



UNIVERSITE ABDELHAMID IBN BADIS-MOSTAGANEM

Faculté des Sciences et de la Technologie

Département de Génie des Procédés

N° D'ORDRE : D/2014

Thèse

Présentée pour obtenir

LE DIPLOME DE DOCTORAT EN SCIENCES

SPECIALITÉ : Science des matériaux

Par

M^{me} SEFIR YAMINA

**ETUDE DE L'EFFET DES PARAMETRES
STRUCTURAUX SUR LES STRUCTURES DE
BANDES DANS LES SUPERRESEAUX
QUASIPERIODIQUES $Al_xGa_{1-x}As / GaAs$**

Soutenue le 12/06/2014 , devant le jury composé de :

Président	: Mr.El Hadj ELANDALOUSSI	Professeur	U. Mostaganem
Examineurs	: Mr. Abdelouahab ZANOUN	Professeur	ENP d'Oran
	: Mr. Abdallah MILOUDI	Professeur	ENP d'Oran
	: Mr. Abdelkader CHOUIAH	Professeur	U. Mostaganem
	: Mr. Djamel MADOURI	Maître de conférences A	U. d'Oran ES-SENIA
Rapporteur	: Mr. Zoubir AZIZ	Maître de conférences A	U. Mostaganem

A

Ma défunte fille

Mon défunt mari

Remerciements

Louange à Dieu qui a permis d'élaborer cette thèse.

Je remercie toutes les personnes de près ou de loin qui m'ont soutenu moralement et spirituellement.

Mes vifs remerciements à Monsieur *AZiZ Zoubir* mon directeur de thèse, qui m'a soutenu dans les moments difficiles et qui m'a aidé à traverser le rude chemin de la vie estudiantine. Merci infiniment *Mr AZiZ*.

Je remercie également Monsieur *Bentata Samir*, Professeur à l'université de Mostaganem qui a toujours été présent pour moi.

Je suis particulièrement reconnaissante à Monsieur *El Hadj ELANDALOUSSI*, Professeur à l'université de Mostaganem d'avoir bien voulu présider cet honorable jury et je le prie d'accepter mes sincères remerciements.

Mes remerciements les plus sincères à Monsieur *Zanoun Abdelouahab* et Monsieur *Abdallah Miloudi*, Professeurs à l'ENP d'Oran, à Monsieur *Chouiah Abdelkader*, Professeur à l'université de Mostaganem et à Monsieur *Madouri Djamel*, Maitre de conférences A à l'université d'Oran ES- SENIA qui m'ont fait l'honneur de faire partie du jury.

Cette thèse est aussi le fruit d'un travail de groupe. Je souhaiterais remercier toute l'équipe de recherche de notre laboratoire.

Mes remerciements vont également aux membres de ma famille qui m'ont poussé et soutenu. Ils ont chassé mes doutes et mes incertitudes.

Un grand merci pour mes très chers parents, je sais que vous serez toujours là pour moi.

A mon mari Nourddine

A tous, merci

Ce travail a été effectué au Laboratoire de Technologie et Propriétés du Solide (LTPS), à la Faculté des Sciences et Techniques (FST), Université Abdelhamid Ibn Badis (Mostaganem).

Résumé : Ce travail consiste à étudier l'effet de la variation des paramètres structuraux sur les structures de bandes dans les superréseaux quasipériodiques de Fibonacci $Al_xGa_{1-x}As/GaAs$ en utilisant le formalisme de la matrice de transfert et les fonctions d'Airy. Nos résultats obtenus montrent que l'augmentation de la largeur des puits de Fibonacci af conduit au confinement des subminibandes avec un élargissement des minigaps, ce qui provoque une fragmentation systématique et cohérente. L'épaisseur de la barrière de Fibonacci bf agit sur la largeur des subminibandes en contrôlant la force d'interaction entre les états propres voisins. Son augmentation donne lieu aux états singulièrement étendus. La hauteur de la barrière de Fibonacci V_f permet de contrôler le degré de désordre structural. Ces phénomènes deviennent plus considérables pour les structures quasipériodiques en dimer. La variation de ces paramètres permet la conception de laser à longueur d'onde modulable.

Mots-clés: Coefficient de transmission- Superéseaux quasipériodiques - Etats singulièrement localisés et étendus- Paramètres structuraux- Laser de longueur d'onde modulable.

الملخص: يتمثل موضوع هذا البحث, في دراسة تأثير تغيرات العوامل البنيوية على بنيات الشرائط في الشبكات العالية. الشبه الدورية لفيبوناتشي $Al_xGa_{1-x}As/GaAs$ باستخدام دساتير مصفوفة الانتقال و دوال أيري. النتائج المتحصل عليه تبين إن زيادة عرض الأبار لفيبوناتشي تقود إلى احتوائها على شرائط مصغرة مع توسيع ممرات الانتقال, الذي يؤدي إلى تجزئ منهجي و متماسك. سمك الحاجز لفيبوناتشي يؤثر على عرض الشرائط المصغرة و قوة التداخلات بين الحالات النقية المجاورة, زيادته تؤدي إلى ظهور حالات أحادية ممددة. ارتفاع في سمك الحاجز لفيبوناتشي يسمح بمراقبة درجة الاضطراب البنيوي في هذه البنيات. من جهة أخرى, هذه الظواهر تصبح أكثر ظهورا بالنسبة للبنيات الخاصة بالشبكات العالية الشبه دورية الثنائية لفيبوناتشي. التغيرات في هذه العوامل تسمح بتصميم ليزر ذو أطوال موجات قابلة للتعديل.

الكلمات المفتاحية: معامل النفوذ- الشبكات العالية الشبه دورية- الحالات الأحادية الممددة و المتمركزة- تغيرات العوامل البنيوية- ليزر ذو أطوال موجات قابلة للتعديل.

Abstract: This work is to study the effect of the variation of structural parameters on the band structure in the quasiperiodic Fibonacci superlattices $Al_xGa_{1-x}As/GaAs$ using the formalism of the transfer matrix and Airy functions. Ours results show that increasing the width of Fibonacci's wells af allows to the confinement of subminibands with a widening of minigaps, this causes a consistent and coherent fragmentation. The barrier thickness of Fibonacci bf acts on the width of subminibands by controlling the interaction force between neighboring eigenstates. Its increase gives rise to singularly extended states. The barrier height Fibonacci V_f permit to control the degree of structural disorder in these structures. On the other hand, these phenomena become more significant for quasiperiodic structures dimer of Fibonacci. The variation of these parameters permits the design of laser with modulated wavelength.

Keywords: Transmission coefficient – Quasiperiodic superlattices- Singularly localized and extended states- Structural parameters- Laser with modulated wavelength

Sommaire

INTRODUCTION GENERALE	1
CHAPITRE I GENERALITES SUR LES SUPERRESEAUX	
I.1 INTRODUCTION	4
I.2. SUPERRESEAUX	4
I.2.1 Historique des superréseaux	4
I.2.2 Définition d'un superréseau	5
I.2.3 Techniques de fabrication	6
I.2.3.1 Epitaxie par jets moléculaires	6
I.2.3.2 Epitaxie en phase vapeur des organométalliques	7
I.2.4 Types de superréseaux	8
I.2.4.1 Superréseaux à puits et à barrières rectangulaires	8
I.2.4.2 Superréseaux à potentiel de MATHIEU	8
I.2.4.3 Superréseaux polytypes	8
I.2.4.4 Superréseaux à modulation de dopage	9
I.2.4.5 Superréseaux à puits quantique parabolique	10
I.2.4.6 Superréseaux à dents de scie	10
I.2.4.7 Superréseaux à masse effective	11
I.2.4.8 Superréseaux quasipériodiques	12
I.2.5. Matériau GaAs et $Al_xGa_{x-1}As$	12
I.2.6 Notion de gap direct et gap indirect	13
I.2.7 Classification des superréseaux	14
I.2.8 Propriétés des superréseaux	15
I.2.8.1 Structure de minibande	15
I.2.8.2 Coefficient de transmission	16
I.2.8.3 Effet tunnel résonnant	16
I.2.8.4 Temps de l'effet tunnel résonnant	17
I.2.9 Application lasers	17
I.2.9.1 Principe de fonctionnement d'une diode laser	18
I.2.9.2. Structure d'une diode laser	19
I.2.9.3. Le laser à cascade quantique	20
I.3. CONCLUSION	21
I.4. REFERENCES	23
CHAPITRE II LES SYSTEMES UNIDIMENSIONNELS	
II.1 SYSTEME ORDONNÉ	28
II.2 SYSTEMES DESORDONNÉS	29
II.3 SYSTEMES QUASIPERIODIQUES	30
II.3.1 Propriétés structurales	31
II.3.1.1 Coupe et projection	31
II.3.1.2 Propriétés d'invariance	32
II.3.2 Les superréseaux quasipériodiques de Fibonacci	32
II.4 CONCLUSION	33
II.5 REFERENCES	34
CHAPITRE III MODELISATION ET SIMULATION	
III.1 INTRODUCTION	36
III.2 APPROXIMATIONS ET CONDITIONS DE CONTINUITES	36
III.2.1 Approximation de la masse effective	36
III.2.2 Fonction enveloppe et Conditions de continuité	37
III.3 FORMALISMES	38
III.3.1 Calcul du coefficient de transmission	39
III.3.1.1 En absence de tension appliquée ($V_a=0$)	39
III.3.1.2 En présence de tension appliquée (V_a)	43

III.3.2. Temps de l'effet tunnel résonant	46
III.4 LOGICIEL « SUPERRESEAUX »	47
III.4.1. Fonctionnement du logiciel	47
III.4.2. Implémentation	48
III.5 CONCLUSION	54
II.6 REFERENCES	55
CHAPITRE IV RESULTATS ET DISCUSSIONS	
IV.1 INTRODUCTION	58
IV.2 SUPERRESEAUX GaAs/Al _x Ga _{1-x} As	58
IV.2.1 Potentiel	58
IV.2.2 Masse effective	58
IV.3 STRUCTURES ORDONNEES	59
IV.3.1 Double barrières rectangulaires	59
IV.3.2 Triple barrières rectangulaires	60
IV.3.3 Structures à N barrières rectangulaires	62
IV.3.4 Effet du champ électrique	64
IV.3.4.1 Double et triple barrières rectangulaires	65
IV.3.4.2 Structures à N barrières rectangulaires	66
IV.3.5 Temps de l'effet tunnel résonnant	67
IV.4 STRUCTURES QUASIPERIODIQUES	68
IV. 4.1 Cas de structure quasipériodique de Fibonacci en monomère	69
IV.4.1.1. Structure quasipériodique en largeur du puits	69
IV.4.1.2. Structure quasipériodique en épaisseur de barrière	72
IV.4.1.3. Structure quasipériodique en hauteur de barrière	74
IV.4.1.4. calcul des longueurs d'ondes émises par les structures de Fibonacci en monomère	78
IV.4.1.5. Influence de la tension externe	79
IV.4.2. Cas de structure quasipériodique de Fibonacci en dimer	81
IV.4.2.1 En largeur du puits	81
IV.4.2.2 En épaisseur de barrière	83
IV.4.2.3 En hauteur de barrière	86
IV.4.2.4 Longueurs d'ondes lasers	87
IV.5. REFERENCES	89
CONCLUSION GENERALE ET PERSPECTIVES	92

INTRODUCTION GÉNÉRALE

INTRODUCTION GENERALE

L'élaboration des premières couches semiconductrices, au début des années 1970 par Esaki et Tsu [1] a ouvert le vaste champ de recherche des hétérostructures semiconductrices [2]. Les puits quantiques furent les premières structures réalisées.

Les alliages GaAs/Al_xGa_{1-x}As sont des matériaux largement étudiés durant ces 30 dernières années. Ils ont commencé à être utilisés pour l'émission et la détection de rayonnement infrarouge dans le développement du domaine optoélectronique [3,4] depuis l'invention de la diode laser en 1962. Un large nombre de dispositifs tels que les lasers à semiconducteurs [5], les cellules solaires à haute fréquence, les diodes électroluminescentes, les photodétecteurs [6], le circuit intégré monolithique micro-ondes, etc..., ont été fabriqués sur la base du système alliages GaAs/Al_xGa_{1-x}As.

Les superréseaux à base de semiconducteurs III-V à gap direct de type GaAs/Al_xGa_{1-x}As [7-9] font l'objet de cette thèse. Leur fabrication est basée sur la technique de croissance notamment : l'épitaxie par jets moléculaires "Molecular Beam Epitaxy"(MBE), l'épitaxie phase vapeur aux organo-métalliques "Metal Organic Chemical Vapor Deposition" (MOCVD). Leur construction est basée sur le profil du potentiel ayant différentes formes. Ces techniques ont permis la fabrication de très grandes variétés d'hétérostructures semiconductrices à puits quantiques très performantes en termes de rendement quantique [10].

L'avantage de ces systèmes réside dans le fait que leurs propriétés optiques sont modifiées en changeant leurs paramètres structuraux. Particulièrement la largeur et la composition. En plus, grâce à leur structure de bande transformée en minibandes par effet tunnel résonnant [11], les porteurs excités du système sont mieux protégés contre les relaxations par les phonons optiques considérés comme des éléments réducteurs de la transmission électronique[12].

L'effet tunnel résonnant est un phénomène de transport traduisant le comportement ondulatoire de la particule pour traverser une barrière de potentiel même si elle a une petite énergie. Par conséquent son temps est très court dans ces structures. Cet effet est interprété analytiquement par la détermination du coefficient de transmission qui est un paramètre essentiel à travers lequel plusieurs paramètres physiques peuvent être calculés,

notamment : la conductivité, la résistivité...etc. Le coefficient de transmission est calculé suite à la résolution de l'équation de Schrödinger. Pour cela les théoriciens ont appliqué plusieurs modèles et approximations étudiant différents types de profil de potentiel.

Dans ce travail, notre objectif est d'étudier le transport électronique d'un seul électron à température nulle. Nous nous sommes intéressés à l'étude de la propagation des ondes électroniques ainsi qu'à la nature des états électroniques dans des structures quasipériodiques de Fibonacci monomère et dimer à une dimension, en se basant sur le calcul du coefficient de transmission à l'aide de méthodes numériques mises au point et l'utilisation d'un logiciel nommé *SUPERRESEAUX* « SR » élaboré par notre équipe de recherche.

Nous allons dans le premier chapitre donner des définitions générales concernant les superréseaux, leurs modes de fabrication et leurs types. Nous nous intéresserons également à la structure d' $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ / GaAs puisqu'elle fait l'objet de notre étude dans ce manuscrit

Dans le deuxième chapitre, une synthèse bibliographique a été effectuée pour présenter les différents types de systèmes unidimensionnels en décrivant la nature des différents états électroniques responsables du transport dans ces systèmes.

Le troisième chapitre traite les différents formalismes utilisés pour la détermination de la structure de minibandes. En utilisant la méthode de Matrice de transfert, pour calculer le coefficient de transmission en absence et en présence de la tension appliquée et le temps de l'effet tunnel résonnant qui repose sur la résolution de l'équation de Schrödinger, en utilisant les fonctions d'Airy et la technique de la Lorentzienne.

Le dernier chapitre, fait l'objet des résultats obtenus lors de la simulation en étudiant le comportement du coefficient de transmission pour des structures périodiques et quasipériodiques de Fibonacci monomère et dimer ayant différentes configurations afin d'analyser la nature des états électroniques et les structures de bandes avec les interprétations adéquates.

Enfin, notre thèse s'achève par une conclusion générale et les perspectives envisagées comme suite de ce modeste travail.

Références

1. L. Esaki and R. Tsu, IBM J. Res. Develop. **14**, 61 (1970).
2. D.P. Nguyen « Confinements non usuels dans les boîtes quantiques semi conductrices ». Thèse de doctorat, Université Pierre et Marie Curie Paris VI (2005).
3. B.F. Levine, J. App. Phy. **74** (8) 15 (1993).
4. E. Rosencher, la recherche 248, vol. **23**, 1270 (1992).
5. L. Marshall, Laser Focus World **34** (7) 139-143 (1998).
6. R. Ignatius and M. Ignatius Laser Focus World **34** (7) 139-143 (1998).
7. W. Gellermann, M. Kohmoto, B. Sutherland and P. C. Taylor, Phys. Rev. Lett. Vol **72**, p633 (1994).
8. M. Schramboeck, A.M. Andrews, T. Roch, W. Schrenk and G. Strasser, Microelectronic Engineering .Vol **84**, p 1443 (2007).
9. F. Ungan, E. öztrkü, Y. Ergün and I.S. kömen, Superlattices and Microstructures. Vol **41**, p 22 (2007).
10. B. Salem, « *Spectroscopie optique des îlots quantiques d'In As/In P(001) pour la réalisation de composants optoélectroniques émettant à 1.55 μm* » Thèse de doctorat, Institut national des sciences appliquées de LYON (2003).
11. B. Sapoval et C. Hermann, « *Physique des semi-conducteurs* » Edit : Berlin, Springer, B74 245216 (2006).
12. T.N. Quang « *Effet de spin dans les nanostructures semiconductrices: modélisation et expériences de magnéto-transport* » Thèse de doctorat, CNRS Marcoussis, France (2006).



CHAPITRE I

*GENERALITES SUR LES
SUPERRESEAUX*

CHAPITRE I

GENERALITES SUR LES SUPERRESEAUX

I.1 INTRODUCTION

L'étude du fonctionnement des différents types de composants électroniques passe par une maîtrise préalable des phénomènes physiques régissant les propriétés des électrons dans des semiconducteurs. Les composants modernes font appel à des structures complexes de couches minces de matériaux différents [1].

L'industrie électronique s'est basée dès les années cinquante jusqu'aux années soixante dix sur les semiconducteurs de germanium (*Ge*) et de silicium (*Si*) qui possède de meilleures qualités électroniques mais qui nécessite une très grande pureté monocristalline. Les composants semiconducteurs, pièce maîtresse de toute chaîne de conversion, permettent désormais d'utiliser des structures à la fois plus simples à contrôler et plus performantes en terme de rendement et de qualité de l'énergie [2].

Ce chapitre présente la définition des superréseaux en se basant sur quelques techniques de fabrications qui permettent leurs croissances, leurs propriétés électroniques, leurs différents types de classification et ensuite leurs modes d'application.

I.2 SUPERRESEAUX

I.2.1 Historique des superréseaux

En 1940, Dumont et Youtz avaient étudié l'empilement artificiel des couches de matériaux métalliques pour réaliser des réseaux de diffraction des rayons x [3,4]. En 1969 une nouvelle classe de structures fait apparaître des superréseaux ou multipuits quantiques [5,7]. Dans les années 1978, Dingle a réalisé un superréseau constitué de (*GaAlAs / GaAs*) [8]. Esaki et Tsu firent la découverte des premiers superreseaux à partir de semiconducteur des familles III et V [9] : *GaAs-(AlGaAs)* au début des années 1970 [10], ce système demeure comme le plus étudié à ce jour et a déjà fait l'objet de nombreuses applications [11]. Leurs processus sont un empilement de couches ultra fines dont la période était inférieure au libre parcours moyen des électrons. En 1985 les superréseaux métalliques ont été réalisés par Chang et Giessen [12]. Au début des années 1990, Lijima et al. [13] ont réalisé les premiers superréseaux d'oxydes ferroélectriques.

I.2.2 Définition d'un superréseau

Un superréseau est un empilement multicouche de semiconducteurs ultrafins (quelques dizaines d'Angstrom d'épaisseurs) alternées périodiquement suivant l'axe de croissance (figure I.1) [14-21]. En 1969, Esaki et al. [22] ont proposé l'idée d'une structure de basse dimension et ont présenté une discontinuité de bords de bandes de conduction et de valence à l'interface de deux semiconducteurs. Le matériau à faible gap représente le puits de potentiel pour les électrons et à grand gap c'est la barrière [23-25]. Ainsi, un profil de potentiel périodique résulte d'une succession de puits et de barrières. La période, $L=a+b$ du potentiel, permet de faire la différence entre un puits quantique qui présente des états isolés, et un superréseau, où se forme une structure de minibandes [26].

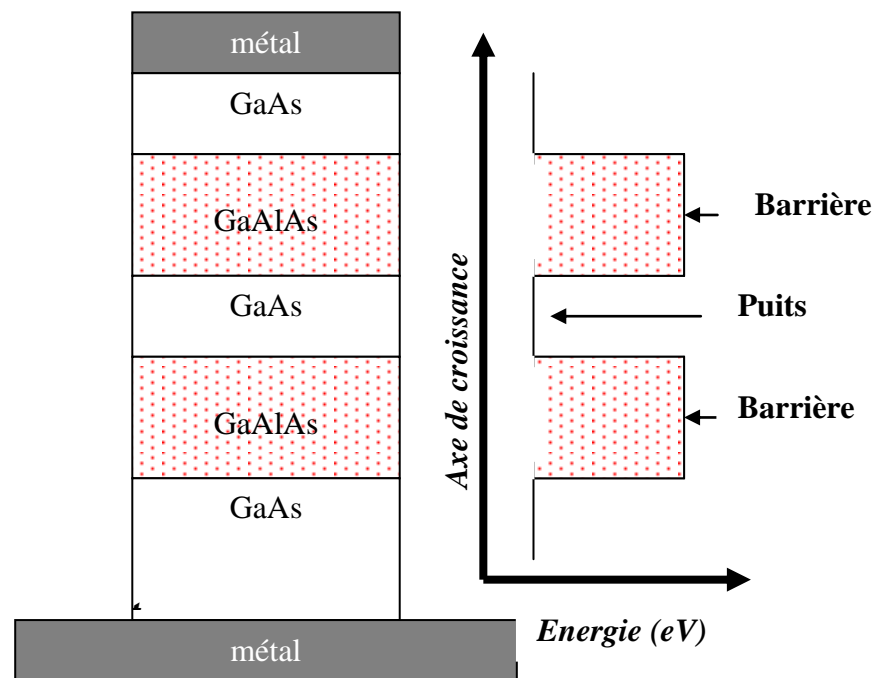


Figure. I.1 Superréseau à puits et à barrières rectangulaires (AlGaAs/GaAs) [27]

I.2.3 Techniques de fabrication

La technique de fabrication des structures optoélectroniques [28,29] est appelée épitaxie. Elle est réalisée dans des réacteurs à température contrôlée, et permet de déposer de fines couches de semiconducteur sur un substrat de même nature, tout en préservant sa structure cristalline [30]. La couche croît progressivement en prolongeant la structure cristalline du substrat. Ce procédé demande, notamment, que l'état de surface initial du substrat soit parfait car la moindre imperfection est amplifiée par le mode de croissance. Il existe plusieurs variantes de l'épitaxie suivant le matériau à élaborer ainsi que les épaisseurs voulues.

I.2.3.1 Epitaxie par jets moléculaires

Cette technique a été perfectionnée dans les années soixante après son apparition au début du siècle [31,32], et dans les milieux des années 1970 par le laboratoire de Bell (USA) [33]. C'est une technique de dépôt sous ultra vide permettant d'obtenir des matériaux semiconducteurs avec une grande précision (composition, épaisseur), et une grande qualité structurale. L'épitaxie par jets moléculaires (l'EJM) [34-39] est une technique puissante pour la production de composants de haute performance. Le schéma de principe présenté sur la figure (II.2) décrit les principaux éléments d'un bâti d'épitaxie.

Dans une enceinte sous ultra vide (10^{-10} - 10^{-11} bar) de dépôt sur un substrat chauffé, des creusets contenant le métal sous sa forme solide est chauffé par un filament. La température de chaque creuset est contrôlée par un thermocouple. Les jets atomiques ou moléculaires issus des différentes sources convergent vers un substrat fixé sur un four.

La croissance s'obtient par cristallisation des éléments III-V envoyés. Les paramètres importants de croissance sont : la vitesse de croissance qui permet de repousser les limites d'apparition des défauts ou de la rugosité lors de croissances à basse température, la pression d'élément V car l'augmentation de la quantité d'élément V diminue la mobilité des différents éléments V, et la température de croissance, lors des croissances la mobilité des éléments sur la surface ainsi que leur coefficient de collage sont des processus actifs thermiquement.

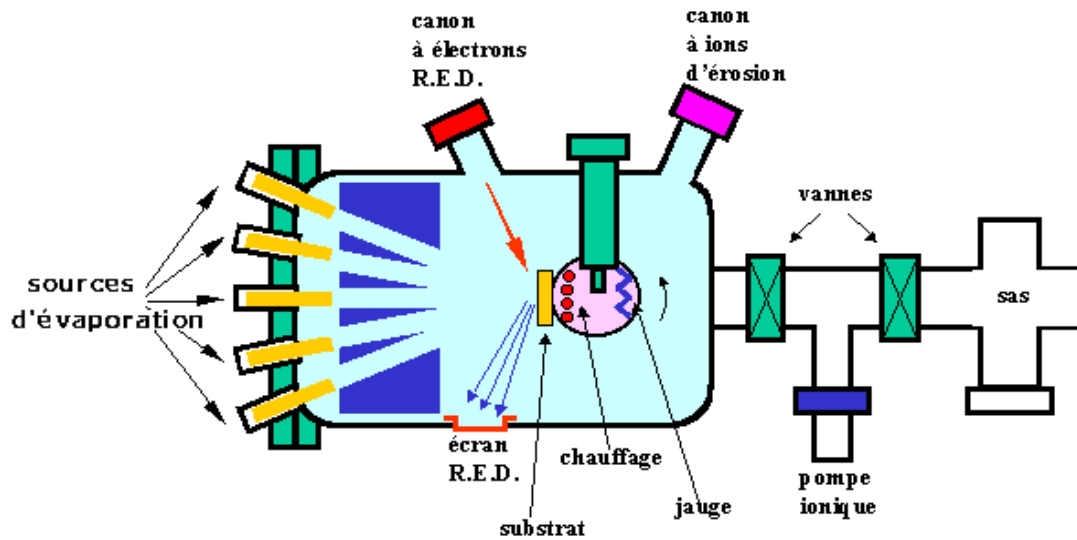


Figure. I.2 Schéma général d'épitaxie par jet moléculaire [40]

I.2.3.2 Epitaxie en phase vapeur des organométalliques

MOCVD (Metal Organic Chemical Vapor Deposition) à injection, développé dans les années 90 au LMGP [41], est basé 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 stœchiométrie, de la vitesse de croissance et de la qualité cristalline des films. L'injection des précurseurs dissous dans un solvant est réalisée sous forme de gouttelettes contrôlées par une micro vanne. Un flux gazeux transporte les précurseurs dans la zone de réaction sur un substrat chauffé formant 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 (figure I.3).

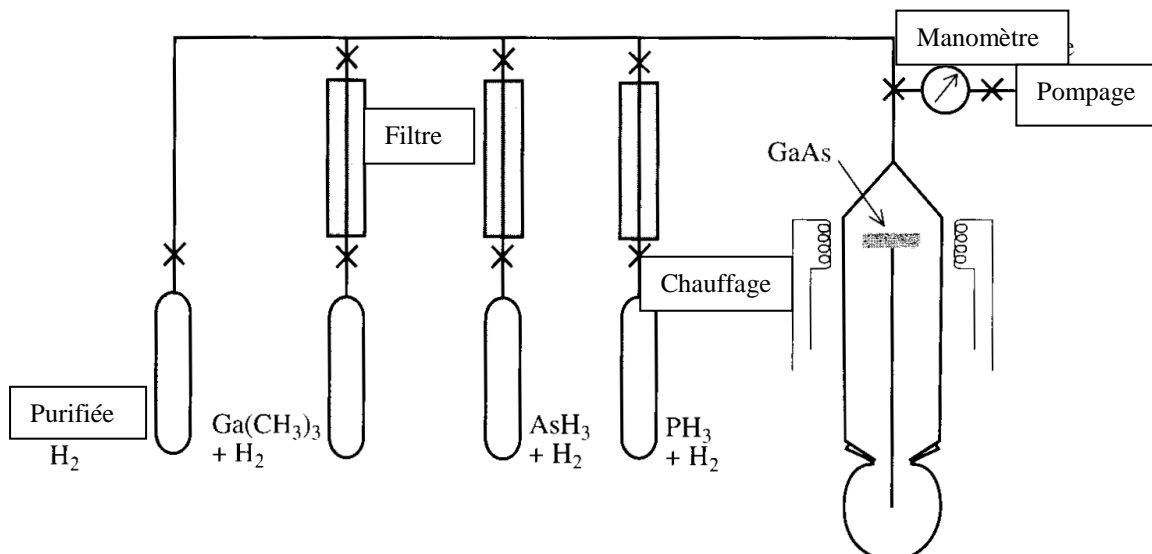


Figure. I.3 Schéma d'une installation de MOCVD [40]

I.2.4 Types de superréseaux

Les types de superréseaux sont basés sur les propriétés des matériaux semiconducteurs utilisés et les techniques de croissance.

I.2.4.1 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_xGa_{1-x}As. Ce type est le plus utilisé, parce que le profil du potentiel est très simple à étudier [42], il est à la base de l'élaboration de plusieurs composants tels les photodétecteurs [43] et les diodes lasers [44]. Ces superréseaux ont des propriétés fascinantes résidant dans leur capacité de confinement des états électroniques figure (I.4).

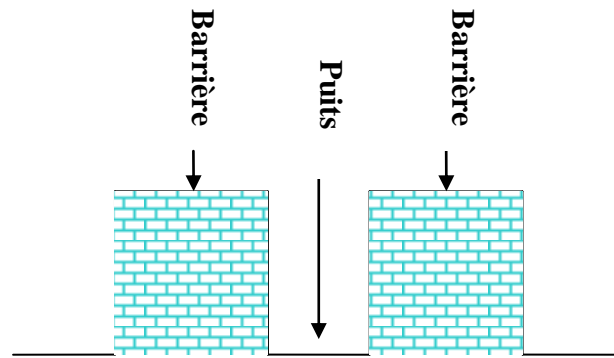


Figure. I.4 SR à puits et à barrières rectangulaires.

I.2.4.2 Superréseau à potentiel de Mathieu

Le superréseau formé à partir d'une allure sinusoïdale.

$$V(z) = -Va \cos(2\pi z/a) \quad (1)$$

Va : L'amplitude du potentiel.

a : paramètre du réseau.

L'intérêt d'étudier ces types de superréseaux réside dans la résolution théorique de l'équation de Mathieu ainsi que dans l'apparition des états particuliers à l'intérieur du profil de potentiel considéré.

I.2.4.3 Superréseau polytype

La structure est composée de trois constituants (*A*, *B* et *C*) [45,46], plusieurs formes de potentiel sont obtenus (Figure I.5), elles sont dues à la différence existante entre leurs bandes de conduction et leurs utilisations dans des dispositifs à hautes fréquences.

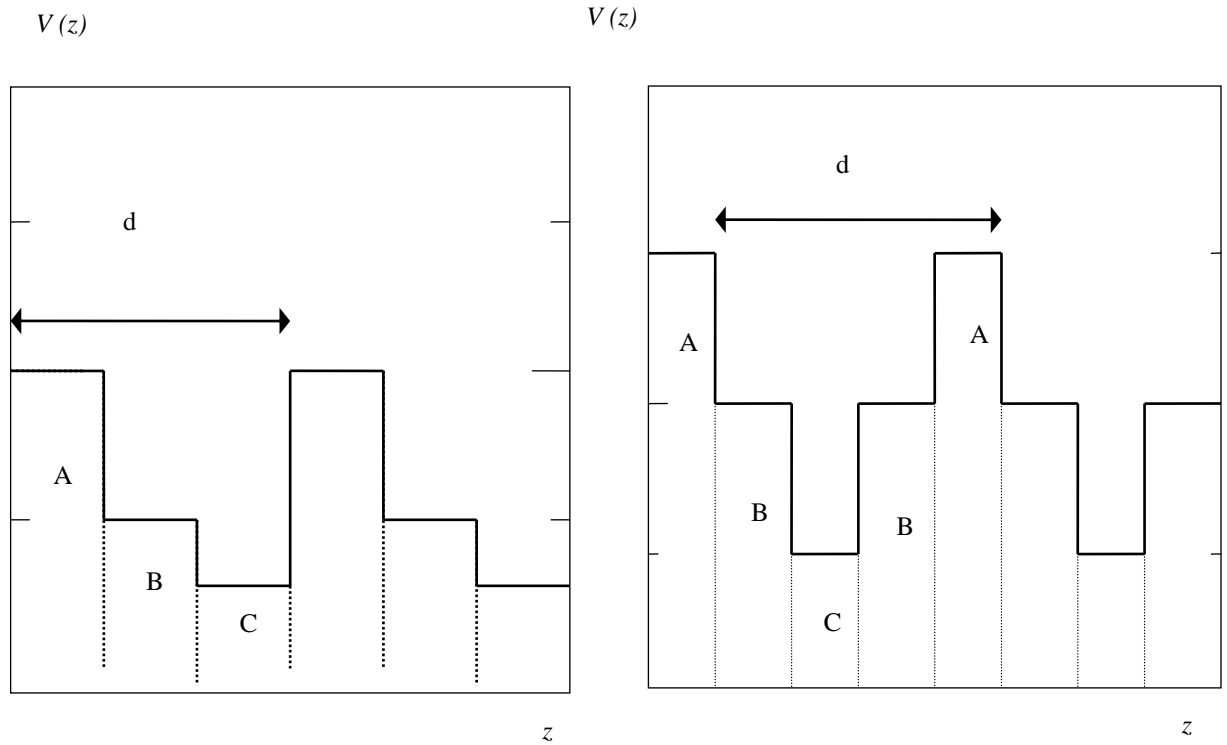


Figure. I.5 Profil de potentiel d'un SR polytypes

I.2.4.4 Superréseau à modulation de dopage

Le profil de potentiel est donné par la relation(3). Ces types de superréseaux, proposés par Esaki et al. [47] consistent à empiler des monocouches atomiques dopées n et p , alternées périodiquement et séparées par quelques uns des matériaux non dopés. Ces superréseaux, dits à dopage conventionnel réalisés par Ploog et al. [48], présentent un inconvénient car une forte modulation de dopage ne peut être réalisée en une faible période [49]. Ce problème a été surmonté par une nouvelle technique de dopage.

Ainsi le profil de dopage est décrit par la relation :

$$N_D(z) = N^{2D} \delta(z) \tag{2}$$

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

$$V(z) = N^{2D} d (e/4\epsilon) \tag{3}$$

d : la période.

e : la charge de l'électron.

ϵ : La permittivité du matériau.

I.2.4.5 Superréseau à puits quantiques paraboliques

Ils sont construits par l'empilement des puits et des barrières rectangulaires très minces, la hauteur de la barrière varie tout en conservant la composition du matériau et le contraire se fait d'une manière quadratique du centre du puits jusqu'au bord de celui-ci (figure I.6). Capasso et Kiehl [50] ont présenté un transistor à effet tunnel résonant.

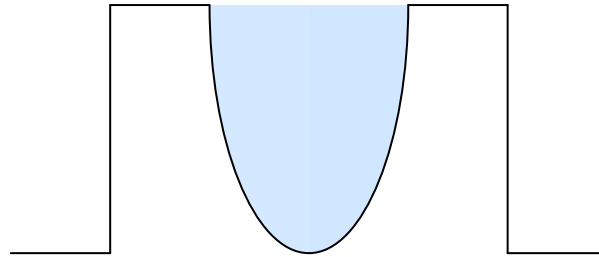


Figure. I.6 Profil de potentiel d'un SR à puits quantiques paraboliques

I.2.4.6 Superréseau à dents de scie

Cette structure est obtenue à partir d'une modulation de la composition du matériau utilisé, tel que le $Al_xGa_{1-x}As$, dans chaque période pour obtenir un gap dégradé linéairement allant d'une valeur maximale qui forme le grand gap jusqu'à une valeur minimale qui donne le petit gap [51,52]. Plusieurs formes de profils sont obtenues selon la modulation utilisée (figure I.7). Leurs applications technologiques utilisées dans la fabrication des rectificateurs [53] et les photomultiplicateurs [54].

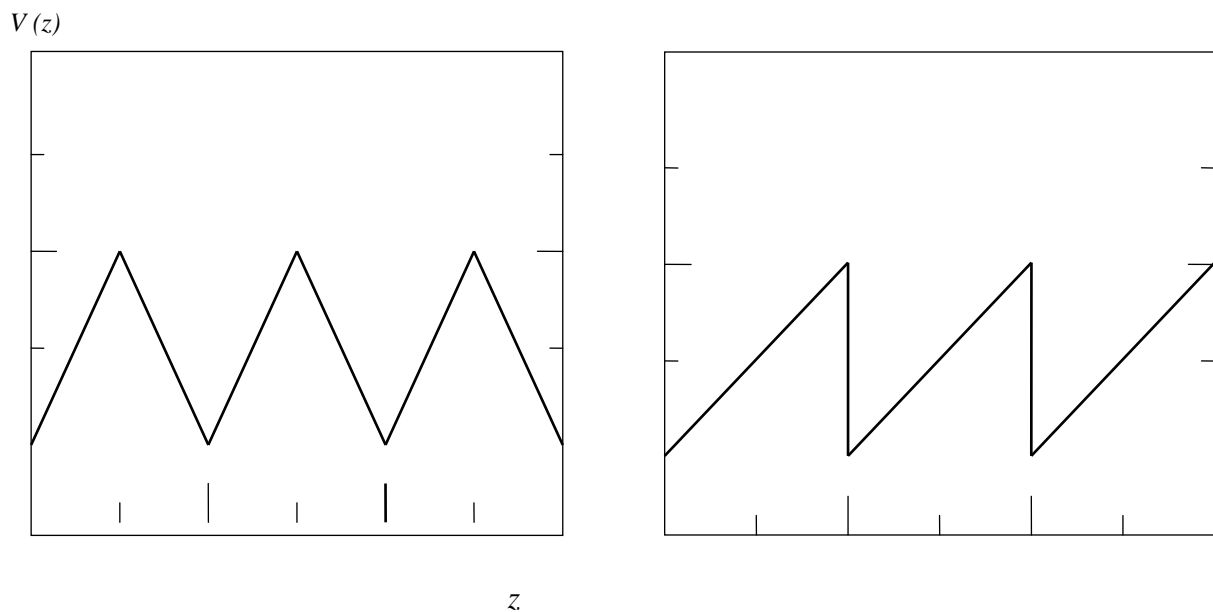


Figure. I.7 Profils de potentiel d'un SR à dents de scie

I.2.4.7 Superréseau à masse effective

Ce type de superréseau construit par une modulation périodique de la masse effective [55] (figure I.9). Il est difficile de choisir les constituants semiconducteurs utilisés pour la réalisation d'un tel profil. Il faut avoir les mêmes paramètres a du réseau et la même affinité électronique κ .

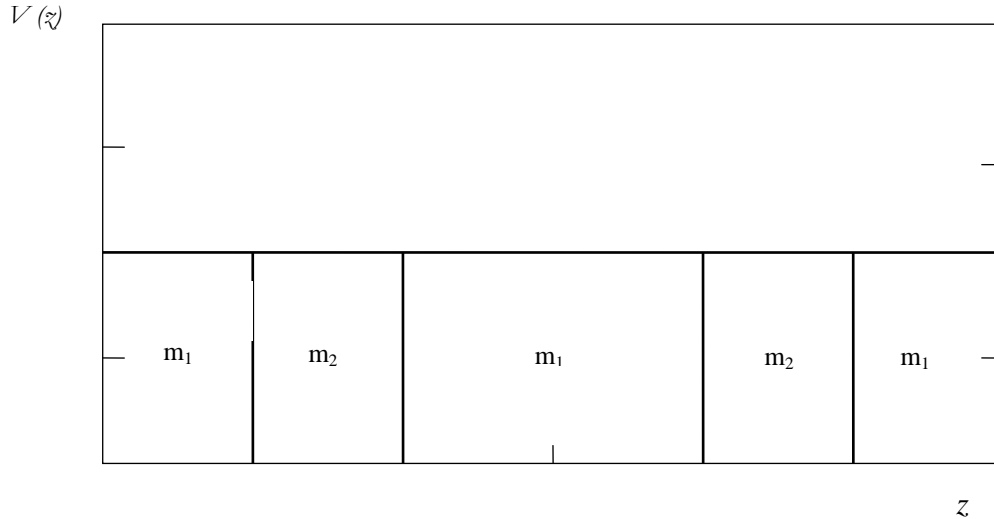


Figure. I.9 Profil de potentiel d'un SR à masse effective

Le tableau.1, résume quelques matériaux dont les propriétés, comme la constante du réseau a , l'affinité électronique κ , l'énergie du gap E_g , la masse effective du premier matériau m_1 du deuxième m_2 et la masse de l'électron libre m_0 [56], permettent de constituer un tel type de superréseau.

Tableau 1: Propriétés de quelques matériaux [57].

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

I.2.4.8 Superréseau quasipériodique

Il est bâti à partir de la série de Fibonacci [58-60]. Puis on habille chaque site avec une base. Cette construction exige deux éléments différents *A* et *B* [61] de longueur L_A et L_B . En prenant *B* comme première séquence et en appliquant la loi de récurrence suivante :

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

le rapport (L_A/L_B) doit être égal au nombre d'or $\left(\phi = \frac{1 + \sqrt{5}}{\sqrt{5} - 1} \right)$.

Les structures quasipériodiques [62-68] sont bâties suivant les séquences générées par la série de Fibonacci qui a comme terme général:

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

En 1984 Levine et al. [69] ont décrit une nouvelle classe de réseaux quasipériodiques à 1, 2 et 3 dimensions, nommée les quasi-cristaux. Merlin [70] a réalisé un nouveau type d'hétérostructures en prenant le système hétérostructure *AlAs*, dit mono énergétique de Fibonacci.

I.2.5 Matériau GaAs et $Al_xGa_{1-x}As$

Un alliage semiconducteur est constitué par les éléments des colonnes III et V de la classification périodique de type $A_xB_{1-x}C$. Ces matériaux sont caractérisés par leur grande mobilité électronique et leur masse effective plus légère que celle du silicium.

Dans ce travail, nous nous intéressons au composé ternaire $Al_xGa_{1-x}As$ où *x* représente la concentration dans les différentes couches [71]. Le tableau suivant donne quelques propriétés du *GaAs* et $Al_xGa_{1-x}As$ à 300 K.

Tableau .2 : Gap énergétique et masse effective du *GaAs* et $Al_xGa_{1-x}As$ à 300 K

	m_e / m_0	E_g (eV) à 300 K
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 ($0.45 < x < 1$)

m_e : la masse effective

m_0 : la masse d'un électron libre

Pour l'alliage $Al_xGa_{1-x}As$, la nature de la transition énergétique change selon le taux d'aluminium x , où $0 < x < 1$ [72,73].

- Pour $x < 0.45$, le matériau est dit à bande interdite directe et la probabilité de transition radiative est élevée.
- Pour $x > 0.45$ [74], le matériau est à bande interdite indirecte et ne permet pas de réaliser 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.

Puisque la largeur des bandes interdites du $GaAs$ et $Al_xGa_{1-x}As$ est importante, on peut séparer l'étude de la bande de conduction de celle de valence. Le matériau $GaAs$ [75] cristallise dans la structure zinc blende, par contre l'alliage $Al_xGa_{1-x}As$ est plus compliqué dû à la distribution aléatoire des atomes de Ga et d' Al lors de la croissance épitaxiale. Cependant dans la plupart des travaux, on suppose que l' $Al_xGa_{1-x}As$ a la même structure que $GaAs$.

I.2.6 Notion de gap direct et gap indirect

La notion de gap direct et indirect est liée à la représentation de la dispersion énergétique d'un semiconducteur c.à.d. Le diagramme $E(\vec{k})$ figure (I.9). Ce diagramme permet de définir spatialement les extrêmes des bandes de conduction et de valence. Ces extrêmes représentent dans un semiconducteur 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 [76].

a) Semiconducteur 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 $E(\vec{k})$ [77].

b) Semiconducteur à gap indirect

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

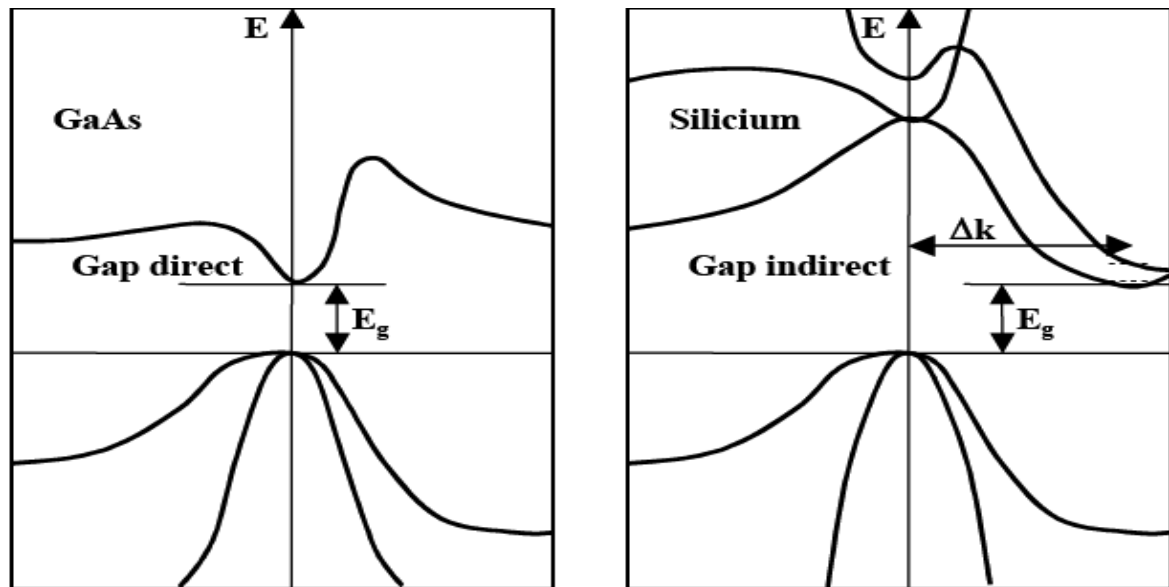


Figure. I.9 Représentation d'un gap direct (*GaAs*), gap indirect (*Si*) [78]

I.2.7. Classification des superréseaux

L'apparition de superréseaux fabriqués de dispositifs électroniques, leurs structures classifient selon les schémas d'énergie de confinement les électrons et les trous, figure (I.10). Différents types de semi-conducteurs, tels que les composés III et V, peuvent être épitaxiés les uns sur les autres pour former différents types de multipuits quantiques.

* Superréseau de type I, les extrema des bandes de valence (BV) et de conduction (BC) sont situés dans la même région de l'espace (le gap dans ce cas est un 'gap direct'), donc les multipuits quantiques ou superréseaux sont dits de type I ; et dans ce dernier, les électrons et les trous sont confinés dans la même couche (semi-conducteur) A. tels que *GaAlAs /GaAs* et *GaSb/AlSb* [79].

* Superréseau de type II, les extrema des bandes (BV) et (BC) sont spatialement séparés, (le gap dans ce cas est un gap indirect) ; donc les multipuits quantiques ou superréseaux sont dits de type II. Dans ce type, les électrons et les trous sont spatialement séparés, c-à-d. Lorsque les électrons sont confinés dans une couche, les trous sont confinés dans une couche différente. Tels que *InAs /GaAs* [80].

* Superréseaux de type IIB qui est un cas particulier du type II, se comportent comme les semi-conducteurs de gap nul, ou les semi-conducteurs de faible gap. Dans ce cas l'énergie de gap est plus faible entre les électrons dans la couche A, et les trous dans la couche B, tel que *InAs /GaSb*) [81].

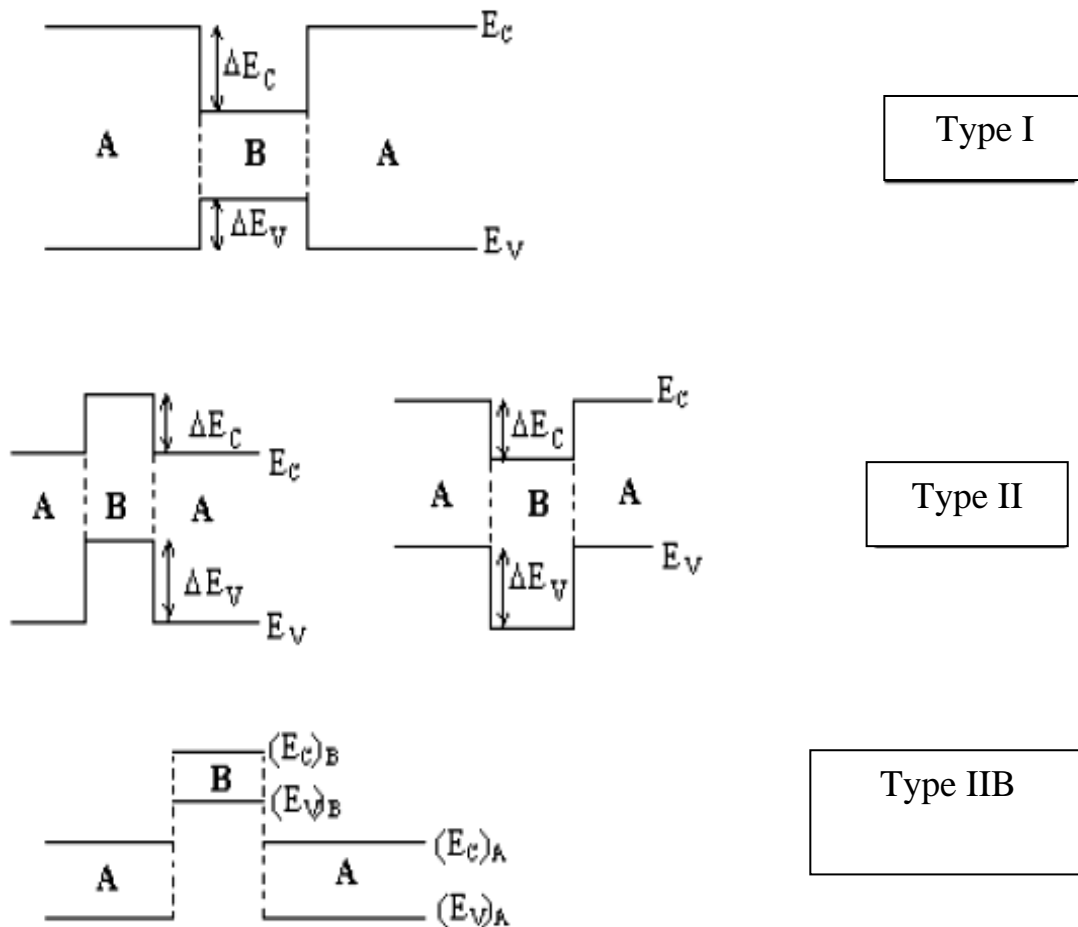


Figure. I.10 Diagrammes schématiques de trois arrangements de confinement des électrons et trous dans les multipuits quantiques et superréseaux [82]

I.2.8 Propriétés des superréseaux

I.2.8.1 Structure des minibandes

Quand le libre parcours moyen des électrons est supérieur à la période de superréseau, ceux-ci traversent les barrières par effet tunnel [83]. L'effet tunnel transforme les niveaux d'énergie discrets qu'occupent les électrons de la bande de conduction (ou les trous de la bande de valence), dans des puits quantiques isolés en "minibandes" qui sont des intervalles continus d'énergies permises.

La structure de minibande a permis le confinement des électrons dans des niveaux bien définis à l'intérieur des puits séparés par des barrières fines, et la période plus large qui conditionne le couplage entre les puits permet d'ajuster la largeur de la minibande. La largeur de la minibande dépend de la nature du couplage électronique entre les niveaux des puits

adjacents, plus celui-ci est faible, moins est la largeur. Dans le cas où les puits sont éloignés, les niveaux deviennent discrets et les états sont bien évidemment localisés.

I.2.8.2 Coefficient de transmission

Le coefficient de transmission est donné par le module du rapport du courant de probabilité de l'onde transmise sur le courant de probabilité de l'onde incidente [84,85]:

$$T = \left| \frac{j_t}{j_i} \right| \quad (4)$$

Ou bien avec les amplitudes des ondes incidentes et transmises :

$$T = |t|^2 = \frac{k_t}{k_i} \left| \frac{A_t}{A_i} \right|^2 \quad (5)$$

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

I.2.8.3 Effet tunnel résonnant

L'effet tunnel résonnant (ETR)[86] se manifeste lorsqu'une particule doit traverser successivement deux barrières de potentiel « pontée » par un ou plusieurs états discrets permis. En mécanique classique, une particule d'énergie cinétique E inférieure à V_0 ne traverse pas la barrière, mais en mécanique quantique la particule possède une probabilité non nulle de traverser cette barrière sous la forme d'une onde évanescente figure (I.11) d'après les solutions d'équation de Schrödinger.

On décrit l'effet tunnel par deux paramètres : les coefficients de réflexion R et de transmission T , qui désignent la particule quantique d'être réfléchi par la barrière de potentiel et d'être transmise à travers celle-ci. Donc la somme de leur probabilité est égale à l'unité: $R + T = 1$. Wentzel Kramers et Brillouin [87] ont déterminé la probabilité de transmission à travers une barrière de potentiel quelconque $V(x)$ dans une approximation semiclassique.

En 1970 Tsu et Esaki [88] ont étudié une structure à multi barrières confinant un puits rectangulaire mise entre deux contacts ohmiques produisant une tension appliquée V_a . L'ETR est interbande, c-à-d. que les porteurs de charges restent dans la même bande avant et après leurs passages, donc il traduit un comportement ondulatoire des électrons en fonction des énergies présentant des résonances.

En 1983 Vassal et al [89] ont utilisé le formalisme de la matrice de transfert pour étudier le comportement du coefficient de transmission T . Ils ont pris en considération la discontinuité des masses au bord de chaque interface.

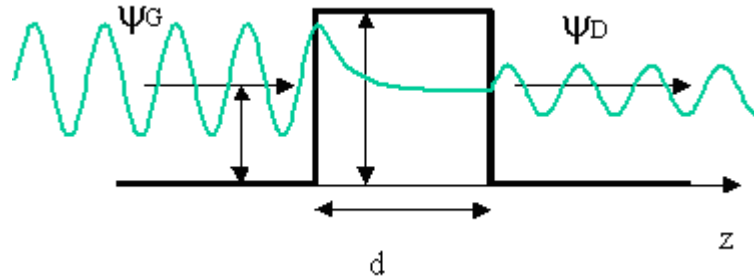


Figure. I.11 Barrière de potentiel dans un modèle unidimensionnel

I.2.8.4 Temps de l'Effet tunnel résonnant

Le temps de passage du transport résonnant t est une entité physique pour l'interprétation des caractéristiques courant-tensions.

Juang [90] a présenté des résultats de l'effet tunnel résonnant en intégrant l'équation de Schrödinger par rapport au temps.

Fisher et Zhang [91] ont utilisé une méthode plus élégante basée sur la détermination de la fonction « Lorentzienne » qui correspond au pic de résonance du coefficient de transmission, obtenu à partir de la matrice de transfert, t qui est donné par la relation:

$$t = \frac{\hbar}{\Delta E} \quad (6)$$

ΔE : largeur à mi-hauteur de la Lorentzienne.

I.2.9 Applications lasers

Pour réaliser un laser, il suffit de placer deux miroirs aux extrémités de l'amplificateur optique. Les nombres de photons identiques qui vont et viennent entre les miroirs vont donc augmenter à chaque passage, c'est la première amplification de la lumière laser.

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

$$\lambda = \frac{h \cdot c}{\Delta E} \quad (7)$$

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

c : la vitesse de la lumière (m/s)

h : constante de Planck (J.s)

Les lasers sont des outils souvent indispensables pour de nombreuses applications dans l'industrie, utilisés dans le coupage, le soudage et le perçage [92]. En médecine, ils réparent les zones malades en les brûlant sans toucher aux parties saines. Le laser sert dans les télécommunications optiques, les mesures de distances et les contrôles de vitesses [93]. Ils servent aussi à aligner des routes, des tunnels, dans le stockage et le lecteur de l'information sur des disques optiques [94].

1.2.9.1 Principe de fonctionnement d'une diode laser

Les lasers à semiconducteurs [95] sont des diodes qui émettent une lumière cohérente par émission stimulée (figure I.12). Ils consistent en une jonction p-n, composée des éléments III-V semiconducteurs de type GaAs dont les dimensions sont inférieures à 1mm.

- **Absorption**

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

$$h\nu = E_2 - E_1 \quad (8)$$

- **Emission**

Lorsqu'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 $t_{1/2}$ 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.

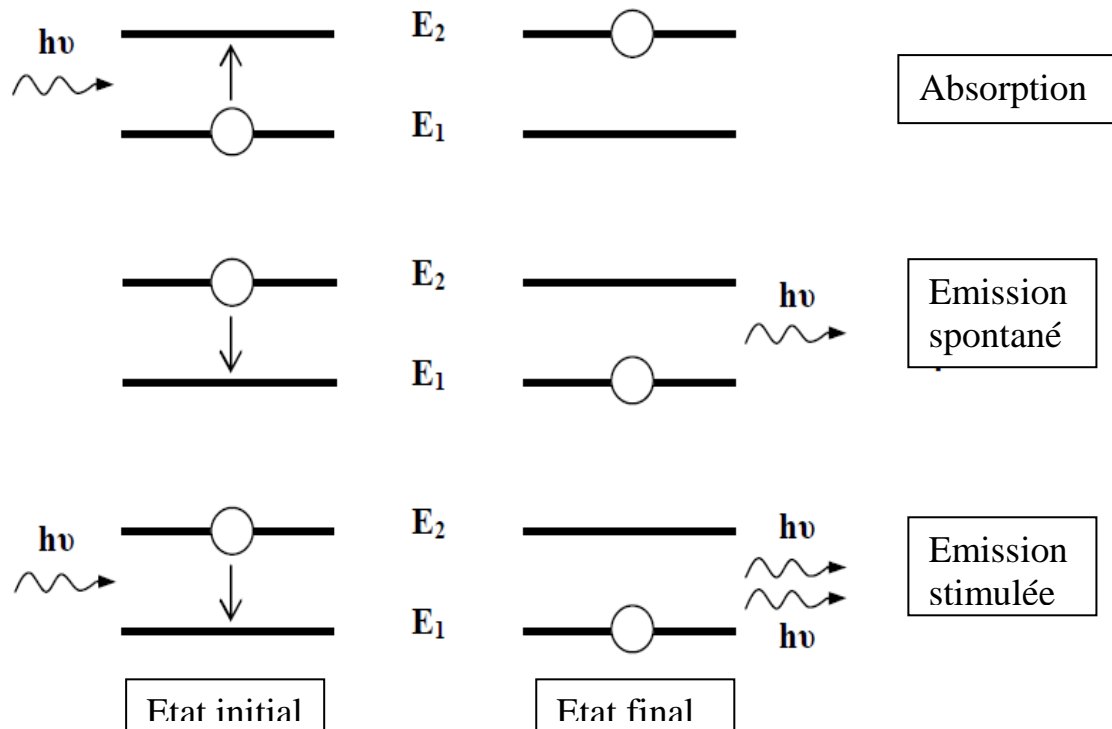


Figure. I.12 Principe de l'effet laser [96]

I.2.9.2 Structure d'une diode laser

Une diode laser est un composant optoélectronique à base de matériaux semiconducteurs, utilisée pour réaliser l'effet laser et conçue pour la première fois en 1962 [97,98], elle est devenue un dispositif très important avec différents types en 1994 [99,100].

La figure (I.13) représente la structure d'une diode laser à base de GaAs. Les dimensions de la couche active de type p sont de 200 μm de longueur, 2 à 10 μm de largeur et 0.1 μm d'épaisseur, est prise en sandwich entre deux couches de $\text{Ga}_{0,7}\text{Al}_{0,3}\text{As}$, dopées respectivement n et p. Ce sandwich confine dans la région active à la fois les électrons et les photons.

Les photons sont confinés dans la couche active de GaAs (p) par la différence d'indice qui existe entre GaAs et AlGaAs. Les réflexions totales à l'interface des deux matériaux évitent l'étalement des photons dans le GaAlAs. Les électrons sont confinés dans la couche active en raison de la différence de gap qui existe entre $\text{Ga}_{0,7}\text{Al}_{0,3}\text{As}$ ($E_g \approx 1.9 \text{ eV}$) et GaAs ($E_g \approx 1.4 \text{ eV}$). Les deux couches d'AlGaAs constituent des barrières de potentiel qui empêchent les électrons et les trous de diffuser au-delà du GaAs.

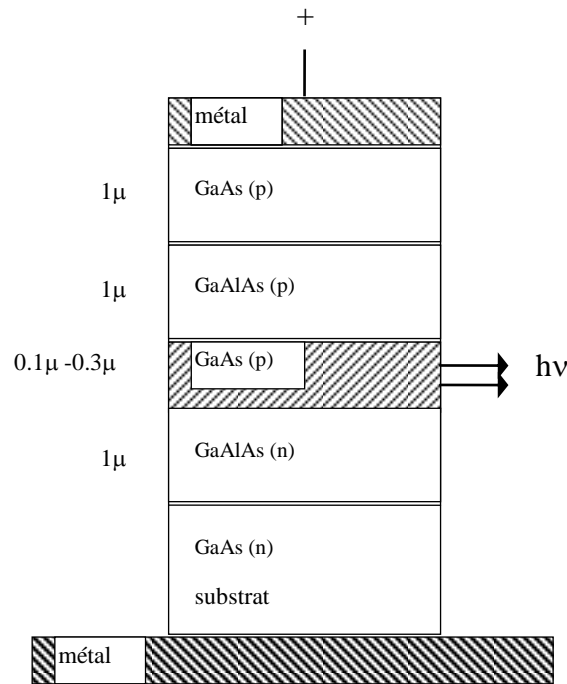


Figure. I.13 Structure d'une diode laser au GaAs

I.2.9.3 laser à cascade quantique

Le laser unipolaire à cascade quantique a été développé aux Bell-Laboratoires dans l'équipe de F. Capasso ($\lambda_{\text{émission}}=5\mu\text{m}$). C'est un laser semiconducteur utilisant un seul type de porteurs, basé sur deux phénomènes fondamentaux de la mécanique quantique: L'effet tunnel et le confinement quantique. Bien que le concept de base ait été proposé en 1971, il a fallu plus de vingt ans avant qu'un tel dispositif soit finalement réalisé en 1994 [101-103].

Le laser à cascade quantique (QC) est basé sur une approche complètement différente de celle de la diode Laser. Dans un laser QC (Figure I.14), les électrons font des transitions entre des états liés, créés par confinement quantique dans des couches alternées ultraminces des matériaux semiconducteurs. Ces dernières, appelées puits quantiques, ont une taille comparable à la longueur d'onde de Debroglie de l'électron, elles restreignent son mouvement dans la direction perpendiculaire au plan des couches. A cause de cet effet, appelé confinement quantique, l'électron ne peut passer d'un état d'énergie à l'autre que par pas discrets, en émettant des photons de lumière.

L'espacement entre les états dépend de la largeur du puits et augmente quand la taille du puits diminue. Il est important de souligner l'agilité de ces structures qui permet d'obtenir des longueurs d'onde d'émission différentes en jouant sur les paramètres géométriques de la couche active.

Dans le système InGaAs/InAlAs, il a été démontré la possibilité d'obtenir des longueurs d'onde d'émission allant de $3,5\mu\text{m}$ [104] à $24\mu\text{m}$ [105]. Les lasers à cascade quantique délivrent une puissance crête de l'ordre de quelques dizaines à quelques centaines de milliwatts [106,107] et leur fonctionnement à température ambiante a été obtenu en régime d'impulsions comme en régime continu à des longueurs d'onde au-delà de $16\mu\text{m}$. L'un des grands champs d'applications industrielles de ces sources infrarouges est la détection d'effluents liquides ou gazeux à l'état de trace.

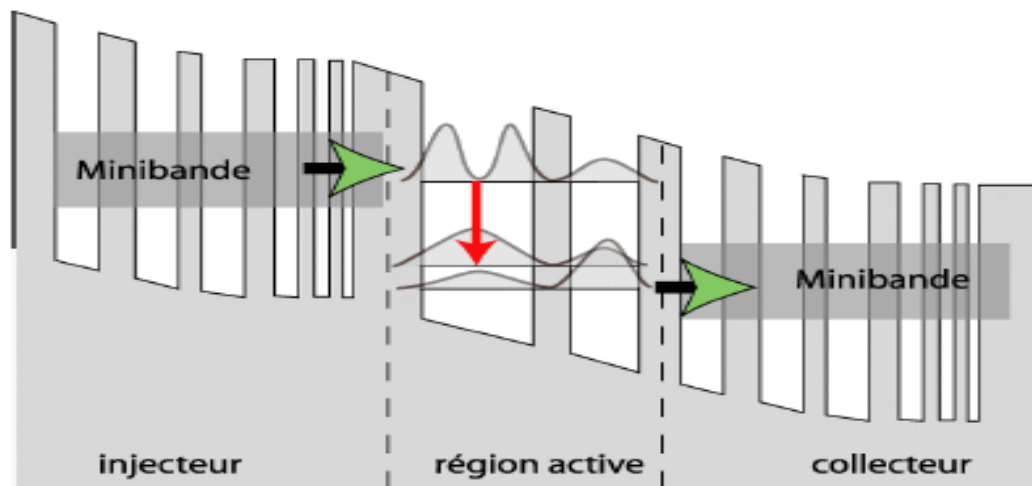


Figure. I.15 laser à cascade quantique

I.3 CONCLUSION

Dans ce chapitre certaines notions générales des superréseaux ont été introduites. Un développement considérable des techniques de croissance a permis la fabrication de ces matériaux. Parmi les méthodes les plus perfectionnées, on a cité : la MBE et la MOCVD.

En utilisant la propriété du désalignement des bords de bande à l'interface suivant l'axe de croissance, ces techniques ont ouvert la perspective pour l'élaboration d'un choix très vaste de types de superréseaux:

- Les superréseaux à puits et à barrières rectangulaires, une structure utilisée très souvent vue la facilité de sa croissance et la simplicité de son étude tout en exposant des propriétés fascinantes, résidant dans leur capacité de confinement des états électroniques.
- Les superréseaux à dents de scie ou à puits paraboliques avec leurs différentes formes sont difficilement obtenus pour les faibles périodes à cause de quelques critères expérimentaux liés à la modulation de la composition du matériau utilisé dans chaque période.

Certaines formes de potentiel dans les superréseaux apportent à la physique un aspect fondamental, tels que:

- Les superréseaux quasipériodiques avec leurs états critiques présentant un cas intermédiaire entre les structures périodiques, traitées par le théorème de Bloch d'où la notion d'états continus, et celles désordonnées étudiées par le théorème d'Anderson avec l'apparition des états localisés.
- Les superréseaux à potentiel de MATHIEU conduisant à la résolution de l'équation de Mathieu d'où la formation des états particuliers à l'intérieur du profil considéré.

La largeur des puits dans les superréseaux étant inférieure au libre parcours moyen de l'électron ne subit aucune collision durant plusieurs périodes.

Dans les superréseaux des phénomènes spectaculaires sont observés :

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

Par conséquent, ces dispositifs trouvent des applications technologiques intéressantes, comme les lasers à longueur d'ondes variables et les diodes à effet tunnel résonnant interbandes.

L'application électronique des superréseaux impose la compréhension du comportement de l'électron. Pour cela, ce travail est orienté vers l'étude du profil de la bande de conduction. La notion de discontinuité des bords de bande et de la masse effective au niveau des interfaces s'est avérée le problème principal dans la détermination des propriétés des superréseaux. La différence de la masse entre les matériaux constituant le superréseau induit une limite de validité pour les conditions de continuité.

I.4 RÉFÉRENCES

1. S.M.Sze “*Semiconductor devices: Physics and technology*” John Wiley and Sons, 2nd edition (2001).
2. S.Lefebvre, F. Miserey, *Editions Tec &Doc* (342p, ISBN/ISS 2.7462. 0919.5) (2004).
3. D.W.M. Dumont and J. P.Youtz. *App.Phys.***11**, 357 (1940).
4. W.g.Feng, W.z. He, D. p. Xue, Y. b. Xue, X. Wu, *J. Phys: Condens. Mat.* 8241–8249,1 (1989).
5. B. Boittiaux, « *les composants semiconducteurs* » 2^{ème} édition Tec &Doc (ISBN/ ISS 2.7430.0068.4) (2003).
6. D.P.Nguyen « *Confinements non usuels dans les boites quantiques semiconductrices* » Thèse de doctorat, Université Pierre et Marie Curie Paris VI (2005).
7. W.Haug and A.P.Jauho “*Quantum kinetics in transport and optics of semiconductors*” Springer Series in solid state sciences 123, second edition, Heidelberg (2008).
8. H.Mathieu, H. Fanet « *Physique des semiconducteurs et des composants électroniques* » édition Masson (ISBN-2100516434) (2009).
9. H.Tuffigo « *Propriétés optiques des puits quantiques et superréseaux* » Thèse de doctorat, Université de Grenoble(1990).
10. G.L.Bir and G.E. Pikus, « *symmetry and strain-induced effects semiconductors*», Wiley, New York (1974).
11. J.Y.Cibert. S.I. Dang, S. Tatarenko, G. Feuillet, P.H. Juneauand, K. Saminadayar, *Apl. Phys. Lett.* 56,292 (1990).
12. L.L.Chang and B.C. Giessen "*Synthetic Modulated Structures*" edited by I. Academic Press, (1985).
13. K.Iijima, T.Terashima, Y. Bando, K. Kamigaki and H. Terauchi, *App.Phys.* **72**.2840-2845 (1992).
14. P.Pereyra, *Phys. Rev. Lett.***84** 1772–5 (2000).
15. C.Pacher and E. Gornik, *Phys. Rev. B* **68** 155319 (2003).
16. A.Khan, P.K. Mahapatra, S.P. Bhattacharya and S.N. Mohammad, *Phil. Mag.* **84** 547–63 (2004).
17. C.Pacher, W. Boxleitner and E. Gornik, *Phys. Rev. B* **71** 125317(2005).
18. J.Nanda, P.K. Mahapatra and C.L. Roy, *Physica B* **383** 232–42 (2006).
19. P.K.Mahapatra, K. Bhattacharyya, K. Khan and C.L. Roy, *Phys. Rev. B* **58** 1560–71 (1998).
20. P.Panchadhyayee , R. Biswas, A. Khan and P.K. Mahapatra , *J. Appl. Phys* (2008).

21. L. Esaki, R. Tsu, *IBM J. Res. Dev.* **14**, 61 (1970).
22. R. Tsu and L. Esaki, *App. Phys. Lett.* **22**, 562 (1973).
23. A. Wacker, *Phys. Rep.* 357, 1(2002).
24. A. Patane, N. Mori, D. Fowler, L. Eaves, M. Henini, D. K. Maude, C. Hamaguchi and R. Airey, *Phys. Rev. Lett.* **93**. 146801 (2004).
25. A. Amann, J. Schlesner, A. Wacker and E. Scholl, *Phys. Rev. B* **65**. 193313(2002).
26. A. Chomatte, B. Devraud, P. Auvray, A. Regreny, *J. App. Phys.* **59**, 3835(1986).
27. Z. Aziz « *Modélisation et Simulation de l'Effet de la Variation de la Fraction Molaire sur les Propriétés Optoélectroniques des Superréseaux $Al_xGa_{1-x}As/GaAs$* » Thèse de doctorat, Université de Mostaganem (2008).
28. J.D. Joannopoulos, P.R. Villeneuve and S. Fan, *Nature (London)* 386, **143** (1997).
29. D.S. Wiersma, R. Sapienza, S. Mujumdar, M. Collocci, M. Ghulyanan and L. Pavesi, *Appl. Optics* **7**, S190 (2005).
30. C.F. Hart, *Phys. Lett. A* **132**.453 (1988).
31. F. Rinaldi, Optoelectronics, Department, University of Ulm, A. Report (2002).
32. A. Y. Cho and J. Arthur, *Progr. Solid Stat. Chem.* **30**, 157(1975).
33. B. Gil and R.L. Aulombard, editors "Semiconductor heteroepitaxy" 258p, *World Scientific* (1995).
34. R. Merlin, K. Bajema, R. Clarke, F.Y. Juang, P.K. Bhattacharya, *Phys. Rev. Lett.* **55** (1985).
35. J. Todd, R. Merlin, R. Clarke, K.M. Mohanty and J.D. Axe, *Phys. Rev. Lett.* **57**.1157 1768 (1986).
36. R. Merlin, K. Bajema, J. Nagle and K. Ploog, *J. Phys.* **48**.C5-503 (1987).
37. D.C. Hurley, S. Tamura, J.P. Wolfe, *Phys. Rev. B* **37**.8829 (1988).
38. F. Laruelle, B. Etienne, *Phys. Rev. B* **37**.4816 (1988).
39. A.A. Yamaguchi, T. Saiki, T. Tada, T. Ninomiya, K. Misawa, T. Kobayashi, M. Kuwata-Gonokami and T. Yao, *Solid State Commun.* **75**.955 (1990).
40. D.V. Morgan and K. Boar, "An introduction to semiconductor technology", 2nd edition, John Wiley & sons, (1990).
41. M. van Schilfgarde, A. Sher and A.B. Chen. InTlSb. *Phys. Lett.* **62** (16), 1857-1859 (1993).
42. C.M. Tan, J.M. Xuand and S. Zukotynsky, *J. App. Phy.* **67**, 3011(1990).
43. R. Rarcy. « *Application des lasers : principes optique avec problème commentés* » Edition Masson (1993).

44. L.Marshall, *laser focus world* **34** (7) 139-143 (1998).
45. L.Esaki, L. L. Chang, and E. E. Mendez, *J. App. Phys.* **20**, L529 (1981).
46. N.Navel and B. Laikhtman, *Phys. Rev. B* **49**, 16 829 (1994).
47. L.Esaki and R. Tsu, *IBM J. Res. Note, Rc*, 2418 (1969).
48. H.C.Casey, M.K. Ploog, A. Fisher and H. Kunzel, *J. Electrochem. Soc.* **1281**, 400 (1981).
49. E.F.Shubert, J.E. Cunningham, and W. T. Sang, *Phys. Rev. B* **36**, 1348 (1987).
50. F.Capasso and A. Kiehl, *J. App. Phys.* **58**, 1366 (1985).
51. F.Capasso, S. Luryi, W.T. Sang, C.G. Bethea and B.F. Levine, *Phys. Rev. Lett.***51**, 2318 (1983).
52. J.A.Brum, P. Voisin and G. Bastard, *Phys. Rev. B* **33**, 1063 (1986).
53. C.L.Allyn, A.C. Gossard and W. Wiegmann, *App. Phys. Lett.***36**, 373 (1980).
54. F.Capasso, W.T. Sang, and G. F. Williams, *IEEE, Trans. Electron. Devices* **30**,381(1983).
55. A.K.Sasaki, *Phys. Rev. B* **30**, 7016 (1984).
56. Y.Bennabi « *effets d'interfaces sur la structure de bandes et les propriétés de transport par effet tunnel résonnant dans les semiconducteurs* » Mémoire de magister, USTO (juin 1996).
57. B.Simon, *Adv. App. Math.***3**, 463(1982).
58. G.Gumbs and M.K .Ali, *Phys. Rev. Lett.***60** 1081–4 (1988).
59. E.L.Albuquerque and M.G.Cottam, *Phys. Rep.* 376.225–337 (2003).
60. J.Li, D. Zhao and Z. Liu, *Phys. Lett. A* 332.461(2004).
61. F.Laruelle, B. Etienne, J. Barrau, K. Khirouni, J.C. Brabant, T. Amand and M. Brousseau, *Surf. Sci.* **228** 92–5(1990).
62. P.Panchadhyayee, R. Biswas, A. Khanand and M.K. Mahapatra, *J. Phys: Condens Matter.* **20** 275243 (2008).
63. E.L.Albuquerque and M.G. Cottam, *Phys. Rep.*376.225 (2003).
64. L.Fernandez-Alvarez and V.R. Velasco, *Phys. Rev. B* **57**. 14141 (1998).
65. J.E.Zarate, L. Fernandez-Alvarez and V.R. Velasco, *Superlatt. Microst.* **25**.519 (1999).
66. V.R.Velasco, J.E. Zarate, *Prog. Surf. Sci.* **67**. 383 (2001).
67. J.Tutor, V.R. Velasco, *Int. J. Mod. Phys.B* **21**. 2925(2001).
68. H.Aynaou, V.R. Velasco, A. Nougaoui, E.H. El Boudouti, B. Djafari-Rouhani, D. Bria, *Surf. Sci.***538**, 101(2003).
69. D.Levine, P. J. Steinhard and R. Clark, *Phys. Rev. Lett.***53**, 2477 (1984).

70. R.Merlin, K. Bajema and R. Clark, *Phys. Rev. Lett.***55**, 1768 (1985).
71. F.Bechstedt, H. Geecke and H. Grille, *phys. Rev. B* **47**, 13540 (1993).
72. S.Adachi, *J. Appl. phys* **58**(3) (1985).
73. R.KHLIL « *L'étude des propriétés de transport électronique dans un gaz bidimensionnel* » Thèse de doctorat, Université de Reims Champagne-Ardenne(2005).
74. V.V.Paranjape, *Phys. Rev. B* **52**. 10740 (1995).
75. R.Merlin, K. Bajema, R. Clarke, F.-Y. Juang, P.K. Bhattacharya, *Phys. Rev. Lett.***55** 1768 (1985).
76. O.Bonnaud « *physique des solides, des semiconducteurs et dispositifs* » IETR, Université de Rennes 1 (2003).
77. H.Mathieu « *Physique des semi-conducteurs et composants électroniques* » Edit Masson, p 27-29, 5^e édition (2001).
78. R.Maciejko “optoélectronique”Presses Inter Polytechnique, p528 (2002).
79. E.F.Shubert, J. E. Cunningham, and W. T. Sang, *Phys. Rev. B* **36**, 1348 (1987).
80. G.Bastard “*Wave Mechanics Applied to Semiconductor Heterostructures* “ Edition de Physique (1989).
81. D.L.Smith and C. Mailhot, *Rev. Mod.Phys.***62**, 173 (1990).
82. M.Wolony and D. Selle. « *Introduction aux composants à hétérostructures d'onde électrique* »vol 70, p59-74. **3** (1990).
83. B.Sapoval and C. Hermann « *The physics of semiconductors*» Edit, B74, 245216 (2006).
84. C.C.Tannoudji, B. Diu and F. léole « *Mécanique quantique*» volume I, P32-40, Hermann, Paris, (1996)
85. E.Merzbacher. « *Quantum Mechanics* », John Wiley et Sons, 3rd édition, P 92-11 (1998).
86. S.Golka, C. Pflugl, W. Schrenk, G. Strasser, C. Skierbiszewski, M. Siekacz, I. Grzegory, S. Porowski, *Appl. Phys. Lett.* **88**.172106 (2006).
87. D.Quirion « *Transport coherent et spectroscopie tunnel dans les hétérostructures supraconductrices* » Thèse de doctorat, Université Josef Fourier, Grenoble(2001).
88. L.Esaki, L. L. Chang, and E. E. Mendez, *J. App. Phys.* **20**, L529 (1981).
89. M. O.Vassell, J. Lee, and H. F. Lokwood, *J. App. Phys.* **54**, 5206 (1983).
90. C.Juang, *Phys. Rev. B* **44**, 10706 (1991).
91. J.Fisher and C. Zhang, *J. App. Phys.* **76**, 606 (1994).
92. K.Kincade and S. Anderson, *Laser Focus World*, vol. 41, n° 1, (2005).
93. J.W.Scott, *laser focus world* **34** (10) 75-78 (1998).
94. V.S.Robert , *Laser Focus World*, Vol. **41**, n° 2, (2005).

95. G.Scamarcio, F. Capasso, C. Sirtori, J. Faist, A.F. Hutchinson, D.L. Sivco and A.Y. Cho, *Science* **276**.773 (1997).
96. F.Enjalbert « *Etude des hétérostructures semiconductrices et application au laser* »
Thèse de doctorat, Université Joseph Fourier-Grenoble(2004).
97. R.D.Dupuis, *IEEE J. Quantum Electron*, QE-**23**, 651-657, (1987).
98. R.H. Redike , *IEEE J. Quantum Electron*, QE-**23**,692-695, (1987).
99. S.G.Anderson, *Laser Focus World*, **30**, 62-76, (1994).
100. N.L.Thomas, R. Houdré, M.V. Kotlyar, D.O. Brien and T.F. Krauss, *J.Opt.Soc. Am. B* **24**, No.12 (2007).
101. J.Faist, M. Beck, T. Aellen, E. Gini, *App. Phys. Lett* **78**, 147 (2001).
102. J.Faist , J. Viernow, J.L. Lin, D.Y. Petrovkh and F.M. Leibsle, *App. Phys. Lett.* Vol **72**, N° 6 (1996).
103. J.Faist, F. Capasso, D.L. Sivco, A.L. Hutchinson and A.Y. Cho, *Phys. Lett* **72**.680 (1998).
104. R.Colombelli, F. Capasso, C. Gmachl, A.L. Hutchinson, D.L. Sivco, A. Tredicucci, M.C. Wank, A.M. sergent and A.Y. Cho. *App. Phys. Lett.* **78**, 2620 (2001).
105. C.Gmachl, A. Tredicucci, F. Capasso, A.L. Hutchinson, D.L. Sivco, J.N. Baillargeon and A.Y. Cho. *App.Phys. Lett*, **72**, N° 24, 3130 (1998).
106. C.Gmachl, H.Gmachl, H.M. Ng, R. Paiella and R. Martini. *Physica E* (2002).
107. D.Hofstetter, M. Beck, T. Aellen and J. Faist M.W. Sigrist, *Optics lett.*Vol.26 (2001).



SYSTEMES UNIDIMENSIONNELS

CHAPITRE II

SYSTEMES UNIDIMENSIONNELS

Dans ce chapitre, on étudie le transport électronique dans les différents types des systèmes ordonnés, désordonnés et quasipériodiques à une dimension.

II-1 SYSTÈME ORDONNÉ

Dans un cristal, un électron a une énergie potentielle périodique avec la périodicité du cristal. Donc, les électrons sont des états étendus qui ont une probabilité de présence non nulle sur tout le cristal et sont décrit par des ondes de Bloch.

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.

Un état de Bloch est exprimé sous la forme :

$$\Psi_k(\vec{r}) = U_k(\vec{r}) e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \quad (1)$$

$U_k(\vec{r})$: une fonction vérifiant la périodicité du réseau, c.à.d. $U_k(\vec{r} + \vec{R}) = U_k(\vec{r})$

\vec{R} : le vecteur de translation du réseau cristallin

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 . les états de Bloch sont dits des états étendus (figure II.1).

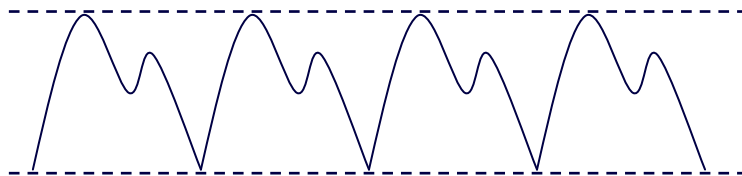


Figure. II.1 Etat étendu de Bloch d'un système ordonné.

II.2 SYSTEMES DESORDONNÉS

Quand le désordre est introduit dans le système, le théorème de Bloch n'est plus vérifié et les fonctions d'ondes perdent leur périodicité. Donc, on a deux types d'états désordonnés. Si le désordre est suffisamment fort, les fonctions d'onde deviennent localisées [1-3] (figure II.2) dans une région finie du système infini [4].

Par ailleurs, si celui-ci est faible, les états propres restent étendus, mais non périodiques, l'enveloppe de la fonction d'onde demeure horizontale (figure II. 3).

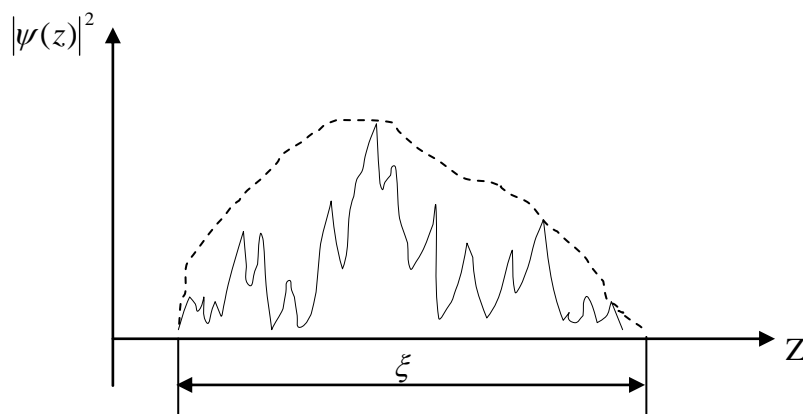


Figure. II.2 Etat localisé d'un système fortement désordonné.

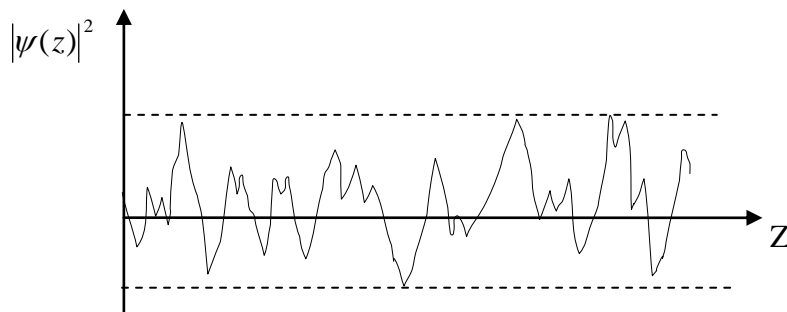


Figure. II.3 la fonction d'onde dans un système faiblement désordonné.

Dans les matériaux, il existe deux types de désordre

- **Le désordre structural**: est dû à des dopants, à des impuretés et à des défauts chimiques intrinsèques au matériau.
- **Le désordre topologique**: vient du positionnement aléatoire des atomes hors des sites cristallins, il forme ainsi des états localisés.

II.3 SYSTEMES QUASIPERIODIQUES

Malgré la différence intrinsèque du point de vue de la structure entre différents types de systèmes quasipériodiques comme les incommensurables modulés, les incommensurables composites et les quasicristaux existe une approche commune de leurs symétries. Un effort considérable portant sur l'étude des systèmes modulés possédant un réseau de base donne maintenant une bonne compréhension tant sur des aspects structuraux que sur des dynamiques associés.

Différentes descriptions interprètent les comportements caractéristiques de ces phases (branche de fluctuation de phase, transition d'ancrage, forme de modulation, rôle des défauts, aspects métastables...). Depuis la découverte des quasicristaux caractérisée par l'absence de réseaux périodiques de base, une très grosse activité tant expérimentale que théorique existant apporte des résultats très importants mais révèle simultanément l'extrême complexité du sujet. Parallèlement, les structures composites constituées de deux ou plusieurs réseaux de base imbriqués intermodulés apparaissent intermédiaires dans leur complexité. Par analogie avec les quasicristaux, ces structures existent à toutes les températures par construction de l'édifice cristallin.

D'un commun accord avec l'ensemble de ces structures quaspériodiques, une description de super espace recrée une périodicité dans des dimensions supérieures. L'étude des caractéristiques structurales dynamiques, voire électroniques doit constituer une ouverture vers la compréhension des systèmes quasicristallins. L'interdisciplinarité, entre physique et chimie du solide, peut jouer un rôle majeur sur ce sujet.

La découverte, fin 1984 [5], d'une structure atomique originale composée d'aluminium et de Manganèse (Al, Mn) a donné naissance à une nouvelle classe de matériaux. Avant cette découverte, la plupart des physiciens pensaient que tout solide ordonné était périodique [6].

De nombreux quasicristaux sont des alliages ternaires à base d'aluminium et avec des proportions bien précises, par exemple les phases icosaédriques AlCuFe et AlPdMn sont d'une qualité structurale comparable à celle des meilleurs cristaux. Il existe aussi des phases décagonales, périodiques dans une direction et quasipériodiques dans le plan perpendiculaire. Les phases quasicristallines coexistent souvent avec des phases cristallines de compositions très voisines (différence inférieure à 1 %). Certaines de ces phases cristallines ont une grande cellule unité qui coïncide localement avec la structure de la phase quasicristalline voisine : elles sont appelées phases approximantes.

Les quasicristaux forment une nouvelle classe d'alliages métalliques dont la structure n'est pas périodique [7]. Ils ont des propriétés physiques différentes de celles des autres métaux et alliages cristallins par exemple $\text{Al}_{86}\text{Mn}_{14}$ [8]. Ces matériaux sont extrêmement fragiles [9].

Dés 1990 [10] les premiers quasicristaux de très grande qualité structurale dont Aluminium–Cuivre–Fer (Al Cu Fe) présentaient des propriétés originelles comme $\text{Al}_{62,5}\text{Cu}_{25,5}\text{Fe}_{12,5}$ [11], alors qu'ils sont composés de métaux courants. Ces quasicristaux se comportent de façon opposée aux métaux du point de vue électrique.

La possibilité des structures quasipériodiques avait été démontrée du point de vue géométrique par Penrose avec l'introduction de ses célèbres pavages à 2D [12-14]. Des structures métalliques à symétrie icosaédrique (avec un ordre translationnel réduit) avaient aussi été observés avec des simulations numériques [15,16]. Ce qui laissait envisager la possibilité qu'un solide réel prenne cette forme.

II.3.1 Propriétés structurales

Les propriétés structurales des quasicristaux et cristaux incommensurables sont décrites par le formalisme des fonctions quasipériodiques [17]. Dans le cas des quasicristaux solides, on est confronté à une structure discrète et des méthodes de discrétisation du problème ont donc été développées. On introduira d'abord l'algorithme de la coupe et la projection dans le cas 1D [18] pour analyser ensuite leurs conséquences dans les propriétés structurales des quasicristaux solides.

II.3.1.1 Coupe et projection

Un système quasipériodique dérive d'un système périodique dans un espace (dit super espace) [19] de dimension plus élevée. Pour le cas simple d'un réseau quasipériodique 1D, on peut partir, par exemple, d'un réseau carré dans l'espace 2D dont les sites forment une maille de pas " a ". On considère une droite quelconque dans le plan (xy) qui passe par l'origine. Si sa pente " $\tan \alpha$ " est un nombre irrationnel, cette droite ne croisera aucun nœud du réseau 2D, excepté l'origine. Le sous espace 1D constitué par cette droite s'appelle espace parallèle " E_{11} " et sera l'espace physique accessible du système quasipériodique. On introduit dans cet espace les « surfaces atomiques » qui sont ici des segments de longueur " $a / \cos \alpha$ ". Ces surfaces atomiques sont orthogonales à notre droite et centrées sur les nœuds du réseau 2D. L'ensemble quasipériodique est alors obtenu en considérant comme sites de la structure 1D tous les endroits où la droite E_{11} croise une surface atomique. Donc, cet ensemble présente une alternance non

périodique de deux distances entre sites qui sont $a\cos\alpha$ et $a\sin\alpha$ (figure II.4). Avec ce mécanisme de projection, on trouve donc l'ensemble discret de points dans l'espace parallèle.

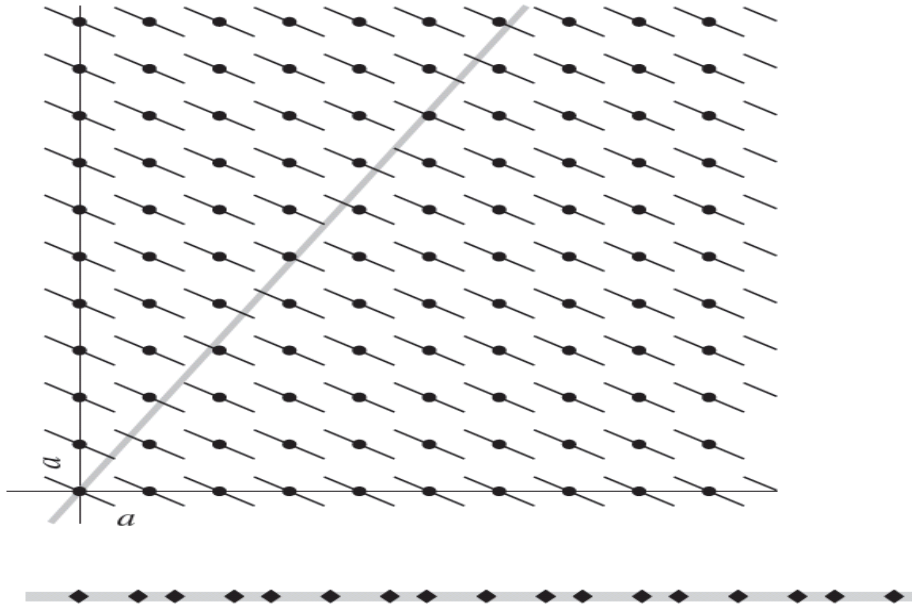


Figure. II.4 Exemple d'application de la technique de coupe et projection pour décrire un réseau quasipériodique 1D [49].

II.3.1.2 Propriétés d'invariance

Le réseau quasipériodique 1D que l'on a construit avant ne présente pas de symétrie par translation. Cependant, la régularité des fonctions quasipériodiques par rapport, par exemple, au cas du désordre stochastique, donne aux quasicristaux des propriétés d'invariance très marquées. La répétitivité des cristaux périodiques : le cristal est décrit par une maille élémentaire qui engendre tout le solide par simple translation, Considérant une séquence bien déterminée de notre « pavage » à une dimension, on peut démontrer que cette séquence se répète un nombre infini de fois dans le quasicristal. En plus, la distance moyenne qui sépare deux séquences identiques est une fonction croissante de la dimension considérée [20].

II.3.2 Les superréseaux quasipériodiques de Fibonacci

Les superréseaux quasipériodiques constituent une classe intermédiaire entre les structures périodiques aux états électroniques étendus et les structures à désordre aléatoire aux états exponentiellement localisés [21,22], ils sont adaptés à l'étude de la localisation à une dimension.

Les théoriciens comme les expérimentateurs utilisent fréquemment la suite de Fibonacci pour générer des superréseaux quasipériodiques [23-26]. On construit un superréseau de Fibonacci à partir de deux briques de bases différentes A et B, chacune composée de quelques monocouches semiconductrices et de la loi de récurrence $A \rightarrow AB$ et $B \rightarrow A$ qui commence à l'ordre $L = -1$ par B et $L = \emptyset$ par A, on génère les empilements suivants : AB, ABA, ABBAABBA, ABAABABA. Chaque séquence $S(L)$ apparaît comme la juxtaposition des deux séquences précédentes $S(L - 1)$ et $S(L - 2)$ et le nombre $F(L)$ de briques de base de la séquence $S(L)$ suit la loi numérique de Fibonacci : $F(L) = F(L - 1) + F(L - 2)$ avec $F(-1) = F(0) = 1$. Un dénombrement rapide montre que le nombre de briques A ou B suit également la loi de Fibonacci et que la proportion de A par rapport à B tend vers le nombre d'or $\tau = (1 + \sqrt{5})/2$ lorsque l'ordre L tend vers l'infini, la première conséquence de cette construction est la disparition dans la séquence $S(\infty)$ de l'invariance par translation. La suite des approximations périodiques dans chaque terme est obtenue par la répétition à l'infini d'une séquence $S(L)$. La majorité des chercheurs ont considéré la chaîne unidimensionnelle de Fibonacci [27-31] comme exemple d'un système quasipériodique et plusieurs propriétés caractéristiques des systèmes de Fibonacci ont été rapportées.

Enrique Macia et al. [32] ont présenté une analyse de transmission d'onde à travers les structures multicouche diélectriques de Fibonacci et ont montré leur application en tant que des réflecteurs.

Lusk et al. [33] ont étudié les minigaps unidimensionnels en utilisant les structures quasipériodiques de Fibonacci dans les guides d'ondes. Peng et al. [34] ont observé les transmissions résonnantes de la lumière dans des multicouches symétriques de Fibonacci, caractérisées par des pics de transmission. Utiles pour les applications de filtres optiques de longueur d'ondes multiples à bande étroite.

Plusieurs travaux [35-49] ont été effectués pour étudier les systèmes quasipériodiques

II.4 CONCLUSION

Dans ce chapitre, on a défini les systèmes ordonnés, désordonnés et quasipériodiques. L'intérêt d'étudier ces systèmes est de trouver des situations intermédiaires entre les structures périodiques aux états électroniques étendus de Bloch et les structures à désordre aléatoire aux états exponentiellement localisés. Les systèmes quasipériodiques n'ont pas une théorie expliquant la nature des états électroniques. Dans le chapitre suivant, on va présenter les hypothèses pour étudier les différents systèmes et détailler les méthodes et les formalismes de calculs utilisant plusieurs approches.

II.5 RÉFÉRENCES

1. F.Laruelle, B. Etienne, J. Barrau, K. Khirouni, J.C. Brabant, T. Amand and M. Brousseau, *Surf. Sci.* **228** 92–5 (1990).
2. P.E.Brito, C.A.A. Silva and H.N. Nazareno, *Phys. Rev. B* **51** 6096–9 (1995).
3. L.Kroon, E. Lennholm and R. Riklund, *Phys. Rev. B* **66** 094204(2002).
4. E.M.Izrailev and A.A. Krokhim, *Phys. Rev. Lett.* **82**, 4062 (1999).
5. C.Berger, T. Genet, P. Lindqvist, P. Lancv, J.C. Grieco, G. Fourcandot and F.C. Lackmann; *solid state communication*, **87**, 977 (1993).
6. P.W.Anderson. Basic Notions of Condensed Matter Physics, Ed. Addison Wesley, Frontiers in Physics (1984).
7. F.Mompiou, L. Bresson, P Cordier and D. Caillard, *Philos. Mg.* **84**, 2777-2792 (2004).
8. D.Shechtman, I. Blech, D. Gratias and J.W. Cahn. *Phys. Rev. Lett* **53** (1984).
9. R.Proveti, J.P.Chateau, G. Michot, UMR 7556, laboratoire de physique des matériaux, rapport d'activité scientifique, Université H. Poincaré Nancy(1999).
10. F.S.Piercer, S.J. Poon and Q. Guo, *Science* 261,737 (1993).
11. T.Klein, C. Berger, D. Mayou and F. Cyrot Lackmann, *Phys. Rev. Lett.* **66**, 2907 (1991).
12. R.Penrose. *Bull. Inst, Math and its Appl.***10**, 266 - 271(1974).
13. M.Gardner. *Sci. Am.* 236, 110 (1977).
14. R.Penrose. *Mathematical Intelligencer* **2**, 32 (1979).
15. P.J.Steinhardt, D .R. Nelson and M. Rouchetti, *Phys. Rev. Lett.* **47**, 1297 (1981).
16. P.J.Steinhardt, D.R. Nelson and M. Rouchetti, *Phys.Rev.B* **28**, 784 (1983).
17. H.Bohr, *Acta Math.***47**, 2237 (1926).
18. M.Duneau and A. Katz. *Phys. Rev. Lett.* **54**, 2688 (1985).
19. L.Guidoni « *refroidissement et piégeage d'atomes de césium dans un potentiel lumineux quasipériodique* » Thèse de doctorat, Paris VI (1998).
20. J.E.S.Socolar, P.J. Steinhardt and D. Levine, *Phys. Rev.B* **32**, 5547(1985).
21. F.Dominguez-Adame and A. Sanchez, *Phys. Rev. Lett. A.* Vol **.159**, p 153 (1991).
22. S.Bentata, B. Ait Saadi, H. Sediki, *Superlatt.Microstruct.* Vol. **30**, p 297 (2001).
23. S.Bentata, *Superlatt. Microstruct.* Vol. **37**, p295 (2005).
24. G.Abal, R. Donangelo, A. Romanelli, A. C. S. Schifino and R. Siri, *Phys Rev E.* **65**, 046236-2 (2002).
25. E.Macia, *Phys. Rev. B*, Vol. **63**, 205421 (2001).
26. G.Macia, *Ferroelectrics*, Vol. **250**, 401 (2001).

27. P.Panchadhyayee, R. Biswas, A. Khan and P.K. Mahapatra, *J. Phys: Condens. Matter* **20**, 275243 (2008).
28. Y.Q.Qin, Y. Y. Zhu, S. N. Zhu and N. B. Ming. *App Phys*, Vol. **84**, 6911 (1998).
29. S.N.Zhu, Y. Y. Zhu and N. B. Ming, *Science*, **278**, 843 (1997).
30. X.Yang, Y. Liu and X. Fu. *Phys. Rev B*, Vol. **59**, 4546 (1999).
31. X.Q.Huang, S. S. Jiang, R. W. Peng and A. Hu. *Phys. Rev.E*, Vol. **59**, (2001).
32. E.Macia, *Appl Phys Lett*, **73**:3330 (1998).
33. D.Lusk, I. Abdulhalim, and F. Placido, *Optics Communications*, Vol. **198**,273, (2001).
34. R.W.Peng, M. Mazzer, X. Q. Huang, F. Qiu, M. Wang, A. Hu and S. S. Jian, *Appl Phys Lett*, Vol. **80**, 3063(2002).
35. J.W.Dong, P. Han and H.Z. Wang. *Phys Lett*, **20**:1963 (2003).
36. H.Aynaou , V.R. Velasco , A. Nougauoui , E.H. El Boudouti , B. Djafari-Rouhani and D. Bria, *Surface Science*, 538, 101–112 (2003).
37. F.F.Medeiros, E.L. Albuquerque and M.S. Vasconcelos, *Surface Science* 601 4492–4496 (2007).
38. F.Dominguez-Adame, E. Macia and B. Méndez, *Cond-Mat*, **55** (534) 2007.
39. M.Palomino-Ovando, Gregorio H. Cocolletzi and C. Perez-Lopez, *Phys Lett A* 213, 191-196 (1996).
40. W.J.Hsueh and C.H. Chen and J.A. Lai, *Eur. Phys .B* **73**, p 503, (2010).
41. S.Sheelan and C.H. Arunava. *Phys Lett A*, 329: 100–7 (2004).
42. P.W.Mauriza, E.L. Albuquerquea, M.S. Vasconcelosc. *Physica A*, 294:403–14 (2001).
43. G.Linage, F. Montoya, A. Sarmiento, K. Showalter and P. Parmananda. *Phys Lett A*, 359:638–9 (2006).
44. R.N.Costa Filho and E.L. Albuquerque superla. *Physica A*, 274:545–54 (1999).
45. T.Chena, C. Chenga and H. Teoh. *Physica A*, **380**:377–90 (2007).
46. E.L.Albuquerque and E.S. Guimaraes. *Physica A*, 277: 405–14 (2000).
47. T.Y.Shang, H.Y. Zhang, Y.P. Zhang, O. Wang and J.Q. Yao. *Int.J. Infrared Milli Waves*, **28**: 671–6 (2007).
48. P.W.Mauriz, M.S. Vasconcelos and E.L.Albuquerque. *Physica A*.329:101–13 (2003).
49. R.J.D.Tilley. «Crystals and crystal »John Wiley & Sons, LTD. QD 905. 2T56. 548- USA (2006).



CHAPITRE III

MODELISATION ET SIMULATION

CHAPITRE III

MODELISATION ET SIMULATION

III.1 INTRODUCTION

La naissance de la simulation numérique remonte au début des années 1950 où les premiers ordinateurs furent utilisés pour un usage civil.

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 mathématique et servent à étudier le fonctionnement, les propriétés et l'évolution d'un système modélisé. On parle également de calcul numérique.

Pour cette grande importance de la simulation dans le domaine scientifique, on a voulu créer un modèle pour déterminer le coefficient de transmission et le temps de l'effet tunnel résonnant. Ce chapitre traite les différents formalismes utilisés pour la détermination de la structure de minibandes, le calcul du coefficient de transmission et le temps de l'effet tunnel résonnant ainsi que l'utilisation d'un logiciel qui permet la simulation des différents types de superréseaux. A cet effet, les approximations suivantes sont considérées [1-5].

III.2 APPROXIMATIONS ET CONDITIONS DE CONTINUITES

III.2.1 Approximation de la masse effective

L'approche quantique la plus fréquemment utilisée en microélectronique est l'approximation de la masse effective. La validité de cette méthode macroscopique repose sur la parabolicité des bas de bandes d'énergie. Considérant un système unidimensionnel, l'approximation de la masse effective représente la propagation d'électrons dans un matériau homogène via des ondes planes [6-9].

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

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

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

Vu la complexité de la résolution de l'équation de Schrödinger, due au potentiel cristallin $V(\vec{r})$, l'approximation de la masse effective (AME) permet d'obtenir des solutions approchées, Celle-ci consiste à remplacer l'électron quasi-libre par un quasi-électron libre, c.à.d. le mouvement d'une particule de masse m_0 dans un cristal de potentiel $V(\vec{r})$ est semblable au mouvement d'une particule libre de masse m^* dans le vide.

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

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

Ainsi m^* est une masse comportant toutes les complexités du potentiel $V(\vec{r})$ et définie par la dérivée seconde de l'énergie au voisinage d'un extremum \vec{k}_0 de la surface iso énergétique [10]. 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 .

L'application de l'approximation de la masse effective associée à quelques modèles théoriques [11], afin d'explicitier les propriétés importantes des superréseaux est utilisée pour déterminer la structure de minibandes [12-13], l'effet tunnel résonant (ETR) [14-20]...etc.

III.2.2.Fonction enveloppe et Conditions de continuité

Dans les superréseaux, les propriétés de discontinuité de la masse effective au niveau des interfaces posent un problème, celui de décrire les conditions de continuité (C.C) de l'équation de Schrödinger à l'interface et de pouvoir appliquer l'AME, malgré la dépendance de sa position. Dans la littérature, plusieurs formes d'écriture ont été proposées [21-23].

Ben Daniel et al. [24] décrivent le superréseau comme un bloc de semiconducteurs, ne tenant pas en compte la discontinuité de la masse effective aux interfaces.

Différents modèles avec différentes approches ont été élaborés pour décrire la structure de bandes des superréseaux. Le modèle de Kronig-Penney [25-32] permet d'avoir une vue simplifiée du problème. Son application dans le cas des superréseaux réels dépend de l'exigence dans l'exactitude des résultats. En fait, ce modèle n'est approprié que pour une estimation des résultats. Dans le cas contraire, il est nécessaire d'utiliser des modèles plus réalistes.

Bastard [33] a proposé une forme plus simple de conditions de continuité vérifiée par la fonction enveloppe $f(z)$ et sa première dérivée:

$$f(z^-) = f(z^+) \tag{3.a}$$

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

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

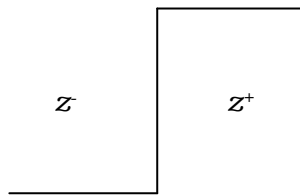


Figure.III.1 Interface abrupte.

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 :

$$u_A(\vec{r}_0) \approx u_B(\vec{r}_0) \tag{4}$$

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

III.3 FORMALISMES

L'expression de l'équation de Schrödinger suivant l'axe de croissance (oz) d'un électron ayant une énergie incidente E et une masse effective $m^*(z)$, traversant un profil de potentiel $V(z)$ dans un état stationnaire [35-39] est donnée par:

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

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.

La résolution de l'équation (5) utilisant les approximations et les hypothèses citées précédemment permet de :

- calculer le coefficient de transmission T en absence et en présence de la tension appliquée, en se basant sur la matrice de transfert et sur les fonctions d'ondes d'Airy et Bairy [40-52]
- En utilisant le modèle de la Lorentzienne pour déterminer le temps de l'effet tunnel résonnant [53].

Les énergies sont généralement considérées inférieures à la hauteur des barrières et l'étude se restreint au superréseau GaAs /Al_xGa_{1-x}As de type I selon l'axe de croissance [001] [54]. Ce choix justifie le fait de pouvoir uniquement considérer la bande de conduction dûe aux larges gaps dans les deux matériaux.

III.3.1 Calcul du coefficient de transmission T

❖ Modèle de la matrice de transfert

III.3.1.1 En absence de tension appliquée ($V_a = 0$)

Une méthode habituellement utilisée pour obtenir des informations en mécanique quantique consiste à écrire les équations de continuité au niveau de toutes les interfaces, de les rassembler toutes dans un système, ensuite de procéder aux calculs de résolutions qui interviennent, par exemple, à annuler les déterminants. Cette méthode bien qu'exacte conduit souvent à des calculs très encombrants.

Pour éliminer cette difficulté, on fait généralement recours à la méthode de matrice de transfert qui consiste à déterminer les fonctions enveloppes, leur amplitude dans le dernier matériau du multipuits quantique en fonction de celles du premier.

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

L'interprétation physique de cette technique est également directe, elle introduit la réponse du système en terme de matrice obtenue à partir d'une relation linéaire liant les fonctions d'onde et leur première dérivée au niveau des interfaces [55-57] :

$$\begin{pmatrix} \psi(0) \\ \frac{1}{m_a} \nabla \psi_a(0) \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} \psi(0) \\ \frac{1}{m_b} \nabla \psi_b(0) \end{pmatrix} \quad (6)$$

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

La résolution de l'équation (5) donne les fonctions enveloppes dans chaque région (figure III. 2):

Région (I) : $V(z)=0$; $m^*(z)=m_a$ (7)

$$\psi_I(z) = A e^{ik_1z} + B e^{-ik_1z} \quad (8)$$

Région (II): $V(z) = V_0$; $m^*(z) = m_b$ (9)

$$\psi_I(z) = C e^{ik_2z} + D e^{-ik_2z} \quad (10)$$

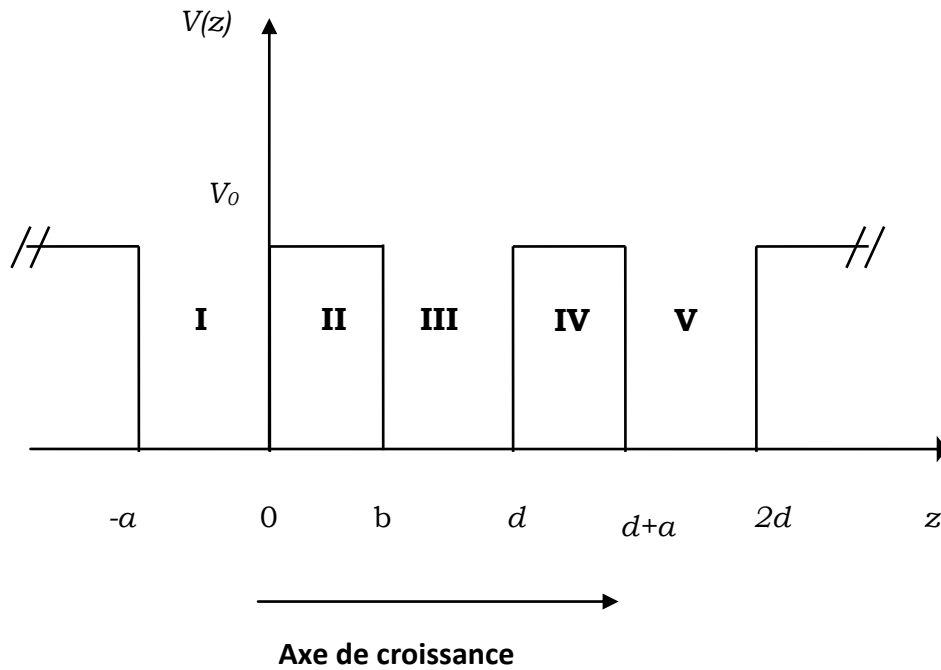


Figure.III.2 Profil de potentiel d'un SR à puits et à barrières rectangulaires.

Région (III) : $V(z) = 0$; $m^*(z) = m_a$ (11)

$$\psi_I(z) = E e^{ik_1z} + F e^{-ik_1z} \quad (12)$$

avec

$$k_1 = \sqrt{\frac{2m_a E}{\hbar^2}} \quad \text{et} \quad \kappa_2 = \sqrt{\frac{2m_b(E - V_0)}{\hbar^2}} \quad (13)$$

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

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

en $z=0$

$$\Psi_I(0) = \Psi_{II}(0) \quad (14)$$

$$\frac{1}{m_a} \Psi'_I(z)|_{z=0} = \frac{1}{m_b} \Psi'_{II}(z)|_{z=0} \quad (15)$$

Impliquent :

$$S_I(0) \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = S_{II}(0) \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} \quad (16)$$

avec

$$S_I(z) = \begin{pmatrix} e^{ik_1 z} & e^{-ik_1 z} \\ \frac{ik_1}{m_a} e^{ik_1 z} & -\frac{ik_1}{m_a} e^{-ik_1 z} \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad S_{II}(z) = \begin{pmatrix} e^{ik_2 z} & e^{-ik_2 z} \\ \frac{ik_2}{m_b} e^{ik_2 z} & -\frac{ik_2}{m_b} e^{-ik_2 z} \end{pmatrix} \quad (17)$$

D'où:

$$\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = S_I^{-1}(0) S_{II}(0) \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} \quad (18)$$

En $z=b$ le résultat obtenu est similaire

$$\begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} = S_{II}^{-1}(b) S_{II}(b) \begin{pmatrix} E \\ F \end{pmatrix} \quad (19)$$

En remplaçant (19) dans (18), l'expression devient

$$\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} E \\ F \end{pmatrix} \quad (20)$$

avec

$$M = S_{II}^{-1}(b) S_{II}(b) S_I^{-1}(0) S_{II}(0) \quad (21)$$

En utilisant le modèle de matrice de transfert [58-61] et les conditions de continuité de Bastard [62] pour un électron incident venant de la gauche, on obtient une relation reliant le coefficient de réflexion R avec celui de transmission τ .

$$\begin{pmatrix} 1 \\ R \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} \tau \\ 0 \end{pmatrix} \quad (22)$$

Une algèbre simple conduit à la matrice de transfert

$$M = -\frac{m_a}{2ik_1} \begin{bmatrix} \frac{ik_1}{m_a} & 1 \\ \frac{ik_1}{m_a} & 1 \end{bmatrix} S(0, L) \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ \frac{ik_2}{m_a} & \frac{ik_2}{m_a} \end{bmatrix} \quad (23)$$

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

$$S(0, L) = \prod_{j=0}^n D_j(l) = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{pmatrix} \quad (24)$$

Le coefficient de transmission est donné par :

$$T = \frac{4}{(S_{11} + S_{22})^2 + \left(\frac{k_2}{m_a} S_{12} - \frac{m_a}{k_1} S_{21} \right)^2} \quad (25)$$

Le coefficient de transmission est le facteur le plus déterminant dans l'effet tunnel résonnant car il le mesure quantitativement. En traçant la courbe du coefficient de transmission en fonction de l'énergie de la particule, plusieurs grandeurs physiques peuvent être déterminées, comme :

- Les énergies de résonances, pour lesquelles le coefficient de transmission décrit des pics caractérisant le passage de la particule par effet tunnel.

- Le temps de transition, c.à.dire. le temps de l'effet tunnel obtenu par l'inverse de la largeur à mi-hauteur du pic. Ce temps est très important car il permet l'application de ces dispositifs dans les systèmes électroniques à réponse rapide.
- La conductance de Landauer ($\sigma = \frac{\tau}{1 - \tau}$) décrivant la conductivité microscopique sans dimension du système.
- La résistance de Landauer ($\rho = \frac{1}{\sigma}$) [63-73].

La forme des pics du coefficient de transmission T révèle la nature des états responsables de ceux là car plus le pic est étroit, l'énergie lui correspondant est celle d'un état lié. Donc le calcul du coefficient T pour les structures à ETR présente un intérêt physique considérable. C'est pourquoi une méthode est présentée dans ce paragraphe pour déterminer T pour une structure à barrière rectangulaire soumise à un champ électrique. Cette méthode procure des solutions exactes de l'équation de Schrödinger, elle est basée sur les fonctions d'Airy [74-76].

III.3.1.2 En présence de tension appliquée (V_a)

❖ Modèles des Fonctions d'Airy

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

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

$$\frac{1}{m^*(z)} \frac{\partial^2}{\partial z^2} \cdot \psi(z) + \frac{2}{\hbar^2} [E - V(z)] \cdot \psi(z) = 0 \tag{26}$$

Les solutions de l'équation (26) dans chaque région du potentiel sont données par les relations suivantes:

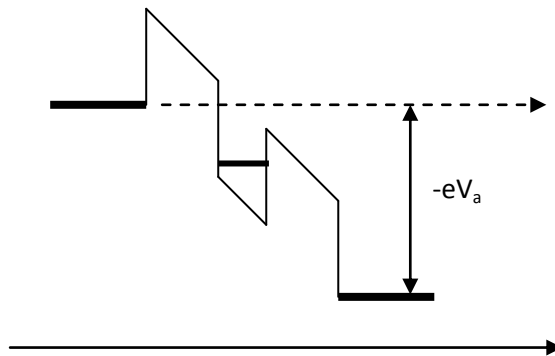


Figure.III.3 Structure soumise à la tension V_a .

Région (I) : $V(z) = 0$ et $m^*(z) = m_a$ (27)

$$\psi_I(z) = 1 e^{ikz} + R e^{-ikz} \quad (28)$$

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

Région (II) : $V(z) = V_0 - \frac{eV_a}{L} z$ et $m^*(z) = m_b$ (29)

Soit le changement de variable,

$$\rho(z) = \left(\frac{2em_b V_a}{L\hbar^2} \right)^{1/3} \left(\frac{V_0 - E}{eV_a/L} - z \right) = Z(\eta - z) \quad (30)$$

L'équation (26) devient,

$$\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} \psi_2(\rho) - \rho \psi_2(\rho) = 0 \quad (31)$$

La solution de l'équation (31) en utilisant les fonctions d'Airy est donnée par:

$$\psi_2(\rho) = C_2^+ A_i(\rho) + C_2^- B_i(\rho) \quad (32)$$

Où A_i et B_i représentent les fonctions d'Airy.

Région (III) :

$$V(z) = -\frac{eV_a}{L} (z+b) \quad \text{et} \quad m^*(z) = m_a \quad (33)$$

En effectuant ce changement de variable,

$$\rho'(z) = \left(\frac{2em_a V_a}{L\hbar^2} \right)^{1/3} \left(-\frac{beV_a - E}{L} - z \right) = Z'(\eta' - z) \quad (34)$$

L'équation (26) devient,

$$\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} \psi_3(\rho) - \rho \psi_3(\rho) = 0 \quad (35)$$

La résolution de l'équation (35) dans cette région est formulée par

$$\psi_3(\rho) = C_3^+ A_i(\rho') + C_3^- B_i(\rho') \quad (36)$$

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 (V)

$$V(z) = 0 \quad \text{et} \quad m^*(z) = m_a \quad (37)$$

$$\psi_5(z) = 0 \quad e^{-ik'z} + \tau \quad e^{ik'z} \quad (38)$$

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

La première amplitude dans la relation (38) 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 :

$$\begin{pmatrix} 1 \\ R \end{pmatrix} = -\frac{m_a}{2ik} \begin{pmatrix} -\frac{ik}{m_a} & -1 \\ -\frac{ik}{m_a} & 1 \end{pmatrix} S(0, l) \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ \frac{ik'}{m_a} & -\frac{ik'}{m_a} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tau \\ 0 \end{pmatrix} \quad (39)$$

avec $S(0, l) = S_p(0) S_p^{-1}(b) \cdot S_b(0) S_b^{-1}(a) \cdot S_p(0) S_p^{-1}(b)$ (40)

où $S_p(\rho) = \begin{pmatrix} A_i(\rho) & B_i(\rho) \\ \frac{A_i'(\rho)}{m_b} & \frac{B_i'(\rho)}{m_b} \end{pmatrix}$ et $S_b(\rho') = \begin{pmatrix} A_i(\rho') & B_i(\rho') \\ \frac{A_i'(\rho')}{m_a} & \frac{B_i'(\rho')}{m_a} \end{pmatrix}$ (41)

représentent respectivement les matrices de diffusion au niveau du puits et de la barrière. La relation finale est donc donnée par :

$$\begin{pmatrix} 1 \\ R \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} \tau \\ 0 \end{pmatrix} \quad (42)$$

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 incide

$$T = \frac{k'}{k} \tau^* \tau \quad \text{avec} \quad \tau = \frac{1}{M_{11}} \quad (43)$$

Soient A , B , C et D les éléments de la matrice $S(0,l)$, des relations (39) et (42),

$$M_{11} = \frac{1}{2} \left[\left(A + \frac{k'}{k} D \right) + i \left(\frac{k' B}{m_a} - \frac{C}{k} m_a \right) \right] \quad (44)$$

$$\text{avec} \quad T = \frac{\left(4 \frac{k'}{k} \right)}{\left(A + \frac{k'}{k} D \right)^2 + \left(\frac{k' B}{m_a} - \frac{C m_a}{k} \right)^2} \quad (45)$$

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' [77-79].

III.3.2 Temps de l'effet tunnel résonant

Le simple formalisme présenté pour le calcul de t est principalement basé sur l'obtention des valeurs du coefficient $T(E)$. Dans la mesure où ce travail apporte une méthode efficace permettant la détermination de T pour le profil $V(z)$; le temps de l'ETR peut être calculé pour toutes les structures étudiées dans ce mémoire.

❖ Modèle 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:

$$T(E) = \frac{\Delta E^2}{(E - E_r^2) + \Delta E^2} \quad (46)$$

E_r est l'énergie de résonance et ΔE la largeur de l'état quasi-lié dans le puits.

Les structures étudiées dans ce travail possèdent des barrières fines, cette approximation ne peut être appliquée, d'où ΔE est obtenue en l'identifiant à la largeur à mi-hauteur du pic de résonance du coefficient T . En vertu du principe d'incertitude de Heisenberg, le temps de l'ETR est inversement proportionnel à ΔE :

$$t = \frac{\hbar}{\Delta E} \quad (47)$$

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

III.4 LOGICIEL SUPERRESEAUX

III.4.1 Fonctionnement du logiciel

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 bâtie 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 quasipériodique, dont le désordre est introduit selon les séquences de la série de Fibonacci.

Etape 3 :

Calcul : d'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).

III.4.2 Implémentation

Le prototype de logiciel est constitué d'une fenêtre principale comportant une barre de menu, une boîte de saisi associée à une liste déroulante. L'utilisateur peut sélectionner un élément de la liste ou entrer directement une valeur dans la boîte 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.III.4 Fenêtre de l'interface principale.

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

Cette fenêtre (figure III.5) 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).

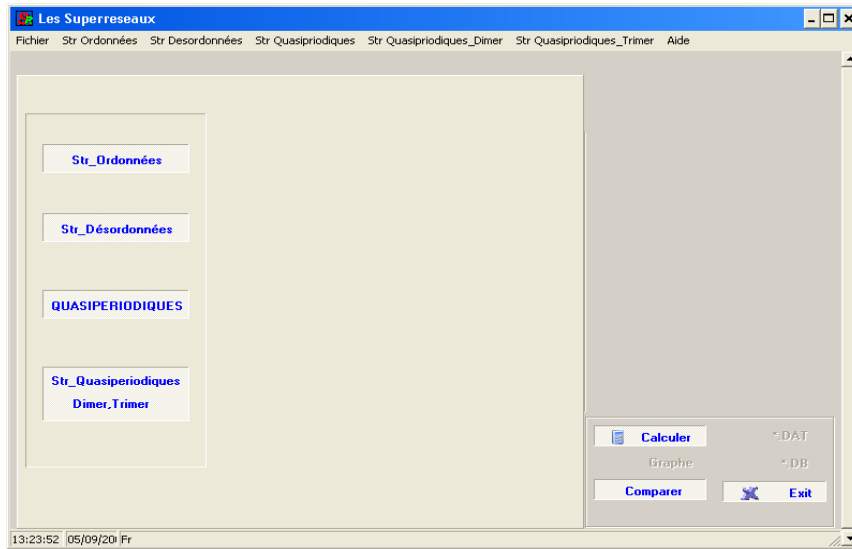


Figure.III.5 Fenêtre représentant le choix des structures à

Les menus *Str Désordonnées*, *Str Quasipériodiques dimer*, *str quasipériodiques trimers* contiennent les différentes possibilités des différents types de systèmes. La figure suivante représente un exemple de ces menus (*Str désordonnées*) :



Figure.III.6 Menu structures désordonnées.

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, dans laquelle 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 (III.7) illustre cette fonctionnalité.

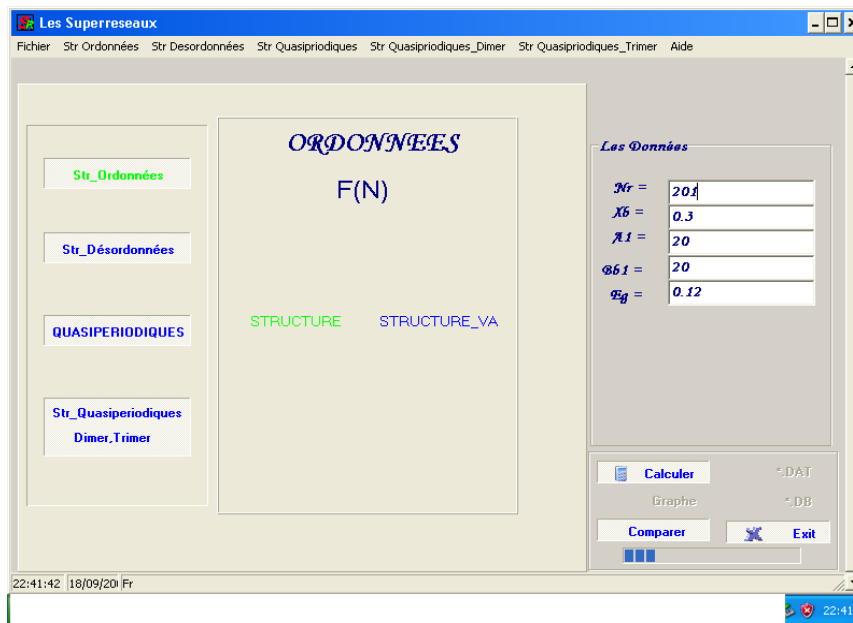


Figure.III.7 Fenêtre représentant la progression et le contrôle de calcul.

Fenêtre graphique

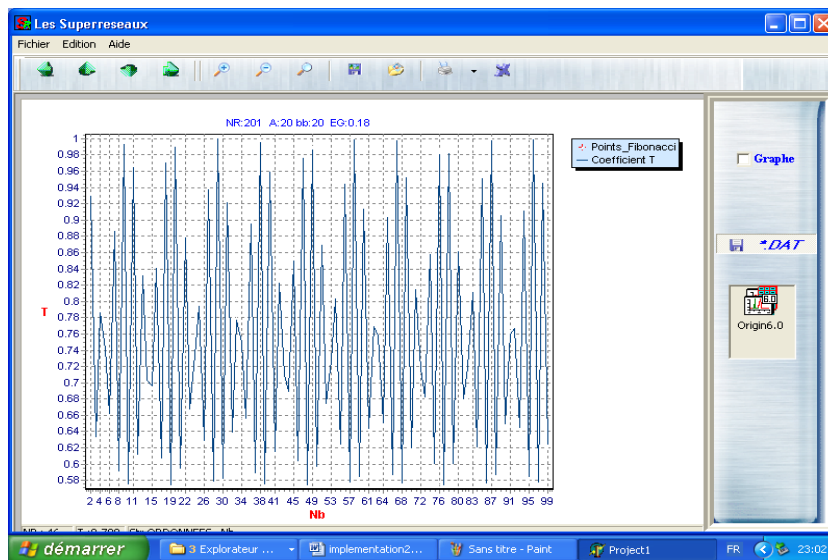


Figure.III.8 Fenêtre graphique.



: On fait appel à Origin6.0 qui est un utilitaire plus puissant et efficace pour traitement des graphes (figure III.9).

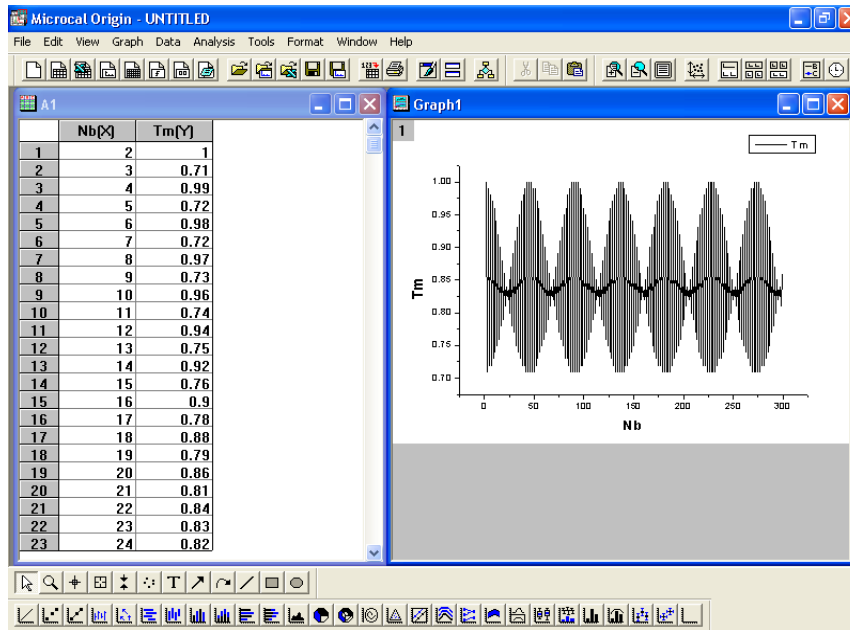


Figure.III.9 Interface de l'Origine 6.0.

❖ L'étude 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.

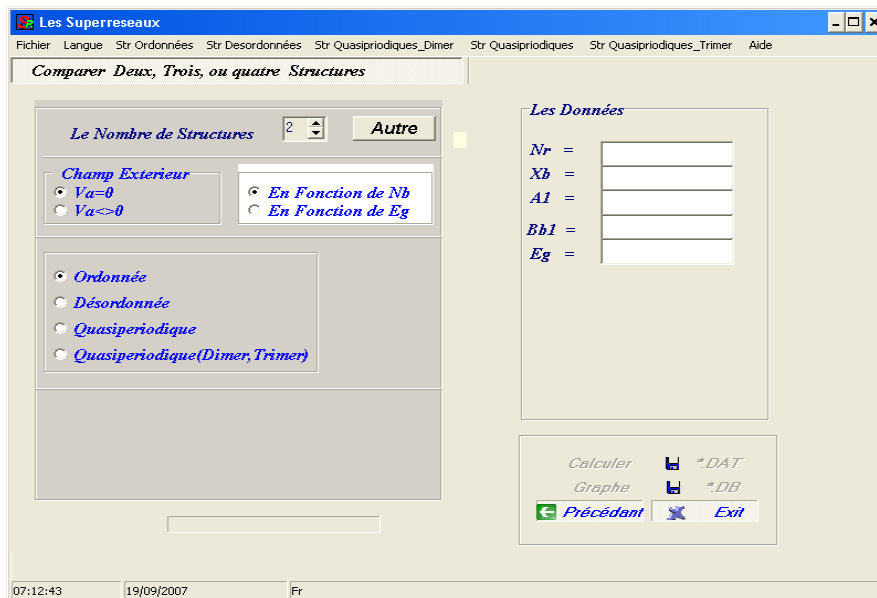


Figure.III.10 Fenêtre de comparaison de plusieurs

La barre de menu traduit les tâches offertes par les différentes boîtes (figure III.10).

Autre : Assure la sélection du nombre de structures désirées en introduisant les paramètres appropriés. A la fin du dernier choix les boutons suivants 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.

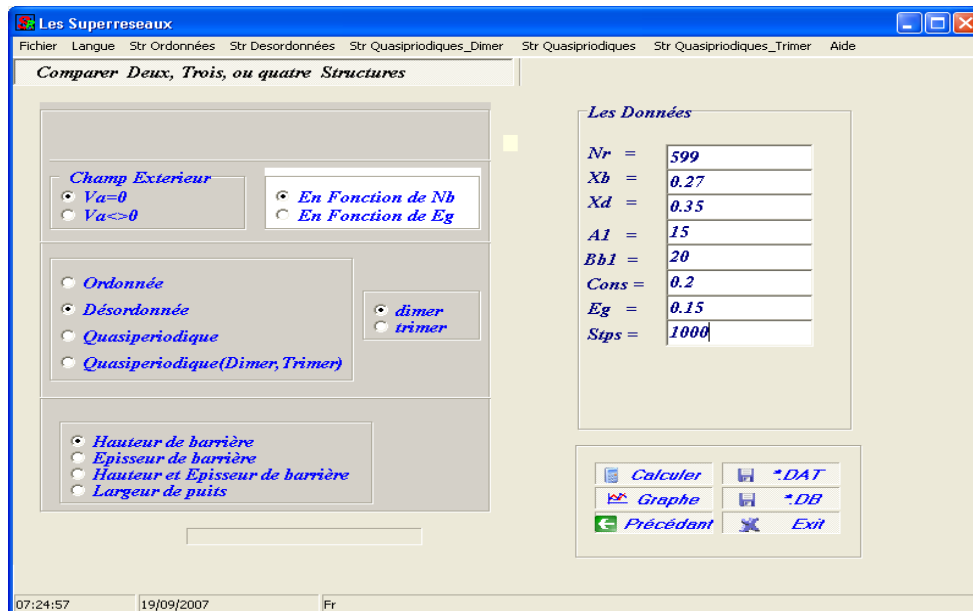


Figure.III.11 Fenêtre représentant la façon d'introduire des paramètres.

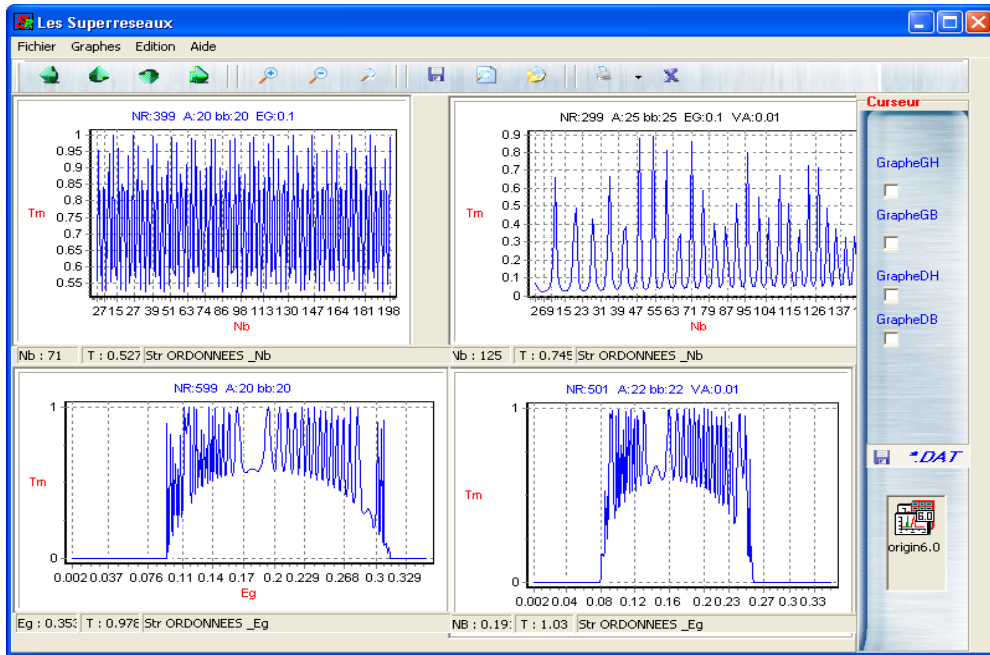


Figure.III.12 Fenêtre de comparaison Graphique de plusieurs structures.

La fenêtre représentée ci-dessus permet le traitement de plusieurs graphes en même temps (quatre ou plus), les traitements doivent être effectués individuellement sur ces graphes.

Chaque figure comporte les informations concernant le système représenté parmi lesquelles on cite : le type, le nombre de régions (barrières et puits), la hauteur et l'épaisseur de barrière, la largeur du puits et la taille de l'échantillon (cas de dimer, trimer).

❖ **Les données**

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

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

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

La hauteur **Vd** doit apparaître par paire (triplet) dans les systèmes dimers (trimers), avec $(0 < Xb < 0.45 ; 0 < Xd < 0.45)$.

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

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

Bd1 : épaisseur des barrières régulières 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 moyenne pour calculer le coefficient de transmission).

Va : valeur de champ extérieur appliqué (Volt).

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

III.5 CONCLUSION

Dans cette partie, nous avons abordé les différents formalismes des caractéristiques des SRs, utilisant l'approximation de la masse effective et celle de la fonction enveloppe ainsi que les conditions de continuité de Bastard dans le modèle de la matrice du transfert. La résolution de l'équation de Schrödinger a permis la détermination du coefficient de transmission à partir d'une résolution basée sur les fonctions d'Airy.

On utilise le modèle de la Lorentzienne pour déterminer le temps de l'effet tunnel résonnant, un logiciel « **SUPERRESEAUX** » qui regroupe tous les programmes de calcul permettant l'étude de plusieurs types de superréseaux. Ces formalismes sont appliqués dans le chapitre IV pour discuter les résultats en illustrant les avantages et les inconvénients des méthodes proposées et en essayant d'interpréter les phénomènes physiques observés.

III.6 RÉFÉRENCES

1. Z.Elatche « *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. G.Bastard, *Wave Mechanics Applied to Semiconductors Heterostructures* Edition de Physique (1989).
6. Y.Ando and T. Itoh, *J. App. Phys.***61**, 1497 (1987).
7. P.R.L.De Carvalho,V.N. Freire, M. M. Auto and G.A. Farias, *Super.Micros.***14**, 221(1993).
8. C.M.Tan, J. M. Xu, and S. Zukotynski, *J. App. Phys.* **67**, 3011 (1990).
9. N.Sekkal, H. Aourag, N. Amrane and B. Soudini, *Phys. Rev. B* 215, 171 (1995).
10. G.Bastard, “*Wave Mechanics Applied to Semiconductors Heterostructures*” Edition de Physique (1989).
11. P.Kiréev « *La physique des semiconducteurs* », edit. Mir. Moscou (traduction Française) (1975).
12. W.J.Hsueh, C.H.Chen and J.A. Lai. *Eur. Phys .B* **73**.p503 (2010).
13. Mayer A, *Phys. Rev. E* **74** 046708(2006).
14. B.Sapoval and C. Harmann, *Physique des semiconducteurs* (2006)
15. K.F.Brennan and C. J. Summers, *J. App. Phys.* **61**, 614 (1987).
16. J.P.Peng, H. Chen and S. X. Zhou, *J. Phys. Cond. Matter* I 5451 (1989).
17. S.S.Allen and S. L. Richardson, *Phys. Rev. B* **50**, 11 693 (1994).
18. S.S.Allen and S. L. Richardson, *J. App. Phys.* **79**, 886 (1996).
19. A.N.Khonder, M. R. Khan and A. F. N. Anwar, *J. App. Phys.* **63**, 5192 (1988).
20. Y.Zebda and A. M. Kanan, *J. App. Phys.* **72**, 559 (1992).
21. H.Pruszkarski, *Physica B.* 125, 179 (1984).
22. T.Ando and S. Moris, *Phys. Rev. B* **40**, 11609 (1989).
23. Q. G.Zhu and H. Kroemer, *Phys. Rev. B* **27**, 3519 (1989).
24. D. J.Ben Daniel and C. B. Duke, *Phys. Rev.* 152, 683 (1966).
25. R. L.Kronig and W. J. Penney, *Proc. R. Soc. London, Ser. A* 130, 499 (1930).
26. A.M.Tan, J. M. Xu and S. Zukotynski, *J. App. Phys.* **67**, 3011 (1990).
27. A.Sanchez, E. Macia and F. Dominguez-Adame, *Phys. Rev B* **49**,147; 15428 (1994).
28. S.Khaled, *J. Phys. Cond. Matt.* **19**, 076202 (2007).

29. B.Kramer and A. Mac Kinnon, *Rep. Prog. Phys.* **56**, 1469 (1993),
30. E.N.Economou, C.M. Soukoulis and M.H. Cohen, *Phys. Rev. B* **9**, 4399 (1988).
31. H.Dunlap, H.L.Wu and P. Philips, *Phys. Rev. Lett.* **65**, 88 (1990).
32. P.Philips, H.L. Wu, *Sciences* **252**, 1805 (1992).
33. G.Bastard, *Phys. Rev. B* **24**, 5693 (1981).
34. I.Galbraith and G. Duggan, *Phys. Rev. B* **38**, 10057 (1988).
35. .M.Tan, J. M. Xu and S. Zukotynski, *J. App. Phys.* **67**, 3011 (1990).
36. A.Nogaret, L. A. Cury, D. K. Maude, J. C. Portal and D. L. Sivco, *Semi. Sci. Tech.* **8**, 1819 (1993).
37. C.Tannoudji, C.B. Diu, and F. Lalce, *Quantum Mechanics*. John Wiley & Sons. New York (1977).
38. L.D.Landau and E. M. Lifshitz, *Quantum Mechanics- Pergamon*, Oxford (1984).
39. E.Merzbacher, *Quantum Mechanics*, 3rd. ed. John Wiley & Sons. New York (1998).
40. H.A.Antosiewicz, M. Abramowitz and I.A. Stegun, *Handbook of Mathematical Functions* Eds (1972).
41. F.Berz, *Semi. Sci. Tech.* **8** (1993).
42. M.O.Vassell, J. Lee and H.F. Lokwood, *J.App.Phys.***54**, 5206 (1983).
43. K.F.Brennan and C.J. Summers, *J.App.Phys.***61**, 614 (1987).
44. J.P.Peng, H. Chen and S.X. Zhou, *J. Phys. Cond.Matter* **I** 5451 (1989).
45. S.S.Allen and S.L. Richardson, *J.App.Phys.***79**, 886 (1996).
46. D.J.Fisher and C. Zhang, *J.App.Phys.***76**, 606 (1994).
47. H.X.Jiang and J.Y. Lin, *J.App.Phys.***61**, 624 (1987).
48. N.Sekkal, H. Aourag, N. Amrane, and B. Soudini, *Phys. Rev. B* **215**, 171 (1995).
49. D.L.Smith and C. Mailhiot, *Rev. Mod.Phys.***62**, 173 (1990).
50. F.Bechstedt, H. Geecke and H. Grille, *Phys. Rev. B* **47**, 13 540 (1993).
51. T.Ando, S. Wakara and H. Akera, *Phys. Rev. B* **40**, 11 610 (1989).
52. J.Leo and J. A. Toombs, *Phys. Rev. B* **43**, 1944 (1994).
53. S.S.Allen and S.L. Richardson, *Phys. Rev B* **50**, 11 693 (1994).
54. L.Li.Tsung and Kelin J. Kuhn, *Phys. Rev. B* **49**, 2608 (1994).
55. F.Capasso, S. Luryi, W. T. Tsang, C.G. Bethea and B. F. Levine, *Phys. Rev. Lett.* **51**, 2318 (1983).
56. R.C.Miller, A.C. Grossard, D.A. Kleinman and O. Munteanu, *Phys. Rev B* **29**, 3740 (1984).
57. G.P.Berman, F. Dominguez-Adame and A. Sanchez, *Physica D* 107.166 (1997).

58. J.S.Walker and J. Gathright, *Amer. J. Phys.* **62**.408(1994).
59. T.P.Horikis, *Phys. Lett. A* 359. 345 (2006).
60. F.R.Villatoro and J. A. Monsoriu, *Phys Lett A* **372**. 3801(2008).
61. M.Born and E. Wolf, *Principles of Optics* 7th edn (Cambridge: Cambridge University Press) pp 62–74 (1999).
62. G.Bastard, *Phys. Rev. B* **24**. 5693 (1981).
63. P.Harrison "Quantum Wells, Wires and Dots: Theoretical and Computational Physics of Semiconductor Nanostructures" Wiley, 3 edition (2000).
64. W.Salejda, *Physica A* **232**.769(1996).
65. W.Salejda and P. Szyszuk, *Physica A* **252**.547(1998).
66. R.Landauer, *Philo.Mag.***21**, 863 (1970).
67. A.Douglas Stone and A. Szafer, *IBM J.Res.Develp.***33**, 384 (1988).
68. Y.Imry and R. Landauer, *Rev. Mod.Phys.***71**, 306 (1999).
69. S.Datta, *Electronic transport in mesoscopic systems*, Cambridge university press, Cambridge, (1995).
70. Y.Imry, *Introduction to mesoscopic physics*, Oxford university press, Oxford (2000).
71. C.L.Roy and A. Khan, *Phys. Rev. B* **49** 14979–83(1994).
72. C.L.Roy, A. Khan and C. Basu, *J. Phys.: Condens. Matter* **7** 1843–53(1995).
73. M.H.Tyc and W. Salejda, *Physica A* 303 493–506(2002).
74. J.Nanda, P.K. Mahapatra and C.L. Roy, *Physica B* 383 232–42(2006).
75. P.K.Mahapatra, K. Bhattacharyya, A. Khan and C.L. Roy, *Phys. Rev. B* **58** 1560–71(1998).
76. P.Panchadhyayee, R. Biswas, A. Khan and P.K. Mahapatra, *J. Appl. Phys.* At press (2008).
77. Z.Aziz, S. Bentata, R. Djelti and Y. Sefir, *Solid state Communication* **150**,865-869 (2010).
78. R.Djelti, S. Bentata, Z. Aziz, A.Besbes. *Superlatt.Microstruc* **50** .659666 (2011).
79. Z.Aziz, S. Bentata and R. Djelti. *Eur. Phys. J.Appl. Phys.***35**, 114 (2006).



CHAPITRE IV

RESULTATS ET DISCUSSIONS

CHAPITRE IV

RESULTATS ET DISCUSSIONS

IV.1 INTRODUCTION

Ce chapitre donne le fruit du travail effectué car il décrit l'aspect numérique des différentes méthodes et approximations présentées dans le chapitre précédent. L'équation de Schrödinger associée au potentiel des systèmes étudiés a été résolue pour l'étude des différentes hétérostructures à profil de potentiel rectangulaire, ce qui nous permet d'avoir un aperçu général sur la nature des différents états électroniques de la structure (localisation, délocalisation...) et les structures de minibandes, en particulier les superréseaux quasipériodiques de Fibonacci en monomère et en dimer.

Au début, on introduit les résultats étudiant le comportement du coefficient de transmission pour des structures ordonnées afin de faire une comparaison entre les états des structures quasipériodiques en absence et en présence du champ électrique.

Le choix d'étudier un SR type $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ est justifié dans la mesure où la littérature procure tous les paramètres expérimentaux utilisés dans notre calcul numérique. En particulier, l'expression du potentiel de ce SR en fonction de la fraction molaire x de la composition en Aluminium introduite lors de l'épitaxie.

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

IV.2.1 Potentiel

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

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

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

IV.2.2 Masse effective

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

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

m_0 étant la masse de l'électron libre.

IV.3 STRUCTURES ORDONNEES

Avant d'aborder les propriétés de transport électronique des superréseaux quasipériodiques, il est indispensable de bien comprendre le comportement des structures ordonnées. Plusieurs situations peuvent être distinguées selon les paramètres du superréseau choisi. Celles-ci déterminent si la fonction d'onde électronique a une probabilité significative d'atteindre, par effet tunnel, un puits quantique adjacent.

IV.3.1 Double barrières rectangulaires

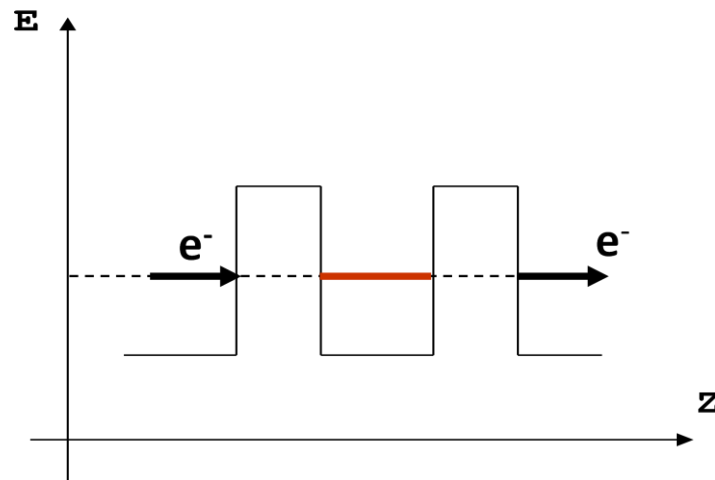


Figure. IV.1 Structure d'une double barrière.

L'étude du coefficient de transmission en fonction de l'énergie incidente de l'électron pour une structure à double barrières rectangulaires schématisée par la figure (IV.1).

La figure (IV.2), nous montre un pic de résonance d'amplitude égale à l'unité localisée à une énergie E_r dont la position dépend des paramètres de la double barrière. Ce pic est dû à l'existence d'un état permis confiné à l'intérieur du puits, permettant à l'électron de transpercer les deux barrières par le phénomène d'effet tunnel résonnant.

Ces états permis des électrons se confinent vers le bas du puits avec l'augmentation des largeurs des puits et l'augmentation de l'épaisseur de barrière " b ", ce qui rend les pics moins larges [1-4].

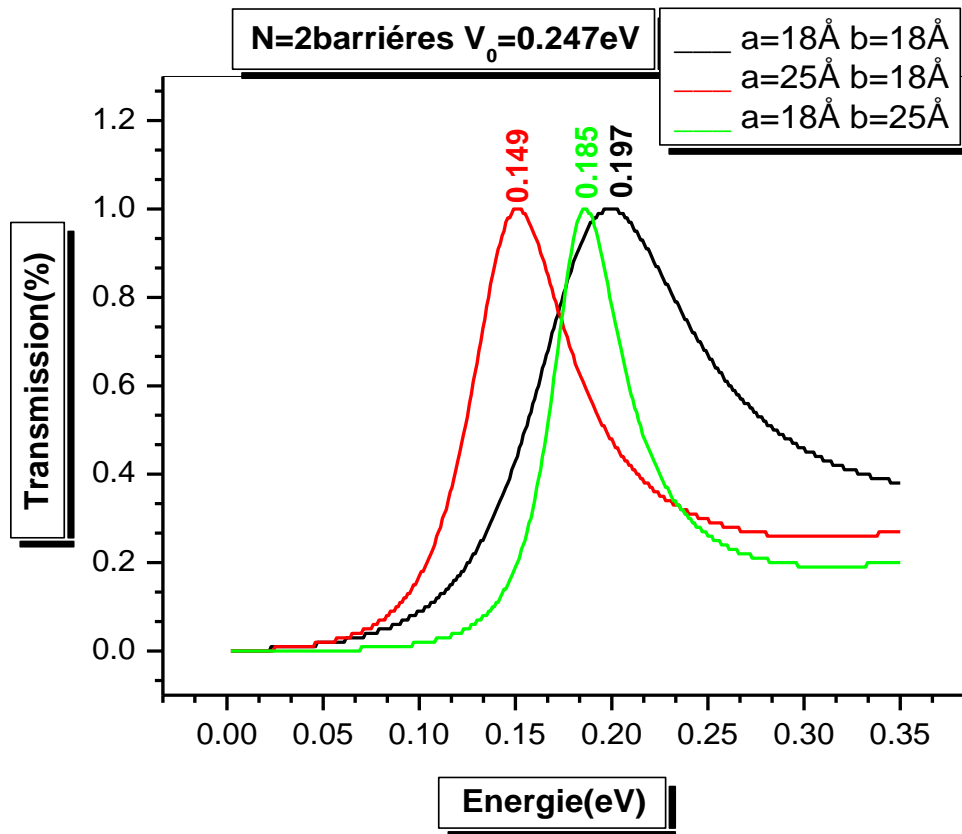


Figure. IV.2 Coefficient de transmission d'une structure double barrières en fonction de l'énergie de l'électron.

IV.3.2 Triple barrières rectangulaires

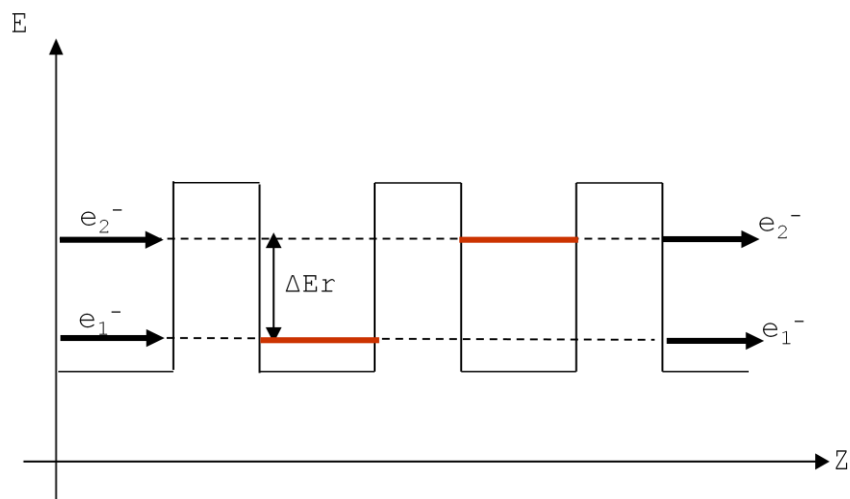


Figure. IV.3 Structure d'une triple barrière.

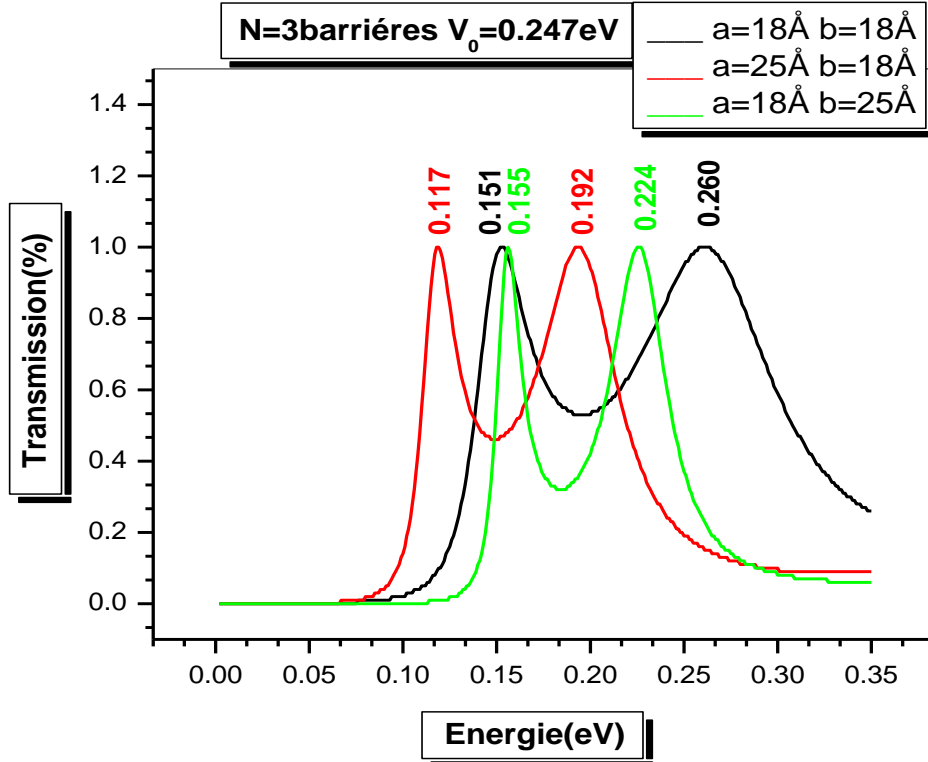
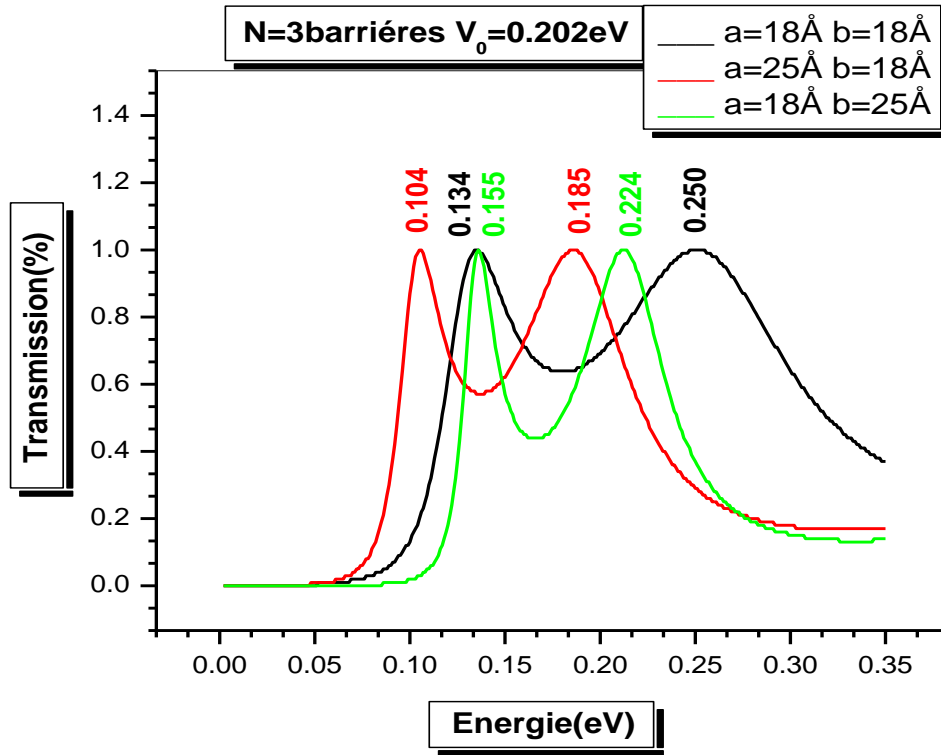


Figure. IV.4 Coefficient de transmission en fonction de l'énergie de l'électron pour une structure triple barrière. (a) $V=0.202\text{eV}$, (b) $V=0.247\text{eV}$.

En gardant les mêmes paramètres que ceux de la structure double barrières, Les mêmes interprétations que celles de la structure double barrière peuvent être données sauf qu'ici on remarque :

- Deux pics de résonance au lieu d'un seul, où chacun correspond à un état électronique permis dans chaque puits de potentiel (figure IV.3).
- L'augmentation de la hauteur de barrière décale la région permise vers les grandes énergies (figure IV. 4b).
- L'augmentation de la hauteur de la barrière associée à de faibles largeurs du puits quantique, augmente l'énergie E_V correspondant à la vallée.
- La différence d'énergie ΔE , correspondant aux deux états permis dans chaque puits de potentiel, augmente pour des largeurs de puits très grande devant l'épaisseur de barrière ($a=25\text{\AA}$, $b=18\text{\AA}$ figure (IV.4.a,b). Cette augmentation procure de faibles longueurs d'ondes et des temps rapides de réponse dans les systèmes électroniques [5-8].

IV.3.3 Structure à N barrières rectangulaires

Le profil du superréseau ordonné avec une hauteur de potentiel constante, tout en conservant la période spatiale suivant la direction de croissance, contenant N barrières rectangulaires, est représenté dans la figure (IV.5).

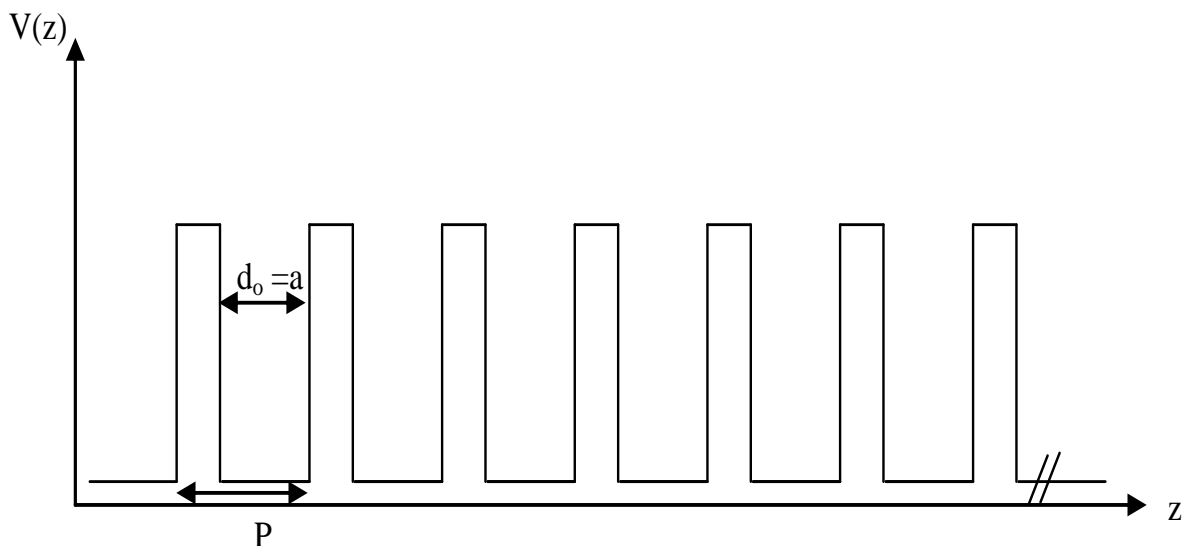


Figure. IV.5 Structure à N barrières rectangulaires.

Les paramètres physiques utilisés pour calculer le coefficient de transmission de cette structure sont : $N=377$ barrières rectangulaires périodiques de période $P = a + b$, constante le long de la structure, $a=18\text{\AA}$, $b=18\text{\AA}$, $V_0= 247\text{meV}$ et $V_1=202\text{meV}$; où a et b représentent respectivement la largeur du puits et l'épaisseur de barrière. Les masses effectives correspondant à chaque région du potentiel sont : $m_a=0,067m_0$, $m_{b0}=0,096 m_0$ et $m_{b1}=0,089m_0$ respectivement du puits, de barrière de hauteur V_0 et de barrière de hauteur V_1 . Ces paramètres sont choisis de telle sorte que la minibande obtenue sera inférieure aux hauteurs des barrières.

La figure (IV.6) montre la variation du coefficient de transmission en fonction de l'énergie d'électron pour deux structures ordonnées. L'électron dans ces structures de potentiel possède $(N-1)$ états permis confinés à l'intérieur du puits lui permettant de transpercer les N barrières, c'est le phénomène d'effet tunnel résonnant (ETR). En effet, chaque puits de potentiel procure un état permis de transmission exploité par l'électron pour passer par ETR. Donc, pour une structure à N barrières de potentiel, on a $(N-1)$ pics de transmission très proches les uns des autres, ce qui donne naissance à une structure de minibande permise. Les positions des bords inférieurs et supérieurs de la minibande des deux hauteurs de barrières V_0 et V_1 sont aussi observées dans la figure (IV.6). Ces résultats sont en bon accord avec ceux trouvés par Bentata et al. [9], Gomez et al. [10], Aziz et al. [11], Djelti et al. [12-14] et Terkhi et al. [15-16] pour des conditions comparables.

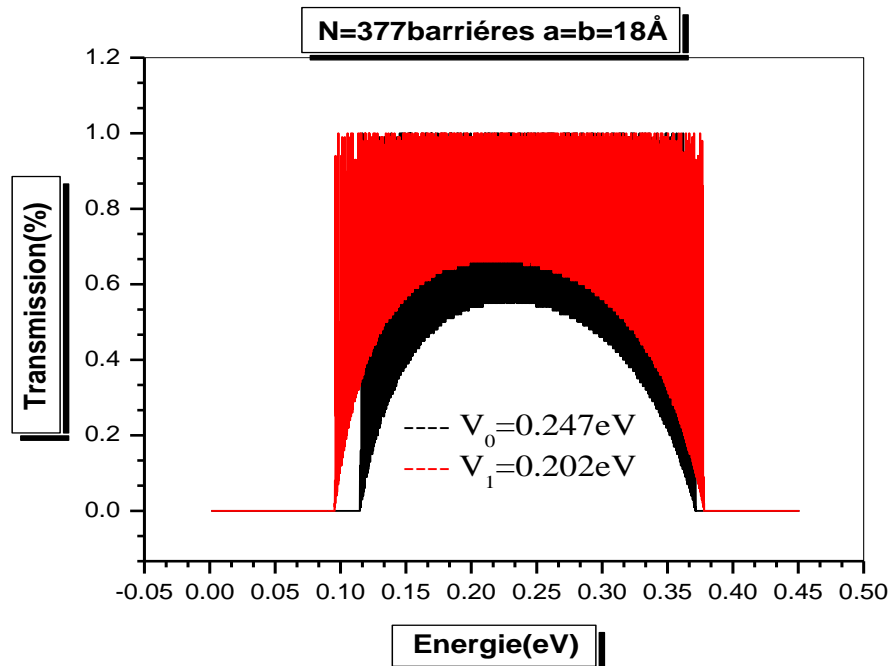


Figure. IV.6 Coefficient de transmission en fonction de l'énergie d'électron pour deux structures ordonnées.

L'augmentation de la taille du système par prolongement de la périodicité est nécessaire pour évaluer l'évolution spatiale d'un état résonnant. La figure (IV.7) représente le coefficient de transmission en fonction du nombre de barrière pour $E_r=250meV$. On remarque que T présente des oscillations périodiques pondérées par une fonction enveloppe de période $P = 850 \text{ \AA}$. Celle ci a une relation avec la période du SR. Cet état est un état étendu de Bloch.

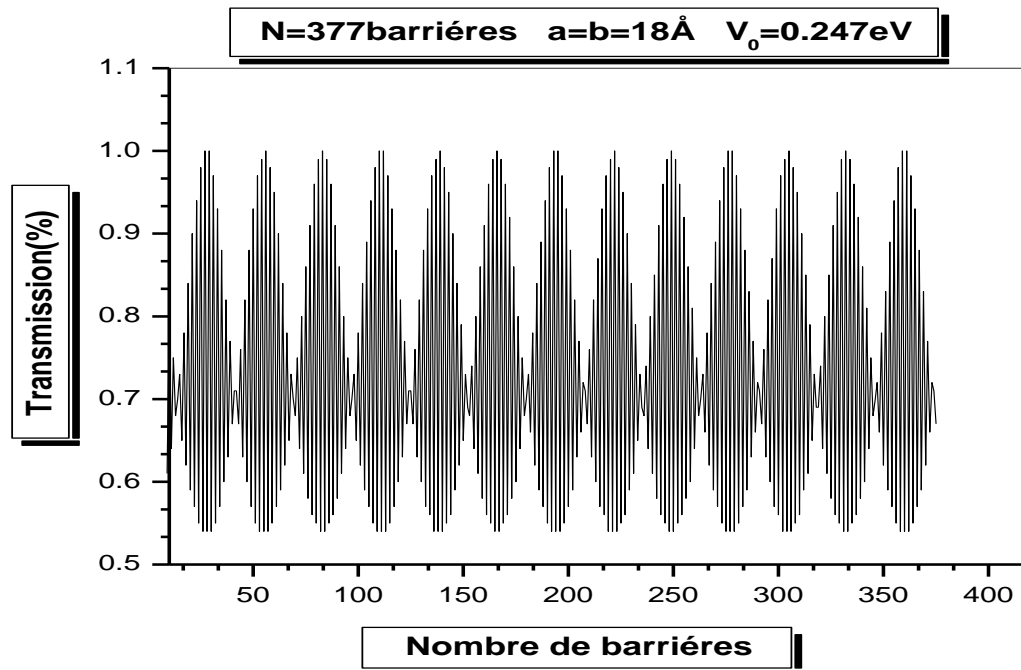


Figure. IV.7 Coefficient de transmission d'un SR ordonné en fonction du nombre de barrières.

IV.3.4 Effet du champ électrique

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 IV. 8).

Ning et al. [17], ont étudié l'effet d'un champ électrique sur un superréseau périodique de taille finie. Le champ électrique dans leur cas a provoqué un déplacement des pics de transmission vers les basses énergies. Cela est en parfait accord avec nos résultats.

Le champ électrique incline le profil de potentiel, Cette inclinaison provoque une rupture de la symétrie du profil de potentiel. Le champ électrique dans les systèmes périodiques localise les états électroniques à cause de la rupture de la périodicité. Ce type de localisation est connu sous le nom de l'effet Stark-Wannier-Ladder [18-22].

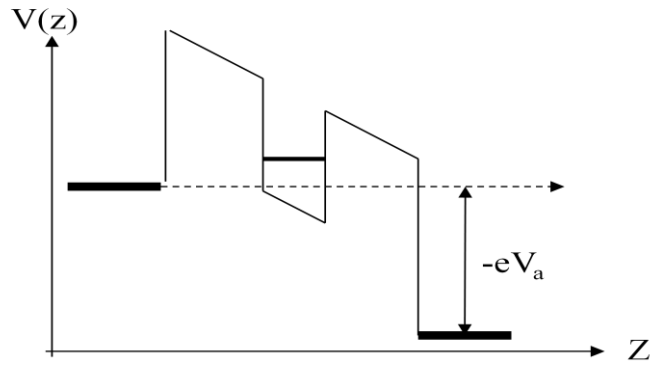


Figure. IV.8 Un superréseau soumis à une tension externe V_a .

IV.3.4.1 Double et triple barrières rectangulaires

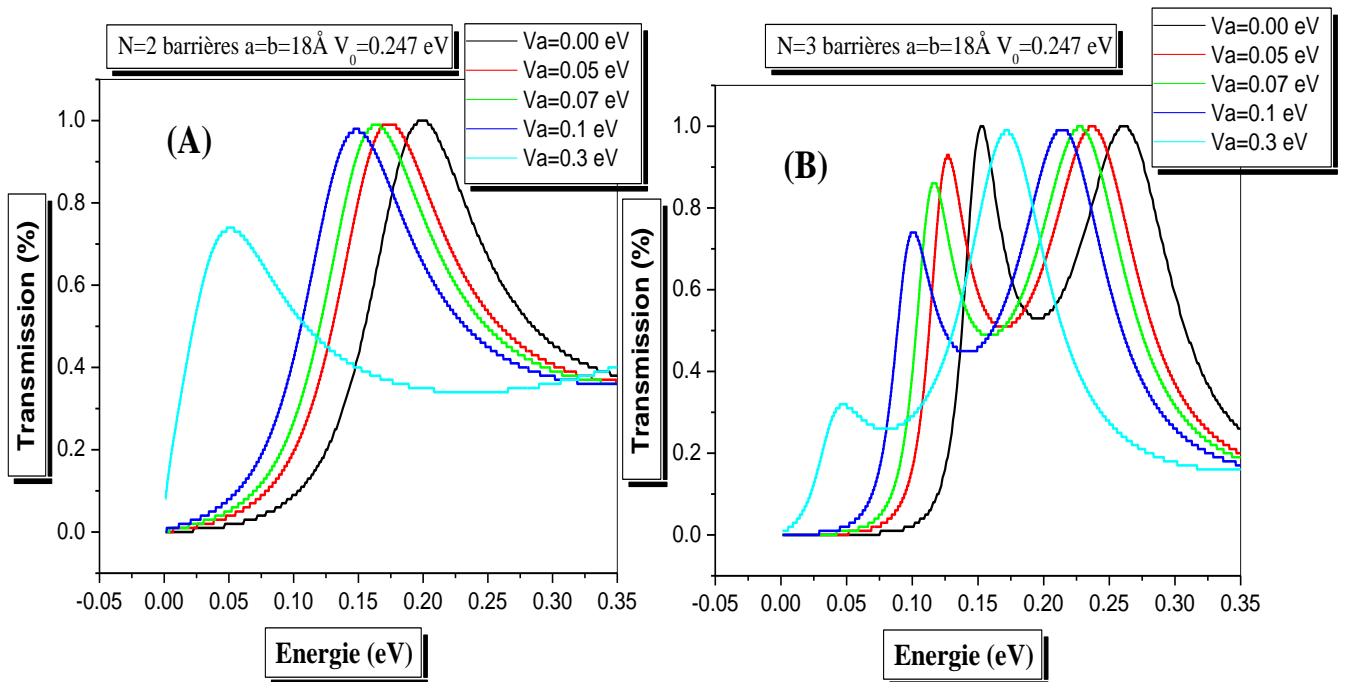


Figure. IV.9 Coefficient de transmission en fonction de l'énergie de l'électron des deux structures en double barrières (A) et triple barrières (B) pour différentes tensions appliquées.

L'évolution du coefficient de transmission d'une structure double et triple barrières soumise à une tension appliquée V_a en fonction de l'énergie de l'électron, présentée par la figure (IV.9) montre une:

- Translation des pics de résonances, vers les plus basses énergies avec l'augmentation de V_a . Ce résultat est similaire à ceux obtenus dans la littérature [23,24].
- 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.

VI.3.4.2 Structure à N barrières rectangulaires

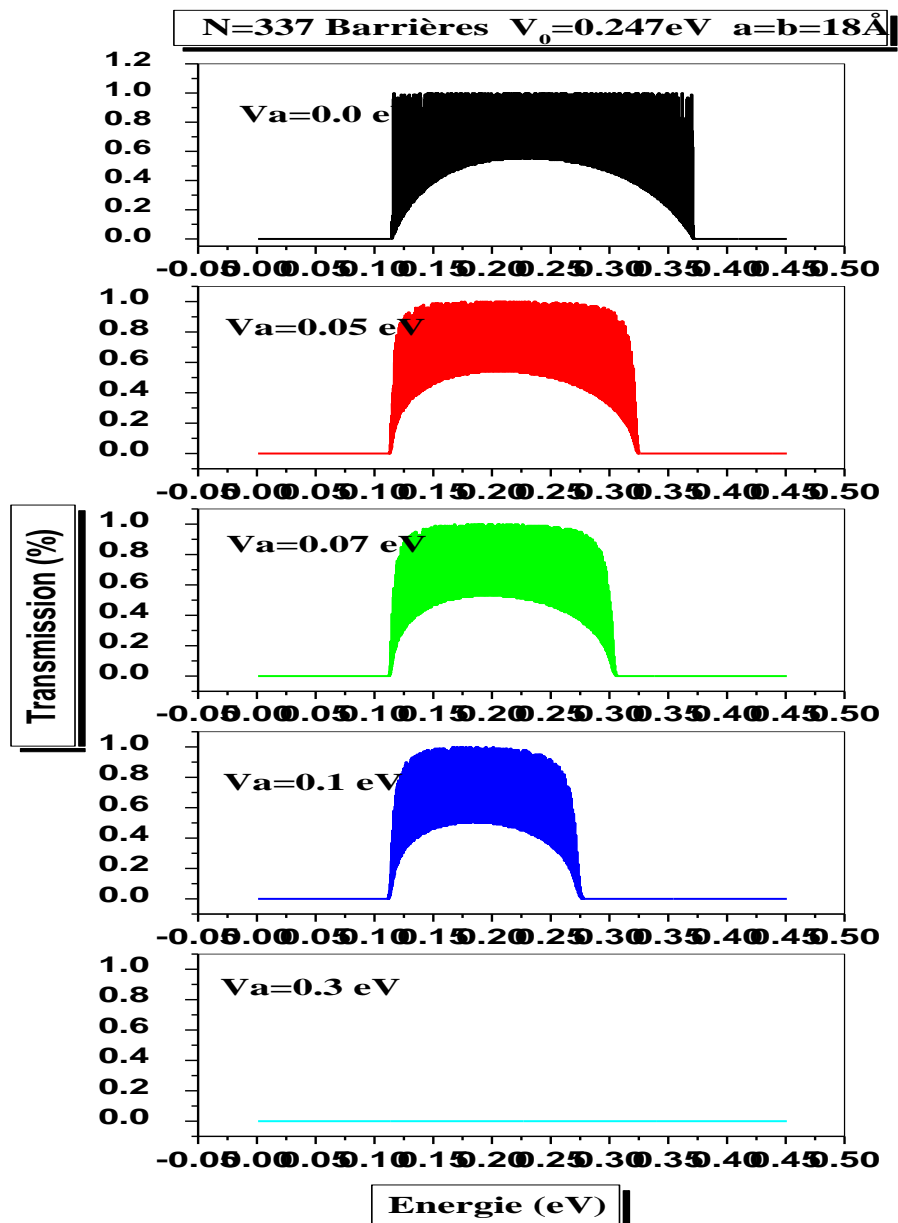


Figure. IV.10 Coefficient de transmission d'une structure à N barrières en fonction de l'énergie de l'électron à différentes tensions appliquées.

La figure (IV.10) 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 $V_a=0.3eV$. 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. Par contre en absence du champ électrique, les fonctions d'onde sont délocalisées. Les électrons subissent des diffusions associées aux deux puits adjacents. Ces résultats sont en bon accord avec ceux trouvés par Djelti et al. [25,26].

IV.3.5. Temps de l'effet tunnel résonnant

Le temps de l'effet tunnel résonnant est calculé pour une structure double barrière rectangulaire soumise à une tension extérieure V_a . Le tableau IV.1 expose les valeurs de la largeur à mi-hauteur du pic de résonance du coefficient de transmission ΔE et du temps de l'effet tunnel t ainsi que la vitesse de l'électron traversant ces profils.

D'après le tableau IV.1, l'ordre de grandeur du temps de passage par effet tunnel résonnant est de femtoseconde (10^{-15} s) pour l'électron. On constate aussi que la vitesse de l'électron augmente avec la tension V_a car la particule est accélérée sous l'influence du champ appliqué. Elle atteint une valeur de l'ordre du un millième de la vitesse de la lumière, ce qui est considérable.

Cette méthode (Lorentzienne) présente un seul inconvénient: 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 valeurs ainsi obtenues s'interprètent comme un ordre de grandeur qualitatif.

Tableau IV.1: Représentation des valeurs de la largeur à mi-hauteur ΔE du pic de résonance de $T(E)$, temps de l'effet tunnel résonnant t et la vitesse de l'électron V .

V_a (Volt)	E_r (eV)	ΔE (eV)	t (s) $\times 10^{-15}$	V (m/s) $\times 10^5$
0.00	0.197	0.130	5.048	4.12
0.05	0.173	0.129	5.087	4.05
0.1	0.147	0.127	5.167	3.93

IV.4 STRUCTURES QUASIPERIODIQUES

L'intérêt d'étudier ces matériaux est de trouver des situations intermédiaires favorables entre les états localisés dans les systèmes désordonnés et les états étendus de Bloch caractérisant les systèmes ordonnés. C'est le cas des superréseaux de Fibonacci.

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

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

Il faut empiler les couches semiconductrices en obéissant à la règle de substitution suivante :

Ordre de séquence

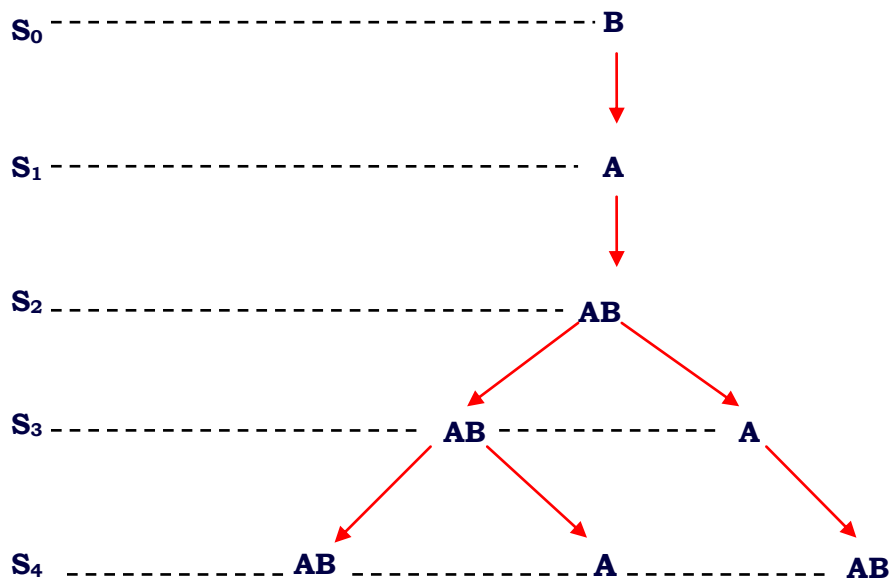


Figure. IV.11 Superréseau quasipériodique de Fibonacci.

Dans la description de ces types de superréseaux, plusieurs paramètres peuvent être variés, notamment : la largeur du puits de Fibonacci a_f , l'épaisseur de barrière de Fibonacci b_f , la hauteur de potentiel de Fibonacci V_f , ainsi que la largeur de la structure L à travers le nombre de barrière N .

Pour cela, nous avons étudié les deux cas de structure quasipériodique de Fibonacci en monomère et en dimer avec le calcul des longueurs d'ondes émises par ces types de structures.

IV.4.1 Cas de structure quasipériodique de Fibonacci en monomère

IV.4.1.1 Structure quasipériodique en largeur du puits

Dans ce paragraphe, le coefficient de transmission est tracé pour une structure de Fibonacci en largeur du puits. Le profil de potentiel de la quatrième séquence (*aafaaaaf*) est représenté dans la figure suivante :

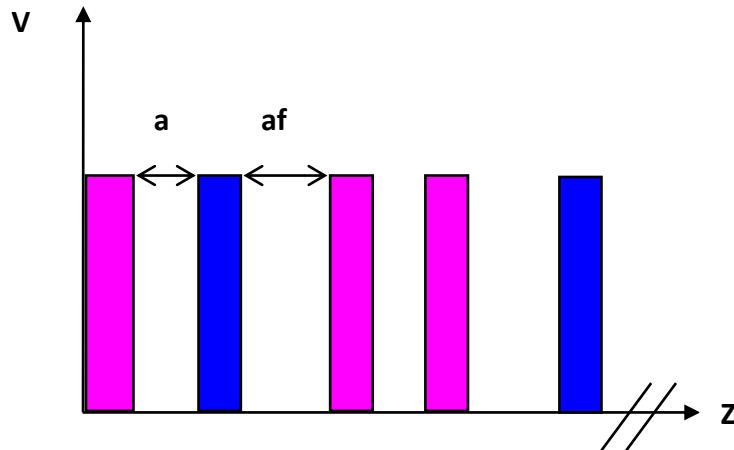


Figure. IV.12 Représentation d'une structure de Fibonacci de la quatrième séquence pour $af > a$.

La structure étudiée a une hauteur de potentiel $V_0 = 0.247 \text{ eV}$ et une épaisseur de barrières $b = 18 \text{ \AA}$ séparées par des puits de largeur $a = 18 \text{ \AA}$ et des puits de largeur de Fibonacci (A) $af = 20 \text{ \AA}$, (B) $af = 25 \text{ \AA}$ et (C) $af = 30 \text{ \AA}$ pour $N = 377$ barrières.

La figure (IV.13.A) montre une fragmentation de la minibande principale en plusieurs subminibandes et minigaps. Cette fragmentation est due à l'introduction de la quasipériodicité dans le profil de potentiel. Aussi, des états singulièrement localisés sont constatés à l'intérieur des subminibandes. Cela est une conséquence directe des interférences destructives des ondes électroniques sur les parois des barrières de la structure, dû à l'introduction des largeurs af décrivant la perte de la périodicité du superréseau. Ce phénomène observé est similaire à celui de Gellermann et Lusk [27,28]. Les figures (IV.13.B-C) présentent une fragmentation plus conséquente c.à.d. Les minigaps deviennent plus larges et des subminibandes plus restreintes, cela est dû au confinement des états à l'intérieur des puits de Fibonacci af qui deviennent plus importants. L'effet de la quasipériodicité est mieux senti par l'électron car la différence entre les puits a et af est plus considérable par rapport à celle de la figure (IV.13.A).

Le puits de Fibonacci introduit joue le rôle d'un défaut détruisant la périodicité du système. En augmentant sa largeur, son effet devient de plus en plus conséquent.

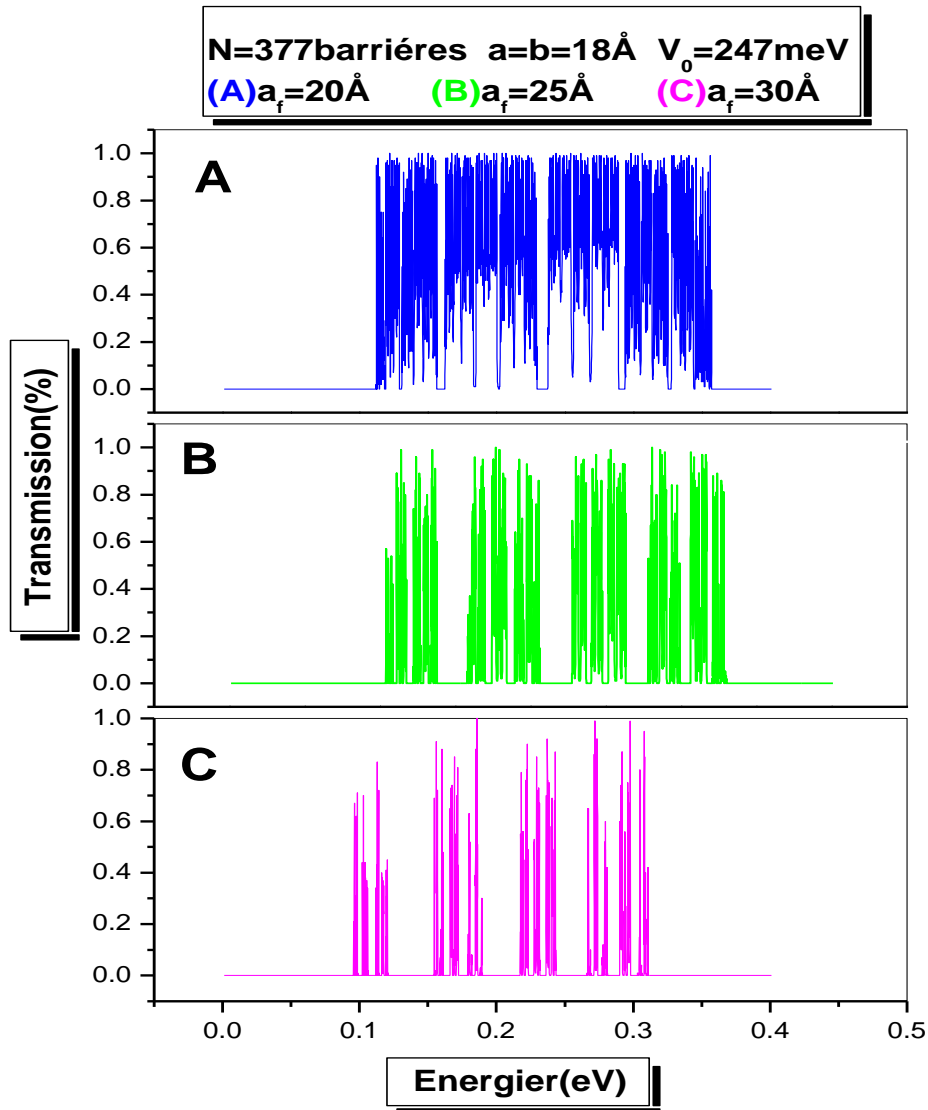


Figure. IV.13 Coefficient de transmission en fonction de l'énergie de l'électron pour une structure quasipériodique en largeur du puits pour $af > a$.

Le coefficient de transmission en fonction du nombre de barrières est représenté sur la figure (IV.14) pour les mêmes valeurs des paramètres précédents à des valeurs d'énergie correspondant au coefficient de transmission nul et à l'unité.

On constate dans la figure (IV.14.A) que le coefficient de transmission garde son comportement oscillatoire et la fonction enveloppe a perdu son aspect cohérent due à l'absence de la notion de périodicité ; cet état représente un état étendu mais pas celui de Bloch. Dans la figure (IV.14.B), le coefficient de transmission a un comportement oscillatoire avec une diminution en exponentiel de la fonction enveloppe jusqu'à son annulation à partir de $N= 20$

barrières. Cet état correspond à un état localisé. Ce résultat est similaire à celui de Dominguez-Adame et al. [29].



Figure. IV.14 Coefficient de transmission en fonction du nombre de barrières pour une structure quasipériodique de Fibonacci en largeur du puits à (A) $E_r= 3.053\text{eV}$ et (B) $E_r=3.265\text{eV}$.

IV.4.1.2 Structure quasipériodique en épaisseur de barrière

L'effet de la variation de l'épaisseur de barrière est étudié dans ce paragraphe pour une structure de 377 barrières. Le profil de potentiel de la quatrième séquence (*bbfbbb*) est représenté dans la figure suivante :

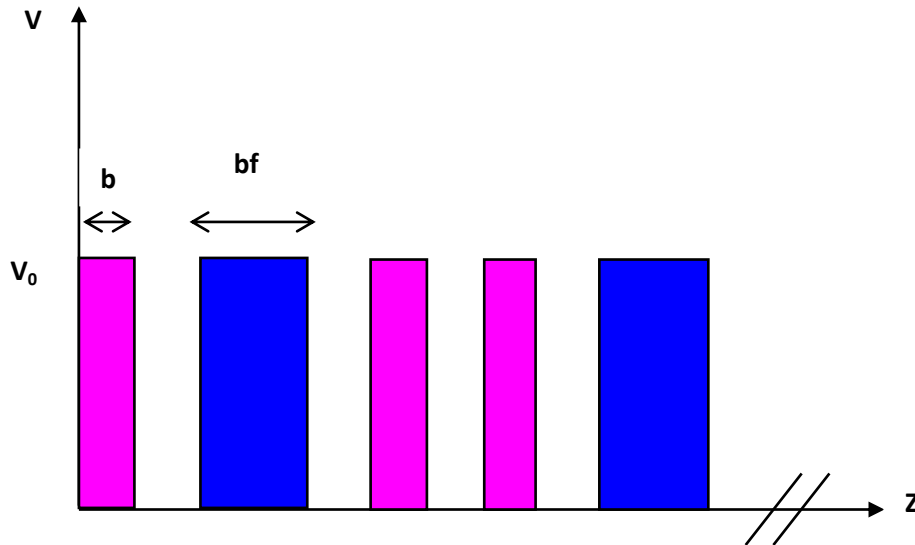


Figure. IV.15 Représentation d'une structure de Fibonacci de la quatrième séquence pour $bf > b$.

La structure étudiée a une hauteur de potentiel $V_0 = 0.247 \text{ eV}$ et une épaisseur de barrières $b = 18 \text{ \AA}$ séparés par des puits de largeur $a = 18 \text{ \AA}$ et des épaisseurs de barrières de Fibonacci (A) $bf = 20 \text{ \AA}$, (B) $bf = 25 \text{ \AA}$ et (C) $bf = 30 \text{ \AA}$ pour $N = 377$ barrières.

Le coefficient de transmission dans la figure (IV.16.A) montre un spectre fortement fragmenté en trois submibandes séparées par deux minigaps. Cette fragmentation est due à l'introduction de la quasipériodicité. Des états singulièrement localisés sont constatés à l'intérieur des submibandes, cela est une conséquence directe des interférences destructives des ondes électroniques. Alors que dans la figure (IV.16.B-C), la fragmentation est plus conséquente. Elle conduit à l'apparition des minigaps de largeurs important lors de l'introduction d'une barrière de Fibonacci plus large que la première. Le nombre des états passant par l'effet tunnel diminue considérablement d'où l'apparition des états singulièrement étendus.

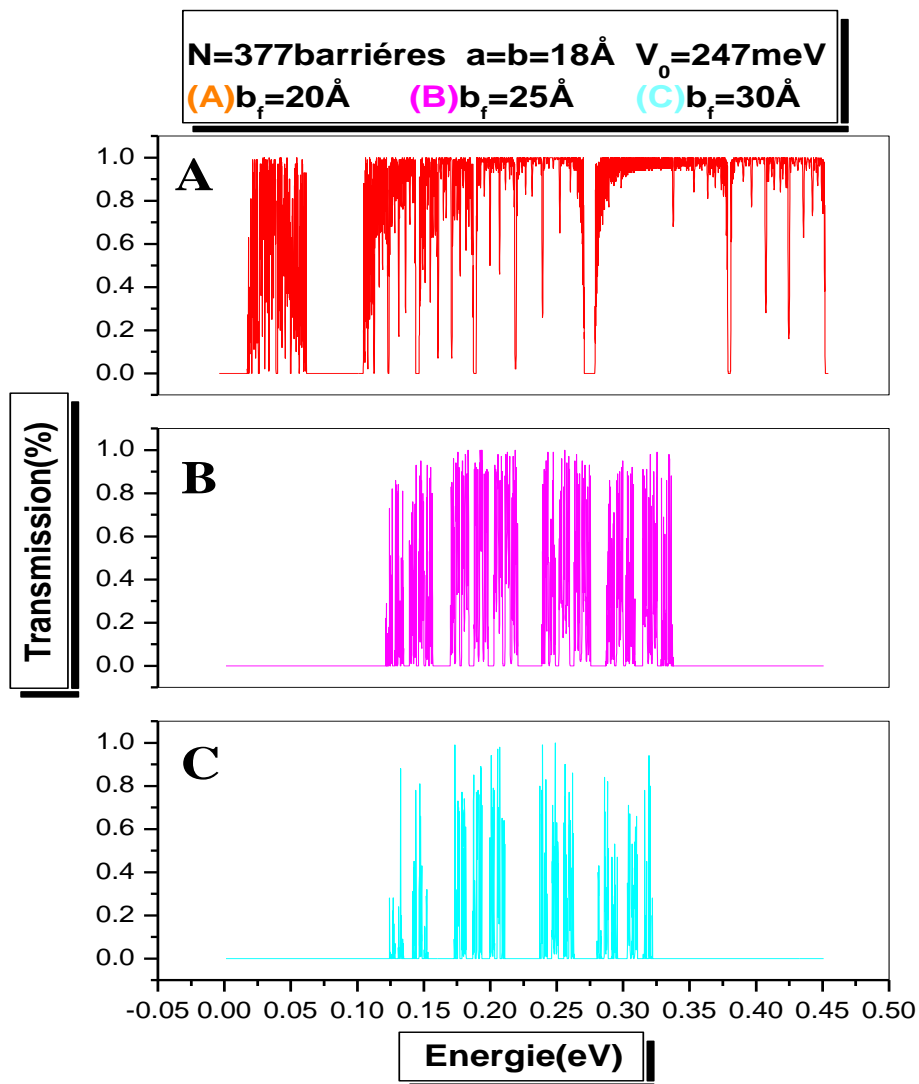


Figure .IV.16 Coefficient de transmission en fonction de l'énergie de l'électron pour une structure quasipériodique en épaisseur de barrière $bf > b$.

La figure (IV.17) représente le coefficient de transmission en fonction du nombre de barrières pour les mêmes valeurs des paramètres précédents à des valeurs d'énergies correspondant à un coefficient de transmission nul ($T=0$) et à l'unité ($T=1$). On constate dans la figure (IV.17.A) que le coefficient de transmission garde son comportement oscillatoire et la fonction enveloppe a perdu son aspect cohérent dû à l'absence de la notion de périodicité ; cet état représente un état étendu mais pas celui de Bloch. Dans la figure (IV.17.B), le coefficient de transmission a un comportement oscillatoire avec une diminution en exponentiel de la fonction enveloppe jusqu'à son annulation. Pour les petites valeurs de N , la structure joue le rôle d'une

structure ordonnée. Avec l'augmentation de la taille du superréseau, l'électron commence à sentir l'effet du défaut quasipériodique avec la diminution du coefficient de transmission jusqu'à son annulation. A grande portée, la quasipériodicité tend vers le désordre.

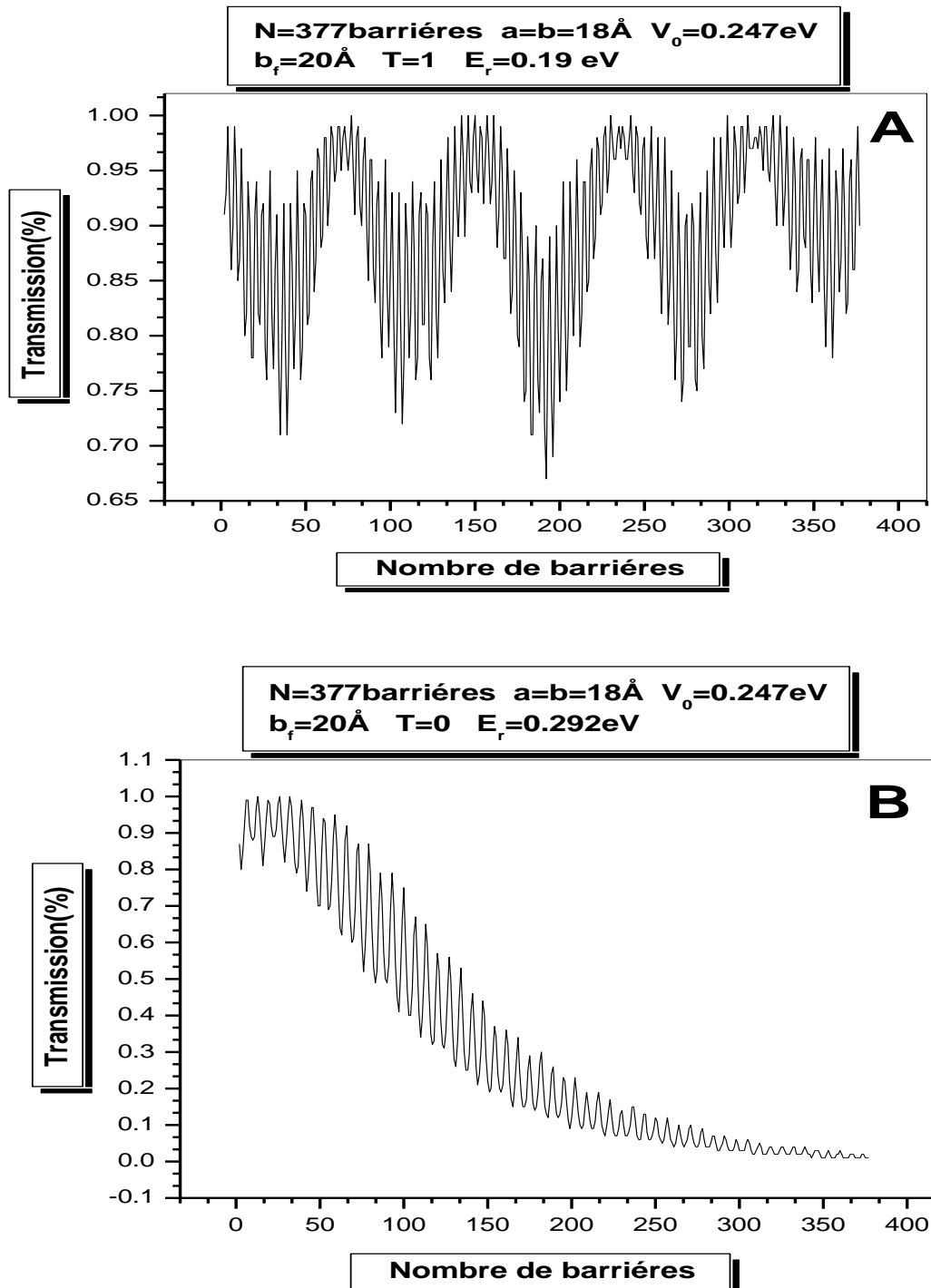


Figure. IV.17 Coefficient de transmission en fonction du nombre de barrières pour une structure quasipériodique de Fibonacci en épaisseur de barrière à (A) $E_r=1.9\text{ eV}$ et (B) $E_r=2.925\text{eV}$.

IV.4.1.3 Structure quasipériodique en hauteur de barrière

L'effet de la variation de la fraction molaire en aluminium est étudié pour une structure de 377 barrières. La périodicité est introduite en faisant varier la hauteur de barrière de Fibonacci tout en variant la valeur de la fraction molaire en aluminium (voir équation 1) comme le montre la figure suivante :

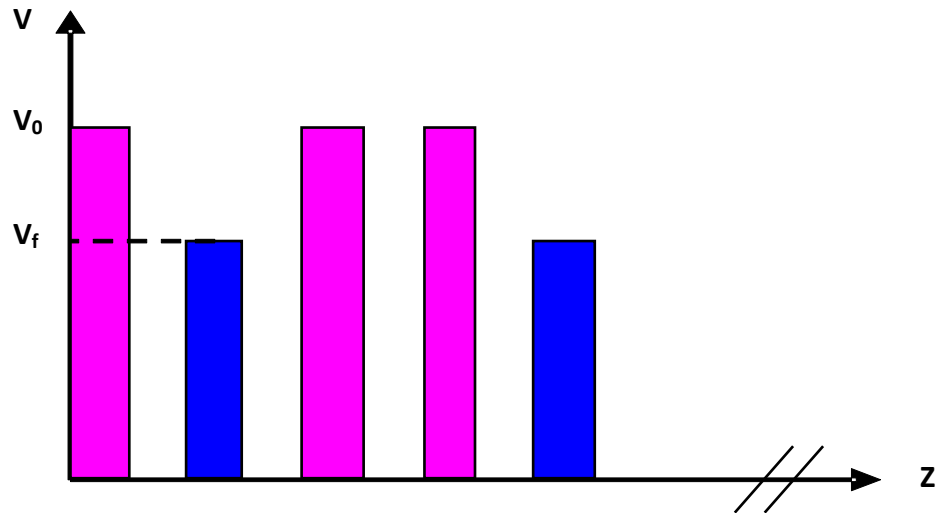


Figure. IV.18 Représentation d'une structure de Fibonacci de la quatrième séquence pour $V_f < V_0$.

Le coefficient de transmission est représenté selon l'énergie de l'électron pour une structure ayant un potentiel $V_0 = 247 \text{ meV}$ pour différentes valeurs de potentiel de Fibonacci : (A) $V_f = 202 \text{ meV}$; (B) $V_f = 150 \text{ meV}$, (C) $V_f = 100 \text{ meV}$ et $V_f = 30 \text{ meV}$ correspondant respectivement à $x = 0.27$, $x = 0.20$, $x = 0.134$ et $x = 0.04$

Dans la figure (IV.19.A), on remarque l'existence de trois régions de largeurs différentes et chaque région contient des subminibandes et des minigaps. Ces régions se distinguent de plus en plus lorsque la hauteur de barrière diminue c.à.d. des minigaps apparaissent avec des largeurs plus considérables jusqu'à la disparition de la première subminibande. En effet, le nombre des états singulièrement localisés augmente à l'intérieur des subminibandes qui sont dus aux états de conduction des impuretés. Pour $V_f = 100 \text{ meV}$, les deux premières régions contiennent uniquement des états singulièrement étendus, la plus grande subminibande résiste à l'effet de la quasipériodicité car ses électrons possèdent des énergies supérieures au défaut [30]. Ses effets sont dus à la diminution du potentiel de Fibonacci par rapport au potentiel hôte V_0 d'où l'électron sent le degré du désordre.

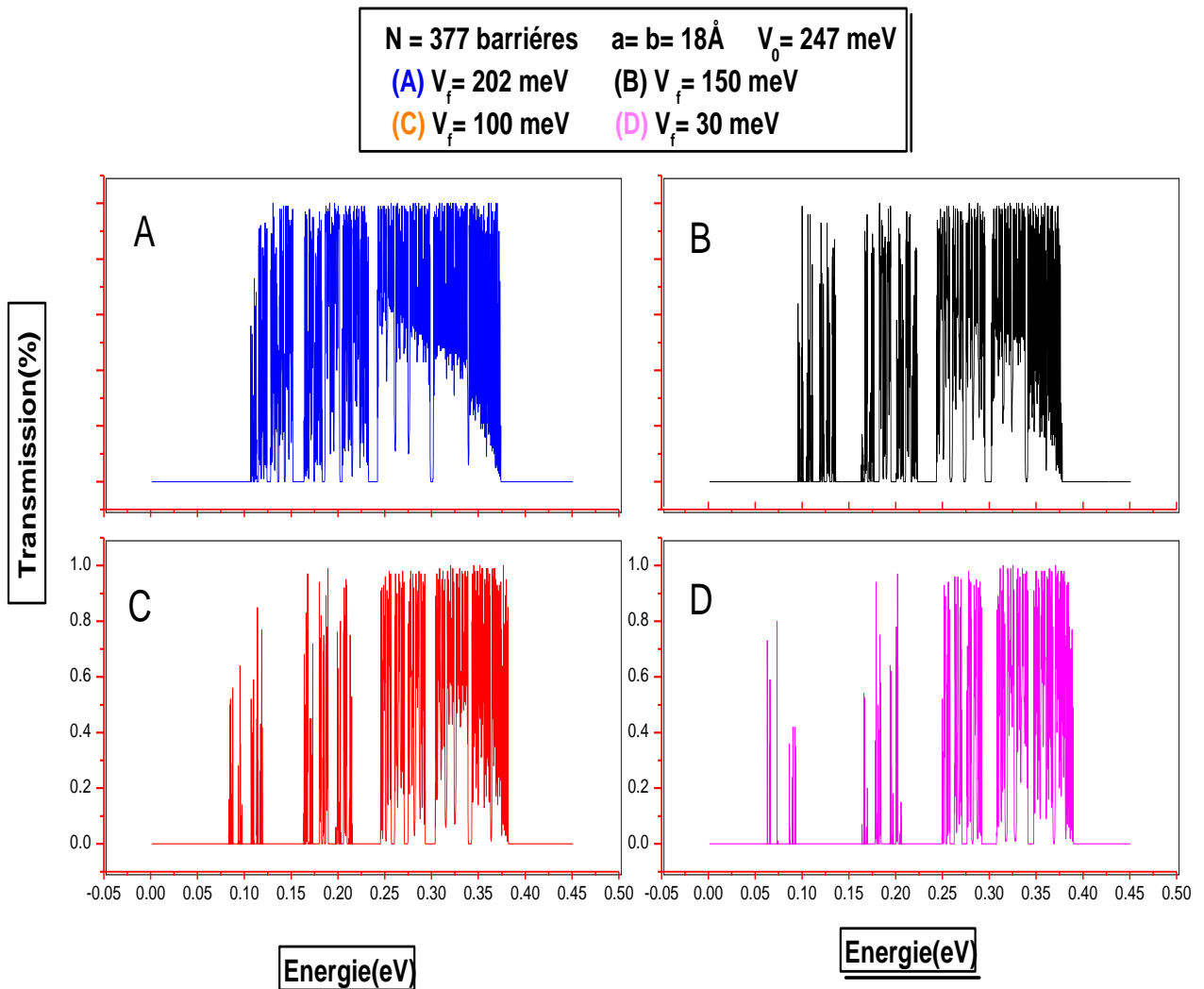


Figure .IV.19 Coefficient de transmission en fonction de l'énergie de l'électron pour une structure de Fibonacci en hauteur de barrière pour différentes valeurs de potentiel de Fibonacci.

En traçant le coefficient de transmission en fonction du nombre de barrières pour les mêmes valeurs des paramètres précédents à des valeurs des énergies de résonances pour $T=1$ (figure IV.20), on remarque que le coefficient de transmission garde son comportement oscillatoire et la fonction enveloppe a perdu son aspect cohérent dû à l'absence de la périodicité (figure IV.20.A). Dans les figures (IV.20.B-D) l'électron ne sent pas la quasipériodicité et les états sont des états étendus de Bloch car l'énergie de l'électron est supérieure au potentiel de Fibonacci d'où le système tend vers une structure ordonnée régie par le théorème de Bloch.

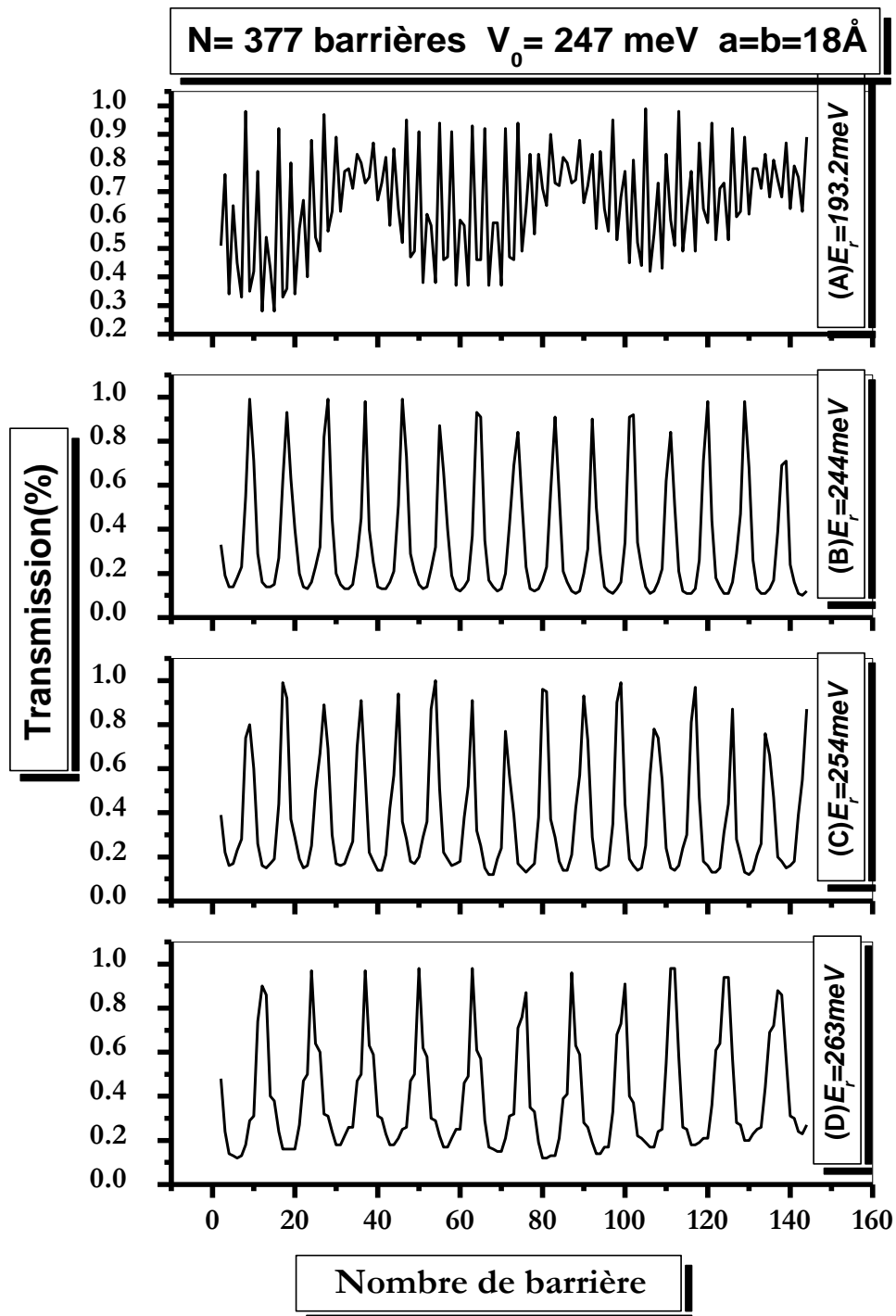


Figure. IV.20 Coefficient de transmission en fonction du nombre de barrières pour une structure quasipériodique de Fibonacci en hauteur de barrière à différentes valeurs d'énergies de résonances.

IV.4.1.4 Calcul des longueurs d’ondes émises par les structures de Fibonacci en monomère

Les longueurs d’ondes émises sont calculées à partir de l’équation suivante

$$\lambda = \frac{h.c}{\Delta E}$$

Où ΔE est la valeur du saut d’énergie entre deux subminibandes dans la bande de conduction en (joules), c vitesse de la lumière et h constante de Planck ($6,62.10^{-34}$ J.s).

Tableau IV.2 : Représentation des valeurs des longueurs d’ondes émises laser par les différents cas de structures quasipériodiques de Fibonacci monomères.

Structure quasipériodique de Fibonacci en largeur de puits			
Cas (A)	Cas (B)	Cas (C)	
$\lambda_1=95.37 \mu\text{m}$ $\lambda_2=72.93 \mu\text{m}$ $\lambda_3=103.32 \mu\text{m}$ $\lambda_4=123.98 \mu\text{m}$ $\lambda_5=65.25 \mu\text{m}$ $\lambda_6=137.76 \mu\text{m}$ $\lambda_7=137.76 \mu\text{m}$ $\lambda_8=103.32 \mu\text{m}$ $\lambda_9=59.04 \mu\text{m}$ $\lambda_{10}=112.71 \mu\text{m}$ $\lambda_{11}=154.98 \mu\text{m}$	$\lambda_1=96.47 \mu\text{m}$ $\lambda_2=71.83 \mu\text{m}$ $\lambda_3=100.32 \mu\text{m}$ $\lambda_4=121.91 \mu\text{m}$ $\lambda_5=66.35 \mu\text{m}$ $\lambda_6=135.86 \mu\text{m}$ $\lambda_7=135.86 \mu\text{m}$ $\lambda_8=103.35 \mu\text{m}$ $\lambda_9=60.15 \mu\text{m}$ $\lambda_{10}=112.71 \mu\text{m}$ $\lambda_{11}=155.90 \mu\text{m}$	$\lambda_1=413.28 \mu\text{m}$ $\lambda_2=413.28 \mu\text{m}$ $\lambda_3=137.76 \mu\text{m}$ $\lambda_4=247.97 \mu\text{m}$ $\lambda_5=177.12 \mu\text{m}$ $\lambda_6=123.98 \mu\text{m}$ $\lambda_7=247.97 \mu\text{m}$ $\lambda_8=309.96 \mu\text{m}$ $\lambda_9=177.12 \mu\text{m}$ $\lambda_{10}=177.12 \mu\text{m}$ $\lambda_{11}=413.28 \mu\text{m}$ $\lambda_{12}=137.76 \mu\text{m}$ $\lambda_{13}=177.12 \mu\text{m}$	

Structure quasipériodique de Fibonacci en épaisseur de barrière			
Cas (A)	Cas (B)	Cas (C)	
$\lambda_1=5.51 \mu\text{m}$ $\lambda_2=4.50 \mu\text{m}$ $\lambda_3=1.83 \mu\text{m}$ $\lambda_4=1.31 \mu\text{m}$	$\lambda_1=9.46 \mu\text{m}$ $\lambda_2=8.13 \mu\text{m}$ $\lambda_3=8.73 \mu\text{m}$ $\lambda_4=12.27 \mu\text{m}$ $\lambda_5=6.81 \mu\text{m}$ $\lambda_6=12.27 \mu\text{m}$ $\lambda_7=15.30 \mu\text{m}$ $\lambda_8=9.46 \mu\text{m}$ $\lambda_9=5.58 \mu\text{m}$ $\lambda_{10}=11.07 \mu\text{m}$ $\lambda_{11}=13.62 \mu\text{m}$	$\lambda_1=123.98 \mu\text{m}$ $\lambda_2=120.37 \mu\text{m}$ $\lambda_3=154.98 \mu\text{m}$ $\lambda_4=177.12 \mu\text{m}$ $\lambda_5=123.98 \mu\text{m}$ $\lambda_6=177.12 \mu\text{m}$ $\lambda_7=309.96 \mu\text{m}$ $\lambda_8=206.64 \mu\text{m}$ $\lambda_9=77.49 \mu\text{m}$ $\lambda_{10}=177.12 \mu\text{m}$ $\lambda_{11}=177.12 \mu\text{m}$	

Structure quasipériodique de Fibonacci en hauteur de barrière			
Cas (A)	Cas (B)	Cas (C)	Cas (D)
$\lambda_1=20.32 \mu\text{m}$ $\lambda_2=62.13 \mu\text{m}$ $\lambda_3=5.34 \mu\text{m}$ $\lambda_4=6.45 \mu\text{m}$ $\lambda_5=7.67 \mu\text{m}$ $\lambda_6=4.38 \mu\text{m}$ $\lambda_7=2.18 \mu\text{m}$ $\lambda_8=1.70 \mu\text{m}$	$\lambda_1=24.79 \mu\text{m}$ $\lambda_2=17.96 \mu\text{m}$ $\lambda_3=6.96 \mu\text{m}$ $\lambda_4=8.98 \mu\text{m}$ $\lambda_5=9.61 \mu\text{m}$ $\lambda_6=5.46 \mu\text{m}$ $\lambda_7=2.41 \mu\text{m}$ $\lambda_8=1.65 \mu\text{m}$	$\lambda_1=466.18 \mu\text{m}$ $\lambda_2=302.40 \mu\text{m}$ $\lambda_3=103.32 \mu\text{m}$ $\lambda_4=144.17 \mu\text{m}$ $\lambda_5=120.37 \mu\text{m}$ $\lambda_6=64.76 \mu\text{m}$ $\lambda_7=25.77 \mu\text{m}$ $\lambda_8=34.63 \mu\text{m}$ $\lambda_9=31.03 \mu\text{m}$	$\lambda_1=206.64 \mu\text{m}$ $\lambda_2=247.97 \mu\text{m}$ $\lambda_3=177.12 \mu\text{m}$ $\lambda_4=103.32 \mu\text{m}$ $\lambda_5=154.98 \mu\text{m}$ $\lambda_6=137.76 \mu\text{m}$ $\lambda_7=77.49 \mu\text{m}$ $\lambda_8=37.57 \mu\text{m}$ $\lambda_9=30.24 \mu\text{m}$

D'après le tableau IV.2, représentatif explicitant les valeurs des longueurs d'onde émises par les différents types de structures quasipériodiques étudiées précédemment, on constate que les majeures parties de ces structures constituent des lasers à longueurs d'ondes modulables émettant dans l'Infrarouge proche et lointain. Les structures quasipériodiques de Fibonacci en monomère peuvent être utilisées dans les modulateurs de lumière infrarouge, les photodétecteurs infrarouges ($4-20\mu\text{m}$) [31], appareils photo infrarouges ($8-12\mu\text{m}$) [32] et détecteurs de fluide et de molécules chimiques et biologiques ($60-200\mu\text{m}$) [33,34].

VI.4.1.5 Influence de la tension externe

Nous avons étudié l'effet de la tension appliquée sur les différentes types de structures quasipériodiques en monomère en présentant le coefficient de transmission en fonction de l'énergie de l'électron incident, pour différentes valeurs de tensions appliquées : $V_a=0.0$ Volt ; $V_a=0.05$ Volt ; $V_a=0.07$ Volt et $V_a=0.1$ Volt (figure IV.21).

La figure (IV.21.a), montre l'effet des différentes valeurs de la tension appliquée sur des structures étudiées précédemment en largeur du puits. Nous observons l'existence d'une structure de minibande s'étendant de 113,2 meV à 322,4 meV avec une légère diminution du coefficient de transmission T. L'augmentation de la valeur de la tension appliquée provoque le rétrécissement des subminibandes et la disparition des minigaps, donc l'électron ne sent pas l'effet de la quasipériodicité et la structure tend vers une structure ordonnée à longue portée.

On observe dans la figure (IV.21.b), le rétrécissement de la largeur de minigaps jusqu'à leur disparition et l'apparition des états singulièrement localisés lors de l'augmentation de la valeur de la tension appliquée; donc l'électron ne sent pas trop l'effet de la quasipériodicité.

En comparant les figures (IV.21.c) on constate une forte réduction de la valeur du coefficient de transmission, particulièrement au bord de la subminibande inférieure, où plusieurs pics de transmission disparaissent complètement. L'augmentation du champ électrique provoque le confinement des états électroniques (rétrécissement des subminibandes), leur translation vers les basses énergies jusqu'à leur disparition, cela est dû à l'effet Wannier-Stark. Ainsi, on peut conclure que l'effet du champ électrique entre l'ordre à longue portée et la localisation des états des superréseaux de Fibonacci est plus complexe que celui dans les superréseaux périodiques. Cette différence résulte de la nature différente des états dans les deux types de superréseaux. En particulier, nous déduisons que les propriétés de localisation due au champ électrique sont plus prononcées dans le cas de superréseau de Fibonacci. Ce résultat est en parfait accord avec la littérature [35-44].

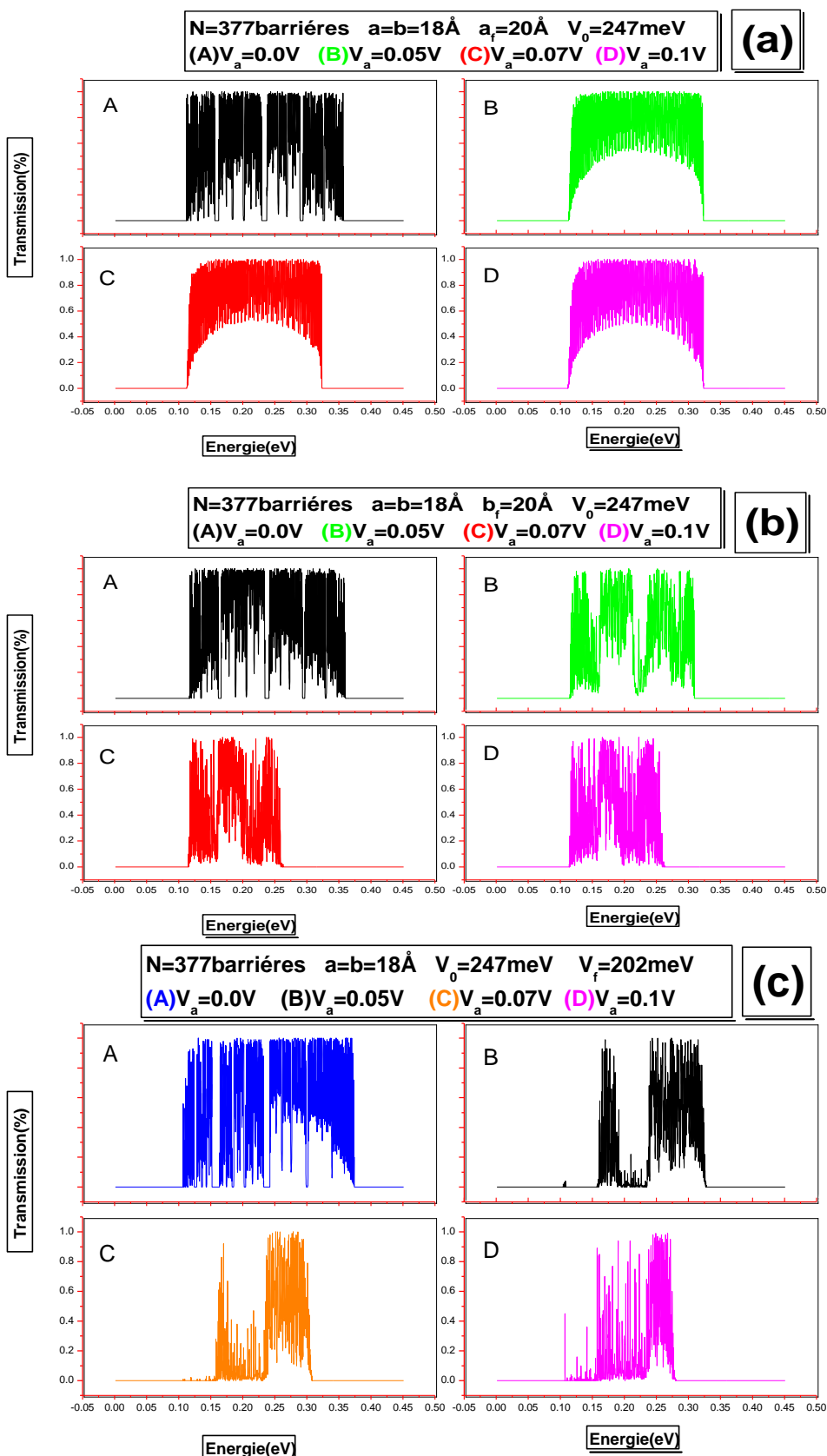


Figure. IV.21 Coefficient de transmission en fonction de l'énergie de l'électron incident pour une structure quasipériodique en (a) largeur du puits, (b) épaisseur de barrière et (c) hauteur de barrière soumise aux différentes valeurs de tensions appliquées.

IV.4.2 Cas de structure quasipériodique de Fibonacci en dimer

IV.4.2.1 En largeur du puits

Dans ce paragraphe, le coefficient de transmission est tracé pour une structure de Fibonacci en dimer, en largeur du puits. Le profil de potentiel de la quatrième séquence (*aafafaaafaf*) est représenté dans la figure suivante.

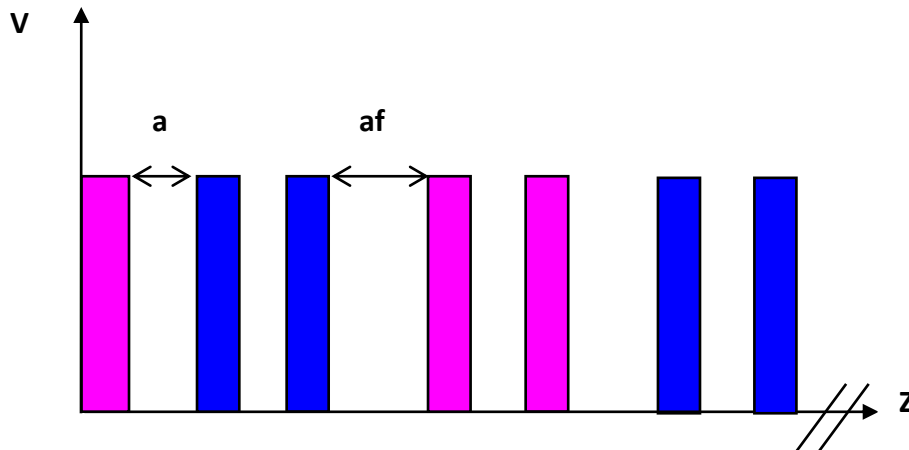


Fig.IV.22 Représentation d'une structure de Fibonacci en dimer de la quatrième séquence pour $af > a$.

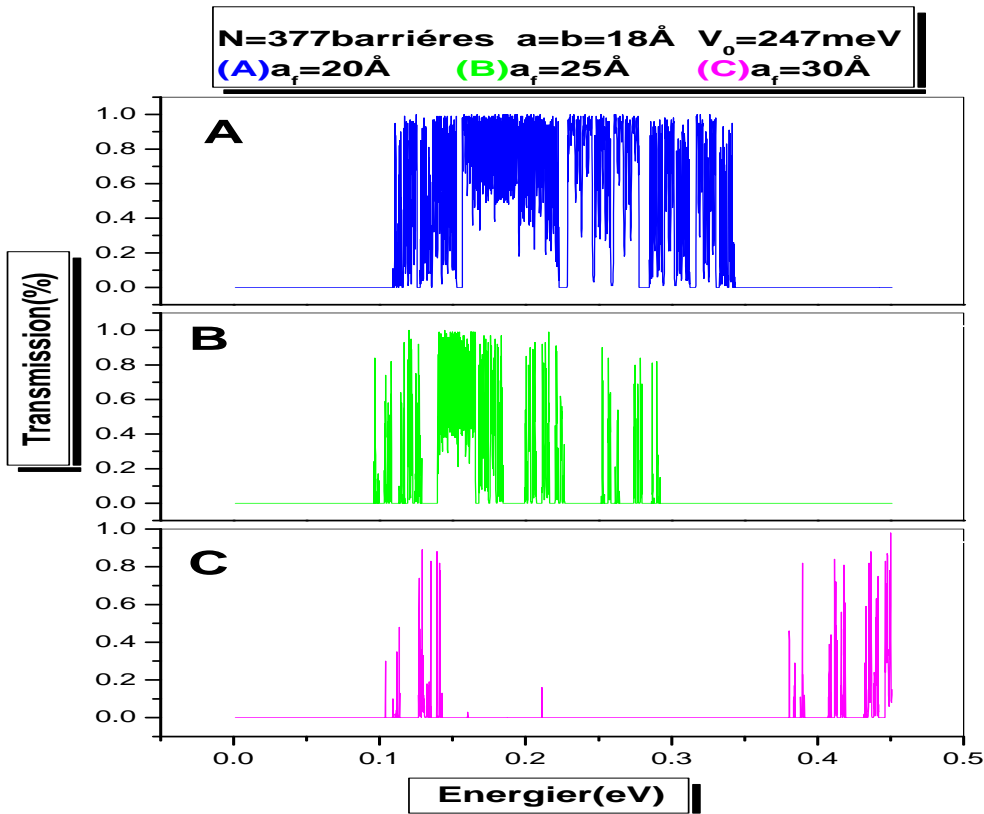


Figure. IV.23 Coefficient de transmission en fonction de l'énergie de l'électron pour une structure quasipériodique en dimer en largeur du puits.

Le coefficient de transmission dans la figure (IV.23.A), montre que la structure de la minibande principale est subdivisée en plusieurs subminibandes et minigaps. Cette subdivision est due à l'introduction du dimer dans le profil de potentiel. Des états singulièrement localisés sont constatés à l'intérieur des subminibandes, ceci est une conséquence directe des interférences destructives des ondes électroniques.

En comparant les figures (IV.23.B-C), on observe une forte réduction de la valeur du coefficient de transmission ou plus particulièrement vers le centre de la figure (IV.23.C), dont plusieurs pics de transmission disparaissent complètement. L'augmentation de la largeur de Fibonacci af provoque un fort rétrécissement des subminibandes jusqu'à leur disparition complète d'où l'apparition des états singulièrement étendus; donc nous déduisons que les propriétés de localisation sont dues au dimer induit.

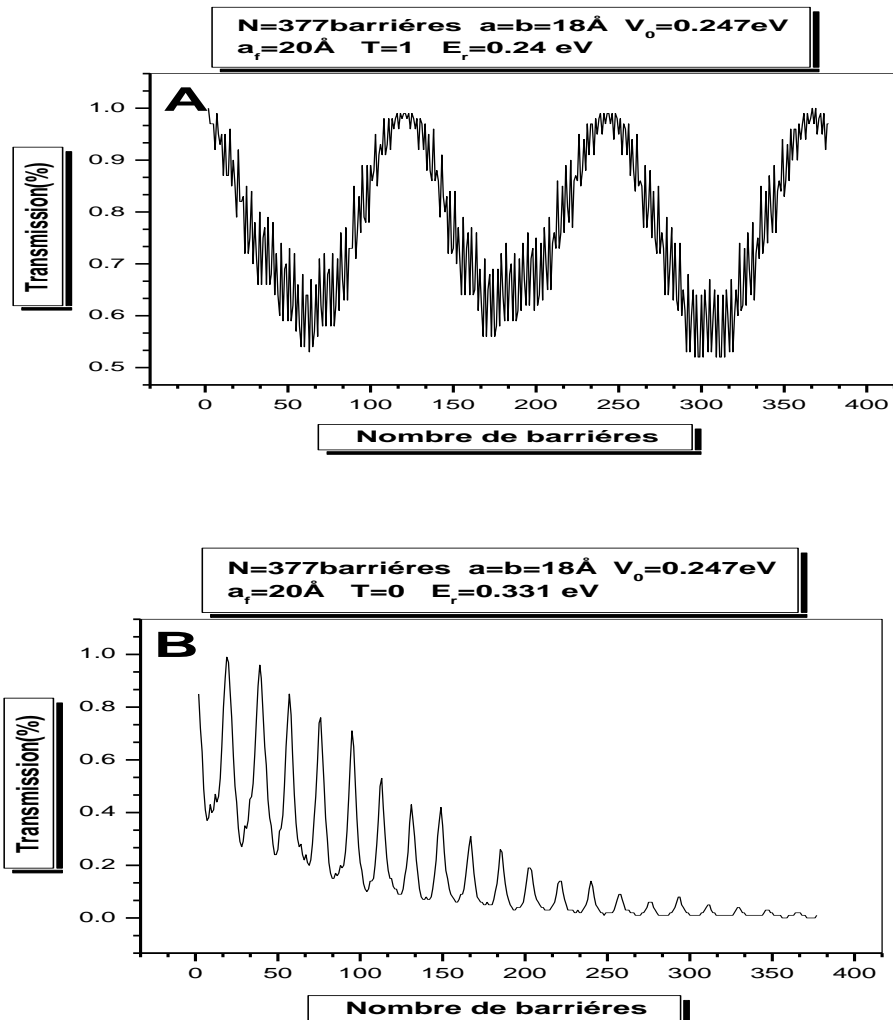


Figure. IV.24 Coefficient de transmission en fonction du nombre de barrières pour une structure quasipériodique de Fibonacci en dimer en largeur du puits à (A) $E_r=2.4\text{ eV}$ et (B) $E_r=3.315\text{ eV}$

La figure (IV.24) représente le coefficient de transmission en fonction du nombre de barrières pour les mêmes valeurs des paramètres précédents à des valeurs d'énergies correspondant à un coefficient de transmission nul ($T=0$) et à l'unité ($T=1$). On constate dans la figure (IV.24.A) que le coefficient de transmission garde son comportement oscillatoire et la fonction enveloppe a perdu son aspect cohérent due à l'absence de la notion de périodicité ; cet état représente un état étendu mais pas celui de Bloch. Dans la figure (IV.24.B) le C.T a un comportement oscillatoire avec une diminution en exponentiel de la fonction enveloppe jusqu'à son annulation.

IV.4.2.2 En épaisseur de barrière

Dans ce paragraphe, le coefficient de transmission est tracé pour une structure de Fibonacci en dimer en épaisseur de barrière. Le profil de potentiel de la quatrième séquence ($bbfbfbbfbf$) est représenté dans la figure suivante :

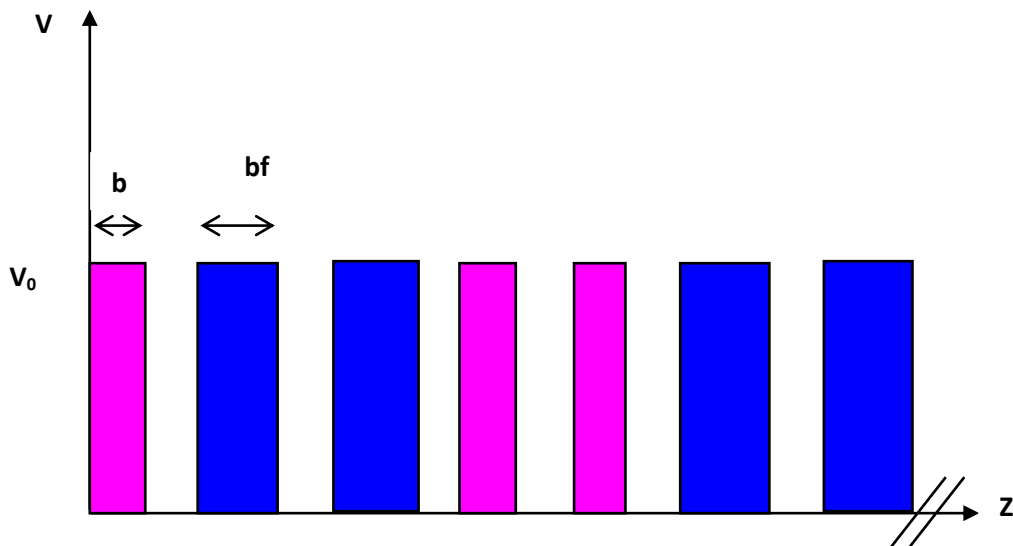


Figure. IV.25 Représentation d'une structure de Fibonacci en dimer de la quatrième séquence pour $bf > b$.

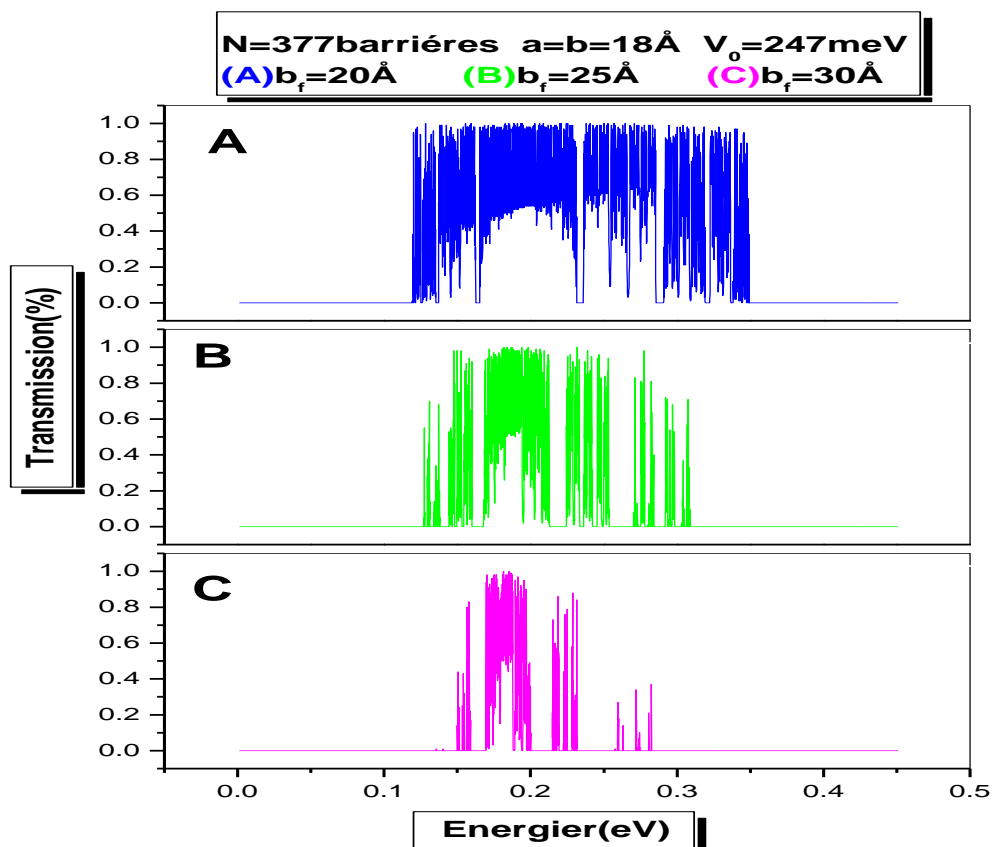


Figure. IV.26 Coefficient de transmission en fonction de l'énergie de l'électron pour une structure quasipériodique en dimer en épaisseur de barrière $b_f > b$.

Dans la figure (IV.26.A), nous remarquons l'existence de quatre régions, chaque région contient des subminibandes et minigaps ; cela est dû à l'introduction du dimer. Lorsque l'épaisseur de barrière de Fibonacci b_f augmente dans les figure (IV.26.B-C), ces régions se rétrécissent de plus en plus avec l'apparition des minigaps de largeurs plus considérables jusqu'à la disparition de la première et la dernière subminibande. Le nombre des états passant par l'effet tunnel diminue considérablement d'où l'apparition des états singulièrement étendus.

La figure (IV.27.B-A), présente le coefficient de transmission en fonction du nombre de barrières pour les mêmes valeurs des paramètres précédents à des valeurs d'énergie correspondant au coefficient de transmission nul et à l'unité. Nous remarquons les mêmes interprétations comme celles de la structure en largeur du puits de Fibonacci en dimer.

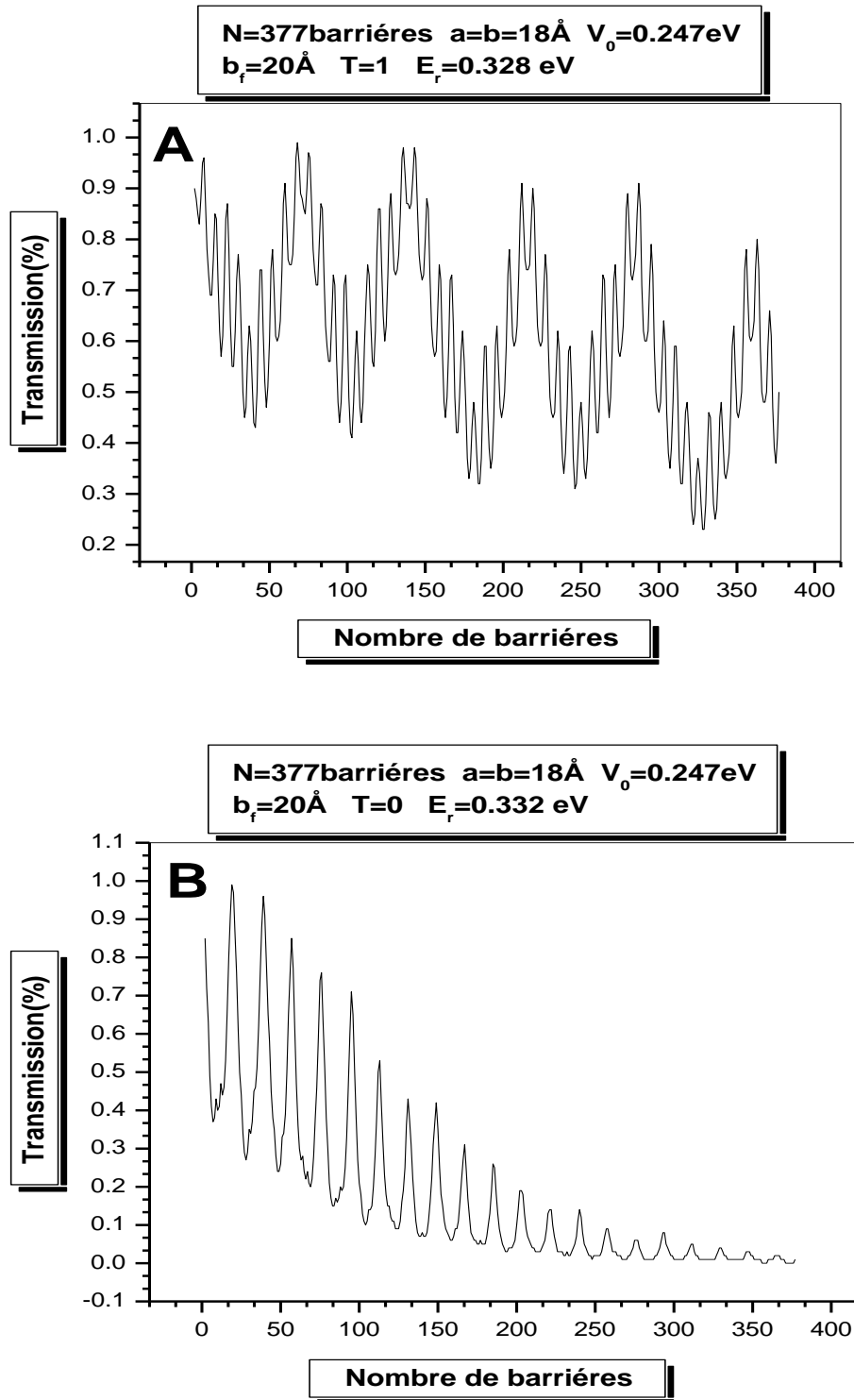


Figure. IV.27 Coefficient de transmission en fonction du nombre de barrières pour une structure quasipériodique de Fibonacci en dimer en épaisseur de barrière à (A) $E_r=3.285$ eV et (B) $E_r=3.32$ eV.

IV.4.2.3 En hauteur de barrière

Le coefficient de transmission est calculé pour une structure de Fibonacci en dimer en hauteur de barrière. Le profil de potentiel de la quatrième séquence ($VV_fV_fVV_fV_f$) est représenté dans la figure suivante :

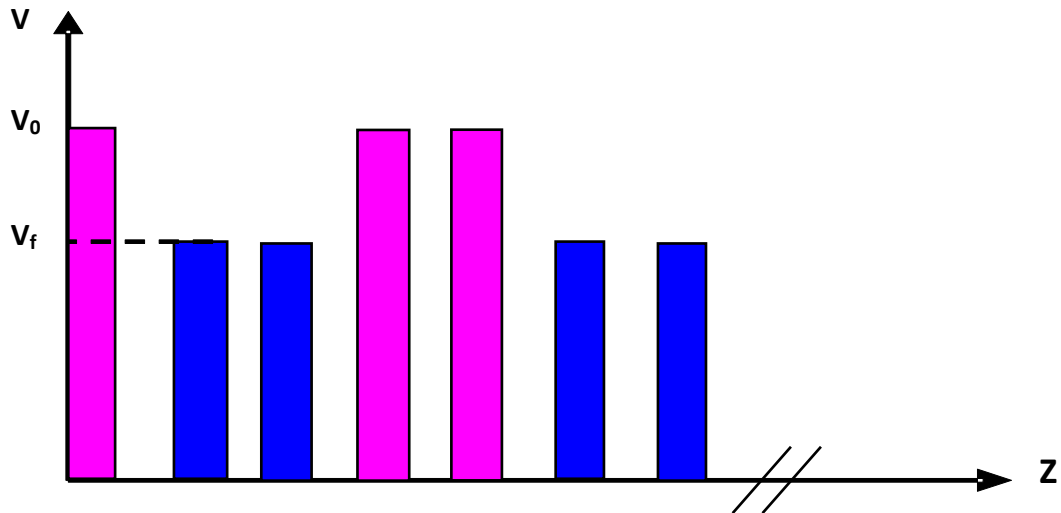


Figure. IV.28 Représentation d'une structure de Fibonacci en dimer de la quatrième séquence pour $V_f < V_0$.

La courbe représentant la transmission de l'électron en fonction de son énergie est schématisée par la figure (IV.29.A) qui présente toujours une subdivision de la structure de minibande principale en cinq subminibandes séparées par quatre minigaps, cela est dû à l'introduction du dimer. En diminuant la hauteur de la barrière de Fibonacci V_f voir figure (IV.29.B-C), on remarque l'élargissement des minigaps jusqu'à la disparition de quelques pics avec une augmentation du nombre des états singulièrement localisés à l'intérieur des subminibandes. Les quatre premières régions contiennent uniquement des états singulièrement étendus voir figure (IV.29.A-C). Dans ce cas, la dernière subminibande ne sent pas l'effet du quasipériodique en dimer et la structure tend vers une structure ordonnée à longue portée [45], ou l'électron ne peut pas faire la différence entre les hauteurs de potentiels V_0 et V_f .

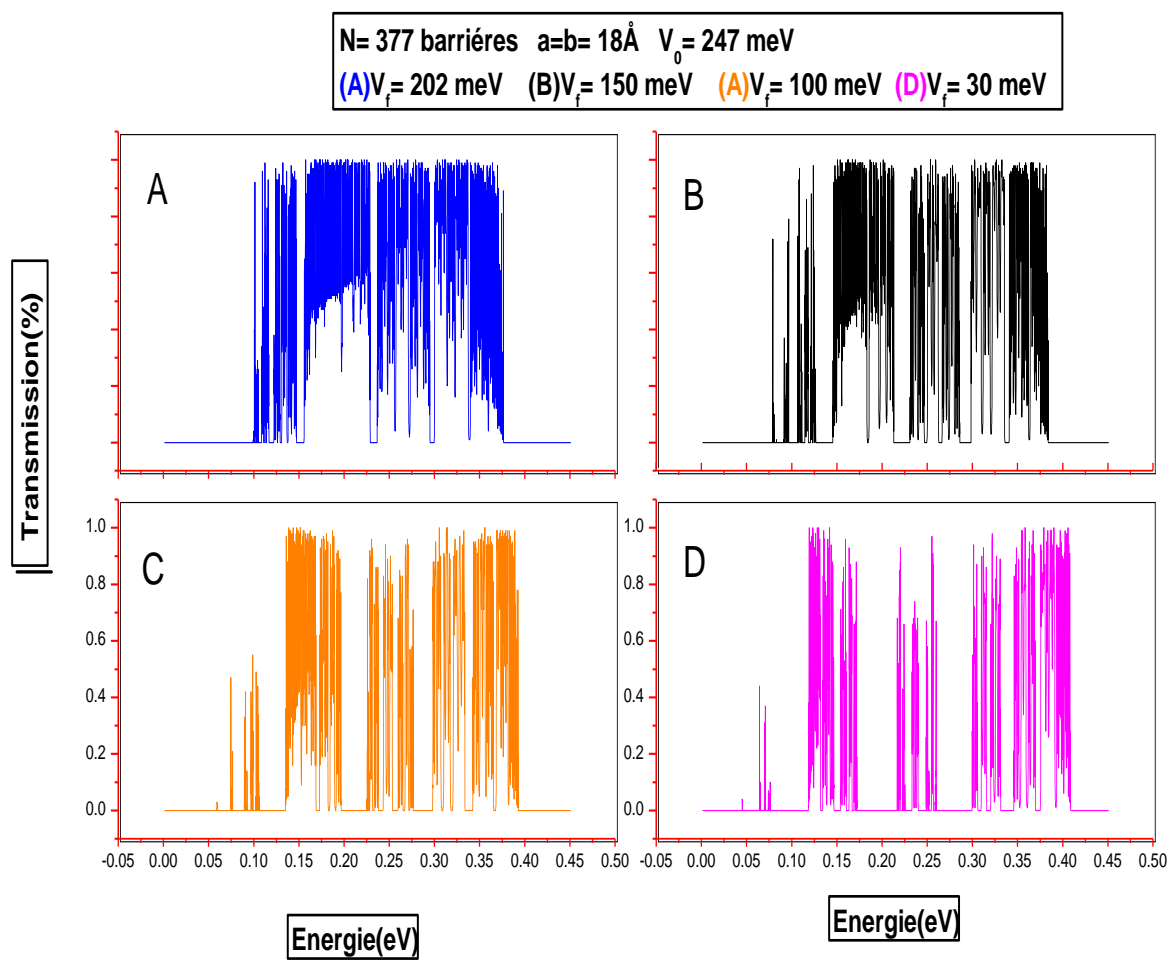


Figure. IV.29 Coefficient de transmission en fonction de l'énergie de l'électron pour une structure de Fibonacci en dimer en hauteur de barrière avec $N=377$ barrières pour différentes valeurs de potentiel de Fibonacci.

IV-4.2.4 Longueurs d'ondes lasers

D'après le tableau IV.3, des longueurs d'ondes émises pour ces structures de lasers de longueurs d'ondes comprises entre $(1.73-62\mu\text{m})$ dans le domaine infrarouge proche et moyen. Ces systèmes de Fibonacci en dimer qui peuvent être appliqués dans des domaines très variés tels que la chirurgie, la métrologie, l'enregistrement, la lecture optique de données et la découpe de matériaux [46-47] etc...

Tableau IV.3: Représentation des valeurs des longueurs d'ondes laser pour les différents cas de structures quasipériodiques de Fibonacci en dimer.

Structure quasipériodique de Fibonacci en dimer en largeur du puits			Structure quasipériodique de Fibonacci en dimer en épaisseur de barrière		
Cas (A)	Cas (B)	Cas (C)	Cas (A)	Cas (B)	Cas (C)
$\lambda_1=7.7 \mu\text{m}$	$\lambda_1=30.24\mu\text{m}$	$\lambda_1=31\mu\text{m}$	$\lambda_1=7.7 \mu\text{m}$	$\lambda_1=11.07\mu\text{m}$	$\lambda_1=13.62 \mu\text{m}$
$\lambda_2=5.12 \mu\text{m}$	$\lambda_2=24.31\mu\text{m}$	$\lambda_2=12.27\mu\text{m}$	$\lambda_2=4.92 \mu\text{m}$	$\lambda_2=15.30\mu\text{m}$	$\lambda_2=3.92 \mu\text{m}$
$\lambda_3=1.88 \mu\text{m}$	$\lambda_3=8.156 \mu\text{m}$	$\lambda_3=7.20\mu\text{m}$	$\lambda_3=1.91 \mu\text{m}$	$\lambda_3=31 \mu\text{m}$	$\lambda_3=24.80 \mu\text{m}$
$\lambda_4=2.55 \mu\text{m}$	$\lambda_4=4.90 \mu\text{m}$	$\lambda_4=12.27\mu\text{m}$	$\lambda_4=2.70 \mu\text{m}$	$\lambda_4=2.72 \mu\text{m}$	$\lambda_4=41.32 \mu\text{m}$
$\lambda_5=4.54 \mu\text{m}$	$\lambda_5=7.65 \mu\text{m}$	$\lambda_5=30.24\mu\text{m}$	$\lambda_5=4.23 \mu\text{m}$	$\lambda_5=13.62 \mu\text{m}$	$\lambda_5=30.24 \mu\text{m}$
$\lambda_6=8.80 \mu\text{m}$	$\lambda_6=15.30 \mu\text{m}$	$\lambda_6=41.32\mu\text{m}$	$\lambda_6=7.65 \mu\text{m}$	$\lambda_6=62 \mu\text{m}$	
$\lambda_7=10.16 \mu\text{m}$	$\lambda_7=20 \mu\text{m}$	$\lambda_7=20.32 \mu\text{m}$	$\lambda_7=11.16 \mu\text{m}$	$\lambda_7=31 \mu\text{m}$	
	$\lambda_8=24.80 \mu\text{m}$	$\lambda_8=41.32 \mu\text{m}$		$\lambda_8=41.32 \mu\text{m}$	
	$\lambda_9=9.46 \mu\text{m}$	$\lambda_9=23.84 \mu\text{m}$		$\lambda_9=31\mu\text{m}$	
	$\lambda_{10}=17.71\mu\text{m}$	$\lambda_{10}=20.66 \mu\text{m}$		$\lambda_{10}=20.30 \mu\text{m}$	

Structure quasipériodique de Fibonacci en dimer en hauteur de barrière			
Cas (A)	Cas (B)	Cas (C)	Cas (D)
$\lambda_1=20.66 \mu\text{m}$	$\lambda_1=20.66 \mu\text{m}$	$\lambda_1=3.71 \mu\text{m}$	$\lambda_1=3.96\mu\text{m}$
$\lambda_2=3.92 \mu\text{m}$	$\lambda_2=24.31 \mu\text{m}$	$\lambda_2=5.10 \mu\text{m}$	$\lambda_2=6.45 \mu\text{m}$
$\lambda_3=1.89 \mu\text{m}$	$\lambda_3=30.24 \mu\text{m}$	$\lambda_3=10.24 \mu\text{m}$	$\lambda_3=13.62 \mu\text{m}$
$\lambda_4=1.73 \mu\text{m}$	$\lambda_4=20.66 \mu\text{m}$	$\lambda_4=20.66 \mu\text{m}$	$\lambda_4=20.66 \mu\text{m}$
$\lambda_5=2.11 \mu\text{m}$	$\lambda_5=1.82 \mu\text{m}$	$\lambda_5=10.16 \mu\text{m}$	$\lambda_5=10.16 \mu\text{m}$
$\lambda_6=1.61 \mu\text{m}$	$\lambda_6=8.21 \mu\text{m}$	$\lambda_6=3.61\mu\text{m}$	$\lambda_6=17.46 \mu\text{m}$
	$\lambda_7=6.10 \mu\text{m}$	$\lambda_7=5.82\mu\text{m}$	$\lambda_7=20.32 \mu\text{m}$
	$\lambda_8=3.40 \mu\text{m}$	$\lambda_8=5.10 \mu\text{m}$	$\lambda_8=11.27 \mu\text{m}$
	$\lambda_9=2.72 \mu\text{m}$		$\lambda_9=5.34 \mu\text{m}$

IV.5 RÉFÉRENCES

1. Z.Aziz « *Modélisation et Simulation de l'Effet de la Variation de la Fraction Molaire sur les Propriétés Optoélectroniques des Superréseaux $Al_xGa_{1-x}As/GaAs$* » Thèse de doctorat: Université de Mostaganem (2008).
2. R.Djelti « *les superréseaux à désordre corrélé* » Thèse de doctorat: Université de Mostaganem (2009).
3. Y.Sefir « *Etude des propriétés optoélectroniques des superréseaux quasipériodiques* » Mémoire de magister: Université de Mostaganem (2010).
4. F.Bendahma « *Nature des états électroniques dans les superréseaux à désordre corrélé* » Mémoire de magister: Université de Mostaganem (2010).
5. M.Arakawa, H. Yamamoto, S. Tanaka and N. Yamada, *Electronics and Communications in Japan* (Part II: Electronics), Vol **85** (2002).
6. H.Takura and H. Yamamoto. *Electronics and Communications in Japan* (Part II: Electronics), Vol **90**, 25 (2007).
7. H.Hamaguchi, H. Yamamoto and N. Yamada. *Electronics and Communications in Japan* (Part II: Electronics), Vol **87**, 9 (2004).
8. E.Simion and I. Ciucu. *Romanian Reports in Physics*, Vol **59**, N° 3, P. 803-814 (2007).
9. S.Bentata, *Superlattices and Microstructures*, **37**: 297 (2005).
10. I.Gomez, F. Dominguez-Adame and E. Diez, *Physica. B* 324: 235 (2002).
11. Z.Aziz, S. Bentata and R. Djelti, *Eur. Phys.J. Appl. Phys.* **35**,113-116 (2006).
12. R.Djelti, S. Bentata and Z. Aziz, *Lebanese Science journal*, Vol.8, N° 01 (2007).
13. R.Djelti, S. Bentata and Z. Aziz, *AIP Conf. Proc.* 929.6 (2007).
14. R.Djelti, S. Bentata and Z. Aziz, *Fizika A* (Zagreb) **15**. 4, 219 (2006).
15. S.Terkhi, Z. Aziz, B. Bouadjemi and S. Bentata, *Superlattices and Microstructures* **56**, 16-26 (2013).
16. S. Terkhi, S. Bentata, R. Djelti and B. Bouadjemi, *Results in Physics* 2,189-202 (2012).
17. G.N. Ning, D.Yuan and W.D. Deering, *Phys.Rev B* **51** N 7, 4641 (1994).
18. S.J. Kim, Y. T .Oh, T. W. Kang and T. W. Kim, *J. App. Phys.* **77**, 2486 (1995).
19. G.Bastard, R. Ferreira and P. Voisin, *Phys. Rev. B* **50**, 4445 (1994).
20. G.Bastard, J.B. Leuse, R. Ferreira and P. Voisin, *Superlattices and Microst* **6**, 77 (1989).
21. K.H. Schmidt, N. Linder, G. H. Döhler, H. T. Grahn, K. Ploog and H. Shneider, *Phys. Rev. Lett.* **72**, 2769 (1994).
22. S. M.A. Nimour, N. Zekri and R. Ouasti, *Phys. Lett. A*, 226 (1997).
23. H. Yamamoto. *Physica Status Solid B*, Vol **141**, N°2 (2006).

24. H.Masayuki, H. Hamaguchi , H. Yamamoto and N. Yamada. *Electronics and communications in Japan* (Part II: Electronics), Vol **88**, N° 3 (2005).
25. R.Djelti, Z. Aziz, S. Bentata and A. Besbes, *Superlattices and Microstructures* **50**,659-666 (2011).
26. R.Djelti, S. Bentata, Z. Aziz and A. Besbes, *Phys. J.Appl .Ahys.* **48**,10605 (2009).
27. W.Gellermann, M. Kohmoto , B. Sutherland, and P. C. Taylor, *Physical Rev Lett*, Vol. **72**, 633,(1994).
28. D.Lusk, I. Abdulhalim and F. Placido, *Optics Communications*, Vol. 198,273,(2001).
29. F.Dominguez-Adame, E. Macia and B. Méndez, *Cond-Mat*, **55** (534) (2007).
30. Z.Aziz, S. Bentata and R. Djelti, *J. App. Sci.* **15** 3140-3144, (2006).
31. P.Boucaud and S. Sauvage, *C. R. Physique* , Vol **4**. 1133-1154 (2003).
32. S.Forget, S. Chenais, F. Druon, F. Balembois and P. Georges, *J. Phys.* IV.119.183 (2004).
33. M.A.Belkin, J.A. Fan, S. Hormoz, F. Capasso, S. P. Khanna, M. Lachab, A. G.Davies and E. H. Linfield, *Optics Express* **16** 3242-3248 (2008).
34. F.K.Tittel,Y.A. Bakhirkin, A.A. Kosterev and G. Wysocki, *Rev.Laser Eng.***34** 275-284 (2006).
35. M.Castro and F. Dominguez-Adame. *Physics Letters A* **225** (1997).
36. J.yotirmayee Nanda, P.K. Mahapatra and C.L. Roy. *Physica B: Condensed Matter*, Vol ; **383**, N°2 (2006).
37. P.Panchadhyayee, R. Biswas, Khan Arif and P.K. Mahapatra. *Phys B Condensed matter*, Vol. **20**, N° 27 (2008).
38. P.K.Mahapatra, P. Panchadhyayee,S.P. Bhattacharya and Arif Khan. *Physica B Condensed Matter*, Vol **403**, N°1 (2008).
39. Z.Aziz, S. Bentata, R. Djelti and E. Elandalousi. *Modern Phys Lett B journal* Vol **23**, N°19 (2009).
40. Z.Aziz, S. Bentata, R. Djelti and Y. Sefir, *Solid state Communication* **150**, 865-869 (2010).
41. Z.Aziz, Y. Sefir, R. Djelti and S .Bentata, *IEEE Conference Proceeding, Electronics, Communications and Photonics Conference* (SIECPC) (2011).
42. J.S. Walker and J. Gathright, *Amer. J. Phys*, **62** 408(1994).
43. S.M.A. Nimour, N. Zekri and R. Ouasti, *Phys. Lett. A* **226**. 393R (1997).
44. G.Bastard, J.B. Leuse, R. Ferreira and P. Voisin, *Superlatt Microstruct* **6**, 77 (1989).
45. Z.Aziz, Y. Sefir, R.Djelti, B. Bouadjemi and S. Bentata, *IEEE Conference Proceeding, Electronics, Communications and Photonics Conference* (SIECPC) (2013).

46. D.Bertrand and E.Dufour «*La spectroscopie infrarouge et ses applications analytiques*», Tec et Doc, Paris (2000).
47. J.Y.Bengloan «*Etude du confinement optique et des propriétés thermiques*» Thèse de doctorat: Université de Paris XIORSAY (2005).

CONCLUSION GÉNÉRALE

CONCLUSION GENERALE ET PERSPECTIVES

Les superréseaux à semiconducteurs III-V sont devenus le pilier de l'optoélectronique pour la réalisation de lasers et de photodétecteurs à base de puits quantiques.

Cette thèse présente une étude de l'effet des paramètres structuraux sur les structures de bandes dans les superréseaux quasipériodiques de Fibonacci $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$. Une synthèse a été consacrée à l'introduction de quelques généralités des superréseaux et des systèmes unidimensionnels ayant servi de base pour la compréhension de transport électronique. Après avoir présenté les méthodes numériques de calcul utilisées, nous avons abordé l'étude de la transmission électronique dans les systèmes ordonnés. Les résultats trouvés montrent que chaque puits de potentiel correspond à un état permis de transmission pour les structures en double et triple barrière rectangulaire. Pour une structure à N barrières, on obtient (N-1) pics très proches les uns des autres correspondants à (N-1) puits, ce qui donne naissance à une structure de minibande permise. Le temps de passage de l'électron par effet tunnel résonnant dans ces structures est de l'ordre du femtosecondes (10^{-15} seconde).

On a étudié aussi l'effet de la variation des paramètres structuraux sur le phénomène de transport électronique dans différentes configurations de superréseaux quasipériodiques réalisées par le biais de la série de Fibonacci.

L'apériodicité introduite en largeur de puits induit dans le spectre de la transmission une fragmentation de la minibande principale en plusieurs subminibandes séparées par des minigaps. Chaque subminibande contient des états singulièrement localisés. C'est une conséquence directe des interférences destructives des ondes électroniques sur les parois des barrières car le puits de Fibonacci joue le rôle d'un défaut détruisant la périodicité du système, en augmentant sa largeur, son effet devient de plus en plus conséquent.

Par contre, dans les structures de Fibonacci à épaisseur de barrière, la fragmentation est plus conséquente. Elle conduit à l'apparition des minigaps de largeurs importantes lors de l'introduction d'une barrière de Fibonacci plus large, le nombre des états passant par l'effet tunnel diminue considérablement d'où l'apparition des états singulièrement étendus.

La variation de la hauteur de barrière de Fibonacci sur les systèmes quasipériodiques mène à l'augmentation des états singulièrement localisés, ce qui conduit à une naissance des états singulièrement localisés et étendus.

D'autre part, ces phénomènes deviennent plus considérables pour les structures quasipériodiques en dimer. L'augmentation de largeur de puits fait rétrécir la structure de la minibande vers le centre jusqu'à sa disparition complète du fait que la largeur de puits de Fibonacci a_f est supérieure à la longueur d'onde λ de l'électron. Dans cette situation les puits sont découplés et les états deviennent liés. Le puits se présente à la particule comme une marche de potentiel infinie.

Par contre, l'augmentation de l'épaisseur de la barrière de Fibonacci b_f influe sur la transmission électronique dans les superréseaux quasipériodiques en provoquant une translation des pics de résonance vers les basses énergies à cause de l'effet de confinement des états électroniques à l'intérieur du puits du dimer.

En conséquence, l'effet de la hauteur de la barrière sur la transmission a été étudié pour $V_f < V_0$, tous les pics de résonance relatifs au dimer se transforment en minibande, du fait que l'électron ne peut pas faire la différence entre les hauteurs de potentiel V_0 et V_f . Il franchit les barrières comme si c'était un système ordonné.

Nous avons étudié l'effet de l'application d'un champ électrique sur ces structures qui provoquent le rétrécissement des subminibandes et la translation des états vers les basses énergies. Ceci est dû à l'effet Stark qui représente le confinement des états électroniques.

Enfin, on a calculé toutes les longueurs d'ondes laser pouvant être émises par les structures étudiées dans ce travail. La gamme des longueurs d'onde obtenue pour les structures GaAs/Al_xGa_{1-x}As permet d'envisager des dispositifs très prometteurs dans la conception des lasers à longueur d'onde contrôlable dans le domaine de l'infrarouge.

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

TRAVAUX LIES A CETTE THESE

TRAVAUX LIES A CETTE THESE

1-PUBLICATIONS

1. **Yamina sefir**, Zoubir Aziz, Redouan Djelti, Bouabdellah Bouadjemi, Samir Bentata “Achievement of tailored laser frequencies by fine-tuning structural parameters of Fibonacci’s in $Al_xGa_{1-x}As/GaAs$ superlattices ”Superlattices and Microstructures” S0749-6036(13) 00244-9(2013).
2. Zoubir Aziz, **Yamina Sefir**, Redouan Djelti, Bouabdellah Bouadjemi and Samir Bentata, “*Periodic Oscillations in Dimer Quasiperiodic Fibonacci $Al_xGa_{1-x}As/GaAs$ Superlattices*” IEEE Conference Proceeding, Electronics, International Saudi Communications and Photonics Conference (SIECPC), (2013).
3. Z. Aziz, **Sefir.Y**, R. Djelti and S. Bentata, “ *Modelisation and simulation of the transmission properties in Dimer Fibonacci Superlattices*”, IEEE Conference Proceeding, Electronics, Communications and Photonics Conference (SIECPC), Saudi International(2011)
4. Aziz.Z, Bentata.S, Djelti.R and **Sefir.Y** “*Suppression of the singularly localized states in dimer quasiperiodic Fibonacci superlattices* ». Solid state Communication150, 865-869 (2010).

2-COMMUNICATIONS

1. **Y.Sefir**, Z .Aziz, F.Bendahama, S.Terkhi, Z.F .Meghoufel, S.Chetid, 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.
2. **Sefir.Y**, Aziz.Z, Bouadjimi.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, 7 Juin 2012 à Université Abdelhamid Ibn Badis de Mostaganem.
3. **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.
4. S.Chetid, S.Bentata, Z.F .Meghoufel, A.Zitouni, S.Terkhi, **Y.Sefir**, B. Bouadjemi « *Etude de transmission balistique dans les cristaux photoniques* » Deuxième journée Scientifique des doctorants -19 Mai 2013 à Université Abdelhamid Ibn Badis de Mostaganem.
5. F.Bendahama,Z.F .Meghoufel,**Y.Sefir**,S.Terkhi,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.
6. Aziz.Z, **Sefir.Y**, Djelti.R, Bouadjemi.B and Bentata.S,” *Periodic Oscillations in Dimer Quasiperiodic Fibonacci $Al_xGa_{1-x}As/GaAs$ Superlattices*” Electronics,

- Communications and Photonics Conference (SIECPC), (2013) Saudi International Riyadh -April 27th-30th, 2013
7. Z.Aziz, **Y.Sefir**, R.Djelti and S.Bentata ,”*Singularly Extended States In Dimer Quasiperiodic $Al_xGa_{1-x}As/GaAs$ Superlattices*”, International Conference on Advanced Materials for Photonics, Sensing and Energy Conversion Applications El Jadida - Morocco from the 5-7th December 2012.
 8. Z.Aziz , **Y.Sefir** , R.Djelti and S.Bentata “ *Effect of the Applied Bias on Miniband Structures in Dimer Fibonacci $GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs$ Superlattices*” International Conference on Microelectronics, Nanoelectronics and Photonics Paris- France from the 28-29th November 2012.
 9. Bendahama.F, Bentata.S, **Sefir.Y**, Terkhi.S et Meghoufel.Z.F ”*Influence des Paramètres Structuraux sur les propriétés optoélectroniques des superréseaux désordonné*” Première journée Scientifique des doctorants (JSDOCFST2012)14 Mai 2012 à Université Abdelhamid Ibn Badis de Mostaganem.
 10. Terkhi.S, Bentata.S, Meghoufel.Z.F, Bouadjimi.B, Bendahama.F et **Sefir.Y**,” *L’Effet de la fraction molaire $\langle X \rangle$ sur les propriétés de transport électronique des superréseaux générés par des séquences spécifiques* ”Première journée Scientifique des doctorants (JSDOCFST-2012)-14 Mai 2012 à Université Abdelhamid Ibn Badis de Mostaganem.
 11. 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 à Université Abdelhamid Ibn Badis de Mostaganem.
 12. S.Terkhi, S.Bentata , Z.F. Meghoufel, B.Bouadjemi, Z. Aziz et **Y.Sefir**. "*Effet de la fraction molaire "x" sur les propriétés de transport électrique des superréseaux quasipériodiques $InAs/In_xGa_{1-x}As$* ".10^{ème} Congrès National de la Physique et de ses Applications 20-22 Novembre 2012 à Université Abdelhamid Ibn Badis de Mostaganem.
 13. F.Meghoufel, S.Bentata, S.Terkhi, B.Bouadjemi, F.Bendahma et **Y.Sefir**."*Effet de la nonlinéarité sur la transmission électronique d'un superréseau $GaAs/AlGa_{1-x}As$* ".10^{ème} Congrès National de la Physique et de ses Applications 20-22 Novembre 2012 à Université Abdelhamid Ibn Badis de Mostaganem.
 14. Aziz.Z, Bentata.S, Djelti.R and **Sefir.Y**,” *Modelisation and simulation of the transmission properties in Dimer Fibonacci Superlattices*” Electronics, Communications and Photonics Conference (SIECPC), (2011) Saudi International Riyadh -April 24th-26th, 2011

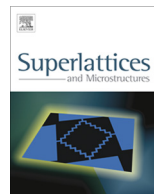
15. Aziz.Z, Bentata.S, Djelti.R and Sefir.Y,” *Structure of miniband in dimer Fibonacci GaAs-A_xG_{a1-x}As superlattices*”. Fourth Saudi Science Conference (FSSC), Madinah Saudi Arabia, **March 21-24**, 2010.



ELSEVIER

Contents lists available at ScienceDirect

Superlattices and Microstructures

journal homepage: www.elsevier.com/locate/superlattices

Achievement of tailored laser frequencies by fine-tuning the structural parameters of Fibonacci's in $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ superlattices



Yamina Sefir, Zoubir Aziz*, Redouan Djelti, Bouabdellah Bouadjemi, Samir Bentata

Laboratoire de Technologie et des Propriétés du solide, Université Abdelhamid Ibn Badis, BP 227, 27000 Mostaganem, Algeria

ARTICLE INFO

Article history:

Received 8 May 2013

Received in revised form 23 July 2013

Accepted 31 July 2013

Available online 11 August 2013

Keywords:

Transmission coefficient

Singularly extended states

Structural parameters

Laser with modulated wavelength

ABSTRACT

We investigate the tunneling conduction in $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ Fibonacci superlattices. Using the transfer matrix formalism, the effective mass and envelope function approximations, we calculate the transmission coefficient of quasiperiodic multibarrier system. We examine numerically the effect of the Fibonacci's structural parameters on the electronic energy spectra of Fibonacci Superlattices (FSL). Ours results show that increasing the width of Fibonacci's wells a_f allows to the confinement of subminibands with a widening of minigaps, this causes a consistent and coherent fragmentation. The barrier thickness of Fibonacci b_f acts on the width of subminibands by controlling the interaction force between neighboring eigenstates. Its increase gives rise to singularly extended states. The barrier height Fibonacci V_f permit to control the degree of structural disorder in these structures. The variation of these parameters permits the design of laser with modulated wavelength.

© 2013 Elsevier Ltd. All rights reserved.

1. Introduction

Due to technological applications in resonant tunneling devices, semiconductor heterostructures have been the subjects of many theoretical and experimental investigations [1–5]. In particular, layers of GaAs and $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ semiconductors are alternated to generate the artificial materials, which in turn display discontinuity of the valence and conduction bands to form potential barriers ($\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$)

* Corresponding author. Fax: +213 45 33 13 69.

E-mail address: aziz_zdz@yahoo.fr (Z. Aziz).

and wells (GaAs) for both electrons and holes. Though, most of the work done on superlattices has been devoted to periodic arrays; in recent years Fibonacci systems have attracted the attention of many investigations after the first experimental realization of these quasi-periodic materials [6–7]. The Fibonacci superlattice (FSL), which is made by juxtaposing two different building blocks A and B arranged in a Fibonacci sequence, has become a standard model for the study of these systems since Merlin et al. [8] reported its realization and characterization considering layers of AlAs and GaAs grown by molecular-beam epitaxy. This type of structure has been classified in the literature as quasi-periodic systems, intermediate between the periodic and disordered structures. Besides, the FSL can be considered as a one dimensional example of a quasi-crystal. Since the pioneer works of Kohmoto and Sutherland, the electronic localization in one-dimensional Fibonacci quasi-crystal have been intensively studied [9]. Xiangbo et al. [10] have investigated the transmission properties of light through the Fibonacci-class quasiperiodic multilayer and found some interesting results. The trace map of propagation matrices is deduced and the invariant of motion is found. They obtained the expression of the coefficient T analytically for general incidences and normal one. Arnava et al. [11] have examined the conventional idea of determining the nature of the electronic eigenfunction of a Fibonacci lattice from a study of the associated with the trace map.

In this paper we have treated the effect of the Fibonacci's structural parameters on the transmission properties of FSL for 377 barriers.

2. Model

We calculate in this section the transmission coefficient of GaAs/Al_xGa_{1-x}As FSL in the stationary case. For definiteness, we consider quantum well-based SL constituted by two semiconductor materials GaAs and Al_xGa_{1-x}As. The physical picture may be handled through the investigation of states close to the bottom of the conduction miniband with $k_{\perp} = 0$. As usual, the non-parabolicity effects can be neglected without loss of generality [12,13].

The one-dimensional time-independent Schrödinger wave equation for an electron in a semiconductor heterostructure, with $V(z)$ potential, under the envelope function/effective mass approximations is given as [14]:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dz} \frac{1}{m^*(z)} \frac{d}{dz} + V_{SL}(z) \right] \psi(z) = E\psi(z) \quad (1)$$

Here the SL potential V_{SL} derives directly from the different energies of the conduction band-edge of the two semiconductor materials (GaAs and Al_xGa_{1-x}As) at the interfaces.

The structure of FSL is starting from two basic building blocks A and B. Here A and B consists of the barrier height of the potential or the barrier thickness or the width of the well. A usual method to construct the Fibonacci sequence is to use an inflation process according to the rule $B \rightarrow A$ and $A \rightarrow AB$. This sequence comprises S_{n-1} elements A and S_{n-2} elements B. The initial sequences is $S_0 = A = \{V_0; a; b\}$ and $S_1 = B = \{V_f; a_f; b_f\}$

In this model of superlattices, we consider that:

- (a) The height of the barriers takes only two values, namely V_0 for the basic block A and V_f for B;
- (b) The thickness of the barriers takes two values, namely b for the basic block A and b_f for B;
- (c) The width of the wells takes two values, namely a for the basic block A and a_f for B.

The potential profile for the fifth sequence for example is represented in Fig. 1.

We include in the following treatment, the electron effective masses according to the different regions of the potential: m_{b1} and m_{bf} corresponding to the barrier heights V_0 and V_f , respectively, and m_a to the well. The transmission coefficient and all the related physical quantities of interest at zero temperature can be conveniently computed within the framework of the transfer matrix formalism.

Using the Bastard conditions of continuity [15], for an incident electron coming from the left one has the relation between the reflected and transmitted amplitude, r and t , respectively:

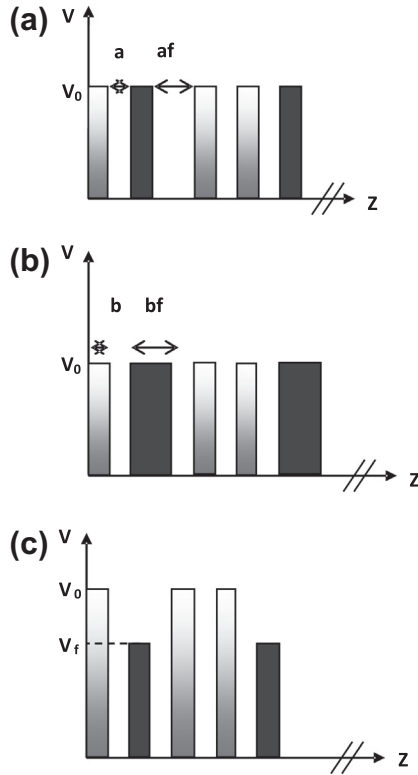


Fig. 1. Potential profile for the fifth sequence; (a) Fibonacci width well superlattice (FWBSL), (b) Fibonacci thickness barrier superlattice (FTBSL) and (c) Fibonacci height barrier superlattice (FHBSL).

$$\begin{pmatrix} 1 \\ r \end{pmatrix} = M(0, L) \begin{pmatrix} t \\ 0 \end{pmatrix} \tag{2}$$

The transmission coefficient is defined:

$$\text{With } \tau = \frac{1}{M_{11}} \tag{3}$$

and

$$M_{11} = \frac{1}{2} \left[\left(A + \frac{k_2}{k_1} D \right) + i \left(\frac{k_2}{m_w} B - \frac{m_w}{k_1} C \right) \right] \tag{4}$$

The transmission coefficient is then given by:

$$T = \frac{4(k_2/k_1)}{\left(A + \frac{k_2}{k_1} D \right)^2 + \left(\frac{k_2}{m_w} B - \frac{m_w}{k_1} C \right)^2} \tag{5}$$

Detailed demonstration is given in our previous article [16].

3. Results and discussion

Several parameters can be varied, namely: the height of the potential barriers V_0 and V_f , the width of the quantum wells a and a_f , the thickness of the potential barriers b and b_f . For a proper understand-

ing, we have treated the over quoted GaAs/Al_xGa_{1-x}As as the semiconductor SL. In particular, the SL potential V_{SL} may be expressed in terms of the aluminum concentration “ x ” in Al_xGa_{1-x}As, using the rule 60% for the conduction-band offset [17]:

$$V_{SL} = 0.6 (1.247 x) \quad \text{for } 0 \leq x \leq 0.45 \tag{6}$$

This interval of x delimits the region where Al_xGa_{1-x}As presents a direct gap in the direction Γ . As well as the effective mass in this region:

$$m(x) = (0.067 + 0.083 x) \cdot m_0 \tag{7}$$

m_0 being the free electron mass.

We have chosen the physical parameter values, such as $a = 18 \text{ \AA}$, $b = 18 \text{ \AA}$, $V_0 = 247 \text{ meV}$ to obtain allowed minibands lying below the barriers. The corresponding effective masses are taken to be $m_a = 0.067 m_0$, $m_{b0} = 0.096 m_0$ and $m_{bf} = 0.089 m_0$ for respectively the quantum well and the two barrier heights V_0 and V_f [17].

For the above parameters, transmission coefficient versus electron incident energy $T(E)$ is plotted.

3.1. Ordered structures

Before discussing the transport properties of Fibonacci superlattices, it is essential to understand the behavior of ordered structures. Fig. 2 shows the position of the lower and upper band edges of the minibands corresponding to the two ordered SL with the barrier height V . We can observe the existence of one miniband under the well, ranging from 129 to 332 meV, we can explain the process of the miniband structure formation inside the well by the existence of $(N-1)$ states allowed in $(N-1)$ well ranging between the barriers.

3.2. Quasiperiodic structures

We study the effect of structural parameters on subminiband of FSL:

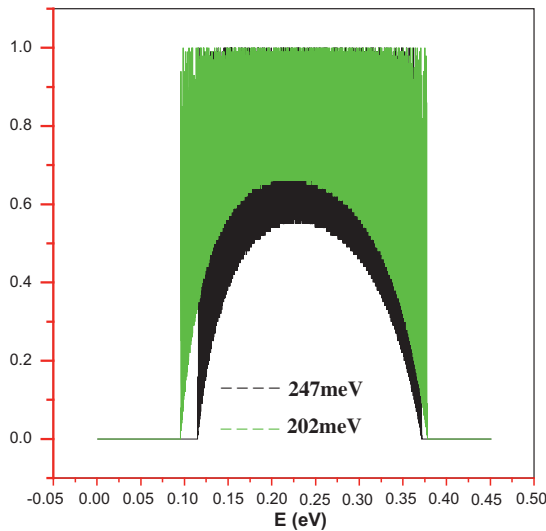


Fig. 2. Transmission coefficient versus the incident electron energy E of the ordered structure with $N = 377$ barriers, $V_0 = 247 \text{ meV}$, $V_1 = 202 \text{ meV}$ and $a = b = 18 \text{ \AA}$.

3.2.1. Effect of Fibonacci's height of barrier

Fig. 3 presents the transmission coefficient according to the electron energy of the FHBSL structure with potential $V_0 = 247$ meV for different potential values of Fibonacci: (a) $V_f = 202$ meV; (b) $V_f = 150$ meV, (c) $V_f = 100$ meV and (d) $V_f = 30$ meV. In Fig. 3a, we note the existence of three regions of different width and each region contains subminibands and minigap. These regions differ more when the barrier height decreases i.e. appearance of minigap with larger widths until the disappearance of the first subminiband. For $V_f = 100$ meV, the first two regions contain only singular extended states, most subminiband resists the effect of quasiperiodicity because its electrons have energies greater than the default (V_f). Its effects are due to the decrease in Fibonacci potential height relative to the potential host V_0 ; here the electron feels the degree of disorder.

3.2.2. Effect of the Fibonacci's thickness of barrier

The transmission coefficient is plotted versus the incident electron energy of the FTBSL structure with a height barrier $V_0 = 0.247$ eV, thickness $b = 18$ Å for different Fibonacci's values thickness of barrier (A) $bf = 20$ Å, (B) $bf = 25$ Å, (C) $bf = 30$ Å and separated by wells of width $a = 18$ Å for $N = 377$ barriers. Fig. 4A shows a spectrum strongly fragmented into three sub-minibands separate by two subminigaps, this fragmentation is due to the introduction of quasiperiodicity. The singularly localized states are found inside subminibands, this is a direct consequence of destructive interference of

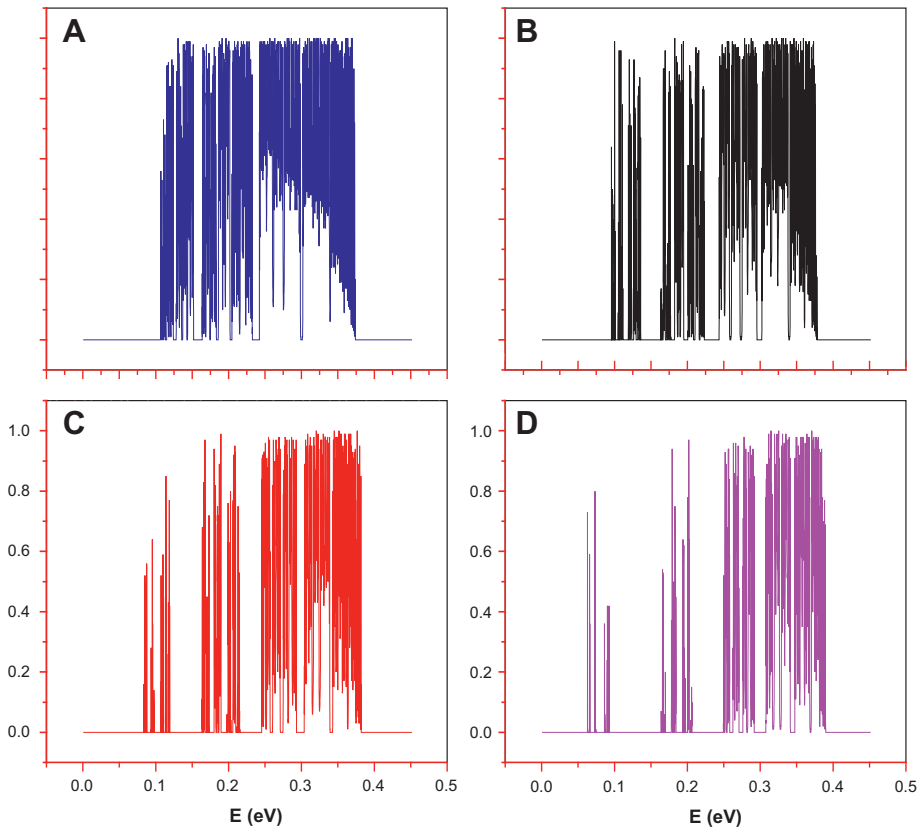


Fig. 3. Transmission coefficient versus the incident electron energy E of the FHBSL structure potential values of Fibonacci: (A) $V_f = 202$ meV; (B) $V_f = 150$ meV; (C) $V_f = 100$ meV; (D) $V_f = 150$ meV with $N = 377$ barriers, $V_0 = 247$ meV and $a = b = 18$ Å.

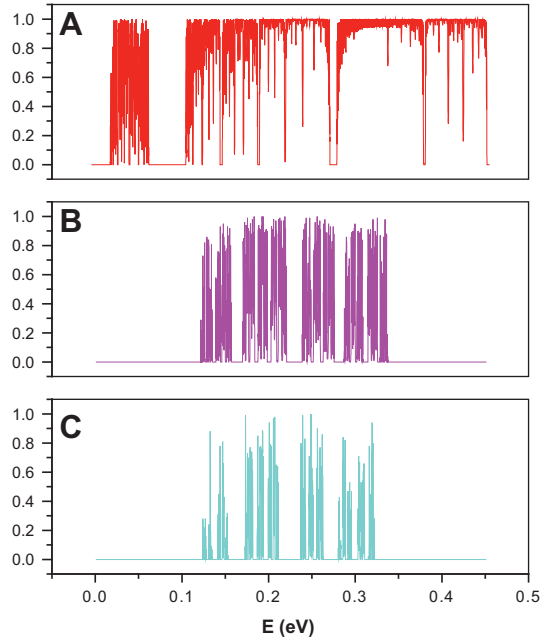


Fig. 4. Transmission coefficient versus the incident electron energy E of the FTBSL structure thickness barrier values of Fibonacci: (A) $b_f = 20$ Å; (B) $b_f = 25$ Å; (C) $b_f = 30$ Å with $N = 377$ barriers, $V_0 = 247$ meV and $a = b = 18$ Å.

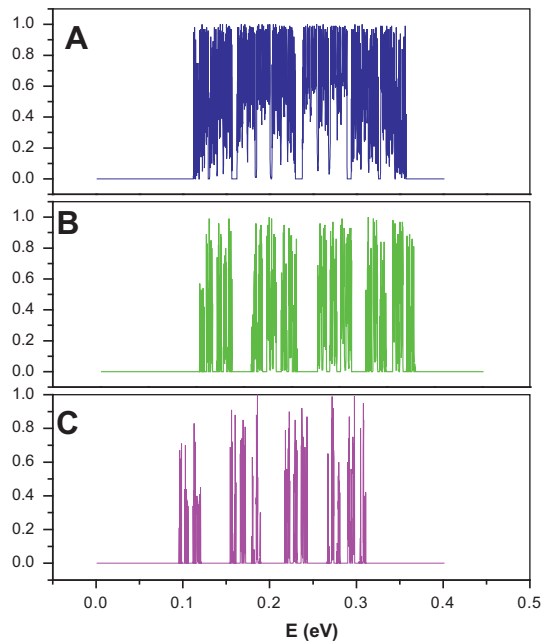


Fig. 5. Transmission coefficient versus the incident electron energy E of the FWWSL structure width well values of Fibonacci: (A) $a_f = 20$ Å; (B) $a_f = 25$ Å; (C) $a_f = 30$ Å with $N = 377$ barriers, $V_0 = 247$ meV and $a = b = 18$ Å.

Table 1
Values of the wavelengths of laser emitted by the different quasiperiodic structures.

Quasiperiodic structures									
FTBSL			FWWSL			FHBSL			
Cas (A) (μm)	Cas (B) (μm)	Cas (C) (μm)	Cas (A) (μm)	Cas (B) (μm)	Cas (C) (μm)	Cas (A) (μm)	Cas (B) (μm)	Cas (C) (μm)	Cas (D) (μm)
$\lambda_1 = 5.51$	$\lambda_1 = 9.46$	$\lambda_1 = 123.98$	$\lambda_1 = 95.37$	$\lambda_1 = 413.28$	$\lambda_1 = 413.28$	$\lambda_1 = 20.32$	$\lambda_1 = 24.79$	$\lambda_1 = 466.18$	$\lambda_1 = 203.64$
$\lambda_2 = 4.50$	$\lambda_2 = 8.13$	$\lambda_2 = 120.37$	$\lambda_2 = 72.93$	$\lambda_2 = 413.28$	$\lambda_2 = 413.28$	$\lambda_2 = 62.13$	$\lambda_2 = 17.96$	$\lambda_2 = 302.40$	$\lambda_2 = 247.97$
$\lambda_3 = 1.83$	$\lambda_3 = 8.73$	$\lambda_3 = 154.98$	$\lambda_3 = 103.32$	$\lambda_3 = 137.76$	$\lambda_3 = 137.76$	$\lambda_3 = 5.34$	$\lambda_3 = 6.96$	$\lambda_3 = 103.32$	$\lambda_3 = 177.12$
$\lambda_4 = 1.31$	$\lambda_4 = 12.27$	$\lambda_4 = 177.12$	$\lambda_4 = 123.98$	$\lambda_4 = 247.97$	$\lambda_4 = 247.97$	$\lambda_4 = 6.45$	$\lambda_4 = 8.98$	$\lambda_4 = 144.17$	$\lambda_4 = 103.32$
	$\lambda_5 = 6.81$	$\lambda_5 = 123.98$	$\lambda_5 = 65.25$	$\lambda_5 = 177.12$	$\lambda_5 = 177.12$	$\lambda_5 = 7.67$	$\lambda_5 = 9.51$	$\lambda_5 = 120.37$	$\lambda_5 = 154.98$
	$\lambda_6 = 12.27$	$\lambda_6 = 177.12$	$\lambda_6 = 137.76$	$\lambda_6 = 123.98$	$\lambda_6 = 123.98$	$\lambda_6 = 4.38$	$\lambda_6 = 5.46$	$\lambda_6 = 64.76$	$\lambda_6 = 137.76$
	$\lambda_7 = 15.30$	$\lambda_7 = 309.96$	$\lambda_7 = 137.76$	$\lambda_7 = 247.97$	$\lambda_7 = 247.97$	$\lambda_7 = 2.18$	$\lambda_7 = 2.41$	$\lambda_7 = 25.77$	$\lambda_7 = 77.49$
	$\lambda_8 = 9.46$	$\lambda_8 = 206.64$	$\lambda_8 = 103.32$	$\lambda_8 = 309.96$	$\lambda_8 = 309.96$	$\lambda_8 = 1.70$	$\lambda_8 = 1.65$	$\lambda_8 = 34.63$	$\lambda_8 = 37.57$
	$\lambda_9 = 5.58$	$\lambda_9 = 77.49$	$\lambda_9 = 59.04$	$\lambda_9 = 177.12$	$\lambda_9 = 177.12$			$\lambda_9 = 31.03$	$\lambda_9 = 30.24$
	$\lambda_{10} = 11.07$	$\lambda_{10} = 177.12$	$\lambda_{10} = 112.71$	$\lambda_{10} = 177.12$	$\lambda_{10} = 177.12$				
	$\lambda_{11} = 13.62$	$\lambda_{11} = 177.12$	$\lambda_{11} = 154.98$	$\lambda_{11} = 413.28$	$\lambda_{11} = 413.28$				
				$\lambda_{12} = 137.76$	$\lambda_{12} = 137.76$				
				$\lambda_{13} = 177.12$	$\lambda_{13} = 177.12$				

electron waves. in Fig. 4B and C, the fragmentation is more substantial it leads to the appearance of important width minigap when we introduce a Fibonacci barrier wider than the first. The number of states through tunneling decreases considerably leading to the appearance of singularly extended states.

3.2.3. Effect of Fibonacci's width of well

Fig. 5 presents the transmission coefficient versus the incident electron energy of the FWWSL structure the potential $V_0 = 0.247$ eV and a thickness $b = 18$ Å separated by the width of wells $a = 18$ Å and Fibonacci width of well (A) $a_f = 20$ Å, (B) $a_f = 25$ Å and (C) $a_f = 30$ Å for $N = 377$ barriers. Fig. 5A shows a fragmentation of the principal miniband in several subminibands and minigaps. This fragmentation is due to the introducing of the quasiperiodicity into the profile of potential. Also, the singularly localized states are noted inside the subminibands. That is a direct consequence of the destructive interferences of the electronic waves on the walls barriers' structure, due to the introduction of the widths of well Fibonacci a_f describing the loss of the periodicity of the superlattices. Fig. 5B and C presents a more consequent fragmentation i.e. the minigaps become broader and of the more restricted subminibands, it is due to the confinement of the states inside the wells of Fibonacci a_f which becomes more important. The effect of the quasiperiodicity is felt well by the electron because the difference between the wells a and a_f is more considerable compared to Fig. 5A. The well of Fibonacci introduces play the role of a defect destroying the periodicity of the system, by increasing the width its effect becomes increasingly consequent.

3.3. Laser with modulated wavelength

The calculated values of the wavelength of the electron from the equation:

$$\lambda = \frac{h \cdot c}{\Delta E} \quad (8)$$

Or ΔE is the value of the jump in energy between two subminibands in the conduction band (in joules); C the speed of light and h is the constant planck's.

According to the representative Table 1 explaining the values of wavelengths, the different cases of quasiperiodic structures considered above are laser with wavelength modulated near and far infrared emitting. The different types of quasiperiodic structures can be used in infrared light modulators, photodetectors Infrared (4–20 μm) [18], the infrared camera (8–12 μm) [19] and the detectors of fluid and molecules and chemical organic (60–200 μm) [20].

4. Conclusion

In this paper, we have studied the behavior of the transmission coefficient for different structures of Fibonacci using of the transfer-matrix formalism. The shape of the transmission spectrum is featured by the split of the main miniband in subminibands separated by a minigap. Our results show that increasing the width of Fibonacci wells a_f allows to the confinement of subminibands with a widening of minigaps, this causes a consistent and coherent fragmentation. The barrier thickness of Fibonacci b_f acts on the width of subminibands by controlling the interaction force between neighboring eigenstates. Its increase gives rise to singularly extended states. The barrier height Fibonacci V_f permit to control the degree of structural disorder in these structures. The variation of these parameters permits the design of laser with modulated wavelength.

Acknowledgements

My sincere thanks go to Mr. *Nicolas Rivier* professor at Louis Pasteur University of Strasbourg (France) for his collaboration and his innovative ideas.

References

- [1] E. Mèndez, *Physics and Applications of Quantum Wells and Superlattices*, Plenum Publishing Co., New York, 1988. p. 159.
- [2] H. Ehremreich, D. Turnbull, *Solid State Phys.*, vol. 44, Academic Press, New York, 1991.
- [3] L.L. Chang, L. Esaki, R. Tsu, *Appl. Phys. Lett.* 24 (1974) 593.
- [4] J. Chen, J.G. Chen, C.H. Yang, R.A. Wilson, *J. Appl. Phys.* 70 (1991) 3131.
- [5] O. Vanbesien, D. Lippens, *Solid State Electron.* 32 (1989) 1533.
- [6] M.W.C. Dharma-Wardana, A.H. MacDonald, D.J. Lockwood, J.-M. Baribeau, D.C. Houghton, *Phys. Rev. Lett.* 58 (1987) 1761.
- [7] D.J. Lockwood, M.W.C. Dharma-Wardana, G.C. Aers, J.-M. Baribeau, *Appl. Phys. Lett.* 52 (1988) 2040.
- [8] R. Merlin, K. Bajema, R. Clarke, F.Y. Juang, P.K. Bhattacharaya, *Phys. Rev. Lett.* 55 (1985) 1768.
- [9] M. Kohmoto, B. Sutherland, *Phys. Rev. Lett.* 56 (1986) 2740.
- [10] Xiangbo. Yang, Youyan. Liu, Fu Xiujun, *Phys. Rev. Lett.* B 54 (1999).
- [11] Arnuva chakrabarti, S.N. Karmakar, R.K. Moitra, *Phys. Rev. Lett.* A 168 (1992).
- [12] M. Schramboeck, A.M. Andrews, T. Roch, W. Schrenk, G. Strasser, *Microelectron. Eng.* 84 (2007) 1443.
- [13] P.K. Mahapatra, P. Panchadhyayee, S.P. Bhattacharya, A. Khan, *Physica B* 403 (2008) 2780.
- [14] S. Bentata, *Superlatt. Microstruct.* 37 (2005) 294.
- [15] G. Bastard, *Phys. Rev.* B24 (1981) 5693.
- [16] Z. Aziz, S. Bentata, R. Djelti, *Euro. Phys. J. Appl. Phys.* 35 (2006) 114.
- [17] S. Adachi, *J. Appl. Phys.* 58 (1985) R1.
- [18] P. Boucaud, S. Sauvage, *C.R. Physique* 4 (2003) 1133.
- [19] S. Forget, S. Chenais, F. Druon, F. Balembois, P. Georges, *J. Phys.* IV 119 (2004) 183.
- [20] M.A. Belkin, J.A. Fan, S. Hormoz, F. Capasso, S.P. Khanna, M. Lachab, A.G. Davies, E.H. Linfield, *Opt. Exp.* 16 (5) (2008) 3242.