schéma général d'un réacteur d'épitaxie

Le réacteur d'épitaxie fonctionne selon certains paramètres de croissance tels que:

- **La vitesse de croissance** est un facteur cinétique important, permettant de repousser les limites d'apparition des défauts ou de la rugosité lors de croissances à basse température. Les études précédentes menées par F. Sanchez ont montré que les faibles vitesses de croissance (inférieure à 1µm/h) favorisent l'apparition de la rugosité et du maclage.
- **La pression d'élément V** est un paramètre souvent évoqué dans la littérature comme influençant beaucoup la qualité cristalline surtout à basse température. Une augmentation de la quantité d'élément V présents en surface diminue la mobilité des différents éléments III. De plus, il y a à basse température une incorporation excédentaire de l'arsenic dans la matrice. Ces deux phénomènes peuvent introduire une augmentation de la rugosité de surface et donc favoriser l'apparition de macles.
- **La température de croissance** est également un paramètre essentiel. Lors des croissances, la mobilité des éléments sur la surface ainsi que leur coefficient de collage sont des processus activés thermiquement. Un contrôle de la température se révèle donc particulièrement primordial pour pouvoir observer les effets des différentes températures sur les mécanismes de croissance.

1.2.2.2 Epitaxie en phase vapeur organométalliques

Cette technique nommée MOCVD (Metal Organic Chemical Vapor Deposition) à injection, développée dans les années 90 au LMGP, 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 1.11 présente le schéma d'une installation de réacteur MOCVD.

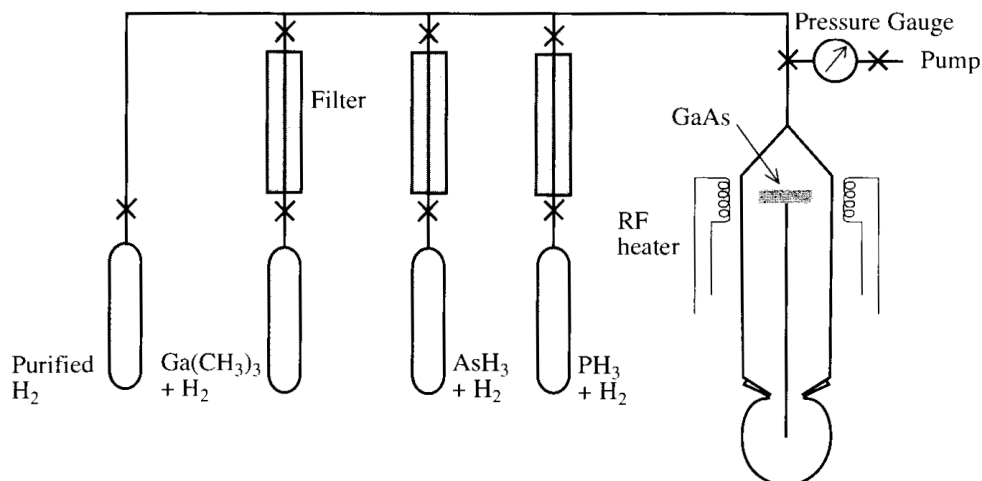


Figure 1.11: Schéma d'une installation de MOCV.

1.2.3 Types de superréseaux

1.2.3.1 Superréseau à puits et à barrières rectangulaires

Cette structure constitue la superposition de deux matériaux possédant des mailles presque idéales et de structures de bandes différentes telles que $GaAs/Al_x Ga_{1-x} As$. Ce type de superréseau constitue un élément de base dans la fabrication des diodes laser [21] et photodétecteurs (figure 1.12) [22].

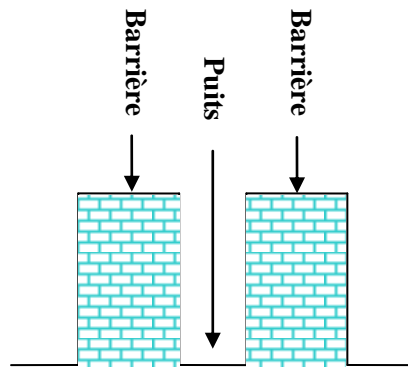


Figure 1.12: SR à puits et à barrières rectangulaires.

1.2.3.2 Superréseau à puits quantiques paraboliques

Ce type de superréseau est constitué d'un empilement de puits et de barrières rectangulaires très minces (figure 1.13). La fabrication d'un tel réseau prend en charge l'alternance entre la hauteur de la barrière et la composition du matériau [23-24]. Le transistor présenté par Capasso et al [25] est basé sur ce type de SR.

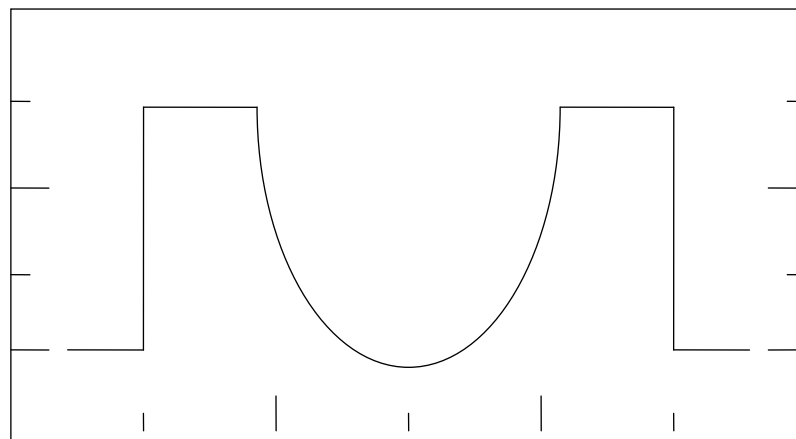


Figure 1.13: Profil de potentiel d'un SR à puits quantiques paraboliques

1.2.3.3 Superréseau à dents de scie

Cette structure est caractérisée par une variation linéaire du gap d'une valeur maximale (grand gap à une valeur minimale (petit gap) [26], elle est obtenue à partir d'une variation de la composition du matériau utilisé (figure 1.14). Ces systèmes présentent des propriétés physiques très intéressantes, ils entrent dans la réalisation des rectificateurs [27] et photomultiplicateurs [28].

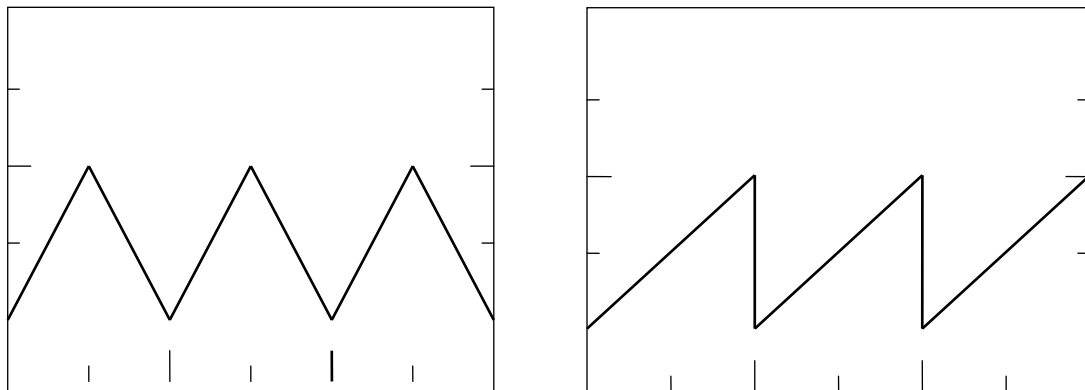


Figure 1.14: Profils de potentiel d'un SR à dents de scie

1.2.3.4 Superréseau à masse effective

Ce type de SR est théoriquement construit par une modulation périodique de la masse effective [29] (figure 1.15). Il est difficile de choisir les constituants semiconducteurs utilisés pour 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 :

$Al_{0.23}Ga_{0.3}In_{0.47}P/GaAs$, $Ga_{0.86}In_{0.14}P_{0.78}Sb_{0.22}/GaAs$ et le $Al_{0.5}In_{0.5}As_{0.49}Sb_{0.51}/GaSb$.

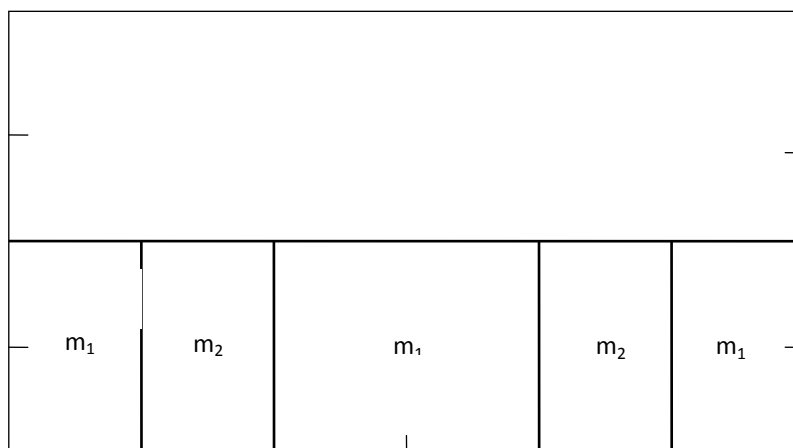


Figure 1.15: Profil de potentiel d'un SR à masse effective.

1.2.3.5 Superréseau à modulation de dopage

Ce type de superréseau est constitué d'un empilement périodique de couches alternées obtenues à partir d'un même matériau dopées différemment en n et p.

Ces types de SR, proposés par Esaki et al [30], puis sont réalisés par Ploog et al [31].

1.2.4 Propriétés optoélectroniques des superréseaux

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

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

1.2.4.1 Effet tunnel

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

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

En physique classique, si l'énergie communiquée à une particule est insuffisante, elle ne peut pas franchir la barrière de potentiel dont la hauteur V_0 est supérieure à son énergie et retombe vers son point de départ. En physique quantique on décrit la particule par une énergie E dont la fonction d'onde est ψ . La particule peut franchir la barrière, même si son énergie initiale E est inférieure à V_0 (figure 1.16). Elle peut passer de l'autre côté comme par un petit tunnel [32]. Donc la probabilité de retrouver la particule de l'autre côté n'est pas nulle.

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: $R + T = 1$.

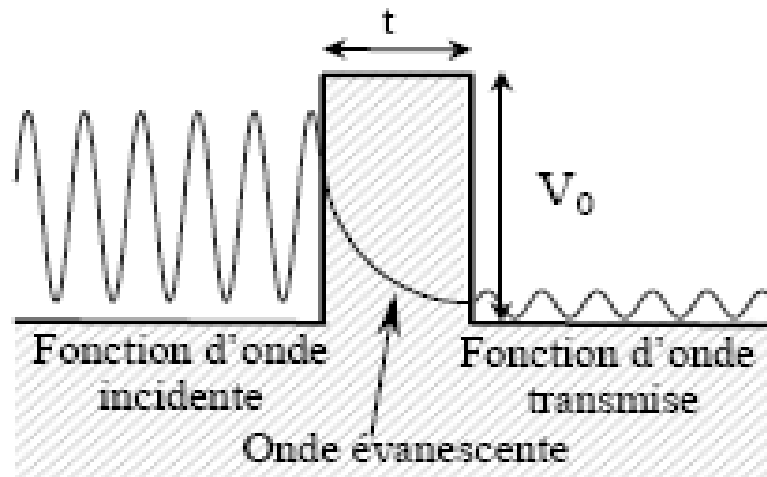


Figure 1.16: Transmission tunnel d'une particule quantique à travers d'une barrière de potentiel.

1.2.4.2 Structure de minibande

L'effet tunnel transforme les niveaux d'énergie discrets occupés par les électrons de la bande de conduction (ou les trous de la bande de valence) en intervalles continus d'énergies appelés structure de minibandes (figure 1.17) [33].

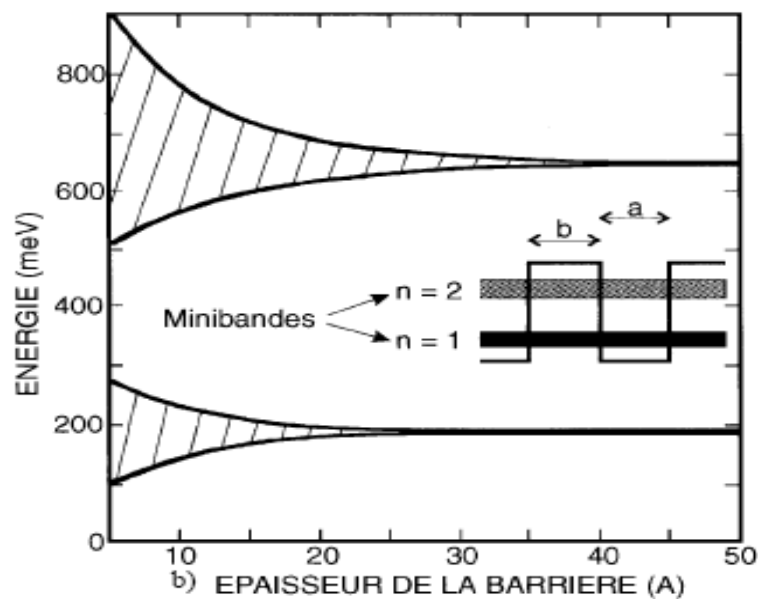


Figure 1.17: Schéma d'une structure de minibandes

Ces minibandes sont à peu près centrées sur les niveaux discrets d'énergies existant. La largeur de la minibande de transmission dépend principalement de la somme des épaisseurs des puits et des barrières (la superpériode). Cette largeur mesure le couplage entre puits, considéré comme la plus importante caractéristique d'un superréseau.

Dans le cas du GaAs /AlAs:

le couplage est fort, si $\Delta E = 5 \text{ meV}$ [34]

le couplage est faible, si $\Delta E = 0.4 \text{ meV}$ [35]

La structure complète de bandes d'un 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 super-réseau est déjà assez fortement absorbant, il est donc entendu que les caractéristiques données ici se réfèrent aux minibandes fondamentales de conduction et de valence.

1.2.4.3 Transmission électronique

Le coefficient de transmission est donné soit par le module du rapport du courant de probabilité de l'onde transmise sur le courant de probabilité de l'onde incidente [36-37]:

$$T = \left| \frac{J_t}{J_i} \right| \quad (1.5)$$

Soit par les amplitudes des ondes incidentes et transmises:

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

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

La détermination de la fonction d'onde ψ de l'électron soumis a une barrière de potentiel passe par la résolution de l'équation de Schrödinger stationnaire [38]:

$$H\psi = E\psi \quad (1.7)$$

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

$$T = \frac{4E\phi}{4E\phi + (E + \phi)^2 \sinh(kd)^2} \quad (1.8)$$

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 se mener de façon analytique, mais pour d'autres formes de potentiel, ce n'est pas toujours possible.

Différentes méthodes permettant de calculer numériquement le coefficient de transmission existent dans la littérature [39]. Citons par exemple la méthode des matrices de transfert [40-41] et la méthode WKB [42-43].

- **Approche au modèle unidimensionnel**

Ce modèle décrit simplement la fonction de transfert, $T(E)$, d'une particule de fonction d'onde ψ à travers une barrière de potentiel. La figure 1.18 représente l'onde incidente ψ_G et l'onde transmise ψ_D . La résolution de l'équation de Schrödinger [44] fait apparaître deux ondes progressives (milieux 1 et 2) et une onde évanescente à l'intérieur de la barrière de potentiel. A l'aide des conditions de continuité, on peut déterminer le coefficient de transmission du milieu 1 au milieu 2.

$$T(E) = \left| \frac{\psi_D}{\psi_G} \right| \approx \frac{16E(V - E)}{V_a^2} \exp \left[-2 \frac{\sqrt{2m(V - E)}}{\hbar} d \right] \quad (1.9)$$

Lors de l'application de la tension V_a , un courant tunnel, qui lui est proportionnel [45], apparaît entre les deux électrodes :

$$I_t \propto V_a \exp[-2\gamma - d] \quad \text{Où} \quad \gamma \propto \left(\frac{\phi_1 + \phi_2}{2} \right) \quad (1.10)$$

L'équation 1.10 montre que le courant tunnel varie de manière proportionnelle avec la tension appliquée et il décroît exponentiellement avec la distance d . C'est cette dernière caractéristique qui est à l'origine des très hautes résolutions obtenues en microscopie STM.

La microscopie à effet tunnel (Scanning Tunneling Microscopy S.T.M) est une technique de caractérisation de surfaces métalliques et/ou semi-conductrices récente. Même si l'effet tunnel est connu depuis 1930 [46], on doit la réalisation du premier STM à Binnig et Rohrer [47-48] en 1981 (Prix Nobel de physique en 1986).

1.2.4.4 Effet laser

- **Diode laser et principe de fonctionnement**

Une diode laser est un composant opto-électronique à base de matériaux semi-conducteurs. Elle est utilisée pour réaliser l'effet laser, conçue pour la première fois en 1962 [49-50], et devenue un dispositif très important avec des différents types en 1994 [51-52].

La figure 1.18 représente la structure d'une diode laser à base GaAs. Les dimensions de la couche active de type p sont: 200 μm de longueur, 2 à 10 μm de largeur et 0.1 μm d'épaisseur. est prise en sandwich entre deux couches de $\text{Ga}_{0,7}\text{Al}_{0,3}\text{As}$, dopées respectivement n et p. Ce sandwich confine dans la région active, à la fois les électrons et les photons.

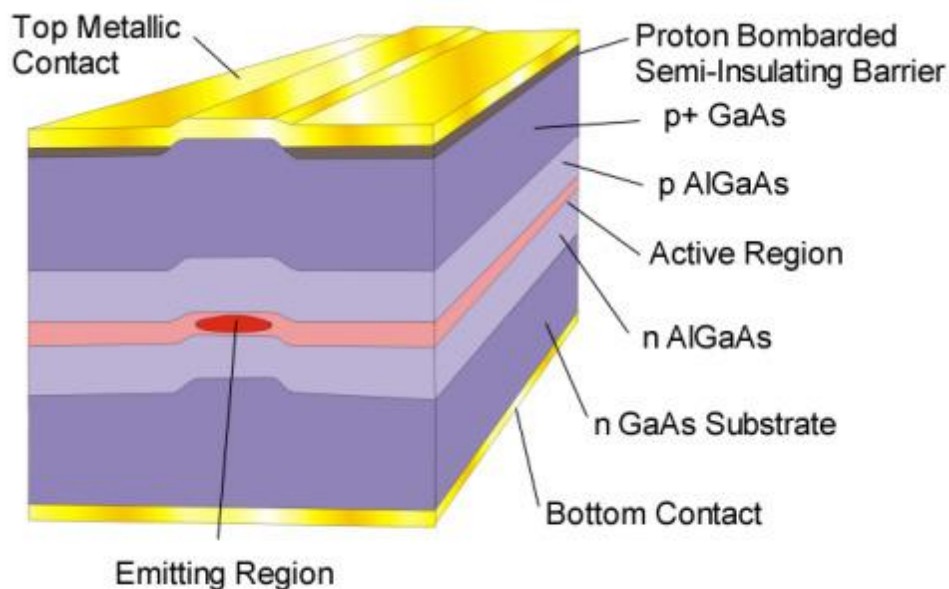


Figure 1.18: Représentation d'une diode Laser à base de GaAs.

Les photons sont confinés dans la couche active de GaAs (p) par la différence d'indices existant entre GaAs et AlGaAs. Les réflexions totales à l'interface des deux matériaux évitent l'étalement des photons dans le GaAlAs. Les électrons sont confinés dans la couche active en raison de la différence de gap qui existe entre $\text{Ga}_{0,7}\text{Al}_{0,3}\text{As}$ ($E_g \approx 1,9 \text{ eV}$) et GaAs ($E_g \approx 1,4$

eV). Les deux couches de GaAlAs constituent des barrières de potentiel qui empêchent les électrons et les trous de diffuser au-delà du GaAs.

Les lasers à semi-conducteurs sont des diodes qui émettent une lumière cohérente par émission stimulée (figure 1.19). Ils consistent dans une jonction p-n, composée d'éléments semi-conducteurs III-V de type GaAs dont les dimensions sont inférieures, en général, à 1mm.

- **Absorption**

L'électron initialement sur le niveau inférieur E_1 passe sur le niveau supérieur E_2 après avoir absorbé un photon d'énergie (Figure 1.25)

$$h\nu = E_2 - E_1 \quad (1.11)$$

- **Emission**

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

- 1) **Emission spontanée:**

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

- 2) **Emission stimulée:**

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

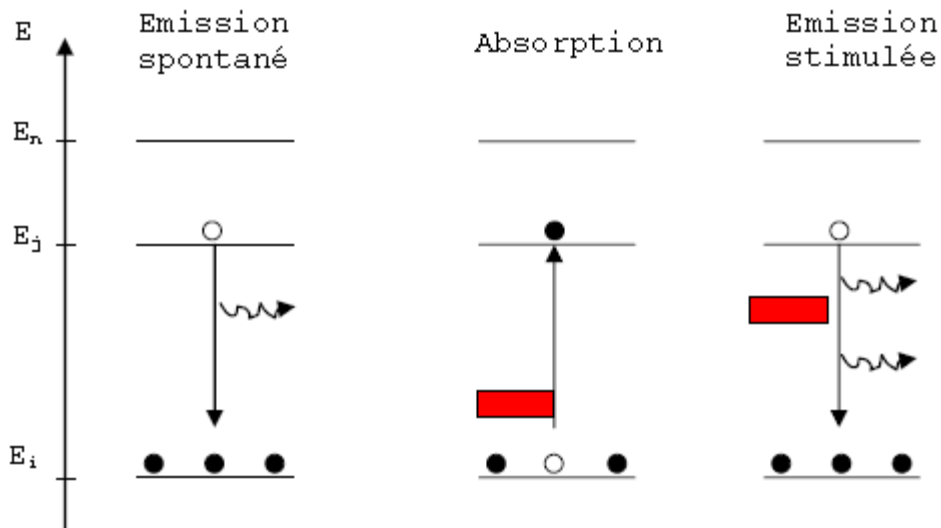


Figure 1.19: Principe de l'effet laser.

1.2.5 Lasers à superréseaux et applications

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...) [53].

L'idée ingénieuse de l'inversement de population a permis l'élaboration d'un dispositif laser à base de SR, de 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 lasers remonte à 1971, quand Kazarinov et al [54] ont présenté une étude théorique sur le processus de génération et d'amplification de la lumière infrarouge dans les SRs à semiconducteurs.

Avec le développement des techniques de croissance des monocristaux telles que la MBE et la MOCVD, plusieurs efforts ont été consacrés à leurs réalisations. Après, quelques applications ont suivi, telles que l'étude des modulateurs de lumière infrarouge, des détecteurs infrarouges [55-57] et des diodes lasers [58-60].

En 1991 Yang et al. [61] 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. [62], 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 .

Les lasers à superréseaux avec leur lumière magique ont trouvé de multiples applications dans notre vie quotidienne. Ces diodes laser sont largement utilisées dans les télécommunications car elles sont facilement modulées et deviennent des sources lumineuses couplées pour la réalisation des fibres optiques de communication. Des diodes laser infrarouge et rouge sont courantes dans les lecteurs de CD, DVD, HD-DVD, disques Blu-ray et code-barres [63]. 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.

Ils sont utilisés pour produire des impulsions de la lumière qui se déplace par laser pour relier les réseaux d'ordinateurs ensemble. Les imprimantes laser utilisent des diodes laser pour créer les charges statiques qui attirent les particules de toner à imprimer leurs tambours. Les pointeurs laser sont utilisés dans des dispositifs qui mesurent les distances et le contrôle des niveaux dans le domaine militaire. Les plus puissantes diodes laser sont utilisées en médecine pour les affections ophtalmologiques et en chirurgie cérébrale précisément pour brûler les tissus. A l'industrie, les lasers sont utilisés dans le traitement des matériaux (soudure, perçage, découpage, gravure....) [64].

1.3 Systèmes ordonnés et désordonnés

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

Les systèmes désordonnés sont des systèmes à différentes variables qui évoluent avec des échelles de temps différentes. Un exemple est celui des électrons qui se déplacent dans un milieu avec des impuretés à des positions aléatoires dans le matériau. Cela a l'air d'être un problème académique mais en fait, c'est le problème de la conduction de l'électricité, de la loi d'Ohm. On sait quand on fait passer du courant à l'intérieur d'un conducteur, qu'il y a une certaine résistance, mais si on essaye de comprendre cette résistance à partir des interactions microscopiques entre les atomes, c'est une affaire beaucoup plus compliquée qui demande des outils théoriques beaucoup plus approfondis [65].

1.3.1 Localisation d'Anderson

En 1958, Anderson [66] ouvrit tout un champ de recherche en montrant que les ondes associées à des électrons soumis à un potentiel aléatoire décrivant leur interaction avec un milieu désordonné, ne se propageaient plus d'une région quelconque de l'espace à une autre, mais sous certaines conditions, elles demeuraient localisées dans une région finie de l'espace [67].

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

Cette idée de la localisation a eu des répercussions dans des domaines variés comme pour le transport radiatif, la sismologie, la physique atomique qui en sont quelques exemples. Cette approche a initié une nouvelle physique mésoscopique, qui a permis la découverte de phénomènes nouveaux tels que la rétrodiffusion cohérente, la localisation faible, les fluctuations universelles de conductance, etc. Cela a ouvert aussi les portes d'une physique des ondes en milieu désordonné très riche [68] avec des applications concrètes actuelles dans de nombreux domaines concernant entre autres les télécommunications, l'acoustique sous-marine, les atomes froids ou encore l'imagerie médicale [69].

1.3.2 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.

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

$$\Phi(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\vec{r}} u(\vec{r}) \quad (1.12)$$

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

Les états de Bloch sont dits des états étendus (figure 1.20), car la probabilité de trouver un électron de Bloch dans un site i du réseau est identique à celle dans n'importe quelle autre position équivalente dans un site j .

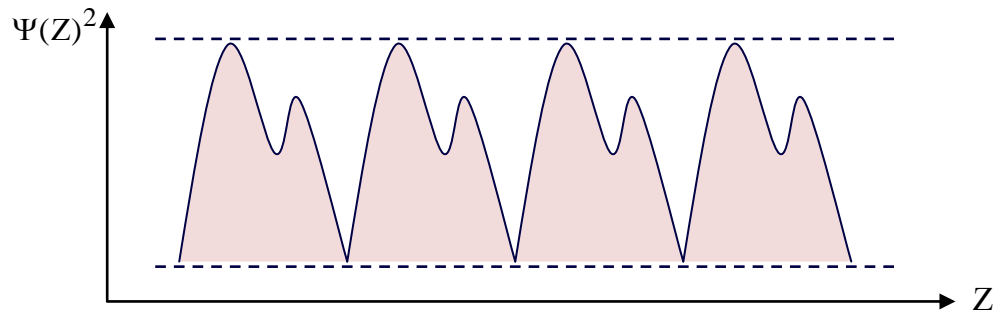


Figure 1.20: Représentation d'état étendu de Bloch d'un système ordonné.

1.3.3 Système désordonné

Si le désordre est plus important, la propagation de la fonction d'onde associée à l'électron forme un réseau d'interférence particulièrement complexe. Des interférences constructives peuvent alors piéger l'électron. Il peut ainsi exister des états électroniques localisés, malgré le fait que l'électron ne soit pas enfermé dans un puits de potentiel. On parle dans ce cas de localisation forte (figure 1.21).

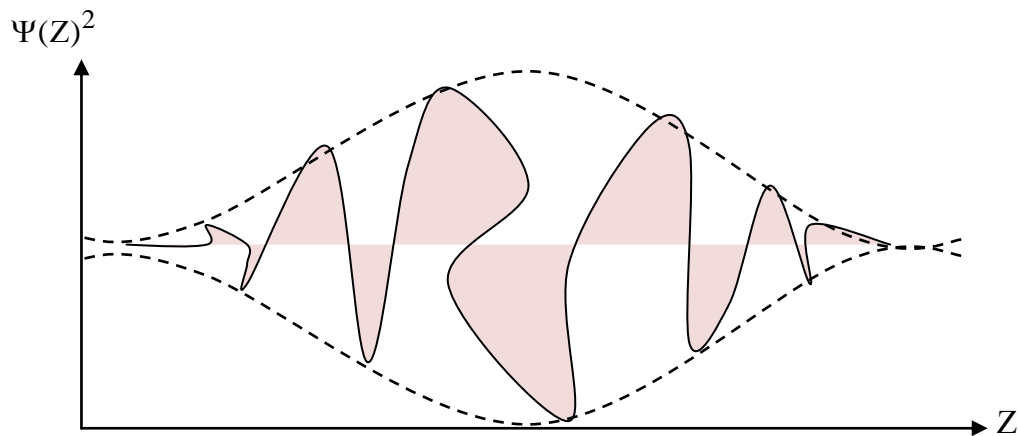


Figure 1.21: Représentation d'état localisé d'un système totalement désordonné.

1.3.4 États électroniques dans un système ordonné et désordonné

Dans un système ordonné périodique parfait les états électroniques sont étendus de Bloch, par contre dans un système désordonné caractérisé par des défauts la propagation de l'onde associée à un électron forme des interférences destructives et rend les états électroniques fortement localisés c'est ce qu'on appelle la localisation d'Anderson (figure 1.22).

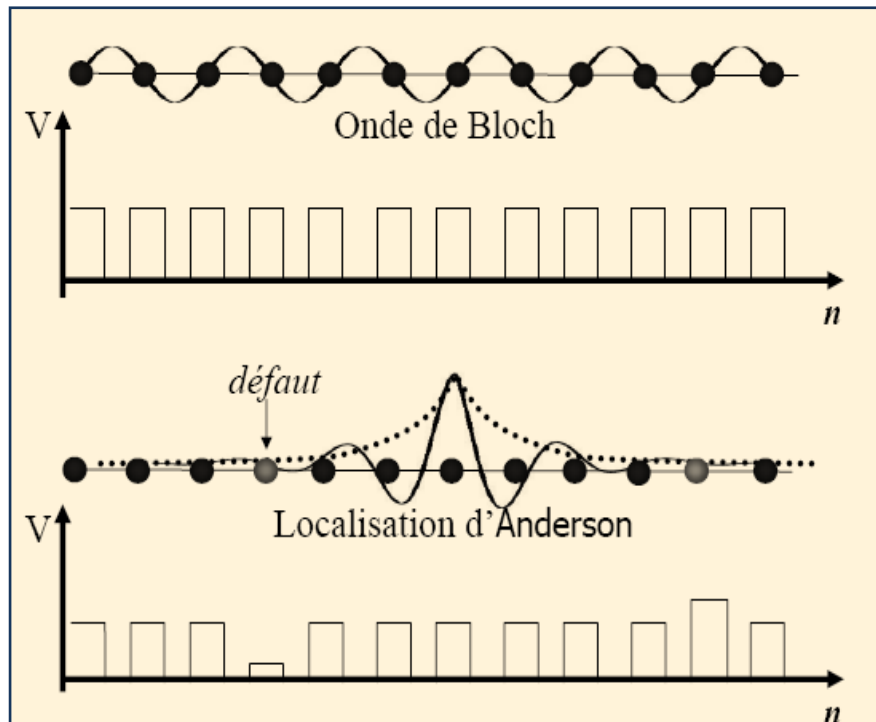


Figure 1.22: État étendu de Bloch et état localisée d'Anderson.

1.3.5 Types de désordre

Dans les matériaux, on distingue les types de désordre suivants :

1.3.5.1 Désordre spatial

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

1.3.5.2 Désordre structural

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

1.3.5.3 Désordre compositionnel

Les alliages sont obtenus à partir de la distribution aléatoire de plusieurs types d'atomes sur un réseau.

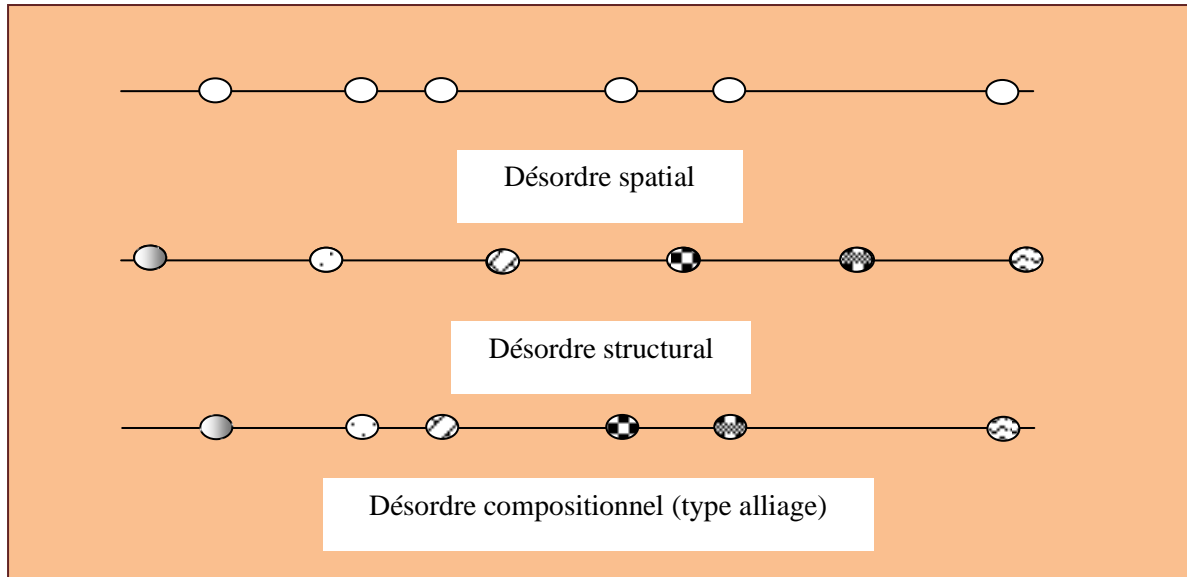


Figure 1.23: Types de désordre dans un système unidimensionnel

1.3.6 Transport électronique dans les systèmes désordonnés

Pour les électrons dans un métal, Anderson et Mott se sont basés sur le phénomène de la localisation pour expliquer la transition métal-isolant dans les métaux désordonnés tridimensionnels [70].

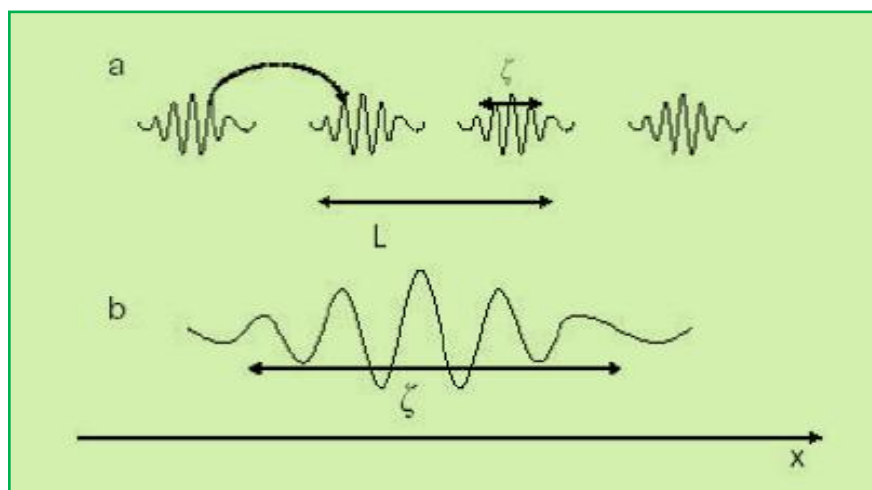


Figure 1.24: (a) Localisation forte, lorsque la longueur de la localisation ξ est plus petite que la taille de l'échantillon L . La conduction se fait par sauts entre différents états localisés. (b) Régime délocalisé.

En comparant la taille de l'échantillon L à la longueur de localisation ξ on peut différencier deux régimes dépendant du niveau de désordre (figure 1.24):

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

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

$$g(L) = \alpha e^{-\frac{L}{\xi}} \quad (1.13)$$

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

1.3.7 Critères de la localisation

Le travail remarquable de P. Anderson en 1958 [66], montre que la fonction d'onde d'un électron dans un réseau unidimensionnel non périodique ne peut pas être du type fonction de Bloch. Elle reste donc limitée dans l'espace (localisation d'Anderson).

Mott et al en 1968 [71], dans une étude sur la localisation dans les semi-conducteurs amorphes, ont proposé le concept de front de mobilité, une énergie séparant les états électroniques localisés des états étendus, ainsi à la température nulle, la conductivité s'annule à partir d'un certain degré de désordre rendant le système isolant (figure 1.25).

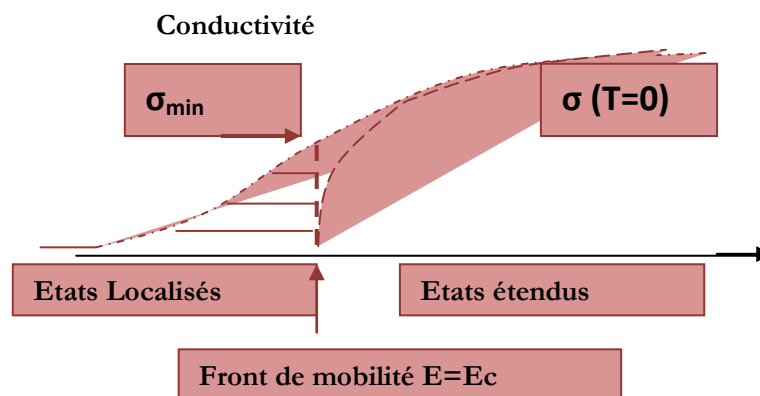


Figure 1.25: Schéma représentant la notion de front de mobilité

En 1970 Landauer [72] avança l'idée que le transport dans les solides, à très basse température, où les événements inélastiques sont très rares, peut être conçu comme un

problème de diffusion élastique des électrons de conduction. Cette idée lui a permis alors d'exprimer la conductance G , d'un fil unidimensionnel en fonction des coefficients de transmission T , et de réflexion R .

$$G = \frac{2e^2}{h} \frac{T}{R} \quad (1.14)$$

En 1970 Thouless et al [73] ont montré en effet que pour les systèmes unidimensionnels, il existe un paramètre unique qui contrôle le comportement du système quand il change de taille, c'est sa conductance G .

Deux limites sont exposées :

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

$$G(L) = \frac{n_s e^2 \tau}{m^* L^{d-2}} \quad (1.15)$$

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

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

$$g(L) = e^{\frac{L}{\xi}} \quad (1.16)$$

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

1.3.8 Délocalisation des systèmes désordonnés

Depuis le travail remarquable d'Anderson, l'échelle des grandeurs physiques telles que la conductance ou la résistance souffrent de troubles dans les systèmes électroniques dans la limite de basse température [74]. Ces systèmes mésoscopiques, contenant environ 10^{19} objets élémentaires comme des électrons ou des atomes, on s'attend à être prometteuses dans la prochaine génération des dispositifs électroniques. Dans ce contexte, de manière surprenante, l'évolution récente est de souligner la possibilité de suppression la localisation dans les systèmes unidimensionnels désordonnés induite par la non-linéarité [75], la corrélation spatiale particulière dans le désordre [76-77] ou des interactions à longue distance [78].

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 respectivement les modèles mathématiques des liaisons fortes et de Kronig-Penney. Une simulation numérique dans le dernier cas permettra de décrire les réponses de transmission conventionnelles dans le modèle du dimer aléatoires.

Les études expérimentale, analytiques et numériques 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.

1.3.8.1 Constats des études expérimentales

Les études et les résultats expérimentaux restent toujours très limités devant les recherches théoriques, ceci est dû à la complication des expériences ce qui mène toujours à des résultats approximatifs ou faux. Des résultats expérimentaux [79] indiquent qu'une corrélation dans le désordre conduit à l'existence d'états délocalisés par simple distribution des éléments constituant le superréseau.

Les superréseaux de types GaAs-Al_{0.3}Ga_{0.7}As de semi-conducteur désordonnés intentionnellement avec ou sans corrélation du désordre, ont été étudiés expérimentalement par Bellami et al [80]. Ils ont déterminé les propriétés structurales de ce système par diffraction aux rayons X et ses états électroniques par spectroscopie photovoltaïque. Ces derniers ont été comparés à la suite d'un calcul théorique basé sur le coefficient de transmission et la structure de minibande. Ils ont noté que la probabilité de la délocalisation au niveau du désordre n'est pas nulle, ce qui en accord avec les travaux théoriques de Dominguez et al [81-84].

1.3.8.2 Constats des études théoriques et numériques

Dominguez et al [85] ont démontré théoriquement et numériquement dans une série d'articles, l'existence d'un ensemble d'états prolongés pour des systèmes unidimensionnel désordonnés.

S.Bentata [86], T.Hakobyan et al [87], I.Gomez et al [88] A.Parisini [89] et R.Djelti [90] ont étudié numériquement l'influence du désordre corrélé sur les propriétés de transport dans des superréseaux GaAs-Al_xGa_{1-x}As. Ils ont pris au hasard une concentration x en aluminium à deux valeurs différentes, avec la condition que l'une d'entre elles apparaît

seulement en doublet (dimer). Les états électroniques du SR ont été étudiés par le calcul théorique du coefficient de transmission de la structure de minibande. Ils ont observé que le processus de la délocalisation existe quand le désordre est corrélé [91].

Les énergies des états délocalisés peuvent être changées par la variation des paramètres appropriés du système étudié pour les puits et barrières. Au moyen du formalisme de la matrice de transfert [92-94] et du modèle de Kronig Penny [95], Plusieurs grandeurs physiques ont été calculées telles que la conductance, la fluctuation universelle de la conductance, la longueur de localisation, la résistance et sa probabilité de distribution [96-97].

1.4 Conclusion

Dans ce chapitre nous avons présenté d'un part, des rappels sur les semi-conducteurs III-V qui sont la base des hétéro-structures étudiées. D'autre part, nous avons donné un aperçu sur les caractéristiques spécifiques et les propriétés physiques des superréseaux. 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 des couches monocristallines de matériaux semiconducteurs. 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.

Nous avons mis en évidence dans ce chapitre, une synthèse concernant les états électroniques des systèmes ordonnés et désordonnés. Il y a autant de définitions et d'approches établies dans différentes publications, les manipulations sont difficiles à réaliser et sont toujours contestées. Les études théoriques sont triviales, déjà contenues dans le papier d'Anderson en 1958 ou bien soit trop compliquées pour comprendre les expériences.

Références

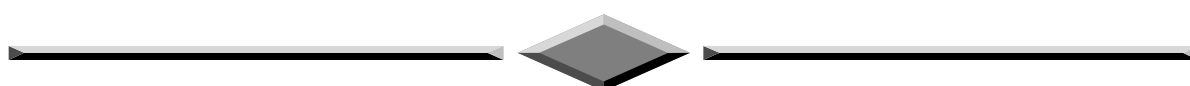
- [1] L. Esaki and R. Tsu, IBM J. Res. Develop. **14**, 61(1970).
- [2] L. L. Chang and B. C. Giessen, "Synthetic Modulated Structures" edited by I. Academic Press, (1985).
- [3] K. Iijima, T. Terashima, Y. Bando, K. Kamigaki and H. Terauchi, App Phys. **72**.. 2840-2845 (1992).
- [4] A.Beiser, Physique Appliquée Cours et Problèmes. McGrawHill, série Schaum (1987).
- [5] S.M.SZE, Physics of Semiconductor Devices, John Wiley &Son (1981).
- [6] H.Mathieu, Physique des semi-conducteurs et composants électroniques, edt Masson(1996).
- [7] S.M.SZE, Physics of Semiconductor Devices, John Wiley &Sons, (1981).
- [8] O.Bonnaud, physique des solides, des semiconducteurs et dispositifs (2003).
- [9] S.Tiwari, D.J.Frank, Appl.phys.Lett, **60**(5), (1992).
- [10] M Levinshtein, M Shur, Semiconductor parameters. Volume II Ternary and quaternary III-V compounds. Edit. (1998).
- [11] Vurgaftman (I.), Felix (C.L.), Bewley (W.W.), Stokes (D.W.), Bartolo (R.E.) Meyer (J.R.), « Mid-infrared W lasers », Phil. Trans. Roy. Soc. Lond. A **359**, p. 489, (2001).
- [12] S.Adachi, J.Appl.phys **58**(3), (1985).
- [13] Thèse Rachid KHLIL, Université de Reims Champagne-Ardenne, P45-47, (2005).
- [14] J. H. Davies. The physics of low-dimensional semiconductors, Cambridge University Press, (1998).
- [15] D. W. M. DuMond and J. P. Youtz. App. Phys. **11**, 357 (1940).
- [16] H.Mathieu, Physique des semiconducteurs et des composants électroniques, edt Masson (1987).
- [17] D.P. Nguyen, Confinements non usuels dans les boites quantiques semi-conductrices.Thèse de doctorat. Année 2005.
- [18] L. Esaki, R. Tsu, IBM J. Res. Dev. 14 (1970) 61.
- [19] F.Rinaldi, Annual Report, Optoelectronics Department, University of Ulm (2002).
- [20] D.V.Morgan and K.Boar, "An introduction to semiconductor technology", 2nd edition, John Wiley & sons, (1990).
- [21] R.Q.Yang and J.M.Xu, App.Phys.Lett. **59**, 181 (1991).
- [22] A. Fiore, E. Rosencher, P. Bois, J. Nagle and N. Laurent App.Phys.Lett. **64**, 478 (1994).

- [23] R. C. Miller, A. C. Grossard, D. A. Kleiman, and O. Munteana, *Phys. Rev. B* **29**, 3740 (1984).
- [24] S. Sen, F. Capasso, A. C. Grossard, R. A. Spah, A. L. Hutchinson, and S. N. G. Chu, *App. Phys. Lett.* **51**, 1428 (1987).
- [25] F. Capasso and A. Kiehl, *J. App. Phys.* **58**, 1366 (1985)
- [26] J.A.Brum, P.Voisin and G.Bastard, *Phys.Rev.B* **33**, 1063 (1986).
- [27] C.L.Allyn, A.C.Gossard and W.Wiegmann, *App.Phys.Lett.* **36**, 373(1980).
- [28] F.Capasso, W.T.Sang, and G.F.Williams, *IEEE, Trans.Electron. Devices* **30**, 381 (1983).
- [29] A. K. Sasaki, *Phys. Rev. B* **30**, 7016 (1984).
- [30] L. Esaki and R. Tsu, *IBM J. Res. Note, Rc*, 2418 (1969). H. C. Casey Jr. And M. B Panis «Heterostructure Laser » (Bell Laboratories, Murray Hill, New Jersey) Part A, B (Academic, Press) (1978).
- [31] K. Ploog, A. Fisher, and H. Kunzel, *J. Electrochem. Soc.* **1281**, 400 (1981).
- [32] G.Binning, H.Rohrer, C.Gerber, et al., *Physical ReviewLetters* **49**, 57 (1982).
- [33] H. T. Grahn, H. Shneider, and K. V. Klitzing, *Phys. Rev. B* **41**, 2890 (1990).
- [34] L. Esaki and L. L. Chang, *Phys. Rev. Lett.* **33**, 493 (1974).
- [35] K. K. Choi and B. F. Levine, *Phys. Rev. B* **35**, 4172 (1987).
- [36] C.C.Tannoudji, B.Diu, and F.Laloe.« Mécanique quantique» volume I, P32-40, Hermann, Paris, (1996)
- [37] E.Merzbacher. « Quantum Mechanics », Joh, Wiley et Sons, 3rd édition, P 92-112 (1998)/11
- [38] E.O.Kane. Basic concept of tunnelling, *Tunnelling phenomena in solids*, P1-12. Plenum Press,(1969).
- [39] C.B.Duke. Tunnelling in solids. *Solid state physics. Academic Press*, New York, (1969).
- [40] A.K.Ghatak, K.Thyagarajan, and M.R.Shenoy. *IEEEJ.Quant.Elect*, **24**(8), P1524-1531, (1988).
- [41] B.Jonsson and T.Sverre. *IEEE J. Quant.Elect*, **26**(11),P 2025-2035,(1990)
- [42] E.Merzbacher. « Quantum Mechanics », P113-134. *Joh, Wiley et Sons, 3rd édition*, (1998).
- [43] A.Messaiah. *Mecanique Quantique*, volume I, P194-203.Dunod, (1965).
- [44] C.Cohen-Tannoudji, B.Diu and F.Laloë, *Mécanique quantique*, Paris,(1980).
- [45] J.G.Simmons, *Journal of Applied Physics* **34**, 1793 (1963).

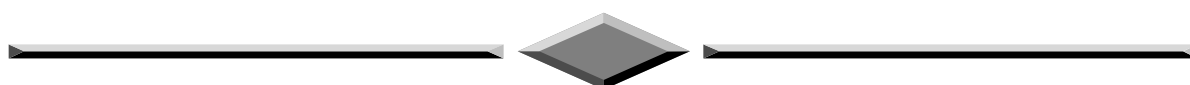
- [46] J.Frenkel, *Physical Review* **36**, 1604 (1930).
- [47] G.Binning and H.Rohrer, *Helvetica Physica Acta* **55**,726 (1982).
- [48] G.Binning, H.Rohrer, C.Gerber, et al., *App Phys Letters* **40**, 178(1982).
- [49] Dupuis R.D, *IEEE J.Quantum Electron.*, QE-**23**, 651-657, (1987).
- [50] Redike R.H., *IEEE J.Quantum Electron.*, QE-**23**,692-695,(1987).
- [51] Anderson S.G., *Laser Focus World*, **30**, 62-76, (1994).
- [52] N.L.Thomas, R.Houdré, M.V.Kotlyar, D.O'Brien, and T.F.Krauss
J.Opt.Soc.Am.B **24**, No.12 (2007).
- [53] G. Brassart, J. L. Meyzonnette et J. P. Pocholle, « Sources laser », Tech. Ing. E 4020
(1996)
- [54] R. F. Kazarinov and R. A. Suris, *Sov. Semicond.* 5, 707 (1971); 6, 120 (1972).
- [55] S. Smith, L. C. Chiu, S. Margalit, A. Yariv, and A. Y. Cho, *J. Vac. Sci. Technol. B* 1,
376 (1983).
- [56] D. Coon and R. P. G. Karunasiri, *App. Phys. Lett.* 45, 649 (1984).
- [57] B. F. Levin, K. K. Choi, C. G. Bethea, J. Walker, and R. J. Malik, *App. Phys. Lett.* 50,
1092 (1987).
- [58] F. Capasso, K. Mohammed, and A. Y Cho, *App. Phys. Lett.* 48, 478 (1986).
- [59] P. F. Yuh and K. L. Wang, *App. Phys. Lett.* 51, 1404 (1987).
- [60] H. C. Liu, *J. App. Phys.* 63, 2856 (1988).
- [61] R. Q.Yang and J. M. Xu, *App. Phys. Lett.* 59, 181 (1991).
- [62] M. Sweeny and J. M. Xu, *App. Phys. Lett.* 54, 546 (1989).
- [63] Robert V. Steele, « Diode-laser market grows at a slower rate », dans *Laser
Focus World*, vol. 41, n° 2, 2005.
- [64] Kathy Kincade, Stephen Anderson, « Laser Marketplace 2005: Consumer
applications boost laser sales 10% », dans *Laser Focus World*, vol. 41, n° 1,
2005.
- [65] P. Sheng, *Introduction to Wave Scattering, Localization, and Mesoscopic Phenomena*
(Springer, New York, 2006).
- [66] P.W.Anderson. Absence of diffusion in certain random latticies. *Physical Review*, 109,
page 1492, March 1958.
- [67] P. W. Anderson, *Phys. Rev.* **B23**, 4828 (1981).
- [68] P.Sebbah, editor. *Waves and Imaging through Complex Media*. Kluwer Academic
Publishers, 2001. (2006).

- [69] S. KAWKA. Modélisation de la localisation faible et forte dans une géométrie confinée, (2006).
- [70] K.Byczuk, W.Hofstetter, and D.Vollhardt, Phys.Rev.Lett. **94** 056404 (2005).
- [71] N.F.Mott, J.Non.Crystal.Solids **1** 1 (1968).
- [72] R.Landauer, Philos. Mag. **21** 863 (1970).
- [73] D.J.Thouless. Physics Reports, **13** P 93,(1974).
- [74] For a review see M. Janseen, Phys. Rep. 295 (1998) 1.
- [75] Yu.S. Kivshar, S.A. Gredeskul, A. S´anchez, L. V´azquez, Phys. Rev. Lett. 64 (1990).
- [76] D. Dunlap, H.L.Wu, P. Phillips, Phys. Rev. Lett. 65 (1990) 88.
- [77] F.A.B.F.Moura, M.M. Lyra, Phys. Rev. Lett. 81 (1998) 3735.
- [78] A. Rodr´ıguez, V.A. Malyshev, F. Dom´ınguez-Adame, J. Phys. A: Math. Gen. 33 (2000).
- [79] Xiaoshuang Chen Physics Letters A **257** 317–324 (1999).
- [80] V.Bellani, E.Diez, A.Parisini, L.Tarricone, R.Hey, G.B. Parravicini, F.Dominguez-Adame Physic E 7 823-826(2000).
- [81] A.Sachez, E.Macia and F.Dominguez-Adame, Phys.Rev B **49**, 147 (1994).
- [82] F.Dominguez-Adame, A.Sachez and E.Diez, Phys.Rev B **50**, 17736 (1994).
- [83] E.Macia and F.Dominguez-Adame, Phys.Rev.Lett.**76**,2957 (1996).
- [84] G.P.Berman, F.Dominguez-Adame and A.Sachez, Phys.D **107**, 166 (1997).
- [85] F.Dominguez-Adame, I.Gomez,A.Avakyan,D.Sedrakyan,A.Sedrakyan, *Physica status solidi B*. vol.221, no2, P 633-639 (2000).
- [86] S.Bentata, Superlattices and Microstructures **37** 292–303(2005).
- [87] T.Hakobyan, D.Sedrakyan, A.Sedrakyan, I.G´omez And F.Dom´ınguez.Adame, Phys.Rev B **61**, 11432-11436 (2000).
- [88] I.Gomez, F.Dominguez-Adame, E.Diez Physica **B 324** 235–239 (2002).
- [89] A.Parisini, L.Tarricone, V.Bellani, G.B.Parravicini, E.Diez, F.Dom´ınguez- Adame, and R.Hey Phys.Rev B **63**, 165321 (2001).
- [90] Djelti.R, Bentata.S, Aziz.Z «Nature des ´etats Electroniques des superréseaux (Type Dimer/Trimer) d´esordonn´es en hauteur de barriere » Lebanese Science journal, vol.8, N° 01, (2007).
- [91] V. Bellani, E. Diez, R. Hey, L. Toni, L. Tarricone, G. B. Parravicini, F. Dominguez-Adame, and R. Gomez-Alcala, Phys. Rev. Lett. **82**, 2159 (1999).
- [92] M. O. Vassel, J. Lee, and H. F. Lockwood, J. Appl. Phys. **54**, 5206 (1983).

- [93] S. S. Allen and S. L. Richardson, J. Appl. Phys. **79**, 886 (1996).
- [94] Y. Guo, B. L. Gu, Z. Q. Li, and Y. Kawazoe, Eur. Phys. J. **B3**, 257 (1998).
- [95] R. de Kronig and W. G. Penney, Proc. R. Soc. **A130**, 499 (1931).
- [96] F. A. B. de Mora and M. L. Lyra, Phys. Rev. Lett. **81**, 3735 (1998); Physica **A26** (1999).
- [97] F. M. Izrailev and A. A. Krokhin, Phys. Rev. Lett. **82**, 4062 (1999).



Chapitre 2
Formalisme et méthodes de calcul



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

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

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

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

2.1 Approximations de base

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

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

2.1.1 Approximations de la masse effective

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

$$H = \frac{-\hbar^2}{2m_0} \Delta + V(\vec{r}) + W(\vec{r}) \quad (2.1)$$

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

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

$$m_{ij}^{*-1} = \frac{1}{\hbar^2} \left. \frac{\partial^2 E(\vec{k})}{\partial k_i \partial k_j} \right|_{\vec{k}_0} \quad (2.2)$$

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

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

2.1.2 Fonction enveloppe et conditions de continuité

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

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

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

$$f(z^-) = f(z^+) \quad (2.3.a)$$

$$(1/m_a) \frac{\partial}{\partial z} f(z^-) = (1/m_b) \frac{\partial}{\partial z} f(z^+) \quad (2.3.b)$$

avec la relation (2.3.b) basée sur l'hypothèse physique de la continuité du flux du courant $j(z)$.

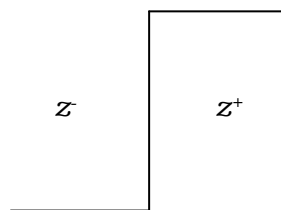


Figure 2.1: Interface abrupte

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

$$u_A(\vec{r}_0) \approx u_B(\vec{r}_0) \quad (2.4)$$

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

2.2 Modèles et méthodes théoriques

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

$$\frac{1}{m^*(z)} \frac{\partial^2}{\partial z^2} \cdot \psi(z) + \frac{2}{\hbar^2} [E - V(z)] \cdot \psi(z) = 0 \quad (2.5)$$

Le profil $V(z)$ est considéré comme l'énergie du minimum de la bande de conduction par rapport à une origine supposée prise au niveau de la BC du matériau jouant le rôle du puits (figure 2.2).

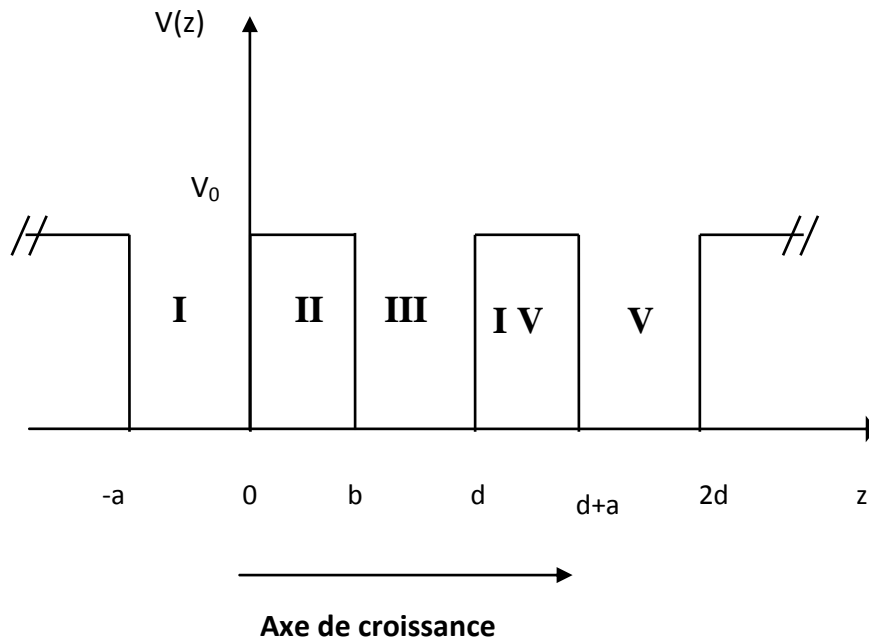


Figure 2.2: Profil de potentiel d'un SR à puits et barrières rectangulaires.

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

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

Cette dernière est appliquée à différents profils de potentiel.

2.2.1 Calcul de la structure de minibande-Modèle de la matrice de transfert

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

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

$$\begin{pmatrix} \psi(0) \\ \frac{1}{m_a} \nabla \psi_a(0) \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} \psi(0) \\ \frac{1}{m_b} \nabla \psi_b(0) \end{pmatrix} \quad (2.6)$$

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

La résolution de l'équation (2.5) donne les fonctions enveloppes dans chaque région (figure 2.3):

Région (I) : $V(z) = 0 ; m^*(z) = m_a$ (2.7)

$$\psi_I(z) = A e^{ik_1 z} + B e^{-ik_1 z} \quad (2.8)$$

Région (II): $V(z) = V_0 ; m^*(z) = m_b$ (2.9)

$$\psi_I(z) = C e^{ik_2 z} + D e^{-ik_2 z} \quad (2.10)$$

Région (III) : $V(z) = 0 ; m^*(z) = m_a$ (2.11)

$$\psi_I(z) = E e^{ik_1 z} + F e^{-ik_1 z} \quad (2.12)$$

Avec

$$k_1 = \sqrt{\frac{2m_a E}{\hbar^2}} \quad \text{et} \quad k_2 = \sqrt{\frac{2m_b(E - V_0)}{\hbar^2}} \quad (2.13)$$

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

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

En $z=0$

$$\psi_I(0) = \psi_{II}(0) \quad (2.14)$$

$$\frac{1}{m_a} \psi'_I(z)|_{z=0} = \frac{1}{m_b} \psi'_{II}(z)|_{z=0} \quad (2.15)$$

impliquent:

$$S_I(0) \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = S_{II}(0) \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} \quad (2.16)$$

Avec

$$S_I(z) = \begin{pmatrix} e^{ik_1 z} & e^{-ik_1 z} \\ \frac{ik_1}{m_a} e^{ik_1 z} & -\frac{ik_1}{m_a} e^{-ik_1 z} \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad S_{II}(z) = \begin{pmatrix} e^{ik_2 z} & e^{-ik_2 z} \\ \frac{ik_2}{m_b} e^{ik_2 z} & -\frac{ik_2}{m_b} e^{-ik_2 z} \end{pmatrix} \quad (2.17)$$

$$\text{D'où} \quad \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = S_I^{-1}(0) S_{II}(0) \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} \quad (2.18)$$

En $z=b$ le résultat obtenu est similaire

$$\begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} = S_{II}^{-1}(b) S_{II}(b) \begin{pmatrix} E \\ F \end{pmatrix} \quad (2.19)$$

En remplaçant (2.19) dans (2.18), l'expression devient

$$\begin{pmatrix} E \\ F \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} \quad (2.20)$$

Avec

$$M = S_{II}^{-1}(b) S_{II}(b) S_I^{-1}(0) S_{II}(0) \quad (2.21)$$

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

2.2.2 Calcul du coefficient de transmission

Pour calculer le coefficient de transmission T d'un superréseau double barrière rectangulaire soumis à une tension extérieure V_a (figure 2.3), l'équation de Schrödinger est résolue d'une façon exacte en utilisant les fonctions d'Airy et d'une manière approchée par la méthode des ondes planes.

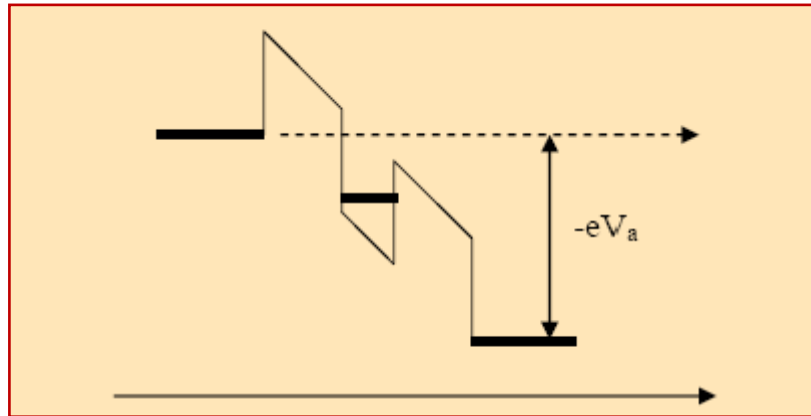


Figure 2.3: Structure d'une double barrière soumise à une tension extérieure V_a .

2.2.2.1 Fonction d'Airy

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

$$\frac{1}{m^*(z)} \frac{\partial}{\partial z} \cdot \psi(z) + \frac{2}{\hbar^2} [E - V(z)] \cdot \psi(z) = 0 \quad (2.22)$$

Les solutions de l'équation (2.22) dans chaque région du potentiel sont données par les relations suivantes:

Région (I): $V(z) = 0$ et $m^*(z) = m_a$ (2.23)

$$\psi_I(z) = 1 e^{ikz} + R e^{-ikz} \quad (2.24)$$

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

Région (II): $V(z) = V_0 - \frac{eV_a}{L} z$ et $m^*(z) = m_b$ (2.25)

Soit le changement de variable,

$$\rho(z) = \left(\frac{2em_b V_a}{L\hbar^2} \right)^{1/3} \left(\frac{V_0 - E}{eV_a / L} - z \right) = Z(\eta - z) \quad (2.26)$$

L'équation (2.22) devient,

$$\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} \Psi_2(\rho) - \rho \Psi_2(\rho) = 0 \quad (2.27)$$

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

$$\psi_2(\rho) = C_2^+ A_i(\rho) + C_2^- B_i(\rho) \quad (2.28)$$

Où A_i et B_i représentent les fonctions d'Airy.

Région (III):

$$V(z) = -\frac{eV_a}{L}(z+b) \quad \text{et} \quad m^*(z) = m_a \quad (2.29)$$

En effectuant ce changement de variable

$$\rho'(z) = \left(\frac{2em_a V_a}{L\hbar^2} \right)^{1/3} \left(-\frac{beV_a - E}{eV_a / L} - z \right) = Z'(\eta' - z) \quad (2.30)$$

La résolution de l'équation (2.22) dans cette région est formulée par

$$\Psi_2(\rho) = C_3^+ A_i(\rho') + C_3^- B_i(\rho') \quad (2.31)$$

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

Région (IV)

$$V(z) = 0 \quad \text{et} \quad m^*(z) = m_a \quad (2.32)$$

$$\psi_5(z) = 0 e^{-i\kappa z} + \tau e^{i\kappa z} \quad (2.33)$$

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

La première amplitude dans la relation (2.33) est nulle, car la particule est supposée venir de $z = -\infty$.

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

$$\begin{pmatrix} 1 \\ R \end{pmatrix} = -\frac{m_a}{2ik} \begin{pmatrix} -\frac{ik}{m_a} & -1 \\ -\frac{ik}{m_a} & 1 \end{pmatrix} S(O,l) \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ \frac{ik'}{m_a} & -\frac{ik'}{m_a} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tau \\ 0 \end{pmatrix} \quad (2.34)$$

Avec
$$S(O,l) = S_p(0) S_p^{-1}(b) \cdot S_b(0) S_b^{-1}(a) \cdot S_p(0) S_p^{-1}(b) \quad (2.35)$$

Où
$$S_p(\rho) = \begin{pmatrix} A_i(\rho) & B_i(\rho) \\ \frac{A'_i(\rho)}{m_b} & \frac{B'_i(\rho)}{m_b} \end{pmatrix} \text{ et } S_b(\rho') = \begin{pmatrix} A_i(\rho') & B_i(\rho') \\ \frac{A'_i(\rho')}{m_a} & \frac{B'_i(\rho')}{m_a} \end{pmatrix} \quad (2.36)$$

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

$$\begin{pmatrix} 1 \\ R \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} \tau \\ 0 \end{pmatrix} \quad (2.37)$$

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

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

$$T = \frac{k'}{k} \tau^* \tau \text{ avec } \tau = \frac{1}{M_{11}} \quad (2.38)$$

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

$$M_{11} = \frac{1}{2} \left[\left(A + \frac{k'}{k} D \right) + i \left(\frac{k' B}{m_a} - \frac{C m_a}{k} \right) \right] \quad (2.39)$$

$$\text{Avec } T = \frac{\left(4 \frac{k'}{k}\right)}{\left(A + \frac{k'}{k} D\right)^2 + \left(\frac{k'B}{m_a} - \frac{Cm_a}{k}\right)^2} \quad (2.40)$$

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

2.2.2.2 Méthode des ondes planes

La méthode des ondes planes permet de donner des solutions approchées à l'équation de Schrödinger pour un profil de potentiel arbitraire. Soit $V(z)$ un profil arbitraire d'une structure connectée à un émetteur et un collecteur dont une tension V_a leur est appliquée. Le profil arbitraire est décomposé en n paliers équidistants de largeur l . Chaque palier j est caractérisé par une hauteur V_j , une masse effective m_j de l'électron et une fonction d'onde ψ_j (figure 2.4):

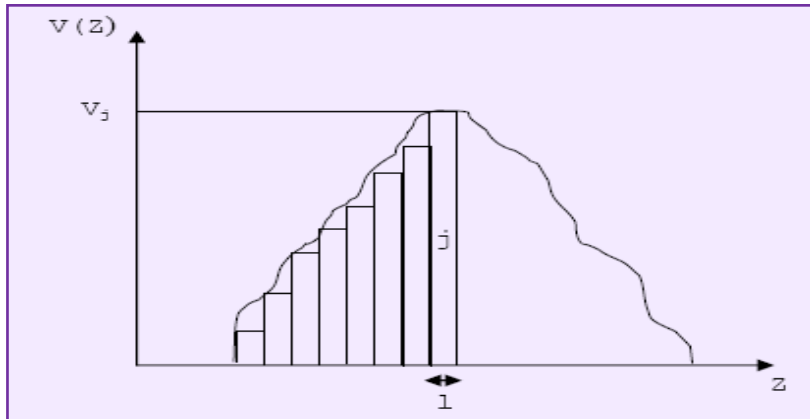


Figure 2.4: Profil arbitraire

$$V(Z) \equiv V_j = V \left[\frac{Z_{j-1} + Z_j}{2} \right] ; m(Z) \equiv m_j = m \left[\frac{Z_{j-1} + Z_j}{2} \right] \quad (2.41)$$

et

$$\psi_j(Z) = A_j \exp(iK_j Z) + B_j \exp(-iK_j Z) \quad (2.42)$$

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

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

$$\begin{pmatrix} 1 \\ R \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} \tau \\ 0 \end{pmatrix} \quad (2.43)$$

$$M = \frac{m_a}{2iK} \begin{bmatrix} \frac{iK}{m_a} & 1 \\ \frac{iK}{m_a} & 1 \end{bmatrix} S(0, L) \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ \frac{1}{m_a} & \frac{1}{m_a} \end{bmatrix} \quad (2.44)$$

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

$$S(0, L) = \prod_{j=0}^n D_j(L) = \begin{bmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{bmatrix} \quad (2.45)$$

avec

$$D_j(l) = \begin{bmatrix} \cos[K_j l] & -\frac{m_j}{K_j} \sin[K_j l] \\ \frac{K_j}{m_j} \sin[K_j l] & \cos[K_j l] \end{bmatrix} \quad \text{Pour } E - V_j \geq 0 \quad (2.46)$$

et

$$D_j(l) = \begin{bmatrix} ch[\rho_j l] & -\frac{m_j}{\rho_j} sh[\rho_j l] \\ \frac{\rho_j}{m_j} sh[\rho_j l] & ch[\rho_j l] \end{bmatrix} \quad \text{Pour } E - V_j < 0 \quad (2.47)$$

tel que

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

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

$$T = \frac{\left(4 \frac{K'}{K}\right)}{\left(S_{11} + \frac{K'}{K} S_{22}\right)^2 + \left(\frac{K'}{m_a} S_{12} - \frac{m_a}{K} S_{21}\right)^2} \quad (2.48)$$

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

2.2.3 Intérêt du coefficient de transmission

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

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

2.3 Logiciel Superréseaux

2.3.1 Principe de fonctionnement

Ce logiciel permet l'étude de quelques types de superréseaux qui sont:

- Les systèmes ordonnés ;
- Les systèmes désordonnés ;
- Les systèmes quasipériodiques ;
- Les systèmes quasipériodiques dimer et trimer.

D'une façon générale le fonctionnement du logiciel se fait suivant les étapes suivantes :

Etape 1 : Introduire les paramètres caractérisant la (les) structure(s) à étudier.

Etape 2 : En utilisant les paramètres, on bâtit une ou plusieurs structures selon le choix de l'utilisateur qui peut être :

- Structure Ordonnée ;
- Structure Quasipériodique ;
- Structure Désordonnée : en introduisant le désordre aléatoire, une structure désordonnée peut être bâtit à partir d'une structure ordonnée ;
- Structure Quasipériodique dimer (ou trimer) : celle ci peut être construite à partir d'une structure quasipériodiques, dont le désordre est introduit selon les séquences de la série de Fibonacci.

Etape 3 :

Calcul : autres choix doivent être sélectionnés avant de lancer le calcul, on donnera plus de détails dans la partie **Implémentation**.

Etape 4 :

Traduire les résultats numériques obtenus dans l'*étape 3* à des résultats graphiques (courbes).

2.3.2 Implémentation

Le prototype de logiciel est constitué d'une fenêtre principale comportant une barre de menu, une boite de saisi associée à une liste déroulante. L'utilisateur peut sélectionner un élément de la liste ou entrer directement une valeur dans la boite de saisie, et trois boutons traduisant les types de fonctionnement du logiciel. Il peut effectuer les traitements désirés en sélectionnant l'un des trois boutons ou un élément du menu.

Cette fenêtre est illustrée dans la figure suivante :

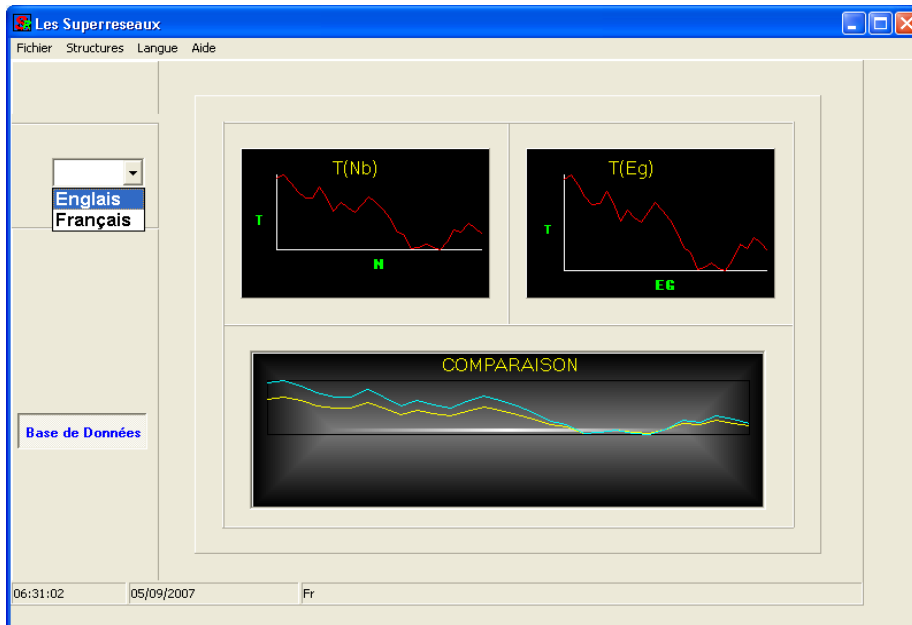


Figure 2.5:Fenêtre de l'interface principale

○ **L'étude d'une seule structure, $T(Eg)$ ou bien $T(Nb)$**

Cette fenêtre se compose d'une barre de menu, quatre boutons représentant les différentes structures, d'un bouton pour lancer le calcul, un deuxième pour tracer les graphes, et deux boutons pour enregistrer les données, dans la base de données où se forme un fichier (*.Db,*.Dat).

Le choix d'une structure entraîne l'apparition d'un menu contenant les différentes possibilités, la sélection d'une possibilité montre une boîte de saisie, qu'on doit introduire les données appropriées en appuyant sur le bouton **Calculer**. La barre de progression commence à contrôler le calcul jusqu'à sa fin, la figure (2.6) illustre cette fonctionnalité.

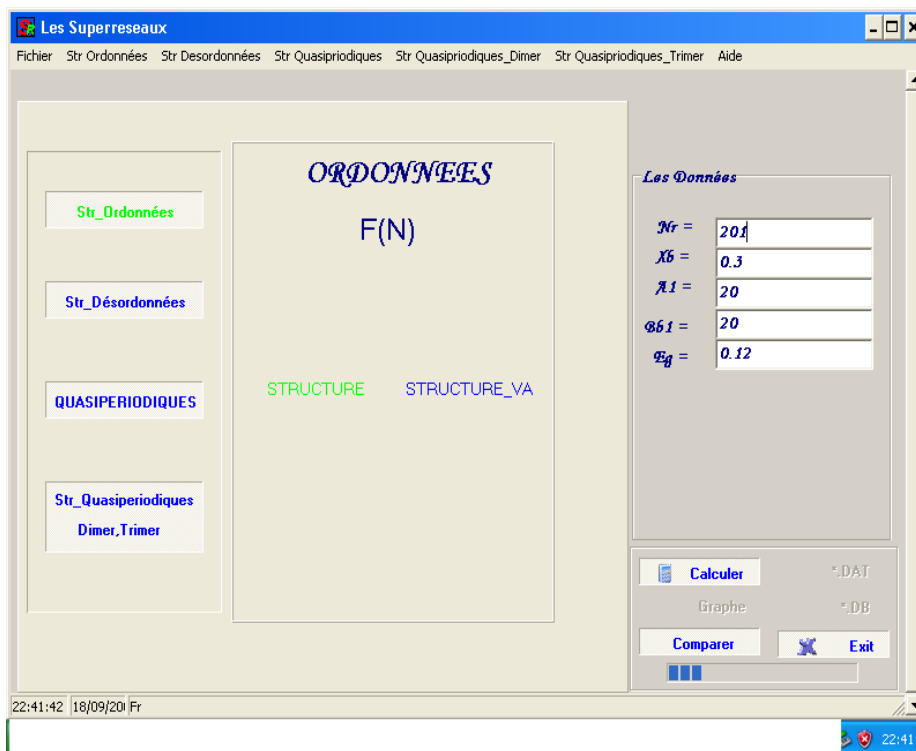


Figure 2.6: Fenêtre représentant la progression et le contrôle de calcul

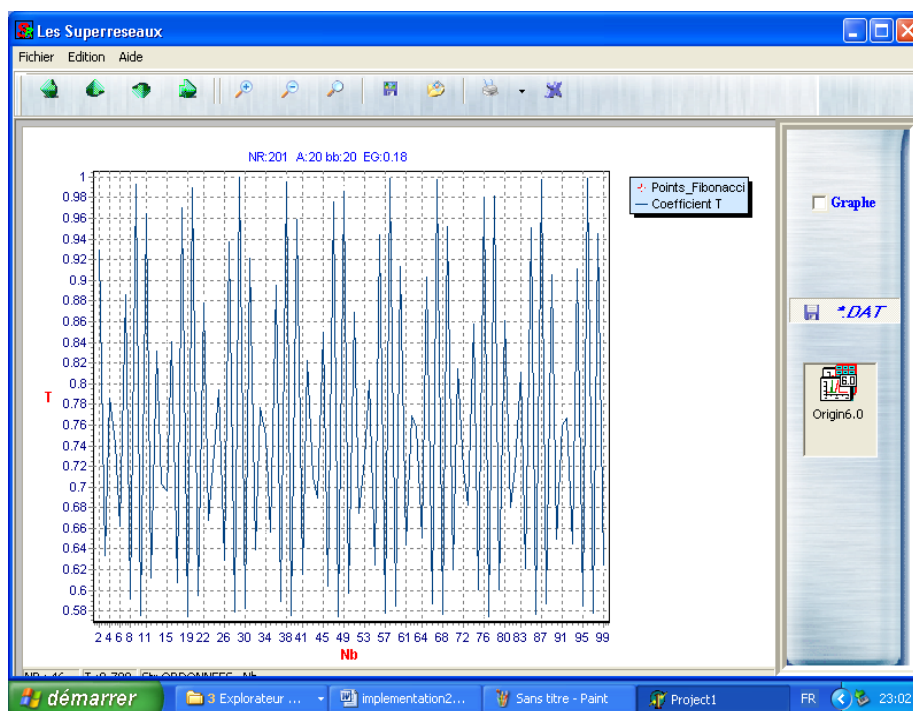


Figure 2.7: Fenêtre graphique

On fait appel à Origin6.0



qui est un utilitaire plus puissant et efficace

pour traitement des graphes (figure 2.8).

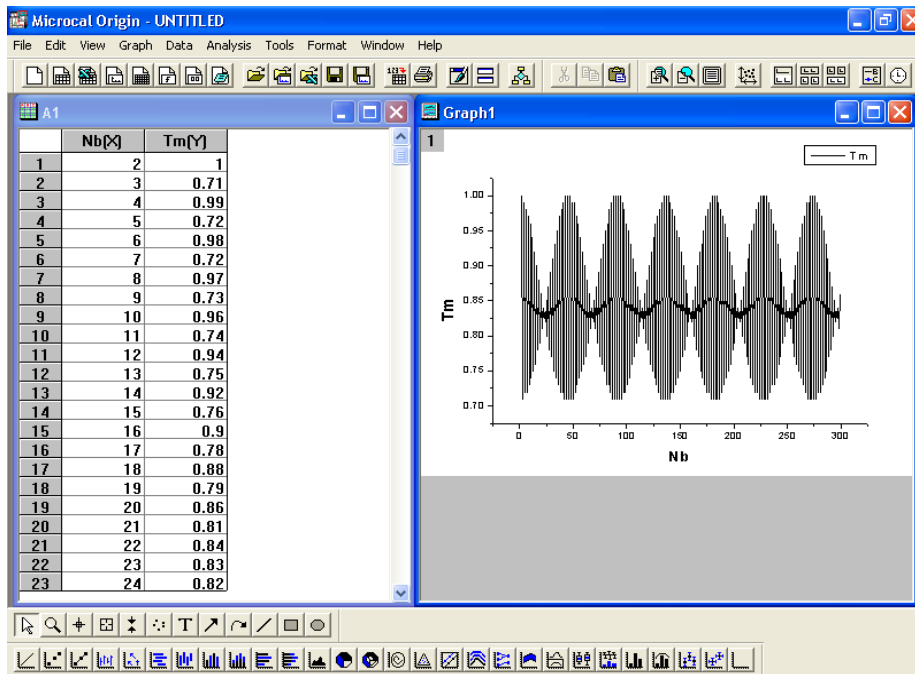


Figure 2.8: Interface d'Origin6.0

- **Etude de plusieurs structures:**

Dans ce cas, l'utilisateur peut traiter jusqu'à quatre systèmes à la fois, il a la possibilité de choisir n'importe quel type de structure.

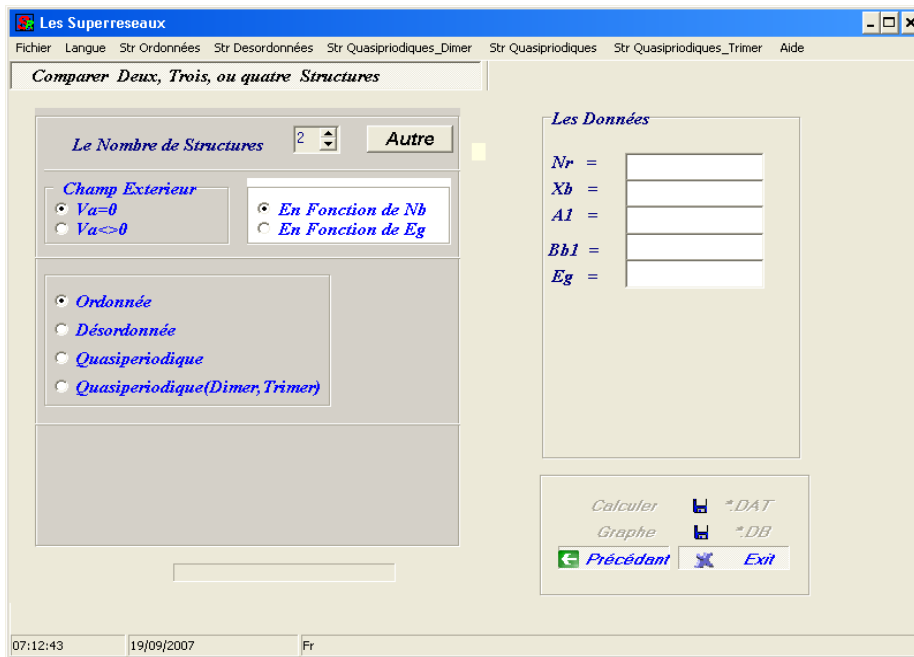


Figure 2.9: Fenêtre de comparaison de plusieurs structures

La barre de menus traduit les tâches offertes par les différentes boîtes illustrés dans la figure ci-dessus.

Autre : Assure la sélection du nombre de structures désiré, en introduisant les paramètres appropriés, à la fin du dernier choix les boutons suivant apparaissent :

Calculer : Pour lancer le calcul ;

Graphe : Dessiner les graphes ;

***.DAT** : Enregistrer les résultats sous forme d'un fichier *.dat ;

***.DB** : Enregistrer les résultats dans la base de données.

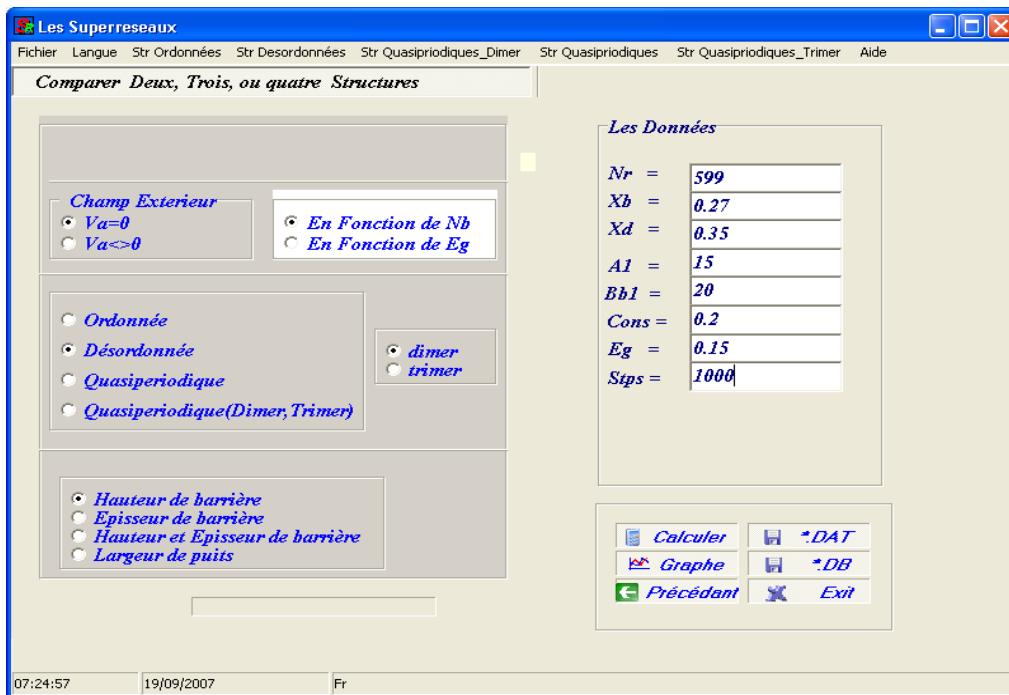


Figure 2.10: Fenêtre représentant la façon d'introduire des paramètres

○ Remarques

Avant de lancer le calcul selon le choix de type de système, il faut faire entrer les données suivantes :

Nr : nombre de régions du système étudié (nombre de barrières+nombre des puits).

Xb et Xd : déterminent les valeurs Vb et Vd du potentiel lorsque le désordre est introduit en hauteur de barrières; le Vd prenant place aléatoirement dans la structure avec une contrainte additionnelle :

Pour ($0 < Xb \leq 0.45$ et $0 < Xd \leq 0.45$), la hauteur Vd doit apparaître par paire dans les systèmes dimers et par triplet pour les trimers,.

$A1$: largeur de puits régulière dans les systèmes (initiale).

$A2$: largeur de puits lorsque le désordre est introduit en largeur de puits.

$Bd1$: épaisseur des barrières régulière dans les systèmes (initiale)

$Bb2$: épaisseur des barrières lorsque le désordre est introduit en épaisseur de barrières.

$Cons$: concentration du désordre.

Eg : valeur de l'énergie dans laquelle on veut calculer les amplitudes de transmission.

$Stps$: nombre d'échantillon de superréseaux désordonnés (la valeur moyen pour calculer coefficient de transmission).

V_a : valeur de champ extérieur appliqué (Volt).

Remarque : les paramètres $A1$, $A2$, $Bd1$ et $Bd2$ sont exprimés en Å et E_g en eV .

2.4 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 utilisant le modèle de la matrice de transfert. La détermination du coefficient de transmission à partir d'une résolution basée sur les fonctions d'Airy et les ondes plane a été aussi présentée.

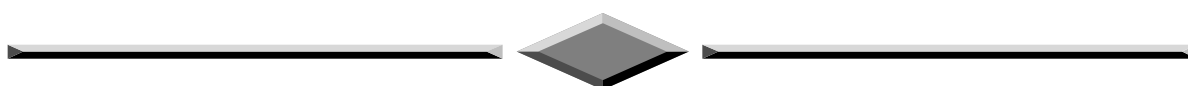
Le coefficient de transmission T décrit l'interaction de la particule avec le système à travers les éléments de la matrice du transfert et les masses effectives. Elle comporte aussi la manifestation de la nature ondulatoire de la particule représentée par les vecteurs d'onde.

Chaque modèle présenté dans ce chapitre expose au moins une propriété importante du SR. Ces formalismes ont été utilisés par notre équipe de recherche pour élaborer le logiciel « *Superréseaux* » permettant de grouper tous nos programmes de calcul et facilitant la tâche aux utilisateurs et aux chercheurs dans ce domaine.

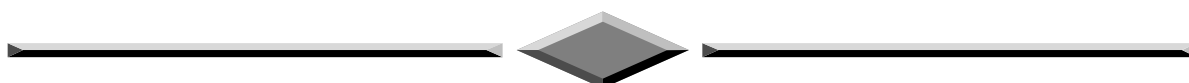
Références

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

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



Chapitre 3
Résultats et discussions



3.1 Introduction

Ce chapitre traite tout d'abord le comportement des systèmes ordonnés et ensuite les systèmes désordonnés à désordre corrélé en dimer et trimer en terme structural et spatial. Notre travail consiste à étudier les propriétés optoélectroniques de ces superréseaux types (III-V) à base d'Arsenic.

Ainsi, la nature des états électroniques dans ces systèmes est déterminée par le calcul de leurs coefficients de transmission. 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 [1]:

$$V_{SR}(x) = 0.6 (1.247x) \text{ Pour } 0 < x < 0.45 \quad (3.1)$$

L'intervalle de x dans (4.1) délimite la région du gap direct du $Al_xGa_{1-x}As$.

De même la masse effective dans cette région est donnée par :

$$m(x) = (0.067 + 0.083x) m_0 \text{ Pour } 0 < x < 0.45 \quad (3.2)$$

m_0 étant la masse de l'électron libre.

3.2 Superréseau ordonné

Un superréseau ordonné est un profil ayant une hauteur de barrière constante tout en conservant la période spatiale suivant la direction de croissance. Ces systèmes à double, triple et N barrières ont été choisis pour faire l'objet de cette étude préliminaire.

3.2.1 Double barrière rectangulaire

Ce genre de structure présente un seul état de passage permis par l'électron (figure 3.1).

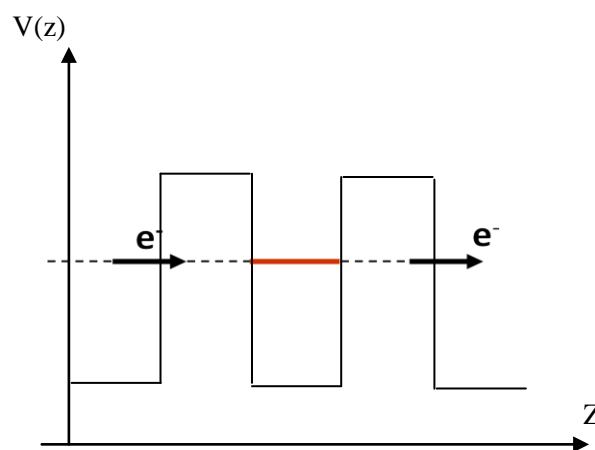


Figure 3.1: Un état permis dans la structure double barrières.

L'étude du coefficient de transmission en fonction de l'énergie incidente de l'électron pour une structure à double barrière, nous montre par le biais de la figure 3.2, un pic de résonance d'amplitude égale à 1 localisé à une énergie E_r dont la position dépendant des paramètres de la double barrière. Ce pic est dû à l'existence d'un état permis confiné à l'intérieur du puits, permettant à l'électron de transpercer les deux barrières par le phénomène d'effet tunnel résonnant.

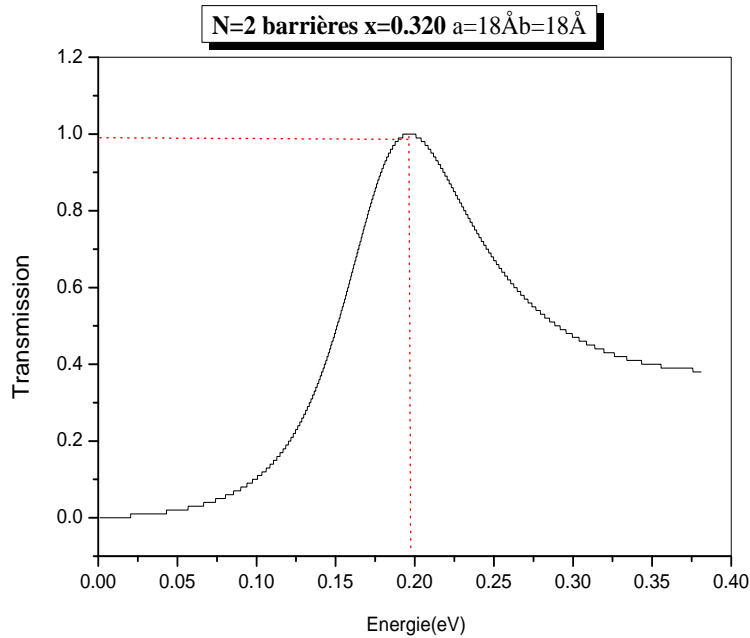


Figure 3.2: Coefficient de transmission d'une structure double barrières en fonction de l'énergie incidente.

3.2.2 Triple barrière rectangulaire

Dans ce cas de figure 3.3, on observe deux états permis.

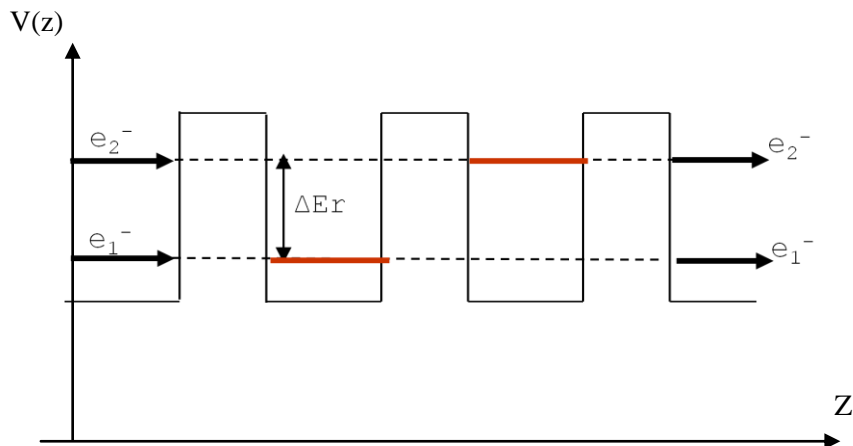


Figure 3.3: Deux états permis dans la structure triple barrières

Les mêmes phénomènes sont constatés pour la structure triple barrière sauf que celle-ci présente deux pics de résonance au lieu d'un seul où chacun correspond à un état électronique permis dans chaque puits de potentiel.

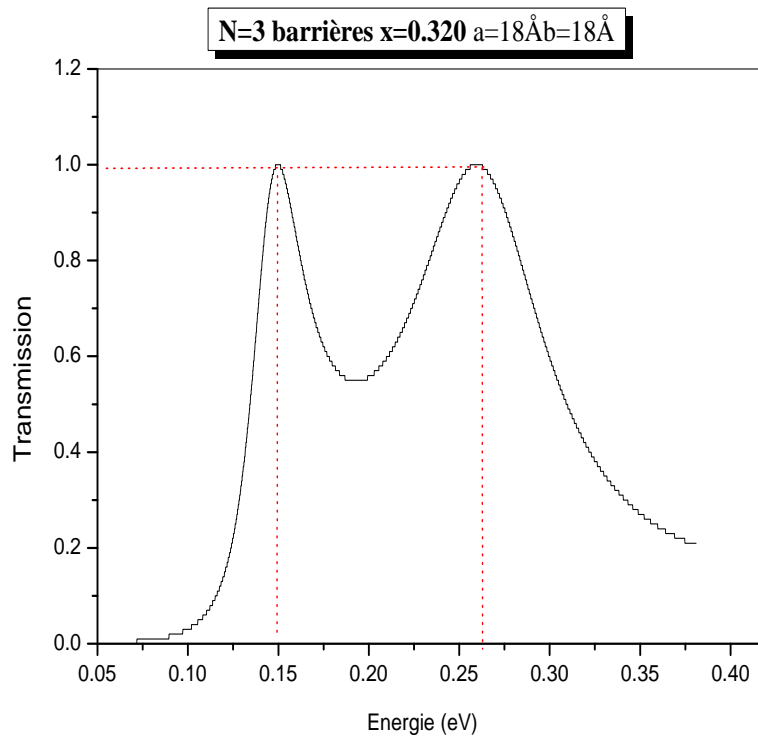


Figure 3.4: Coefficient de transmission d'une structure triple barrières en fonction de l'énergie incidente.

3.2.3 Structure à N barrières rectangulaires

Le profil du superréseau ordonné avec une hauteur de barrière constante, tout en conservant la période spatiale suivant la direction de croissance, contenant N barrières rectangulaires est représenté dans la figure (3.5).

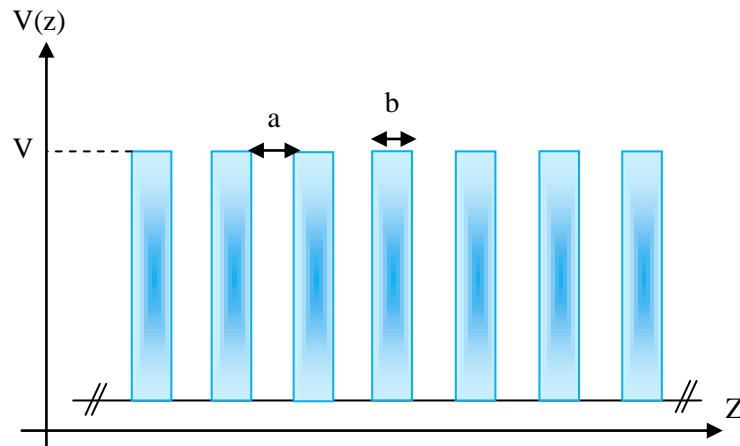


Figure 3.5: Structure à N barrières rectangulaires.

Pour une structure à N barrières on obtient N-1 pics très proches les uns des autres correspondants à N-1 puits, ce qui donne naissance à une minibande permise. Pour $x=0.32$, la minibande s'étend de 110 meV jusqu'à 375 meV et de 150 meV jusqu'à 365 meV pour $x=0.44$. Nous constatons ainsi que pour la faible concentration d'aluminium ($x=0.32$), la largeur de la minibande est plus significative ($\Delta E=265$ meV), le temps de réponse du système dans ce cas est très rapide (figure 3.6). Ces résultats sont en bon accord avec celles trouvés par Bentata et al. [2], Gomez et al. [3], Aziz et al. [4] et Djelti [5] pour des conditions comparables.

La zone d'intersection des minibandes des deux structures ordonnées est très importante pour l'interprétation physique des systèmes à désordre corrélé.

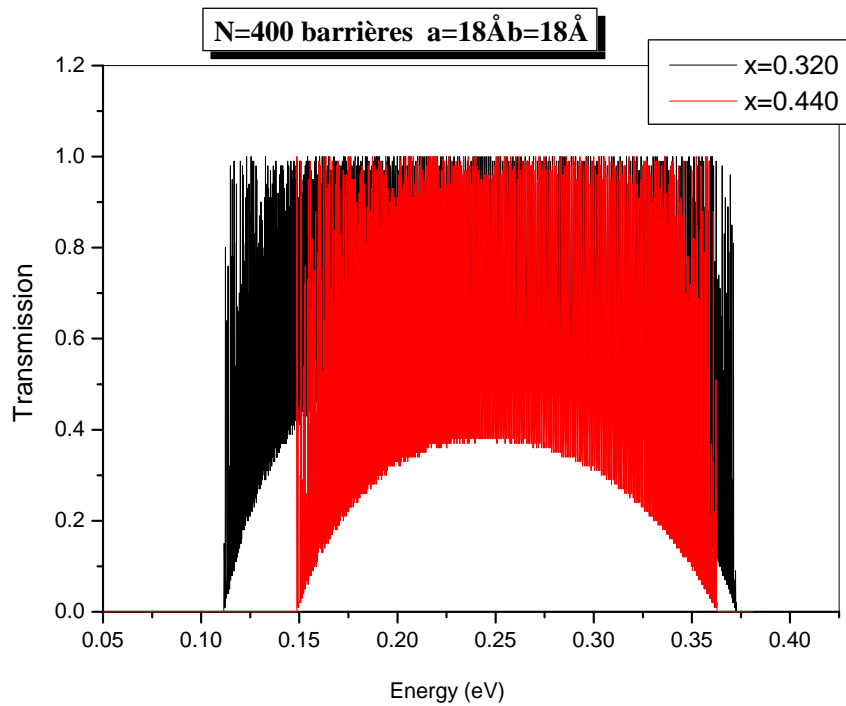


Figure 3.6: Coefficient de transmission en fonction de l'énergie d'électron pour deux structures ordonnées.

3.3 Superréseau à désordre structural

3.3.1 Paramétrisation

Le système étudié se compose de 200 barrières rectangulaires périodiques de période $P = a + b$. a et b représentent respectivement la largeur du puits et l'épaisseur de la barrière.

Dans ce modèle désordonné du superréseau, nous considérons que la hauteur des barrières prend au hasard deux valeurs d'énergie, à savoir V_1 et V_2 aléatoirement réparties dans la structure du superréseau. V_1 et V_2 désignent respectivement la hauteur de la barrière du système et le potentiel de la cellule élémentaire du dimer ou trimer.

V_1 et V_2 sont proportionnels aux deux valeurs choisies de la concentration d'Al ($x \leq 0.45$) dans les barrières du superréseau GaAs/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$. Les potentiels choisis sont $V_1=0.24$ eV ($x_1=0.32$) et $V_2=0.33$ eV ($x_2=0.44$).

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

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

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

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

Ce modèle consiste à introduire un désordre par doublet de barrières de hauteur V_2 différente de V_1 , distribuées aléatoirement dans la structure du superréseau [6-8] (figure 3.7).

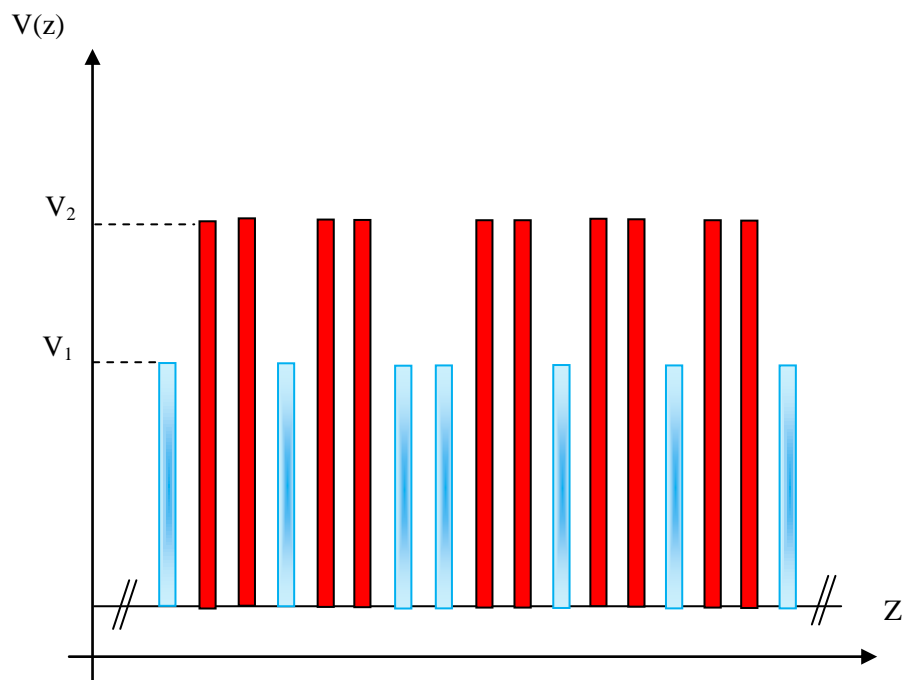


Figure 3.7: Superréseau en dimer hauteur de barrière.

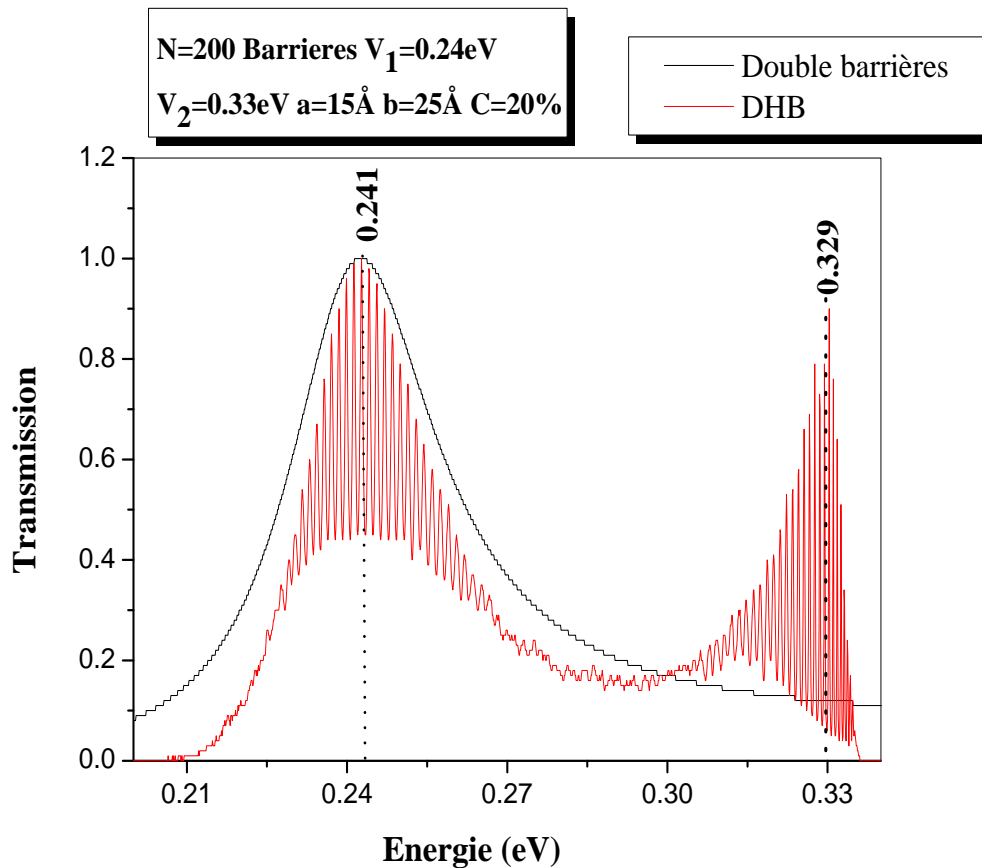


Figure 3.8: Coefficient de transmission d'une structure désordonnée en DHB en fonction de l'énergie.

D'après la figure 3.8, l'évolution du coefficient de transmission en fonction de l'énergie de l'électron, montre que l'introduction du désordre provoque d'une part la destruction de la minibande à l'intérieur du puits et d'autre part la naissance de deux pics de résonance d'énergies respectives $E_{r1}=241\text{ meV}$ et $E_{r2}=329\text{ meV}$. Le premier est dû à la cellule élémentaire dimer introduite comme la confirme la courbe noire de la structure double barrière isolée et le second résulte de la commutation des deux potentiels V_1 et V_2 . On constate aussi trois types d'états propres:

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

Ce résultat est en parfait accord avec ceux trouvés dans la littérature [9-10].

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

D'après la synthèse bibliographique établie, très peu de travaux jusqu'à présent ont été effectués dans l'étude des structures à désordre corrélé en trimer hauteur de barrière. Ce modèle consiste à introduire un désordre par triplet de barrières de hauteur V_2 différente de V_1 (figure 3.9).

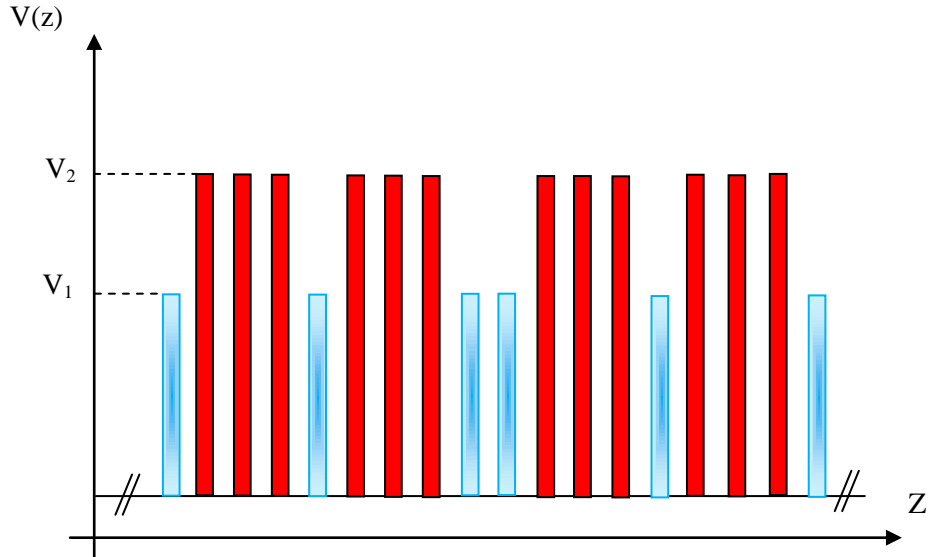


Figure 3.9: Schéma d'un superréseau en trimer hauteur de barrière.

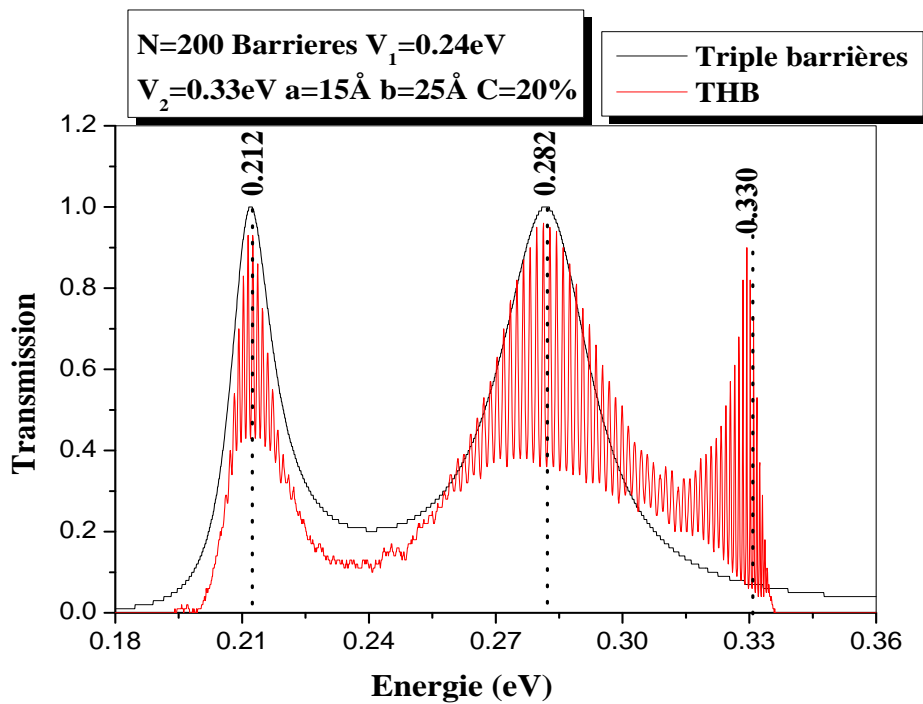


Figure 3.10: Coefficient de transmission d'une structure désordonnée en THB en fonction de l'énergie.

La variation du coefficient de transmission en fonction de l'énergie pour une structure désordonnée en THB (figure 3.10), montre l'existence de trois pics situés aux énergies résonnantes $E_{r1}=212$ meV, $E_{r2}=282$ meV et $E_{r3}=330$ meV, séparés par deux vallées d'énergies $E_{V1}=233$ meV et $E_{V2}=238$ meV. Les deux premiers pics sont dûs à la cellule trimer comme la confirme la courbe noire de la structure triple barrière isolée, l'autre à la commutation des deux potentiels (V_1 et V_2) [11].

• **Preuve de la résonance de commutation**

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

$$\Psi_j(z) = A_j \exp(ik_j z) + B_j \exp(-ik_j z) \quad (3.3)$$

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

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

$$S(0, L) = \prod_{j=0}^n M_j(l) = \begin{bmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{bmatrix} \quad (3.4)$$

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

$$M_j(l) = \begin{bmatrix} ch[\rho_j l] & -\frac{m_j}{\rho_j} sh[\rho_j l] \\ \frac{\rho_j}{m_j} sh[\rho_j l] & ch[\rho_j l] \end{bmatrix} \quad \text{pour } E - V_j < 0 \quad (3.5)$$

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

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

Prenons un système construit par deux blocs différents distribués aléatoirement dans le réseau. Il est évident que l'effet aléatoire disparaît quand, pour une énergie donnée de l'électron, les positions de deux blocs différents peuvent être inter-changées [12]. Dans ce

cas, tous les blocs de chaque type sont déplacés vers une région des deux côtés. On peut présenter ce processus comme suit :

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

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

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

$$[M_1, M_2] = 0 \quad (3.6)$$

Cela conduit à l'équation suivante:

$$\frac{k_d^2 + m_d^2}{m_d k_d} \text{sh } k_d l \cdot \text{ch } k_b l - \frac{k_b^2 + m_b^2}{m_b k_b} \text{sh } k_b l \cdot \text{ch } k_d l + \frac{m_d^2 k_b^2 - m_b^2 k_d^2}{k_b k_d m_d m_b} \text{sh } k_b l \cdot \text{sh } k_d l = 0 \quad (3.7)$$

La résolution de cette équation donne:

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

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

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

3.3.4 Influence des paramètres structuraux sur la transmission électronique

3.3.4.1 Largeur de puits

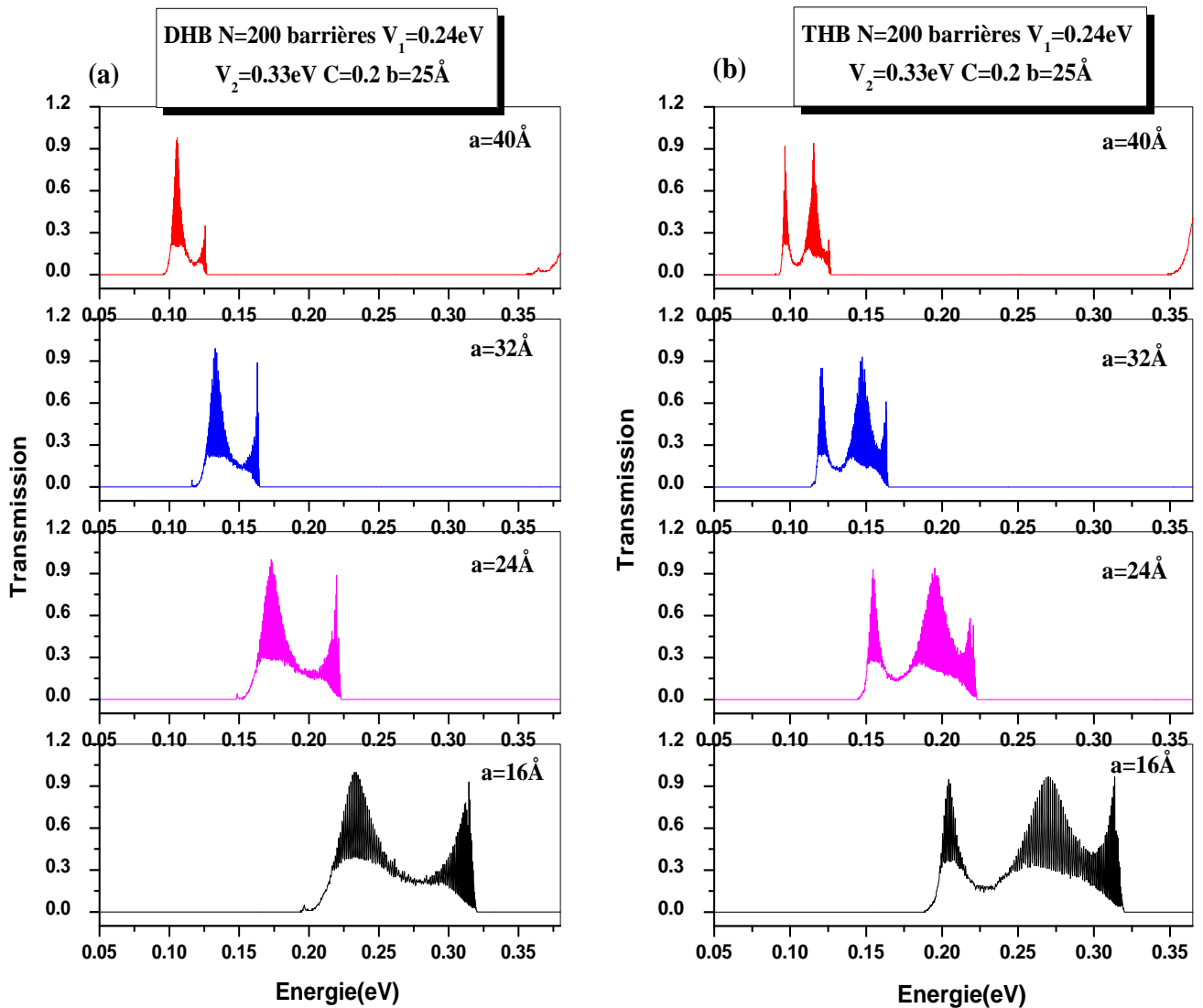
a) Cas du dimer

La figure 3.11a montre une structure de minibande permise avec deux pics de résonance pour chaque valeur de a. Une translation vers les basses énergies est observée pour ces structures à large puits ($a=32$ et 40 \AA). La largeur des minibandes diminue tout en augmentant

la largeur a . Ce phénomène est dû au confinement des états énergétiques à l'intérieur des puits.

b) Cas du trimer

Le même phénomène est observé dans le cas du trimer que celui du dimer, mais avec trois pics de résonance (voir figure 3.11b).



Figures 3.11: Transmission électronique du DHB (a) et THB (b) en fonction de l'énergie à différentes largeurs de puits.

3.3.4.2 Épaisseur de la barrière

a) Cas du dimer

La courbe représentative de la transmission de l'électron en fonction de son énergie schématisée par la figure 3.12a, présente toujours une structure de minibande avec deux pics de résonance comme la précédente, sauf que celle-ci montre un rétrécissement des minibandes vers le centre avec l'augmentation de b . La différence relative entre les deux pics devient de plus en plus faible jusqu'à sa disparition pour $b = 54 \text{ \AA}$. Pour une épaisseur de barrières atteignant la valeur de 54 \AA , l'énergie électronique a aucun effet sur la transmission qui reste toujours nulle ou la portée de l'onde diminue tout en augmentant l'épaisseur de la barrière. Ce phénomène s'explique par le fait que b est supérieur à la longueur d'onde λ de l'électron. Dans cette situation les puits sont découplés et les états deviennent liés dans les puits. La barrière se présente à la particule comme une marche de potentiel infinie.

b) Cas du trimer

Le graphe représentant le coefficient de transmission en fonction de l'énergie à différentes épaisseurs de barrière b (figure 3.12b) montre le même phénomène pour le trimer que celui du dimer.

3.3.4.3 Hauteur de barrière

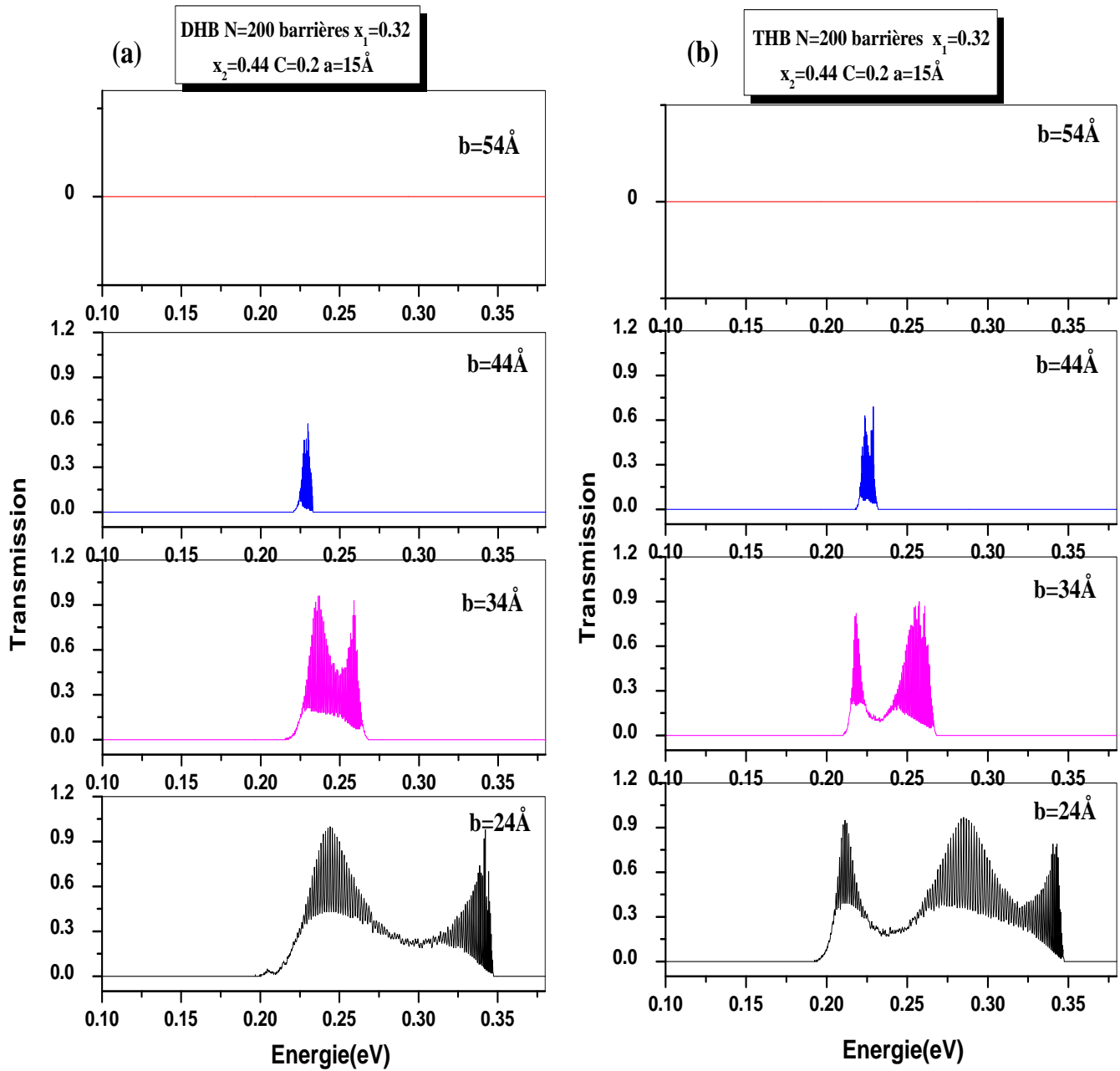
a) Cas du dimer ($V_1 < V_2$)

Le graphe représenté sur la figure 3.13a, montre la variation du coefficient de transmission (T) en fonction de l'énergie (E) de l'électron pour une hauteur constante de barrière du dimer $V_2 = 0.33 \text{ eV}$ et à différentes valeurs de V_1 .

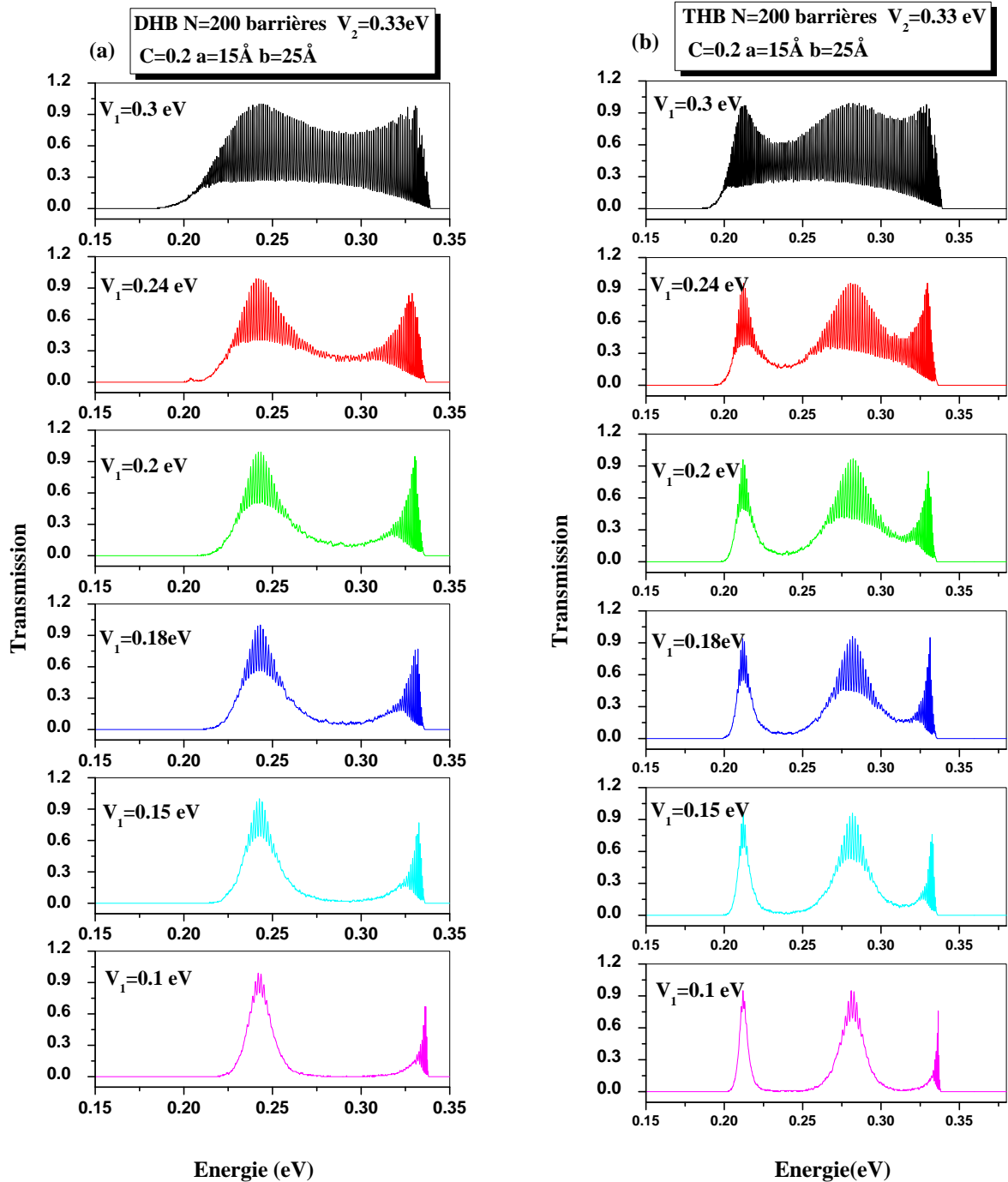
Pour toutes les valeurs de V_1 , on observe deux pics séparés jusqu'à où la différence ($V_2 - V_1$) devient approximativement nulle ($V_1 = 0.3 \text{ eV}$). Ceci peut être expliqué par la disparition de l'effet du désordre où l'électron ne peut pas faire la différence entre les hauteurs des barrières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

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

Les mêmes phénomènes sont observés dans le cas du trimer, c.-à-d. l'effet du désordre disparaît lorsque la différence $V_2 - V_1$ devient nulle (figure 3.13b).



Figures 3.12: Transmission électronique du DHB (a) et THB (b) en fonction de l'énergie à différentes épaisseurs de barrière.



Figures 3.13: Coefficient de transmission des deux profils en DHB (a) et THB (b) en fonction de l'énergie pour différentes valeurs de hauteurs de barrières.

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

L'étude du coefficient de transmission du DHB en fonction de l'énergie de l'électron à différentes valeurs des hauteurs de barrières V_2 représentée par la figure 3.14, nous montre:

- la disparition du pic relatif à la cellule dimer aux valeurs de V_2 correspondant à 0.1, 0.15 et 0.18 eV. Ce phénomène peut être expliqué par l'existence de ce pic en dehors de la zone d'intersection des minibandes des deux profils ordonnés de V_1 et V_2 (voir la figure 3.15).
- La présence d'une structure de minibande pour $V_2=0.3$ eV due à une différence presque nulle de V_1-V_2 .

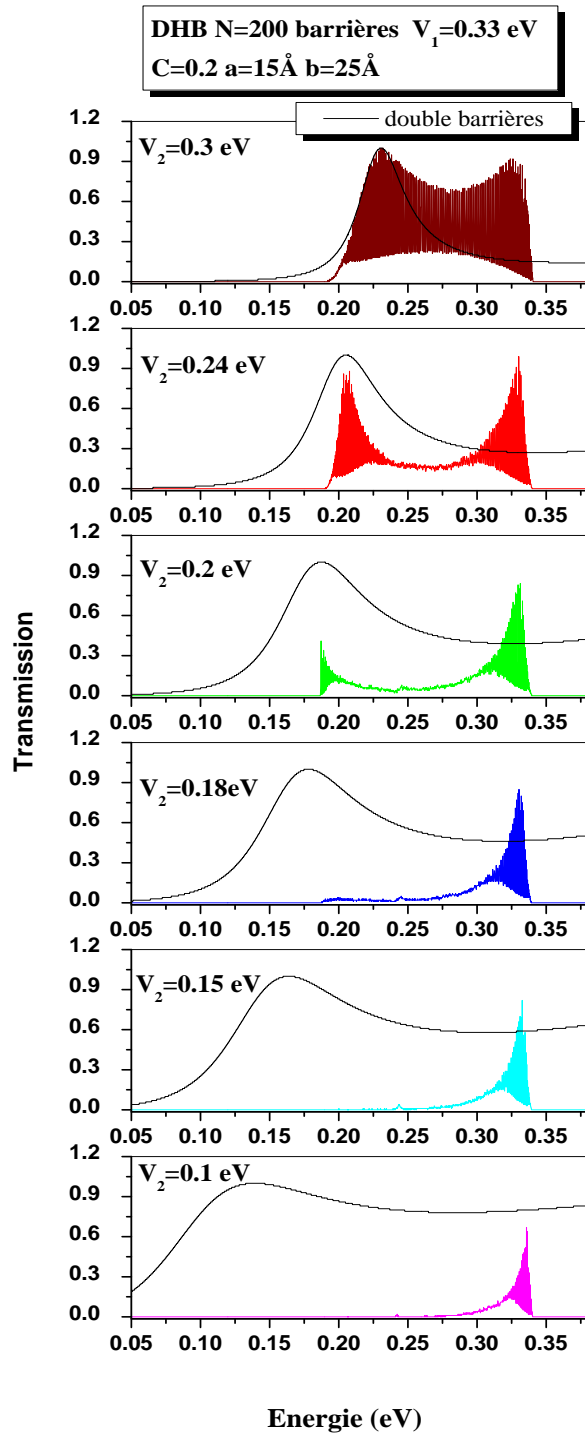


Figure 3.14: Coefficient de transmission en fonction de l'énergie pour une structure en DHB.

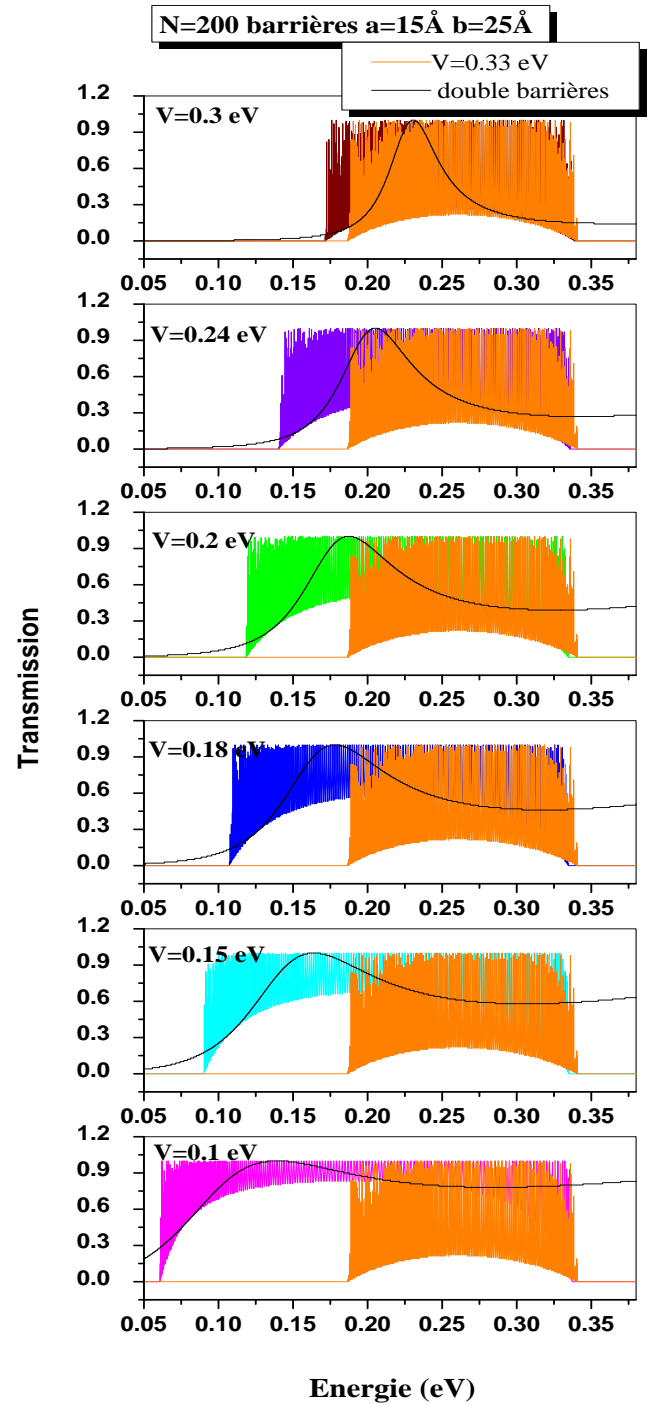


Figure 3.15: Structure de minibandes pour deux profils ordonnés

Le même phénomène est observé pour la structure en THB (figure 3.16) que celui du DHB (figure 3.14), sauf que pour le trimer nous remarquons la disparition du premier pic résultant de la cellule trimer. Ce phénomène est dû à l'intersection des minibandes des deux profils ordonnés constituant une zone interdite pour l'électron à un tel état (figure 3.17). Ce pic n'apparaît qu'à partir de $V_2=0.28$ eV.

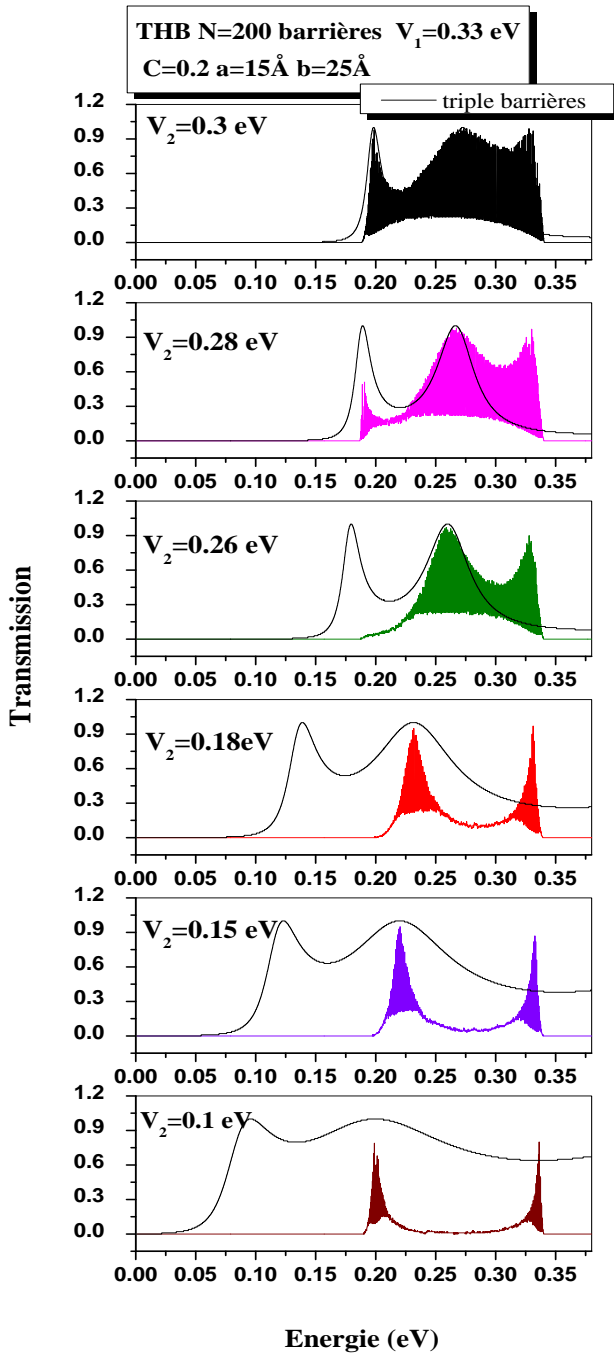


Figure 3.16: Coefficient de transmission du trimer en fonction de l'énergie à différentes valeurs de V_2

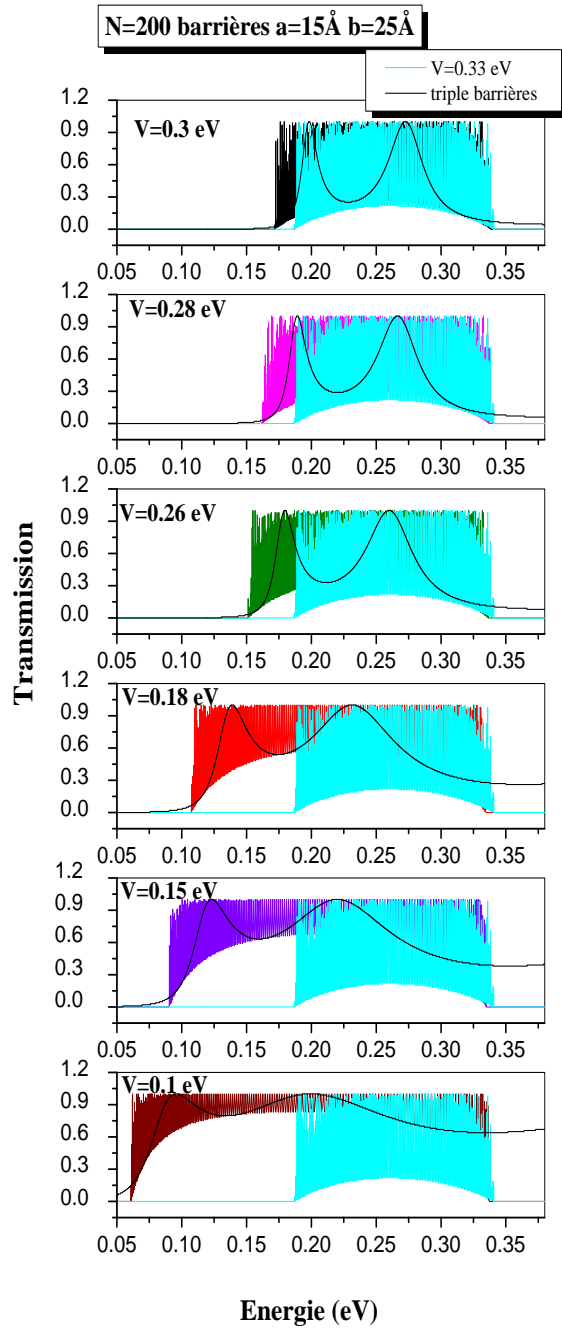


Figure 3.17: Structure de minibande pour deux profils ordonnés.

3.3.5 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 :

$$\gamma = -\frac{1}{2N} \ln T \quad (3.8)$$

où N représente le nombre de barrières et T indique le coefficient de transmission. Celui ci nous permet de mesurer la nature des états dans un système dynamique.

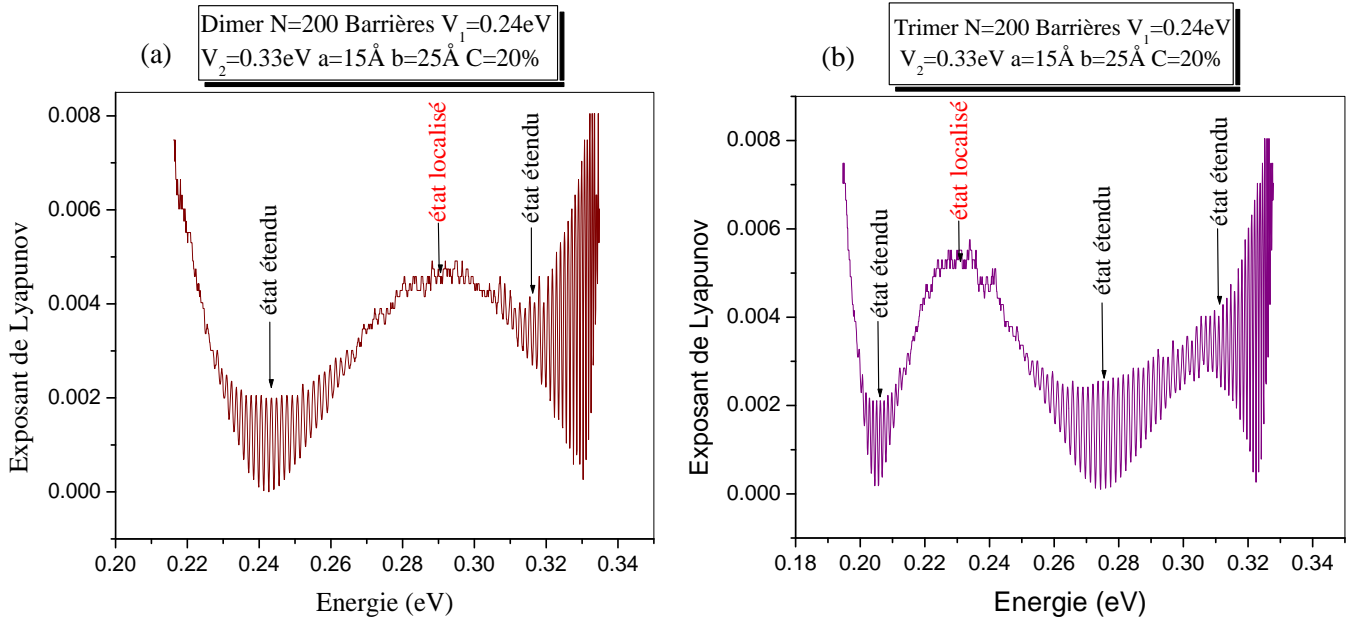
La figure 3.18 représente la variation de l'exposant de Lyapunov en fonction de l'énergie incidente de l'électron pour des structures DHB et THB. A partir de ces courbes, on remarque que :

- pour les énergies de l'électron égales à E_r , L'exposant de Lyapunov tend vers zéro près des énergies de résonance. Puis il tend vers l'infinie dans les régions des états interdits.
- les énergies de résonance correspondent aux états électroniques étendus quand γ tend vers zéro, c.-à-d. la longueur de localisation tend vers l'infini.
- un pont existe, séparant la phase des états fortement localisés dans les queues de bande et la phase des états délocalisés voir étendus près des énergies de résonances [13-14].

Les études faites sur les structures en DHB présentant une certaine corrélation du désordre montre la disparition de la localisation [15-16]. Cela est en parfait accord avec les résultats de Djelti [17].

Remarque

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



Figures 3.18: Exposant de Lyapunov en fonction de l'énergie pour : a) DHB b) THB.

3.3.6 Influence de la tension appliquée

3.3.6.1 Structure ordonnée

L'application d'une tension externe au bord d'un superréseau ordonné modifie directement le profil de la structure de minibande, ce qui va engendrer une modification des propriétés optoélectroniques du système (figure 3.19).

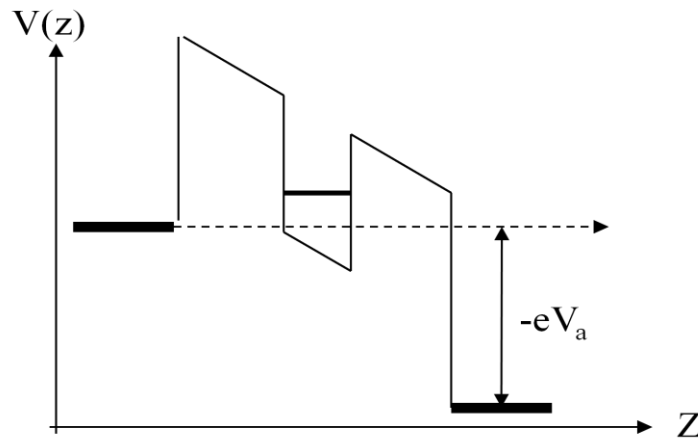
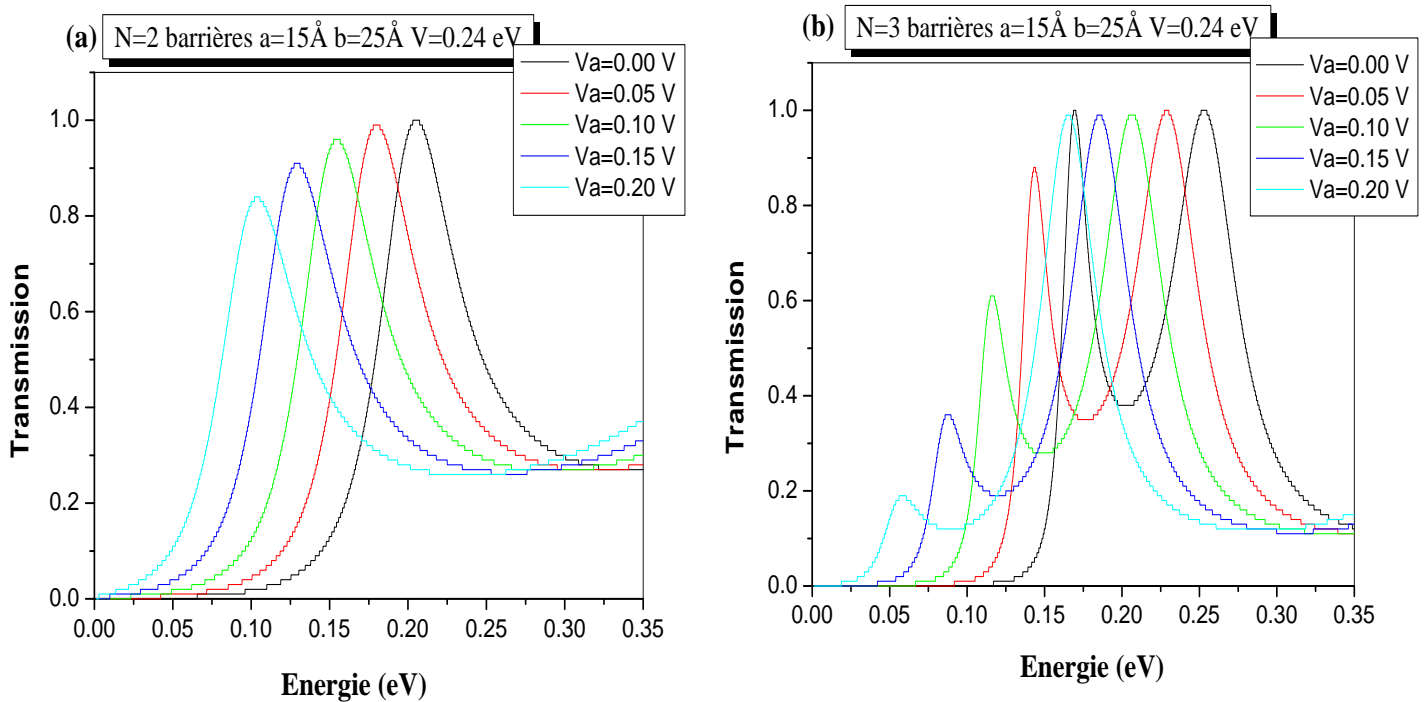


Figure 3.19: Un superréseau soumis à une tension externe V_a

a) Double et triple barrières rectangulaires

L'évolution du coefficient de transmission d'une structure double et triple barrières soumis à une tension appliqué V_a en fonction de l'énergie de l'électron, présentée par les figures 3.20 a-b montre une:

- translation des pics de résonance, vers les plus basses énergies avec augmentation de V_a . Ce résultat est en parfait accord avec celui obtenu par Consuelo et al [18].
- diminution de l'amplitude de transmission ce qui implique une faible probabilité de transmission par effet tunnel.
- largeur plus considérable du deuxième pic de la structure triple barrière que celui du premier), ce qui indique que les états lui correspondant sont moins confinés.



Figures 3.20: Coefficient de transmission en fonction de l'énergie des deux structures en double (a) et triple barrières (b) pour différentes tensions appliquées.

b) Structure à N barrières rectangulaires

La figure 3.21 représente une destruction et une translation des minibandes vers les basses énergies avec l'augmentation de la tension V_a , jusqu'à son annulation complète pour $V_a=0.2V$. Cela signifie que le champ électrique localise les fonctions d'onde. Les puits pourront être considérés comme découplés puisque les extensions des fonctions d'onde ne permettent pas le couplage entre niveaux consécutifs (figure 3.22), par contre en absence du champ électrique, les fonctions d'onde sont délocalisées. Les électrons subissent des diffusions associées aux deux puits adjacents.

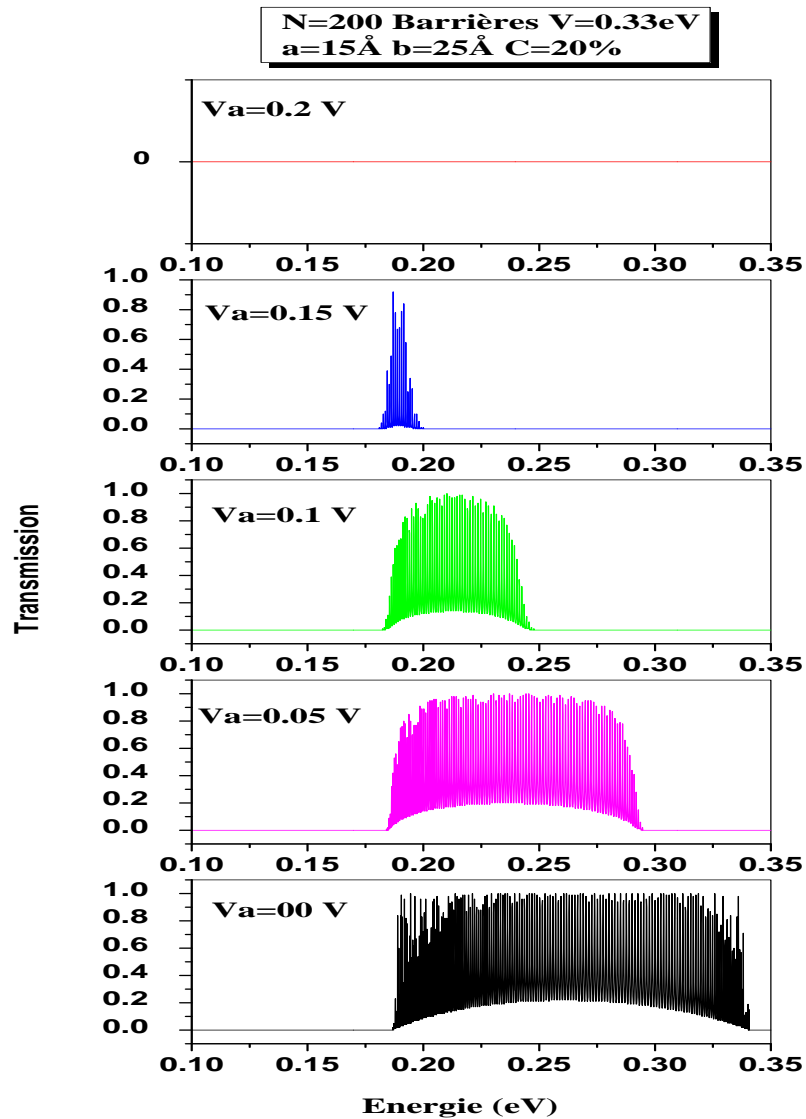


Figure 3.21: Coefficient de transmission d'une structure à N barrières en fonction de l'énergie à différentes tensions appliquées.

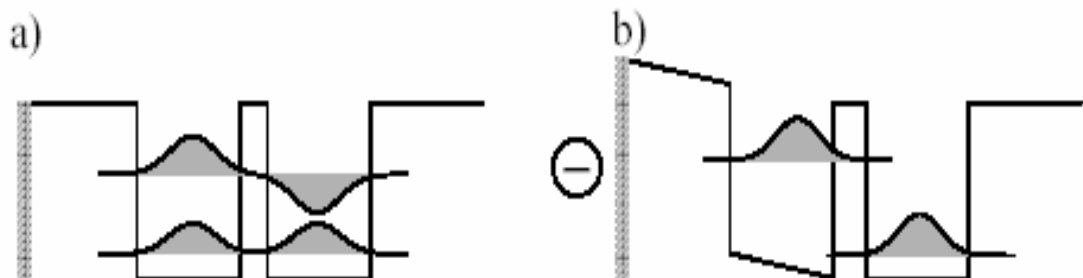


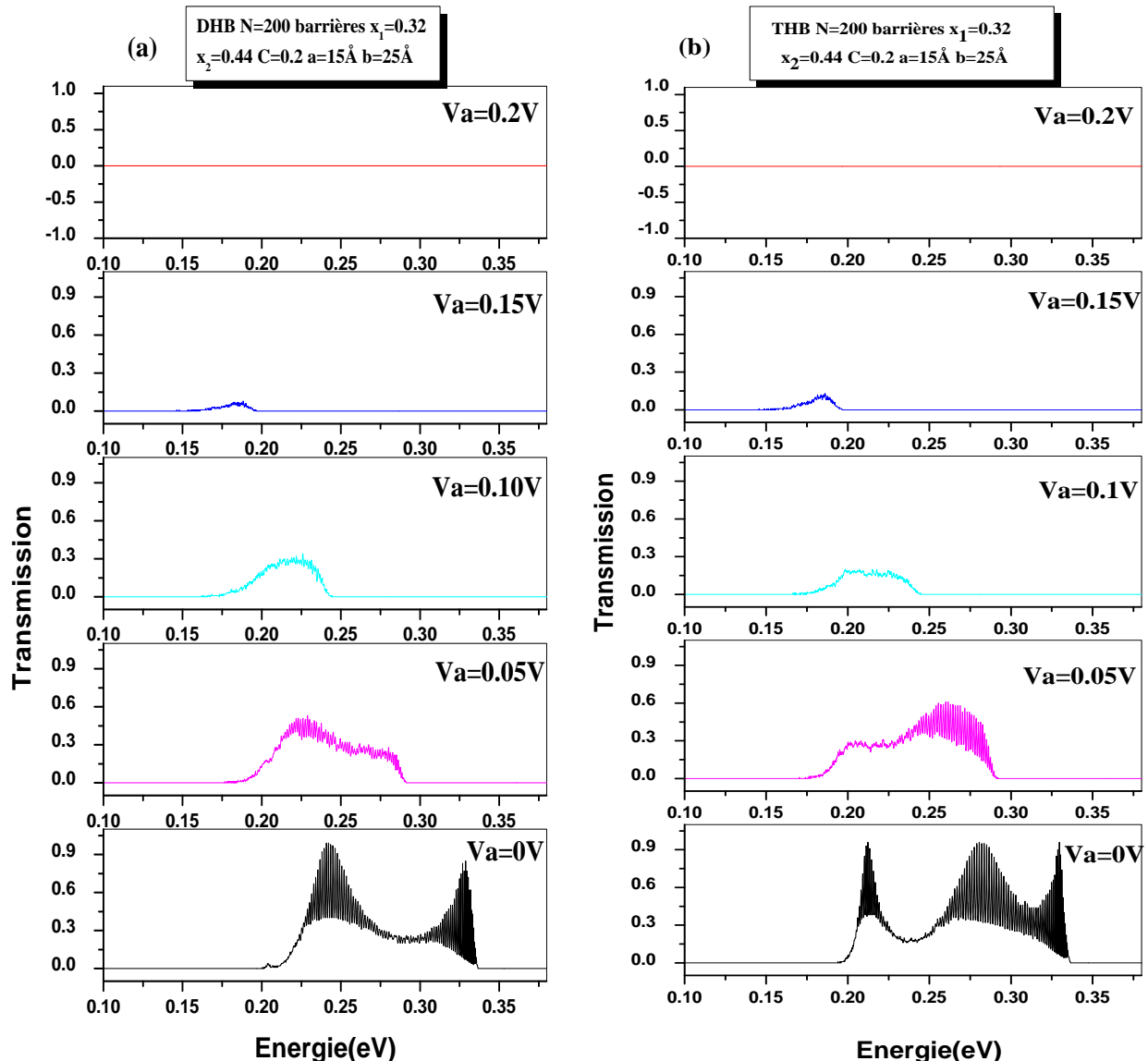
Figure 3.22: Schéma de 2 puits couplés (a) et découplés (b).

3.3.6.2 Structure désordonnée en dimer et trimer

a) $V_1 < V_2$

A travers les figures 3.23a-b, l'effet d'une tension de polarisation appliquée V_a sur des structures à désordre corrélé, en dimer et trimer hauteur de barrière montre:

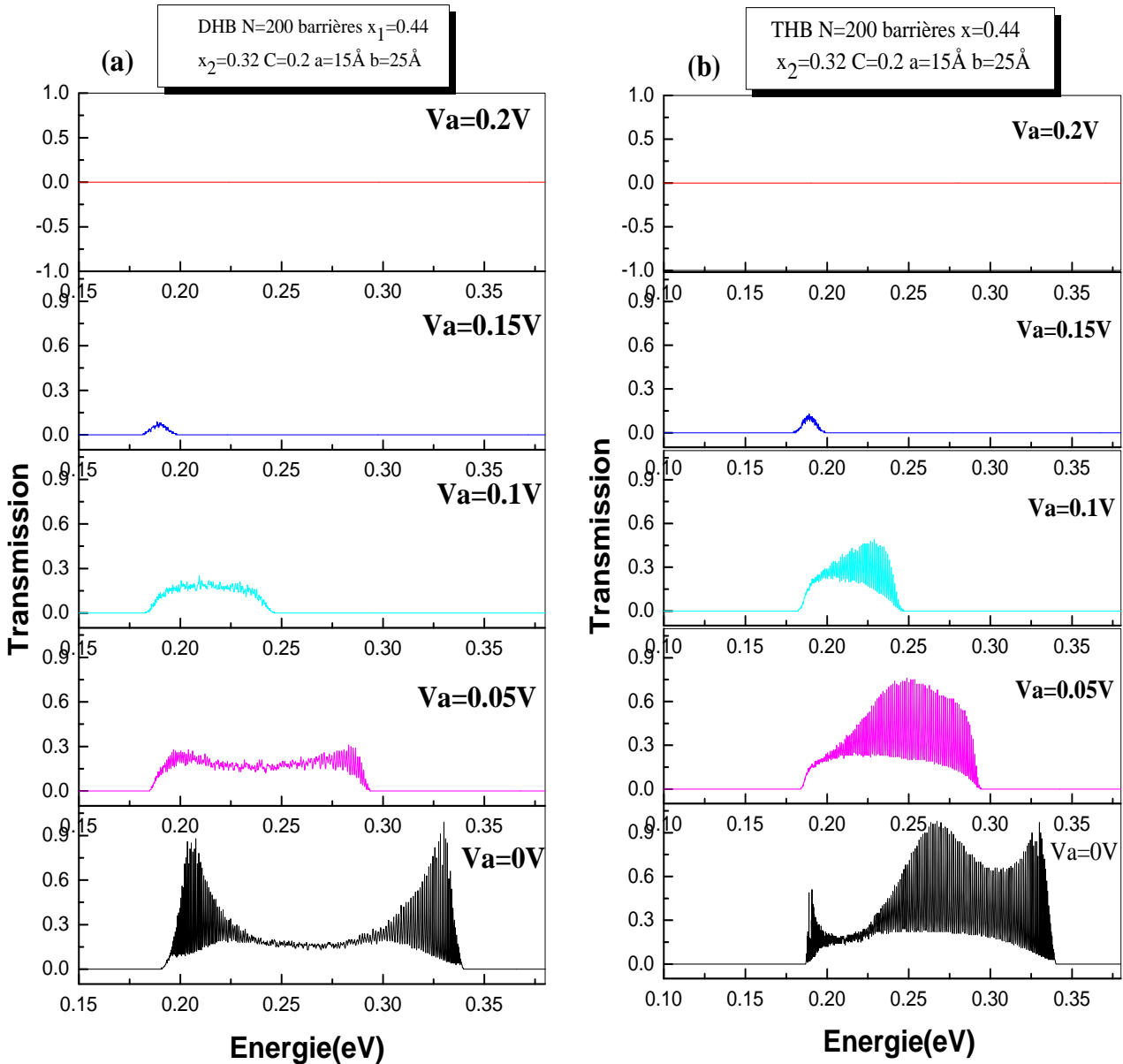
- Une translation de la minibande vers les basses énergies avec une augmentation de V_a .
- Pour des faibles tensions, la conduction est ohmique et l'électron passe par effet tunnel.
- Pour une valeur critique de V_a , la probabilité tunnel décroît considérablement et la structure de minibande est détruite. Ceci est expliqué par l'effet Stark signifiant la modification des états électroniques sous l'action d'un champ électrique [19].
- Un décalage des deux états énergétiques correspondant à deux puits consécutifs rend la transmission tunnel fortement limitée.
- Une disparition du pic de commutation des deux structures désordonnées en Dimer et Trimer. Cela peut être expliqué par une asymétrie de la structure par effet du champ électrique.
- Des pics de résonance provenant des cellules élémentaires qui résistent à la perturbation extérieure aux faibles valeurs de V_a .



Figures 3.23: Transmission électronique d'un DHB (a) et THB (b) en fonction de l'énergie à différentes tensions appliquées.

b) $V_1 > V_2$

La transmission électronique des deux profils d'un superréseau en DHB et THB en fonction de l'énergie sous une tension appliquée est présentée par les figures 3.24a-b.



Figures 3.24: Transmission électronique d'un DHB (a) et THB (b) en fonction de l'énergie à différentes tensions appliquées.

Ces dernières montrent:

- Une translation vers les basses énergies et une destruction remarquable de la structure de minibande tout en augmentant la tension V_a , jusqu'elle s'annule complètement pour les valeurs supérieures à 0.2 V.

- Une disparition du pic de commutation du dimer ou trimer sous l'effet de la tension appliquée responsable de la destruction de la symétrie structurale.
- Une disparition du pic de la cellule élémentaire dû à la non résistance des pics à la perturbation extérieure pour les grandes valeurs de V_a . En conclusion l'application d'un fort champ externe minimise la corrélation du désordre et rend les puits adjacents découplés, on assiste ainsi à la destruction de la structure de minibande où les états deviennent localisés.

3.3.7 Influence de la taille du système

3.3.7.1 Structures ordonnées

La figure 3.25 représente l'effet de la taille du système sur la transmission électronique du superréseau $\text{GaAs}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$. On remarque que pour la structure ordonnée ($N=1000$ barrières), le coefficient de transmission pour $E=0.328$ eV, présente un comportement oscillatoire variant entre 0.1 et 1. Cette oscillation est pondérée par une enveloppe périodique de période $P=2545$ Å. L'allure de cette courbe montre clairement que les états correspondants sont des états étendus de Bloch du fait de la périodicité du système. Pour $E=0.290$ et 0.242 eV l'oscillation varie respectivement de 0.3 à 1 et de 0.4 à 1. Ainsi, la période de l'enveloppe dépend de l'énergie de l'électron incident.

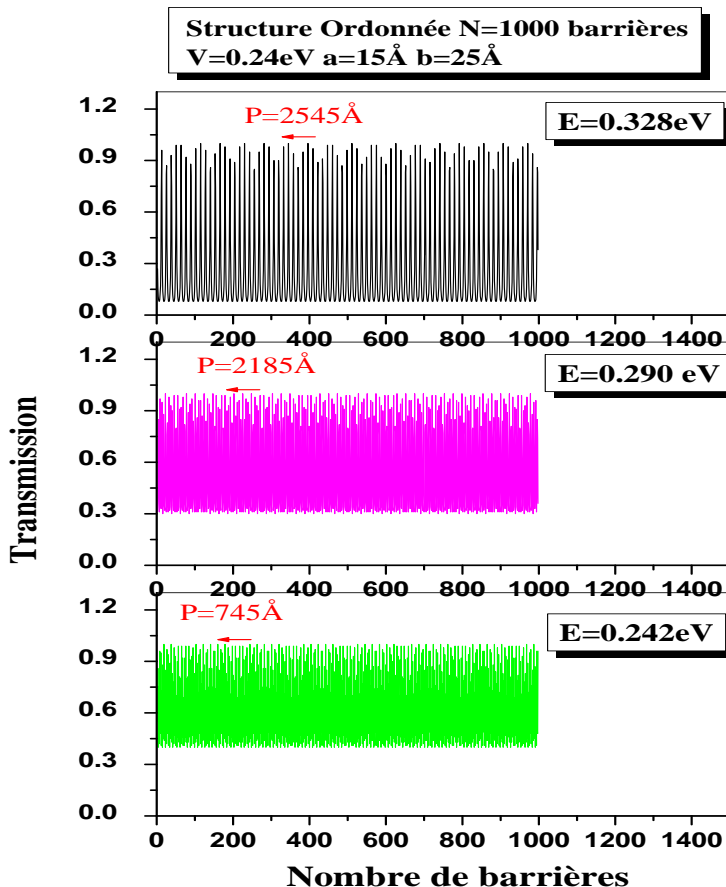


Figure 3.25: Coefficient de transmission d'une structure ordonnée en fonction du nombre de barrières.

3.3.7.2 Structures désordonnées

- Cas du dimer

Pour la structure désordonnée en DHB, trois cas sont constatés (figure 3.26) :

1. Pour une énergie proche de la résonance dimer $E_d=0.242\text{eV}$, la transmission garde son comportement oscillatoire mais sous une enveloppe non périodique d'où l'état électronique correspondant à cette énergie est étendu mais pas de Bloch, cela est dû à la corrélation du désordre [20-21].
2. L'énergie correspondante à la résonance de commutation ($E_C=0.328\text{ eV}$) montre une enveloppe périodique d'où l'état est de Bloch.
3. Pour les énergies loin de la résonance comme l'énergie de la vallée ($E_v=0.290\text{ eV}$), la transmission oscille sous une enveloppe qui s'atténue jusqu'à l'annulation complète pour un nombre de barrières très grand, d'où les états énergétiques sont fortement localisés.

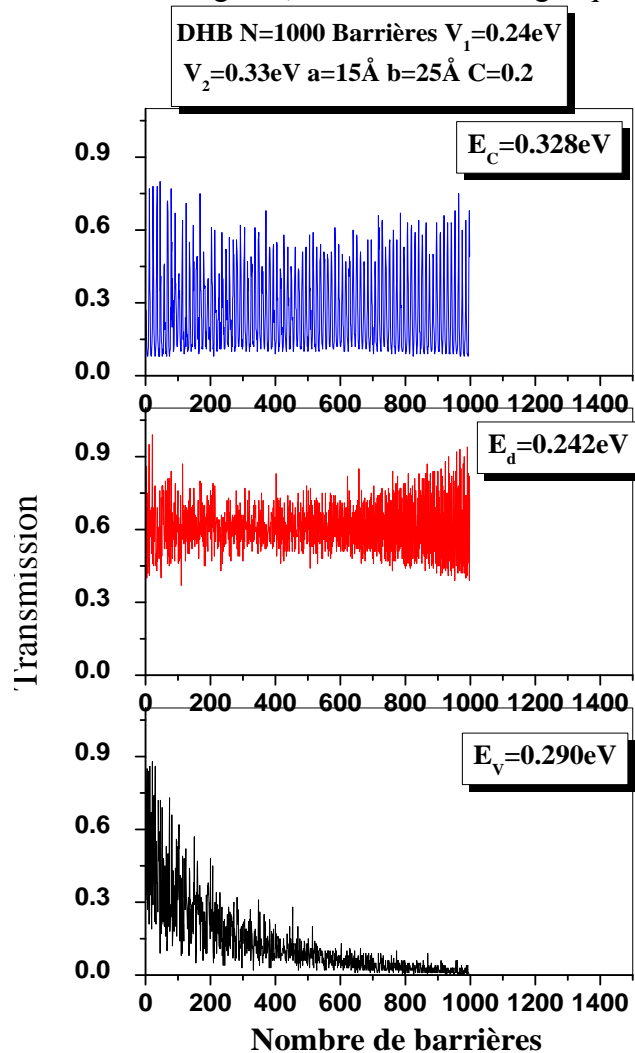


Figure 3.26: Coefficient de transmission d'une structure en DHB en fonction du nombre de barrière.

• **Cas du trimer**

A travers la figure 3.27, le phénomène observé pour le trimer est le même que celui du dimer, sauf que le premier (THB) présente trois états étendus au lieu de deux. Ces états correspondent aux énergies suivantes:

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

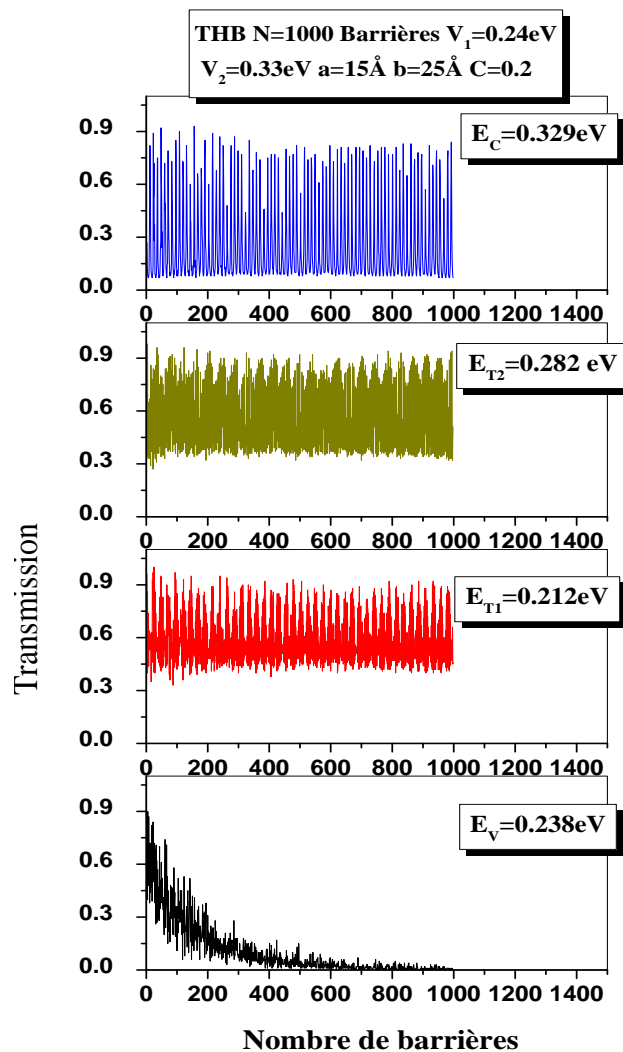
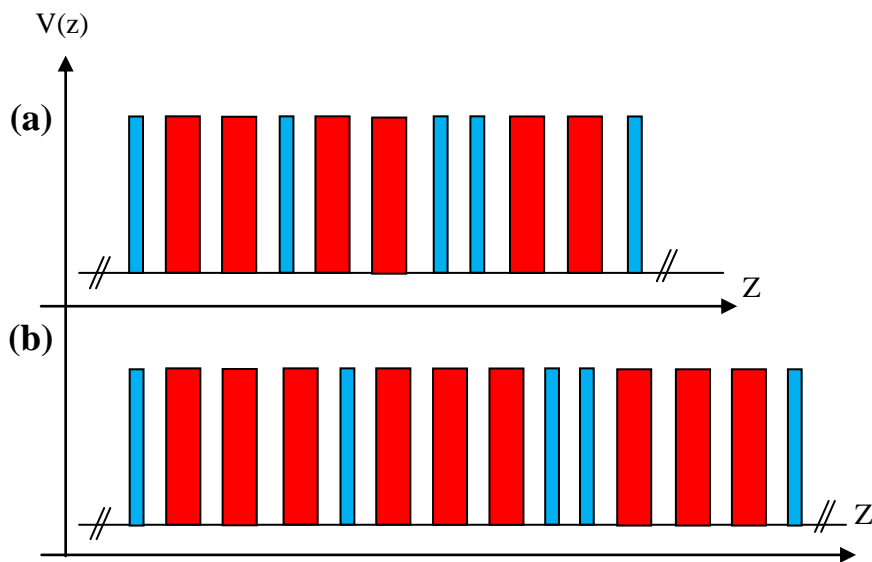


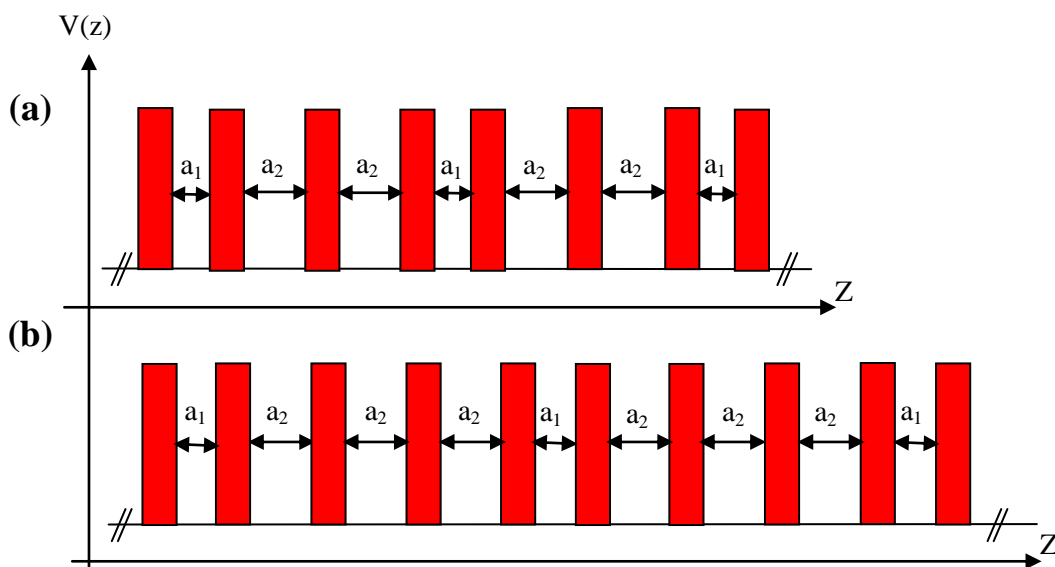
Figure 3.27: Coefficient de transmission d'une structure en THB en fonction du nombre de barrières.

3.4 Superréseau à désordre spatial

Ce modèle consiste à garder la hauteur de la barrière constante et introduire un désordre par doublet ou triplet des épaisseurs des barrières ou des largeurs des puits distribués aléatoirement dans la structure du superréseau. Cette technique élimine la conservation de la période (figures. 3.28 et 3.29).



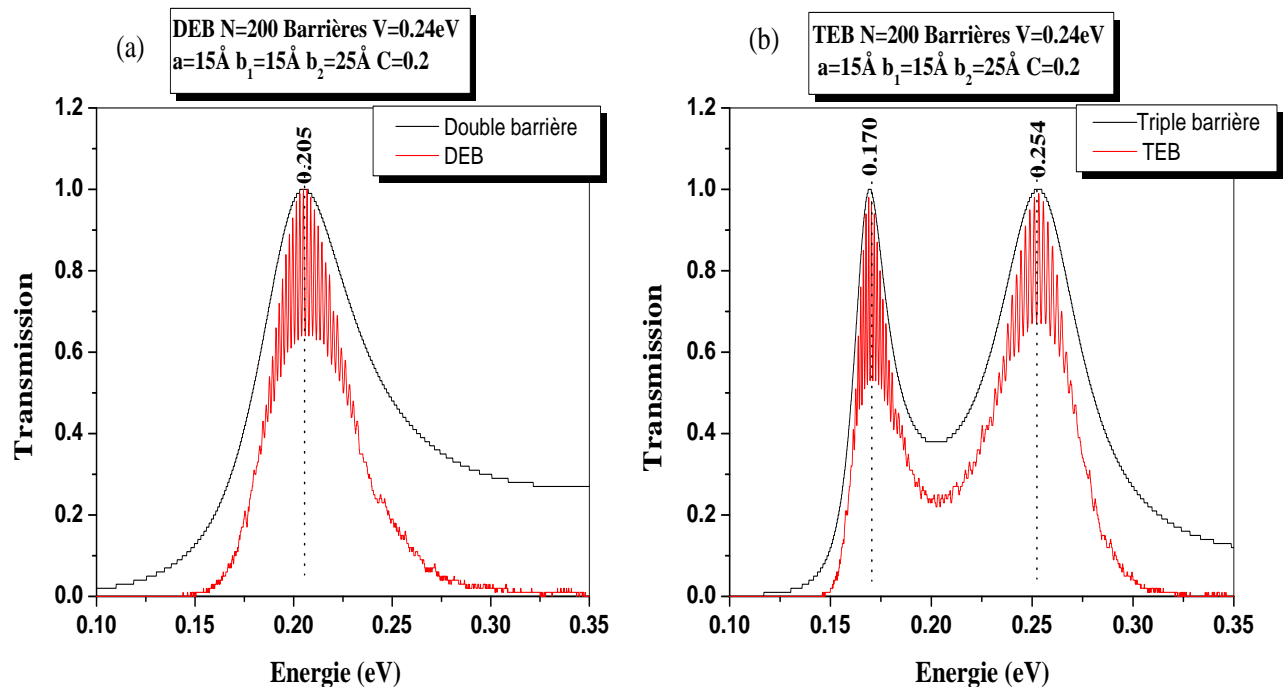
Figures 3.28: Superréseau à désordre spatial: a) DEB b) TEB



Figures 3.29: Superréseau à désordre spatial: a) DLP b) TLP

Pour les structures en dimer et trimer épaisseur de barrière, les figures 3.30 a-b montrent:

- Une disparition du pic correspondant à la résonance de commutation, due à l'absence de la périodicité du superréseau.
- L'existence des pics de résonance provenant de la cellule élémentaire du dimer ou du trimer.



Figures 3.30: Comparaison entre deux structures :
 a) en double barrière et en DEB. b) en triple barrière et en TEB.

3.4.1 Effet de l'épaisseur de barrière

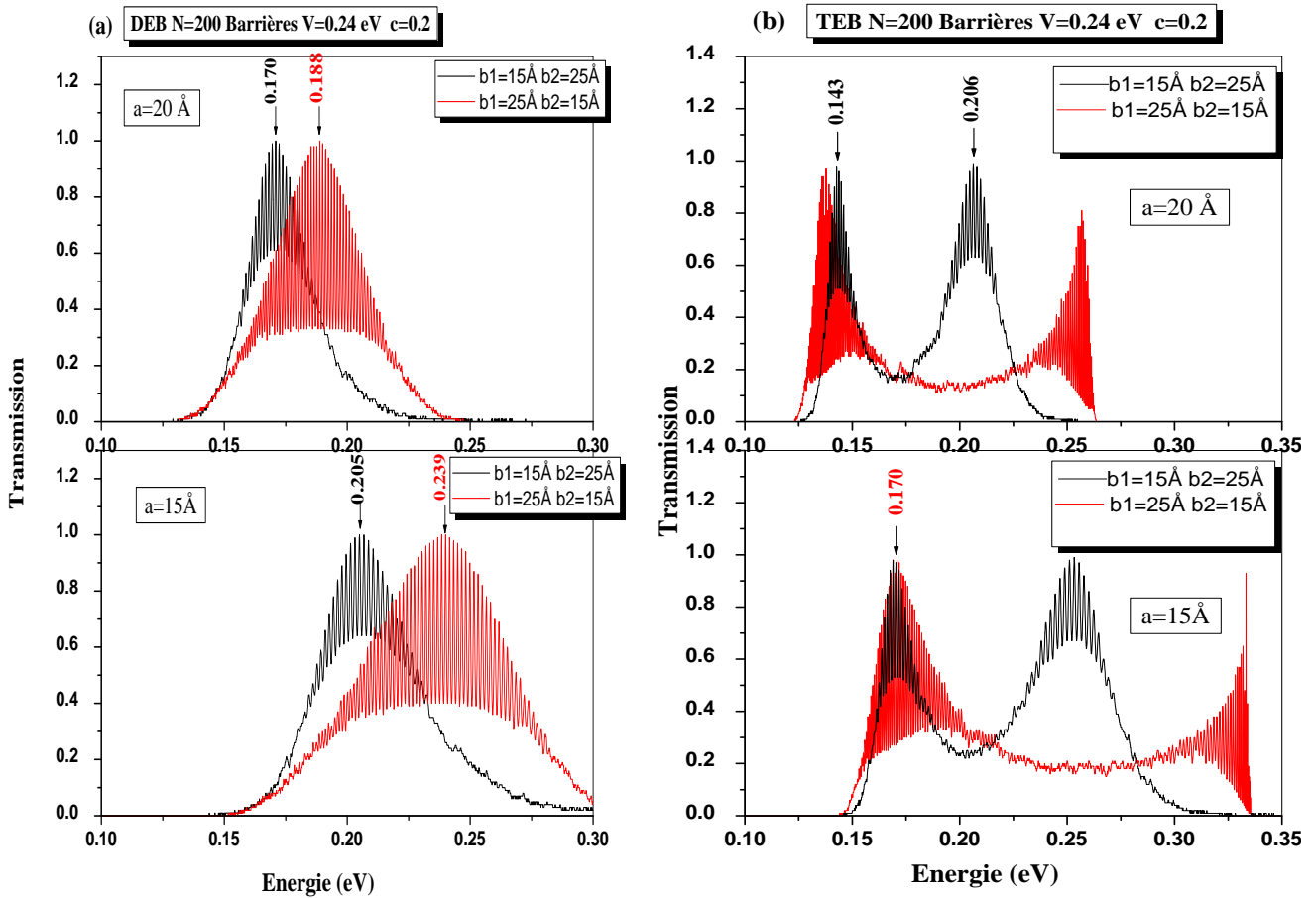
Une translation des pics de résonance vers les basses énergies a été observée quand on augmente la largeur du puits.

Les pics de transmission deviennent de plus en plus étroits pour le DEB et la distance diminue entre les deux pics de résonance pour le TEB avec l'augmentation de l'épaisseur de la barrière (voir figures 3.31a-b).

Interprétation :

- La translation des pics vers les basses énergies résulte du confinement des états à l'intérieur des puits (ce phénomène a été observé dans le cas du désordre structural).

- La limitation des pics en DEB et la diminution de la distance entre les deux pics de transmission pour le TEB ont eu lieu à cause d'une part de la présence des cellules élémentaires dimer/trimer et d'autre part à la décroissance de la portée de l'onde électronique sous l'effet de l'augmentation des épaisseurs des structures en double ou en triple barrière.



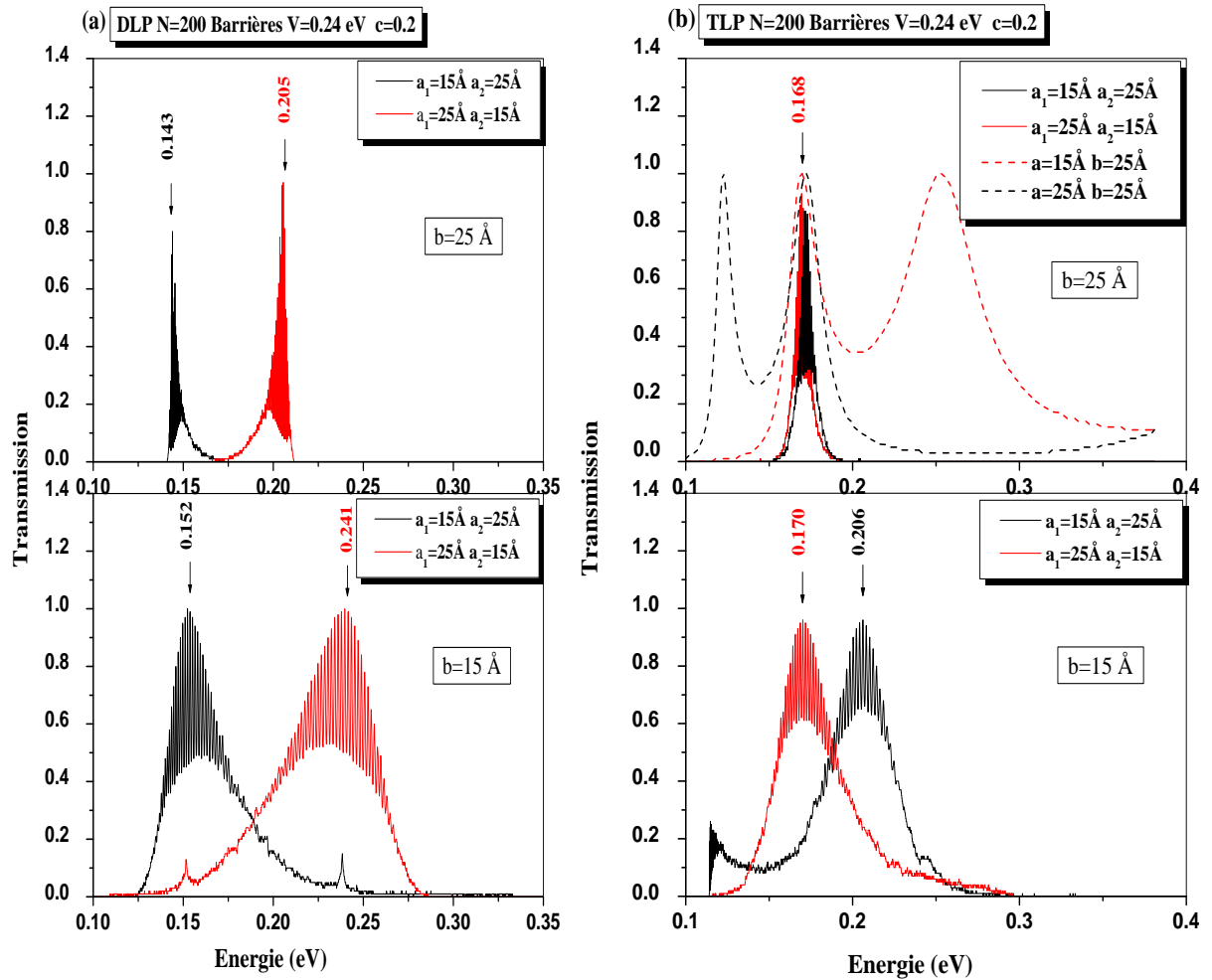
Figures 3.31: Transmission électronique des deux structures en DEB (a) et en TEB (b).

3.4.2 Effet de la largeur de puits

L'effet de la largeur de puits sur la transmission électronique des structures en dimer et trimer est représenté par les figures 3.32a-b, on constate:

- La disparition du pic correspondant à la résonance de commutation.
- L'existence des pics de résonance originaires de la cellule élémentaire pour le dimer.

- La disparition des deux premiers pics correspondant respectivement aux paramètres suivant: $a_1=15 \text{ \AA}$; $a_2=25 \text{ \AA}$ et $a_1=25 \text{ \AA}$; $a_2=15 \text{ \AA}$ pour le trimer. Cette absence des pics est due à leur position en dehors de la zone d'intersection permise.
- D'un côté une translation des pics vers les basses énergies quand on augmente a_2 et de l'autre côté les pics de résonance deviennent plus fines avec l'élévation de b (le même phénomène a été observé dans le cas du DEB et TEB).



Figures 3.32: Coefficient de transmission en fonction de l'énergie des deux structures en DLP (a) et en TLP (b).

3.5 Longueur d'onde laser

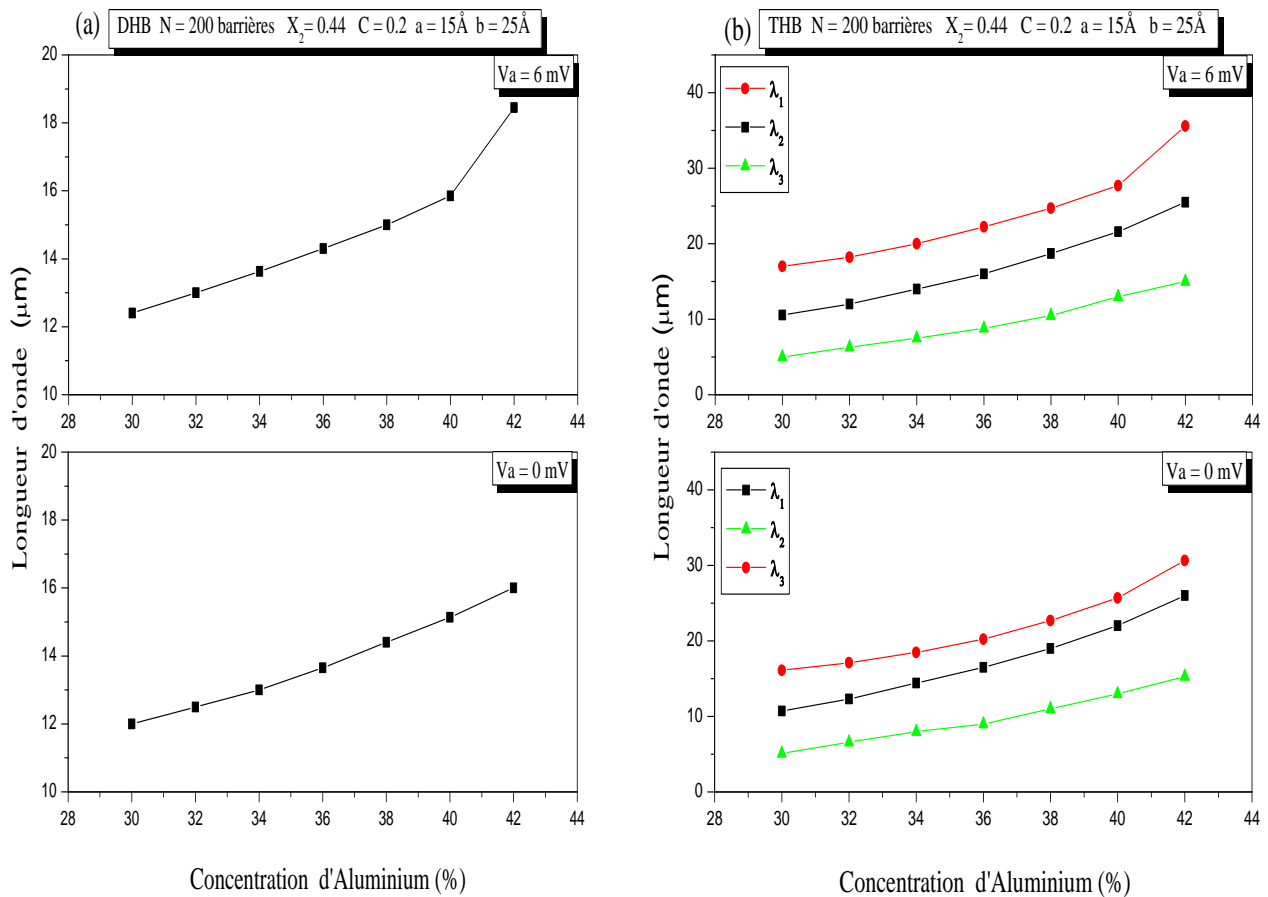
Pour développer des sources laser dans le domaine infrarouge, l'approche la plus courante a été d'étendre le fonctionnement des diodes laser à puits quantiques vers les plus grandes longueurs d'onde. Pour cela, notre travail consiste d'abord à faire varier la valeur de la concentration d'Aluminium x_1 entre 0.3 et 0.42 relative à la hauteur de barrière V_1 tout en fixant x_2 à 0.44 pour V_2 du DHB ou THB.

Les valeurs calculées de la longueur d'onde de l'électron à partir de l'équation (3.9) en fonction de x_1 sont schématisées par les et 3.33 (a –b).

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

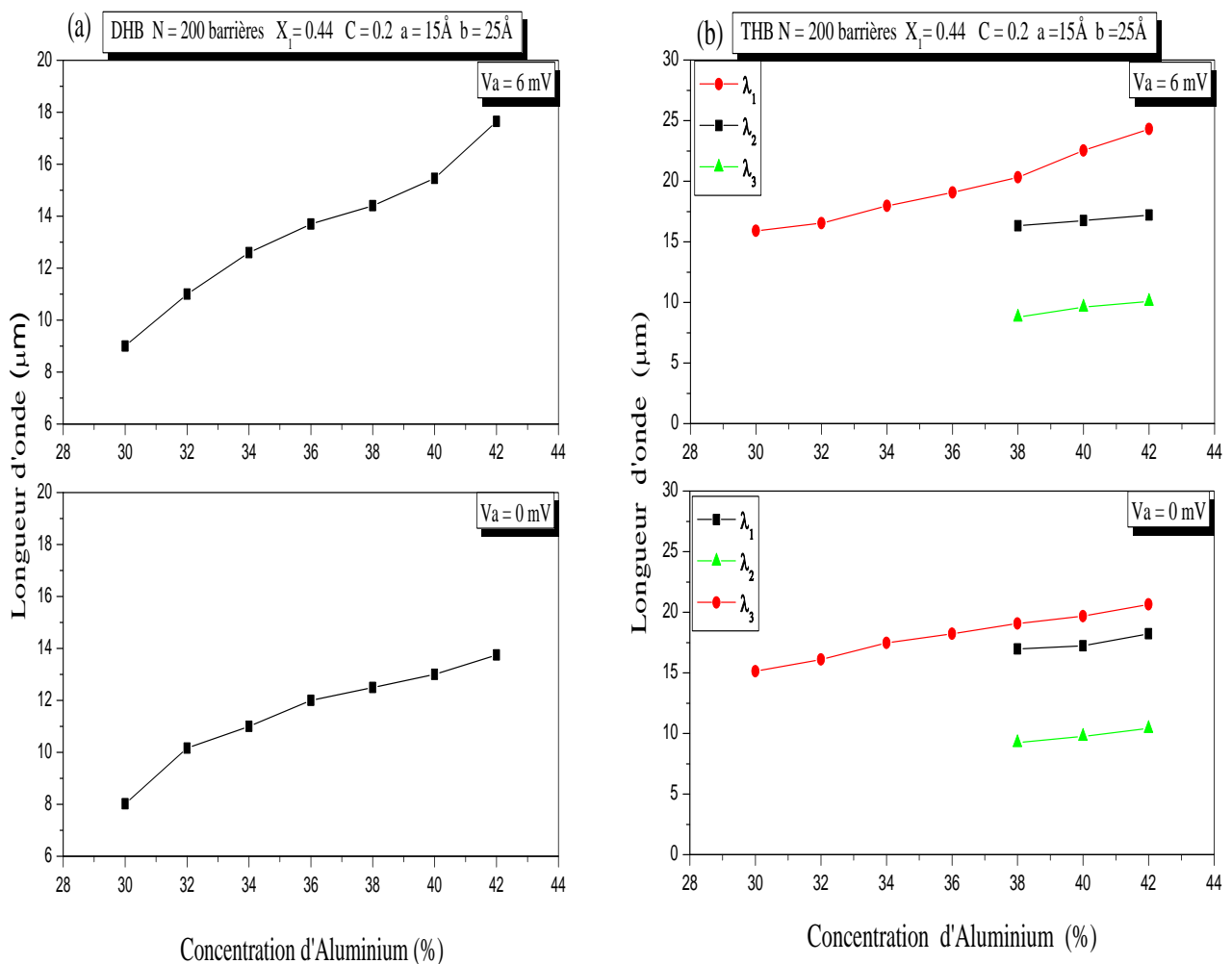
$$\lambda = \frac{hc}{\Delta E} \tag{3.9}$$

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



Figures 3.33: Longueur d'onde laser du DHB (a) et THB (b) en fonction de la concentration d'Aluminium x_1 à deux tensions appliquées.

Les figures 3.33 (a- b) nous indiquent une augmentation des longueurs d'onde tout en restant dans le moyen infrarouge. Cette augmentation est le résultat d'une diminution de la différence d'énergie entre deux pics de résonance successifs. Ce phénomène est dû à la corrélation du désordre en DHB ou en THB. En effet, l'énergie de transition électronique séparant deux niveaux résonants se déplace vers les plus basses valeurs. Ce déplacement spectral responsable de la variation de la longueur d'onde laser est dû à la variation de la bande interdite du matériau $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ en fonction de la concentration x_1 . Ainsi l'élévation de la tension appliquée V_a , entraîne un accroissement de la longueur d'onde.



Figures 3. 34: Longueur d’onde laser du DHB (a) et THB (b) en fonction de la concentration d’Aluminium x_2 à deux tensions appliquées.

La variation de la Longueur d'onde laser du DHB et THB en fonction de la concentration x_2 d'Aluminium sans ou sous une tension appliquée montre que la distribution est presque exponentielle mais toujours dans le moyen infrarouge (figures 3. 34).

Dans le cas du dimer pour $0 < x < 0.44$, l'électron émet sur une seule longueur d'onde, alors que pour la structure trimer, il peut se trouver soit sur deux niveaux d'énergies possibles ($0 < x_2 < 0.38$) soit sur trois ($0.38 \leq x_2 < 0.44$). S'il est excité il sautera sur un niveau supérieur puis redescendra sur un autre inférieur en émettant une onde lumineuse correspondant au saut d'énergie ΔE (figure 3. 35).

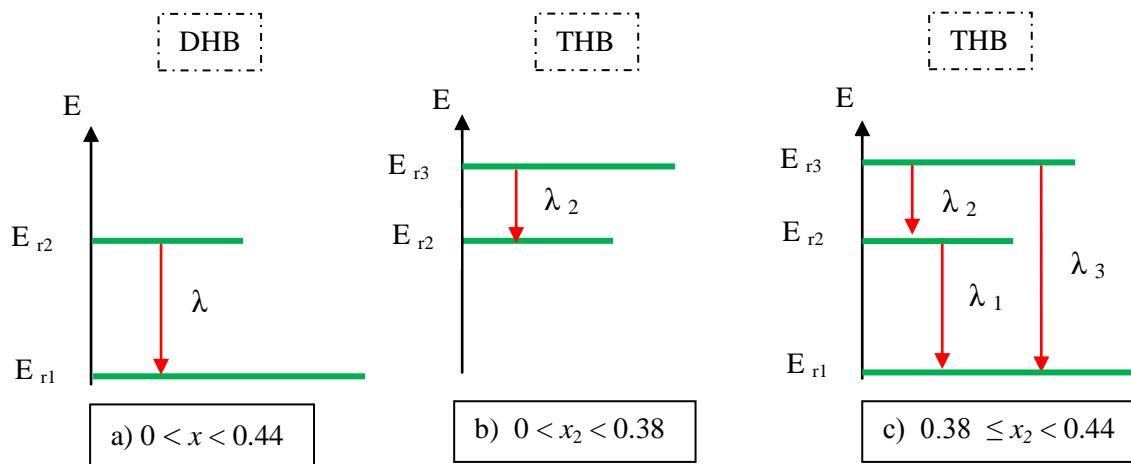


Figure 3. 35: Transition intra-bande du DHB et THB en fonction de la concentration d'Al.

Cette plage de longueur d'onde correspond à celle des photodétecteurs à infrarouge (4 à 20 μm) et des appareils photo infrarouges (entre 8 et 12 μm) [22-26].

Helm et al [27], ont démontré pour la première fois, l'émission des radiations infrarouge de 110, 70 et 50 μm , basée sur des structures avec 5 à 6 minibandes dans le puits. En s'inspirant de cette expérience, Choe et al [28] ont proposé la possibilité d'avoir des émissions de l'ordre de 3 à 5 μm .

3.6 Temps de l'effet tunnel résonant

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

Plusieurs méthodes citées dans la littérature sont utilisées pour calculer le temps de l'effet tunnel résonant telles que la technique de l'hamiltonien, la méthode des valeurs propres complexes [29-36] et la méthode de la Lorentzienne que nous avons utilisé.

3.6.1 Méthode de la Lorentzienne

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

$$T(E) = \frac{\Delta E^2}{(E - E_r)^2 + \Delta E^2} \quad (3.10)$$

E_r : Energie de résonance

ΔE : Largeur à mi-hauteur du pic de résonance du coefficient T [37].

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

$$t = \frac{\hbar}{\Delta E} \quad (3.11)$$

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

Les tableaux 3.1-3.4, montrent une étude comparative des temps de l'effet tunnel résonnant (TETR) sans et sous une tension appliquée entre les deux désordres structural et spatial pour les structures en dimer et trimer. Le temps est exprimé en femtoseconde ($1\text{fs}=10^{-15}\text{s}$). Ce temps dépend des paramètres structuraux choisis: $a=15\text{\AA}$, $b=25\text{\AA}$, $x_1=0.44$ pour le désordre structural et $a=15\text{\AA}$, $b_1=15\text{\AA}$, $b_2=25\text{\AA}$ et $b=25\text{\AA}$, $a_1=25\text{\AA}$, $a_2=15\text{\AA}$ respectivement pour le dimer et le trimer dans le cas du désordre spatial. Nous observons dans certains cas l'impossibilité de calculer ce temps par le fait de l'absence de pic de résonance. Dans le cas du désordre structural le (TETR) diminue avec l'élévation de la concentration x de l'Aluminium pour le dimer et le trimer. Ceci peut être expliqué par la disparition de l'effet du désordre où l'électron ne peut pas faire la différence entre les hauteurs de barrières V_1 et V_2 , il franchit la structure comme si c'était un système ordonné.

Chapitre 3: Résultats et discussions

Dans le cas du désordre spatial c'est totalement différent, où (TETR) est directement proportionnel à la concentration x d'Aluminium relative au gap du matériau étudié $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ qui empêche le passage de l'électron. L'application d'un champ électrique externe $V_a = 6$ mV minimise la corrélation du désordre et rend le temps de passage long. Ceci est dû à l'effet Stark signifiant la modification des états électroniques sous l'action d'un champ électrique externe [38-39].

Les superréseaux THB et TEB compte respectivement un temps de passage de l'électron relativement court ($t_1=7.00$ fs, $t_2=7.04$ fs) et ($t_1=5.88$ fs, $t_2=5.98$ fs) soit sans ou sous un champ électrique externe $V_a = 6$ mV. Ceci permet de réaliser des composants optoélectroniques ultrarapides dus à leurs temps de réponse très court [40].

Tableau 3.1: Comparaison entre les désordres structural et spatial du dimer ($V_a = 0$ mV).

		x (%)	30	32	34	36	38	40	42
Désordre structural DHB	t_1 (fs)		13.54	12.53	11.23	10.96	10.58	10.19	9.82
	t_2 (fs)		23.00	21.64	19.06	17.73	16.44	14.25	12.84
Désordre spatial	DEB	t_1 (fs)	13.65	14.92	16.47	18.08	19.74	21.21	23.17
		t_2 (fs)	-	-	-	-	-	-	-
	DLP	t_1 (fs)	42.15	53.40	72.15	79.28	-	-	-
		t_2 (fs)	-	-	-	-	-	-	-

Tableau 3.2: Comparaison entre les désordres structural et spatial du dimer ($V_a = 6$ mV).

		x (%)	30	32	34	36	38	40	42
Désordre structural DHB	t_1 (fs)		13.95	13.14	11.72	11.30	10.96	10.58	10.07
	t_2 (fs)		24.33	22.58	20.12	18.78	17.21	15.16	13.94
Désordre spatial	DEB	t_1 (fs)	13.85	15.29	17.26	18.79	20.56	22.15	24.35
		t_2 (fs)	-	-	-	-	-	-	-
	DLP	t_1 (fs)	45.38	59.55	81.94	92.16	-	-	-
		t_2 (fs)	-	-	-	-	-	-	-

Tableau 3.3: Comparaison entre les désordres structural et spatial du trimer ($V_a = 0$ mV).

		x (%)	30	32	34	36	38	40	42
Désordre structural THB		t_1 (fs)	-	-	-	-	32.78	25.24	23.53
		t_2 (fs)	16.94	16.82	16.73	10.68	7.83	7.32	7.00
		t_3 (fs)	19.73	18.06	14.68	8.91	8.78	8.11	7.89
Désordre spatial	TEB	t_1 (fs)	11.75	12.19	12.90	14.00	14.62	14.95	15.30
		t_2 (fs)	5.88	6.09	6.45	6.85	7.23	7.47	7.65
		t_3 (fs)	-	-	-	-	-	-	-
	TLP	t_1 (fs)	59.82	65.80	75.63	88.92	106.13	129.02	177.84
		t_2 (fs)	-	-	-	-	-	-	-
		t_3 (fs)	-	-	-	-	-	-	-

Tableau 3.4: Comparaison entre les désordres structural et spatial du trimer ($V_a = 6$ mV).

		x (%)	30	32	34	36	38	40	42
Désordre structural THB		t_1 (fs)	-	-	-	-	32.94	27.34	23.63
		t_2 (fs)	19.34	18.57	16.80	15.40	8.36	7.34	7.04
		t_3 (fs)	19.92	19.16	14.75	12.28	9.20	8.14	7.97
Désordre spatial	TEB	t_1 (fs)	11.96	12.65	13.43	14.30	15.30	15.66	16.05
		t_2 (fs)	5.98	6.20	6.58	6.93	7.31	7.65	7.83
		t_3 (fs)	-	-	-	-	-	-	-
	TLP	t_1 (fs)	65.80	73.11	77.41	91.39	113.45	134.29	193.53
		t_2 (fs)	-	-	-	-	-	-	-
		t_3 (fs)	-	-	-	-	-	-	-

3.7 Conclusion

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

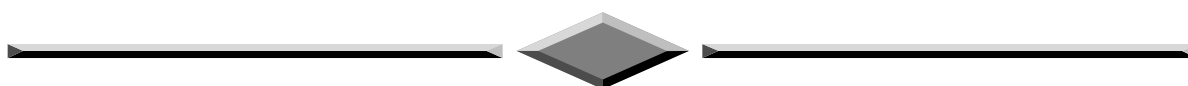
Chapitre 3: Résultats et discussions

superréseau. Les systèmes étudiés permettent de réaliser des longueurs d'onde modulable où les émissions laser obtenues sont dans le moyen infrarouge.

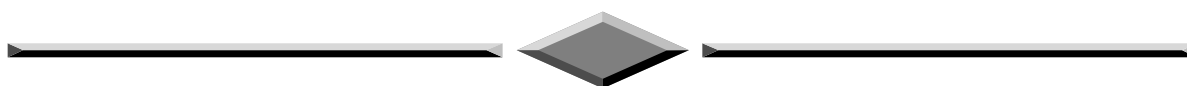
Références

- [1] S.Adachi, *J.App.Phys.* 58 R1 (1985).
- [2] S. Bentata, *Superlattices and Microstructures*, 37: 297 (2005).
- [3] I. Gomez, F.Dominguez-Adame, E. Diez, *Physica*. B324: 235 (2002).
- [4] Z. Aziz, S. Bentata, R. Djelti, *J. App. Sci.* 7(3) 3140, 2006.
- [5] R. Djelti, S. Bentata, Z. Aziz, *Lebanese Science journal*, vol.8, N° 01 (2007)
- [6] J.C.Flores, *J.Phys.Condens.Matter*, 1 8471(1989).
- [7] K.Senouci, *J.Phys.Condens.Matter* 19 076202 (2007).
- [8] V.Bellani, M.Amado E.Diez. C.Koerdt, M.Potemski and R.Hey, arXiv:070162.v1 Cond-mat.mes-hall,(2007).
- [9] F.Dominguez-Adame, V.A.Malyshev, *Am.J.Phys*,72 227(2004).
- [10] 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).
- [11] S.Bentata, B.Ait Saadi, H.Sediki, *Superlattices and Microstructure*, 30 300(2001).
- [12] G.Bastard, J.B.Leuse, R.Ferreira, and P.Voisin, *Superlattices and Microstructures* 6, 77(1989).
- [13] R.Djelti, Z.Aziz, S.Bentata, *FIZIKA A* 154,219-226(2006).
- [14] L.Zhenxing and Z.Weiyi *Phys.Rev.B* 75, 064207 (2007).
- [15] E.Diez, A.Sanchez, F.Dominguez-Adame, *Solid State Electronics* 40 433 (1996).
- [16] V.Bellani, E.Diez, A.Parisini, L.Tarrione, R.Hey,G. B. Parravicini, F.Dominguez-Adame,*Physica*, A7823(2000).
- [17] R.Djelti, S.Bentata, Z.Aziz, American Institute of Physics AIP conference proceedings, *Nanotechnology and its applications*, 929, 6-11, (2007).
- [18] M.Consuelo, A.Lima, G.A.Farias, and V.N.Freire, *Superlattices and Microstructures* 17, 235 (1995).
- [19] J.S.Walker, J.Gathright, *Amer.J.Phys*, 62 408(1994).
- [20] W.Zhang and S.E.Ulloa, *Phys.Rev.B* 74, 115304 (2006).
- [21] T.Kaya, *Eur.phys.j,B:Cond.Matter.phys*, vol.55,no1,(2007).
- [22] S. Smith, L. C. Chiu, S. Margalit, A. Yariv, and A. Y. Cho, *J. Vac. Sci. Technol.* B1, 376 (1983).
- [23] D. Coon and R. P. G. Karunasiri, *App. Phys. Lett.* 45, 649 (1984).
- [24] I.Vurgaftman, C.L. Felix, W.W. Bewley, D.W. Stokes, R.E. Bartolo, J.R Meyer,

- «Mid-infrared W lasers », *Phil. Trans. Roy. Soc. Lond. A* 359, p. 489, (2001).
- [25] J.Faist, F.Capasso, D. L. Sivco, C.Sirtori, A.L.Hutchinson, A. Y.Cho, « Quantum Cascade Laser », *Science* 264, 553, (1994).
- [26] R.Teissier, D. Barate, A.Vicet, C.Alibert, A.N.Baranov, X.Maracadet, C.Renard, M.Garcia, C.Sirtori, D.Revin, J.Cockburn, « Room temperature operation of InAs/AlSb quantum cascade lasers », *Appl. Phys.Lett.* 85, (2), 167, (2004).
- [27] M. Helm, P. England, E. Colas, F. De Rosa, and S. J. Allen, Jr. *Phys. Rev. Lett.* 63, 74 (1989).
- [28] J. W. Choe, A. G. U. Perera, M. H. Francombe, and D. D. Coon, *App. Phys. Lett.* 59, 54 (1991).
- [29] T.G.C. Sollner, W.D.Goodhue, P.E.Tannanwald, C.D.Parker, and D.D.Peck, *App.Phys.Lett.* 43, 588 (1985).
- [30] Luryi, *App.Phys.Lett.* 47, 490 (1985).
- [31] T.B.Bahder, C.A.Morrison, and J.D.Bruno, *App.Phys.Lett.* 51, 1089(1987).
- [32] Zou, J.Rammer, and K.A.Chao, *Phys.Rev.B* 24, 15 912 (1992).
- [33] Landauer and T.Martin, *Rev. Mod.Phys.* 66, 217 (1994)
- [34] H.Hauge and J.A.Stonvneng, *Rev.Mod.Phys.* 61, 917 (1989).
- [35] Jauho, in *Hot Carriers in Semiconductor Nanostructures*, edited by J.Shah (Academic, New York, (1992).
- [36] Juang, *Phys.Rev.B* 44,10706 (1991).
- [37] S. S. Allen and S. L. Richardson, *Phys. Rev. B* 50, 11 693 (1994).
- [38] J.S. Walker, J.Gathright, *Am.J.Phys.* 62, 408 (1994).
- [39] I. Gomez, F.Dominguez-Adame, E.Diez, *Phys.Rev.B:Condens.Matter* 324, 238 (2002).
- [40] F.Bendahma, S.Bentata, R.Djelti, Z.Aziz, *Physica B* 449, 150–154, (2014).



Conclusion générale



Conclusion générale

Cette thèse présente une étude qualitative sur les propriétés optoélectroniques des superréseaux ordonnés et désordonnés types (III-V) à base d'Arsenic. Un aperçu général sur les méthodes numériques de calcul a été abordé, suivi d'une étude de transmission électronique dans les systèmes ordonnés. A travers les résultats obtenus, les structures en double et triple barrières rectangulaires présentent un état permis pour chaque puits de potentiel. Pour une structure à N barrières rectangulaires, N-1 pics de résonance très proches les uns des autres relatifs à N-1 puits, donnent naissance à une structure de minibandes permises.

Les structures aux désordres structural et spatial ont fait aussi l'objet de notre étude. Le désordre structural consiste à introduire par doublet ou triplet des hauteurs de barrières de V_2 différentes de V_1 , réparties d'une manière aléatoire dans la structure du superréseau. Contrairement au désordre structural qui conserve la période P du système ($P = a + b$), seules les largeurs des puits a ou bien les épaisseurs des barrières b ont été modifiées dans le cas du désordre spatial.

La variation du coefficient de transmission en fonction de l'énergie incidente de l'électron pour une structure dimer hauteur de barrière présente la destruction de la structure de minibandes entraînant l'apparition de deux pics de résonance, l'un est dû à la cellule dimer et l'autre à la commutation entre les deux potentiels V_1 et V_2 . Une démonstration analytique utilisant les commutateurs quantiques est présentée comme preuve théorique de l'origine de cet état correspondant à ce pic. La structure en trimer hauteur de barrière montre la présence de trois pics de résonance, les deux premiers sont dûs à la cellule élémentaire trimer et le troisième résultant de la commutation des deux potentiels V_1 et V_2 . Ces résultats sont en parfait accord avec ceux trouvés dans la littérature.

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

De l'autre côté, l'augmentation de l'épaisseur de la barrière b fait rétrécir la structure de la minibande vers le centre jusqu'à sa disparition complète à des valeurs dépassant 54 Å. Du fait que b est supérieur à la longueur d'onde λ de l'électron, l'ensemble des barrières se présentent à la particule comme une marche de potentiel infinie. Ainsi, les puits sont découplés et les états deviennent liés dans les cas du dimer et trimer.

Conclusion générale

Deux cas se présentent dans l'étude de l'influence de la hauteur de la barrière sur la transmission:

- $V_1 < V_2$,

Tous les pics de résonance relatifs au dimer et au trimer sont complètement présents. Une fois, la différence ($V_2 - V_1$) devienne approximativement nulle, ces pics se transforment en minibandes. L'électron franchit les barrières comme si c'était un système ordonné.

- $V_1 > V_2$

La disparition des pics correspondants à la cellule dimer/trimer se manifeste pour quelques valeurs de V_2 , du fait que la région d'intersection des minibandes du réseau V_1 et V_2 n'est pas suffisamment large pour supporter l'existence de tels types de pics.

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

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

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

L'application d'un champ électrique externe entraîne la disparition de la symétrie qui à son tour provoque la diminution linéaire du profil de potentiel. L'augmentation du champ externe minimise la corrélation du désordre et rend les puits adjacents découplés, où les états deviennent très localisés.

Les superréseaux GaAs/ $Al_xGa_{1-x}As$, matériaux à désordre corrélé, faisant l'objet de notre travail présentent une seule émission pour le dimer et une ou trois pour le trimer. Cette propriété nous a permis d'envisager des dispositifs très prometteurs dans la conception des lasers à longueur d'onde modulable dans le moyen infrarouge.

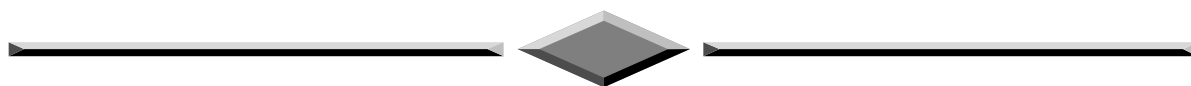
Par comparaison entre les deux types de désordre, il a été montré que dans le cas du désordre structural le temps de l'effet tunnel résonnant (TETR) diminue avec l'élévation de la concentration x de l'Aluminium pour le dimer et le trimer. Ceci peut être expliqué par la

Conclusion générale

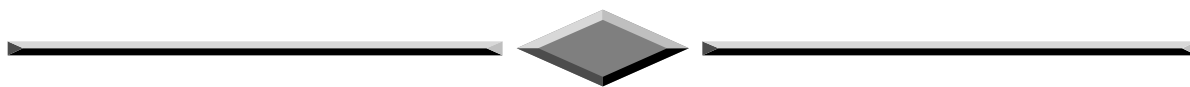
disparition de l'effet du désordre où l'électron ne peut pas faire la différence entre les hauteurs de barrières V_1 et V_2 , il franchit la structure comme si c'était un système ordonné.

Dans le cas du désordre spatial c'est totalement différent, le TETR est directement proportionnel à la concentration x d'Aluminium relative au gap du matériau GaAs/ $Al_xGa_{1-x}As$ étudié. Ce dernier empêche le passage de l'électron. L'application d'un champ électrique externe minimise la corrélation du désordre et rend le temps de passage plus long. Ceci est dû à l'effet Stark signifiant la modification des états électroniques sous l'action d'un champ électrique externe. Le temps de l'effet tunnel résonnant obtenu nous donne la possibilité de réaliser des composants optoélectroniques ultrarapides à temps de réponse très court.

Finalement, si le travail réalisé a apporté quelques réponses concernant les propriétés optoélectroniques des superréseaux désordonnés, de nombreuses perspectives sont envisagées telles la généralisation de la corrélation sur les modèles de N mer, l'effet de la température à travers l'introduction du coefficient KBT dans l'équation de Schrödinger qui prend en charge l'interaction électron-photon et l'influence de la non linéarité à travers les interactions coulombiennes électron-électron.



Travaux liés à cette thèse



Communications nationales

1. **F. Bendahma**, S. Bentata, Y. Sefir, S. Terkhi, Z. Meghoufel "Influence des paramètres structuraux sur les propriétés optoélectroniques d'un superréseau désordonné". Première journée Scientifique des doctorants (JSDOCFST-2012)-14 Mai 2012 à Université Abdelhamid Ibn Badis de Mostaganem.
2. Sefir.Y, Aziz.Z, Bentata.S, **Bendahama.F**, Terkhi.S et Meghoufel.Z.F,"Etude des propriétés optoélectroniques des superréseaux quasipériodiques "Première journée Scientifique des doctorants (JSDOCFST-2012)-14 Mai 2012 à Université Abdelhamid Ibn Badis de Mostaganem.
3. S. Terkhi, S. Bentata, Z.F. Meghoufel, B. Bouadjmi, **F. Bendahma** et Y. Sefir" Effet de la fraction molaire « x » sur les propriétés de transports électroniques des superréseaux gènes par des séquences spécifiques » "Première journée Scientifique des doctorants (JSDOCFST-2012)-14 Mai 2012 à Université Abdelhamid Ibn Badis de Mostaganem".
4. Sefir.Y, Aziz.Z, Bouadjmi.B, Terkhi.S, **Bendahama.F** et Bentata.S,"L'effet des Paramètres Structuraux sur les propriétés optoélectroniques des superréseaux quasipériodiques" la Journée Mondiale de L'Environnement (Eau et Environnement) 7 Juin 2012 à Université Abdelhamid Ibn Badis de Mostaganem.
5. **F. Bendahma**, Y. Sefir, S. Terkhi, Z.F.Meghoufel et S.Bentata. "Emission laser dans un superréseau désordonné". 10^{ème} Congrès National de la Physique et de ses Applications 20-22 Novembre 2012- Mostaganem.
6. Z. F. Meghoufel, S. Bentata, S. Terkhi, B. Bouadjmi, **F. Bendahma** et Y. Sefir" Effet de la nonlinéarité sur la transmission électronique d'un superréseau GaAs/ Al_xGa_{1-x}As". 10^{ème} Congrès National de la Physique et de ses Applications 20-22 Novembre 2012- Mostaganem.
7. **F. Bendahma**, Z.F.Meghoufel, Y. Sefir, S. Terkhi, et S.Bentata. " Etude des propriétés électroniques d'un matériau de type GaAs" . "Deuxième journée Scientifique des doctorants 19 Mai 2013 à Université Abdelhamid Ibn Badis de Mostaganem".
8. Y. Sefir , Z.Aziz, **F. Bendahma**, S. Terkhi, Z.F.Meghoufel, S.Chérid, S.Bentata. " Etude l'effet des paramètres structuraux sur la nature des états électroniques des

superréseaux quasipériodiques de Fibonacci " . "Deuxième journée Scientifique des doctorants 19 Mai 2013 à Université Abdelhamid Ibn Badis de Mostaganem".

9. S. Terkhi, S. Bentata, R. Djelti, Z. Aziz, Z. F. Meghoufel, et **F. Bendahma**, et Y. Sefir. " Effet de la variation de la fraction molaire « x » sur les émissions laser dans les superréseaux désordonnés InAs / In_xGa_{1-x}As".Les journées d'études de chimie (12-13 Mars 2014). Faculté des sciences et de la technologie, Université de Mascara.
10. **F. Bendahma**, S.Bentata , S. Cherid, Z.F.Meghoufel, A. Zitouni, B.Bouadjmi, Y. Sefir, S. Terkhi. " propriétés de transport dans les superréseaux désordonnés" . "3ème journée Scientifique des doctorants 19 Mai 2014 à Université Abdelhamid Ibn Badis de Mostaganem".
11. S. Cherid, S.Bentata , **F. Bendahma**, B.Bouadjmi Z.F.Meghoufel, A. Zitouni, S. Terkhi, Y. Sefir. " Etude des phénomènes de transport dans les cristaux photoniques à désordre corrélé". "3ème journée Scientifique des doctorants 19 Mai 2014 à Université Abdelhamid Ibn Badis de Mostaganem".

Communications internationales

1. Z. F. Meghoufel, S. Bentata, S. Terkhi, S.Cherid, Y. Sefir and **F. Bendahma** " Etude des effets nonlinéaires sur les propriétés de transport électronique d'un superréseau ". Second International Conference on New Materials and Active Devices (NMCA'2014). Larbi Ben M'hidi University, Oum El-Bouagi (Algeria).
2. **F. Bendahma**, S. Bentata, F. Z. Meghoufel, S.Cherid, S. Terkhi, Y. Sefir "OPTOELECTRONICS PROPERTIES OF GaAs / Al_xGa_{1-x}As SUPERLATTICES ". 1^{er} Congrès International sur les Plasmas et les Matériaux (CIPM'14). Université Abou Bekr Belkaid (Tlemcen).
3. S. Terkhi, S. Bentata, Z. F. Meghoufel, S.Cherid, Y. Sefir et **F. Bendahma** "Effet de désordre en hauteur de barrièresur les longueurs d'ondes émise par les superréseaux InAs / In_xGa_{1-x}As ". 1^{er} Congrès International sur les Plasmas et les Matériaux (CIPM'14). Université Abou Bekr Belkaid (Tlemcen).

Publications internationales

1. F. Z. Meghoufel, S. Bentata, S. Terkhi, **F. Bendahma**, S.Cherid. " Electronic transmission in non-linear potential profile of GaAs / Al_xGa_{1-x}As biased quantum well structure"Superlattices and Microstructures 57, 115-122 (2013).
2. **F. Bendahma**, S. Bentata, R. Djelti, Z.Aziz. " Effect of the aluminium concentration on the resonant tunnelling time and the laser wavelength of random trimer barrier Al_xGa_{1-x}As superlattices " Physica B 449, 150-154 (2014).