

الجمهورية الجزائرية الديمقراطية الشعبية  
وزارة التعليم العالي و البحث العلمي

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



Faculté des Sciences Exactes et de l'Informatique

## THÈSE

Pour l'obtention du titre de

**DOCTEUR EN SCIENCES**

**Filière: Physique**

**Option : Sciences des matériaux**

Présentée par

**MEGHOUFEL Zahira Faiza**

# ÉTUDE DES EFFETS NON LINÉAIRES SUR LES PROPRIÉTÉS DE TRANSPORT ÉLECTRONIQUES DANS LES SUPERRÉSEAUX $Al_xGa_{1-x}As$

*Soutenu publiquement le 26 Novembre 2013*

*Devant le jury composé de:*

Président	Mr. K. SENOUCI	Professeur à l'UMAB de Mostaganem
Examineurs	Mr. H. AIT KACI	Professeur à l'USTO d'Oran
	Mr. A. ZANOUN	Professeur à l'ENSET d'Oran
	Mr. A. AIBOUT	Maître de Conférences A à l'UMAB de Mostaganem
Rapporteur	Mr. S. BENTATA	Professeur à l'UMAB de Mostaganem

Année universitaire 2013-2014



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

*Étude des effets non linéaires sur les propriétés de transport électroniques dans les  
superréseaux  $Al_xGa_{1-x}As$*

**Résumé:**

Dans ce travail, nous étudions les effets de l'interaction électron-électron sur les propriétés de transport électronique d'un superréseau  $Al_xGa_{1-x}As$ . Ce phénomène induit une nonlinéarité dans la réponse du système. L'équation de Schrödinger nonlinéaire est formulée en terme de potentiel effectif. Les formalisme de la matrice de transfert et celui des ondes planes ont été appliqués pour évaluer la transmission électronique ainsi que la nature des états dans la structure quantique. Il y a apparition d'un état dégénéré à l'intérieur du puits, qui, sous l'influence d'un champ externe, se scinde en deux. Les deux états évoluent vers des énergies élevées.

**Mots clés :** Superréseau, Nonlinéarité, Matrice de transfert, État dégénéré.

---

*Study of nonlinear effects on the electronic transport properties in the  $Al_xGa_{1-x}As$   
superlattices*

**Abstract:**

In this work, we study the effects of electron-electron interaction on electronic transport properties of a  $Al_xGa_{1-x}As$  superlattice. This phenomenon induces a nonlinearity in the response system. The nonlinear Schrödinger equation is formulated in terms of the effective potential. The transfer matrix and the plane waves formalisms were applied to evaluate the electronic transmission and the type of states in the quantum structure. There is an appearance of a degeneracy state within the well, which, under an external field influence, splits into two. Both the two states evolve towards higher energies.

**Keywords:** Superlattice, Nonlinearity, Transfer-matrix, Degeneracy state.

*À mes chers parents*

# Remerciements

Je remercie Dieu le tout puissant pour ces bienfaits et pour m'avoir permis d'accomplir ce travail jusqu'au bout.

J'adresse mes sincères remerciements au *Pr. S. BENTATA*, en sa qualité d'encadreur, pour les précieux conseils qu'il m'a prodigué, et pour sa patience, qu'il reçoive ici l'expression de ma gratitude et de mon profond respect.

Monsieur le *Pr. K. SENOUCI* m'a fait le grand honneur de présider ce jury. Je lui suis particulièrement reconnaissante et je le prie d'accepter mes plus vifs remerciements.

Mes remerciements sont immenses pour Mr. *H. AIT KACI*, Professeur à l'USTO (Oran), qui a eu la bienveillance d'accepter de juger ce travail. Qu'il trouve ici l'expression de ma très grande reconnaissance.

Mr. *A. ZANOUN*, Professeur à l'ENSET (Oran), m'a également fait l'honneur de participer au jury. Qu'il reçoive ici mes plus sincères remerciements.

Je remercie également Mr. *A. AIBOUT*, Maître de Conférences A à l'Université de Mostaganem, d'avoir accepté de juger mon travail pour la seconde fois, puisqu'il a déjà fait partie du jury qui a examiné mon travail de Magister, il y a 10 ans de cela! Qu'il trouve ici la preuve de ma reconnaissance.

Je n'oublie pas de remercier les membres de ma famille, surtout ma sœur *NAIMA*, pour leur aide, leur soutien permanent, et leur amour.

Mes remerciements vont également à Mr *K. MANSERI*, le Chef du département de Physique, à Mme. *S. TERKHI*, ainsi qu'à mon amie de toujours Mme. *H. HENTIT* pour son appui, ses conseils et ses encouragements.

Je remercie tous ceux qui ont contribué de près ou de loin à ce travail.

A tous, merci.

# Table des matières

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

REFERENCES .....	4
------------------	---

## *Chapitre I:*

### **SEMIONDUCTEURS ET SUPERRÉSEAUX**

I.1. INTRODUCTION .....	5
I.2. LES SEMICONDUCTEURS .....	5
1.2.1. Définition .....	5
1.2.2. Les composés binaires, ternaires et quaternaires des semiconducteurs III-V .....	7
1.2.3. Structure cristalline des semiconducteurs III-V .....	8
1.2.4. Réseau réciproque et zone Brillouin .....	9
1.2.5. Structure de bandes des semiconducteurs .....	10
1.2.5.a. Notion de gap direct et gap indirect .....	12
1.2.5.b. Structure de bandes des semiconducteurs III-V .....	13
1.2.5.c. Bandes interdites et intérêt des semiconducteurs III-V .....	14
I.3. SUPERRESEAUX .....	16
1.3.1. Historique des superréseaux .....	17
1.3.2. Définition d'un superréseau .....	17
1.3.3. Techniques de fabrication: l'épitaxie .....	19
1.3.3.a. Epitaxie par jets moléculaires .....	19
1.3.3.b. Epitaxie en phase vapeur des organométalliques .....	20
1.3.4. Types de superréseaux .....	21
1.3.4.a. Superréseaux à puits et à barrières rectangulaires .....	21
1.3.4.b. Superréseaux polytypes .....	22
1.3.4.c. Superréseaux à dents de scie .....	23
1.3.4.d. Superréseaux à masse effective .....	23
1.3.4.e. Superréseaux quasipériodiques .....	24
1.3.4.f. Superréseaux à potentiel de MATHIEU .....	24
1.3.4.g. Superréseaux à modulation de dopage .....	25
1.3.5. Classes des superréseaux .....	25
1.3.5.a. Superréseau de type I .....	26
1.3.5.b. Superréseau de type II .....	26
1.3.5.c. Superréseau de type III .....	26
1.3.6. Propriétés des superréseaux .....	27
1.3.6.a. Structure de minibandes .....	27
1.3.6.b. Effet tunnel résonant (ETR) .....	29
1.3.6.c. Résistance différentielle négative .....	31
1.3.6.d. Temps de l'effet tunnel résonnant .....	33
1.3.7. Applications .....	34
1.3.7.a. Diode laser .....	36
1.3.7.b. Le laser à cascade quantique .....	39
I.4. CONCLUSION .....	40
I.5. REFERENCES .....	41

## *Chapitre II:*

### **APPROXIMATIONS, MODÈLES ET FORMALISMES: APPLICATION AU CAS NONLINÉAIRE**

II.1. INTRODUCTION .....	46
II.2. APPROXIMATIONS DE BASE .....	47
II.2.1. Approximation de la masse effective (AME) .....	47

II.2.2. Conditions de continuité de Bastard .....	48
II.3. CALCUL DU COEFFICIENT DE TRANSMISSION.....	49
II.3.1. Modèle de la matrice de transfert .....	51
II.3.1.a. Matrice de transfert pour une barrière rectangulaire .....	51
II.3.1.b. Matrice de transfert pour un système à N barrières rectangulaires .....	54
II.3.2. Méthode exacte: Formalisme des fonctions d'Airy.....	57
II.3.3. Méthode Approchée: Formalisme des ondes planes .....	60
II.4. L'INTERACTION ELECTRON-ELECTRON .....	62
II.4.1. Équation de Schrödinger nonlinéaire .....	62
II.4.2. Notion de potentiel effectif.....	63
II.5. CONCLUSION .....	68
II.6. REFERENCES .....	69

### *Chapitre III:*

## **RÉSULTATS ET DISCUSSIONS**

III.1. INTRODUCTION .....	71
III.2. NATURE DES ETATS DANS UN SOLIDE CRISTALLIN .....	71
III.2.1. États étendus .....	71
III.2.2. États localisés et délocalisés .....	72
III.3. RESULTATS ET DISCUSSIONS.....	74
III.3.1. Étude des structures non soumises au champ externe $V_b$ .....	74
III.3.1.a. Sans l'influence de l'interaction électronique.....	74
III.3.1.b. Influence de l'interaction électronique.....	78
III.3.2. Étude des structures soumises au champ externe $V_b$ .....	90
III.3.2.a. Sans l'influence de l'interaction électronique.....	90
III.3.2.b. Influence de l'interaction électronique .....	93
III.3. CONCLUSION .....	97
III.4. REFERENCES .....	98
<b>CONCLUSION GENERALE .....</b>	<b>99</b>
REFERENCES .....	101
<b>TRAVAUX LIES A CETTE THESE .....</b>	<b>102</b>

# **INTRODUCTION GÉNÉRALE**

## ***Introduction générale***

Le développement rapide des techniques de croissance des semiconducteurs a permis l'élaboration d'hétérostructures dites superréseaux (SR). Ces composants sont construits à base de profil de potentiel ayant différentes formes, en fonction de l'application technologique désirée, tels que les lasers à semiconducteurs.

L'effet tunnel résonant (ETR) à travers une hétérostructure à puits quantique a attiré une considérable attention à cause de son application dans les dispositifs électroniques à vitesse ultra-rapides. L'étude de l'ETR dans une double barrière (DB) GaAs/GaAlAs à des fréquences de l'ordre de plusieurs THz a été reporté dans la littérature [1]. La raison basique pour laquelle l'ETR survient dans les structures à double barrière est un phénomène quantique dont les caractéristiques fondamentales sont maintenant bien connues: il y a une forte croissance de la transmission électronique à chaque fois que l'énergie de l'électron incident est proche à celle d'un état quasi-lié inoccupé à l'intérieur du puits [2]. En pratique, un gradient de voltage est appliqué pour décaler le niveau d'énergie de cet état quasi-lié de largeur non nulle, de telle manière à ce que son centre soit confondu avec le niveau de Fermi. Par conséquent, les caractéristiques courant-tension présentent une résistance différentielle négative et la transmission des porteurs de charge est totale.

En réalité, la situation est beaucoup plus complexe qu'elle n'y paraît. Il en est ainsi, même pour les hétérostructures de bonne qualité, lorsque la diffusion des porteurs de charges à travers les dislocations ainsi que la rugosité surfacique sont négligeables. En particulier, la diffusion inélastique est toujours présente dans les dispositifs réels. Un exemple majeur sur un tel événement est l'interaction électron-électron, dans lequel l'énergie des électrons tunnel change.

L'influence de tels effets multi-corps sur la structure à DB, a attiré de considérables attentions. Même avec leurs degrés de succès assez satisfaisant, les calculs multicorps rencontrent encore des difficultés qui peuvent compliquer, dans certains cas, l'interprétation du processus physique sous-jacent.

Le modèle de l'équation de Schrödinger à liaisons fortes pour un SR nonlinéaire a été appliqué pour résoudre et comprendre le problème de la transmission dans les systèmes

nonlinéaires, et a ouvert la possibilité d'examiner les phénomènes de propagation de solitons, le chaos et la bistabilité [3-7]. L'équation de Schrödinger est alors représentée sous la forme d'une carte discrète, utilisée pour décrire l'excitation électronique. Ceci exhibe l'apparition de fonctions d'ondes chaotiques dans quelques cas, et un transport balistique dans d'autres.

Presilla et *al.* [8] ont souligné la possibilité de nonlinéarités effectives dues aux interactions multicorps dans le transport électronique à travers une structure à double barrières, et ont observés des oscillations de la charge stockée à l'intérieur du puits quantique.

En général, ce type de traitement peut être assimilé à celui de Hartree-Fock, dans laquelle les interactions entre les particules sont substitués par un potentiel effectif. Dans tout les cas, ce qui apparait clairement est que l'ETR dans les nanostructures est intrinsèquement un phénomène nonlinéaire comme il a été démontré dans plusieurs situations, telle que la dépendance nonlinéaire dans le blocage du voltage en fonctions des électrons tunnels obtenue avec l'approximation de la méthode de Hartree-Fock par Wang et *al.* [9].

Un modèle d'analyse approximatif pour une structure à double barrière nonlinéaire basé sur l'équation de la masse effective généralisée a été établi pour décrire les effets de la diffusion électron-électron. dans ce modèle le champ d'interaction local nonlinéaire à été introduit pour prendre en compte des phénomènes de diffusion inélastiques et confirment des résultats de Diez et *al.* [10,11].

L'hamiltonien de Kroning-Penney a également été utilisé pour étudier les effets des interactions nonlinéaires sur les propriétés de transmission électronique dans les doubles barrières des systèmes périodiques et désordonnés [12]. Dans ces structures, une rangée d'intensités nonlinéaires pour lesquelles la délocalisation prend place et une intensité nonlinéaire critique au-delà de laquelle le comportement est renversé, ont été observées. Pour les systèmes de dimensions finies, la transmission pour les énergies correspondantes au gap décroît exponentiellement, tandis qu'avec un faible taux de nonlinéarité, la transmission est de Bloch. Dans les cas désordonnés, la transmission décroît en loi de puissance autours des bordures de bandes.

Le travail exposé dans cette thèse se propose d'étudier le profil de la bande de conduction d'un superréseau GaAS/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As nonlinéaire. La notion de discontinuité des bords de bandes et de la masse effective au niveau des interfaces avec le phénomène d'interaction électron-électron, est le problème principal dans la détermination des propriétés

du superréseau. L'étude de la nature des états électroniques est également indispensable pour la compréhension des phénomènes de transport électronique dans ces systèmes.

A cette fin, le manuscrit se décompose en trois parties:

Le premier chapitre est consacré aux définitions de base qui vont permettre de connaître le principe de fonctionnement des hétérostructures. Une synthèse des différentes techniques d'élaboration a été présentée. Les différents types et classes des superréseaux sont exposés. Il inclut également les caractéristiques spécifiques et des propriétés physiques des composés semiconducteurs III-V, ainsi que leurs domaines d'application.

Dans le second chapitre, nous présentons les différents modèles mathématiques approximatifs et exactes permettant d'examiner ces structures. Plus particulièrement, une étude décrivant l'interaction Coulombienne entre deux électrons se propageant dans le même milieu a été établie, permettant ainsi la résolution de l'équation de Schrödinger nonlinéaire.

Le troisième et dernier chapitre, donne les résultats de simulations obtenus au moyens de logiciels élaborés au sein du laboratoire pour des structure à double, a triple et à N barrières, soumises à l'interaction électron-électron, et ce, sans l'influence d'un champ externe. Une étude en fonction d'un voltage externe appliqué a également été présentée, pour lequel un nouvel effet intéressant est observé et analysé.

Enfin, une conclusion générale reprend les différents résultats obtenus et propose des perspectives au travail effectué dans le présent manuscrit.

## Références:

- [1] T. C. L. G. Sollner, W. D. Goodhue, P. E. Tannenwald, C. D. Parker and D. D. Peck, Appl. Phys. Lett. 43, 588 (1984).
- [2] B. Ricco and M. Ya. Azbel, Phys. Rev. B 29, 1970 (1984).
- [3] E. Infeld, G. Rowlands, "*Nonlinear Waves, Solitons and Chaos*", Cambridge University Press, Cambridge, 1990.
- [4] Y. Wan, C. M. Soukoulis, Phys. Rev. A 41, 800 (1990).
- [5] R. Knapp, G. Papanicolaou, B. White, in: A. R. Bishop, D. K. Campbell, S. Pnevmatikos Eds.), "*Disorder and Nonlinearity*", Springer-Verlag, Berlin, 1989.
- [6] Y. Wan, C. M. Soukoulis, Phys. Rev. B 40 (12), 264 (1989).
- [7] P. Hawrylak, M. Grabowski, P. Wilson, Phys. Rev. B 40, 6398 (1989).
- [8] C. Pressilla, G. Jona-Lasinio, F. Capasso, Phys. Rev. B 43, 5200 (1991).
- [9] L. Wang, J. K. Zhang and A. R. Bishop, Phys. Rev. Lett. 74, 567 (1991).
- [10] E. Diez, F. Domínguez-Adame, A. Sánchez, Phys. Lett. A 198, 403 (1995).
- [11] E. Diez, F. Domínguez-Adame, A. Sánchez, Phys. Lett. A 215, 103 (1996).
- [12] K. Senouci, N. Zekri, H. Bahloul, K. Sen, J. Phys. Condens. Matter. 11, 1823 (1999).

*Chapitre I:*

**SEMIONDUCTEURS ET SUPERRÉSEAUX**

## I.1. Introduction:

Quand, dans les années 70, Esaki a réalisé la première hétérostructure de semiconducteurs [I.1], il a réussi à faire passer le monde des basses dimensionnalités d'hypothèse de théoricien à l'une des physiques les plus riches de la fin du XX<sup>ème</sup> siècle, et a ainsi pavé la route à la fabrication contrôlée de nanostructures. Une quinzaine d'années plus tard, En 1985 les superréseaux métalliques et semiconducteurs ont été réalisés par Chang et Giessen [I.2]. La même année, ils ont commencé à être utilisés pour l'émission et la détection de rayonnement infrarouge. Le puits quantique, brique de base de ces dispositifs, permet alors un contrôle des propriétés optiques via des propriétés géométriques, ce qui constitue une véritable révolution. Au début des années 1990, Lijima et *al.* [I.3] ont réalisé les premiers superréseaux d'oxydes ferroélectriques.

Les alliages GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As sont des matériaux largement étudiés durant ces 30 dernières années. ils ont été des matériaux clés dans le développement du domaine optoélectronique depuis l'invention de la diode laser en 1962. Un large nombre de dispositifs tels que les lasers à semiconducteurs [I.4], des diodes électroluminescentes, les cellules solaires à haute fréquence, les photodétecteurs [I.5], le circuit intégré monolithique micro-ondes, ..etc, ont été fabriqué sur la base du système GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As.

Nous allons dans ce chapitre donner des définitions générales concernant les matériaux semiconducteurs, et plus particulièrement les matériaux III-V, puis par la suite les superréseaux, leurs modes de fabrication et leurs types. Nous nous intéresserons également à la structure du Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As puisqu'elle fait l'objet de notre étude dans ce manuscrit.

## I.2. Les Semiconducteurs:

### 1.2.1. Définition:

Les matériaux ayant la plus faible résistivité à température ambiante, typiquement inférieure à  $10^{-5}\Omega\text{m}$ , sont les métaux (cuivre, or, argent.. etc.). la conduction électrique s'effectue essentiellement par les électrons libres dont la concentration diffère peu d'un métal à l'autre (de  $10^{22}$  à  $10^{23} \text{ cm}^{-3}$ ) quelque soit sa pureté. Une augmentation de la température provoque une légère augmentation de la résistivité pouvant s'expliquer par le fait que les électrons libres sont gênés dans leurs déplacement par les vibrations (croissantes avec la température) des atomes du métal.

les matériaux dont la résistivité est typiquement supérieure à  $10^8 \Omega m$  sont considérés comme isolants: C'est le cas pour le verre, le mica et la silice ( $SiO_2$ ), le carbone (diamant). Cette fois l'augmentation de la température peut provoquer la libération d'électrons (ainsi que des trous) qui peuvent participer à la conduction électrique, ce qui provoque une baisse de la résistivité avec la température.

Entre les métaux et les isolants se trouvent les semiconducteurs (SC) dont la résistivité varie de  $10^{-3}$  à  $10^4 \Omega m$  (ou plus). ils sont isolants au zéro absolu, et conduisent l'électricité de façon limitée à température ambiante. La conduction électrique se fait par les électrons et les trous ou, de façon préférentielle, par l'un ou l'autre type de porteurs. Un semiconducteur peut être soit pur auquel cas il est dit intrinsèque, soit dopé par des impuretés (qui permettent de contrôler sa résistivité) auquel cas il est dit extrinsèque. ils sont classés suivant les groupes des atomes qui les composent.

Le tableau(I.1) donne des exemples de matériaux ou de composés semiconducteurs en fonction des éléments qui les constituent et de la position de ces éléments dans le tableau de Mendeleev:

13	IIIA	14	IVA	15	VA
5	10.811	6	12.011	7	14.007
	<b>B</b>		<b>C</b>		<b>N</b>
	BORE		CARBONE		AZOTE
13	26.982	14	28.086	15	30.974
	<b>Al</b>		<b>Si</b>		<b>P</b>
	ALUMINIUM		SILICIUM		PHOSPHORE
31	69.723	32	72.64	33	74.922
	<b>Ga</b>		<b>Ge</b>		<b>As</b>
	GALLIUM		GERMANIUM		ARSENIC
49	114.82	50	118.71	51	121.76
	<b>In</b>		<b>Sn</b>		<b>Sb</b>
	INDIUM		ETAIN		ANTIMOINE

**Tableau I.1.** Exemples de composés semiconducteurs (en rouge).

Les semiconducteurs III-V sont presque tous à gap direct et sont les plus importants dans la conception des dispositifs optoélectroniques. Leur grande force réside dans le nombre quasi illimité d'alliages possibles entre Ga, As, Al, In et P. Cette particularité essentielle a donné aux semiconducteurs III-V la première place pour l'optoélectronique et notamment

pour les lasers semiconducteurs [I.6]. On peut distinguer des semiconducteurs III-V binaires, ternaires et quaternaires.

### ***1.2.2. Les composés binaires, ternaires et quaternaires des semiconducteurs III-V:***

#### **➤ *Les composés binaires:***

Les composés binaires possibles n'ont pas le même intérêt potentiel. L'étude de leurs propriétés, et en particulier de la structure de bandes, montre que les éléments les plus légers donnent des composés dans lesquels la bande interdite est large et indirecte, et pour lesquels la masse effective des électrons est élevée. Les composés contenant du bore, de l'aluminium ou de l'azote entrent dans cette catégorie. Ils ont en général peu d'intérêt pour l'électronique rapide [I.7], qui demande des semiconducteurs à forte mobilité de porteurs. Pour l'optoélectronique, une structure de bande directe est nécessaire pour que les transitions optiques soient efficaces [I.8]. A l'autre extrémité, les éléments lourds comme le thallium ( $_{81}\text{Ti}$ ) ou le bismuth ( $_{83}\text{Bi}$ ) donnent des composés à base de Gallium (GaAs, GaSb) ou d'indium (InP, InAs, InSb) dont les propriétés sont les plus intéressantes. Le tableau (I.2) résume quelques paramètres pour différents matériaux de la famille III-V.

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

**Tableau I.2.** Paramètres des principaux composés binaires III-V [I.9-10].

➤ **Les composés ternaires et quaternaires**

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

➤ **Ternaires** : S'il y a substitution de deux atomes sur l'un des sous réseaux, soit:

$A_x A'_{(1-x)} B$ . Exemple:  $Ga_x In_{(1-x)} P$ , lorsque la composition exacte compte peu, on écrit tout court GaInP.

➤ **Quaternaires 1+3** : S'il y a substitution de trois atomes sur des sous réseaux, soit:

$A_x A'_y A''_{(1-x-y)} B$ . Exemple:  $Ga_x In_y Al_{(1-x-y)} As$ .

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

**I.2.3. Structure cristalline des semiconducteurs III-V:**

La plupart des matériaux III-V cristallisent dans la structure dite "Zinc Blende" présentée sur la figure I.1. Cette structure, qui s'apparente à celle du diamant, est constituée de deux sous-réseaux cubiques à faces centrées, l'un étant constitué des atomes de l'élément III, l'autre des atomes de l'élément V [I.11-14]. Ces deux sous-réseaux sont décalés l'un par rapport à l'autre le long de la diagonale du cube d'une quantité  $(a/4, a/4, a/4)$ ,  $a$  étant le paramètre cristallin, c.à.d. la longueur de l'arête du cube élémentaire. De ce fait dans les matériaux III-V, les liaisons ne sont pas simplement covalentes comme dans le Silicium. Elles reposent sur le transfert d'électrons des atomes du groupe V sur ceux du groupe III. Cette répartition est à l'origine du caractère partiellement covalent des liaisons (semiconducteurs polaires). Cette composante ionique de la liaison est importante, elle se manifeste par la présence de moments dipolaires électriques qui interagissent avec le rayonnement électromagnétique de grande longueur d'onde au même titre qu'il y a interaction entre les cristaux ioniques et la lumière infrarouge [I.14]. Cette propriété est en particulier responsable de l'anisotropie optique dans les hétérostructures semiconductrices III-V. Elle a été mise en évidence expérimentalement par Krebs et Voisin [I.15].

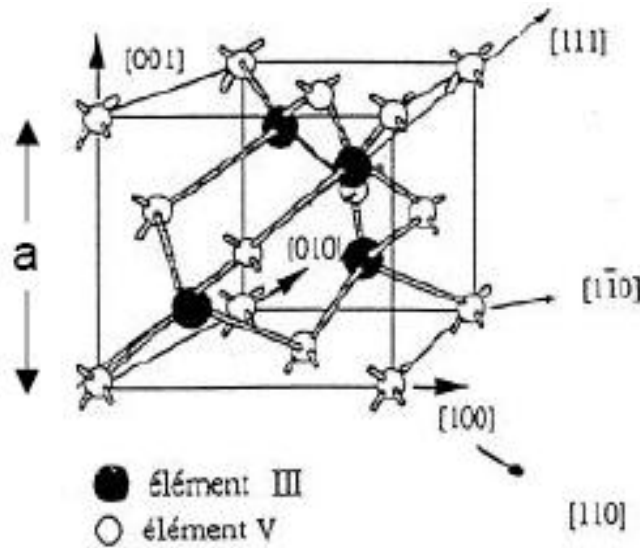


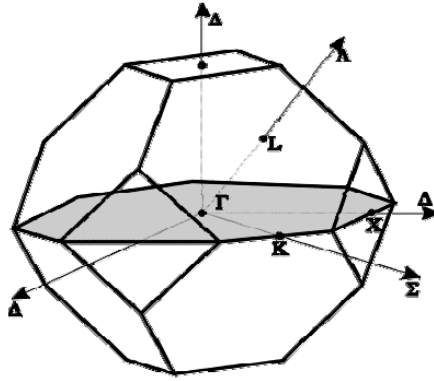
Fig.I.1: Maille élémentaire de la Zinc-blende.

#### 1.2.4. Réseau réciproque et zone Brillouin:

A partir du réseau cristallin, nous définissons le réseau réciproque, qui est le système de coordonnées [énergie-vecteur d'onde] dans lequel on représente les variations des fréquences de vibrations du réseau cristallin ou de l'énergie des états électroniques en fonction du vecteur d'onde  $\vec{k}$  caractérisant la propagation de l'onde considérée [I.17]. Le réseau réciproque associé au vecteur d'onde  $\vec{k}$  de la structure de type zinc-blende est cubique centré. Sa maille élémentaire correspond à la première zone de Brillouin qui, par définition, est la maille primitive dans l'espace réciproque. Elle est définie par la même méthode que la maille de Wigner-Seitz dans le réseau de Bravais, et s'identifie à celle-ci dans l'espace réciproque. L'importance de cette première zone de Brillouin provient de la description en ondes de Bloch dans un milieu périodique, car il est démontré que les solutions peuvent être complètement caractérisées par leur comportement dans cette zone.

La première zone de Brillouin d'un atome est définie comme le volume délimité par des surfaces issues de l'ensemble des points équidistants de l'atome et de ses plus proches voisins. Cette dernière a la forme d'un octaèdre tronqué par les six faces d'un cube dans le cas des composés III-V (Figure I.2). Elle présente un centre de symétrie à l'origine ( $\vec{k} = \vec{0}$ ) noté  $\Gamma$  et des axes de symétrie:

- Les axes  $\langle 100 \rangle$  à symétrie d'ordre 4 ( $\Delta$ ).
- Les axes  $\langle 111 \rangle$  à symétrie d'ordre 6 ( $\Lambda$ ).
- Les axes  $\langle 011 \rangle$  à symétrie d'ordre 2 ( $\Sigma$ ).



**Fig.I.2:** Première zone de Brillouin de la structure Zinc-Blende.

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

- Points X de coordonnées  $(2\pi/a, 0, 0)$  sur les axes  $\langle 110 \rangle$ .
- Points L de coordonnées  $(\pi/a, \pi/a, \pi/a)$  sur les axes  $\langle 111 \rangle$ .
- Points K de coordonnées  $(0, 3\pi/2a, 3\pi/2a)$  sur les axes  $\langle 011 \rangle$ .

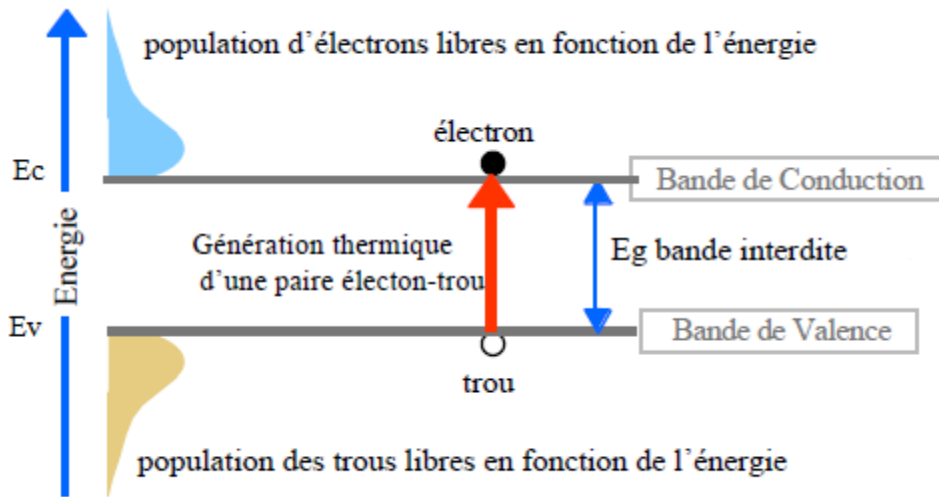
La forme et le volume de la zone de Brillouin ne dépendent que de la géométrie du réseau de Bravais, sans égard à la composition chimique ou au nombre d'atomes dans la cellule unitaire. La zone de Brillouin est une cellule unitaire primitive du réseau réciproque d'importance fondamentale pour l'étude des propriétés électroniques des cristaux, en particulier dans les semiconducteurs [I.13-14].

### ***1.2.5. Structure de bandes des semiconducteurs:***

La structure de bande d'un solide ensemble avec son remplissage (nombre d'électrons par maille) permet de faire la différence entre un isolant et un métal. Dans l'état fondamental d'un isolant les bandes sont ou complètement remplies ou complètement vides, par contre dans un métal au moins l'une des bandes est partiellement remplie.

A température finie, dans un semiconducteur, il existe une probabilité non nulle qu'une fraction des électrons soit excitée thermiquement à travers la bande interdite dans les états inoccupés de la bande d'énergie supérieure, en faisant apparaître des trous dans la bande d'énergie inférieure. Dans ces conditions, le semiconducteur a une conductivité non nulle, c'est la raison pour laquelle la bande d'énergie supérieure, initialement vide, est dite bande de conduction (BC) et la bande d'énergie inférieure est dite bande de valence (BV). La valeur de cette conductivité  $\sigma$  dépend de  $k_B T$  et de la largeur  $E_g$  de la bande interdite ( $E_g$  = "energy

gap"), cette dernière étant par définition la différence entre le sommet de la BV, noté  $E_v$ , et le minimum de la BC, noté  $E_c$ . Une telle structure est schématisée sur la figure I.3:



**Fig.I.3:** Structure de bande et phénomène de génération des paires électrons-trous.

La variation du gap est donnée par l'équation suivante [I.16]:

$$E_g(T) = E_g(0) - \frac{A \cdot T^2}{T+B} \quad (\text{I.1})$$

Où  $A$  et  $B$  sont des constantes.

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

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

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

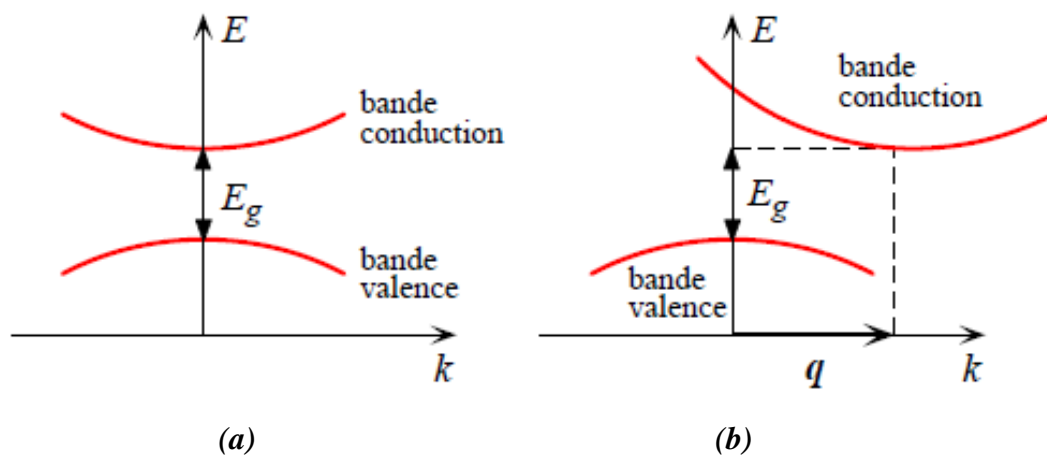
Au voisinage de chacune des limites  $E_c$  et  $E_v$ , respectivement de la bande de conduction et de la bande de valence, la densité d'états permis  $N(E)$  peut être estimée avec l'approximation parabolique suivante [I.17]:

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

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

### ***1.2.5.a. Notion de gap direct et gap indirect:***

Il existe deux types fondamentaux de semiconducteurs: les semiconducteurs dans lesquels le minimum de la bande de conduction et le maximum de la bande de valence sont situés en des points différents de l'espace des  $\vec{k}$ , et les semiconducteurs pour lesquels les extrema sont situés au même point de l'espace des  $\vec{k}$ : Les seconds sont dits à gap direct (Figure I.4(a)), le prototype en est le GaAs, tandis que les premiers sont dits à gap indirect (Figure I.4(b)). La nature du gap joue un rôle fondamental dans l'interaction du semiconducteur avec un rayonnement électromagnétique, et par suite, dans le fonctionnement des composants optoélectroniques. En effet, Les propriétés optiques des semiconducteurs font intervenir non seulement la répartition des états permis pour les électrons, mais également les divers processus par lesquels les électrons peuvent changer de niveaux d'énergie. On distingue des transitions radiatives dans lesquels l'énergie gagnée (ou perdue) par un électron est amenée (ou emportée) sous forme de rayonnement donnant lieu à une absorption (ou émission) de photon dans le cas du gap direct, et des transitions non radiatives dans lesquels l'énergie est échangée avec le réseau cristallin sous forme de phonons (quantum de vibration du réseau).



**Fig.I.4:** Structure de bande à gap (a) direct, (b) indirect.

Le tableau suivant donne la largeur ainsi que la nature des gaps de quelques matériaux:

Cristal	Gap	$E_g$ (eV)		Cristal	Gap	$E_g$ (eV)	
		0K	300K			0K	300K
Diamant	i	5,4	-	HgTe <sup>(a)</sup>	d	-0,30	-
Si	i	1,17	1,11	PbS	d	0,286	0,34-0,37
Ge	i	0,744	0,66	PbSe	i	0,165	0,27
$\alpha$ Sn	d	0,00	0,00	PbTe	i	0,190	0,29
InSb	d	0,23	0,17	CdS	d	2,582	2,42
InAs	d	0,43	0,36	CdSe	d	1,840	1,74
InP	d	1,42	1,27	CdTe	d	1,607	1,44
GaP	i	2,32	2,25	ZnO	d	3,436	3,2
GaAs	d	1,52	1,43	ZnS	-	3,91	3,6
GaSb	d	0,81	0,68	SnTe	d	0,03	0,18
AlSb	i	1,65	1,6	ACI	-	-	3,2
SiC (hex)	i	3,0	-	AgI	-	-	2,8
Te	d	0,33	-	Cu <sub>2</sub> O	d	2,172	-
ZnSb	-	0,56	0,56	TiO <sub>2</sub>	-	3,03	-

**Tableau I.4.** Valeur et nature du gap pour quelques cristaux semiconducteurs et isolants, le préfixe "d" signifie gap direct, le préfixe "i" signifie gap indirect. <sup>(a)</sup> HgTe est un semi-métal, les bandes de valence et de conduction se recouvrent.

### ***1.2.5.b. Structure de bandes des semiconducteurs III-V:***

Les bandes d'énergies sont représentées dans l'espace réciproque en fonction du vecteurs d'onde  $\vec{k}$  dans les directions de plus hautes symétries de la première zone de Brillouin.

#### **➤ *Structure de bande du GaAs:***

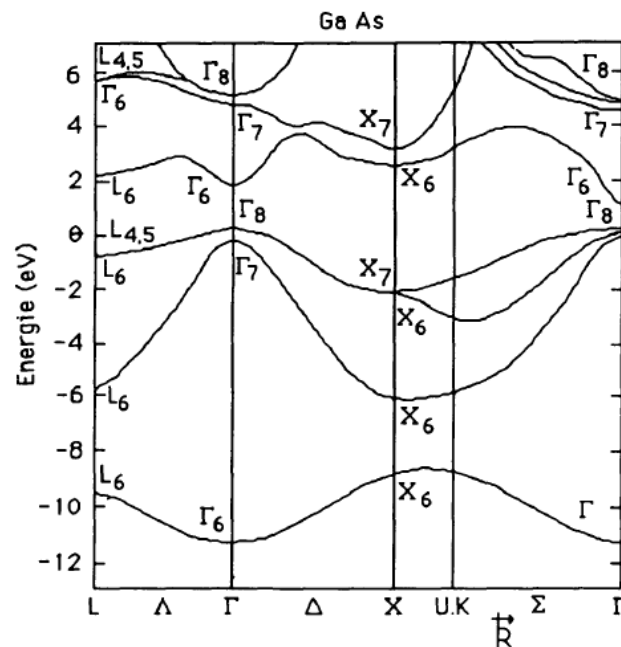
Pour le GaAs, le maximum de la bande de valence est en  $k=0$  et celle-ci est doublement dégénérée avec deux branches confondues au centre de la zone de Brillouin (Figure I.5). Les deux bandes décrivent la disposition de porteurs de masses effectives différentes. La masse des trous lourds est de  $0,68m_0$ , celle des trous légers de  $0,12m_0$  où  $m_0$  est la masse de l'électron au repos. Une troisième branche de la bande de valence est abaissée par rapport aux deux premières d'une énergie égale à  $0,33\text{eV}$ . La bande de conduction

présente, au centre de la zone de Brillouin ( $k=0$ ) un minimum non dégénéré, qui est une vallée à symétrie  $\Gamma$  appelée vallée centrale.

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

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

L'arséniure de gallium étant un composé à gap direct, les transitions électroniques les moins énergétiques entre la bande de valence et la bande de conduction peuvent se faire avec conservation du vecteur d'onde  $\vec{k}$  (sans l'intervention des phonons) [I.8-10].

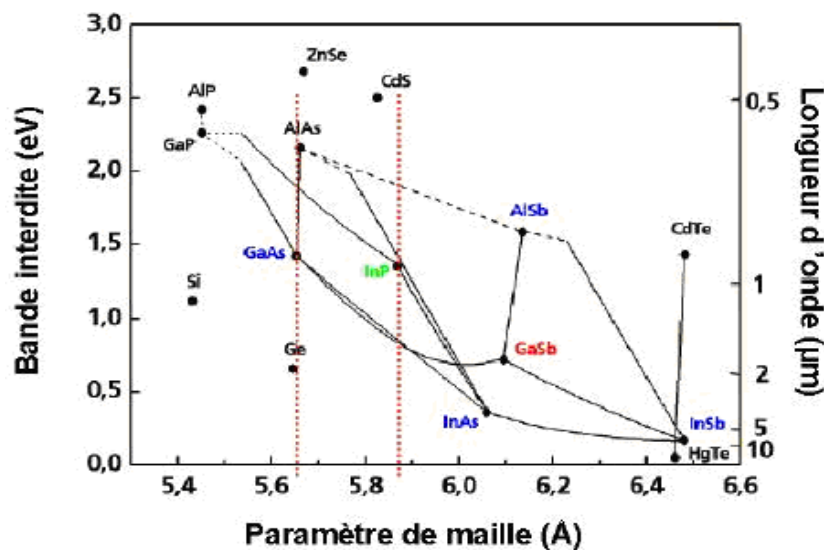


**Fig.I.5:** Structure de bande du GaAs.

### ***1.2.5.c. Bandes interdites et intérêt des semiconducteurs III-V:***

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

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



**Fig.I.6:** Bandes interdites des principaux composés III-V en fonction des paramètres cristallins [I.17].

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

est en général prohibée car engendrant, lors de la croissance cristalline en épitaxie (croissance pseudo-morphique), trop de contraintes mécaniques et donc trop de défauts.

En effet, un désaccord de maille même très faible en pourcentage entre la couche et le substrat est suffisante pour provoquer une forte densité de dislocations diminuant par la suite les performances électroniques du composant fabriqué. Une des conséquences est qu'un grand nombre de composants qui pourraient être potentiellement très performants ne peuvent être fabriqués faute de substrat approprié. En conséquence, même si les alliages semiconducteurs III-V peuvent potentiellement couvrir un très large domaine de longueurs d'onde, seuls d'étroits domaines de composition de ces alliages peuvent être exploités, les autres domaines présentant un désaccord de maille trop fort vis-à-vis des substrats disponibles (Figure I.6).

Dans ce travail, nous nous sommes intéressés plus particulièrement aux alliages ternaires  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  sur substrat GaAs. En pratique, les techniques de croissance en épitaxie par jet moléculaire (EJM) permettent un ajustement précis de la composition  $x$  à partir du simple rapport des flux des éléments III (Al et Ga) et V (As) mis en jeu.

### **I.3. Superréseaux:**

L'étude des hétérostructures a montré que la région voisine de l'interface entre deux matériaux permet la concentration d'une grande densité de porteurs libres, fonction de la nature des matériaux et de la polarisation de la structure. Ces porteurs libres sont localisés au voisinage de l'interface dans un puits de potentiel très étroit, représenté dans le diagramme énergétique par la courbure des bandes de valence et de conduction.

Dans une hétérojonction, les différences de gap et de travail de sortie, entre les deux semiconducteurs, peuvent entraîner l'existence d'une couche d'accumulation. La différence des travaux de sortie du métal et du semiconducteur entraîne l'existence d'une couche d'accumulation ou d'une couche d'inversion dans le semiconducteur. La polarisation de la structure permet en outre de passer d'un régime à l'autre, c.à.d. de maîtriser dans un même semiconducteur le signe et la densité des porteurs libres localisés à la surface du semiconducteur.

La représentation corpusculaire des électrons dans le semiconducteur permet de donner un ordre de grandeur important. Ces électrons sont des particules de masse effective

$m^*$ , animées d'un mouvement brownien caractérisé par un libre parcours moyen  $l = v_{th} \cdot \tau_c$  où  $v_{th}$  est la vitesse thermique des porteurs et  $\tau_c$  leur temps de collision. A la température ambiante  $v_{th} = 10^7$  cm/s et  $\tau_c = 10^{-13}$  à  $10^{-12}$  s, ce qui donne  $l = 100$  à  $1000 \text{ \AA}$ . La largeur du puits est donc inférieure au libre parcours moyen de l'électron. Par conséquent, durant son parcours, la particule ne subit aucune collision. En d'autres termes, la longueur d'onde associée à l'électron étant du même ordre de grandeur que la cavité dans laquelle est enfermée cette onde, il en résulte l'existence d'ondes stationnaires et leurs interférences permettent d'obtenir une quantification à l'intérieur du puits considéré [I.17].

En conséquence, les électrons (ou les trous) confinés dans une couche d'inversion ou d'accumulation se comportent comme un gaz d'électrons (ou de trous) à deux dimensions. Leur mouvement est libre dans le plan de la structure et quantifié dans la direction perpendiculaire. Une étude détaillée doit passer par un traitement quantique du problème.

### ***1.3.1. Historique des superréseaux:***

Les premiers travaux portant sur des couches empilées artificiellement furent produits par DuMond et Youtz (1940) sur des matériaux métalliques dans le but de produire des structures en couches pour réaliser des réseaux de diffraction des rayons X [I.19]. Dans le cadre du transport électronique, l'idée d'une structure à basse dimension a été initialement proposée par L. Esaki et *al.* en 1970 [I.1]: En juxtaposant deux matériaux semiconducteurs différents, les discontinuités aux bords des bandes ont permis l'apparition d'états quasi-liés de nature quantique, confinés à l'interface. L'exploitation de ces niveaux d'énergie a suscité un intérêt immense dans la transmission électronique. Depuis l'avènement de la structure double barrière, les propriétés de transmission dans de tels dispositifs électroniques se sont retrouvées nettement améliorées.

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

### ***1.3.2. Définition d'un superréseau:***

Les états résultant du couplage de deux puits quantiques sont des combinaisons symétriques et antisymétriques des états associés à chacun des puits isolés. Ce système de deux puits couplés est analogue à une molécule diatomique dans laquelle les orbitales moléculaires associées aux combinaisons liantes et antiliantes des orbitales atomiques, résultant du couplage entre les deux atomes.

La séquence:

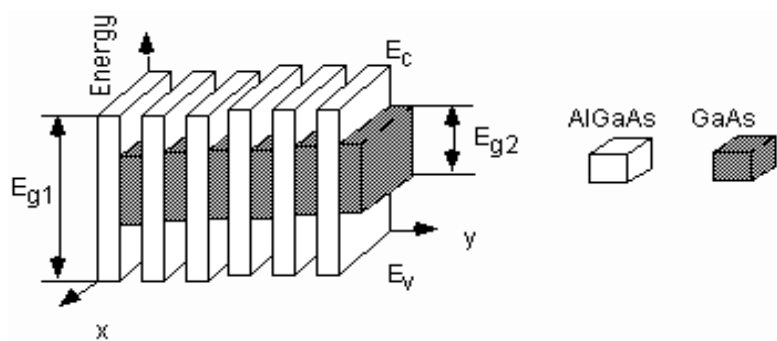
Orbitales atomiques  $\rightarrow$  Orbitales moléculaires  $\rightarrow$  Etats cristallins

obtenue des couplages d'un grand nombre d'atomes, peut donc être reproduite ici sous la forme:

Puits quantique isolé  $\rightarrow$  Double-puits couplés  $\rightarrow$  Multi-puits couplés.

Ainsi, un réseau à une dimension de puits quantiques couplés analogue au réseau d'atomes dans le cristal est obtenu. Ce réseau a évidemment une maille plus importante que celle du réseau atomique et se superpose à ce dernier dans une direction déterminée. Ce système de multi-puits quantiques couplés porte le nom de superréseau (SR) [I.9,17].

Un superréseau (SR) est donc par définition un empilement de couches ultrafines de semiconducteurs (quelques dizaines d'Å d'épaisseurs) [I.20] alternées périodiquement suivant l'axe de croissance (Figure I.7). Son avantage est de présenter une discontinuité de bords de bandes de conduction et de valence à l'interface des deux semiconducteurs. Le matériau à faible gap joue le rôle d'un puits de potentiel pour les électrons et l'autre à grand gap d'une barrière. Ainsi, un profil de potentiel périodique résultant d'une succession de puits et de barrières est obtenu. La période  $d$  [I.21] du potentiel permet de faire la différence entre un puits quantique et un SR où se forme une structure de minibandes. L'ordre de grandeur généralement admis est 200Å.



**Fig.I.7:** Superréseau AlGaAs/GaAs à puits et à barrières rectangulaire.

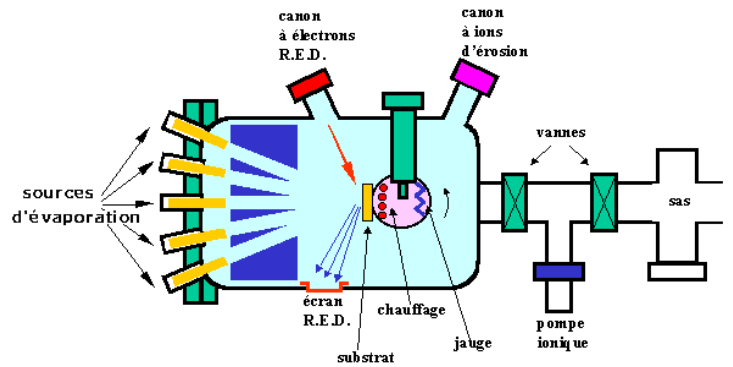
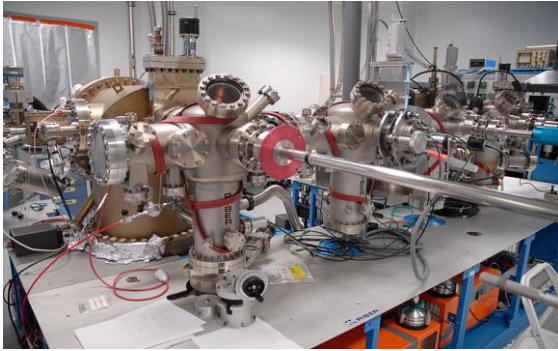
### ***1.3.3. Techniques de fabrication: l'épitaxie***

La technique de fabrication des structures optoélectroniques 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 [I.22]. 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.

#### ***1.3.3.a. Epitaxie par jets moléculaires:***

L'épitaxie par jets moléculaires (EJM) (en anglais Molecular Beam Epitaxy MBE) a été perfectionnée par Arthur et *al.* [I.22-23] dans les années soixante après son apparition au début du siècle. Elle consiste à envoyer des molécules à la surface d'un substrat dans un vide très poussé afin d'éviter tout choc ou contamination sur le parcours. Par le contrôle des cellules d'évaporation, le jet moléculaire est fait en direction du substrat, permettant ainsi de réaliser couche par couche des structures très complexes telles que les superréseaux (SR), les diodes laser, les transistors à forte mobilité d'électrons, mais cette opération est très lente et ne concerne qu'un seul substrat à la fois. La vitesse de croissance est de l'ordre de 1mm par minute, elle est aussi très coûteuse. Le système ultravide,  $10^{-10}$ Torr, permet en permanence de vérifier la cristallinité du cristal en cours de croissances.

L'EJM possède l'avantage de contrôler rigoureusement la composition chimique des interfaces et le profil de dopage. Les multicouches peuvent être réalisées avec des épaisseurs de l'ordre de la monocouche atomique (2,8 à 2,9Å), à des vitesses de croissance extrêmement faibles (inférieur à 100Å/min) et des températures de croissance allant de 400°C jusqu'à 1000°C [I.24]. La technique EJM appliquée pour la fabrication d'hétérojonctions de haute mobilité a été décrite en détail par Witkowsky et *al.* [I.25].



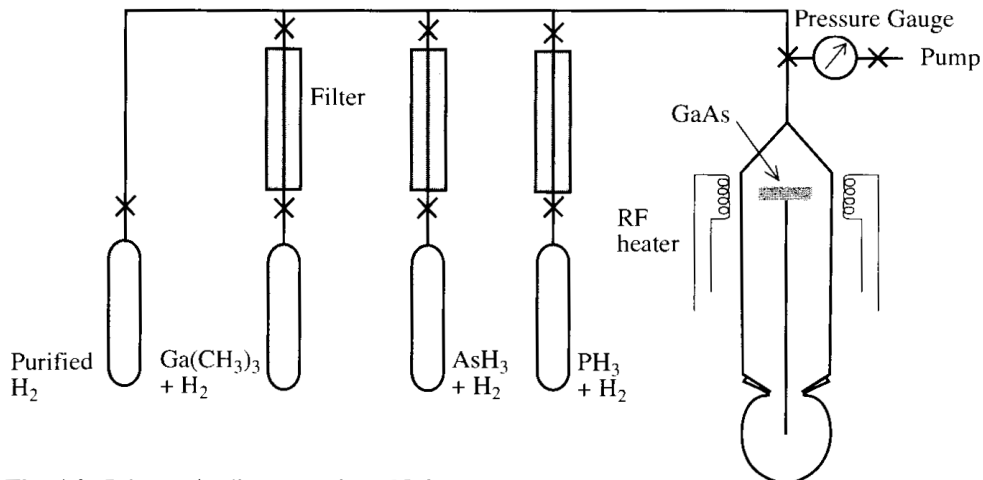
**Fig.I.8:** Epitaxie par jet moléculaire (EJM/MBE).

### ***1.3.3.b. Epitaxie en phase vapeur des organométalliques:***

Cette technique à injection nommée dépôt chimique en phase vapeur des organométalliques (en anglais MOCVD pour Metal Organic Chemical Vapor Deposition), développée dans les années 90 au LMGP [I.26], est basée sur l'utilisation d'injecteurs de moteurs thermiques. Elle permet de synthétiser des couches minces de matériaux complexes avec un très bon contrôle de la stœchiométrie, de la vitesse de croissance et de la qualité cristalline des films. Son principe repose sur l'utilisation d'une micro-vanne à commande électronique qui permet d'introduire des quantités très précisément contrôlées d'une solution composée de précurseurs organométalliques et d'un solvant.

L'injection des précurseurs dissous dans un solvant est réalisée sous forme de gouttelettes contrôlées par la micro-vanne. La taille et le nombre de ces gouttelettes déterminent l'apport de matière dans le réacteur et par la suite, l'épaisseur de la couche déposée. La calibration de l'injecteur est réalisée lors de l'élaboration d'une série de multicouches  $(A/B)_N$  en faisant varier le nombre de gouttes du matériau A pour un nombre de gouttes du matériau B fixe. Le procédé MOCVD breveté par le LMGP en 1993 est actuellement exploité industriellement. La figure I.9 présente le schéma d'une installation de réacteur MOCVD.

Le premier SR synthétisé à partir de la MOCVD est le  $GaAs_{0.5}P_{0.5}/GaAs$  par Blakeslee et al. [I.27-28]. Dans certains cas, les fortes températures de dépôt engendrent des contraintes résiduelles importantes pendant la phase de refroidissement. Ces contraintes dépendent fortement des caractéristiques mécaniques du substrat et de la couche à déposer, et peuvent avoir un impact sur la qualité du film déposé et ses performances en service.



**Fig.I.9:** Schéma d'une installation de MOCVD.

Ces techniques ont permis de réaliser plusieurs types de SR en utilisant la propriété intéressante du désalignement des bords de bandes à l'interface suivant l'axe de croissance.

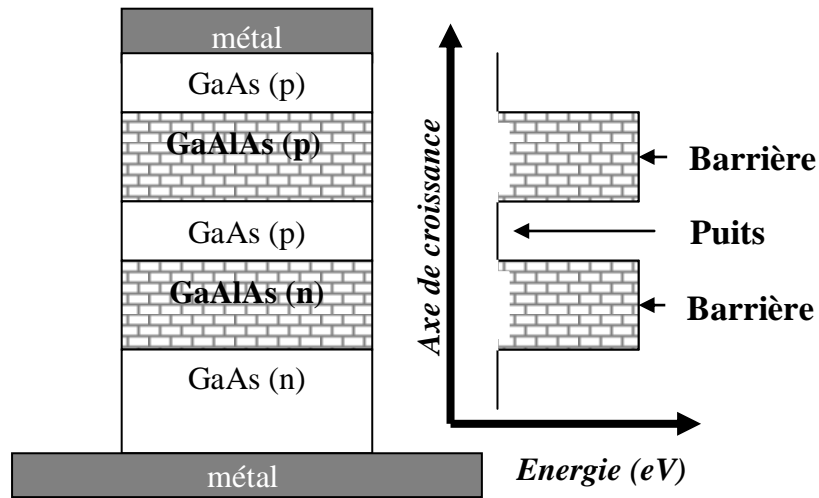
#### **1.3.4. Types de superréseaux:**

Les types de SR rapportés dans la littérature font contribuer à la fois les propriétés des matériaux semiconducteurs utilisés et les techniques de croissance.

##### **1.3.4.a. Superréseaux à puits et à barrières rectangulaires:**

Cette structure constitue la superposition de deux matériaux possédant des mailles presque idéales et de structures de bandes différentes telles que GaAs/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  (Figure I.10). Ce type de superréseaux est le plus répandu car il constitue l'élément de base dans l'élaboration de plusieurs composants, tels que les photodétecteurs [I.21] et les diodes laser [I.29].

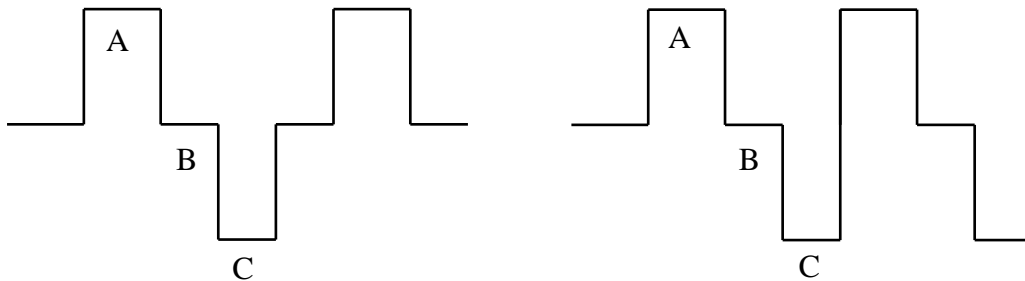
Ces structures, en plus d'une grande simplicité à l'étude, possèdent des propriétés fascinantes résidant dans leur capacité de confinement des états électroniques. Ce profil est obtenu à partir de la mise en contact de deux types de matériaux A et B ayant un accord de maille presque idéal (de l'ordre de  $10^{-3}$ ) et des structures de bandes différentes, telles que GaAs/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  [I.21].



*Fig.I.10:* Superréseau à puits et à barrières rectangulaires.

#### *I.3.4.b. Superréseaux polytypes:*

Leur profil est obtenu par introduction d'un troisième constituant C dans la structure [I.30-31], et à partir de ce triplet (A, B et C), plusieurs formes de potentiel sont obtenues (Figure I.11). Elles sont dues à la différence existante entre leurs bandes de conduction, comme la structure AlSb/GaSb/InAs. Cette structure a permis le perfectionnement de plusieurs entités physiques importantes dans les composants électroniques telles que le rapport Pic-Vallée et la Résistance Différentielle Négative (RDN) [I.32-33], d'où leur application dans les dispositifs à hautes fréquences.



*Fig.I.11:* Superréseaux polytypes.

**I.3.4.c. Superréseaux à dents de scie:**

Cette structure est obtenue à partir d'une modulation de la composition du matériau utilisé, tel que le  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ , dans chaque période pour obtenir un gap dégradé linéairement allant d'une valeur maximale qui forme le grand gap, jusqu'à une valeur minimale qui donne le petit gap [I.34-35]. Ainsi plusieurs formes de profil sont obtenues selon la modulation utilisée (Figure I.12). Ces systèmes présentent des propriétés physiques très intéressantes, d'où viennent leurs applications technologiques dans la fabrication des rectificateurs [I.36] et les photomultiplicateurs [I.37].



**Fig.I.12:** Superréseaux à dents de scie.

**I.3.4.d. Superréseaux à masse effective:**

Ce type de SR est construit par une modulation périodique de la masse effective [I.38]. Il est difficile de choisir les constituants semiconducteurs utilisés pour la réalisation d'un tel profil, car ces derniers doivent avoir les mêmes paramètres  $a$  du réseau ainsi que la même affinité électronique. Dans ce contexte, quelques exemples de SR à masse effective ont été suggérés :

$\text{Al}_{0,23}\text{Ga}_{0,3}\text{In}_{0,47}\text{P}/\text{GaAs}$ ,  $\text{Ga}_{0,86}\text{In}_{0,14}\text{P}_{0,78}\text{Sb}_{0,22}/\text{GaAs}$  et le  $\text{Al}_{0,5}\text{In}_{0,5}\text{As}_{0,49}\text{Sb}_{0,51}/\text{GaSb}$

Le tableau (I.5) regroupe quelques matériaux dont les propriétés permettent de constituer ce type de SR :  $a$  est la constante du réseau,  $\kappa$  l'affinité électronique,  $E_g$  l'énergie du gap,  $m_1$  la masse effective du premier matériau et  $m_2$  celle du second.  $m_0$  est la masse de l'électron libre [I.39] pour ce type de SR [I.40].

Matériaux	$a$ (Å)	$\kappa$ (eV)	$E_g$ (eV)	$m_{2,1}^r / m_0$	$m_2 / m_1$
$\text{Al}_{0,23}\text{Ga}_{0,3}\text{In}_{0,47}\text{P}$	5,65	4,07	2,13	0,13	1,94
$\text{Ga}_{0,86}\text{In}_{0,14}\text{P}_{0,78}\text{Sb}_{0,22}$	5,65	4,07	1,89	0,40	5,97
GaAs	5,65	4,07	1,43	0,067	-
$\text{Al}_{0,23}\text{Ga}_{0,3}\text{In}_{0,47}\text{P}$	6,09	4,07	1,3	0,070	1,4
GaSb	6,09	4,07	0,68	0,043	-

**Tableau I.5.** Propriétés structurales de quelques superréseaux.

**I.3.4.e. Superréseaux quasipériodiques:**

Le processus de croissance de cette structure consiste à bâtir le SR à partir de la série de Fibonacci, puis habiller chaque site avec une base. Cette construction exige deux éléments différents A et B, de longueur respective  $l_A$  et  $l_B$  obéissant aux règles suivantes:

- ✓ A et B suivent une certaine récurrence.
- ✓ Le rapport ( $l_A/l_B$ ) doit être égal au nombre d'or ( $\phi = \frac{1+\sqrt{5}}{\sqrt{5}-1}$ ).

Par exemple, en prenant  $S_0=B$  comme première séquence de la série et en appliquant la loi de récurrence suivante:

$$B \rightarrow A \text{ et } A \rightarrow C=AB$$

À la cinquième séquence le terme de la série prend la forme :  $S_5=CACCA$ .

Plusieurs études théoriques de l'équation de Schrödinger à potentiel quasipériodique ont été abordées dans les années quatre-vingts [I.40]. En 1984 Levine et *al.* [I.41] ont décrit une nouvelle classe de réseaux quasipériodiques à 1, 2 et 3 dimensions, nommée, les quasi-cristaux. Merlin [I.42] a réalisé un nouveau type d'hétérostructure en prenant le système GaAs/AlAs, dit SR de Fibonacci.

Cet intérêt vient du fait que ce problème représente un cas intermédiaire entre les structures périodiques, traitées par le théorème de Bloch et la notion d'états continus, et celles désordonnées qui fait recours au théorème d'Anderson d'où l'apparition des états localisés. Les systèmes quasipériodiques permettent l'apparition des états critiques.

**I.3.4.f. Superréseaux à potentiel de MATHIEU:**

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

$$V(z) = -V_a \cdot \cos(2\pi z/a) \quad (\text{I.3})$$

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

Un exemple proposé par Burt [I.43] utilise un profil de potentiel de la forme:

$$V(z) = V_0 + V_a \cdot \cos(2\pi z/a) \quad (\text{I.4})$$

Où le cristal formant le puits a comme paramètre  $V_0=0,7460\text{eV}$  et  $V_a=2,7512\text{eV}$  avec  $z \in [5a, 15a]$ , et celui constituant la barrière possède un  $V_0=0,0\text{eV}$  et  $V_a=0,59\text{eV}$  avec  $z \in ]0,5a[ \cup ]15a, 20a[$ . La transition puits-barrière est continue avec une profondeur du puits de  $0,2301\text{eV}$ .

#### ***I.3.4.g. Superréseaux à modulation de dopage:***

Les SR à modulation de dopage, proposés par Esaki et *al.* [I.44], sont obtenus à partir d'un empilement périodique et alterné de couches d'un même matériau dopées  $n$  et  $p$ . Ces SR, dits à dopage conventionnel réalisés par Ploog et *al.* [I.45], présentent un inconvénient puisqu'une forte modulation de dopage ne peut-être réalisée en une faible période ( $\approx 200\text{\AA}$ ) [I.46]. Ce problème a été surmonté par une nouvelle technique de dopage qui consiste à empiler des monocouches atomiques dopées  $n$  et  $p$ , alternées périodiquement ( $d \leq 200\text{\AA}$ ), et séparées par quelques unes du matériau non dopé.

Ainsi, le profil de dopage est décrit par la relation:

$$N_D(z) = N^{2D} \cdot d \cdot \delta(z) \quad (\text{I.5})$$

Où  $\delta(z)$  représente la fonction de Dirac et  $N^{2D}$  la concentration des atomes dopants à deux dimensions. Le profil de potentiel est alors donné par la relation:

$$V(z) = N^{2D} \cdot d \cdot e/4\epsilon \quad (\text{I.6})$$

Où  $d$  est la période,  $e$  la charge de l'électron et  $\epsilon$  la permittivité du matériau.

Comme  $V(z)$  dépend de la période et de la concentration, les propriétés optiques sont différentes de celles observées dans les autres SR, car la durée de vie des porteurs de charges est très courte ( $t \approx 3,3\text{nm}$ ).

#### ***I.3.5. Classes des superréseaux:***

L'étude des diagrammes de bande de quelques systèmes a montré que les SR peuvent être classés en deux types [I.47]:

### 1.3.5.a. Superréseau de type I:

Dans ce type de SR les électrons et les trous sont confinés, respectivement, dans la bande de conduction et de valence de la même couche (Figure I.13(a)). C'est dû au fait que les gaps des matériaux constituant le SR sont directs. nous citons à titre d'exemples le AlGaSb/GaAs et le GaSb/AlSb [I.48].

### 1.3.5.b. Superréseau de type II:

Dans ce genre de SR, l'extrema des  $BV$  et  $BC$  sont spatialement séparés, (le gap dans ce cas d'au moins d'un des semiconducteur est indirect). Les électrons et les trous sont confinés dans deux matériaux semiconducteurs adjacents (Figure I.13(b)). exemples: InP/Al<sub>0,48</sub>In<sub>0,25</sub>As.

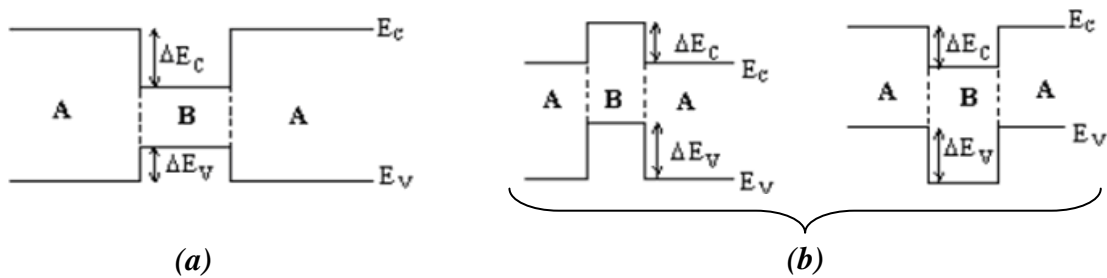


Fig.I.13: superréseau (a) de type I, (b) de type II.

Un cas intermédiaire peut être obtenu dans In<sub>1-x</sub>Ga<sub>x</sub>As/GaSb<sub>1-y</sub>As<sub>y</sub>, par un choix judicieux des compositions  $x$  et  $y$ , ce système peut-être du type I ou II.

D'autres cas aussi intéressants que les premiers sont obtenus tel que celui du SR HgTe/CdTe [I.47] (Figure I.14(a)) où le HgTe possède un gap nul.

### 1.3.5.c. Superréseau de type III:

Dans l'exemple du GaSb/InAs (Figure I.14(b)) où la différence des bords de bande est négative, permet l'ouverture d'une fenêtre dans le SR [I.48]: Il est appelé aussi SR à gap cassé (Broken gap).

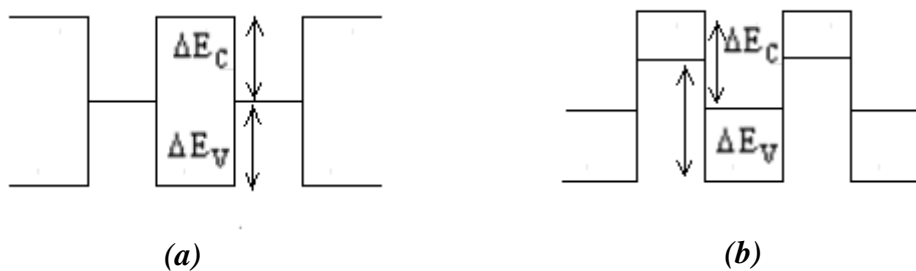


Fig.I.14: superréseau (a) à gap nul, (b) à ouverture de fenêtre (Broken gap).

### ***1.3.6. Propriétés des superréseaux:***

Les SR présentent des propriétés fascinantes qui ont fait l'intérêt de plusieurs applications dans le domaine optoélectronique. Parmi ces propriétés on peut citer:

- a) La diversité existante dans le désalignement des bords de bandes de conduction et de valence (band offset). Celui-ci est contrôlable en fonction de l'enjeu technologique en variant uniquement la valeur de la concentration du matériau utilisé dans la fabrication d'où la création de région d'accélération.
- b) La masse effective varie en fonction de la position, plus exactement, dans la direction de croissance du SR. Dans une structure GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As la masse effective est donnée par:

$$m^*(z) = \begin{cases} m_a = 0,067m_0 \\ m_b = 0,1087m_0 \end{cases}, \text{ pour une concentration d'aluminium } x=0,3$$

Où  $m_a$  et  $m_b$  représentent respectivement les masses dans le puits et la barrière,  $m_0$  est celle de l'électron libre.

- c) L'existence d'une structure de minibandes, induite par la périodicité du potentiel du SR, à l'intérieur des bandes principales (celles-ci dues à la périodicité du potentiel atomique en volume de la structure cristalline).
- d) L'apparition d'un phénomène intéressant: Effet Tunnel Résonant (ETR) dans les propriétés de transport électronique du SR.
- e) Une résistance différentielle négative (NDR) dans les caractéristiques courant-tension est observée, qui est une conséquence directe de l'ETR.

#### ***1.3.6.a. Structure de minibandes:***

Quand le libre parcours moyen des électrons est supérieur à la période du SR, ceux-ci traversent les barrières par effet tunnel. Ainsi l'énergie cinétique se compose de deux termes, un parallèle quantifié suivant l'axe de croissance et l'autre libre dans le plan perpendiculaire. Elle est définie par la relation:

$$E_n(k) = E_{n\parallel} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \quad (\text{I.7})$$

Des mesures d'optiques [I.49-50] ont confirmé expérimentalement ce résultat. La nature de cette structure est analogue à celle dans les cristaux, où se forment les bandes d'énergie induites par la périodicité du réseau. Seulement dans les SR, le cas est plus intéressant, car l'ordre de grandeur des bandes est de quelques "meV" d'où la notion de "minibandes". Cette dernière a permis le confinement des électrons dans des niveaux bien définis à l'intérieur des puits, séparés par des barrières fines [I.51] et la période plus large qui

conditionne le couplage entre les puits permet d'ajuster la largeur de la minibande. Cette dernière dépend de la nature du couplage électronique entre les niveaux des puits adjacents [I.21], plus celui-ci est faible, moins est la largeur. Un exemple du GaAs/AlAs est donné: Si le couplage est fort,  $\Delta E=5\text{meV}$  [I.52], sinon,  $\Delta E=0,4\text{meV}$  [I.53].

Dans le cas où les puits seraient éloignés, les niveaux deviennent discrets, et les états sont bien évidemment localisés. L'intérêt des minibandes est d'être facilement perturbable par un agent extérieur.

Plusieurs modèles théoriques ont été développés, pour obtenir la relation de dispersion des minibandes en fonction des paramètres du SR. Mukhedji et *al.* [I.54] ont appliqué le modèle de Kronig-Penney pour développer un calcul de structure de bande sur le GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As. Ils ont obtenu une relation de dispersion dépendant de la période du SR.

Par sa nouvelle forme de conditions de continuité, Bastard [I.55] a présenté un résultat similaire à celui de Mukhidji et *al.* [I.54] sauf qu'il y a introduit, en plus, les masses des deux matériaux relatives aux puits et à la barrière ce qui a permis le confinement des états, et par conséquence, la diminution dans la largeur des minibandes.

Cho et *al.* [I.56] ont proposé un nouveau formalisme en terme de parité, des fonctions d'ondes aux bords de bande, en utilisant les conditions de continuité de Bastard. Ce modèle donne en plus de la structure de minibande, les fonctions enveloppes au bord de chaque bande du SR.

Pan et *al.* [I.57] ont montré la distinction entre les SR et les puits quantiques. Ils ont utilisé un modèle généralisant la théorie  $\vec{k} \cdot \vec{p}$  avec les mêmes conditions de continuité précédentes.

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

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

La largeur des minibandes  $\Delta E$  est une entité physique très importante. Elle est le facteur prédominant dans la rapidité de réponse des dispositifs électroniques, car le temps de l'ETR, noté  $\Delta t$ , est inversement proportionnel à  $\Delta E$  [I.57], en vertu du principe d'incertitude de Heisenberg:

$$\Delta t = \frac{\hbar}{\Delta E} \quad (\text{I.8})$$

Cette largeur gouverne aussi l'effet laser dans les SR en contrôlant le phénomène d'inversement de population [I.29,58-59] entre les minibandes existantes à l'intérieur des puits.

### 1.3.6.b. Effet tunnel résonant (ETR):

L'effet tunnel a fait l'objet de nombreuses études, aussi bien théoriques qu'expérimentales [I.60-61]. Il traduit la possibilité pour une particule élémentaire de traverser une barrière de potentiel, lorsque ceci reste impossible en mécanique classique. La fonction d'onde dans la barrière n'est pas nulle, et adopte le comportement d'une "onde évanescente" (Figure I.15).

L'effet tunnel est décrit par deux paramètres: Le premier est le coefficient de réflexion  $R$  qui désigne la probabilité de la particule quantique d'être réfléchi par la barrière de potentiel et le second le coefficient de transmission  $T$  désignant la probabilité de la particule quantique d'être transmise à travers celle-ci. Ces deux processus sont les deux seuls possibles; La somme de leur probabilité est donc égale à l'unité:  $R+T=1$ . Leur variation après la traversée d'une barrière de potentiel est schématisée sur la figure I.16.

L'ETR traduit, physiquement, un comportement ondulatoire des électrons en fonction des énergies présentant des résonances. Cette dernière possède une intensité de transmission 1, indépendamment des paramètres du SR, et en absence de champ électrique. Cette caractéristique importante a permis plusieurs applications technologiques dans le domaine optoélectronique et surtout dans les systèmes électroniques à réponse rapide où des oscillateurs à fréquences atteignant 700GHz ont été élaborés [I.62].

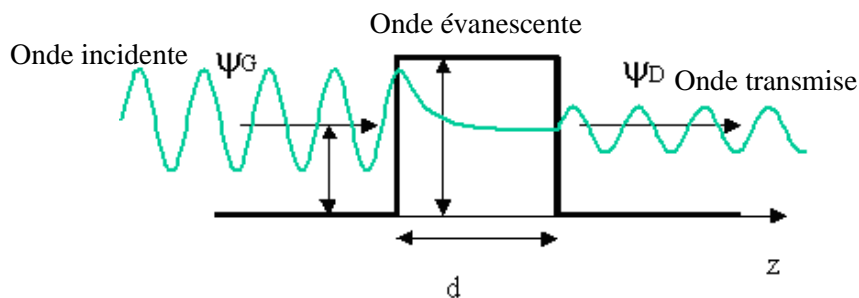
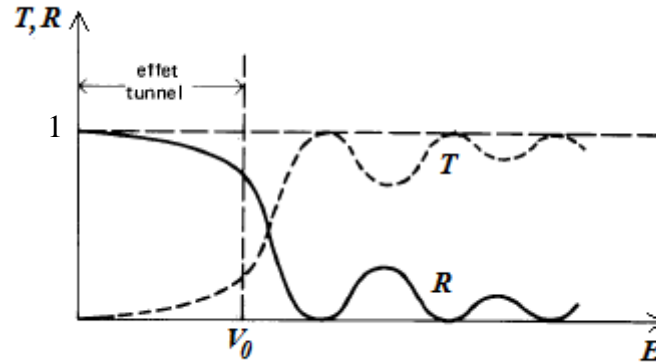


Fig.I.15: Effet tunnel.



**Fig.I.16:** Variation des coefficients de transmission  $T$  et de réflexion  $R$  avant et après traversée d'un potentiel par effet tunnel.

En conséquence du développement de la technologie de croissance, notamment la MBE, la littérature est devenue très riche en étude des structures explicitant cet effet. Ces études théoriques utilisent différents modèles et approximations: tels que la WKB (Wentzel-Kramers- Brillouin), qui est valable pour des potentiels variant faiblement en fonction de la position, or cette condition n'est plus valable dans le cas des barrières fines. C'est pourquoi, l'approche de la matrice de transfert [I.63] est la plus utilisée dans la détermination du coefficient  $T$ .

En 1983 Vassell et *al.* [I.64] ont utilisé le formalisme de la matrice de transfert dérivée de la résolution de l'équation de Schrödinger d'un électron de masse effective  $m^*$ , traversant une multitude de barrières pour étudier la variation de la transmission  $T$ . la discontinuité des masses effectives aux bords de chaque interface a été prise en compte. En 1987, Brennan et *al.* [I.65] ont étudié l'effet tunnel résonnant dans une structure GaAs/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  à travers la résolution de l'équation de Schrödinger en utilisant les fonctions d'Airy. En utilisant la matrice de transfert obtenue à partir des conditions de continuité pour deux paramétrisations de la masse constante et différente à l'interface, Allen et *al.* [I.66-67] ont confirmé les résultats de Vassell. Avec les conditions de continuité de Bastard aux interfaces, ils ont généralisé la résolution de l'équation de Schrödinger pour une multitude de barrières asymétriques. Leurs résultats sont en accord avec ceux d'Esaki et *al.* [I.68] et ceux de Vassell et *al.* [I.64]. Ces études ont permis de développer des techniques pour résoudre l'équation de Schrödinger avec un potentiel arbitraire: Khondker et *al.* [I.69] ont introduit une nouvelle méthode numérique pour calculer le coefficient  $T$  à travers un potentiel arbitraire. Zebda et *al.* [I.70] ont étudié une structure à double barrières, utilisant une méthode itérative basée sur une analogie avec un circuit électronique quadripolaire. Les solutions de l'équation de

Schrödinger sont données par les ondes planes. Les résultats obtenus sont en parfait accord avec ceux mentionnés plus haut [I.64].

Tan *et al.* [I.71] ont présenté une méthode originale pour étudier un profil de potentiel parabolique. Celle-ci est basée sur une discrétisation linéaire du potentiel, puis une résolution itérative utilisant des ondes contenant les fonctions d'Airy comme argument. Cette méthode est une généralisation de celles utilisées dans [I.72-73]. Leur calcul inclut aussi l'effet de discontinuité de la masse avec une variation linéaire dans le puits.

Une étude plus détaillée du coefficient de transmission électronique, pour différentes structures, est présentée dans le chapitre suivant.

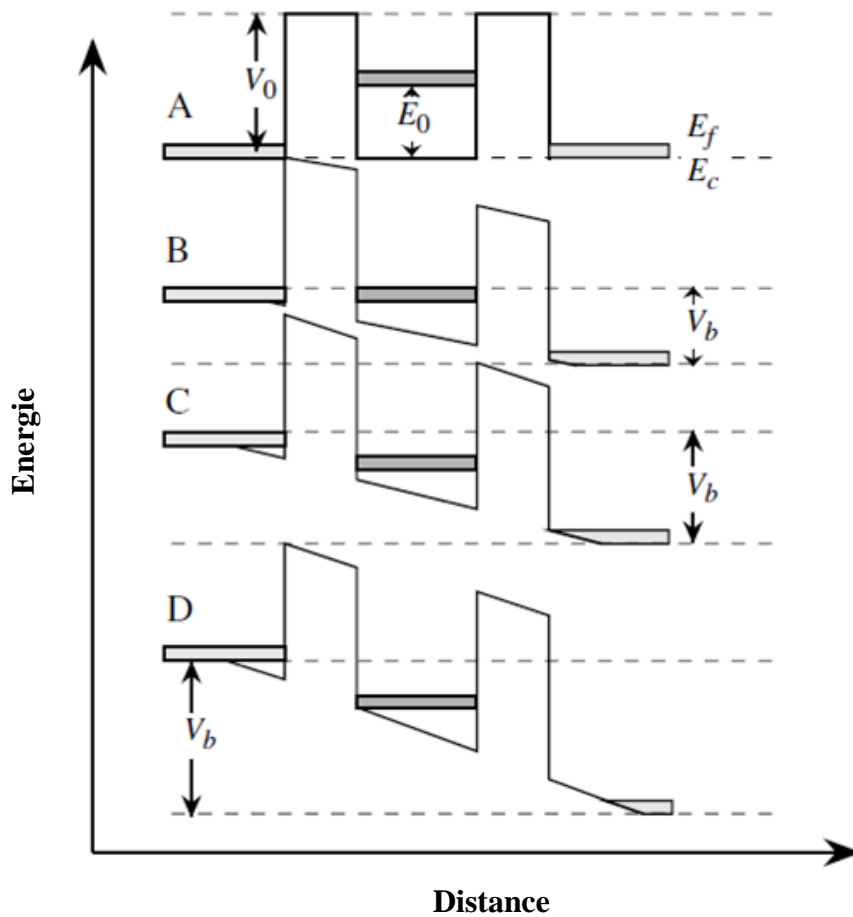
### ***1.3.6.c. Résistance différentielle négative:***

L'utilisation de l'effet tunnel pour obtenir un effet de résistance différentielle négative est connue depuis fort longtemps. Les progrès considérables des techniques de croissance cristalline ont permis le développement de dispositifs dipôles dont le principe de fonctionnement repose sur des effets purement quantiques. Les effets quantiques sont, effectivement, susceptibles de répondre très rapidement et de façon très sensible à la tension de commande et ils peuvent présenter de fortes nonlinéarités ce qui les rend attractifs pour les applications dans le domaine des ondes millimétriques et submillimétriques.

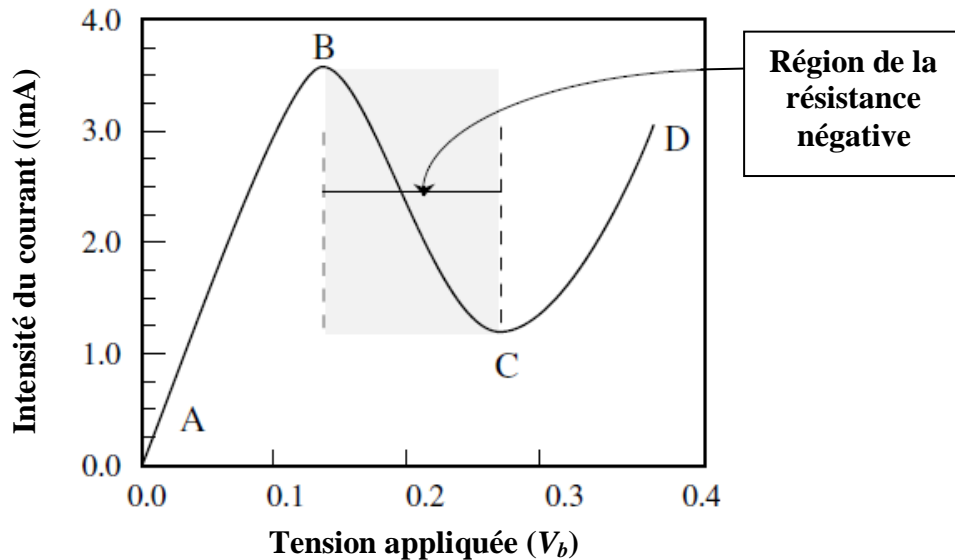
Bien que de nombreux dispositifs aient été proposés, nous nous limiterons ici à la diode à effet tunnel résonnant à double barrière. La diode comporte deux réservoirs d'électrons séparés par deux barrières et un puits de potentiel. La structure comporte donc quatre hétérojonctions entre le matériau possédant un gap élevé (par exemple GaAlAs) et le matériau à plus faible gap du puits et des réservoirs (par exemple GaAs). Si le puits est suffisamment étroit ( $<10\text{nm}$ ), les niveaux d'énergie possibles dans le puits sont quantifiés et généralement les diodes sont réalisées de telle façon que deux niveaux seulement soient permis [I.74]. L'hétérostructure à double barrière se comporte comme un filtre qui présente un pic de la transmission lorsque le premier niveau discret du puits est amené en regard du réservoir d'électrons de la cathode.

Le profil de potentiel type pour une structure à tunnel résonant est schématisé sur la figure I.17 [I.75]. L'opération de l'ETR est conceptuellement assimilée en examinant la figure. Comme il est aperçu, la structure à double barrières présentée possède un état quasi-lié d'énergie  $E_0$ . Si un électron venant de la gauche avec une énergie proche de celle de l'état  $E_0$ , il sera transmis. A une tension externe nulle (le cas A), aucun courant ne traverse la structure

puisque ne niveau permis dans le puits n'est pas aligné avec l'énergie de l'électron incident. Au cas B, lorsque l'énergie de Fermi est alignée avec l'état quasi-lié, la probabilité de franchir la double barrière est donc accrue et il en résulte une augmentation notable du courant. Dans le cas C: À plus forte tension, il n'y a plus correspondance entre les énergies des porteurs et le niveau quasi-lié du puits de potentiel, la transmission diminue et le courant décroît avec l'augmentation de la tension  $V_b$ . Le caractère discret des états de conduction entraîne ici l'existence d'une résistance différentielle négative (Figure I.18). En appliquant des valeurs de champ externe encore plus élevées, il y a une forte émission de courant thermoionique (thermionic), le courant augmente sensiblement (cas D).



**Fig.I.17:** Représentation de la structure à DB, sans tension externe (A), et avec une tension externe appliquée  $V_b$  (B), (C) et (D). [I.75]



**Fig.I.18:** Représentation de la résistance différentielle négative (RDN) dans la structure à DB, sans tension externe (A), et avec une tension externe appliquée  $V_b$  (B), (C) et (D) [I.75].

La résistance différentielle négative (RDN), est une conséquence directe de l'ETR. Elle peut être utilisée pour la réalisation d'oscillateurs très hautes fréquences fonctionnant en mode fondamental ou en mode harmonique. En effet elle permet la génération d'harmoniques impairs à polarisation nulle. Des diodes peuvent donc être utilisées comme multiplicateur de fréquences.

Plusieurs régions de RDN peuvent exister, dont les paramètres sont adaptés pour obtenir plusieurs minibandes à l'intérieur des puits [I.76].

La valeur de la RDN est toujours accompagnée par le rapport Pic-Vallée (PV), traduisant le rapport entre la valeur maximale du premier pic et celle minimale de la première vallée du courant [I.77]. Une grande valeur de ces deux paramètres physiques conditionne la qualité de l'ETR dans des dispositifs à hautes fréquences. Dans cette mesure l'intérêt technologique consiste à réaliser les conditions optimales pour augmenter la RDN et le rapport PV.

#### ***1.3.6.d. Temps de l'effet tunnel résonnant:***

Plusieurs études aussi bien théoriques qu'expérimentales sont orientées vers le calcul du temps de l'ETR. Elles ont pour objectif de mettre au point des méthodes ou des techniques permettant sa détermination et son optimisation. Ce temps est réellement lié à  $\tau_e$  la durée de vie de l'électron dans les états quasi-liés du puits [I.78].

Luryi et *al.* [I.79] ont fait une estimation semi-classique de  $\tau_e$  qui est d'ordre trois de celle mesurée par Sollner et *al.* [I.80]. Bahder et *al.* [I.81] ont appliqué l'approximation de la masse effective et ont résolu le problème dans le plan des énergies complexes ( $E=E_r+i\Gamma_e/2$ ) afin d'obtenir la durée de vie  $\tau_e$  (inversement proportionnelle à  $\Gamma_e$ ) d'un électron dans un état quasi-lié avec une énergie de résonance  $E_r$ .

Dans le même but, Zou et *al.* [I.78] ont présenté deux approches:

- L'approche hamiltonienne.
- La méthode des valeurs propres complexes.

Plusieurs définitions de  $t$  ont été présentées dans la littérature [I.82-86], car c'est un paramètre essentiel dans le contrôle de la rapidité de ces dispositifs. Chacune repose sur une hypothèse physiquement justifiée, mais la méthode la plus simple a été présentée par Fisher et *al.* [I.87], celle-ci est 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 transferts,  $t$  est donné par la relation (I.8) citée plus haut, tel que  $\Delta E$  traduit la largeur à mi-hauteur de la Lorentzienne.

D'autres approches ont été utilisées dans la détermination du temps de l'ETR, pour des applications technologiques telle que la réalisation de laser à SR [I.88-89].

### ***1.3.7. Applications:***

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

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

$$\lambda = \frac{hc}{\Delta E} \quad (\text{I.9})$$

Où  $\Delta E$  est la valeur du saut d'énergie (Joules),  $c$  est la vitesse de la lumière (m/s) et  $h$  la constante de planck (J.s).

L'observation d'une émission laser est autorisée par les transitions intrabandes dans les structures à puits quantiques des composés III-V. En fonction des composés

semiconducteurs, l'énergie de bande interdite peut couvrir le domaine du visible (ZnS, ZnSe, GaN, GaP...), du proche infrarouge (GaAlAs/GaAs, GaInAs/GaAlAs, InP, GaInAsP) du moyen infrarouge (GaSb, InAs, InAsSb...) ou de l'infrarouge (PbSe, PbS, HgCdTe...) [I.90].

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

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

L'étude des Lasers remonte à 1971, quand Kazarinov et *al.* [I.91] ont présenté une étude théorique sur le processus de génération et d'amplification de la lumière infrarouge dans les superréseaux à semiconducteurs.

Depuis, avec le développement des techniques de croissance des monocristaux telles que la MBE et la MOCVD (Metal Organic Chemical Vapor Deposition), plusieurs efforts ont été consacrés à leurs réalisations. Après, quelques applications ont suivi, comme l'étude des modulateurs de lumière infrarouge, des détecteurs infrarouges [I.92-94] et des diodes lasers [I.95-97].

En 1989, Helm et *al.* [I.98] ont démontré pour la première fois, l'émission de radiations infrarouges de 110, 70 et 50 $\mu\text{m}$ , basée sur des structures contenant 5 à 6 minibandes dans les puits quantiques. En s'inspirant de cette expérience Choe et *al.* [I.99] ont proposé la possibilité d'avoir des émissions lasers dont la longueur d'onde est de l'ordre de 3 à 5 $\mu\text{m}$ .

En 1991, Yang et *al.* [I.29] ont montré que l'inversement de population peut-être réalisé à travers un ETR entre interbande. Le concept de ce phénomène a été proposé pour la première fois, par Sweeny et *al.* [I.100], deux configurations basées sur des hétérostructures polytypes ont été présentées à cet effet, donnant une estimation de l'inversement de population égale à  $3 \cdot 10^{11} \text{cm}^{-2}$  avec une densité de courant de  $10 \text{A/cm}^2$ .

### ***1.3.7.a. Diode laser:***

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

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

Une diode laser est constituée d'un milieu générateur et amplificateur de lumière et d'une cavité optique résonnante. Le milieu amplificateur est constitué d'une jonction PN qui était initialement composée d'une homojonction et qui est actuellement représenté par une (ou plusieurs) hétérojonction de composés semiconducteurs à bandes interdites directes.

Dans ces hétérojonctions, on injecte un courant; Une recombinaison radiative des paires électron-trou s'y développe et se manifeste par la création de photons dans les matériaux actifs qui sont à l'origine de l'émission laser. Une double hétérojonction est composée de deux jonctions séparées par une couche active de faible épaisseur de type puits quantique dans ce cas. Les recombinaisons radiatives ont lieu dans cette couche qui est donc elle-même insérée entre deux couches de confinement qui font office de guide optique (Figure I.19). Ces couches de confinement ont une composition qui présente une énergie de bande interdite supérieure à celle caractérisant le matériau constituant la couche active.

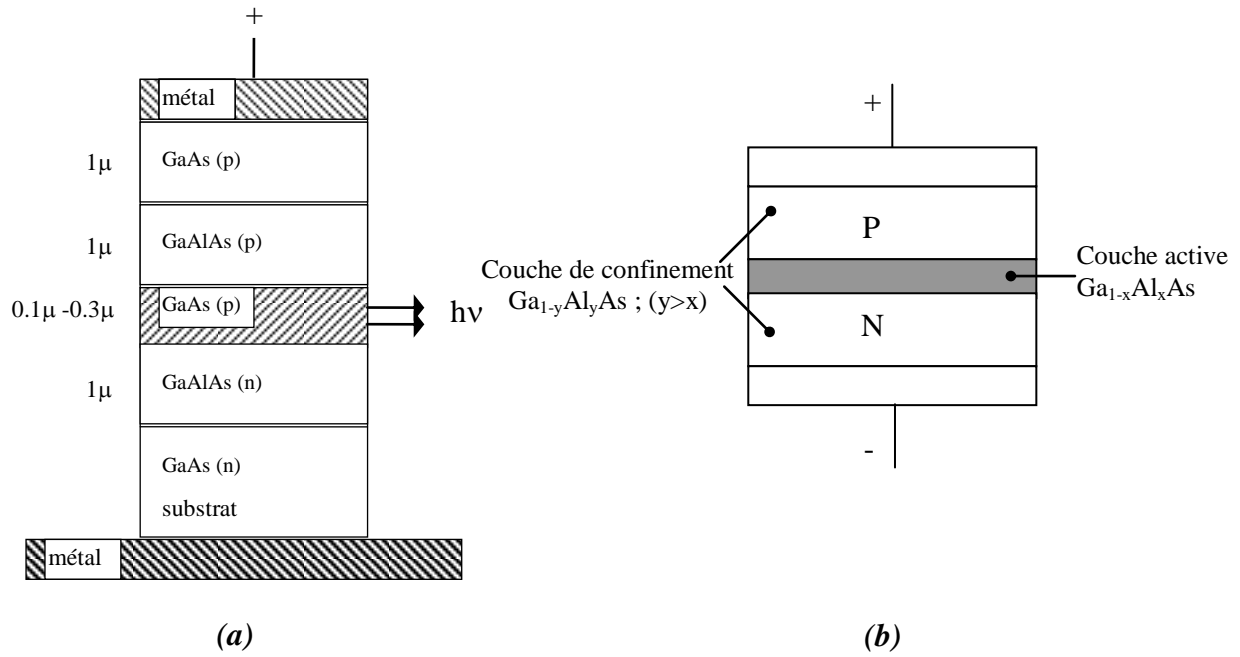
Pour les matériaux  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ , il suffit de modifier la composition en aluminium pour modifier l'énergie de la bande interdite. Ainsi l'insertion du milieu actif du type GaAs, entre deux couches de GaAlAs qui présente une énergie de bande interdite plus grande, permet de réaliser un guide optique puisque l'indice de réfraction de ces couches est inférieur à celui du composé binaire GaAs. Cette propriété a permis de réaliser un grand nombre de structures ayant pour objectif d'optimiser le confinement du mode optique.

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

- Accord possible de la longueur d'onde d'émission en adaptant à la croissance les paramètres géométriques de la structure et les compositions des matériaux.

- Réduction du courant de seuil et de son accroissement avec la température.

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



**Fig.1.19:** (a) Structure d'une diode laser au GaAs, (b) Représentation élémentaire d'une diode hétérojonction.

#### a) Composé GaAs/GaAlAs:

Les diodes laser peuvent être assemblées pour réaliser des barrettes commandées électriquement de façon collective. La multiplication des diodes sur un même substrat permet d'obtenir de fortes puissances à partir de composants miniatures. Ces lasers ont été initialement étudiés et développés aux États-Unis. Selon la structure, les diodes peuvent travailler en régime continu ou en régime impulsionnel. Les niveaux de puissance délivrés atteignent le kilowatt. Un tel arrangement est efficace pour exciter des lasers solides délivrant de fortes énergies ou pour réaliser des commandes optiques de circuits électriques. La diode laser du type GaAs/GaAlAs émet un rayonnement centré à  $\lambda=0,9\mu\text{m}$ , or, les télécommunications par fibres optiques nécessitent l'utilisation de diodes lasers émettant dans la gamme spectrale 1,1-1,6 μm, où les fibres optiques actuelles présentent un minimum d'absorption et de dispersion. Ces diodes lasers sont réalisées à partir du composé quaternaire  $Ga_xIn_{1-x}P_yAs_{1-y}$ . Un choix

judicieux des paramètres  $x$  et  $y$  permet de réaliser un accord de maille parfait avec le substrat de InP, et par suite d'obtenir une hétérostructure libre de toute contrainte.

### ***b) Composés GaInAs/GaAlAs:***

L'hétéroépitaxie de composés pseudomorphiques contraints par désadaptation de maille, de type GaInAs/GaAlAs, permet de réaliser des composants lasers semiconducteurs dont la longueur d'onde d'émission est comprise entre celles pouvant être délivrées par les composés à base de GaAs et de InP. Des densités de courant de seuil inférieures à  $100\text{mA/cm}^2$  et un rendement quantique différentiel externe de 62% ont été rapportés pour ce type de composant à température ambiante émettant à  $0,98\mu\text{m}$ . Une faible dépendance du courant seuil avec la température a été observée. Par ailleurs, le mécanisme de dégradation de ces composés diffère de celui observé sur les composés à base de GaAs, ce qui laisse présager une meilleure fiabilité. La source de pompe adaptée est obtenue à partir de l'alliage semiconducteur GaInAs/GaAlAs. Des considérations liées à l'emploi de structures à puits quantiques et/ou au contrôle des contraintes permettent d'optimiser la structure de diode vis-à-vis de la longueur d'onde devant être émise. Ces composés sont particulièrement adaptés pour exciter la terre rare  $\text{Er}^{3+}$  insérée dans des fibres optiques à base de silice afin de réaliser des amplificateurs optiques. Les avantages liés à l'emploi d'une telle source d'excitation sont la fiabilité de la pompe GaInAs/GaAlAs, la puissance optique délivrée relativement élevée et le faible courant de seuil. Deux grandeurs définissent les caractéristiques d'un amplificateur: Le coefficient de gain et la puissance de saturation. Ces deux grandeurs dépendent de la longueur d'onde du dispositif de pompage, de la composition (concentration en ions actifs) et des paramètres optogéométriques de la fibre. A titre d'exemple, il a été obtenu des coefficients de gain de l'ordre de  $10\text{dB/mW}$  en utilisant une diode GaInAs/GaAlAs pompant une fibre dopée. L'emploi d'une source de pompe à  $1,493\mu\text{m}$  permettait d'obtenir  $6\text{dB/mW}$ .

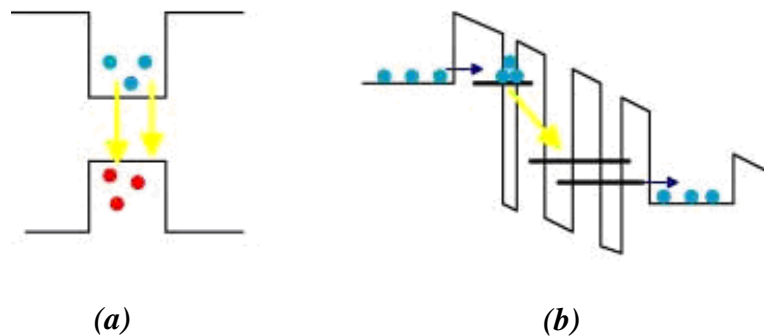
Dans ces applications, les caractères spécifiques aux diodes laser (rendement optique/électrique, fiabilité, faible coût, facilité de mise en œuvre) sont à terme les critères qui gouverneront le choix de l'intégration d'amplificateurs optiques dans les systèmes de télécommunications. De ces points de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

### I.3.7.b. Le laser à cascade quantique:

Le laser unipolaire à cascade quantique a été développé aux Bell-Laboratories dans l'équipe de F. Capasso ( $\lambda_{\text{émission}}=5\mu\text{m}$ ) [I.101]. 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 fallut plus de vingt ans avant qu'un tel dispositif soit finalement réalisé en 1994 [I.102].

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.20), 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.



**Fig.I.20:** Lasers à cascade quantique [I.103] (a) Laser interbande, (b) Laser intersousbande.

Dans le système InGaAs/InAlAs, il a été démontré la possibilité d'obtenir des longueurs d'onde d'émission allant de  $3,5\mu\text{m}$  [I.104] à  $24\mu\text{m}$  [I.105]. Les lasers à cascade quantique délivrent une puissance crête de l'ordre de quelques dizaines à quelques centaines de milliwatts [I.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  $16\mu\text{m}$

[I.108]. L'un des grands champs d'applications industrielles de ces sources infrarouges est la détection d'effluents liquides ou gazeux à l'état de trace [I.109].

#### **I.4. Conclusion:**

Les progrès considérables des techniques de croissance cristalline ont permis le développement des superréseaux dont le principe de fonctionnement repose sur des effets purement quantiques. Ces effets quantiques sont susceptibles de répondre très rapidement et de façon très sensible à la tension de commande, ils peuvent également présenter de fortes nonlinéarités ce qui les rend attractifs pour les applications dans le domaine des ondes millimétriques et submillimétriques.

Dans ce chapitre nous avons donné une définition des superréseaux, leurs différents types et classes, ainsi que leurs techniques de fabrication. Nous avons mis le point sur le phénomène sur lequel se base la transmission électronique dans de telles structures, à savoir, l'effet tunnel résonant (ETR). La transmission peut alors être évaluée au moyen du coefficient de transmission  $T$ . Une des conséquences directes et particulièrement intéressante de l'ETR est la "résistance négative différentielle".

Le comportement des ondes électroniques dans de telles structures est similaire à celui des ondes optiques. Les effets tels que le filtrage, les interférences et la diffraction peuvent s'opérer. Une classe de dispositif a été démontrée et utilisée pour des applications de haute performance, tels que les lasers à longueurs d'onde variables et les diodes à effet tunnel résonnant interbandes.

Afin de mieux cerner le comportement réel à l'intérieur de ces structures quantiques à base de semiconducteurs III-V, nous allons introduire un nouveau concept: celui prenant en considération les interactions entre électrons dans la structure. Une étude détaillée en est donnée dans le chapitre qui suit.

## I.5. Références:

- [1] L. Esaki and R. Tsu, IBM J. Res. Develop. 14, 61 (1970).
- [2] L. L. Chang and B. C. Giessen, "*Synthetic Modulated Structures*" edited by I. Academic Press, (1985).
- [3] K. Iijima, T. Terashima, Y. Bando, K. Kamigaki and H. Terauchi, App Phys. 72.. 2840-2845 (1992).
- [4] L. Marshall, Laser Focus World 34 (7) 139-143 (1998).
- [5] R. Ignatius, M. Ignatius Laser Focus World 34 (7) 139-143 (1998).
- [6] P. Kiréev, "*La physique des semiconducteurs*", 2<sup>ième</sup> édition Mir, Moscou (1975).
- [7] R. Castagné et all. "*Circuits Intégrés en arséniure de Gallium*". Physique, technologie et règles de conception. Masson et CINET ENST Paris, (1989).
- [8] S. Laval ,"*Physique des semiconducteurs III-V*", École d'été d'optoélectronique (2002).
- [9] H. Mathieu, "*Physique des semiconducteurs et des composants électroniques*", Masson, (1987).
- [10] G. Bastard, "*Wave mechanics applied to semiconductor heterostructures*", Les éditions de physique, Paris, (1988).
- [11] P. Y. YU, "*Fundamentals of semiconductors Physics and materials properties*". Manuel Cardona, Springer (2001).
- [12] C. Kittel, "*Introduction a la physique de l'état solide*", Dunod (1972)
- [13] J. S. Blakemore, "*Semiconducting and other major properties of gallium arsenide*", J. Appl. Phys. 53(10) October (1982).
- [14] F. Levy, "*Traité des matériaux (18): Physique et technologie des semiconducteurs*".
- [15] O. Krebs and P. Voisin, Phys. Rev. Lett. 77, 1829 (1996).
- [16] Y. P. Vashni, Physica, 34 (1), 149 (1967).
- [17] H. Mathieu,"*Physique des semiconducteurs et composants électroniques*", Édition Masson, (1996).
- [18] J. H. Davies. "*The physics of low-dimensional semiconductors*", Cambridge University Press, (1998).
- [19] D. W. M. DuMond and J. P. Youtz. J. App. Phys. 11, 357 (1940).
- [20] Voir, Recherche n° 283 p42 Janvier (1996).
- [21] A. Chomatte, B. Devraud, P. Auvray, A. Regreny, J. App. Phys. 59, 3835 (1986).
- [22] F. Rinaldi, Annual Report, Optoelectronics Department, University of Ulm (2002).

- [23] Y. Cho and J. Arthur, *Progr. Solid Stat. Chem.* 30, 157 (1975).
- [24] D. V. Morgan and K. Boar, "*An introduction to semiconductor technology*", 2nd edition, John Wiley & sons, (1990).
- [25] L. C. Witkowsky, T. J. Drummond, C. M. S. Stanchak, H. Morkoç, *Applied Physics Letters* 37, 1033 (1980).
- [26] M. Van Schilfgaarde, A. Sher and A. B. Chen. *InTlSb. Phys. Lett.* 62 (16), 1857-1859, (1993).
- [27] A. E. Blakeslee and C. F. Alliorra, *IBM. J. Res. Dev.* 14, 686(1970).
- [28] M. Manaserit, *App. Phys. Lett.* 12, 156 (1968).
- [29] R. Q. Yang and J. M. Xu, *App. Phys. Lett.* 59, 181 (1991).
- [30] L. Esaki, L. L. Chang, and E. E. Mendez, *Jpn. J. App. Phys.* 20, L529 (1981).
- [31] N. Navel and B. Laikhtman, *Phys. Rev. B* 49, 16 829 (1994).
- [32] H. Toyoshima, Y. Ando, A. Okamoto, and T. Itoh, *Jpn. J. App. Phys.* 25, L786 (1986).
- [33] T. P. E. Broekaert, W. Lee, and C. G. Fonstad, *App. Phys. Lett.* 53, 1545 (1988).
- [34] F. Capasso, S. Luryi, W. T. Sang, C. G. Bethea, and B. F. Levine, *Phys. Rev. Lett.* 51, 2318 (1983).
- [35] J. A. Brum, P. Voisin and G. Bastard, *Phys. Rev. B* 33, 1063 (1986).
- [36] C. L. Allyn, A. C. Gossard and W. Wiegmann, *App. Phys. Lett.* 36, 373 (1980).
- [37] F. Capasso, W. T. Sang, and G. F. Williams, *IEEE, Trans. Electron. Devices* 30, 381 (1983).
- [38] A. K. Sasaki, *Phys. Rev. B* 30, 7016 (1984).
- [39] Y. Bennabi, Mémoire de magister "*Effets d'interfaces dégradées sur la structure de bandes et les propriétés de transport par effet tunnel résonnant dans les semiconducteurs*". USTO (1996).
- [40] B. Simon, *Adv. App. Math.* 3, 463 (1982).
- [41] D. Levine, P. J. Steinhard, and R. Clark, *Phys. Rev. Lett.* 53, 2477 (1984).
- [42] R. Merlin, K. Bajema, and R. Clark, *Phys. Rev. Lett.* 55, 1768 (1985).
- [43] M. G. Burt, *J. Phys. Cond. Matt.* 4, L665 (1992).
- [44] L. Esaki and R. Tsu, *IBM J. Res. Note, Rc*, 2418 (1969).
- [45] H. C. Casey Jr. And M. K. Ploog, A. Fisher, and H. Kunzel, *J. Electrochem. Soc.* 1281, 400 (1981).
- [46] E. F. Shubert, J. E. Cunningham, and W. T. Sang, *Phys. Rev. B* 36, 1348 (1987).
- [47] D. L. Smith and C. Mailhiot, *Rev. Mod. Phys.* 62, 173 (1990).

- 
- [48] G. Bastard, "*Wave Mechanics Applied to Semiconductor Heterostructures*", Édition de Physique (1989).
- [49] K. K. Choi and B. F. Levine, Phys. Rev. B 35, 4172 (1987).
- [50] V. J. Goldman, D. C. Tsu, and J. E. Cunningham, Phys. Rev. Lett. 58, 1256 (1987).
- [51] H.L. Stormer, Phys. Rev. Lett. 56, 85 (1985).
- [52] L. Esaki and L. L. Chang, Phys. Rev. Lett. 33, 493 (1974).
- [53] K. K. Choi and B. F. Levine, Phys. Rev. B 35, 4172 (1987).
- [54] D. Mukherdji and B. R. Nag, Phys. Rev. B 12, 4338 (1975).
- [55] G. Bastard, Phys. Rev. B 24, 5693 (1981).
- [56] H. S. Cho and P.R. Prucnaul, Phys. Rev. B 36, 3237 (1987).
- [57] S. H. Pan and S. Feng, Phys. Rev. B 44, 5668 (1991).
- [58] R. Q. Yang and J. M. Xu, Phys. Rev. B 46, 6969 (1992).
- [59] R. Q. Yang, J. M. Xu, and M. Sweeny, Phys. Rev. B 50, 7474 (1994).
- [60] L. L. Chang, L. Esaki, and R. Tsu, App. Phys. Lett. 24, 593 (1974).
- [61] S. Luryi, App. Phys. Lett. 47, 490 (1985).
- [62] E. B. Brown, App. Phys. Lett. 58, 2291 (1991).
- [63] K. Forest and P. H. Meijer, IEEE J. Quant. Electron. 26, 1067 (1990).
- [64] M. O. Vassell, J. Lee, and H. F. Lokwood, J. App. Phys. 54, 5206 (1983).
- [65] K. F. Brennan and C. J. Summers, J. App. Phys. 61, 614 (1987).
- [66] S. S. Allen and S. L. Richardson, Phys. Rev. B 50, 11 693 (1994).
- [67] S. S. Allen and S. L. Richardson, J. App. Phys. 79, 886 (1996).
- [68] R. Tsu and L. Esaki, App. Phys. Lett. 22, 562 (1973).
- [69] A. N. Khonder, M. R. Khan, and A. F. N. Anwar, J. App. Phys. 63, 5192 (1988).
- [70] Y. Zebda and A. M. Kan'an, J. App. Phys. 72, 559 (1992).
- [71] A. M. Tan, J. M. Xu, and S. Zukotynski, J. App. Phys. 67, 3011 (1990).
- [72] A. K. Ghatak, I. C. Goyal, and R. L. Gallawa, IEEE J. Quant. Electron 26, 305 (1990).
- [73] H. Ohnishi, T. Inata, S. Muto, N. Yokoyama, and A. Shibatomi, App. Phys. Lett. 49, 1248 (1986).
- [74] M. Savelli, D. Gasquet et B. Orsal. "*Physique des dispositifs électroniques*", [E 1 100], Traité électronique (1996).
- [75] U. K. Mishra et J. Singh, "*Semiconductor Device Physics and Design*", Édition Springer (2008).
- [76] H. T. Grahn, H. Shneider, and K. V. Klitzing, Phys. Rev. B 41, 2890 (1990).
- [77] J. J. Shih, H. C. Huong and G. Y. Wu, Phys. Rev. B 50, 2399 (1994).

- 
- [78] N. Zou, J. Rammer, and K. A. Chao, Phys. Rev. B 24, 15 912 (1992).
- [79] S. Luryi, App. Phys. Lett. 47, 490 (1985).
- [80] T. C. G. Sollner, W. D. Goodhue, P. E. Tannanwald, C. D. Parker, and D. D. Peck, App. Phys. Lett. 43, 588 (1985).
- [81] T. B. Bahder, C. A. Morrison, and J. D. Bruno, App. Phys. Lett. 51, 1089 (1987).
- [82] R. Landauer and T. Martin, Rev. Mod. Phys. 66, 217 (1994)
- [83] E. H. Hauge and J. A. Stonveng, Rev. Mod. Phys. 61, 917 (1989).
- [84] A.P. Jauho, "*Hot Carriers Semiconductor Nanostructures*", Edited by J. Shah (Academic, New York, 1992), p. 121.
- [85] C. Juang, Phys. Rev. B 44,10706 (1991).
- [86] C. R. Fernando and W. R. Frensley, J. App. Phys. 76, 2881 (1994).
- [87] D. J. Fisher and C. Zhang, J. App. Phys. 76, 606 (1994).
- [88] J. W. Choe, H. J. Hwang, A. G. U. Perera, S. G. Matsik, and M. H. Francombe, J. App. Phys. 79, 7510 (1996).
- [89] N. Mingo, J. A. Porto, and J. Sanchez-Dehesa, Phys. Rev. B 50, 11884 (1994).
- [90] G. Brassart, J. L. Meyzonnette et J. P. Pocholle, "*Sources laser*", Tech. Ing. E 4020 (1996) .
- [91] R. F. Kazarinov and R. A. Suris, Sov. Semicond. 5, 707 (1971); 6, 120 (1972).
- [92] S. Smith, L. C. Chiu, S. Margalit, A. Yariv, and A. Y. Cho, J. Vac. Sci. Technol. B 1, 376 (1983).
- [93] D. Coon and R. P. G. Karunasiri, App. Phys. Lett. 45, 649 (1984).
- [94] B. F. Levin, K. K. Choi, C. G. Bethea, J. Walker, and R. J. Malik, App. Phys. Lett. 50, 1092 (1987).
- [95] F. Capasso, K. Mohammed, and A. Y Cho, App. Phys. Lett. 48, 478 (1986).
- [96] P. F. Yuh and K. L. Wang, App. Phys. Lett. 51, 1404 (1987).
- [97] H. C. Liu, J. App. Phys. 63, 2856 (1988).
- [98] M. Helm, P. England, E. Colas, F. De Rosa, and S. J. Allen, Jr. Phys. Rev. Lett. 63, 74 (1989).
- [99] J. W. Choe, A. G. U. Perera, M. H. Francombe, and D. D. Coon, App. Phys. Lett. 59, 54 (1991).
- [100] M. Sweeny and J. M. Xu, App. Phys. Lett. 54, 546 (1989).
- [101] J. Faist, F. Capasso "*Quantum Cascade Laser*", Mc Graw-Hill Yearbook of Science and Technology, p265-267 (1997).

- [102] J. Faist, F. Capasso, D. L. Sivco, C. Sirtori, A. L. Hutchinson, and A. Y. Cho "*Quantum Cascade Laser*", *Science*, 264, 553, (1994).
- [103] Romuald Hourdé, "*Dispositifs électronique et optique à semiconducteurs*". Science et génie des matériaux, 2006-2007.
- [104] J. Faist et *al.*, *App. Phys. Lett.* Vol 72, N° 6, 680 (1996).
- [105] R. Colombelli et al. *App. Phys. Lett.* 78, 2620 (2001).
- [106] C. Gmachl et *al.*, *App. Phys. Letters*, 72, N° 24, 3130 (1998).
- [107] C. Gmachl et *al.*, "*Recent results in quantum cascade lasers and intersubband transitions in GaN/AlGaN multiple quantum wells*", *Physica E* (2002).
- [108] D. Hofstetter et *al.*, *App. Phys. Lett.*, 78, 1964 (2001).
- [109] D. Soinnenfroh et *al.*, *Applied Optics*, 40, 812 (2001).

*Chapitre II:*

**APPROXIMATIONS, MODÈLES ET  
FORMALISMES:  
APPLICATION AU CAS NONLINÉAIRE**

## II.1. Introduction:

Depuis l'avènement des superréseaux (SR), plusieurs méthodes d'analyse et de calcul basées sur des modèles approchés plus ou moins élaborés ont été utilisées. L'efficacité de ces méthodes dépend de trois critères essentiels: la simplicité, la rapidité et la généralité. Cette dernière englobe la forme aléatoire du profil de potentiel ainsi que le nombre important de barrières constituant la structure.

La théorie de l'ETR à travers une structure à multicouches a été proposée pour la première fois par Esaki et Tsu [II.1] au début des années soixante-dix. Ils ont présenté un calcul du coefficient de transmission d'une structure constituée par une multitude de barrières rectangulaires soumises à une tension extérieure uniforme. Cette étude originale a servi de base à l'ensemble des travaux qui ont suivi. Toutes les méthodes élaborées présentent une faiblesse devant la variation de la masse effective en fonction de la position selon le potentiel considéré à travers la variation de la fraction molaire.

Ce chapitre traite des différents formalismes existants pour l'étude des hétérostructures qui permettent, essentiellement, de donner les propriétés de transport électroniques. Dans un premier temps, nous exposerons les trois méthodes utilisées pour la résolution de l'équation de Schrödinger linéaire, c.à.d. sans prendre en considération une quelconque interaction électronique. Ces formalismes sont bien connus et étudiés, et donnent lieu à des résultats satisfaisants. Nous pouvons classer ces méthodes en deux catégories principales: Les méthodes exactes, tel que le formalisme utilisant les fonctions d'Airy, adapté plus particulièrement à l'étude des profils de potentiels de formes linéaires [II.2-10], et celles approchées telles que des ondes planes [II.11-14], appliquées à des potentiels de forme arbitraires. Toutes deux doivent être accompagnées par une analyse par la méthode de la matrice de transfert [II.15-16]. L'étude appliquée sur le superréseau GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As, moyennant les méthodes citées ici donnent lieu à des résultats que nous exposerons dans le dernier chapitre.

Dans un second temps nous présenterons la formulation mathématique de la méthode utilisée pour l'étude d'hétérostructures adaptée pour le cas nonlinéaire. Un troisième terme à ainsi été introduit dans l'équation de Schrödinger initiale, traduisant l'interaction entre deux électrons voisins se propageant simultanément dans la structure. Dans tous les cas, la résolution via les méthodes citées précédemment, exige l'utilisation de quelques

approximations, la plus importante étant l'approximation de la masse effective, et des conditions de continuités aux interfaces puits/barrière [II.17-19].

## II.2. Approximations de base:

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

La masse effective est une notion utilisée en physique du solide pour l'étude du transport des électrons. L'hamiltonien d'un électron dans un cristal soumis à un champ extérieur s'écrit:

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

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, l'approximation de la masse effective permet d'obtenir des solutions approchées. Ainsi, plutôt que de décrire l'électron comme une particule libre de masse fixe  $m_0$  et évoluant dans un potentiel donné, on le décrit comme une quasi-particule libre (un quasi-électron) dont la masse est notée  $m_e^*$ : C'est la masse effective. Cette dernière varie avec l'énergie.

En tenant compte de l'approximation parabolique de la bande de conduction et de valence au voisinage de leurs extremums ( $k=k_0$ ) [II.20], la masse effective de l'électron peut être donnée, par la relation suivante:

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

Où les indices  $i$  et  $j$  permettent de repérer les composantes  $x$ ,  $y$  et  $z$  des vecteurs d'ondes. La masse effective obtenue est donc sous forme de tenseur, ce qui revient à dire qu'elle dépend de la direction dans laquelle l'électron se propage.

Pour une bande de conduction suffisamment symétrique afin que le paraboloïde soit de révolution, la masse effective se réduit à:

$$\frac{1}{m_e^*} = \frac{1}{\hbar^2} \left( \frac{d^2 E(k)}{dk^2} \right) \Bigg|_{k=k_0} \quad (\text{II.3})$$

Dans la plupart des cas, en physique des semiconducteurs, on n'est intéressés que par les électrons ayant des énergies proches des bords de bandes permises, car la masse effective

varie relativement peu avec  $k$  : on la considère presque toujours comme un scalaire (matériau idéal et isotrope).

Théoriquement, le terme  $\frac{-\hbar^2}{2m_0}\Delta + V(\vec{r})$  dans l'équation (II.1) est alors remplacé par  $\frac{-\hbar^2}{2m_e^*}\Delta + E_c$ , où  $E_c$  est le minimum de la bande de conduction. De manière générale, les composantes de la masse effective peuvent être mesurées par diverses méthodes telle que la résonance cyclotronique [II.21].

### II.2.2. Conditions de continuité de Bastard:

Les propriétés de discontinuité de la masse effective au niveau des interfaces posent un problème, celui d'écrire les conditions de continuité (C.C.) de l'équation de Schrödinger à l'interface et de pouvoir appliquer l'AME malgré sa dépendance de la position, dans le but de déterminer les solutions de l'équation différentielle. Dans la littérature, plusieurs formes d'écritures ne prenant pas compte la discontinuité de la masse effective aux interfaces ont été proposées [II.15,22-23]. Bastard [II.24] a par la suite, introduit une forme intuitive plus simple de C.C. vérifiée par la fonction d'onde de l'électron et sa première dérivée.

Appliquées à la fonction d'onde d'un électron se propageant dans un cristal périodique et arrivant sur une interface abrupte, les C.C. de Bastard s'écrivent comme suit:

$$\psi(z^-) = \psi(z^+) \quad (\text{II.4})$$

$$\left(\frac{1}{m_a}\right) \cdot \frac{\partial\psi(z^-)}{\partial z} = \left(\frac{1}{m_b}\right) \cdot \frac{\partial\psi(z^+)}{\partial z} \quad (\text{II.5})$$

Où  $m_a$  et  $m_b$  sont respectivement les masses effectives de l'électron dans deux régions adjacentes, notées  $a$  et  $b$ .  $\psi(z^-)$  et  $\psi(z^+)$  sont les fonctions d'ondes de l'électron relatives à ces mêmes régions. L'équation (II.4) traduit ainsi la continuité de la fonction d'onde électronique à une interface abrupte (Figure II.1), tandis que (II.5) repose sur la continuité de la densité de courant de conduction lors du passage de la première région vers la seconde. Ces C.C. sont effectuées en supposant découpler les deux mouvements de l'électron, transversal dans le plan  $(xOy)$  et longitudinal dans la direction  $(Oz)$ .

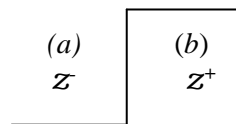


Fig.II.1: Interface abrupte entre deux régions.

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

$$u_A(\vec{r}_0) \approx u_B(\vec{r}_0) \quad (\text{II.6})$$

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 représentés sur la figure II.1 par les régions *a* et *b* respectivement, à la position d'interface  $\vec{r}_0$ : C'est le GasAs et AlGaAs dans notre cas. Cette écriture a été confirmée expérimentalement par Galbraith et *al.* [II.25]. L'application de cette forme empirique de C.C. a apporté des corrections importantes dans l'étude de l'ETR [II.4-8,26-28].

### II.3. Calcul du coefficient de transmission:

Le coefficient de transmission  $T$  est le facteur le plus déterminant dans l'ETR car il le mesure quantitativement. En traçant la courbe de  $T$  en fonction de l'énergie de la particule, plusieurs grandeurs physiques peuvent être déterminées, comme les énergies de résonances pour lesquelles le coefficient  $T$  décrit des pics caractérisant le passage de la particule par effet tunnel, ainsi que le temps de transit, c.à.d. temps de l'ETR 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.

Connaissant la valeur de  $T$ , la densité de courant  $J$  peut également être calculée, d'où la démonstration de l'existence de la résistance différentielle négative, paramètre essentiel dans les oscillateurs et les systèmes travaillant en hautes-fréquences.

La forme des pics du coefficient de transmission 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.

Ainsi, la détermination du coefficient  $T$  pour les structures à ETR présente un intérêt physique considérable, c'est pourquoi différentes types de méthodes sont décrites dans ce paragraphe pour son évaluation : L'une exacte basée sur les fonctions d'Airy [II.2-10] utilisée dans les systèmes à profil linéaire et une autre approchée utilisée pour des formes de profil arbitraires, et dans laquelle les solutions de l'équation de Schrödinger sont données par les ondes planes [II.11-14]. Toutes deux sont accompagnées par le formalisme de la matrice de transfert [II.15-16].

Supposons une particule d'énergie  $E$  incidente sur une ou plusieurs barrières de potentiel de formes et de hauteurs arbitraires. Son comportement est décrit par l'équation de Schrödinger. Plus particulièrement, la fonction d'onde à l'intérieur et à l'extérieur des barrières, les valeurs propres de l'énergie, les énergies de résonances, les coefficients de transmission et de réflexion, ainsi que la probabilité de la densité de courant transmise et réfléchi, peuvent être calculés. Dans la problématique du transport par effet tunnel résonant (ETR) dans les SR, les caractéristiques essentielles sont unidimensionnelles: Les SR sont formés de substrats parallèles et alternés suivant une direction, celle de l'axe de croissance, le plus souvent noté ( $Oz$ ). Le profil de potentiel s'étend alors, suivant la direction  $z$ . L'équation de Schrödinger utilisée pour décrire le mouvement de la particule tunnel est donnée par [II.18,29-31]:

$$\frac{-\hbar^2}{2m^*(z)} \cdot \frac{d^2\psi(z)}{dz^2} + [V(z) - E] \cdot \psi(z) = 0 \quad (\text{II.7})$$

Où  $\psi(z)$  est la fonction d'onde de l'électron,  $V(z)$  est le potentiel du milieu et  $m^*(z)$  est la masse effective de l'électron incident suivant la direction de l'axe ( $Oz$ ) pour chaque substrat.

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 bande de conduction ( $BC$ ) du matériau jouant le rôle de puits.

La résolution de l'équation (II.7) utilisant les approximations et les hypothèses citées précédemment permet:

- 1- Le calcul de la relation de dispersion des énergies en fonction du vecteur d'onde du SR procédant par deux méthodes différentes: Le modèle de Kronig-Penney [II.29] et celui de la matrice de transfert [II.15-16].
- 2- La détermination du coefficient de transmission  $T$  à partir d'une résolution exacte de l'équation (II.7) basée sur les fonctions d'Airy [II.2-10], et une autre approche utilisant les ondes planes [II.11-14]. Cette dernière est appliquée à différents profils de potentiel.
- 3- L'obtention du temps de l'ETR.

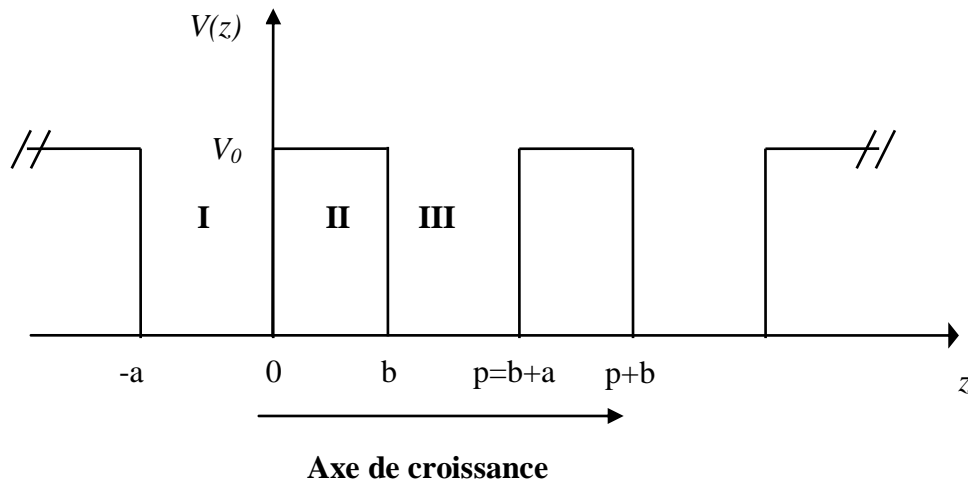
Les énergies sont généralement considérées inférieures à la hauteur des barrières et l'étude se restreint au SR GaAs /Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As de type I selon l'axe de croissance [001] [II.32-33]. Ce choix justifie le fait de pouvoir uniquement considérer la  $BC$  due aux larges gaps dans les deux matériaux.

### II.3.1. Modèle de la matrice de transfert:

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

La technique des matrices de transfert est basée sur une représentation mathématique à la fois élégante et simple. Elle donne dans un premier temps la forme des fonctions d'onde et permet l'évaluation de la transmission électronique dans un SR à N régions. L'interprétation physique est également directe, elle introduit la réponse du système en terme de matrice obtenue à partir d'une relation linéaire liant les fonctions d'ondes et leur premières dérivées au niveau des interfaces [II.15,34], et ceux, en appliquant les C.C. de Bastard détaillées plus haut.

En considérant un profil de potentiel périodique constitué d'une succession de puits et de barrières de formes rectangulaires (Figure II.2), les fonctions d'ondes dans les régions (I), (II) et (III) sont données comme suit:



**Fig.II.2:** Profil de potentiel d'un SR à puits et à barrières rectangulaires, où  $a$  est la largeur du puits,  $b$  l'épaisseur de la barrière et  $p=a+b$  est la période du SR.

#### - Région I:

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

Où:  $V(z)=0$  et  $m^*(z)=m_1=m_a$  (II.9)

#### - Région II:

$$\psi_{II}(z) = C \cdot e^{ik_2z} + D \cdot e^{-ik_2z} \quad (\text{II.10})$$

Où:  $V(z)=V_0$  et  $m^*(z)=m_2=m_b$  (II.11)

**- Région III:**

$$\psi_{III}(z) = E \cdot e^{ik_3z} + F \cdot e^{-ik_3z} \quad (\text{II.12})$$

Où:  $V(z)=0$  et  $m^*(z)=m_3=m_a$  (II.13)

Avec  $k_1 = k_3 = \sqrt{\frac{2m_a E}{\hbar^2}}$  et  $k_2 = \sqrt{\frac{2m_b (E-V_0)}{\hbar^2}}$  (II.14) les nombres d'onde dans les régions (I), (III) et (II) respectivement. Les fonctions d'onde électroniques dans les différentes régions sont sous formes planes, dont  $A, B, C, D, E$  et  $F$  sont les amplitudes; Elles sont données par les relations (II.8), (II.10) et (II.12).

$V(z)$  est la valeur du potentiel. Il est considéré nul dans les puits et constant et égal à  $V_0$  dans les barrières.

Les C.C. de Bastard appliquées aux interfaces des régions (I), (II) et (III) s'écrivent comme suit:

En  $z=z_I=0$ :

$$\psi_I(0) = \psi_{II}(0) \quad (\text{II.15})$$

$$\frac{1}{m_a} \psi'_I(0) = \frac{1}{m_b} \psi'_{II}(0) \quad (\text{II.16})$$

Ce qui donne:

$$S_I(0) \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = S_{II}(0) \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} \quad (\text{II.17})$$

Avec:

$$S_I(z) = \begin{pmatrix} e^{ik_1z} & e^{-ik_1z} \\ \frac{ik_1}{m_a} e^{ik_1z} & \frac{-ik_1}{m_a} e^{-ik_1z} \end{pmatrix} \text{ et } S_{II}(z) = \begin{pmatrix} e^{ik_2z} & e^{-ik_2z} \\ \frac{ik_2}{m_b} e^{ik_2z} & \frac{-ik_2}{m_b} e^{-ik_2z} \end{pmatrix} \quad (\text{II.18})$$

D'où:

$$\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = S_I^{-1}(0) \cdot S_{II}(0) \cdot \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} \quad (\text{II.19})$$

En  $z=z_2=b$ , nous obtenons un résultat similaire:

$$\begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} = S_{II}^{-1}(b) \cdot S_{III}(b) \cdot \begin{pmatrix} E \\ F \end{pmatrix} \quad (\text{II.20})$$

En remplaçant (II.20) dans (II.19), il s'en suit:

$$\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = M \cdot \begin{pmatrix} E \\ F \end{pmatrix} \quad (\text{II.21})$$

Avec: 
$$M = S_I^{-1}(0) \cdot S_{II}(0) \cdot S_{II}^{-1}(b) \cdot S_{III}(b) \quad (\text{II.22})$$

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

$$M = S_I^{-1}(0) \cdot S_{II}(0) \cdot S_{II}^{-1}(b) \cdot S_I(b) \quad (\text{II.23})$$

$M$  est une matrice carrée (2x2) appelée *matrice de transfert*. Les coefficients ( $M_{ij}$ ) contiennent toutes les informations de la structure du SR au niveau des interfaces.

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

$$D_{II}(b-0) = S_{II}(0) \cdot S_{II}^{-1}(b) = \begin{pmatrix} \cos[k_2 b] & -\frac{m_b}{k_2} \cdot \sin[k_2 b] \\ \frac{k_2}{m_b} \cdot \sin[k_2 b] & \cos[k_2 b] \end{pmatrix} \quad (\text{II.24})$$

L'équation (II.23) s'écrit alors sous la forme:

$$M = S_I^{-1}(0) \cdot D_{II}(b-0) \cdot S_I(b) \quad (\text{II.25})$$

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

$$M = \frac{1}{2} \cdot \frac{m_1}{ik_1} \cdot \begin{pmatrix} -\frac{ik_1}{m_1} \cdot e^{-ik_1 z_1} & -e^{-ik_1 z_1} \\ -\frac{ik_1}{m_1} \cdot e^{ik_1 z_1} & e^{ik_1 z_1} \end{pmatrix} \cdot D_{II}(b-0) \cdot \begin{pmatrix} e^{ik_3 z_2} & e^{-k_3 z_2} \\ \frac{ik_1}{m_3} \cdot e^{ik_3 z_2} & -\frac{ik_1}{m_3} \cdot e^{-ik_3 z_2} \end{pmatrix} \quad (\text{II.26})$$

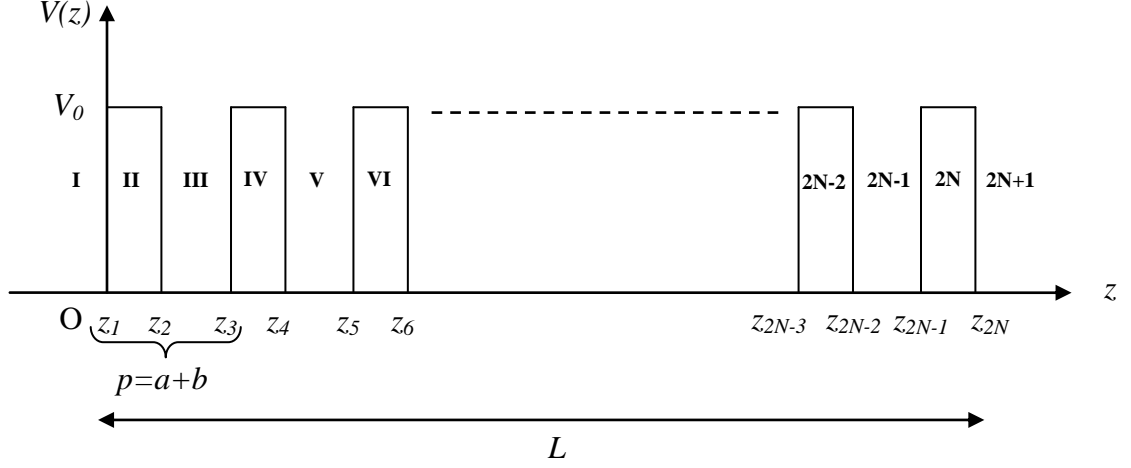
Par translation des  $z$  vers l'origine  $O$ , et puisque  $k_I=k_3$ , et  $m_I=m_3=m_a$  donc:

$$M = \frac{1}{2} \cdot \frac{m_a}{ik_1} \cdot \begin{pmatrix} -\frac{ik_1}{m_a} & -1 \\ -\frac{ik_1}{m_a} & 1 \end{pmatrix} \cdot D_{II}(b-0) \cdot \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ \frac{ik_1}{m_a} & -\frac{ik_1}{m_a} \end{pmatrix} \quad (\text{II.27})$$

L'équation obtenue en (II.27) est la matrice de transfert à travers la barrière rectangulaire d'épaisseur  $b$  (Région (II)).

### II.3.1.b. Matrice de transfert pour un système à $N$ barrières rectangulaires:

Considérons maintenant  $N$  barrières rectangulaires,  $(N-1)$  puits considérés à l'intérieur de la structure de longueur  $L$ , et dont la période est  $p=a+b$  (Figure II.3).



**Fig.II.3:** Profil de potentiel d'un SR à  $N$  barrières rectangulaires et  $(N-1)$  puits quantique.

Dans chaque région  $j$  ( $1 \leq j \leq 2N+1$ ), il y a une onde plane  $\psi_j$  associée à l'électron qui se propage. Nous la définissons pour chaque région comme suit:

**- Région I:**

$$\begin{aligned} \psi_I(z) &= A_1 \cdot e^{ik_1 z} + B_1 \cdot e^{-ik_1 z} \\ &= 1 \cdot e^{ik_1 z} + R \cdot e^{-ik_1 z} \end{aligned} \quad (\text{II.28})$$

$$V_I(z)=0 \text{ et } m_I(z)=m_a \quad (\text{II.29})$$

Avec  $z \leq z_1$ , et:

$$k_1 = \sqrt{\frac{2m_a E}{\hbar^2}} \quad (\text{II.30})$$

**- Région (2N+1):**

$$\begin{aligned} \psi_{2N+1}(z) &= A_{2N+1} \cdot e^{ik_{2N+1} z} + B_{2N+1} \cdot e^{-ik_{2N+1} z} \\ &= \tau \cdot e^{ik_{2N+1} z} + 0 \cdot e^{-ik_{2N+1} z} \end{aligned} \quad (\text{II.31})$$

$$V_{2N+1}(z)=0 \text{ et } m_{2N+1}(z)=m_a \quad (\text{II.32})$$

Avec  $z \geq z_{2N}$ , et  $k_{2N+1}=k_1$ .

**- Les régions entre I et (2N+1):**

Considérons une région  $j$  située entre la région (I) et  $(2N+1)$ . La fonction d'onde électronique correspondante est donnée par:

$$\psi_j(z) = A_j \cdot e^{ik_j z} + B_j \cdot e^{-ik_j z} \quad (\text{II.33})$$

Avec  $z_j \leq z \leq z_{j+1}$ , et  $k_j = \sqrt{\frac{2m_j(E-V_j)}{\hbar^2}}$  (II.34) est le vecteur d'onde dans la  $j^{\text{ième}}$  région.

$$\text{Et } m_j = \begin{cases} m_a & \text{Si l'électron se propage dans le puits} \\ m_b & \text{Si l'électron se propage dans la barrière} \end{cases} \quad (\text{II.35})$$

$$V_j = \begin{cases} 0 & \text{Si l'électron se propage dans le puits} \\ V_0 & \text{Si l'électron se propage dans la barrière} \end{cases} \quad (\text{II.36})$$

En appliquant les C.C. de Bastard à chaque interface  $z_j$ , on obtient la relation reliant les coefficients de la région (I) à ceux de la région (2N+1):

$$\begin{pmatrix} 1 \\ R \end{pmatrix} = M \cdot \begin{pmatrix} \tau \\ 0 \end{pmatrix} \quad (\text{II.37})$$

Où  $M$  est la matrice de transfert de tout le système. Plus explicitement:

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} 1 \\ R \end{pmatrix} &= S_I^{-1}(z_1) \cdot S_{II}(z_1) \cdot S_{II}^{-1}(z_2) \cdot S_{III}(z_2) \dots \dots \cdot S_{2N-1}(z_{2N-2}) \cdot S_{2N-1}^{-1}(z_{2N-1}) \cdot \\ &S_{2N}(z_{2N-1}) \cdot S_{2N}^{-1}(z_{2N}) \cdot S_{2N+1}(z_{2N}) \cdot \begin{pmatrix} \tau \\ 0 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (\text{II.38})$$

Notons cette fois-ci:

$$\begin{aligned} S(0, L) &= S_{II}(z_1) \cdot S_{II}^{-1}(z_2) \cdot S_{III}(z_2) \dots \dots \cdot S_{2N-1}(z_{2N-2}) \cdot S_{2N-1}^{-1}(z_{2N-1}) \cdot \\ &S_{2N}(z_{2N-1}) \cdot S_{2N}^{-1}(z_{2N}) \end{aligned} \quad (\text{II.39})$$

Donc:

$$\begin{aligned} M &= \begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{pmatrix} = \\ &-\frac{m_1}{2ik_1} \begin{pmatrix} -\frac{ik_1}{m_1} \cdot e^{-ik_1 z_1} & -e^{-ik_1 z_1} \\ -\frac{ik_1}{m_1} \cdot e^{ik_1 z_1} & e^{ik_1 z_1} \end{pmatrix} \cdot S(0, L) \cdot \begin{pmatrix} e^{ik_{2N+1} z_{2N}} & e^{-ik_{2N+1} z_{2N}} \\ \frac{ik_{2N+1}}{m_{2N+1}} \cdot e^{ik_{2N+1} z_{2N}} & -\frac{ik_{2N+1}}{m_{2N+1}} \cdot e^{-ik_{2N+1} z_{2N}} \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (\text{II.40})$$

Par translation du système vers l'origine  $O$ ,  $z_1$  et  $z_{2N}$  tendent tous deux vers la valeur 0, On obtient:

$$M = -\frac{m_1}{2ik_1} \begin{pmatrix} -\frac{ik_1}{m_1} & -1 \\ -\frac{ik_1}{m_1} & 1 \end{pmatrix} \cdot S(0, L) \cdot \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ \frac{ik_{2N+1}}{m_{2N+1}} & -\frac{ik_{2N+1}}{m_{2N+1}} \end{pmatrix} \quad (\text{II.41})$$

Où  $m_1=m_{2N+1}=m_a$  (l'électron est dans le puits).

Ici, la matrice  $S(0,L)$  peut être formulée en terme de produit de  $(2N-1)$  matrices élémentaires de diffusion  $D_j(l)$  associée à chaque région  $j$ , dont la largeur est notée  $l$ :

$$S(0, L) = \prod_{j=2}^{2N} D_j(l) = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{pmatrix} \quad (\text{II.42})$$

$$\text{Où: } l = \begin{cases} a & \text{pour les puits} \\ b & \text{pour les barrières} \end{cases} \quad (\text{II.43})$$

Et:

$$D_j(l) = \begin{pmatrix} \cos[k_j l] & -\frac{m_j}{k_j} \cdot \sin[k_j l] \\ \frac{k_j}{m_j} \cdot \sin[k_j l] & \cos[k_j l] \end{pmatrix} \text{ Pour } E - V_j \geq 0 \quad (\text{II.44})$$

$$D_j(l) = \begin{pmatrix} \text{ch}[\rho_j l] & -\frac{m_j}{\rho_j} \cdot \text{sh}[\rho_j l] \\ \frac{\rho_j}{m_j} \cdot \text{sh}[\rho_j l] & \text{ch}[\rho_j l] \end{pmatrix} \text{ Pour } E - V_j \leq 0 \quad (\text{II.45})$$

$$\text{tel que: } \rho_j = \sqrt{\frac{2m_j(V_j-E)}{\hbar^2}} \quad (\text{II.46})$$

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

$$T = \frac{k_{2N+1}}{k_1} \cdot \tau^* \cdot \tau \text{ avec } \tau = \frac{1}{M_{11}} \quad (\text{II.47})$$

Avec:

$$M_{11} = \frac{1}{2} \left[ \left( S_{11} + \frac{k_{2N+1}}{k_1} \cdot S_{22} \right) + i \left( \frac{k_{2N+1} \cdot S_{12}}{m_1} - \frac{S_{21} \cdot m_1}{k_1} \right) \right] \quad (\text{II.48})$$

est le premier élément de la matrice de transfert  $M$ , donc:

$$T = \frac{\left( 4 \cdot \frac{k_{2N+1}}{k_1} \right)}{\left( S_{11} + \frac{k_{2N+1}}{k_1} \cdot S_{22} \right)^2 + \left( \frac{k_{2N+1} \cdot S_{12}}{m_1} - \frac{S_{21} \cdot m_1}{k_1} \right)^2} \quad (\text{II.49})$$

Cette relation du coefficient de transmission décrit l'interaction de la particule avec le système à travers les éléments de la matrice de transfert, fonctions des éléments de la matrice  $S(0,L)$  et des masses effectives. Elle comporte aussi la manifestation de la nature ondulatoire de la particule représentée par les vecteurs d'ondes  $k_l$  et  $k_{2N+1}$ .

### II.3.2. Méthode exacte: Formalisme des fonctions d'Airy

Les structures à puits quantique piégé au milieu d'une double barrières (DB) sont d'une importance capitale puisqu'elles sont utilisées dans un nombre d'applications pratiques, telles que les diodes à résistance différentielle négative [II.35], ainsi qu'en photoélectronique [II.36-37]. Le Coefficient de transmission est souvent calculé comme fonction de l'énergie des porteurs de charge et de la tension appliquée au moyen de la technique de la matrice de transfert détaillée plus haut. Cette procédure donne des résultats numériques pratiques mais ne permet pas de donner un aperçu direct sur les facteurs qui affectent la transmission électronique.

Kane [II.38] considéra la transmission à travers un puits avec des barrières carrées, et a obtenu une expression du coefficient de transmission en l'absence de champ externe appliqué, en termes de paramètres directement calculables. Berz [II.39] à étendu cette étude en introduisant une tension externe. Dans cette optique, les fonctions d'onde sont représentées sous forme de fonctions d'Airy. Il étudia par la suite les variations subies sur les énergies de résonances pour les deux types de charges électrons et trous (Effet Stark), et trouva un bon accord numérique entre la solution exacte et celle approximative (Méthode des ondes planes) que nous présenterons plus loin.

Nous allons, dans ce qui suit, présenter la formulation mathématique de la méthode exacte utilisant les fonctions d'Airy comme solutions de l'équation de Schrödinger pour des structures à profils de potentiel linéaire.

Prenons le cas général d'un profil de potentiel linéaire pour une structure à DB obtenu après l'application du champ externe  $V_b$ , et représenté sur la figure suivante:

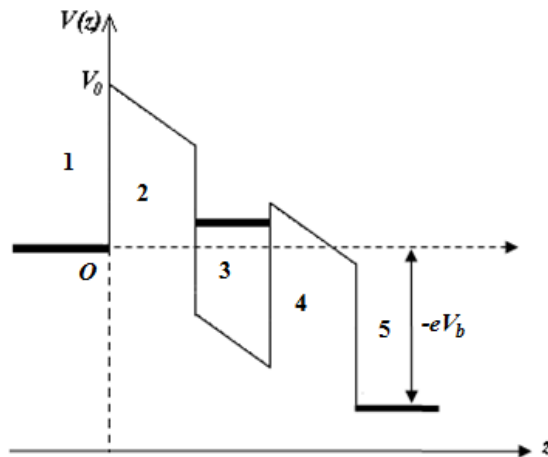


Fig.II.4: Structure à double barrières (DB) soumise à une tension  $V_b$ .

Les solutions de l'équation de Schrödinger (II.7) sont données dans chaque région du potentiel par les relations suivantes :

**- Région 1:**

$$V(z) = 0 \text{ et } m^*(z) = m_a \quad (\text{II.50})$$

$$\psi_1(z) = 1 \cdot e^{ikz} + R \cdot e^{-ikz} \quad (\text{II.51})$$

**- Région 2:**

$$V(z) = V_0 - \frac{eV_b}{L} \cdot z \text{ et } m^*(z) = m_b \quad (\text{II.52})$$

Soit le changement de variable:

$$\rho(z) = \left( \frac{2em_b V_b}{L\hbar^2} \right)^{1/3} \cdot \left( \frac{V_0 - E}{eV_b/L} - z \right) = Z(\eta - z) \quad (\text{II.53})$$

L'équation de Schrödinger (II.7) devient:

$$\frac{\partial^2 \psi_2(\rho)}{\partial \rho^2} - \rho \cdot \psi_2(\rho) = 0 \quad (\text{II.54})$$

La solution de l'équation (II.7) en utilisant les fonctions d'Airy est donnée par:

$$\psi_2(\rho) = C_2^+ \cdot A_i(\rho) + C_2^- \cdot B_i(\rho) \quad (\text{II.55})$$

Où  $A_i$  et  $B_i$  représentent les fonctions d'Airy.

**- Région 3:**

$$V(z) = -\frac{eV_b}{L} \cdot (z + b) \text{ et } m^*(z) = m_a \quad (\text{II.56})$$

En effectuant le changement de variable suivant:

$$\rho'(z) = \left( \frac{2em_a V_b}{L\hbar^2} \right)^{1/3} \cdot \left( -\frac{beV_b - E}{eV_b/L} - z \right) = Z(\eta' - z) \quad (\text{II.57})$$

De même que pour le cas précédent, nous obtenons l'équation de Schrödinger:

$$\frac{\partial^2 \psi_2(\rho')}{\partial \rho'^2} - \rho' \psi_2(\rho') = 0 \quad (\text{II.58})$$

Dont la solution est formulée par:

$$\psi_2(\rho') = C_3^+ \cdot A_i(\rho') + C_3^- \cdot B_i(\rho') \quad (\text{II.59})$$

Pour des raisons de périodicité, les solutions dans les régions qui suivent sont les mêmes que celles dans (2) et (3), sauf que l'amplitude change.

**- Région 5:**

$$V(z) = 0 \text{ et } m^*(z) = m_a \quad (\text{II.60})$$

$$\psi_5(z) = 0 \cdot e^{ik'z} + \tau \cdot e^{-ik'z} \quad (\text{II.61})$$

Avec:

$$k = \sqrt{\frac{2m_a E}{\hbar^2}} \text{ et } k' = \sqrt{\frac{2m_a(E+eV_b)}{\hbar^2}} \quad (\text{II.62})$$

$R$  et  $\tau$  représentent respectivement les amplitudes de réflexion et de transmission.

La première amplitude dans la relation (II.61) est nulle, car la particule est supposée venir de  $-\infty$ .

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

$$\begin{pmatrix} 1 \\ R \end{pmatrix} = -\frac{m_a}{2ik} \cdot \begin{pmatrix} -\frac{ik}{m_a} & -1 \\ -\frac{ik}{m_a} & 1 \end{pmatrix} \cdot S(0, L) \cdot \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ \frac{ik'}{m_a} & -\frac{ik'}{m_a} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \tau \\ 0 \end{pmatrix} \quad (\text{II.63})$$

Avec:

$$S(0, L) = S_p(0) \cdot S_p^{-1}(b) \cdot S_b(0) \cdot S_b^{-1}(a) \cdot S_p(0) \cdot S_p^{-1}(b) \quad (\text{II.64})$$

Où:

$$S_p(\rho) = \begin{pmatrix} A_i(\rho) & B_i(\rho) \\ \frac{A_i'(\rho)}{m_b} & \frac{B_i'(\rho)}{m_b} \end{pmatrix} \text{ et } S_b(\rho') = \begin{pmatrix} A_i(\rho') & B_i(\rho') \\ \frac{A_i'(\rho')}{m_a} & \frac{B_i'(\rho')}{m_a} \end{pmatrix} \quad (\text{II.65})$$

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

$$\begin{pmatrix} 1 \\ R \end{pmatrix} = M \cdot \begin{pmatrix} \tau \\ 0 \end{pmatrix} \quad (\text{II.66})$$

$M$  est la matrice de transfert.

Le coefficient de transmission est donné par:

$$T = \frac{k'}{k} \cdot \tau \cdot \tau^* \text{ avec } \tau = \frac{1}{M_{11}} \quad (\text{II.67})$$

$S_{11}$ ,  $S_{12}$ ,  $S_{21}$  et  $S_{22}$  sont les éléments de la matrice  $S(0,L)$ . A partir des relations (II.63) et (II.66), on obtient:

$$M_{11} = \frac{1}{2} \left[ \left( S_{11} + \frac{k'}{k} \cdot S_{22} \right) + i \left( \frac{k' S_{12}}{m_a} - \frac{S_{21} m_a}{k} \right) \right] \quad (\text{II.68})$$

Le coefficient de transmission  $T$  est alors donné par:

$$T = \frac{\left( 4 \cdot \frac{k'}{k} \right)}{\left( S_{11} + \frac{k'}{k} \cdot S_{22} \right)^2 + \left( \frac{k' S_{12}}{m_a} - \frac{S_{21} m_a}{k} \right)^2} \quad (\text{II.69})$$

Les équations de  $M_{11}$  et  $T$  trouvées ici sont similaires aux équations (II.48) et (II.49) obtenues pour les cas d'une structure à N barrières, sans tension externe appliquée  $V_b$ . La différence se situe au niveau des valeurs des nombres d'ondes de la première et dernière région  $k$  et  $k'$ .

### ***II.3.3. Méthode Approchée: Formalisme des ondes planes***

L'évolution des techniques de croissances épitaxiales ont permis l'élaboration d'hétérostructures ayant des formes de potentiel variées telles que les structures à puits et barrières quantiques triangulaire [II.40-41], parabolique [II.42], etc.. . La résolution exacte de l'équation de Schrödinger pour de tels systèmes est compliquée; Cependant, avec l'avènement des solutions itératives basées sur des méthodes numériques, différentes techniques sont suggérées, donnant ainsi des résultats avec de bonnes approximations.

Une méthode générale calculant le coefficient de transmission  $T$  à travers un profil de potentiel arbitraire est présentée ici. Celle-ci procède par un calcul approché des solutions de l'équation de Schrödinger par le biais des ondes planes.

Soit  $V(z)$  un profil arbitraire d'une structure connectée à un émetteur et un collecteur soumise à une tension  $V_b$  appliquée. Le profil arbitraire est décomposé en  $n$  paliers rectangulaires équidistants de largeur  $l$ . Chaque palier  $j$  est caractérisé par une hauteur  $V_j$ , une masse effective de l'électron  $m_j$  et une fonction d'onde plane  $\psi_j$  (Figure II.5):

$$V(z) = V_j = V\left(\frac{z_{j-1}+z_j}{2}\right) \text{ et } m^*(z) = m_j = m\left(\frac{z_{j-1}+z_j}{2}\right) \quad (\text{II.70})$$

$$\psi_j(z) = A_j \cdot e^{ik_j z} + B_j \cdot e^{-ik_j z} \quad (\text{II.71})$$

Avec  $z_{j-1} \leq z \leq z_j$  et  $j$  allant de 0 à  $N+1$  et  $k_j = \sqrt{\frac{2m_j(E-V_j)}{\hbar^2}}$  (II.72) est le vecteur d'onde dans le palier  $j$ .

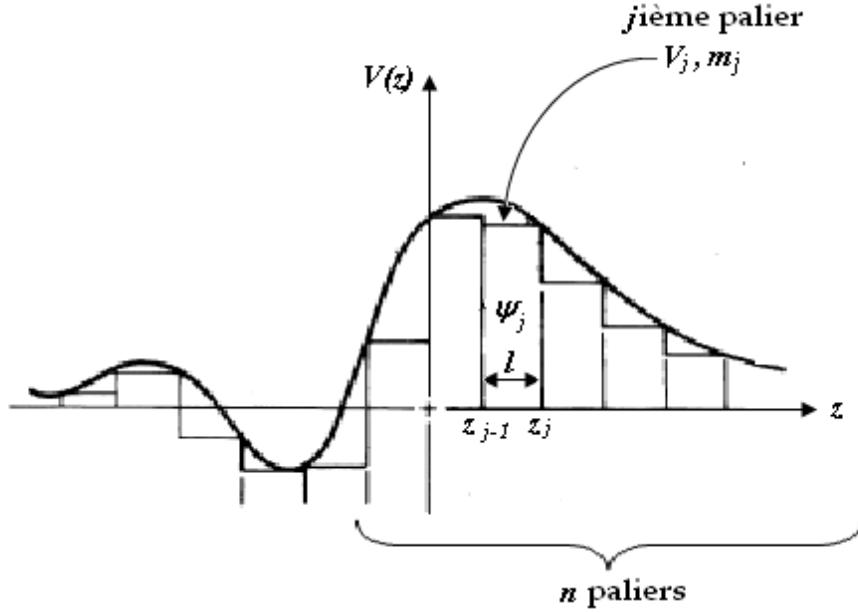


Fig.II.5: Profil de potentiel arbitraire.

Utilisant le modèle de la matrice de transfert et les C.C. de Bastard au niveau de chaque palier, on obtient une relation liant l'amplitude de réflexion avec celle de transmission donnée par l'équation (II.37), ou encore (II.66). L'Obtention de l'expression du coefficient de transmission s'effectue en utilisant la méthode de la matrice de transfert appliquée à une multitude de barrières, détaillée au paragraphe II.3.1.b. Cette dernière expression ressemble parfaitement à celles données par (II.49) et (II.69), elle présente donc un caractère essentiel décrivant la généralité de la méthode. Les coefficients  $S_{11}$ ,  $S_{12}$ ,  $S_{21}$  et  $S_{22}$  comportent toutes les complexités du profil arbitraire.

## II.4. L'interaction électron-électron:

### II.4.1. Équation de Schrödinger nonlinéaire:

De considérables progrès ont été réalisés pour la compréhension des propriétés de transmission électronique par ETR dans les deux cas de milieux linéaires et nonlinéaires, à travers de nombreuses études. La nonlinéarité induite dans les systèmes étudiés tels que les SR provient des interactions entre les particules immobiles ou se propageant à l'intérieur de ces milieux, telle que l'interaction électron-réseau cristallin, mieux connue sous le nom de l'interaction électron-phonon, et exprimant la quantification des ondes sonores sans le système, ainsi que l'interaction électron-électron, à laquelle nous nous intéressons plus particulièrement.

L'équation de Schrödinger a été utilisée pour résoudre et comprendre le problème de transmission dans les systèmes nonlinéaires, et a ouvert la possibilité d'examiner des phénomènes tels que la propagation de solitons, le chaos, ou la bistabilité [II.43-47].

Nous allons dans cette partie, adapter les techniques mathématiques présentées plus haut au cas de l'interaction électron-électron sur une structure à puits et à barrières quantiques rectangulaires, soumise ou non, à une tension externe  $V_b$ .

Puisque nous considérons la propagation d'un second électron en même temps que le premier dans le milieu (l'interaction électronique), un troisième terme est rajouté à l'équation de Schrödinger. L'équation (II.7) devient nonlinéaire:

$$\frac{\hbar^2}{2m^*(z)} \cdot \frac{d^2\psi(z)}{dz^2} + [E - V(z)] \cdot \psi(z) + \alpha \cdot |\psi|^2 \cdot \psi(z) = 0 \quad (\text{II.73})$$

$\alpha$  est le *Coefficient d'interaction électronique*, ou encore le *Taux d'interaction électronique*. Il traduit la possibilité d'une quelconque interaction entre les deux électrons. Il peut prendre les valeurs allant de 0 à 1, de telle manière que lorsque  $\alpha=0$  il n'existe aucune interaction entre les électrons, il y a donc propagation d'un seul électron: C'est le cas linéaire général bien connu, et largement étudié. A l'inverse, lorsque  $\alpha=1$ , il y a une complète interaction entre les deux électrons: Ils sont supposés très proches l'un de l'autre. Les valeurs comprises entre 0 et 1 traduisent une interaction électronique plus ou moins forte dans l'état permis. Ce coefficient est toujours positif dans le cas de l'interaction électron-électron, à l'inverse, il est négatif dans celui de l'interaction électron-phonon. Nous nous intéressons seulement au premier cas puisque nous considérons dans notre étude un SR à gap direct seulement.

Le terme  $|\psi|^2$  est la probabilité de présence de l'électron.

Ainsi, le terme  $\alpha \cdot |\psi|^2$  traduit l'interaction Coulombienne. Il est appelé *Probabilité d'interaction électronique*. Afin de pouvoir résoudre une telle équation, il est nécessaire d'introduire la notion de potentiel effectif . Cette dernière a été utilisée par Diez et *al.* [II.48-49] pour l'étude de l'interaction électronique dans une structure à double barrières.

#### II.4.2. Notion de potentiel effectif:

Afin de résoudre l'équation (II.73), nous substituons les deux termes englobant le potentiel  $V(z)$  et la probabilité d'interaction électronique par un seul terme de potentiel appelé potentiel effectif  $V_{eff}$ . L'équation (II.73) peut alors s'écrire sous la forme conventionnelle suivante:

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*(z)} \cdot \frac{d^2\psi(z)}{dz^2} + [V_{eff}(z) - E] \cdot \psi(z) = 0 \quad (II.74)$$

Où  $V_{eff}$  est donné dans le cas d'un profil de potentiel à barrières rectangulaires de hauteurs  $V_0$  lorsque le système n'est pas soumis à un champ externe par:

$$V_{eff}(z) = \begin{cases} \alpha|\psi|^2 & z \leq 0 \\ V_0 + \alpha|\psi|^2 & m^* = m_b \text{ dans les barrières} \\ \alpha|\psi|^2 & m^* = m_a \text{ dans les puits} \\ \alpha|\psi|^2 & z > L \end{cases} \quad (II.75)$$

Tandis que pour une structure soumise à un potentiel externe  $V_b$ ,  $V_{eff}$  s'écrit:

$$V_{eff}(z) = \begin{cases} \alpha|\psi|^2 & z \leq 0 \\ V_0 - \frac{eV_b}{L} \cdot z + \alpha|\psi|^2 & m^* = m_b \text{ dans les barrières} \\ -\frac{eV_b}{L} \cdot z + \alpha|\psi|^2 & m^* = m_a \text{ dans les puits} \\ -eV_b + \alpha|\psi|^2 & z > L \end{cases} \quad (II.76)$$

En additionnant le terme de la probabilité d'interaction électronique, le profil de potentiel devient arbitraire dans tous les cas. Il s'agit ici de résoudre l'équation de Schrödinger ayant un potentiel variant rapidement. Ainsi, pour obtenir les propriétés de transmission électronique, nous faisons appel au formalisme des ondes planes avec résolution par la méthode de la matrice de transfert basée sur les C.C. de Bastard.

Le profil de potentiel est donc divisé en  $N$  paliers rectangulaires d'épaisseur  $l$ . Dans chaque palier, le potentiel et la masse effective sont considérés constants. A la limite de  $N$  infini, la variation du potentiel et de la masse effective sont atteintes. Les solutions de l'équation de Schrödinger pour chaque palier sont des ondes planes.

Comme résultat direct, la paramétrisation du potentiel  $V_{eff}(z)$  ainsi que la masse effective dans la région  $i$  et le palier  $j$  est donnée de manière générale par:

$$V_{eff}(z) = V_{i,j}(z) = \begin{cases} V_0 - \frac{eV_b}{L} \cdot z + \alpha \cdot |\psi_{i,j}|^2 & m_{i,j}^* = m_i^* = m_b \text{ dans les barrières} \\ -\frac{eV_b}{L} \cdot z + \alpha \cdot |\psi_{i,j}|^2 & m_{i,j}^* = m_i^* = m_a \text{ dans les puits} \end{cases} \quad (\text{II.77})$$

Où  $z_{j-1} < z < z_j$ .

En effet, pour un palier  $j$  se trouvant dans la région  $i$  (puits ou barrière) la fonction d'onde est notée  $\psi_{i,j}$ , où  $i=1,2,\dots,p$  et  $j=1,2,\dots,N$ . Conformément à ces approximations, la fonction d'onde correspondante à un électron d'énergie  $E$ , est formulée par:

$$\psi_{i,j}(z) = A_{i,j} \cdot e^{ik_{i,j}z} + B_{i,j} \cdot e^{-ik_{i,j}z} \quad (\text{II.78})$$

Où  $A_{i,j}$  et  $B_{i,j}$  sont les amplitudes du  $j^{ième}$  palier dans la  $i^{ième}$  région. Les  $k_{i,j}$  sont les vecteurs d'onde correspondants.

La relation entre les amplitudes transmise  $\tau$  et réfléchie  $R$  est donné au moyen de la matrice transfert par l'équation (II.66).  $k$  et  $k'$  sont donnés par (II.62). Sous ces conditions, chaque palier est considéré comme une région, pour lesquelles, à chaque interface, nous pouvons appliquer les C.C. de Bastard. Ceci nous conduit à la relation (II.63), où  $S(0,L)$  est donnée par:

$$S(0,L) = \prod_{i=1}^N D_{i,j}(l) = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{pmatrix} \quad (\text{II.79})$$

Et  $D_{i,j}(l)$  s'écrit sous la forme suivante:

$$D_{i,j}(l) = \begin{pmatrix} \cos[k_{i,j}l] & -\frac{m_{i,j}}{k_{i,j}} \cdot \sin[k_{i,j}l] \\ \frac{k_{i,j}}{m_{i,j}} \cdot \sin[k_{i,j}l] & \cos[k_{i,j}l] \end{pmatrix} \quad \text{Pour } E - V_{i,j} \geq \quad (\text{II.80})$$

Pour un électron incident, le vecteur d'onde  $k_{i,j}$  est donné par:

$$k_{i,j} = \sqrt{\frac{2m_{i,j}(E-V_{i,j})}{\hbar^2}} \quad (\text{II.81})$$

Autrement:

$$D_{i,j}(l) = \begin{pmatrix} \text{ch}[\rho_{i,j} l] & -\frac{m_{i,j}}{\rho_{i,j}} \cdot \text{sh}[\rho_{i,j} l] \\ \frac{\rho_{i,j}}{m_{i,j}} \cdot \text{sh}[\rho_{i,j} l] & \text{ch}[\rho_{i,j} l] \end{pmatrix} \quad \text{Pour } E - V_{i,j} \leq 0 \quad (\text{II.82})$$

Où  $\rho_{i,j}$  est le vecteur d'onde définit comme suit:

$$\rho_{i,j} = \sqrt{\frac{2m_{i,j}(V_{i,j}-E)}{\hbar^2}} \quad (\text{II.83})$$

Le coefficient de transmission est donné par la relation (II.69). Pour l'étude d'une structure non soumise à un potentiel externe, il suffit de substituer  $V_b$  par 0 dans toutes les équations précédentes.

Ces calculs s'effectuent de manière itérative, il est ainsi nécessaire d'exprimer toutes les amplitudes des fonctions d'ondes de chaque palier dans chaque région. Pour ce faire, une analyse détaillée donnant la relation de récurrence entre ces amplitudes est exposée dans ce qui suit.

➤ **Relation de Récurrence:**

Considérons les trois régions successives (ou paliers successifs)  $(n-1)$ ,  $(n)$  et  $(n+1)$  représentées sur la figure II.6.  $z_n$  et  $z_{n+1}$  sont les coordonnées aux interfaces entre les régions (ou paliers) représentées, et  $\psi_{n-1}$ ,  $\psi_n$  et  $\psi_{n+1}$  sont successivement les fonctions d'ondes associées à ces régions (ou paliers). L'onde est de forme plane dans toutes ces régions (ou paliers).

- **La région/ palier (n-1):**  $z < z_n$

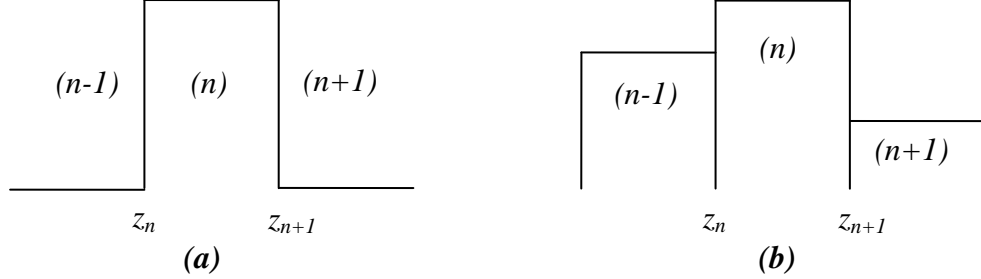
$$\psi_{n-1}(z) = A_{n-1} \cdot e^{ik_{n-1}z} + B_{n-1} \cdot e^{-ik_{n-1}z} \quad (\text{II.84})$$

- **La région/ palier (n):**  $z_n < z < z_{n+1}$

$$\psi_n(z) = A_n \cdot e^{ik_n z} + B_n \cdot e^{-ik_n z} \quad (\text{II.85})$$

- **La région/ palier (n+1):**  $z > z_{n+1}$

$$\psi_{n+1}(z) = A_{n+1} \cdot e^{ik_{n+1}z} + B_{n-1} \cdot e^{-ik_{n+1}z} \quad (\text{II.86})$$



**Fig.II.6:** Représentation de (a) trois régions successives et (b) trois paliers successifs. Dans les deux cas, la forme du profil de potentiel est rectangulaire.

Où,  $k_{n-1}$ ,  $k_n$  et  $k_{n+1}$  sont les vecteurs d'ondes des régions (ou paliers) (n-1), (n) et (n+1) successivement. En appliquant les C.C. de Bastard aux deux interfaces:

➤ À l'interface  $z=z_n$ :

$$\begin{cases} \psi_{n-1}(z_n) = \psi_n(z_n) \\ \frac{1}{m_{n-1}} \psi'_{n-1}(z_n) = \frac{1}{m_n} \psi'_n(z_n) \end{cases} \quad (\text{II.87})$$

En remplaçant chaque fonction d'onde et sa première dérivée à la position  $z=z_n$ , nous obtenons le système d'équations qui relie les amplitudes de la région (ou palier) (n) en fonction de celles de la région (ou palier) (n-1):

$$\begin{cases} A_n = A_{n-1} \cdot e^{i(k_{n-1}-k_n)z_n} \cdot \left(\frac{1+\delta_{n-1,n}}{2}\right) + B_{n-1} \cdot e^{-i(k_{n-1}+k_n)z_n} \cdot \left(\frac{1-\delta_{n-1,n}}{2}\right) \\ B_n = A_{n-1} \cdot e^{i(k_{n-1}+k_n)z_n} \cdot \left(\frac{1-\delta_{n-1,n}}{2}\right) + B_{n-1} \cdot e^{-i(k_{n-1}-k_n)z_n} \cdot \left(\frac{1+\delta_{n-1,n}}{2}\right) \end{cases} \quad (\text{II.88})$$

Où:

$$\delta_{n-1,n} = \frac{k_{n-1} \cdot m_n}{m_{n-1} \cdot k_n}. \quad (\text{II.89})$$

Le système (II.88) peu s'écrire sous la forme matricielle suivante:

$$\begin{pmatrix} A_n \\ B_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{i(k_{n-1}-k_n)z_n} \cdot \left(\frac{1+\delta_{n-1,n}}{2}\right) & e^{-i(k_{n-1}+k_n)z_n} \cdot \left(\frac{1-\delta_{n-1,n}}{2}\right) \\ e^{i(k_{n-1}+k_n)z_n} \cdot \left(\frac{1-\delta_{n-1,n}}{2}\right) & e^{-i(k_{n-1}-k_n)z_n} \cdot \left(\frac{1+\delta_{n-1,n}}{2}\right) \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} A_{n-1} \\ B_{n-1} \end{pmatrix} \quad (\text{II.90})$$

Le système (II.90) nous permet ainsi de trouver les fonction d'ondes  $\psi_n$  dans la région (ou palier) ( $n$ ) en fonction des fonctions d'ondes  $\psi_{n-1}$  dans la région (ou palier) ( $n-1$ ). Le coefficient de la dernière région (ou palier) étant  $\tau$ , il est connu, nous pouvons ainsi obtenir toutes les amplitudes.

➤ **À l'interface  $z=z_{n+1}$ :**

Les C.C. de Bastard donnent ici:

$$\begin{cases} \psi_n(z_{n+1}) = \psi_{n+1}(z_{n+1}) \\ \frac{1}{m_n} \psi_n'(z_{n+1}) = \frac{1}{m_{n+1}} \psi_{n+1}'(z_{n+1}) \end{cases} \quad (\text{II.91})$$

En remplaçant chaque fonction d'onde et sa première dérivée à la position  $z=z_{n+1}$ , nous obtenons le système d'équations qui relie les amplitudes de la région (ou palier) ( $n$ ) en fonction de celles de la région (ou palier) ( $n+1$ ):

$$\begin{cases} A_n = A_{n+1} \cdot e^{i(k_{n+1}-k_n)z_{n+1}} \cdot \left(\frac{1+\delta_{n,n+1}}{2}\right) + B_{n+1} \cdot e^{-i(k_{n+1}+k_n)z_{n+1}} \cdot \left(\frac{1-\delta_{n,n+1}}{2}\right) \\ B_n = A_{n+1} \cdot e^{i(k_{n+1}+k_n)z_{n+1}} \cdot \left(\frac{1-\delta_{n,n+1}}{2}\right) + B_{n+1} \cdot e^{-i(k_{n+1}-k_n)z_{n+1}} \cdot \left(\frac{1+\delta_{n,n+1}}{2}\right) \end{cases} \quad (\text{II.92})$$

Où:

$$\delta_{n,n+1} = \frac{m_n \cdot k_{n+1}}{k_n \cdot m_{n+1}} \quad (\text{II.93})$$

Le système (II.92) s'écrit sous la forme matricielle suivante:

$$\begin{pmatrix} A_n \\ B_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{i(k_{n+1}-k_n)z_{n+1}} \cdot \left(\frac{1+\delta_{n,n+1}}{2}\right) & e^{-i(k_{n+1}+k_n)z_{n+1}} \cdot \left(\frac{1-\delta_{n,n+1}}{2}\right) \\ e^{i(k_{n+1}+k_n)z_{n+1}} \cdot \left(\frac{1-\delta_{n,n+1}}{2}\right) & e^{-i(k_{n+1}-k_n)z_{n+1}} \cdot \left(\frac{1+\delta_{n,n+1}}{2}\right) \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} A_{n+1} \\ B_{n+1} \end{pmatrix} \quad (\text{II.94})$$

Le système (II.94) nous permet ainsi de trouver les fonction d'ondes  $\psi_n$  dans la région (ou palier) ( $n$ ) en fonction des fonctions d'ondes  $\psi_{n+1}$  dans la région (ou palier) ( $n+1$ ).

## II.5. Conclusion:

Dans ce chapitre, nous avons détaillé les formalismes usuels pour la résolution de l'équation de Schrödinger utilisant l'approximation de la masse effective qui présente une faible évolution aux bords des bandes de conduction, ainsi que les conditions de continuité de Bastard. Nous avons pu établir les expressions détaillées du coefficient de transmission, paramètre essentiel pour décrire la nature des états de transmission à l'intérieure de la structure quantique étudiée. deux formalismes ont été considérés suivant la forme du profil de potentiel: La méthode des fonctions exactes d'Airy a été adoptée pour un profil de potentiel linéaire, tandis que celle des ondes planes a été adoptée pour des profils de potentiels arbitraires. Les deux sont accompagnées par une formulation utilisant la matrice de transfert.

La nonlinéarité traduisant les interactions électroniques a été intégrée dans l'équation de Schrödinger au moyen d'un potentiel effectif. Le profil obtenu prend une forme de profil arbitraire et la méthode de résolution adoptée est alors celle de la discrétisation de ce dernier par des paliers équidistants. la résolution par la méthode des ondes planes s'impose ici, donnant pour chaque palier dans chaque région une fonction électronique de forme plane. Le coefficient de transmission  $T$  a, ainsi, pu être évalué au moyens de solutions itératives basées sur une méthode numérique, puisque la résolution exacte de l'équation de Schrödinger incluant les différents effets nonlinéaires reste à nos jours difficile.

Dans le chapitre suivant, nous donnerons les principaux résultats concernant la structure de SR GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>AS à gap direct utilisant le formalisme du potentiel effectif développé plus haut, et ce, pour des structures à doubles, à triples, et à  $N$  barrières.

## II.6. Références:

- [1] R. Tsu and L. Esaki, *App. Phys. Lett.* 22, 562 (1973).
- [2] H. A. Antosiewicz, "*Handbook of Mathematical Functions*". Eds. M. Abramowitz and I. A. Stegun (Dover, New York). p446 (1972).
- [3] F. Berz, *Semi. Sci. Tech.* 8, (1993).
- [4] M. O. Vassell, J. Lee, and H. F. Lokwood, *J. App. Phys.* 54, 5206 (1983).
- [5] K. F. Brennan and C. J. Summers, *J. App. Phys.* 61, 614 (1987).
- [6] J. P. Peng, H. Chen, and S. X. Zhou, *J. Phys. Cond. Matter* I 5451 (1989).
- [7] S. S. Allen and S. L. Richardson, *Phys. Rev. B* 50, 11 693 (1994).
- [8] S. S. Allen and S. L. Richardson, *J. App. Phys.* 79, 886 (1996).
- [9] D. J. Fisher and C. Zhang, *J. App. Phys.* 76, 606 (1994).
- [10] H. X. Jiang and J. Y. Lin, *J. App. Phys.* 61, 624 (1987).
- [11] Y. Ando and T. Itoh, *J. App. Phys.* 61, 1497 (1987).
- [12] P. R. L. De Carvalho, V. N. Freire, M. M. Auto, and G. A. Farias, *Super. Micros.* 14, 221 (1993).
- [13] C. M. Tan, J. M. Xu, and S. Zukotynski, *J. App. Phys.* 67, 3011 (1990).
- [14] N. Sekkal, H. Aourag, N. Amrane, and B. Soudini, *Phys. Rev. B* 215, 171 (1995).
- [15] T. Ando, S. Wakara, and H. Akera, *Phys. Rev. B* 40, 11 610 (1989).
- [16] J. Leo and J. A. Toombs, *Phys. Rev. B* 43, 1944 (1994).
- [17] L. N. Pandey, D. Sahu, and T. F. George, *App. Phys. Lett.* 56, 277 (1990).
- [18] A. Brezini and N. Zekri, *Solid. Stat. Comm.* 86, 613 (1993).
- [19] G. Bastard, "*Wave Mechanics Applied to Semiconductors Heterostructures*", édition de Physique 1989.
- [20] P. Kiréev, "*La physique des semiconducteurs*", Edt. Mir. Moscou (traduction Française) (1975).
- [21] H. Zhu, K. Lai, D. C. Tsui, S. P. Bayrakci, N. P. Ong, M. Manfra, L. Pfeiffer, K. West, "*Density and well width dependences of the effective mass of two dimensional holes in (100) GaAs quantum wells measured by cyclotron resonance at microwave frequencies*", *Solid State Communications*, IOP Science. cond. mat. 0612339 (2006).
- [22] Q. G. Zhu and H. Kroemer, *Phys. Rev. B* 27, 3519 (1989).
- [23] D. J. Ben Daniel and C. B. Duke, *Phys. Rev.* 152, 683 (1966).
- [24] G. Bastard, *Phys. Rev. B* 24, 5693 (1981).
- [25] I. Galbraith and G. Duggan, *Phys. Rev. B* 38, 10057 (1988).

- [26] A. N. Khonder, M. R. Khan, and A. F. N. Anwar, J. App. Phys. 63, 5192 (1988).
- [27] Y. Zebda and A. M. Kan'an, J. App. Phys. 72, 559 (1992).
- [28] A. M. Tan, J. M. Xu, and S. Zukotynski, J. App. Phys. 67, 3011 (1990).
- [29] H. S. Cho and P. R. Prucnal, Phys. Rev. B 36, 3237 (1987).
- [30] D. J. Ben Daniel and C. B. Duck, Phys. Rev. 152, 683 (1966).
- [31] A. Nogaret, L. A. Cury, D. K. Maude, J. C. Portal, and D. L. Sivco, Semi. Sci. Tech. 8, 1819 (1993).
- [32] D. L. Smith and C. Mailhiot, Rev. Mod. Phys. 62, 173 (1990).
- [33] F. Bechstedt, H. Geecke, and H. Grille, Phys. Rev. B 47, 13 540 (1993).
- [34] Voir, Phys. Rev. B 49, 2608 (1994).
- [35] S. Luryi, *Nature* 336 515 (1988).
- [36] P. C. Klipstein, P. R. Tapster, N. Apsley, D. A. Anderson, M. S. Skolnik, T. H. Kerr and K. Woodbridge, J. Phys. C: Solid State Phys. 19, 857 (1986).
- [37] N. Whitehead and G. Parry Electron. Lett. 25, 566 (1989).
- [38] E. O. Kane. "*Tunelling Phenomena in Solids*", ed E. Burstein and S. Lundquist (New York: Plenum), Ch1,1 (1969).
- [39] F. Berz , Semicond. Sci. Technol. 8, 243 (1993).
- [40] A. C. Gossard, W. Brown, C. L. Allyn, and W. Wiegmann, J. Vac. Sci. Tech. 20, 694 (1982).
- [41] F. Capasso, S. Luryi, W. T. Tsang, C. G .Bethea, and B. F. Levine, Phys. Rev. Lett. 51, 2318 (1983).
- [42] R. C. Miller, A. C. Grossard, D. A. Kleinman, and O. Munteanu, Phys. Rev. B 29, 3740 (1984).
- [43] E. Infeld, G. Rowlands, "*Nonlinear Waves, Solitons and Chaos*", Cambridge University Press, Cambridge, (1990).
- [44] Y. Wan, C. M. Soukoulis, Phys. Rev. A 41, 800 (1990).
- [45] R. Knapp, G. Papanicolaou, B. White, in: A.R. Bishop, D.K. Campbell, S. Pnevmatikos (Eds.), *Disorder and Nonlinearity*, Springer-Verlag, Berlin, (1989).
- [46] Y. Wan, C.M. Soukoulis, Phys. Rev. B 40 (12), 264 (1989).
- [47] P. Hawrylak, M. Grabowski, P. Wilson, Phys. Rev. B 40, 6398 (1989).
- [48] E. Diez, F. Domínguez-Adame, A. Sánchez, Phys. Lett. A 215, 103 (1996).
- [49] E. Diez, F. Dominguez-Adame, A. Sanchez, Phys. Lett. A 198, 403 (1995).

*Chapitre III:*

## **RÉSULTATS ET DISCUSSIONS**

### III.1. Introduction:

Les modèles théoriques établis pour l'étude des propriétés de transport électronique dans les superréseaux (SR) ont été détaillés dans le chapitre précédent. Nous nous intéressons plus particulièrement au formalisme des ondes planes combiné avec celui de la matrice de transfert afin de simuler les phénomènes de transmission électronique dans un SR GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As, en intégrant la répulsion Coulombienne entre deux électrons adjacents, traduite par le terme de la probabilité d'interaction électronique inséré dans l'équation de Schrödinger. De ce fait, un programme à base de langage Fortran à été élaboré au sein de notre équipe, s'appliquant aussi bien sur les cas d'hétérostructures linéaires ainsi que nonlinéaires, pour une structure à double ou à multitude de barrières.

Nous avons appliqué notre programme sur des structures ordonnées, linéaires, à double, triple et N barrières (N>3), soumises ou non à un potentiel externe. Cette opération nous a permis de valider dans un premier temps notre logiciel en comparant les résultats obtenus avec ceux déjà existants dans la littérature. Nous avons intégré, par la suite, la nonlinéarité à travers le coefficient d'interaction électronique, ce qui nous a permis d'observer un nouveau comportement de la structure étudiée. Mais avant tout, nous donnons un bref descriptif de la nature des états qui prennent place dans les différentes structures solides périodiques ou non.

### III.2. Nature des états dans un Solide cristallin:

#### III.2.1. États étendus:

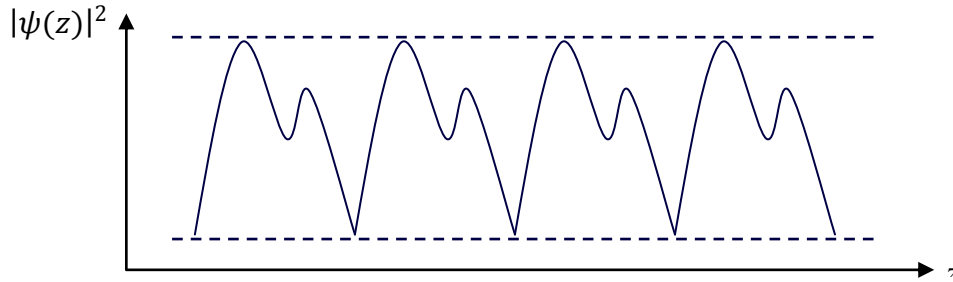
La théorie du transport dans les systèmes électroniques a permis de décrire la physique fondamentale de la propagation des ondes dans les structures périodiques [III.1-2].

En physique du solide élémentaire, il est connu que les états propres dans un cristal périodique parfait sont des états de Bloch donnés par:

$$\psi_{k(\vec{r})} = U_k(\vec{r}) \cdot e^{i\vec{k}\vec{r}} \quad (\text{III.1})$$

Où  $U_k(\vec{r})$  est une fonction vérifiant la périodicité du réseau, c.à.d.  $U_k(\vec{r} + \vec{R}) = U_k(\vec{r})$  avec  $\vec{R}$  le vecteur de translation du réseau cristallin. Ainsi, la probabilité de trouver un électron de Bloch dans un site  $i$  du réseau est identique à celle dans n'importe quelle autre position équivalente dans un site  $j$ . Donc le théorème de Bloch permet de démontrer que les états électroniques permis (qui reproduisent la périodicité du potentiel) sont des états

"étendus" (Figure III.1). Par suite, les objets quantiques sont des ondes de Bloch pouvant se déplacer librement, sans restriction dans toute structure ordonnée.



**Fig.III.1:** Représentation d'état étendu de Bloch d'un système ordonné.

Dans ce type d'état, la transmission est optimale et atteint l'unité à l'énergie de résonance.

### **III.2.2. États localisés et délocalisés:**

La résolution de l'équation de Schrödinger demeure le moyen incontournable pour étudier les propriétés électroniques et connaître la nature des états d'un système quantique. Dans une structure désordonnée par exemple [III.3-7], le problème est très complexe, car on a perdu toutes les symétries par translation et le théorème de Bloch n'est plus valable.

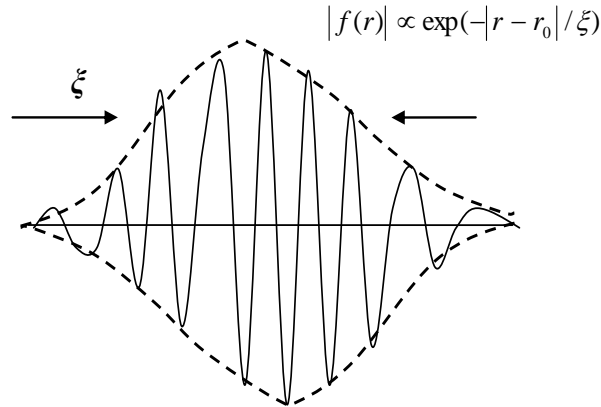
En étudiant le désordre en 1958, Anderson [III.1] a montré qu'en présence d'un désordre suffisamment fort, tous les états électroniques devenaient "localisés" et présentaient par conséquent une propagation limitée [III.2]. La localisation des états est due aux interférences destructives des ondes électroniques, et la fonction enveloppe décroît exponentiellement à partir de certaines positions. Elle devient négligeable, voir nulle, au delà d'une longueur caractéristique  $\xi$  appelée longueur de localisation, liée à la configuration du milieu (Figure. III.2). Plus  $\xi$  est petit, plus l'état est localisé. Dans ces conditions, la fonction enveloppe s'écrit:

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

L'existence de ces états localisés peu s'expliquer physiquement par le fait que les électrons n'arrivent pas à sortir des puits de potentiel dans lesquels ils se trouvent.

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

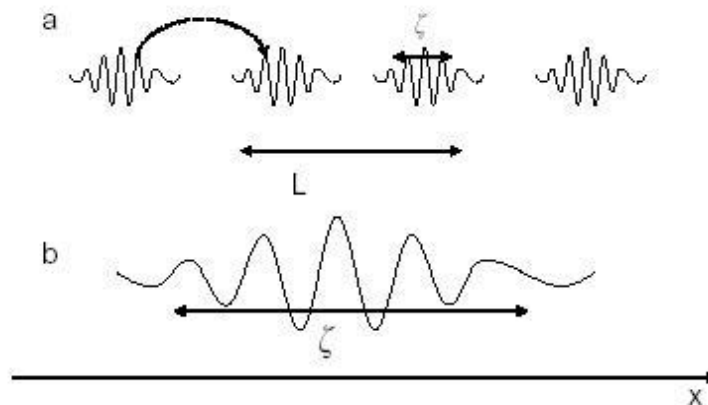
$$g(L) \propto e^{-\frac{L}{\xi}} \quad (\text{III.3})$$



**Fig.III.2:** Représentation d'état localisé où la fonction enveloppe est confinée dans une région finie de l'espace.

Pour traverser l'échantillon, les électrons doivent "sauter" d'état localisé en état localisé (Figure III.3(a)). La conductance du système est reliée à la probabilité  $e^{-\frac{L}{\xi}}$  de ces sauts.

La nature des états à l'intérieur d'une structure quantique peut être intermédiaire entre étendu et localisé: C'est la délocalisation où la transmission n'est pas optimale mais cependant, existante (Figure III.3(b)). Elle prend place lorsque la longueur de localisation est légèrement inférieure à la taille du système  $L$ . La transmission n'atteint pas l'unité dans ce cas là.



**Fig.III.3:** (a) Localisation forte, lorsque la longueur de localisation  $\xi$  est plus petite que la taille de l'échantillon  $L$ . La conduction se fait par sauts entre différents états localisés. (b) Régime délocalisé.

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

### III.3. Résultats et discussions:

Le potentiel de la structure étudiée  $V_{Str}$ , peut être exprimé en termes de la concentration  $x$  de l'aluminium dans le  $Al_xGa_{1-x}As$ , en utilisant la règle des 60% des queues de bande de conduction [III.8-9]:

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

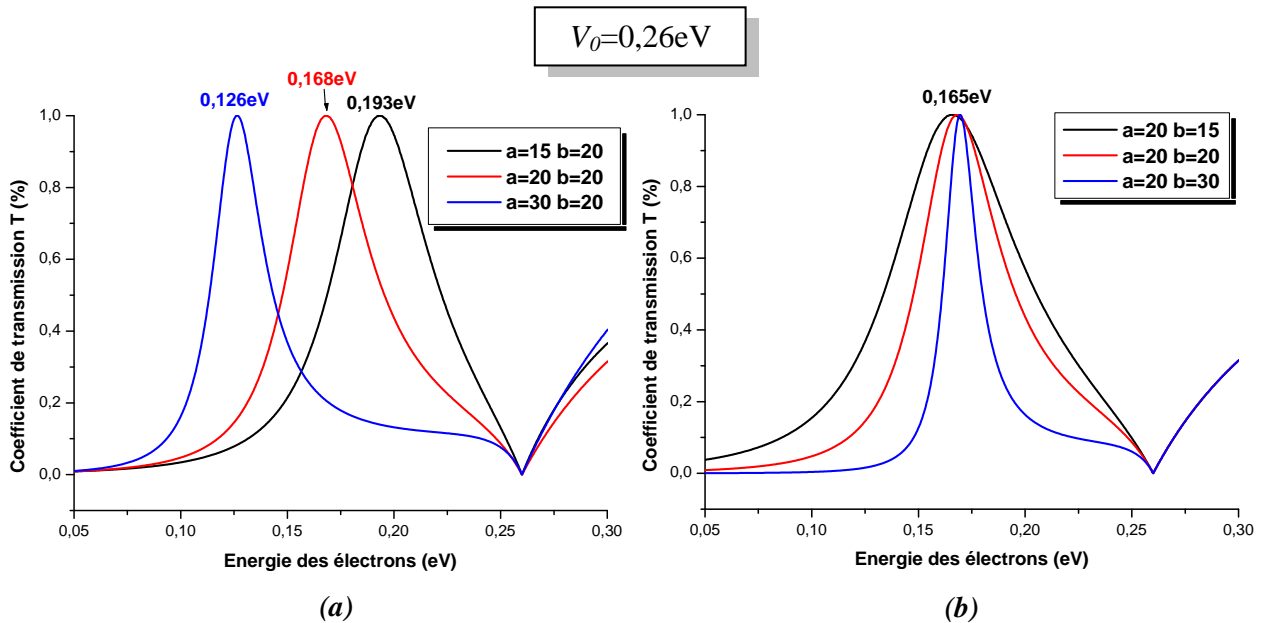
Cet intervalle de  $x$  délimite la région où le SR  $Al_xGa_{1-x}As$  présente un gap direct. La masse effective dans cette région est donnée par :

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

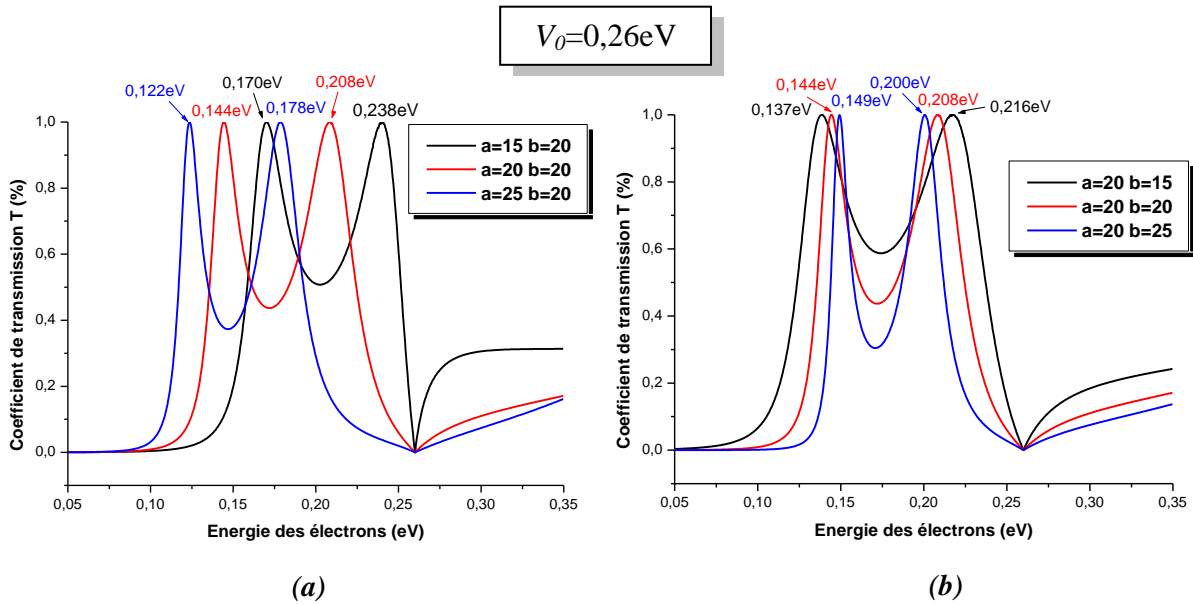
#### III.3.1. Étude des structures non soumises au champ externe $V_b$ :

##### III.3.1.a. Sans l'influence de l'interaction électronique:

Pour le système  $Al_xGa_{1-x}As$ , la hauteur de la bande de conduction en l'absence d'un voltage externe et de nonlinéarité ( $\alpha=0$ ), est prise, au début, égale à 0,26eV. Nous faisons varier les paramètres structuraux, à savoir, l'épaisseur des barrières  $b$  et la largeur du puits  $a$ . Il y a alors transmission électronique par effet tunnel résonant (ETR), et le coefficient de transmission en fonction de l'énergie de l'électron pour une structure à double (DB) et à triples barrières (TB), est donné sur les figures III.4 et III.5.



**Fig III.4:** Coefficient de transmission électronique en fonction de l'énergie de l'électron dans une structure à double barrière (DB), de hauteur  $V_0=0,26\text{eV}$ , (a) pour différentes largeurs de puits  $a(\text{Å})$ , (b) pour différentes épaisseurs de barrières  $b(\text{Å})$ .

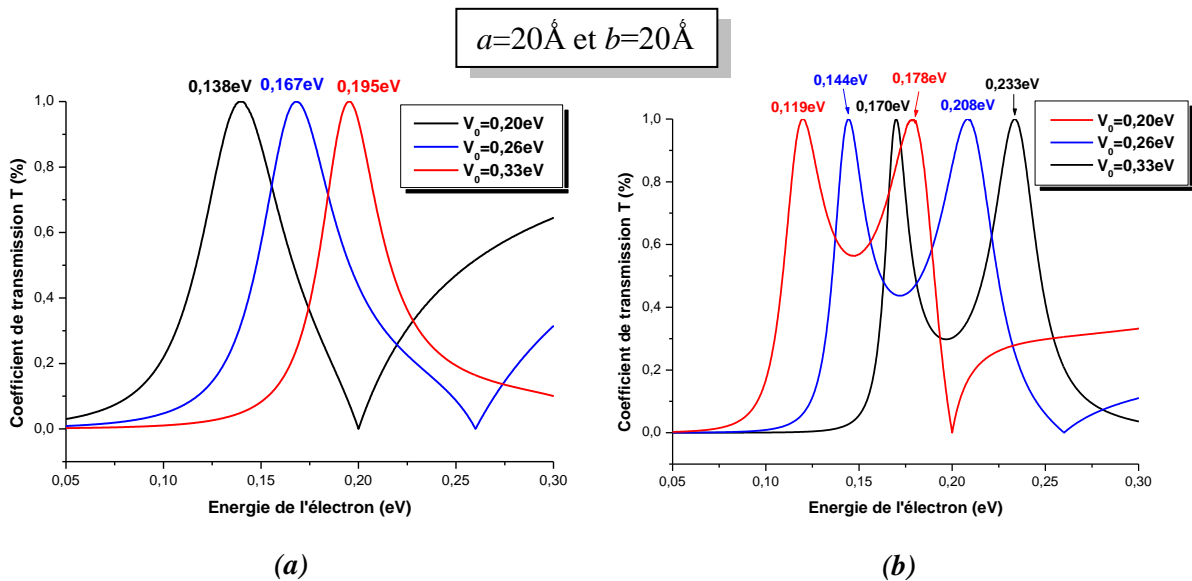


**Fig.III.5:** Coefficient de transmission électronique en fonction de l'énergie de l'électron dans une structure à triple barrière (TB), de hauteur  $V_0=0,26\text{eV}$ , (a) pour différentes largeurs de puits  $a(\text{Å})$ , (b) pour différentes épaisseurs de barrières  $b(\text{Å})$ .

Pour la structure à double barrière, nous observons l'état résonant traduisant une transmission électronique égale à l'unité. Cet état est donc étendu: la transmission par ETR s'opère à l'intérieur du puits permettant à l'électron de transpercer les deux barrières. En augmentant la largeur du puits quantique  $a$  de  $15\text{Å}$  jusqu'à  $30\text{Å}$ , cet état permis se décale vers les basses énergies, signe que les états permis se confinent au fond du puits. En faisant varier l'épaisseur des barrières à présent, tout en gardant une largeur de puits constante, nous obtenons un rétrécissement des pics de transmission avec l'augmentation de  $b$ , tout en conservant leur énergie de résonance constante et égale à  $0,165\text{eV}$ . Ceci est dû au recouvrement entre les ondes électroniques des différentes régions et qui est plus important lorsque l'épaisseur de barrières est petite. Lorsque l'épaisseur de la barrière devient grande, l'électron voit la barrière de potentiel infinie, et donc comme une marche de potentiel, le recouvrement est alors infime et réduit par conséquent, la zone permise jusqu'à la localisation.

La transmission électronique d'une structure à triple barrières en fonction des paramètres de structure est représentée sur la figure III.5. Pour une telle structure, nous obtenons à chaque fois deux états permis, donc deux résonances relatives aux deux puits confinés entre les trois barrières. Le décalage des états étendus pour des largeurs de puits plus grandes est observé également ici. Le même phénomène de rétrécissement de la bande permise est obtenu lors de l'augmentation de  $b$  et les résonances sont dans ce cas là décalées vers le centre de la bande.

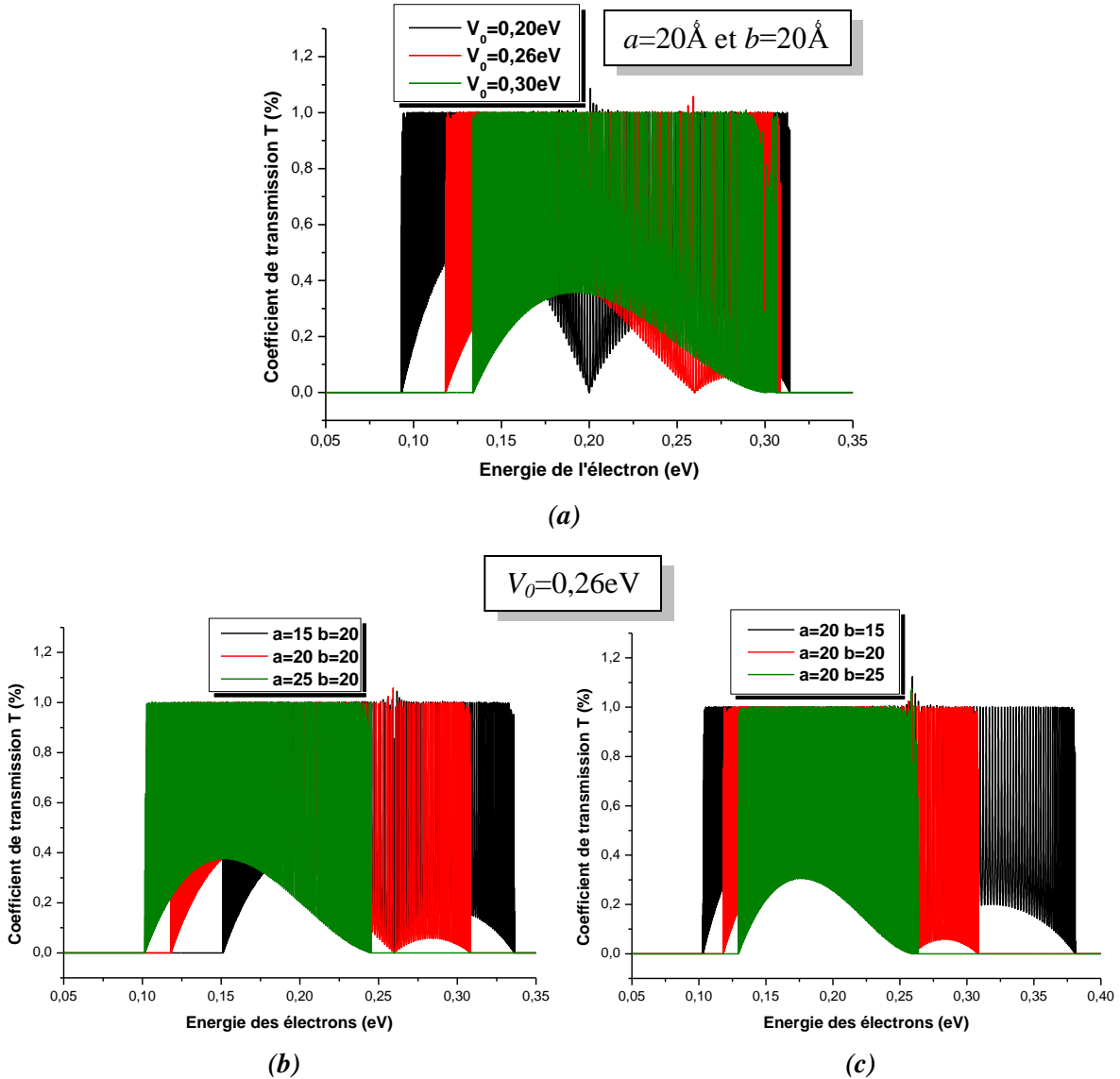
Nous fixons à présent les paramètres de notre structure en prenant une largeur de puits  $a=20\text{\AA}$ , et une épaisseur de barrière  $b=20\text{\AA}$ , tout en faisant varier la hauteur des barrières, c.à.d.  $V_0$ . A cet effet, trois hauteurs de barrières ont été considérées : 0,20eV, 0,26eV et 0,33eV. Ces valeurs correspondent respectivement aux concentrations en aluminium  $x$  égale à 0,27, 0,34 et 0,44 pour lesquelles nous avons un SR à gap direct. Les résultats sont donnés pour une structure à double et à triple barrière sur la figure III.6. Les résultats obtenus montrent une transmission par ETR égale à 1, donc état étendu, qui se décale vers les énergies plus élevées en augmentant la hauteur des barrières. Le même phénomène se produit dans la structure à triple barrières de telle manière que nous obtenons les deux états étendus des deux puits qui se décalent vers les hautes résonances avec l'augmentation de la hauteur de barrière. Ce phénomène est dû au recouvrement des fonctions d'ondes électroniques des électrons ayant une énergie proche du sommet de la barrière.



**Fig.III.6:** Coefficient de transmission électronique en fonction de l'énergie de l'électron pour plusieurs hauteurs de barrière  $V_0$ , avec  $a=b=20\text{\AA}$ , (a) dans une structure à double barrières (DB), (b) dans une structure à triple barrières (TB).

La simulation d'une structure à  $N$  barrières rectangulaires en fonction de différentes hauteurs de barrières puis pour différents paramètres structuraux est représentée sur la figure III.7. Nous observons la structure de minibande conventionnelle pour 399 régions (200 barrières et 199 puits). Il apparaît clairement sur cette figure que la variation des paramètres structuraux influent sur la largeur de la minibande, tout comme la variation des hauteurs de barrières obtenue en changeant les concentrations d'Aluminium  $x$ . Ainsi, pour un SR ayant pour paramètres  $a=b=20\text{\AA}$ , plus la hauteur des barrières est grande plus la minibande

contenant les 199 états étendu devient étroite. Il y a aussi rétrécissement et confinement de la bande permise avec l'augmentation de la largeur des puits. L'augmentation des épaisseurs des barrières provoque un considérable rétrécissement de la largeur de bande permise, avec un décalage des états résonants. En fait, ce décalage est lié aux paramètres structuraux  $a$  et  $b$ : Il peut être orienté vers le centre de la bande permise comme il peut être orienté vers la gauche ou la droite de la bande, comme représenté sur la figure III.7(c).



**Fig.III.7:** Coefficient de transmission électronique en fonction de l'énergie de l'électron d'un SR à 200 barrières (a) en fonction de différentes hauteurs de barrières  $V_0$ , (b) en fonction de différentes largeurs de puits  $a(\text{Å})$ , (c) en fonction de différentes épaisseurs de barrière  $b(\text{Å})$ .

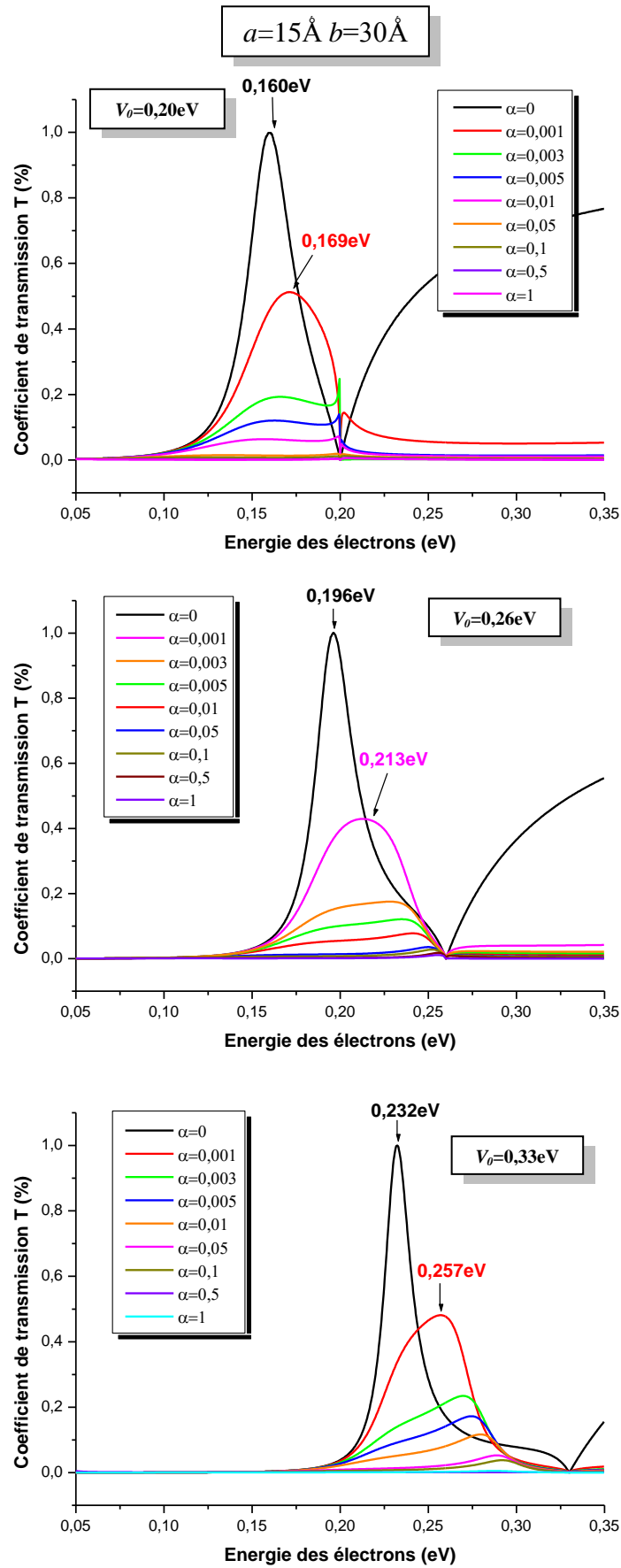
Tous les cas étudiés jusque là présentent des singularités lorsque l'énergie des électrons prend la même valeur que  $V_0$ . Dans ce cas là, La particule se trouve au sommet de la

barrière, où l'on ne connaît pas le comportement exacte de l'électron qui se propage, ainsi que la réponse du système correspondant. Sur certaines figures présentées le résultat se traduit pas une localisation (transmission nulle) à ce point précis, comme c'est le cas pour les structures à double, triple et 200 barrières sur les figures précédentes. Dans d'autres cas, cela exhiberai plutôt une augmentation inhabituelle de la transmission alors que cette dernière devait en réalité diminuer de manière monotone, comme il sera montré sur les figures suivantes, après introduction des interactions multicorps. Dans les deux cas, nous parlons alors d'états étendus singulièrement localisés à la valeur  $E=V_0$ . Les résultats obtenus avec ce logiciel sur les différentes structures étudiées concordent avec ceux trouvés dans la littérature [III.3-7,10-12], ce qui conclut à une validation du logiciel élaboré.

### ***III.3.1.b. Influence de l'interaction électronique:***

#### **➤ *En fonction de la hauteur des barrières:***

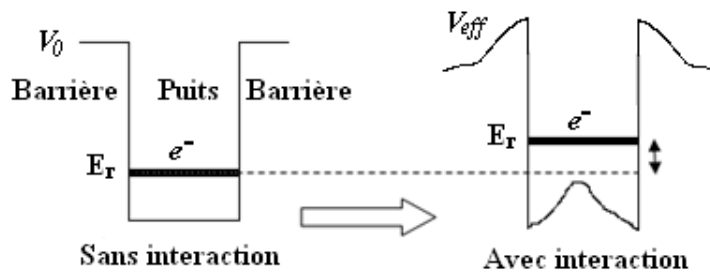
Nous allons, dans ce qui suit, étudier l'influence de l'interaction électronique sur les propriétés de transport d'un SR  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ . Les résultats de simulation obtenus par ce programme sur une structure à double, triples et N barrières en considérant plusieurs valeurs du taux d'interaction  $\alpha$  sont représentées sur les figures suivantes. Le taux d'interaction électronique  $\alpha$  est toujours positif, il traduit la répulsion plus ou moins forte de deux particules suivant que ces dernières soient plus ou moins éloignées l'une de l'autre. Les valeurs de  $\alpha$  sont prises de 0 jusqu'à 1 avec un pas non régulier. l'introduction de l'interaction électron-électron dans l'équation (II.73) implique l'usage de la notion de potentiel effectif, puisque le potentiel n'est plus sous forme de barrières rectangulaire, mais plutôt arbitraire. Pour la résolution d'une telle équation, nous avons adopté le formalisme de la matrice de transfert, avec résolution par le biais des ondes planes, dont la forme est donnée par la relation (II.78), en discrétisant chaque région à des paliers rectangulaires. Le nombre de palier  $n$  est pris égal à 50 [III.13], de telle manière à ce que la marche n'influe par sur la longueur d'onde électronique; En d'autres termes, si  $n$  est très petit, la longueur d'onde électronique sera inférieure à la largeur des paliers, et l'électron verra chaque palier comme une région distincte, ce qui nous amènera à l'étude d'une autre forme du profil de potentiel dite à escalier. La figure III.8 représente le coefficient de transmission d'une double barrières ayant pour paramètres  $a=15\text{\AA}$  et  $b=30\text{\AA}$ , pour trois hauteurs de barrières différentes : 0,20eV, 0,26eV et 0,33eV. Nous observons une diminution considérable de la transmission par ETR à travers la structure étudiée, et ce, dès l'introduction d'un second électron qui se propage au sein du même milieu ( $\alpha=0,001$ ).



**Fig.III.8:** Coefficient de transmission électronique pour une structure DB en fonction de plusieurs taux de l'interaction électronique, pour différentes hauteurs de barrières  $V_0$ .

Ceci peut être expliqué par le fait que les deux électrons, pendant leurs réflexions successives à l'intérieur du puits, voient leurs fonctions d'ondes interférer, ce qui engendre des états destructifs. La transmission est réalisée mais elle n'est pas optimale dans ce cas là ( $T < 1$ ) ; Ces états sont donc des états délocalisés. La localisation complète des états est atteinte pour une valeur d'interaction  $\alpha = 0,5$ : Il n'y a plus de transmission par ETR et les électrons restent confinés au fond du puits de potentiel.

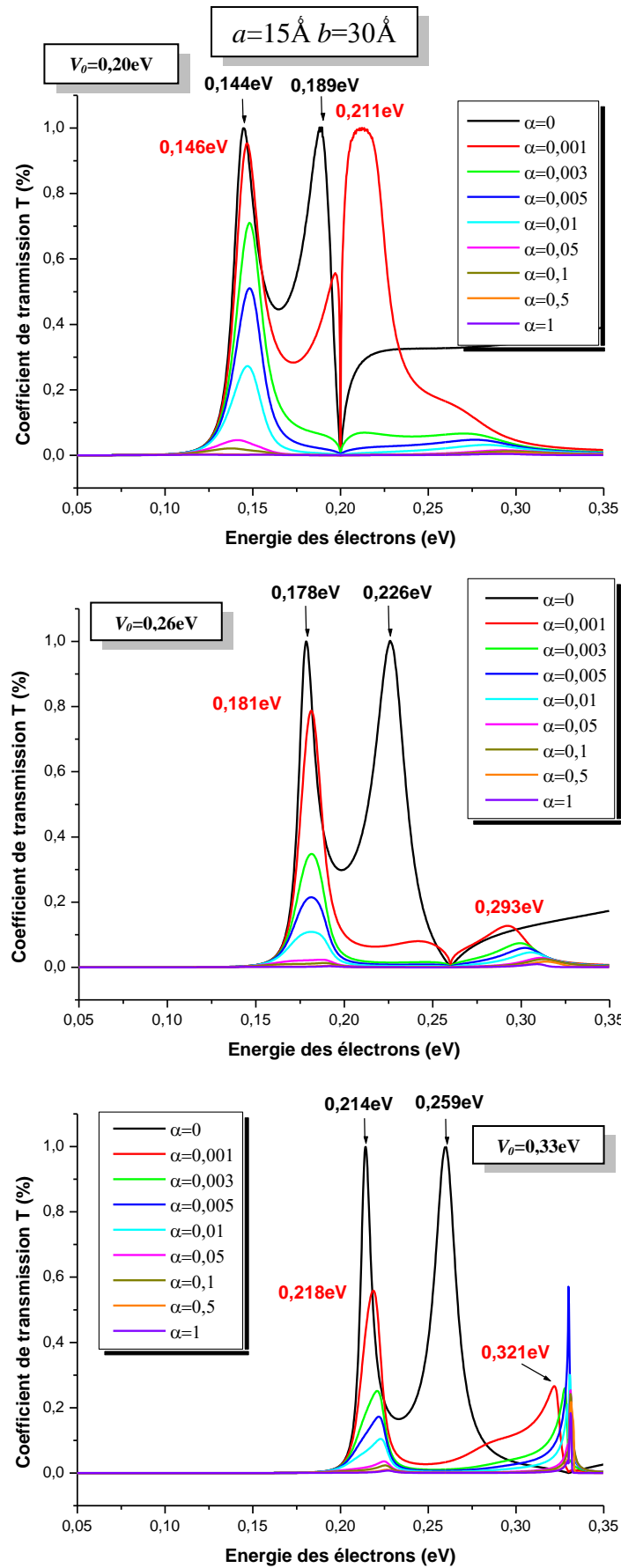
Un autre phénomène est observé sur la même figure : Celui du décalage des états permis vers des énergies plus élevées. En effet, plus l'interaction Coulombienne est forte, plus l'énergie de résonance des états permis est élevée. En rajoutant le terme de la répulsion électronique dans l'équation de Schrödinger, nous avons obtenu un nouveau potentiel arbitraire  $V_{eff}$ . Le décalage des états vers les énergies élevées traduit une déformation de ce profil vers le haut, ce qui conduit à une surélévation des états permis de transmission [III.14]. La figure suivante résume de manière qualitative le phénomène:



**Fig.III.9:** Représentation qualitative du profil de potentiel et des états permis avec et sans interaction électron-électron à l'intérieur du puits quantique [III.14].

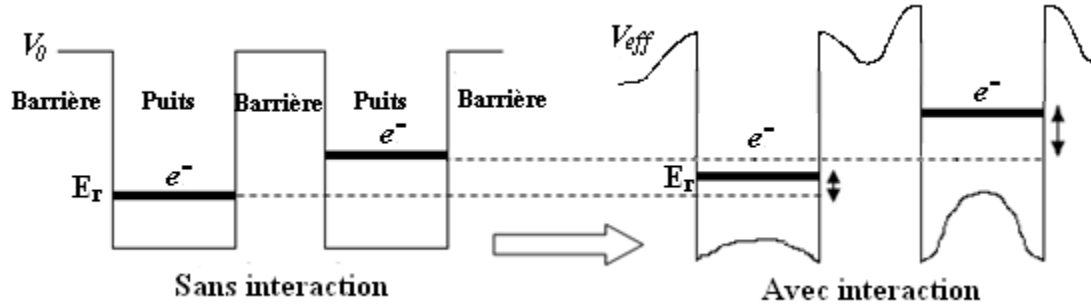
Les résultats obtenus jusque là pour la structure à double barrières sont en parfait accord avec ceux trouvés dans la littérature [III.14-15].

Les mêmes démarches effectuées plus haut sont réalisées pour une structure à triple barrières ayant les mêmes paramètres que la structure double barrières. Les résultats obtenus au moyen du programme élaboré sont présentés sur la figure III.10. On observe les mêmes phénomènes constatés dans la structure à double barrière, sauf qu'ici il existe deux résonances successives au lieu d'une seule. Plus explicitement, il y a diminution de la transmission électronique même pour les plus petites valeurs de l'interaction. Cette diminution est d'autant plus phénoménale pour la seconde résonance que pour la première du fait que les interactions destructives entre les ondes électroniques soient plus importantes dans le second que dans le premier puits, ceci revient à conclure que la surélévation du profil de potentiel au fond du



**Fig.III.10:** Coefficient de transmission électronique pour une structure TB en fonction de plusieurs taux de l'interaction électronique, pour différentes hauteurs de barrières  $V_0$ .

second puits est plus importante que celle opérée dans le premier (Figure III.11). Comme pour le cas de la double barrières, la localisation des états est atteinte pour un taux d'interaction  $\alpha=0,5$ .



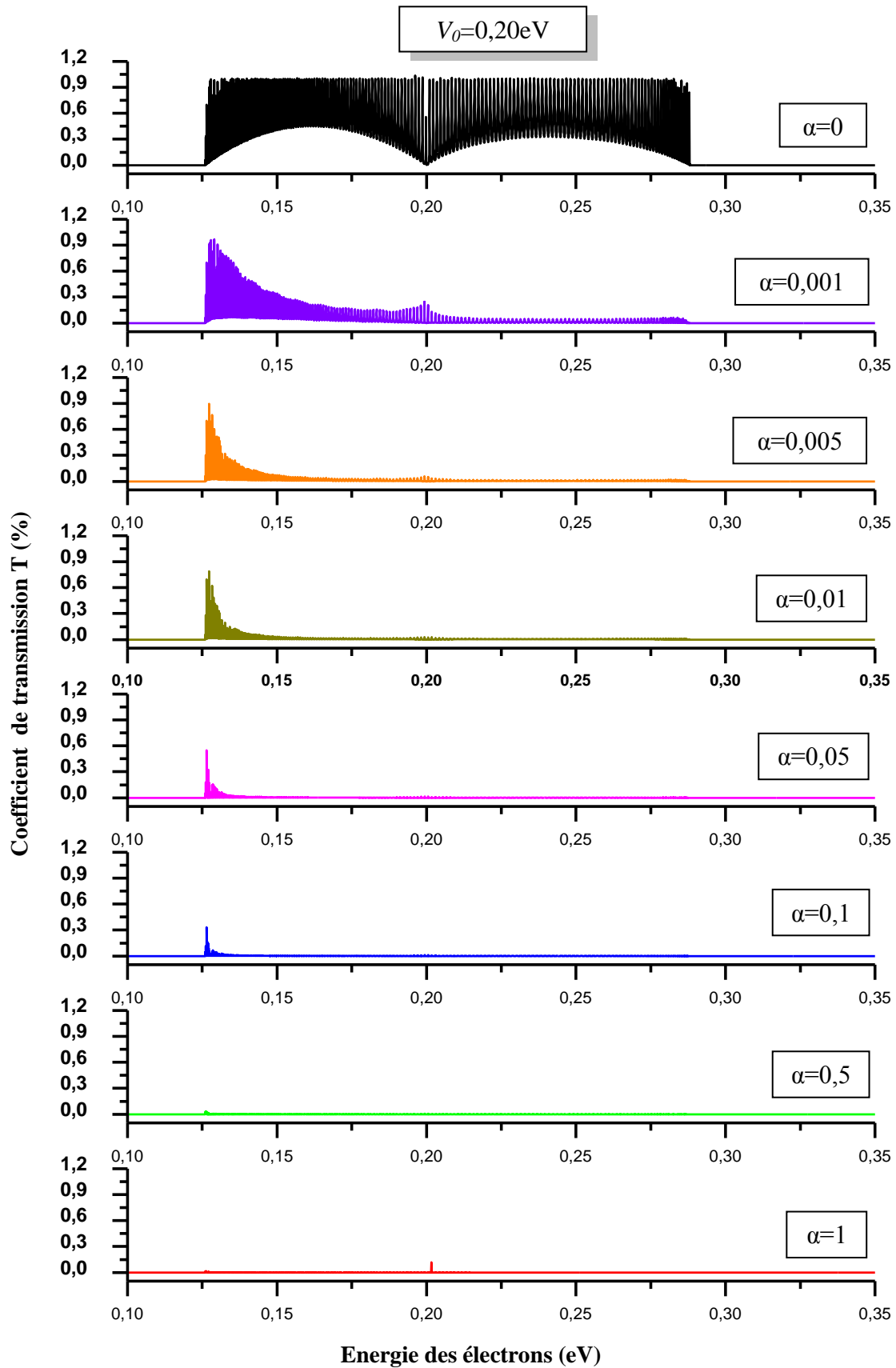
**Fig.III.11:** Représentation qualitative du profil de potentiel et des états permis avec et sans interaction électron-électron dans une triple barrière.

Dans les deux structures étudiées, la diminution est d'autant plus élevée que la hauteur des barrières est grande ce qui est prévisible puisque plus la barrière est haute, plus les électrons auront du mal à la traverser. En effet, pour qu'il y ait transmission par ETR, il est nécessaire pour ces particules d'avoir une énergie importante.

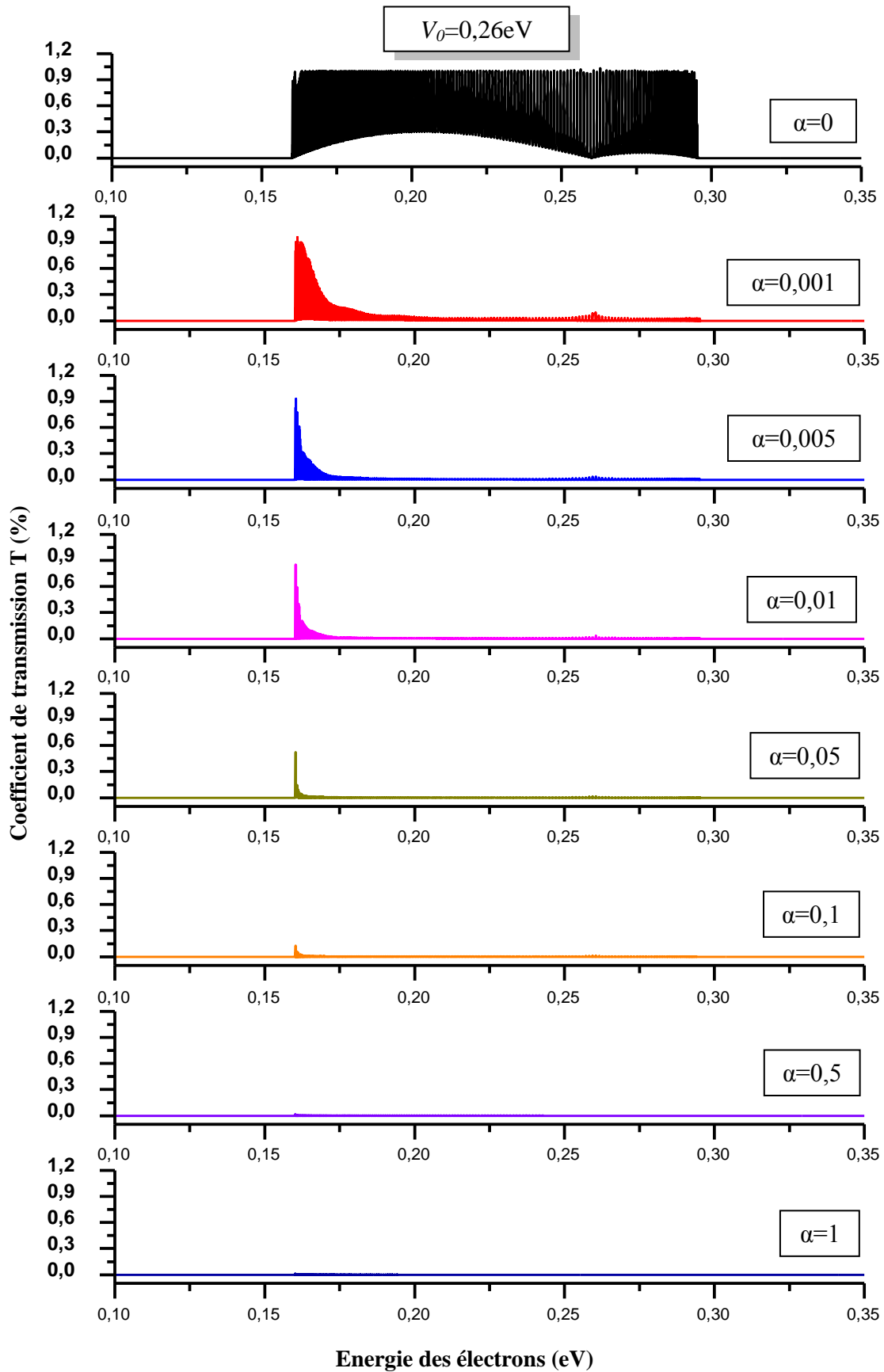
La diminution de la transmission dans les cas étudiés plus haut est rapide et brutale, même pour de faibles interactions électroniques ( $\alpha=0,001-0,003$ ). Cette diminution continue mais de manière plus lente pour les valeurs restantes ( $\alpha$  allant de 0,005 jusqu'à 1).

Les figures III.12, III.13 et III.14 donnent les résultats de simulation pour un SR constitué de 200 barrières, en préservant les mêmes paramètres étudiés plus haut, c.à.d.  $a=15\text{Å}$  et  $b=30\text{Å}$ , pour les hauteurs de barrières 0,20eV, 0,26eV et 0,28eV respectivement, en fonction du taux de l'interaction  $\alpha$ . Avant d'introduire l'interaction électron-électron, nous obtenons pour les trois hauteurs de barrières la structure de minibande constituée d'états étendus singulièrement localisés aux valeurs  $E=V_0$ .

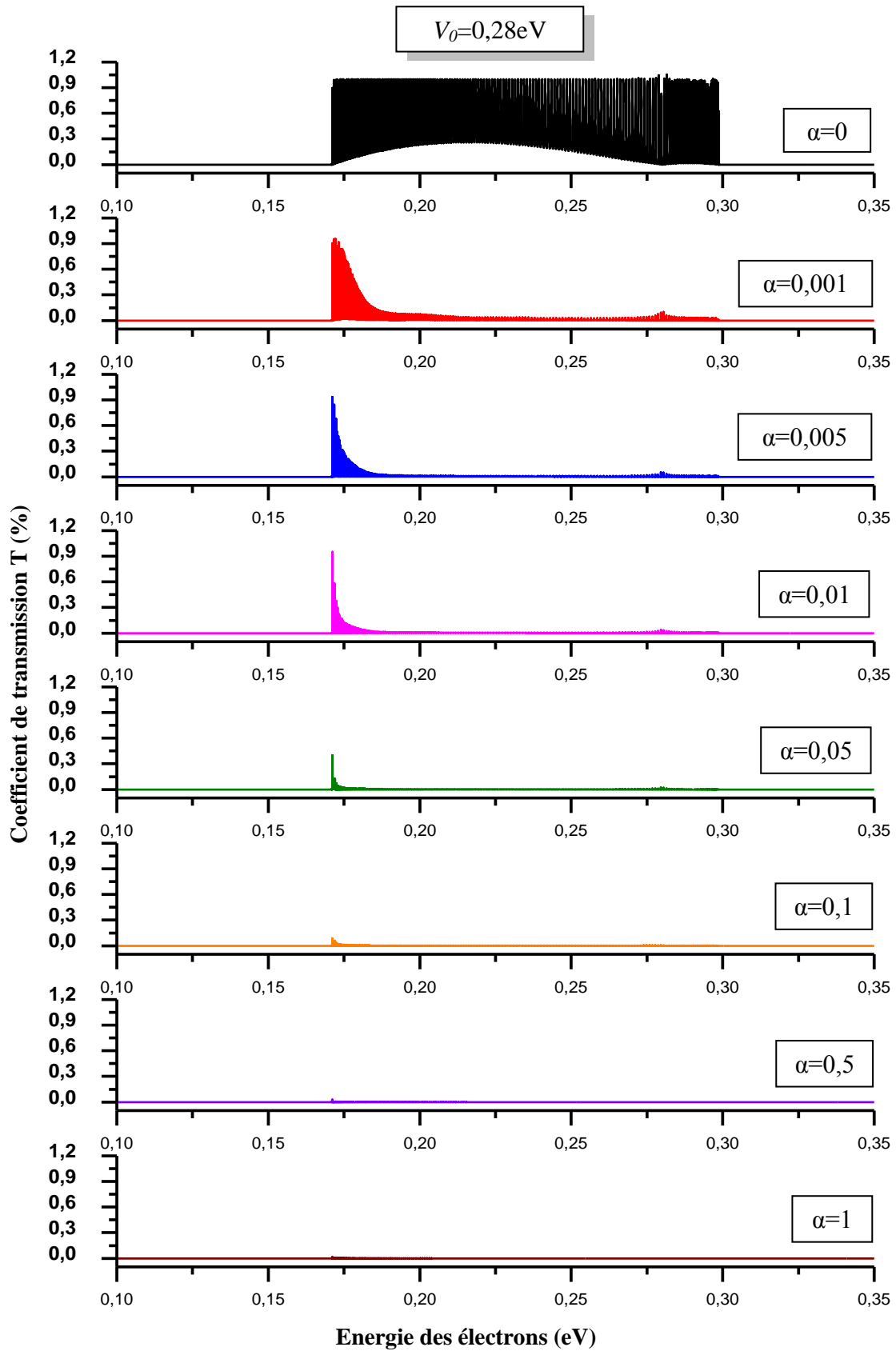
Le même phénomène observé plus haut se produit ici, à savoir, une délocalisation des états transmissives à partir du premier puits. La diminution de la transmission est plus phénoménale sur tout le long de la structure. Nous obtenons ainsi des états électroniques délocalisés et localisés dans les puits piégés entre les barrières. Cette diminution s'effectue de manière exponentielle. La localisation est atteinte plus rapidement lorsque la hauteur des barrières est plus grande. Dans tous les cas, elle est obtenue pour un taux d'interaction  $\alpha=0,5$  et 1. En effet, plus les électrons sont proches l'un de l'autre, plus les interférences destructives entre leurs ondes associées respectives sont importantes.



**Fig.III.12:** Coefficient de transmission électronique pour une structure à 200 barrières en fonction de plusieurs taux de l'interaction électronique, pour  $V_0=0,20\text{eV}$ ,  $a=15\text{Å}$  et  $b=30\text{Å}$ .



**Fig.III.13:** Coefficient de transmission électronique pour une structure à 200 barrières en fonction de plusieurs taux de l'interaction électronique, pour  $V_0=0,26\text{eV}$ ,  $a=15\text{Å}$  et  $b=30\text{Å}$ .



**Fig.III.14:** Coefficient de transmission électronique pour une structure à 200 barrières en fonction de plusieurs taux de l'interaction électronique, pour  $V_0=0,28\text{V}$ ,  $a=15\text{Å}$  et  $b=30\text{Å}$ .

Néanmoins, nous ne remarquons pas le décalage des états délocalisés vers des énergies plus élevées. En réalité, ce décalage existe, mais il n'est pas perceptible ici à cause du très grand nombre de barrières étudiés. De plus, il est plus prononcé dans les derniers puits, au bout de la structure, mais ceci n'est pas visible pour cause de localisation dans cette région.

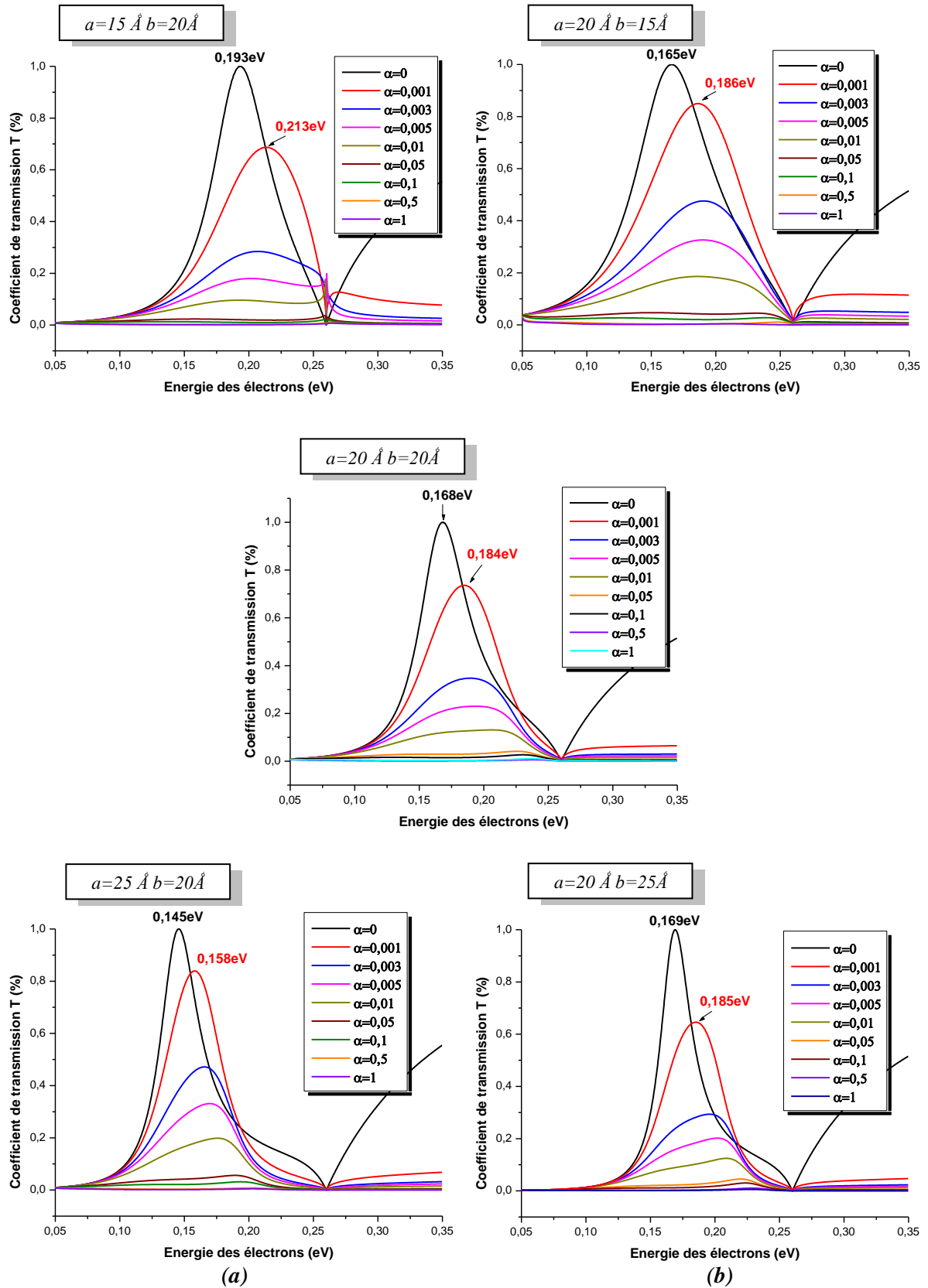
➤ *En fonction des paramètres de la structure:*

Nous fixons cette fois-ci la hauteur des barrières à  $V_0=0,26\text{eV}$ , ce qui limite l'étude à un SR  $\text{Al}_{0,34}\text{Ga}_{0,66}\text{As}$ , et nous étudions l'évolution de la transmission électronique pour les mêmes taux d'interactions considérés précédemment. L'étude effectuée pour des structures à double et à triple barrières est présentée sur les figures III.15 et III.16 respectivement. Ces dernières montrent le confinement conventionnel des états à l'intérieur des puits plus ce dernier devient large. Avec l'introduction de la nonlinéarité dans ces structures, la délocalisation des états est toujours présente même pour des taux infimes d'interaction ( $\alpha=0,001, 0,005.. \text{etc.}$ ). La figure III.15(a) montre l'évolution de la délocalisation des états à l'intérieur du puits, cette dernière est d'autant plus importante que le puits est étroit; Ceci peut s'expliquer par le fait que plus la largeur du puits est petite, plus la probabilité pour les deux électrons de se croiser est importante, par conséquent, les interactions destructives deviennent plus intenses. La localisation est atteinte pour une interaction  $\alpha=0,5$ .

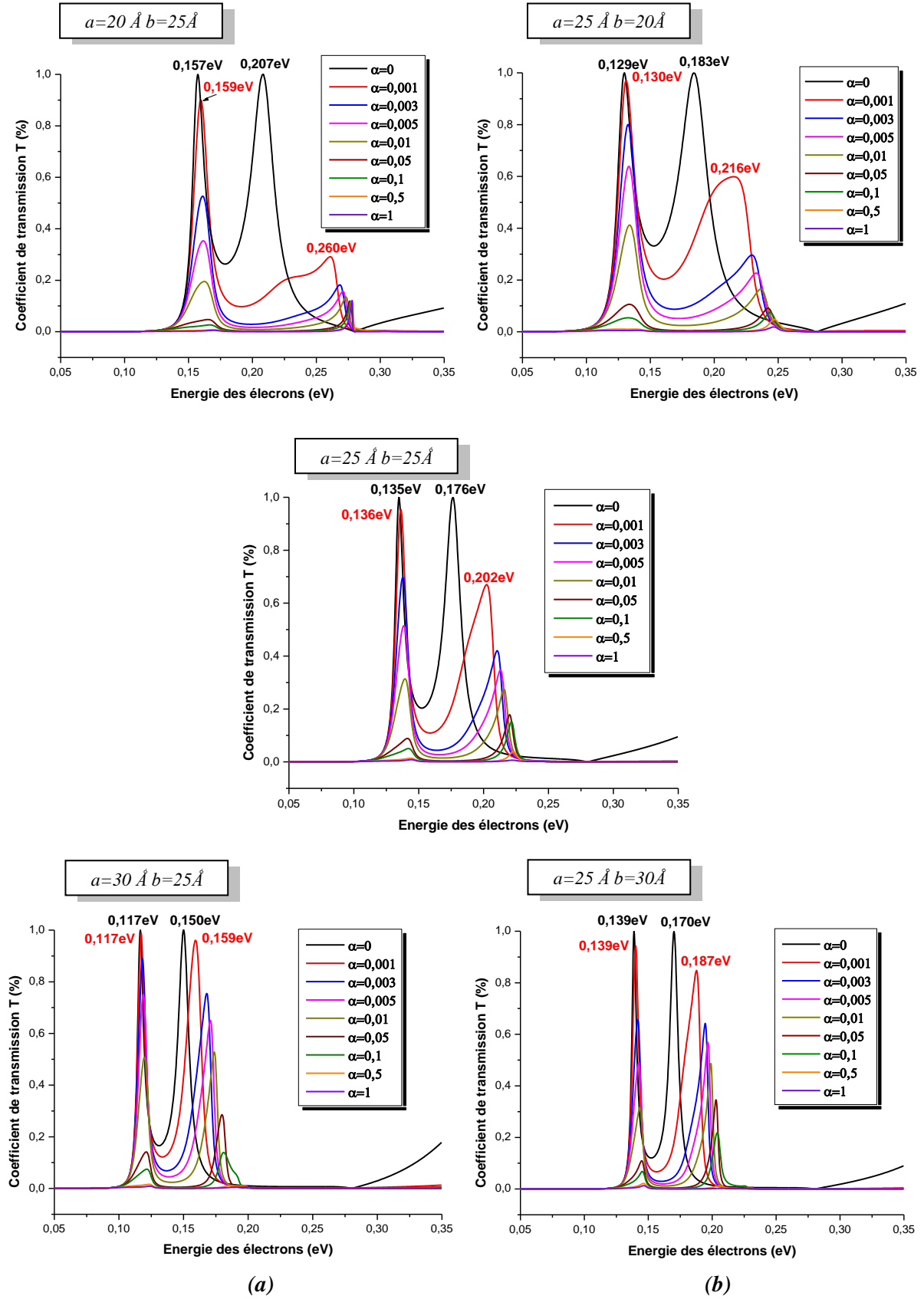
En faisant varier l'épaisseur de barrière seulement (Figure III.15(b)), nous constatons que la diminution de la transmission est plus rapide pour les barrières les plus épaisses, du fait que le recouvrement des états quasi-liés à l'intérieur des puits diminue, ce qui les rend découplés dans ces cas là.

Dans la structure à triple barrière, dont les propriétés de transmission sont représentées sur la figure III.16, les mêmes constatations comme pour la structure à double barrières sont faites: Nous observons une diminution brutale dans la transmission par ETR avec des petites largeurs de puits due toujours aux interférences destructives importantes qui s'opèrent. Cette diminution est plus élevée dans le second puits pour les barrières moins épaisses: les interférences destructives entre les ondes électronique y sont plus fortes.

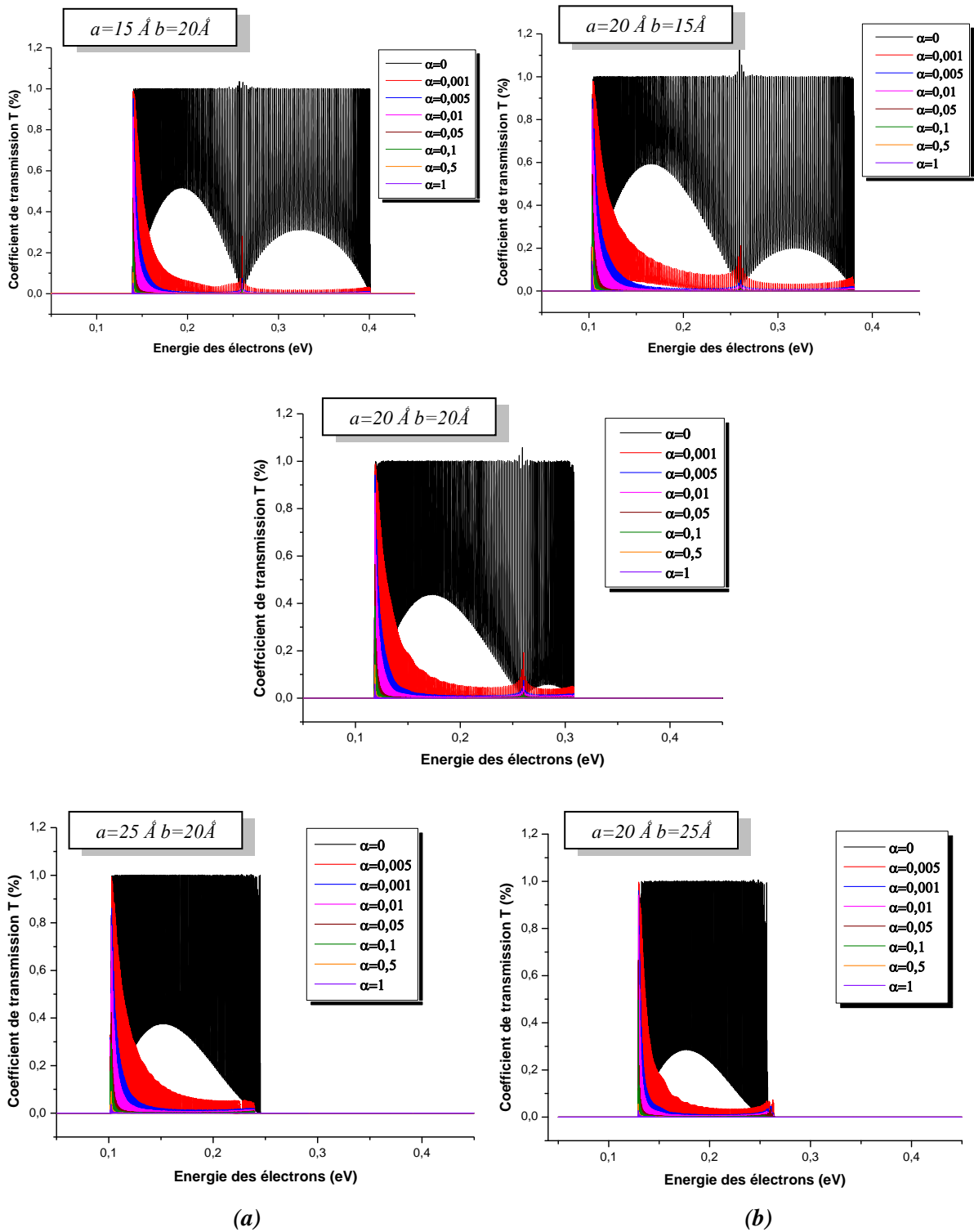
La même étude structurale en fonction des effets électroniques nonlinéaires a été reproduite sur un système de 200 barrières. Les résultats sont présentés sur la figure III.17. Prenant comme référence les mêmes paramètres de structure choisis pour la double et la triple barrières. Le confinement des états étendus, traduit par la présence de la minibande, vers le fond des puits en fonction de l'élargissement de ce dernier est visible sur cette figure.



**Fig.III.15:** Coefficient de transmission électronique pour une structure DB en fonction de plusieurs taux de l'interaction électronique pour une hauteur de barrière  $V_0=0,26\text{eV}$  (a) pour différentes largeurs de puits  $a(\text{\AA})$ , (b) pour différentes épaisseurs de barrières  $b(\text{\AA})$ .



**Fig.III.16:** Coefficient de transmission électronique pour une structure TB en fonction de plusieurs taux de l'interaction électronique pour une hauteur de barrière  $V_0=0,28\text{eV}$  (a) pour différentes largeurs de puits  $a(\text{\AA})$ , (b) pour différentes épaisseurs de barrières  $b(\text{\AA})$ .



**Fig.III.17:** Coefficient de transmission électronique pour une structure à 200 barrières en fonction de plusieurs taux d'interaction électronique, pour  $V_0=0,26\text{eV}$ , (a) Pour différentes largeurs de puits  $a(\text{\AA})$ , (b) pour différentes épaisseurs de barrières  $b(\text{\AA})$ .

La délocalisation des états électroniques s'opère dès la première interaction nonlinéaire  $\alpha=0,001$ , et s'avère être d'autant plus brutale pour des puits étroits, et ce, pour les mêmes raisons mentionnées précédemment dans le cas de la double et de la triple barrières.

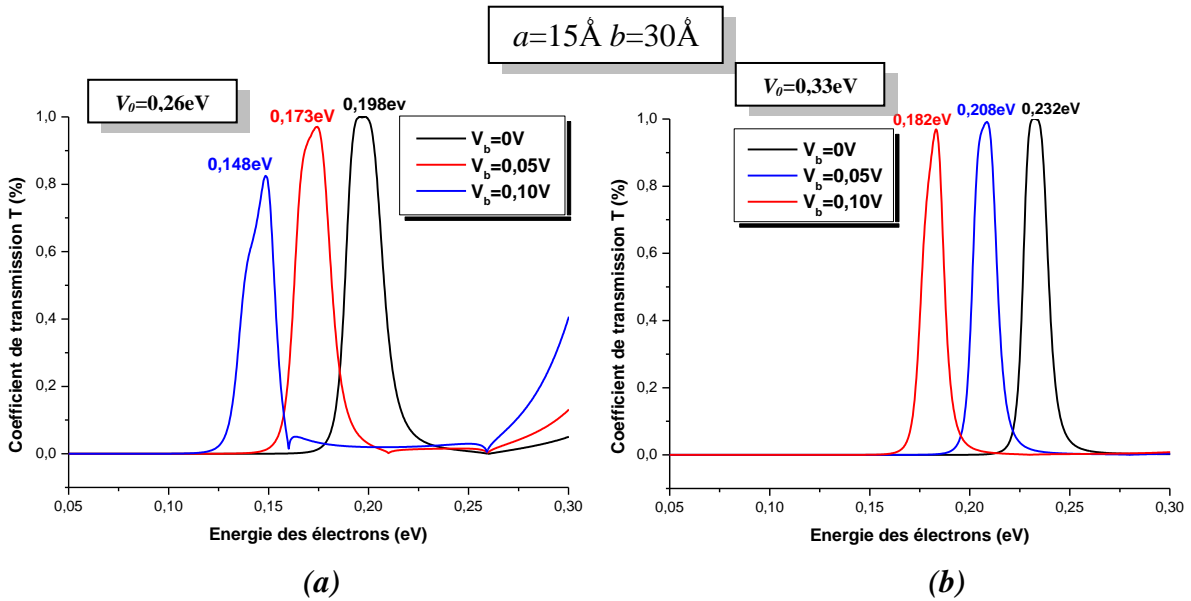
Tous comme pour la structure à double ou à triple barrières, plus les barrières sont fines plus la transmission est élevée. Elle chute brutalement lorsque l'épaisseur de la barrière augmente. On remarque dans tous les cas une diminution de la transmission sous forme exponentielle.

Pour un taux d'interaction égal à 1, il n'y a pas localisation totale, il existe une très faible transmission électronique pour les premières régions, qui s'annule très rapidement tout au long de la structure étudiée, plus on s'éloigne dans le milieu.

### III.3.2. Étude des structures soumises au champ externe $V_b$ :

#### III.3.2.a. Sans l'influence de l'interaction électronique:

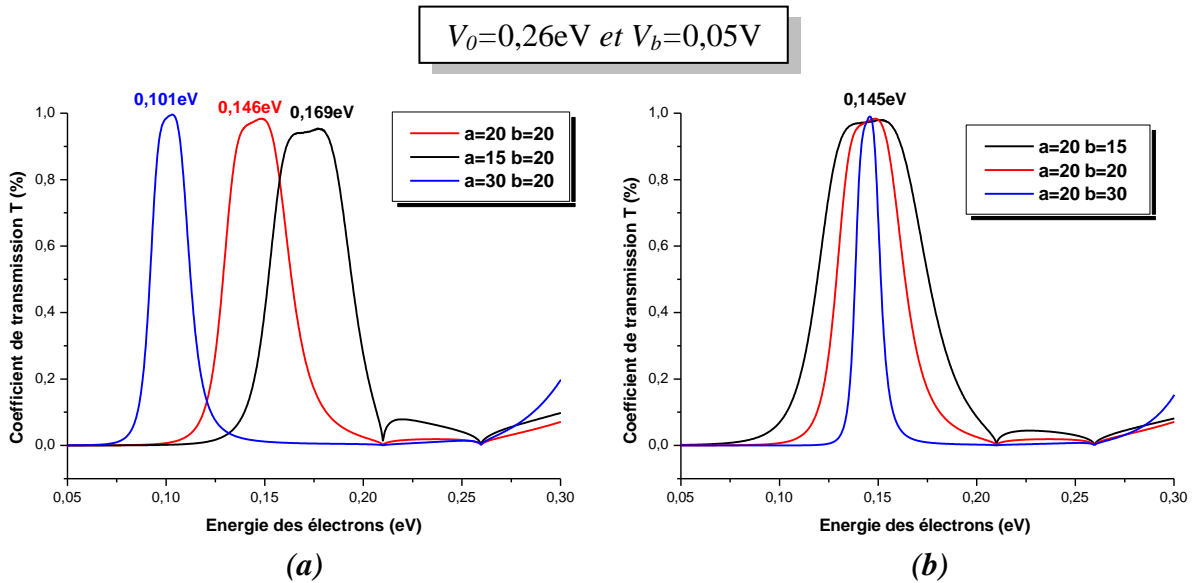
En soumettant les structures à un champ externe, noté  $V_b$ , le profil de potentiel devient linéaire (Figure II.4): Les puits sont alors découplés et les niveaux d'énergies désalignés. En examinant la transmission dans les mêmes structures à doubles barrières étudiées précédemment, pour des hauteurs de la barrière rectangulaire 0,26eV et 0,33eV, et des intensités du champ externe 0V, 0,05V et 0,10V, nous obtenons les figures suivantes:



**Fig.III.18:** Variation du coefficient de transmission en fonction du champ externe  $V_b$  pour une DB ayant les paramètres structuraux  $a=15\text{\AA}$  et  $b=30\text{\AA}$ , et les hauteurs de barrières (a)  $V_0=0,26\text{eV}$  (b)  $V_0=0,33\text{eV}$ .

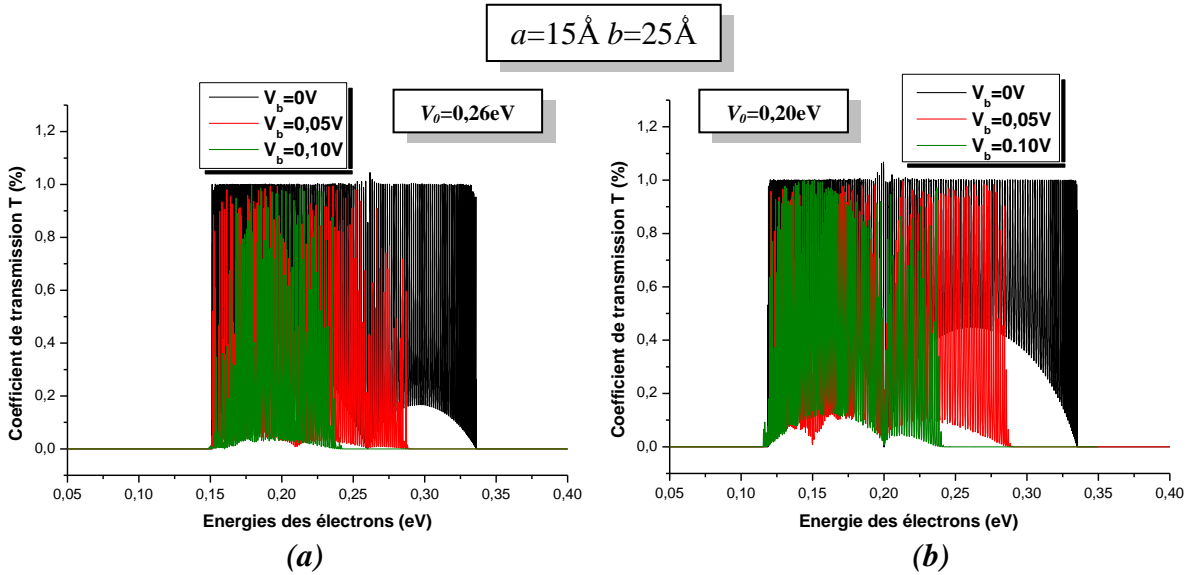
Ces figures montrent un décalage de l'état résonant vers les basses énergies. Ce confinement traduit le désalignement entre les différents états des trois puits successifs, suite à la linéarisation du profil de potentiel [III.3,16-18]. Il en résulte une diminution de la transmission électronique. Cette diminution est plus faible lorsque la hauteur de la barrière est plus élevée.

La figure III.19 présente une étude de l'influence du champ externe d'intensité 0,05V sur la double barrières, en fonction des paramètres structuraux. L'écartement vers les basses énergies de l'état résonant pour des puits plus larges apparaît clairement sur la figure, ainsi que le rétrécissement du pic résonant en fonction de l'augmentation de l'épaisseur de la barrière. Ces phénomènes ont déjà été commentés au début de ce chapitre.



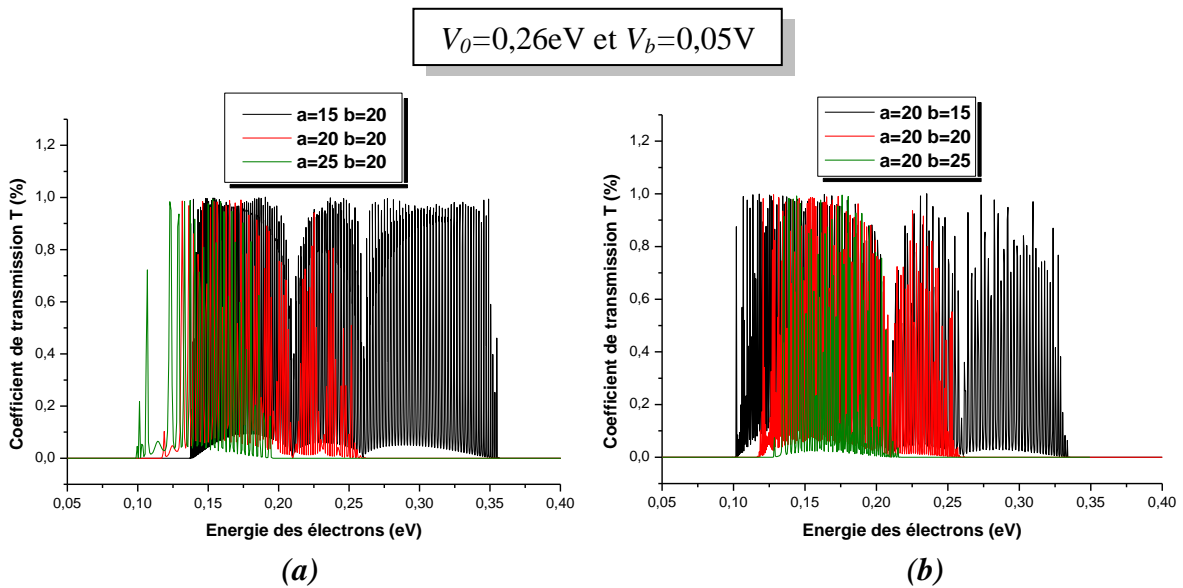
**Fig.III.19:** Variation du coefficient de transmission en fonction des paramètres structuraux d'une DB de hauteur  $V_0=0,26\text{eV}$ , sous l'influence d'un champ externe  $V_b=0,05\text{V}$ , (a) pour différentes largeurs de puits  $a$ (Å), (b) pour différentes épaisseurs de barrières  $b$ (Å).

Les résultats de simulation du coefficient de transmission pour la structure  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  à 200 barrières soumise à plusieurs intensités de voltage externe  $V_b$  (0V, 0,05V et 0,10V) est montrée sur la figure III.20. Elle dévoile la structure de minibande relative aux 199 états étendus des puits quantiques et leur confinement lors de l'augmentation du champ  $V_b$ , pour les deux concentrations en Aluminium  $x=0,34$  et  $x=0,27$  relatives au hauteurs 0,26eV et 0,20eV respectivement.



**Fig.III.20:** Variation du coefficient de transmission en fonction de l'énergie, sous l'influence de plusieurs intensités de champ externe  $V_b$ , pour un SR à 200 barrières ayant les paramètres de structure  $a=15\text{Å}$  et  $b=25\text{Å}$ , de hauteurs (a)  $0,26\text{eV}$ , (b)  $0,20\text{eV}$ .

Sous l'influence d'une perturbation externe d'intensité  $0,05\text{V}$ , le coefficient de transmission du SR  $\text{Al}_{0,34}\text{Ga}_{0,66}\text{As}$  est représenté sur la figure III.21 en fonction des paramètres  $a$  et  $b$  de la structure. Le comportement du SR reste le même que pour la double ou la triple barrières avec diminution de la transmission parfois en dessous de l'unité, et donc du courant électrique qui circule dans le système étudié à cause du désalignement des états permis avec le niveau de fermi, où la transmission est optimale.



**Fig.III.21:** Variation du coefficient de transmission d'un SR à 200 barrières de hauteur  $0,26\text{eV}$ , sous l'influence d'un champ externe  $V_b=0,05\text{V}$ , (a) pour différentes largeurs de puits  $a(\text{Å})$ , (b) pour différentes l'épaisseurs de barrières  $b(\text{Å})$ .

Les résultats exposés ici sont bien connus, et concordent tout à fait avec ceux trouvés dans les travaux effectués sur les SR [III.3-7,10-12,18]. Le but d'avoir simulé de tels résultats était de vérifier le bon fonctionnement du logiciel élaboré, afin de pouvoir l'appliquer au cas de la nonlinéarité.

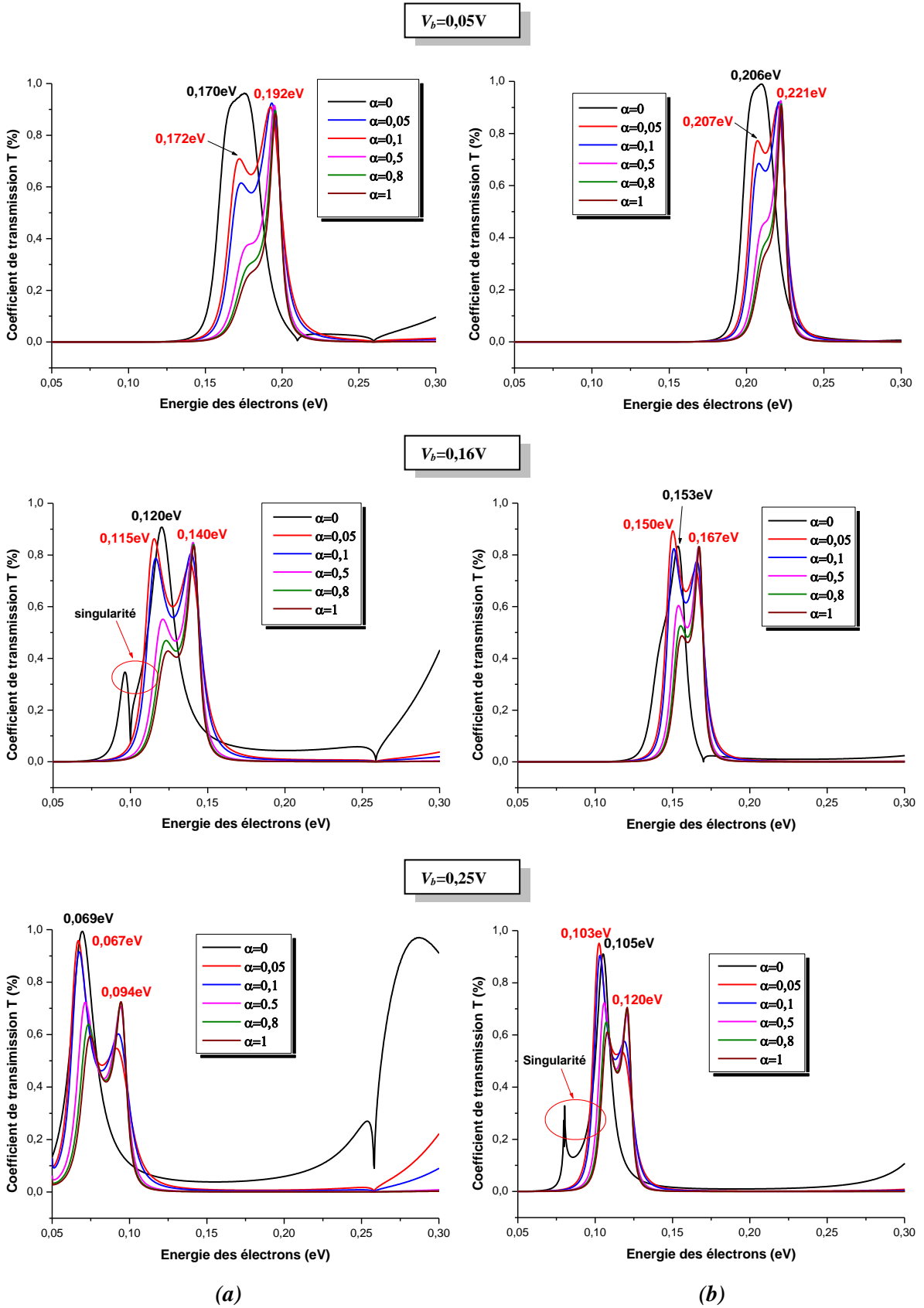
### **III.3.2.b. Influence de l'interaction électronique:**

#### **➤ En fonction de la hauteur des barrières:**

Avec l'introduction de la répulsion Coulombienne entre les deux électrons qui se propagent dans la structure, le potentiel effectif varie très rapidement de manière arbitraire. Ce dernier contient à la fois la valeur de la hauteur de barrière initiale  $V_0$ , l'intensité du champ appliqué  $V_b$  ainsi que la probabilité d'interaction électronique donnée par le produit  $\alpha \cdot |\psi^2|$ .

Nous considérons deux valeurs de la concentration en Aluminium  $x$  relatives à des hauteurs de barrières initiales 0,26eV et 0,33eV, pour plusieurs potentiels externes  $V_b$  appliqués sur une structure à double barrières, en faisant varier à chaque fois le taux d'interaction  $\alpha$  de 0 jusqu'à 1. Les courbes associées tracées sur la figure III.22 montrent, en premier lieu, le pic de résonance caractéristique d'un état permis relatif à un électron qui se propage seul dans la structure ( $\alpha=0$ ), est qui est égal à l'unité dans le cas où  $V_b=0$ , et diminue progressivement lors de l'augmentation de  $V_b$ . On observe clairement aussi le shift des pics vers les faibles énergies associé à la linéarisation du profil de potentiel. Ce pic disparaît pour des valeurs du champ appliqué supérieur à 0,25V dans le cas de  $V_0=0,26\text{eV}$ .

Pour les valeurs de  $\alpha>0$ , il y a répulsion Coulombienne entre les deux électrons, de telle manière que l'état permis initial se scinde en deux états permis bien distincts sous l'influence du potentiel externe appliqué. Ceci prouve l'existence des deux électrons dans le même milieu. En fait, pour les deux électrons, il existe deux résonances distinctes ayant la même énergie, donc le même état permis, et ce, même en l'absence de  $V_b$ : Cet état est dit "dégénéré". Lorsque le champ externe  $V_b$  est appliqué, il agit telle une perturbation, et les deux états relatifs aux deux électrons sont séparés, d'où l'apparition des deux pics ayant des énergies de résonances très proches. Le taux de transmission du premier état délocalisé obtenu diminue graduellement, tandis qu'il croît sensiblement pour le second, incluant une partie de la transmission perdue dans le premier. Il y a décalage des deux états dégénérés vers les énergies élevées lorsque la probabilité d'interaction augmente toujours à cause de la déformation du profil de potentiel vers le haut. Toutes les figures montrent une surélévation des états à l'intérieur des puits d'autant plus importante avec l'augmentation de la hauteur réelle de la barrière  $V_0$ .

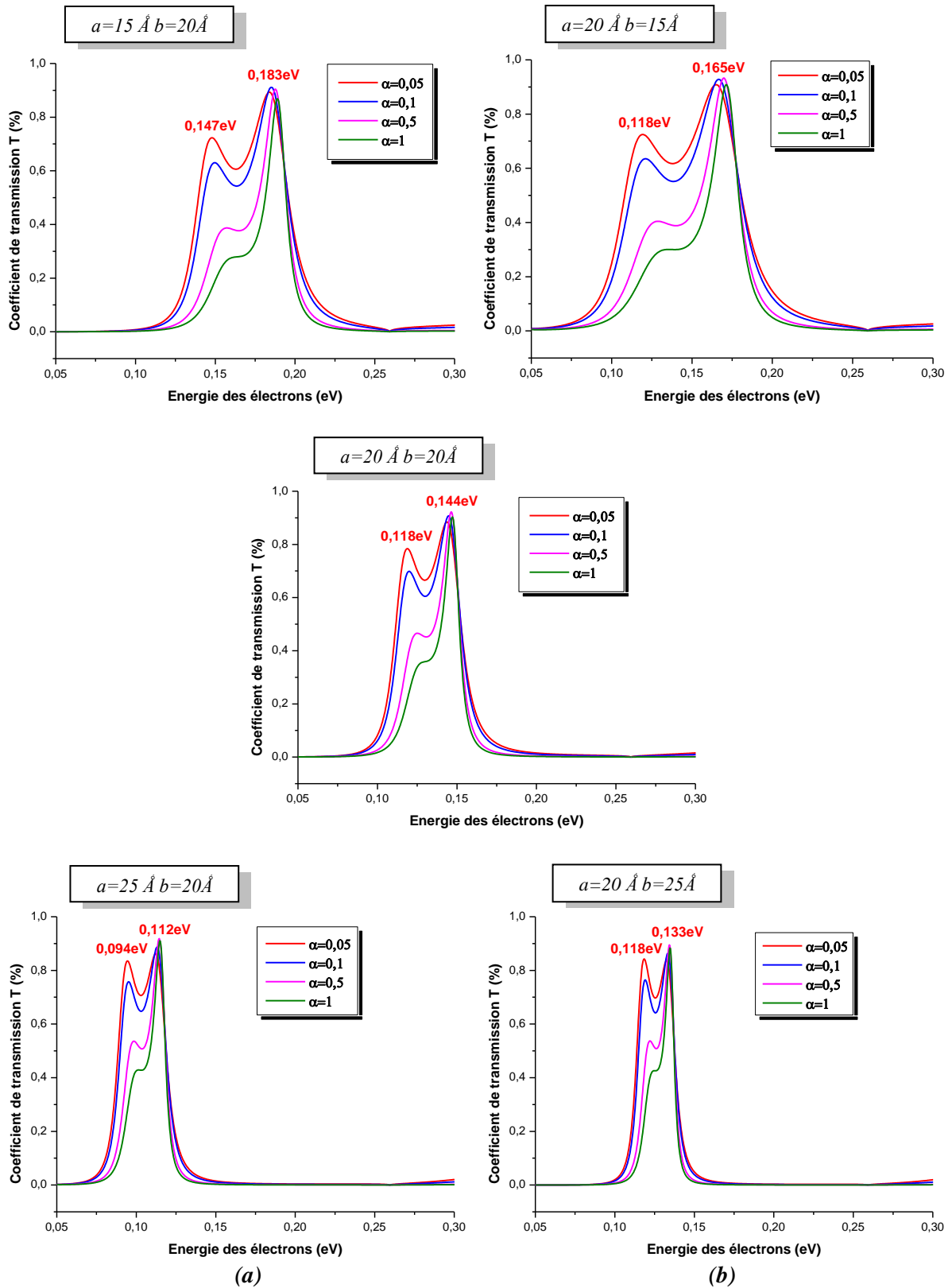


**Fig.III.22:** Variation du coefficient de transmission pour des paramètres structuraux  $a=15\text{\AA}$  et  $b=25\text{\AA}$ , d'une structure à DB sous l'influence des champs externes  $V_b=0,05\text{V}$ ,  $0,16\text{V}$  et  $0,25\text{V}$  (de haut en bas) pour des hauteurs de barrières réelles  $V_0$  (a)  $0,26\text{eV}$ , (b)  $0,33\text{eV}$ .

➤ *En fonction des paramètres structuraux:*

Nous effectuons à présent l'étude pour une double barrières en fixant la valeur de la hauteur de barrière  $V_0$  à 0,26eV, et celle du champ externe  $V_b$  à 0,10V, tout en variant les paramètres  $a(\text{Å})$  et  $b(\text{Å})$ . Les résultats sont tracés sur la figure III.23.

Nous obtenons sur cette figure les deux états dégénérés dus à l'effet de la nonlinéarité, dont les énergies de résonances se rapprochent pour des puits larges. Ceci est dû au décalage des deux états vers le fond du puits, ce décalage étant plus important pour le second état, vu que ce dernier est plus éloigné du fond. Le même phénomène est observé pour les barrières, de telle manière que plus celles-ci deviennent épaisses, plus l'écartement entre les deux états est important: Le décalage vers le haut de la barrière est plus rapide pour le second que pour le premier état à cause du recouvrement des fonctions d'ondes électroniques qui est plus important pour les électrons ayant des énergies élevées. L'ensemble n'atteint pas l'unité pour les paramètres considérés.



**Fig.III.23:** Variation du coefficient de transmission d'une structure à double barrières de hauteur  $V_0=0,26$ V, sous l'influence du champ externe  $V_b=0,10$ V, (a) pour différentes largeurs du puits  $a(\text{\AA})$ , (b) pour différentes épaisseurs de barrières  $b(\text{\AA})$ .

### III.3. Conclusion:

Nous avons étudié l'effet de l'interaction répulsive entre électrons sur les propriétés de transport électronique dans des structures à double, à triple et à 200 barrières. La nonlinéarité, reflétant l'interaction Coulombienne entre deux électrons adjacents, est introduite au moyen d'un potentiel effectif dans l'équation de Schrödinger. Pour les structures double et triple barrières sans voltage externe, l'interaction électronique se traduit par une diminution phénoménale de la transmission électronique due aux interférences destructives entre les ondes électroniques. Elle devient plus intense pour des taux d'interactions élevés, jusqu'à la localisation complète des états. Cette diminution est de forme exponentielle pour un SR à multitudes de régions. Ce phénomène est en parfait accord avec les résultats trouvés par Diez et *al.* sur des profils à double barrières [III.14-15].

Afin d'obtenir un courant électrique circulant dans les hétérostructures, il est nécessaire d'appliquer une différence de potentiel entre l'émetteur et le collecteur, ce qui a pour but de faire correspondre le niveau de Fermi avec les énergies des états permis. Ce champ externe vient s'ajouter au terme du potentiel effectif qui, une fois de plus, change de forme et varie très rapidement. Les résultats obtenus pour une structure à double barrières montrent une levée de dégénérescence traitée par l'apparition de deux états énergétiques permis au lieu d'un seul à l'intérieur du puits quantique, et évoluant de manière différentes. Les deux électrons possèdent ainsi un état dégénéré. Cet état se divise en deux après l'application du voltage. Dans tous les cas, une déformation du profil de potentiel traduit une augmentation des énergies de résonances avec l'augmentation du taux d'interaction.

---

### III.4. Références:

- [1] P. W. Anderson, Phys. Rev. 109, 1492 (1958).
- [2] I. M. Lifchitz, S. A. Gradeskul, L. A. Pastur , "*Introduction to the theory of disordered systems*", Wiley interscience publication, New York (1988).
- [3] S. Terkhi, S. Bentata, R. Djelti, B. Bouadjemi, Results in Physics. 2, 198 (2012).
- [4] S. Terkhi, Z. Aziz , B. Bouadjemi, S. Bentata, Superlattices and Microstructures. 56, 16 (2013).
- [5] S. Bentata, Superlattices and Microstructures, 37: 297 (2005).
- [6] Z. Aziz, S. Bentata, R. Djelti, J. App. Sci. 7(3) 3140 (2006).
- [7] R. Djelti, S. Bentata, Z. Aziz, Lebanese Science journal, vol.8, N° 01 (2007).
- [8] W. L. Bloss, J. Appl. Phys. 65, 4789 (1989).
- [9] S. Adachi, J. App. Phys. 58 R1 (1985).
- [10] R. Tsu and L. Esaki, App. Phys. Lett. 22, 562 (1973).
- [11] S. S. Allen and S. L. Richardson, Phys. Rev. B 50, 11 693 (1994).
- [12] S. S. Allen and S. L. Richardson, J. App. Phys. 79, 886 (1996).
- [13] M. O. Vassell, J. Lee, and H. F. Lokwood, J. App. Phys. 54, 5206 (1983).
- [14] E. Diez, F. Domínguez-Adame, A. Sánchez, Phys. Lett. A 215, 103 (1996).
- [15] E. Diez, F. Domínguez-Adame, A. Sánchez, Phys. Lett. A 198, 403 (1995).
- [16] Z. Aziz, S. Bentata, R. Djelti, Y. Sefir, Solid State Commun. 150, 865 (2010).
- [17] R. Djelti, Z. Aziz, S. Bentata, A. Besbes, Superlattice Microstruct 50, 659 (2011).
- [18] F. Berz, Semincond. Sci. Technol. B, 243 (1993).

## **CONCLUSION GÉNÉRALE**

## ***Conclusion générale***

Des progrès considérables ont été fait pour la compréhension des propriétés de transmission électronique par effet tunnel, pour les milieux linéaires et nonlinéaires, à travers de larges études théoriques, numériques et expérimentales. La nonlinéarité dans les systèmes concernés, tels que les semiconducteurs, résultent essentiellement des phénomènes de diffusion inélastiques telles que les interactions électron-électron, ainsi que l'interaction électron-réseau cristallin, appelée aussi interaction électron-phonon.

L'interaction électronique est introduite dans l'équation de Schrödinger en terme de probabilité d'interaction, la rendant nonlinéaire. Afin de résoudre une telle équation, la notion de potentiel effectif a été intégrée. Comme conséquence directe de cette transformation est la modification du profil de potentiel cristallin qui prend une forme arbitraire. Le problème se limite alors à trouver une méthode pour analyser ce type de profils de potentiels.

En utilisant l'approximation de la masse effective ainsi que les conditions de continuité de Bastard, une formulation mathématique utilisant le modèle de la matrice de transfert avec résolution par la méthode des ondes planes à été adaptée à notre cas.

Pour les structures à double, à triples, et à N barrières, une diminution de la transmission électronique apparaît, lorsque les systèmes ne sont soumis à aucune perturbation extérieure. Pour de forts taux d'interaction électronique, la transmission s'annule, ce qui s'explique par l'apparition et l'augmentation des interactions destructives entre les ondes électroniques. Le même phénomène a été trouvé par Diez et *al.* [1-2].

L'intérêt de telles structures est de pouvoir les utiliser dans diverses applications optoélectroniques, un courant doit en pratique parcourir les structures afin d'optimiser leur tâche. Lors de l'application d'un voltage externe sur une structure à double barrières, l'influence de l'interaction électron-électron montre un nouveau phénomène: celui d'une levée de dégénérescence traute par l'apparition de deux états permis délocalisés à l'intérieur du puits. En réalité, les deux niveaux existaient même lorsqu'il n'y avait pas de perturbation externe, ils étaient cependant, confondus, le voltage externe à juste permis de les séparer. Ce résultat est contradictoire à celui de Diez et *al* [1-2], qui, comme pour le cas précédent, à observé une simple décroissance de la transmission.

quelques-uns des travaux qui ont étudié le problème de la transmission électronique prédisent que la nonlinéarité entraîne une diminution de la localisation d'Anderson [3-6], d'autres travaux prédisent le contraire [7-10], d'autre affirment que cette localisation des états n'est pas réduite de manière significative [11]. Cette diversité dans les résultats obtenus provient du fait que dans le régime nonlinéaire, il existe différentes manière de poser le problème, en fixant l'amplitude de l'onde incidente et calculer celle de l'onde transmise, par exemple. Dans ce cas précis, l'énergie transmise n'est pas unique et peut décroître exponentiellement [8]. Autrement, si c'est l'amplitude de sortie qui est fixée, c'est une décroissance en loi de puissance qui est obtenue [3]. Ainsi, la localisation des états peut ne pas avoir de réponse unique.

Dans tous les cas, un décalage des états vers des résonances plus élevées est obtenu révélant une déformation du profil de potentiel à l'intérieur des puits quantiques.

Comme perspectives, nous proposons d'appliquer notre modèle sur une structure à N barrières. L'application de cette méthode à des structures en introduisant l'effet de la température est également envisageable.

**Références:**

- [1] E. Diez, F. Domínguez-Adame, A. Sánchez, *Phys. Lett. A* 198, 403 (1995).
- [2] E. Diez, F. Domínguez-Adame, A. Sánchez, *Phys. Lett. A* 215, 103 (1996).
- [3] P. Devillard, B. Souillard, *J. Stat. Phys.* 43, 423 (1986).
- [4] Q. Li, C. M. Soulokis, S. Pnevmatikos, E. N. Economou, *Phys. Rev. B* 38, 11888 (1988).
- [5] Yu. S. Kivshar, S.A. Gredeskul, A. Sanchez, L. Vasquez, *Phys. Rev. Lett.* 64, 1693 (1990).
- [6] R. Bourbonnais, R. Maynard, *Phys. Rev. Lett.* 64, 1397 (1990).
- [7] R. Knapp, G. Papanicolaou, B. White, in: A.R. Bishop, D.K. Campbell, S. Pnevmatikos (Eds.), *Disorder and Nonlinearity*, Springer-Verlag, Berlin, 1989.
- [8] B. Doucot, R. Rammal, *Europhys. Lett.* 3, 969 (1987).
- [9] J. Frolich, T. Spencer, C.E. Wayne, *J. Stat. Phys.* 42, 247 (1986).
- [10] C. Albanese, J. Frolich, T. Spencer, *Commun. Math. Phys.* 119, 677 (1988).
- [11] M. J. McKenna, R.L. Stanley, J.D. Mnnard, *Phys. Rev. Lett.* 69, 1807 (1992).

## **TRAVAUX LIÉS À CETTE THÈSE**

## Travaux liés à cette thèse

### ➤ *Publication internationale:*

**Z. F. MEGHOUFEL, S. BENTATA, S. TERKHI, F. BENDAHMA, S. CHERID**

*"Electronic transmission in non-linear potential profile of GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As biased quantum well structure"*.

Superlattices and Microstructures, Volume **57**, p.115-122, **Mars 2013**.

### ➤ *Communications:*

**Z. 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/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As"*

10<sup>ème</sup> Congrès National de la Physique et ses applications, **CNPA'2012**, Mostaganem, 20-22 Novembre **2012**.

**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 électronique des superréseaux quasi périodiques InAs/In<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As"*

10<sup>ème</sup> Congrès National de la Physique et ses applications, **CNPA'2012**, Mostaganem, 20-22 Novembre **2012**.

**S. TERKHI, S. BENTATA, Z.F.MEGHOUFEL, B. BOUADJEMI, F. BENDAHMA et Y. SEFIR**

*"Effet de la fraction molaire « x » sur les propriétés de transport électronique des superréseaux générés par des séquences spécifiques"*

Première Journée Scientifique des Doctorants, **JSDOCFST-2012**, Mostaganem, 14 Mai **2012**.

**B. BOUADJEMI, S.TERKHI, Z.F. MEGHOUFEL et S. BENTATA**

*"Étude de la transmission électronique et la densité de courant dans les superréseaux à profil de potentiel aléatoire type Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As"*

Première Journée Scientifique des Doctorants, **JSDOCFST-2012**, Mostaganem, 14 Mai **2012**.

**S. TERKHI, S. BENTATA, Z. F. MEGHOUFEL et B. BOUADJEMI**

*"Electronic transmission of correlated disorder InAs/Ga<sub>1-x</sub>In<sub>x</sub>As supperlattices with applied bias"*

Deuxième Journée Scientifique de Génie des Procédés, **2<sup>ème</sup> JSDGP**, Mostaganem, 13 Avril **2011**.

**F. BENDAHMA, Y. SEFIR, S. TERKHI, Z. F. MEGHOUFEL et S. BENTATA**

*"Émission laser dans un superréseau désordonné"*

10<sup>ème</sup> Congrès National de la Physique et ses applications, **CNPA'2012**, Mostaganem, 20-22 Novembre **2012**.

**S. CHERID, S. BENTATA, Z.F. MEGHOUFEL, A. ZITOUNI, S. TERKHI, Y. SEFIR, B.BOUADJEMI.**

*"Étude de la transmission balistique dans les cristaux photoniques"*.

Deuxième Journée Scientifique des Doctorant, **JSDOCFST-2013**, Mostaganem, 19 Mai **2013**.

Y. SEFIR, A. AZIZ, F. BENDAHMA, S. TERKHI, **Z. F. MEGHOUFEL**, S. CHERID, S. BENTATA

*"Étude de l'effet des paramètres structuraux sur la nature des états électroniques des superréseaux quasipériodiques de fibonacci"*.

Deuxième Journée Scientifique des Doctorants, **JSDOCFST-2013**, Mostaganem, 19 Mai **2013**.

F. BENDAHMA, S. BENTATA, Y. SEFIR, S. TERKHI, **Z. F. MEGHOUFEL**

*"L'influence des paramètres structuraux sur les propriétés optoélectroniques d'un superréseau désordonné"*

Première Journée Scientifique des Doctorants, **JSDOCFST-2012**, Mostaganem, 14 Mai **2012**.

Y. SEFIR, Z. AZIZ, S. BENTATA, F. BENDAHMA, S. TERKHI et **Z. F. MEGHOUFEL**

*"Étude des propriétés optoélectroniques des superréseaux quasipériodiques"*

Première Journée Scientifique des Doctorants, **JSDOCFST-2012**, Mostaganem, 14 Mai **2012**.