



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

Université Abdelhamid Ibn Badis Mostaganem

Faculté des Sciences Exactes et des Sciences de la Nature et de la Vie
Département de Physique

MEMOIRE

Présenté pour l'obtention du diplôme de

MAGISTER EN PHYSIQUE

OPTION : Modélisation des propriétés optoélectroniques des systèmes quantiques
unidimensionnels

Par
SEFIR YAMINA

Intitulé:

ETUDE DES PROPRIETES
OPTOELECTRONIQUES DES SUPERRESEAUX
QUASIPERIODIQUES

Devant le jury :

Président	M. Bourahla Ahamed	M.C «A»	Université de Mostaganem
Examineur	M. Aibout Abdellah	M.C «A»	Université de Mostaganem
Examineur	M. Zerdali Mokhtar	M.C «B»	U.S.T.O
Encadreur	M. Bentata Samir	M.C «A»	Université de Mostaganem
Co encadreur	M. Aziz Zoubir	M.C «B»	Université de Mostaganem

ANNEE UNIVERSITAIRE : 2009_ 2010

Remerciements

Je remercie dans ce mémoire toutes les personnes qui de près ou de loin ont contribué à son élaboration et m'ont aidé moralement, matériellement et spirituellement.

Je tiens à remercier Monsieur Bentata Samir et Monsieur Aziz Zoubir pour leurs aides précieuses durant la réalisation de ce mémoire.

Mes remerciements s'adressent à Monsieur Bourahla Ahmed pour avoir accepté de présider ce jury ainsi qu'à pour tous les membres du jury, J'associe à mes remerciements toute l'équipe de recherche du département de physique ainsi à ma voisine Dalila qui m'encouragé à achever ce modeste mémoire.

Dédicaces

**Je dédie ce mémoire à mon défunt mari
Mohamed, mon Frère Ghollamallah, mes parents,
mes frères et Sœurs, ma belle famille, mes
proches et mes amis et surtout à mon rayon de
soleil ma fille Aya.**

Yamina

TABLE DES MATIERES

INTRODUCTION GENERALE	01
CHAPITRE I GENERALITES SUR LES SEMICONDUCTEURS ET LES SUPERRESEAUX	
1.1. INTRODUCTION	03
1.2. SEMICONDUCTEURS	04
1.2.1. Définition	04
I.2.2. Structure cristalline	04
I.2.2.1. Géométrie du réseau cristallin	04
I.2.2.2. Réseau réciproque – Zone de Brillouin	05
I.2.2. 3. Etats électroniques dans les semiconducteurs	06
I.2.2.3.1. Structure de bandes	06
I.2.3. Types de semiconducteurs	08
I.2.3.1. Semiconducteurs intrinsèques	08
I.2.3.2. Semiconducteurs extrinsèques	08
I.2.4. Dopage d'un semiconducteur	08
1.2.4.1. Effet du dopage sur la structure de bandes d'énergie	09
I.3. SUPERRESEAUX	09
I.3.1. Définition	10
I.3.2. Types de superréseaux	10
I.3.2.1. superréseaux à puits et à barrières rectangulaires	10
I.3.2.2. Superréseaux polytypes	11
I.3.2.3. SR à dents de scie	11
I.3.2.4. SR à masse effective	12
I.3.2.5. SR à puits quantiques paraboliques	13
I.3.2.6. SR à modulation de dopage	14
I.3.2.7. SR à potentiel de Mathieu	14
I.3.2.8. SR quasipériodiques	14
I.3.3. Matériau GaAs et Al_xGa_{1-x}As	15
I.3.4. classification des superréseaux	16
I.3.5. Technique de fabrication	17
I.3.5.1. Epitaxie par jets moléculaires	17
I.3.5.2. Epitaxie en phase vapeur	18
I.3.6. Propriétés des superréseaux	19
I.3.6.1. Structure des minibandes	19
I.3.6.2. Effet tunnel résonnant	19
I.3.6.3. Temps de l'Effet tunnel résonnant	20
I.3.7. Application lasers	20
I.3.7.1. Structure d'une diode laser	21
I.3.7.2. laser à cascade quantique	22
I.4. CONCLUSION	23
I.5. REFERENCES	25
CHAPITRE II STRUCTURES UNDIMENSIONNELLES QUASIPERIODIQUES	
II-1. SYTÈME ORDONNÉ	28
II.2 SYSTEMES DESORDONNÉS	29

II.3. SYSTEMES QUASIPERIODIQUE	30
II.3.1. Propriétés structurales	31
II.3.1.1. Coupe et projection	31
II.3.1.2. Propriétés d'invariance	32
II.3. 2. Les superréseaux quasipériodiques de Fibonacci	33
II.4. CONCLUSION	35
II.5. REFERENCES	36

CHAPITRE III FORMALISMES ET METHODES DE CALCULS

III.1. INTRODUCTION	38
III.2.APPROXIMATIONS ET CONDITIONS DE CONTINUITES	38
III.2.1.Approximation de la masse effective	38
III.2.2. Fonction enveloppe et conditions de continuité	39
III.3. MODELES ET METHODES THEORIQUES	40
III.3.1. Calcul du coefficient de transmission T	41
III.3.1.1.En absence de tension appliqué ($V_a= 0$)	41
III.3.1.2.En présence de tension appliqué (V_a)	45
III.3.2.Temps de l'effet tunnel résonant	48
III.4. CONCLUSION	49
III.5. REFERENCES	50

CHAPITRE VI RESULTATS ET DISCUSSIONS

IV.1.INTRODUCTION	52
VI.2. STRUCTURES ORDONNEES	53
IV.2.1. Une barrière rectangulaire	53
IV.2.2. Double barrières rectangulaires	54
IV.2.2.1. Coefficient de transmission	54
IV.2.2.2.Temps de l'effet tunnel résonant	55
IV.2.3. Triple barrières	56
IV.2.4. N Barrières ($N>3$)	57
IV.3. STRUCTURES QUASIPERIODIQUES	59
IV.3.1. Effet de la largeur du puits	60
IV.3.2. Effet de l'épaisseur de barrière	64
IV.3. 3. Effet de la hauteur de barrière	66
IV.4.EFFETS DE LA TENSION APPLIQUEE SUR LES STRUCTURES QUASIPERIODIQUES	70
IV.5. REFERENCES	72
CONCLUSION GENERALE ET PERSPECTIVES	74

INTRODUCTION GENERALE

INTRODUCTION GENERALE

La découverte des semiconducteurs a permis un développement massif de l'électronique contemporaine. Le transport dans les semiconducteurs a été décrit par la physique quantique. Il repose sur le fait qu'un électron voit son énergie quantifiée lorsqu'il se déplace au sein d'un arrangement périodique d'atomes, il apparaît alors des bandes d'énergies interdites. Ces matériaux utilisent le phénomène des bandes d'énergie interdites.

Les superréseaux à base de semiconducteurs III-V sont au sein de ce mémoire, leurs fabrications est basées sur la technique de croissance notamment : l'épitaxie par jets moléculaires ("Molecular Beam Epitaxy"), l'épitaxie phase vapeur aux organo-métalliques ("Metal Organic Chemical Vapor Deposition"), etc. leurs constructions est basé sur le profil de potentiel ayant différentes formes. Ces applications technologiques sont utilisées dans les lasers à semiconducteurs et les diodes lasers à effet tunnel résonant.

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

Dans le premier chapitre, Nous décrivons les généralités sur les semiconducteurs et les superréseaux. Leurs définitions, les types, les propriétés et techniques de fabrications ainsi que leurs applications dans les lasers.

Dans le chapitre deux une synthèse bibliographique a été effectuée pour présenter différents types de système unidimensionnel en décrivant la nature des différents états électroniques responsable du transport dans ces systèmes.

Le chapitre trois traite les différents formalismes utilisés pour la détermination de la structure de minibandes. En utilisant le modèle Kronig-Penney et la méthode de Matrice de transfert pour calculer le coefficient de transmission en absence et en présence de la tension appliqué et le temps de l'effet tunnel résonnant qui repose sur la résolution de l'équation de Schrödinger utilisant les fonctions d'Airy et la technique de la Lorentzienne, en utilisant le logiciel « *SUPERRESEAUX* ».

Dans le dernier chapitre, nous présenterons une interprétation des résultats obtenus lors de la simulation du coefficient de transmission pour des structures périodiques et quasipériodiques.

Enfin, notre mémoire s'achève par une conclusion et des perspectives.

CHAPITRE I
GENERALITES SUR LES
SEMICONDUCTEURS ET LES
SUPERRESEUX

CHAPITRE I

GENERALITES SUR LES SEMICONDUCTEURS ET LES SUPERRESEAUX

1.1. INTRODUCTION

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

L'industrie électronique s'est mise en branle dans les années 1950 jusqu'aux années 1970 [I.1] à base de semiconducteur de germanium (Ge) puis, en silicium (Si) qui possède de meilleures qualités électronique mais qui nécessite une très grande pureté monocristalline.

Les composants semiconducteurs, pièces maîtresses de toute chaîne de conversion permettent désormais d'utiliser des structures à la fois plus simples à contrôler, et plus performantes en termes de rendement et de qualité de l'énergie [I.2]

Esaki et Tsu [I.3] furent la découverte des premiers superreseaux à partir de semiconducteur des familles III et V : $GaAs-(Al,Ga)As$ [I.4]. Ce système demeure comme le plus étudié à ce jour, et a déjà fait l'objet de nombreuses applications [I.5]. Leurs processus sont un empilement de couches ultra fines dont la période était inférieure au libre parcours moyen des électrons. En 1985 les superreseaux métalliques et semiconducteurs ont été réalisés par Chang et Giessen [I.6]. Au début des années 1990, Lijima et al [I.7] ont réalisé les premiers superreseaux d'oxydes ferroélectriques.

Ce chapitre est basé sur la définition des semiconducteurs et des superreseaux, quelque technique de fabrications, leurs propriétés électroniques, leurs différents types de classification, ensuite leurs applications.

1.2. SEMICONDUCTEURS

1.2.1. Définition

Un semiconducteur est un solide, dont les propriétés de conduction sont déterminées par deux bandes d'énergie ; les bandes supérieures sont les bandes de conduction, les bandes inférieures sont les bandes de valence. Au zéro degré absolu la bande de valence est pleine d'électrons, la bande de conduction est vide. [I.8]

1.2.2. Structure cristalline

1.2.2.1. Géométrie du réseau cristallin

Un cristal est construit à partir d'un groupe de " n " particules (figure I.1), qui constituent la cellule de base. Ce groupe est répété périodiquement en un réseau défini par, trois vecteurs de translation \vec{a} , \vec{b} et \vec{c} appelés vecteurs primitifs.

La position de chaque cellule du cristal est définie par un vecteur du réseau :

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

Où n_1 , n_2 et n_3 sont des nombres entiers. L'ensemble des points défini par les vecteurs \vec{r} pour toutes les valeurs de n_1 , n_2 , n_3 constituent le réseau. Le parallélépipède construit sur les trois vecteurs primitifs constitue la maille primitive ou maille élémentaire. Le volume de la maille élémentaire est défini par :

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

La maille élémentaire contient un seul nœud, elle contient huit nœuds mis en commun avec huit mailles adjacents.

Le système cubique est le système dans lequel cristallisent la grande majorité des semiconducteurs et en particulier le Si, Ge et la plupart des composés III-V et certains II-VI, par exemple : AlAs, GaAs.....etc. ont une structure cristallographique de type Zinc blende.

Le réseau du silicium (Si), de germanium (Ge) et du diamant (figure I.2) sont constitués de deux réseaux cubiques à faces centrées, imbriqués et décalés l'un de l'autre du quart de la diagonale principale. La maille

élémentaire contient un atome III et un atome V dans les position (0.0.0) et

$$\left(\frac{a}{4}, \frac{a}{4}, \frac{a}{4}\right).$$

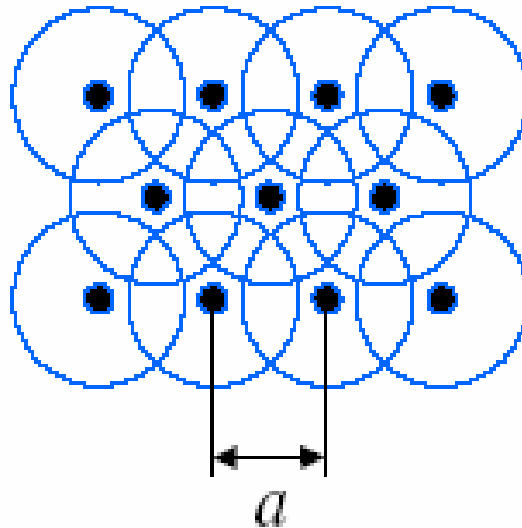


Fig.I.1 .Représentation schématique d'un cristal
(a : constante de réseau) [I.9]

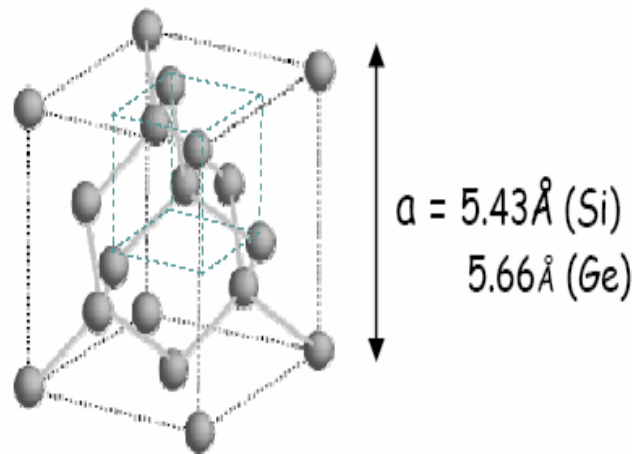


Fig.I.2. Structure diamant- Si ou Ge [I.10]

I.2.2.2. Réseau réciproque – Zone de Brillouin

A partir du réseau cristallin, on définit le réseau réciproque, qui est le système de coordonnées [énergie -vecteur d'onde] dans lequel on représente les variations des fréquences de vibrations du réseau cristallin ou de l'énergie des

états électroniques en fonction du vecteur d'onde \vec{k} caractérisant la propagation de l'onde considérée (de nature vibrationnelle ou électronique [I.11]). Le réseau réciproque associé au vecteur d'onde \vec{k} de la structure de type zinc blende est cubique centré. Sa maille élémentaire, qui correspond à la première zone de Brillouin (figure I.3). Elle présente un centre de symétrie Γ à l'origine ($\vec{k} = \vec{0}$), et un certain nombre d'axes de symétrie: il existe trois axes équivalents $\langle 100 \rangle$ coupant le bord de la zone de Brillouin aux points X, et quatre axes équivalents $\langle 111 \rangle$, avec les points correspondants L [I.12]

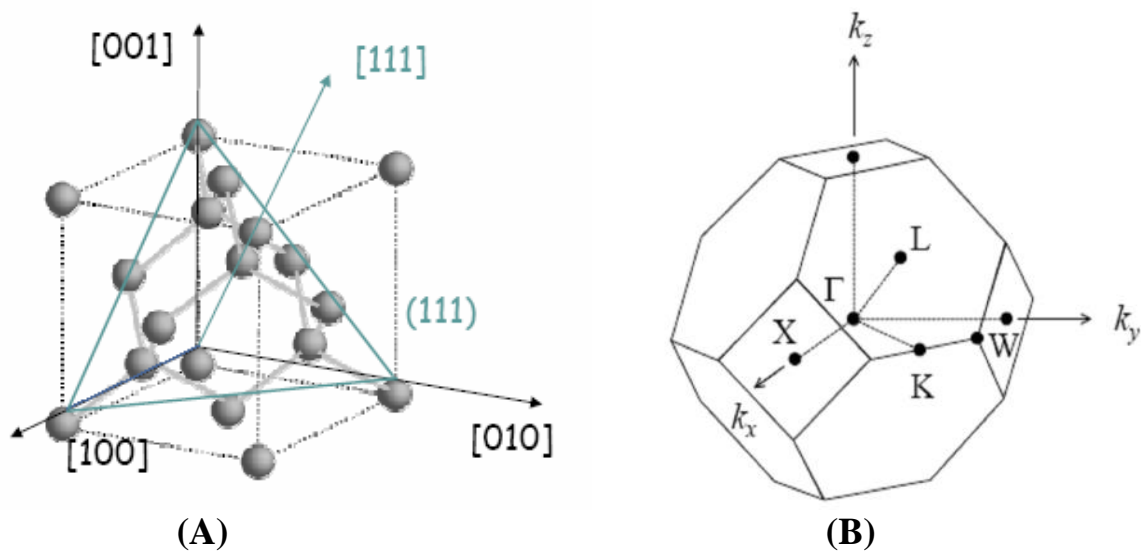


Fig.I.3. (A) Maille élémentaire de structure Zinc Blende, (B) Première zone de Brillouin d'une structure de type Zinc Blende [I.11]

I.2.2. 3. Etats électroniques dans les semi conducteurs

I.2.2.3.1. Structure de bandes

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

Les structures de bandes représentées sur la figure (I.4) font apparaître deux types fondamentaux de semiconducteur. Les semiconducteurs à gap direct sont des semiconducteurs dont le minimum absolu de la bande de conduction et

le maximum absolu de la bande de valence sont situés à valeur voisine du vecteur d'onde \vec{k} et Les semiconducteurs lesquels ces extrema sont situés à des valeurs distincts du vecteur d'onde \vec{k} , constitue le gap indirect. [I.13].

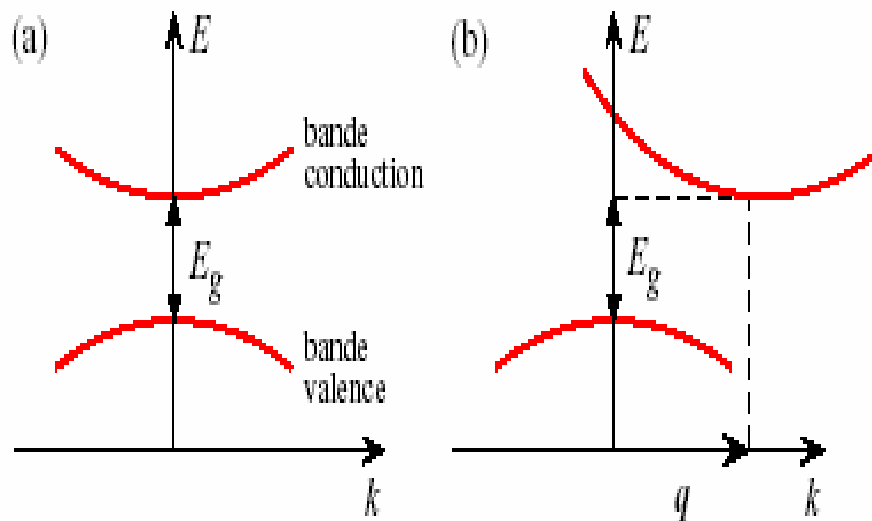


Fig.I.4. Structure de bande schématique d'un semiconducteur à : (a) gap direct, (b) gap indirect [I.12]

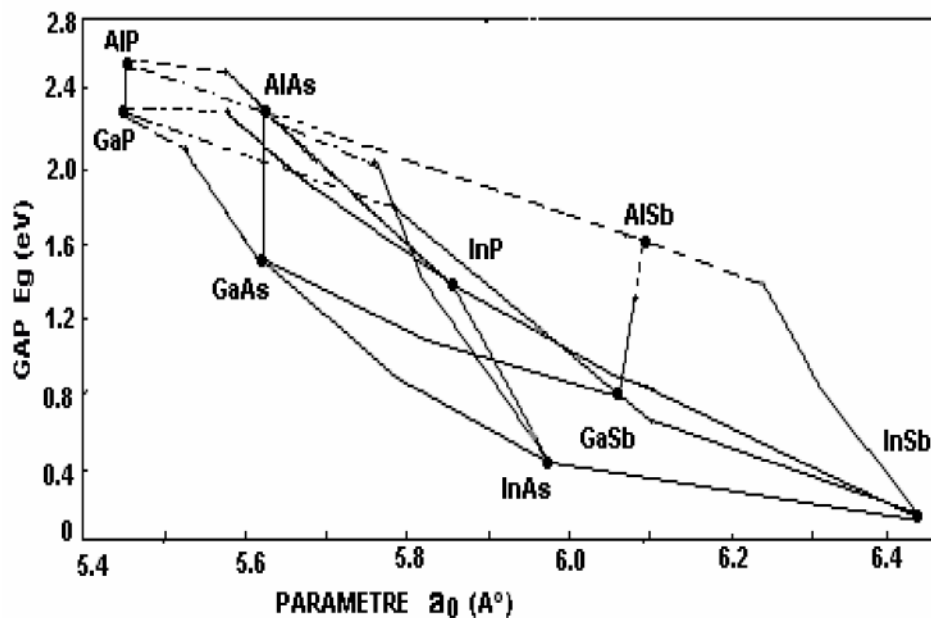


Fig.I.5. Bandes interdites des principaux composés III-V en fonction des paramètres cristallins [I.14]

La figure (I.5) représente les variations de la largeur de bande interdite de l'alliage en fonction du paramètre cristallin, qui varie lui même avec la composition. 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. Il existe cependant une contrainte importante pour la fabrication de ces matériaux, qui sont réalisés en couches minces par croissance épitaxiale sur un substrat binaire : le paramètre cristallin doit être très proche de celui du substrat.

Pour un alliage ternaire de type $Al_xGa_{1-x}As$, le paramètre de maille a_{AlGaAs} s'écrira ainsi:

$$a_{AlGaAs} = x \cdot a_{AlAs} + (1-x) \cdot a_{GaAs}$$

où a_{GaAs} et a_{AlAs} sont respectivement les paramètres de maille des deux binaires $GaAs$ et $AlAs$. Cette loi possède une limite d'applicabilité, il est en effet nécessaire qu'aucun des binaires impliqué ne soit en trop faible proportion (moins de 4%).

I.2.3. Types de semiconducteurs

I.2.3.1. Semiconducteurs intrinsèques : ce sont des semiconducteurs (germanium et surtout le silicium) à haute pureté et très bien cristallisés (moins de 1 atome étranger pour 10^{13} atomes de semiconducteur). Pour lequel le nombre d'électrons est égal au nombre de trous [I.15]. Ils se comportent comme des isolants à très basse température et leurs conductivités augmentent avec la température.

I.2.3.2. Semiconducteurs extrinsèques : sont des semiconducteurs dont les propriétés électriques sont considérablement modifiées par un dopage contrôlé ou non avec des atomes spécifiques choisies [I.15].

I.2.4. Dopage d'un semiconducteur

Il existe deux types de dopage:

- le dopage de type n (élément pentavalent de la colonne V), qui consiste à produire un excès d'électrons, qui sont négativement chargés.
- le dopage de type p (élément trivalent de la colonne III), qui consiste à produire une carence en électrons, donc un excès de trous, considérés comme positivement chargés.

La figure suivante présente des exemples de dopage du Silicium respectivement par du phosphore (dopage n) et du bore (dopage p).

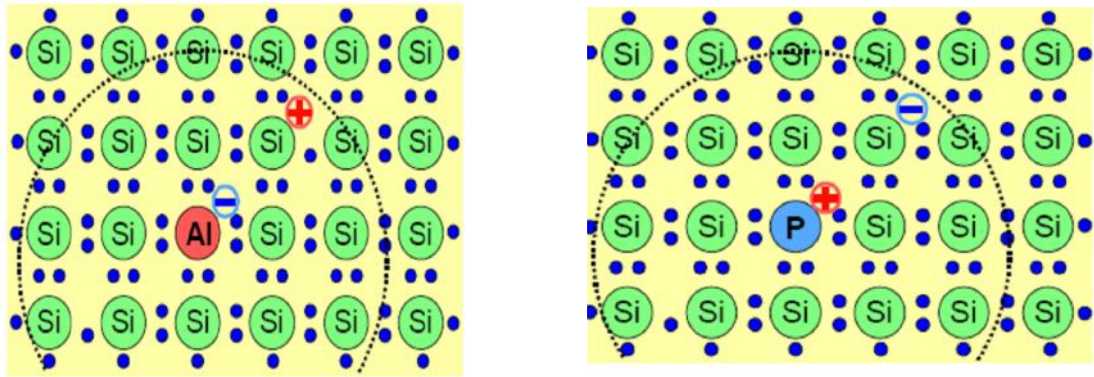


Fig.I.6. Atomes de Phosphore et d'Aluminium en position substitutionnelle dans un réseau de silicium [I.10]

1.2.4.1. Effet du dopage sur la structure de bandes d'énergie

Le dopage provoque l'apparition de nouveaux niveaux accepteurs et donneurs d'électron dans le gap, dans le cas d'un dopage n le niveau d'énergie E_D situé sous la bande de conduction (figure I.7.A) et le dopage p le niveau d'énergie E_A situé au dessus de la bande de valence (figure I.7.B).

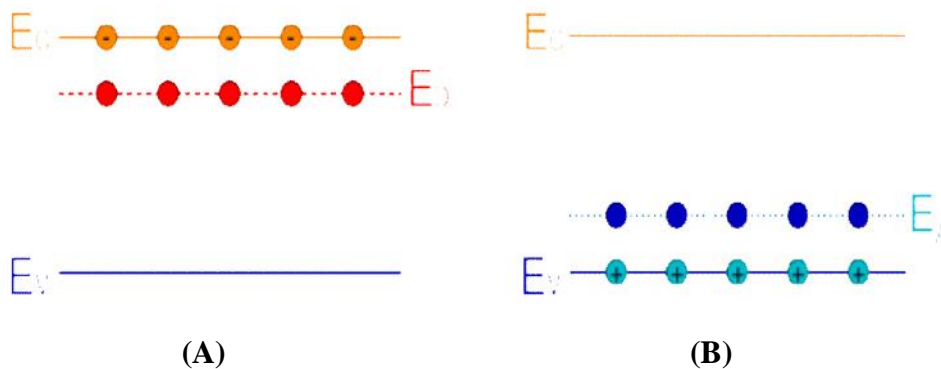


Fig. I.7. Représentation de niveau d'énergie lors du dopage :(A) n et (B) p [I.12]

I.3. SUPERRESEAUX

En 1940, Dumont et Youtz avaient étudié l'empilement artificiel des couches de matériaux métalliques pour réaliser des réseaux de diffraction des rayons [I.16] et en 1969 une nouvelle classe de structures fait apparition les superréseaux ou multipuits quantiques [I.17], Dans les années 1978, Dingle a réalisé un superréseau constitué de $(GaAlAs / GaAs)$.

I.3.1. Définition

Un superréseau est un empilement multicouche de semiconducteurs ultrafins (quelques dizaines d'Angstrom d'épaisseurs) alternées périodiquement suivant l'axe de croissance (figure I.8). En 1969, Esaki et al [I.18] ont proposé l'idée d'une structure de basse dimension et ont présenté une discontinuité de bords de bandes de conduction et de valence à l'interface de deux semiconducteurs. Le matériau à faible gap représente le puits de potentiel pour les électrons et à grand gap c'est la barrière, Ainsi un profil de potentiel périodique résultant d'une succession de puits et de barrières. La période L [I.19] du potentiel permet de faire la différence entre un puits quantique, qui présente des états isolés, et un SR, où se forme une structure de minibandes. L'ordre de grandeur généralement admis est 200\AA .

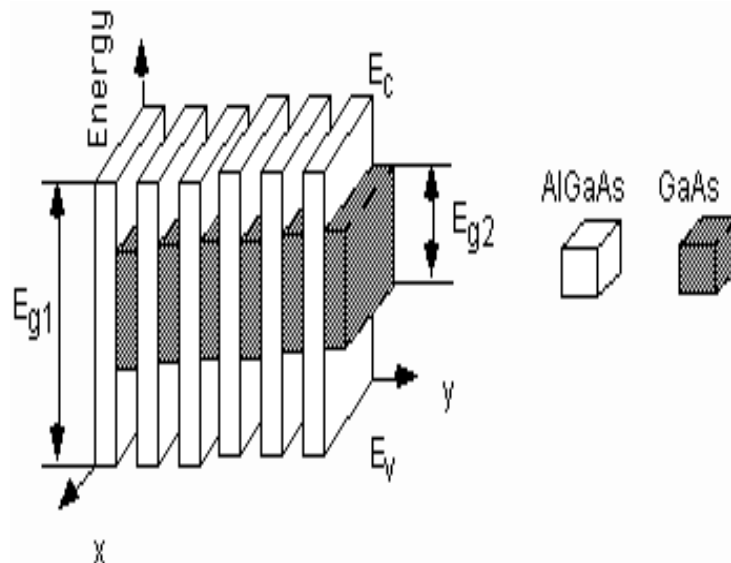


Fig.I.8. Superréseau à puits et à barrières rectangulaire (AlGaAs/ GaAs) [I.20]

I.3.2. Types de superréseaux

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

I.3.2.1. superréseaux à puits et à barrières rectangulaires

Ce type est le plus utilisé, parce que le profil du potentiel est très simple à étudier [I.21], il est à la base de l'élaboration de plusieurs composants tels les photodétecteurs [I.22] et les diodes lasers [I.23]. Ces superréseaux ont des propriétés fascinantes résidant dans leur capacité de confinement des états électroniques.

I.3.2.2. Superréseaux polytypes

La structure est composée de trois constituants (*A*, *B* et *C*) [I.24.25], plusieurs formes de potentiel sont obtenus (Figure I.9), elles sont dues à la différence existante entre leur bandes de conduction, leurs utilisations dans des dispositifs à hautes fréquences.

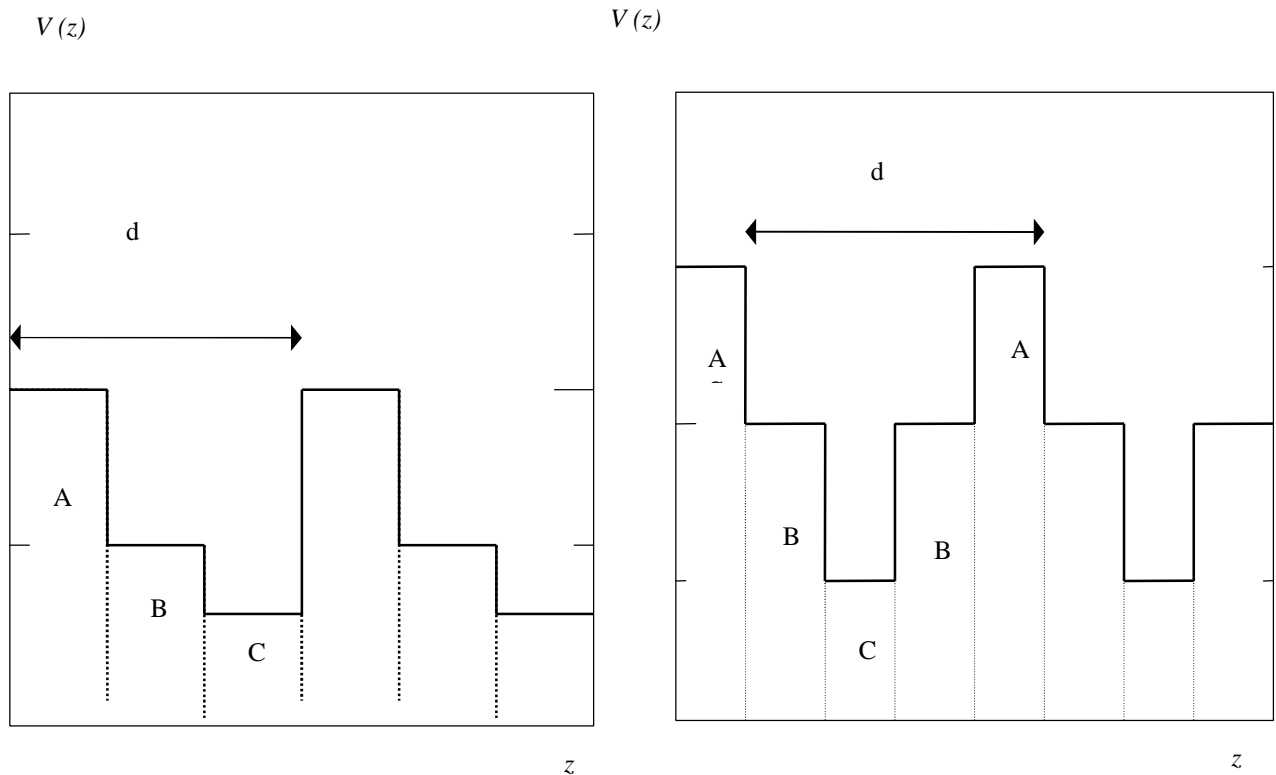


Fig. I.9. Profil de potentiel d'un SR polytype

I.3.2.3. SR à dents de scie

Cette structure est obtenue à partir d'une modulation de la composition du matériau utilisé, tel que le $Al_xGa_{1-x}As$, dans chaque période pour obtenir un gap dégradé linéairement allant d'une valeur maximale qui forme le grand gap jusqu'à une valeur minimale qui donne le petit gap [I.26.27]. Plusieurs formes de profil sont obtenues selon la modulation utilisée (figure I.10). Leurs applications technologiques utilisées dans la fabrication des rectificateurs [I.28] et les photomultiplicateurs [I.29].

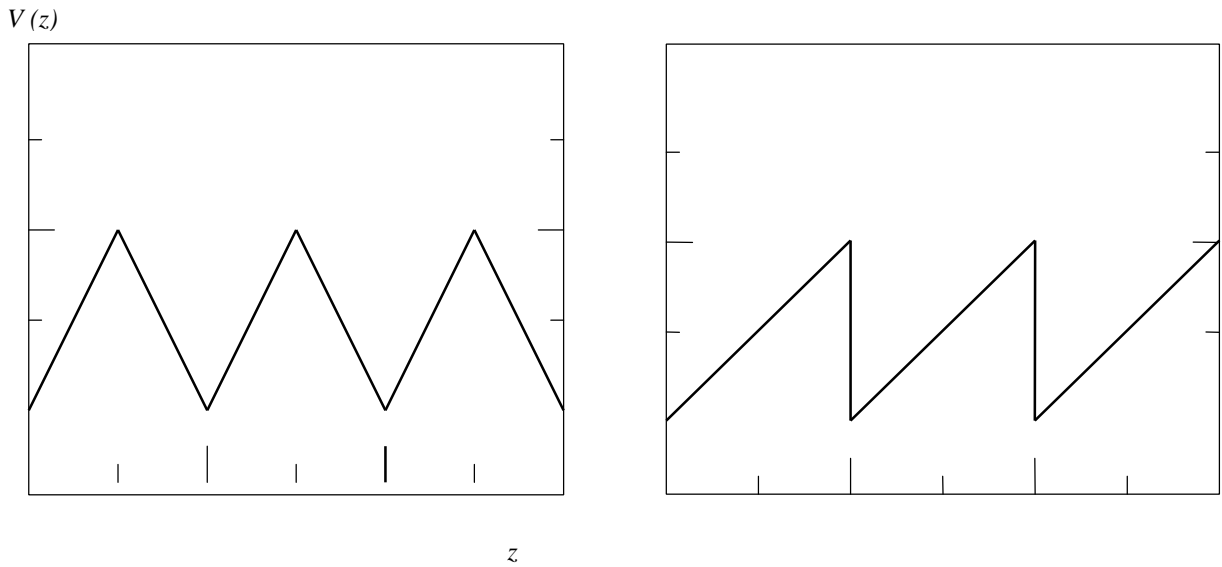


Fig.I.10. Profils de potentiel d'un SR à dents de

I.3.2.4. SR à masse effective

Ce type de SR construit par une modulation périodique de la masse effective [I.30] (figure I.11). Il est difficile de choisir les constituants semiconducteurs utilisés pour la réalisation d'un tel profil, il faut avoir les mêmes paramètres a du réseau, et la même affinité électronique.

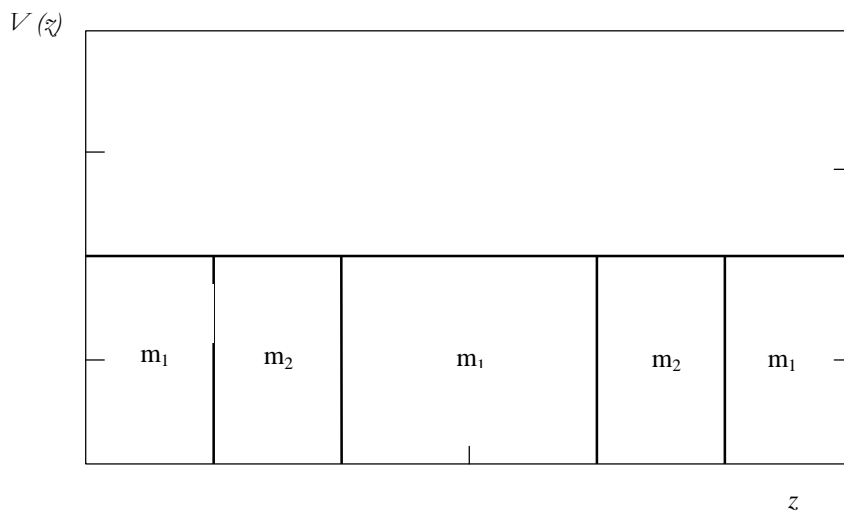


Fig. I.11. Profil de potentiel d'un SR à masse effective.

Le tableau [I.1] résume quelques matériaux dont les propriétés comme la constante du réseau a , l'affinité électronique κ , l'énergie du gap E_g , la masse effective du premier matériau m_1 du deuxième m_2 et la masse de l'électron libre m_0 [I.31] dont leur propriétés permettent de constituer un tel type de SR [I.32].

Tableau I. 1 : Propriétés de quelques matériaux.

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

I.3.2.5. SR à puits quantiques paraboliques

Ils sont construits par l'empilement des puits et des barrières rectangulaires très minces, la hauteur de la barrière varie tout en conservant la composition du matériau et le contraire se font d'une manière quadratique du centre du puits jusqu'au bord de celui-ci (figure I.12). Capasso et al [I.33] ont présenté un transistor à effet tunnel résonant.

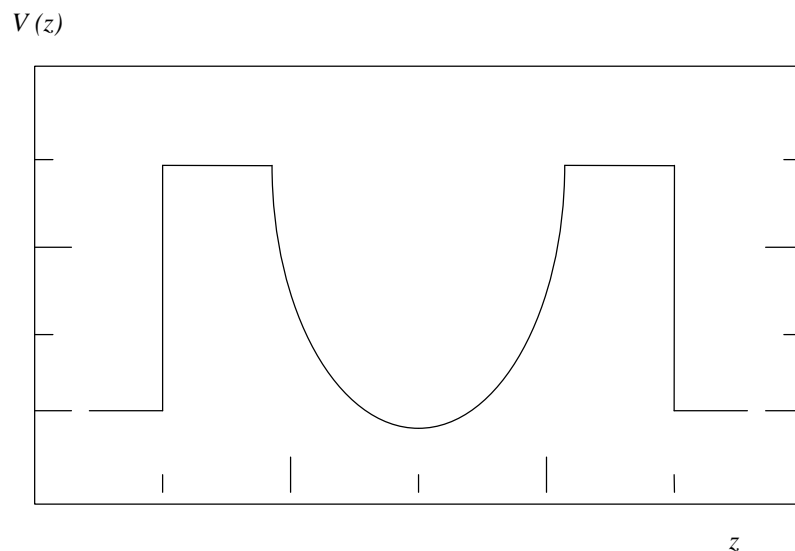


Fig. I.12. Profil de potentiel d'un SR à puits quantiques paraboliques

I.3.2.6. SR à modulation de dopage

Le profil de potentiel est donné par la relation: Ces types de SR, proposés par Esaki et al [I.34], consistent à empiler des monocouches atomique dopée n et p , alternées périodiquement ($d \leq 200 \text{ \AA}$), et séparées par quelques unes des matériau non dopés. Ces SR dits à dopage conventionnel réalisés par Ploog et al [I.35], présentent un inconvénient, car une forte modulation de dopage ne peut être réalisée en une faible période ($\approx 200 \text{ \AA}$) [I.36]. Ce problème a été surmonté par une nouvelle technique de dopage.

Ainsi le profil de dopage est décrit par la relation :

$$N_D(z) = N^{2D} \delta(z) \quad (I.3)$$

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

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

d : la période.

e : la charge de l'électron.

ϵ : La permittivité du matériau.

I.3.2.7. SR à potentiel de Mathieu

Le superréseau formé à partir d'une allure sinusoidal.

$$V(z) = -V_a \cos(2\pi z/a) \quad (I.5)$$

V_a : L'amplitude de potentiel.

a : paramètre du réseau.

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

I.3.2.8. SR quasipériodiques

Il est bâti à partir de la série de Fibonacci. Puis habiller chaque site avec une base. Cette construction exige deux éléments différents A et B de longueur L_A et L_B , on appliquant la loi de récurrence.

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

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

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

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

En 1984 Levine et al. [I.37] ont décrit une nouvelle classe de réseaux quasipériodiques à 1, 2 et 3 dimensions, nommée, les quasi-cristaux. Merlin [I.38] a réalisé un nouveau type d'hétérostructures en prenant le système hétérostructures *AlAs*, dit mono énergétique de Fibonacci.

I.3.3. Matériau GaAs et $Al_xGa_{1-x}As$

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

Dans ce travail nous nous intéressons du composé ternaire $Al_xGa_{1-x}As$ ou x la concentration dans les différentes couches [I.39]. Le tableau suivant donne quelques propriétés du GaAs et $Al_xGa_{1-x}As$ à 300 K.

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

	m_e / m_0	E_g (eV) à 300 K
GaAs	0.067	1.424 gap direct
$Al_xGa_{1-x}As$	$0.067+0.083x$	$1.414+1.247x$ gap direct ($0 < x < 0.45$) $1.90+0.125x+0.143x^2$ gap indirect ($0.45 < x < 1$)

m_e : la masse effective

m_0 : la masse d'un électron libre

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

I.3.4. classification des superréseaux

L'apparition de superréseaux et multipuits quantiques est fabriquée des dispositifs électroniques, il est possible de classifier ses structures selon les schémas d'énergie de confinement de leurs électrons et trous (figure I.13).

Différents types de semiconducteurs, tel que les composés III et VI, peuvent être épitaxiés les uns sur les autres pour former différents types de multipuits quantiques.

* Dans le cas de type I, les extrema des bandes de valence (BV) et de conduction (VC) sont situés dans la même région de l'espace (le gap dans ce cas est un 'gap direct'), donc les multipuits quantiques ou superréseaux sont dites de type I ; et dans ce dernier, les électrons et les trous sont confinés dans la même couche (semi-conducteur) A. tels que *GaAlAs / GaAs* et *GaSb / AlSb* [I.40].

* Dans le cas de type II, les extrema des bandes (BV) et (BC) sont spatialement séparés, (le gap dans ce cas est un 'gap indirect'); donc les multipuits quantiques ou superréseaux sont dites de type II. Dans ce type, les électrons et les trous sont spatialement séparés, c-à-dire, lorsque les électrons sont confinés dans une couche, les trous sont confinés dans une couche différente. Tels que *InAs / GaAs* [I.41]

* Les multipuits quantiques de type IIB qui est un cas particulier du type II, se comporter comme les semiconducteurs de gap nul, ou les semiconducteurs de faible gap, dans ce cas l'énergie de gap est plus faible entre les électrons dans la couche A, et les trous dans la couche B. tels que *InAs / GaSb* [I.42].

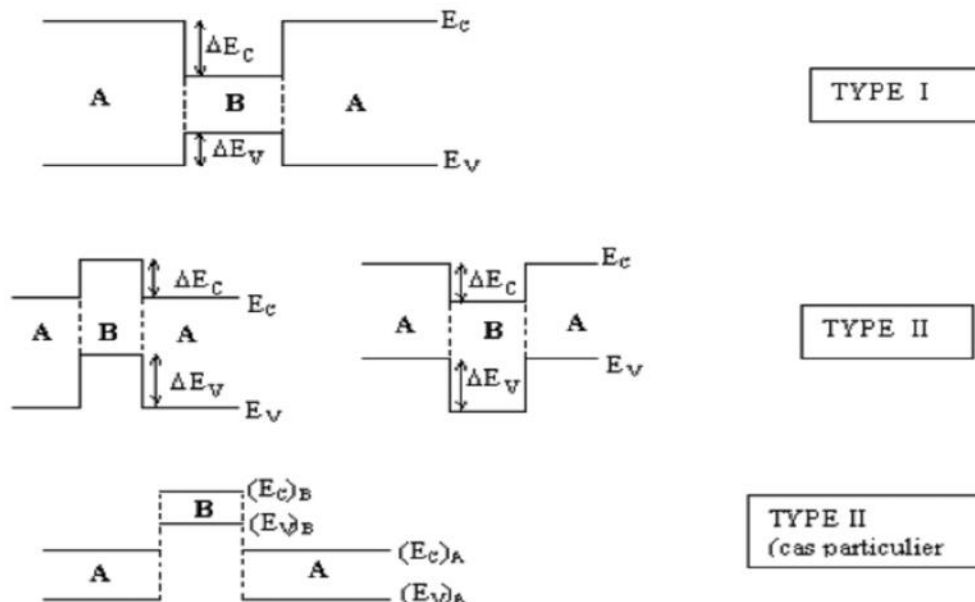


Fig. I.13. Diagrammes schématisques de trois arrangements de confinement des électrons et trous dans multipuits quantiques et superréseaux [I.43]

I.3.5. Technique de fabrication

I.3.5.1. Epitaxie par jets moléculaires

Cette technique perfectionnée par Arthur et al [I.44] dans les années soixante après son apparition au début du siècle, et dans le milieu des années 1970 par laboratoire de Bell (USA) [I.45]. est une technique de dépôt sous ultra vide permettant d'obtenir des matériaux semiconducteurs avec une grande précision (composition, épaisseur), et une grande qualité structurale, l'EJM est une technique puissante pour la production de composants de haute performance. Le schéma de principe présenté sur la figure (I.14) décrit les principaux éléments d'un bâti d'épitaxie.

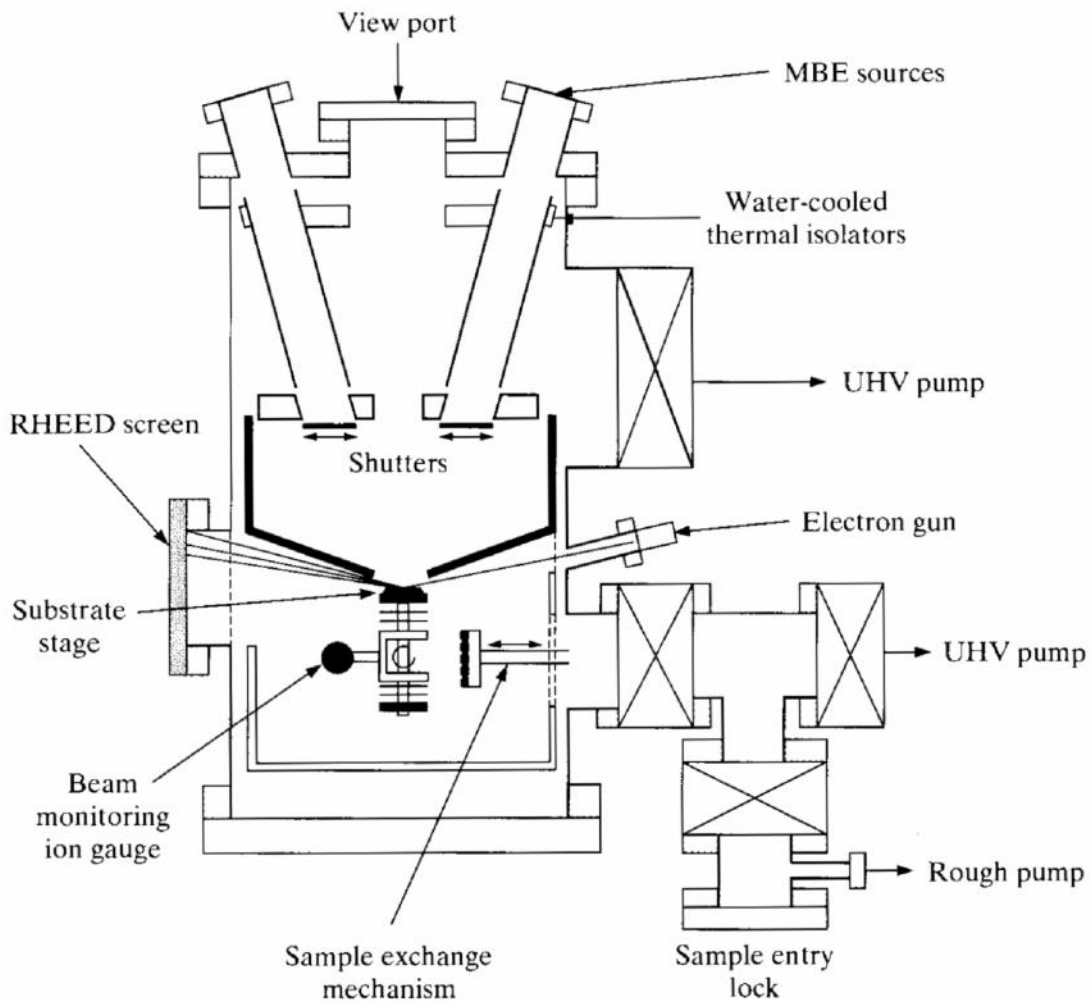


Fig. I.14. schéma général d'épitaxie par jet moléculaire [I.46]

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

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

I.3.5.2. Epitaxie en phase vapeur

MOCVD (Metal Organic Chemical Vapor Deposition) à injection, développé dans les années 90 au LMGP [I.47], est basé sur l'utilisation d'injecteurs de moteurs thermiques. Elle permet de synthétiser des couches minces de matériaux complexes avec un très bon contrôle de la stoechiométrie, de la vitesse de croissance et de la qualité cristalline des films. L'injection des précurseurs dissous dans un solvant est réalisée sous forme de gouttelettes contrôlées par une micro vanne. Un flux gazeux transporte les précurseurs dans la zone de réaction sur un substrat chauffé format une série de multicouches (A/B)_N, en variant le nombre de gouttes du matériau A pour un nombre de gouttes de matériau B fixé (figure I.15).

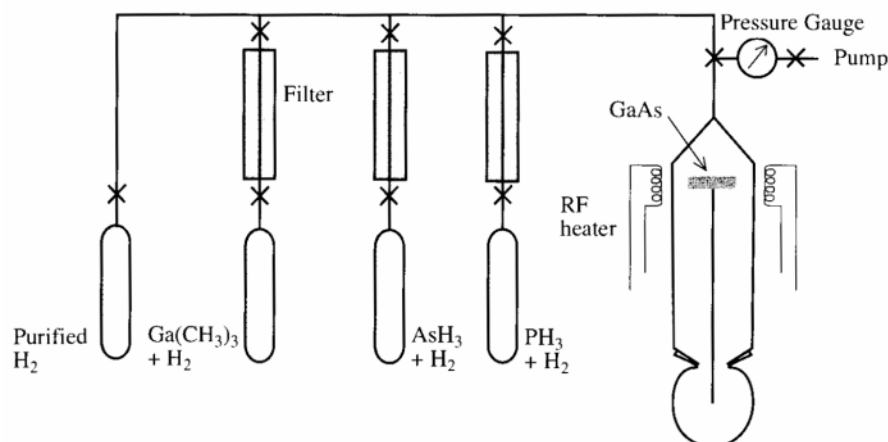


Fig. I.15. schéma d'une installation de MOCV [I.46]

I.3.6. Propriétés des superréseaux

I.3.6.1. Structure des minibandes

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

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

La largeur de minibande dépend de la nature du couplage électronique entre les niveaux des puits adjacents, plus celui-ci est faible, moins est la largeur.

Dans le cas où les puits sont éloignés, les niveaux deviennent discrets et les états sont bien évidemment localisés.

I.3.6.2. Effet tunnel résonnant

L'effet tunnel résonnant se manifeste lorsqu'une particule doit traverser successivement deux barrières de potentiel 'pontée' par un ou plusieurs états discrets permis. En mécanique classique une particule d'énergie cinétique E inférieure à V_0 ne traverse pas la barrière, mais en mécanique quantique la particule possède une probabilité non nulle de traverser cette barrière sous la forme d'une onde évanescente (figure I.16) d'après les solutions d'équation de Schrödinger.

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

En 1970 Tsu et Esaki [I.48] ont étudié une structure à multi barrières confinant un puits rectangulaire mise entre deux contacts ohmiques produisant une Va. L'ETR est interbande, C-a-d. Les porteurs de charges restent dans la

même bande avant et après leurs passages, donc il traduit un comportement ondulatoire des électrons en fonction des énergies présentant des résonances.

En 1983 Vassal et al [I.49] ont utilisé la formalisme de la matrice de transfert pour étudier le comportement de T. ils ont pris en considération, la discontinuité des masses au bord de chaque interface.

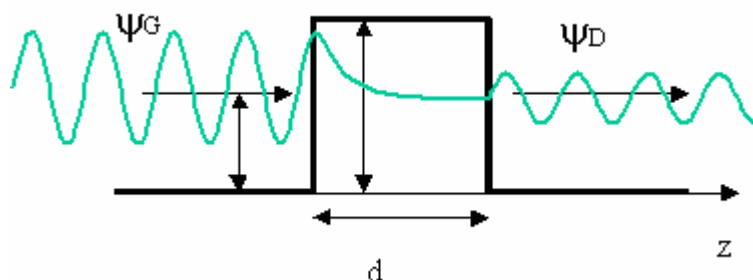


Fig. I.16. Barrière de potentiel dans un modèle unidimensionnel

I.3.6.3. Temps de l'Effet tunnel résonnant

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

Juang et al. [I.50] ont présenté des résultats de l'effet tunnel résonnant en intégrant l'équation de Schrödinger par rapport au temps.

Fisher et al. [I.51] ont utilisé une méthode plus élégante basée sur la détermination de la fonction « Lorentzienne » qui correspond au pic de résonance du coefficient de transmission, obtenu à partir de la matrice de transfert, t est donné par la relation:

$$t = \frac{\hbar}{\Delta E} \quad (I.11)$$

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

I.3.7. Application lasers

Dans un semiconducteur un électron pouvait absorber ou émettre un photon, dans sa bande de conduction. En 1917, Albert Einstein va découvrir un nouveau phénomène : l'émission stimulée. Dans l'émission stimulée, l'électron est dans l'état excité. Un photon va stimuler la désexcitation de l'électron. Cette

désexcitation va stimuler l'émission d'un deuxième photon, les deux photons identiques peuvent à leur tour stimuler d'autres émissions de photons, et ainsi de suite. Ce phénomène nommé l'amplification optique.

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

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

$$\lambda = \frac{h.c}{E} \quad (\text{I.12})$$

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

c : la vitesse de la lumière (m/s)

h : constante de planck (J.s)

Les lasers sont des outils souvent indispensables pour de nombreuses applications, dans l'industrie, ils coupent, soudent et percent. En médecine, ils réparent brûlent les zones brûlantes malades sans toucher aux parties saines. Le laser sert dans les télécommunications optiques [I.52], les mesures de distance et les contrôles de vitesse. Les lasers servent aussi à aligner des routes, des tunnels, aussi utilisé dans le stockage et le lecteur de l'information sur des disques optiques.

I.3.7.1. Structure d'une diode laser

Une diode laser est une jonction à semiconducteur. Démontrée pour la première fois en 1962 [I.53], elle est en 1994 un composant optoélectronique produit industriellement par quantité annuelle de plusieurs millions pour certains types [I.54].

On utilise le système $GaAl/GaAlAs$ (figure I.17) pour des diodes lasers. Pour une diode laser au $GaAs$ [I.55] la couche active de type p, dont l'épaisseur est de l'ordre de 0.1 à 0.3 μ confinée des photons par la différence d'indice qui existe entre $GaAl$ et $GaAlAs$ est prise en sandwich entre deux couches de $Ga_{0,7}Al_{0,3}As$, dopées respectivement n et p . Les électrons sont confinés dans la couche active en raison de la différence de gap existe entre $Ga_{0,7}Al_{0,3}As$ ($E_g \approx 1,9$ eV) et $GaAs$ ($E_g \approx 1,4$ eV). Les deux couches de $GaAlAs$ constituent des barrières de potentiel qui empêchent les électrons et les trous de diffuser au-delà du $GaAs$. Cette diode laser du type $GaAs-GaAlAs$ émet un rayonnement centré à $\lambda=0,9 \mu m$

Les valeurs relatives des gaps et des indices de *GaAs* et *GaAlAs* créent un bon confinement des électrons et des photons..

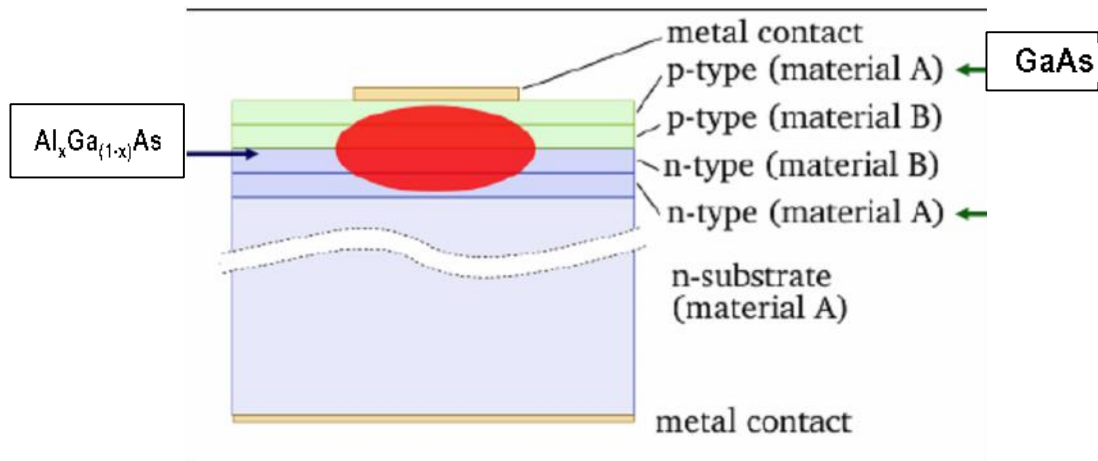


Fig.I.17. Structure d'une diode laser au GaAs

I.3.7.2. laser à cascade quantique

Le laser unipolaire à cascade quantique développé aux Bell-Laboratories dans l'équipe de F. Capasso ($\lambda_{\text{émission}}=5\mu\text{m}$) [I.56]. Le laser à cascade quantique est un laser semiconducteur utilisant un seul type de porteurs, basé sur deux phénomènes fondamentaux de la mécanique quantique; l'effet tunnel et le confinement quantique. Bien que le concept de base ait été proposé en 1971 déjà, il fallut plus de vingt ans avant qu'un tel dispositif soit effectivement réalisé en 1994 [I.57].

Grâce à leur petite taille, leur haute fiabilité et leur facilité d'usage, les diodes lasers semiconductrices conventionnelles jouent un rôle important dans les télécommunications et l'électronique de consommation dans des applications telles que les fibres optiques et les lecteurs CD. Dans ces lasers, la lumière est produite par la recombinaison de charges négatives et positives (les électrons et les trous) à travers la bande d'énergie interdite existant entre les bandes de conduction et de valence du cristal. La séparation énergétique entre les deux bandes détermine donc la longueur d'onde du laser.

Le laser à cascade quantique, ou laser QC, est basé sur une approche complètement différente. Dans un laser QC (figure I.18), les électrons font des transitions entre des états liés, créés par confinement quantique dans des couches alternées ultraminces de matériaux semiconducteurs. Comme ces couches ultraminces, appelées puits quantiques, ont une taille comparable à la

longueur d'onde de Broglie 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.

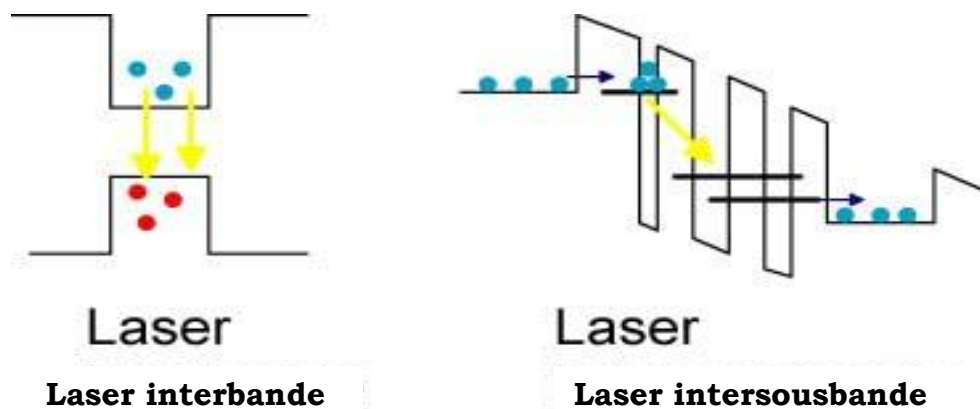


Fig.I.18. *laser à cascade quantique* [I.58]

I.4. CONCLUSION

Dans ce chapitre certains rappels généraux des semiconducteurs et des superréseaux ont été introduits. Un développement considérable des techniques de croissance a permis la fabrication de ces matériaux. Parmi les méthodes les plus perfectionnées on a cité : la MBE et la MOCVD.

- Les propriétés des matériaux semiconducteurs utilisés et les techniques de croissance permettent l'élaboration de plusieurs types de superréseaux. En particulier les superréseaux à puits et à barrières rectangulaires vue la facilitée de sa croissance et la simplicité de son étude tout en exposant des propriétés fascinantes résidant dans sa capacité de confinement des états électroniques.
- Les SR à dents de scie ou à puits paraboliques avec leurs différentes formes, Les SR quasipériodiques avec leurs états critiques présentant un cas intermédiaire entre les structures périodiques et Les superréseaux à potentiel la bande de conduction, le problème majeur dans la détermination des

propriétés des SR est des bords de bande de MATHIEU conduisant à la résolution de l'équation de Mathieu d'où la formation des états particuliers à l'intérieur du profil considéré.

Les superréseaux sont caractérisés par deux phénomènes différents :

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

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

Le comportement de l'électron permet l'étude de profil de la bande de conduction et de la masse effective au niveau des interfaces. La différence de la masse entre les matériaux constituant le SR induit une limite de validité pour les conditions de continuité.

I.5. RÉFÉRENCES

- [1] F. Duan, J. Guojun, « **Introduction to condensed matter physics** » volume 1, Editions World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd.
- [2] S. Lefebvre, F. Miserey, *Editions Tec & Doc* (2004, 428p). ISBN/ISSN 2.7430.0719.2(I.2)
- [3] H. Tuffigo, these de doctorat, Université de Grenoble (1990).
- [4] G.L. Bir and G.e. PIKAS, « **symmetry and strain induced effects semiconductors** », Wiley, New York (1974)
- [5] J. Cibert, Y. Cobil, SI Dang, S. Tatarenko, G. Feuillet, P.H. Jouneau and K. Saminadayar, *Appl. Phys. Lett.* 56, 292 (1990)
- [6] L.L. Chang and B.C. Giessen, "Synthetic Modulated Structures" edited by I. Academic Press, (1985).
- [7] K. Iijima, T. Terashima, Y. Bando, K. Kamigaki and H. Terauchi, *App Phys.* 72. 2840-2845 (1992).
- [8] H. Mathieu, « **physique des semiconducteurs et des composants électroniques** » 5^{ème} édition (Dunod).
- [9] L. Lavergne, « **du détecteur à la masse** » thèse, Université Paris Sud ... – Roscoff 2007
- [10] M. Haelterman, « **physique des semiconducteurs** » thèse de l'Université libre de Bruxelles (2001).
- [11] J.D. Patterson and B.C. Bailey, « **solid-state physics** », Springer-Verlag Berlin Heidelberg 2007
- [12] C. Kittel, « **Introduction à la physique de l'état solide** », Dunod (1972).
- [13] C. Kittel, « **physique de l'état solide** » 7^{ème} édition (Dunod).
- [14] John H. Davies. **The physics of low-dimensional semiconductors**, Cambridge University Press, (1998).
- [15] P. Kireev, « **la physique des semiconducteurs** » 2^{ème} édition, EDitor M.R. Moscou.
- [16] D. W. M. DuMond and J. P. Youtz. *App. Phys.* 11, 357 (1940).
- [17] B. Boittiaux, « **les composants semiconducteurs** » 2^{ème} édition
- [18] R. Tsu and L. Esaki, *App. Phys. Lett.* 22, 562 (1973).
- [19] A. Chomatte, B. Devraud, P. Auvray, A. Regreny, *J. App. Phys.* 59, 3835 (1986).

- [20] Cyrille Barreteau, Physique de solide, "cyrille.barreteau@cea.fr
http://www-dream.cea.fr/spci/cbarreteau/physiaue_du_solid/physol.htm
- [21] C.M. Tan, J.M. Xuand S. Zukotynsky, J. App. Phys. 67, 3011 (1990).
- [22] R. Rarcy. « Application des lasers : principes optique avec problèmes commentés » Edition Masson (1993).
- [23] L. Marshall, laser focus world 34 (7) 139-143 (1998).
- [24] L. Esaki, L. L. Chang, and E. E. Mendez, Jpn. J. App. Phys. 20, L529 (1981).
- [25] N. Navel and B. Laikhtman, Phys. Rev. B 49, 16 829 (1994).
- [26] F. Capasso, S. Luryi, W. T. Sang, C. G. Bethea, and B. F. Levine, Phys. Rev. Lett. 51, 2318 (1983).
- [27] J. A. Brum, P. Voisin and G. Bastard, Phys. Rev. B 33, 1063 (1986).
- [28] C. L. Allyn, A. C. Gossard and W. Wiegmann, App. Phys. Lett. 36, 373 (1980).
- [29] F. Capasso, W. T. Sang, and G. F. Williams, IEEE, Trans. Electron. Devices 30, 381 (1983).
- [30] A. K. Sasaki, Phys. Rev. B 30, 7016 (1984).
- [31] Y. Bennabi, Mémoire de magister « effets d'interfaces sur la structure de bandes et les propriétés de transport par effet tunnel résonnant dans les semiconducteurs ». USTO (juin 1996).
- [32] B. Simon, Adv. App. Math. 3, 463 (1982).
- [33] F. Capasso and A. Kiehl, J. App. Phys. 58, 1366 (1985).
- [34] L. Esaki and R. Tsu, IBM J. Res. Note, Rc, 2418 (1969).
- [35] H. C. Casey Jr. And M. K. Ploog, A. Fisher, and H. Kunzel, J. Electrochem. Soc. 1281, 400 (1981).
- [36] E. F. Shubert, J. E. Cunningham, and W. T. Sang, Phys. Rev. B 36, 1348 (1987).
- [37] D. Levine, P. J. Steinhard, and R. Clark, Phys. Rev. Lett. 53, 2477 (1984).
- [38] R. Merlin, K. Bajema, and R. Clark, Phys. Rev. Lett. 55, 1768 (1985).
- [39] F. Bechstedt, H. Geecke and H. Grille, phys. Rev. B 47, 13540 (1993)
- [40] P. Tronc, Superréseaux - Structure électronique et transitions optiques dans certains semi- conducteurs et hétérostructures III-V.
- [41] G. Bastard, « *Wave Mechanics Applied to Semiconductor Heterostructures* », Edition de Physique (1989).
- [42] D. L. Smith and C. Mailhiot, Rev. Mod. Phys. 62, 173 (1990).
- [43] M. Wolony et D. Selle. Introduction aux composants à hétérostructures l'onde électrique, mai-juin, vol 70, 3, 1990, p59-74.

- [44] Y. Chaand, J. Arther, *Progr. Solid stat. chem...*30 157(1975)
- [45]Semiconductor Heteroepitaxy : Growth, Characterisation and device application, International conference on semiconductor epitaxy, Montpellier France edited by B. Gil and R-L Aulombard, published by World Scientific, (1995).
- [46] R.E.Ruhrwein, U.S.Patent.33, 64084 (1986).
- [47] M. van Schilfgaarde, A. Sher and A. B. Chen. *InTISb. Phys. Lett.* 62 (16), 1857-1859, (1993).
- [48] R. Tsu and L. Esaki, *IBM, Res. Dev.* 14, 61 (1970).
- [49] M. O. Vassell, J. Lee, and H. F. Lokwood, *J. App. Phys.* 54, 5206 (1983).
- [50] Juang, *Phys. Rev. B* 44, 10706 (1991).
- [51] J. Fisher and C. Zhang, *J. App. Phys.* 76, 606 (1994).
- [52] J.W.Scott, *laser focus world* 34 (10) 75-78 (1998).
- [53] R.H.Redike, *IEEE . J.Quantum Electron*, GE-23, 692-695(1987).
- [54] S.G. Anderson, *laser focus world*, 30, 62-76 (1994)
- [55] L. Marshall, *laser focus world*, 34 (7) 139-143 (1998).
- [56] J. Faist, F. Capasso "*Quantum Cascade Laser*" *Mc Graw-Hill Yearbook of Science and Technology* 1997, p265-267
- [57] J. Faist, F. Capasso, D. L. Sivco, C. Sirtori, A. L. Hutchinson, and A. Y. Cho "*Quantum Cascade Laser*", *Science*, 264, 553, (1994)
- [58] Romuald Hourdé, *Dispositifs Eelctronique et optique à semiconducteurs. Science et génie des matériaux -2006-2007.*

CHAPITRE II
STRUCTURES
UNDIMENSIONNELLES
QUASIPERIODIQUES

Chapitre II

STRUCTURES UNIDIMENSIONNELLES QUASIPERIODIQUES

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

II-1. SYSTÈME ORDONNÉ

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

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

Un état de Bloch est exprimé sous la forme :

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

$U_k(\vec{r})$: une fonction vérifiant la périodicité du réseau, c.à.d. $U_k(\vec{r} + \vec{R}) = U_k(\vec{r})$ avec \vec{R} le vecteur de translation du réseau cristallin, La probabilité de trouver un électron de Bloch dans un site i du réseau est identique à celle dans n'importe quelle autre position équivalente dans un site j . les états de Bloch sont dits des états étendus (figure II.1).

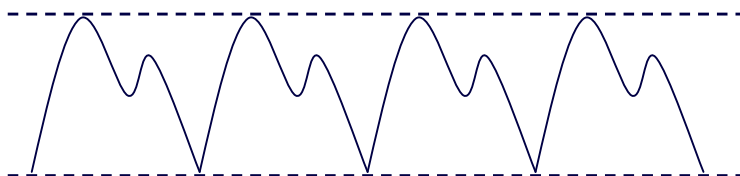


Fig.II.1 *Etat étendu de Bloch d'un système ordonné*

II.2 SYSTEMES DESORDONNÉS

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

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

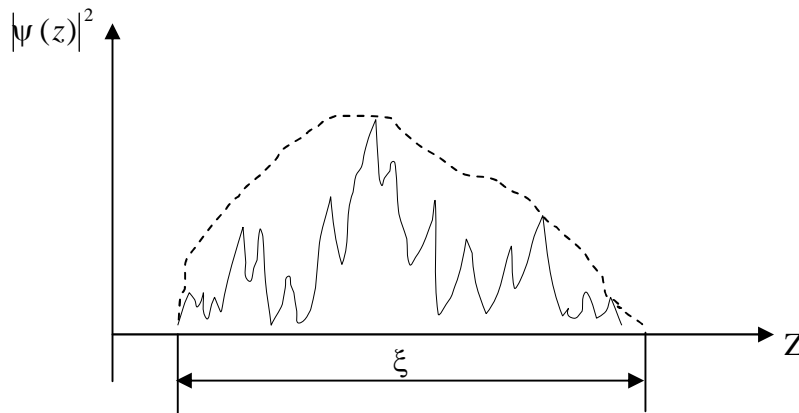


Fig.II.2 *Etat localisé d'un système fortement désordonné*

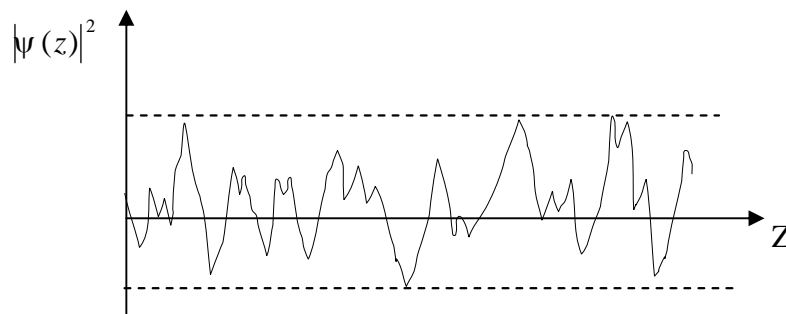


Fig.II.3 *la fonction d'onde dans un système faiblement désordonné.*

Dans les matériaux, il existe deux types de désordre

- **Le désordre structural**: est dû à des dopants, à des impuretés et à des défauts chimiques intrinsèques au matériau

- **Le désordre topologique** : vient du positionnement aléatoire des atomes hors des sites cristallins, Il forme ainsi des états localisés.

II.3. SYSTEMES QUASIPERIODIQUE

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

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

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

La découverte fine 1984 [II.3] d'une structure atomique originale dans une composée d'aluminium et de Manganèse (Al Mn) allait donner naissance à une nouvelle classe de matériaux. Avant cette découverte, la plupart des physiciens pensaient que tout solide ordonné était périodique [II.4].

Les quasicristaux forment une nouvelle classe de d'alliages métalliques dont la structure n'est pas périodique [II.5], ils ont des propriétés physiques différentes de celles des autres métaux et alliages cristallins par exemple $\text{Al}_{86}\text{Mn}_{14}$ [II.6]. Ces matériaux sont extrêmement fragiles [II.7].

Dés 1990 [II.8] les premiers quasicristaux de très grande qualité structurale dans Aluminium – Cuivre – Fer (Al Cu Fe) présentaient des propriétés originelles comme $Al_{62,5}Cu_{25,5}Fe_{12,5}$ [II.9], alors qu'ils sont composés de métaux courants, ces quasicristaux se comportent de façon opposée aux métaux du point de vue électrique.

La possibilité des structures quasiperiodiques avait été démontrée du point de vue géométrique par Penrose avec l'introduction de ses célèbres pavages à 2D [II.10.11.12]. Des métalliques à symétrie icosaédrique (avec un ordre translationnel réduit) avaient aussi été observées avec des simulations numériques [II.13.14]. Ce qui laissait envisager la possibilité qu'un solide réel prenne cette forme.

II.3.1. Propriétés structurales

Les propriétés structurales des quasicristaux et cristaux incommensurables sont décrites par le formalisme des fonctions quasipériodiques [II.15]. Dans le cas des quasicristaux solides, on est confronté à une structure discrète et des méthodes de discrétisation du problème ont donc été développées. On introduira d'abord l'algorithme de la coupe et projection dans le cas 1D [II.16] pour analyser ensuite ses conséquences pour les propriétés structurales des quasicristaux solides.

II.3.1.1. Coupe et projection

Un système quasiperiodique dérive d'un système périodique dans un espace (dit super espace) [II.17] de dimension plus élevée. Pour le cas simple d'un réseau quasipériodique 1D, on peut partir, par exemple, d'un réseau carré dans l'espace 2D dont les sites forment une maille de pas " a ". On considère une droite quelconque dans le plan xy qui passe par l'origine. Si sa pente " $\tan a$ " est un nombre irrationnel, cette droite ne croisera aucun nœud du réseau 2D, exceptée l'origine. L'espace 1D constitué par cette droite s'appelle espace parallèle " E_{11} " et sera l'espace physique accessible du système quasiperiodique. On introduit dans cet espace les « surfaces atomiques » qui sont ici des segments de longueur " $a / \cos a$ ". Ces surfaces atomiques sont orthogonales à notre droite et centrées sur les nœuds du réseau 2D. L'ensemble quasipériodique est alors obtenu en considérant comme sites de la structure 1D tous les endroits où la droite E_{11} croise une surface atomique, donc cet ensemble présente une

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

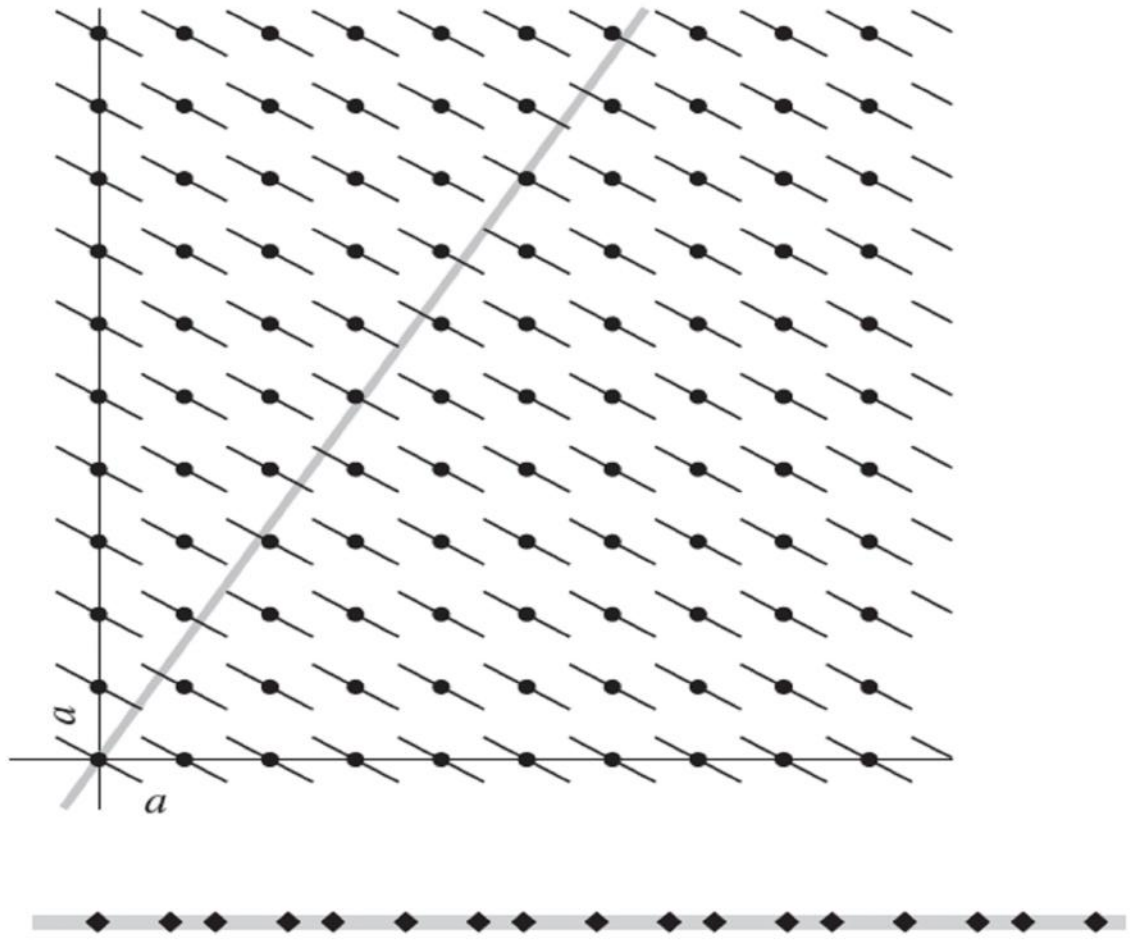


Fig.II.4 Exemple d'application de la technique de coupe et projection : un réseau périodique carré dans le super espace 2D est utilisé pour décrire un réseau quasipériodique 1D. Les intersections entre surface atomique et espace E_{11} définissent les sites d'un ensemble quasipériodique (reporte en bas de la figure) [II.17]

II.3.1.2. Propriétés d'invariance

Le réseau quasipériodique 1D que l'on a construit avant ne présente pas de symétrie par translation. Cependant, la régularité des fonctions quasipériodique par rapport, par exemple, au cas du désordre stochastique, donne aux quasicristaux des propriétés d'invariance très marquées. La répétitivité des cristaux périodiques (le cristal est décrit par une maille élémentaire qui engendre tout le solide par simple translation). Considérons une

séquence bien déterminée de notre « pavage » à une dimension. On peut démontrer que cette séquence se répète un nombre infini de fois dans le quasicristal. En plus, la distance moyenne qui sépare deux séquences identiques est une fonction croissante de la dimension de la considère [II.18].

II.3. 2. Les superréseaux quasiperiodiques de Fibonacci

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

Les théoriciens comme les expérimentateurs utilisent fréquemment la suite de Fibonacci pour générer des superréseaux quasiperiodiques [II.19.20.21.22], on construit un superréseau de Fibonacci à partir de deux briques de bases différentes A et B. chacune composée de quelques monocouches semiconductrices, et de la loi de récurrence $A \rightarrow AB$ et $B \rightarrow A$ qui commence à l'ordre $L = -1$ par B et $L = \Phi$ par A, on génère les empilements suivants : AB, ABA, ABBAABBA, ABAABABA.....(voir figure II.5), chaque séquence $S(L)$ apparaît comme la juxtaposition des deux séquences précédentes $S(L - 1)$ et $S(L - 2)$ et le nombre $F(L)$ de briques de base de la séquence $S(L)$ suit la loi numérique de Fibonacci : $F(L) = F(L - 1) + F(L - 2)$ avec $F(-1) = F(0) = 1$. Un dénombrement rapide montre que le nombre de briques A ou B suit également une loi de Fibonacci et que la proportion de A par rapport à B tend vers le nombre d'or $= (1 + \sqrt{5})/2$ lorsque l'ordre L tend vers l'infini. La première conséquence de cette construction est la disparition dans la séquence $S(\infty)$ de l'invariance par translation. La suite des approximations périodiques dont chaque terme est obtenue par la répétition à l'infini d'une séquence $S(L)$.

La majorité des chercheurs ont considéré la chaîne unidimensionnelle de Fibonacci comme exemple d'un système quasipériodique, et plusieurs propriétés caractéristiques des systèmes de Fibonacci ont été rapportées.

Enrique Macia et al [II.23] ont présenté une analyse de transmission d'onde à travers les structures multicouche diélectriques de Fibonacci et ont montré leur application autant que des réflecteurs.

Lusk et al [II.24] ont étudié les minigaps unidimensionnels, en utilisant les structures quasipériodiques de Fibonacci dans les guides d'onde. Peng et al [II.25] ont observé les transmissions résonnantes de la lumière dans

II.4. CONCLUSION

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

II.5. REFERENCE

- [1] J.M. Ziman.« Models of disorder the theretical physics of homogeneously disordered systems ».
- [2] E.M. Izrailev and A.A.Krokhim, Phys. Rev. Lett.82, 4062 (1999).
- [3] C. Berger, T.Genet, P.Lindqvist, P.Lancv, J.C.Grieco, G.Fourcandot, F.Cyrot-Lackmann; solid state communication, 87, 977 (1993).
- [4]P.W.Anderson.Basic Notions of Condensed Matter Physics, Ed. Addison Wesley, Frontiers in Physics (1984).
- [5] F. Mompiou, L.Bresson,P Cordier and D.Caillard. « Quasicristaux ». Philos.Mg. 84, 2777-2792(2004).
- [6] D. Shechtman, I.Blech, D.Gratias and J.W.Cahn. « Metallic phase with long-range orientational order and no translational symmetry » .Phys.Rev.Lett 53, 1951(1984).
- [7] R. Proveti, J.P.Chateau, G.Michot, UMR 7556, laboratoire de physique des matériaux, rapport d'activité scientifique, Université H.Poincaré Nancy(1996-1999).
- [8] F.S. Piercer, S.J. Poon, Q.Guo,Science, 261,737(1993).
- [9] T. Klein, C.Berger, D.Mayou and F.Cyrot Lackmann. « Proximity of a metal insulator transition in icosahedral phases of high structural quality ». phys.Rev.lett.66,2907(1991).
- [10] R. Penrose. Bull. Inst. Math and its Appl. 10, 266 271(1974).
- [11] M. Gardner.«Extraordinary nonperiodic tiling that enriches the theory of tiles ». Sci. Am. 236, 110 (Janvier1977).
- [12] R. Penrose.Mathematical Intelligencer 2, 32(1979).
- [13] P.J. Steinhardt,D.R. Nelson, et M. Rouchetti. « Icosahedralbond orientational order in supercooled liquids ». Phys.Rev.Lett. 47, 1297(1981).
- [14] P.J. Steinhardt,D.R. Nelson, et M. Rouchetti. « Icosahedralbond orientational order in supercooled liquids ». Phys.Rev.B 28, 784 (1983).
- [15] H.Bohr. « Zur Theorie der fastperiodischen funktionen ». Acta Math.45, 29 (1925).L'article continue dans: Acta Math. 46, 101(1925) : Acta Math. 47, 2237(1926).
- [16] M. Duneau et A. Katz. « Quasiperiodic». Phys.Rev.Lett. 54, 2688(1985).
- [17] L. Guidoni, thèse de doctorat « refroidissement et piégeage d'atomes de césium dans un potentiel lumineux quasipériodique ». Paris VI (1998).

- [18] J.E.S. Socolar, P.J. Steinhardt, et D. Levine. « Quasicrystals with arbitrary orientational symmetry ». *Phys.Rev?B* 32, 5547(1985).
- [19] Abal, G., R. Donangelo, A. Romanelli, A. C. S. Schifino, and R. Siri. *Phys Rev E*. 65, 046236-2 (2002).
- [20] Peng, R. W., M. Mazzer, X. Q. Huang, F. Qiu, M. Wang, A. Hu and S. S. Jian, *App. Phys. Lett*, Vol. 80, 3063(2002).
- [21] Macia, E., *Phys. Rev. B*, Vol. 63, 205421(2001).
- [22] Macia, E., *Ferroelectrics*, Vol. 250, 401(2001).
- [23] E. Macia. *Applied Physics Letters*, 73:3330 (1998).
- [24] Lusk, D., I. Abdulhalim, and F. Placido, *Optics Communications*, Vol. 198, 273, (2001).
- [25] Peng, R. W., M. Mazzer, X. Q. Huang, F. Qiu, M. Wang, A. Hu, and S. S. Jian, *Applied Physics Letters*, Vol. 80, 3063(2002).
- [26] Dong J.W., P. Han, and H.Z. Wang. *Chinese Physics Letters*, 20:1963 (2003).
- [27] H. Aynaou , V.R. Velasco , A. Nougououi , E.H. El Boudouti , B. Djafari-Rouhani and D. Bria, *Surface Science*, 538, 101–112 (2003).
- [28] F.F. de Medeiros, E.L. Albuquerque and M.S. Vasconcelos, *Surface Science* 601 4492–4496(2007).
- [29] F. Dominguez-Adame, E. Macia, and B. Méndez, *Cond-Mat*, 55 (534) 2007
- [30] R.J.D. Tilley . «crystals and crystal ». *QD 905. 2T 56. 548-de22* (2006).

CHAPITRE III
FORMALISMES ET METHODES
DE CALCULS

CHAPITRE III

FORMALISME ET METHODES DE CALCULS

III.1. INTRODUCTION

Pour cette grande importance de la simulation dans le domaine scientifique, on a voulu créer un modèle pour déterminer le coefficient de transmission et le temps de l'effet tunnel résonnant. Ce chapitre traite les différents formalismes utilisés pour la détermination de la structure de minibandes, le calcul du coefficient de transmission et le temps de l'effet tunnel résonnant ainsi que l'élaboration d'un logiciel qui permet l'étude de plusieurs types de superréseaux. A cet effet les approximations suivantes sont considérées [III.1-3].

III.2. APPROXIMATIONS ET CONDITIONS DE CONTINUITES

III.2.1. Approximation de la masse effective

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

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

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

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

Vu la complexité de la résolution de l'équation de Schrödinger, due au potentiel cristallin $V(\vec{r})$, l'approximation de la masse effective (AME) permet d'obtenir des

solutions approchées. Celle ci consiste à remplacer l'électron quasi-libre par un quasi-électron libre, c.à.d. le mouvement d'une particule de masse m_0 dans un cristal de potentiel $V(\vec{r})$ est semblable au mouvement d'une particule libre de masse m^* dans le vide.

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

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

Ainsi m^* est une masse comportant toutes les complexités du potentiel $V(\vec{r})$, et définie par la dérivée seconde de l'énergie au voisinage d'un extremum \vec{k}_0 de la surface iso énergétique [III.4]. Le domaine de validité de l'AME concerne des situations où la masse varie faiblement en fonction de la position, c.à.d. au voisinage de l'extremum \vec{k}_0 .

L'application de l'approximation de la masse effective associée à quelques modèles théoriques [III.5], afin d'explicitier les propriétés importantes des superréseaux, est utilisée pour déterminer la structure de minibandes, l'effet tunnel résonant (ETR), etc...

III.2.2. Fonction enveloppe et Conditions de continuité

Les conditions de continuité jouent un rôle fondamental, car elles sont nécessaires dans la détermination des solutions des équations différentielles. Avec l'avènement des superréseaux, les propriétés de discontinuité de la masse effective au niveau des interfaces pose un problème, celui d'écrire les conditions de continuité de l'équation de Schrödinger à l'interface et de pouvoir appliquer l'AME, malgré sa dépendance de la position. Dans la littérature plusieurs formes d'écritures ont été proposées [III.6.7].

Ben Daniel et al. [III.8] ont démontré l'invalidité des C.C. (conditions de continuité) conventionnelles, c.à.d. celle qui décrivent le superréseau comme un bloc de semiconducteurs et ne prenant pas compte la discontinuité de la masse effective aux interfaces.

Différents modèles avec différentes approches ont été élaborés pour décrire la structure de bande des superréseaux. Le modèle de Kronig-Penney [III.9] permet d'avoir une vue simplifiée du problème. Son application dans le cas des superréseaux réels dépend de l'exigence dans l'exactitude des résultats. En fait, ce modèle n'est approprié que pour une estimation des résultats. Dans le cas contraire, il est nécessaire d'utiliser des modèles plus réalistes.

Bastard [III.10] a proposé une forme intuitive plus simple de C.C. vérifiée par la fonction enveloppe $f(z)$ et sa première dérivée:

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

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

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

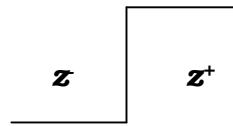


Fig. III.1 Interface abrupte

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

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

Où $u_A(\vec{r}_0)$ et $u_B(\vec{r}_0)$ décrivent les parties périodiques des fonctions d'ondes des matériaux A et B à la position d'interface \vec{r}_0 . Cette nouvelle écriture a été confirmée expérimentalement par Galbraith et al. [III.11]. L'application de cette forme empirique de C.C. a apporté des corrections importantes dans l'étude de l'Effet tunnel résonnant [III.12.18].

III.3. MODELES ET METHODES THEORIQUES

L'expression de l'équation de Schrödinger suivant l'axe de croissance (oz) d'un électron ayant une énergie incidente E et une masse effective $m^*(z)$, traversant un profil de potentiel $V(z)$ dans un état stationnaire [III.19-24] est donnée par:

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

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

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

- calculer le coefficient de transmission T en absence et en présence de la tension appliqué, en se basant sur la matrice de transfert et sur les fonctions d'ondes d'Airy et Bairy [III.25.29]
- En utilisant le modèle de la Lorentzienne pour déterminer le temps de l'ETR.

Les énergies sont généralement considérées inférieures à la hauteur des barrières et l'étude se restreint au SR GaAs / Al_xGa_{1-x}As de type I selon l'axe de croissance [001] [III.30]. Ce choix justifie le fait de pouvoir uniquement considérer la bande de conduction dû aux larges gaps dans les deux matériaux.

III.3.1. Calcul du coefficient de transmission T

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

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

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

Cette méthode permet d'avoir, dans le cas d'une bande pour un superréseau de N puits quantiques entre $(N+1)$ barrières de potentiel [III.31], à ne manipuler que des matrices carrées 2×2 . L'efficacité de cette méthode est plus ressentie lors de la réduction de la dimension des matrices [III.32].

L'interprétation physique de cette technique est également directe, elle introduit la réponse du système en termes de matrice obtenue à partir d'une relation linéaire liant les fonctions d'onde et leur première dérivée au niveau des interfaces [III.33] :

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

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

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

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

$$\psi_I(z) = A e^{ik_1 z} + B e^{-ik_1 z} \quad (\text{III.8})$$

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

$$\psi_{II}(z) = C e^{ik_2 z} + D e^{-ik_2 z} \quad (\text{III.10})$$

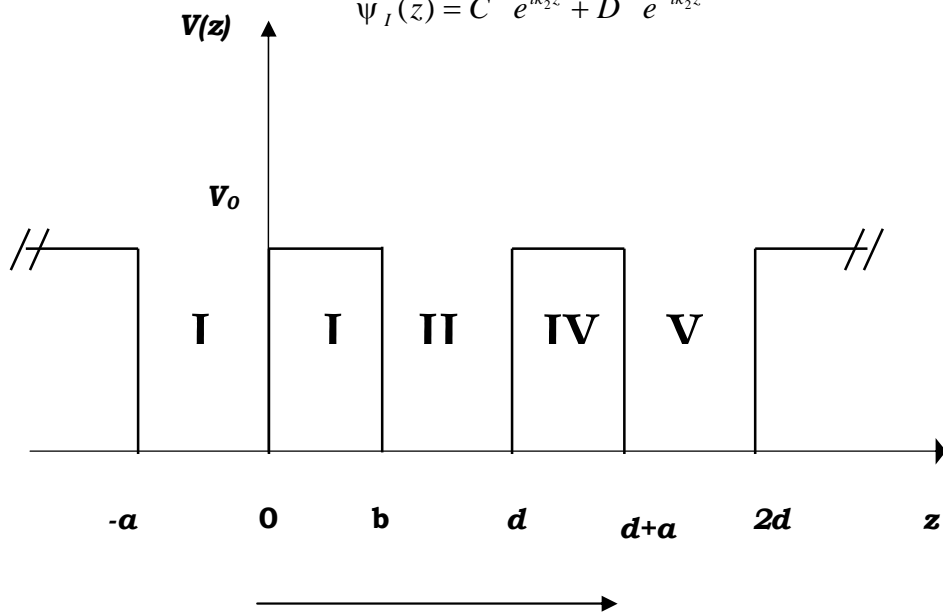


Fig. III.2 Profil de potentiel d'un SR à puits et à barrières rectangulaires

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

$$\psi_I(z) = E e^{ik_1 z} + F e^{-ik_1 z} \quad (III.12)$$

avec

$$k_1 = \sqrt{\frac{2m_a E}{\hbar^2}} \quad \text{et} \quad k_2 = \sqrt{\frac{2m_b(E - V_0)}{\hbar^2}} \quad (III.13)$$

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

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

en $z=0$

$$\psi_I(0) = \psi_{II}(0) \quad (III.14)$$

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

impliquent:

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

(III.16) avec

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

D'où:

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

En $z=b$ le résultat obtenu est similaire

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

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

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

avec

$$M = S_H^{-1}(b) S_H(b) S_I^{-1}(0) S_I(0) \quad (\text{III.21})$$

En Utilisant le modèle de matrice de transfert [III.34] et les conditions de continuité de Bastard [III.35], pour un électron incident venant de la gauche, on obtient une relation reliant le coefficient de réflexion avec celui de transmission :

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

Une algèbre simple conduit à la matrice de transfert

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

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

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

Le coefficient de transmission est donné par :

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

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

- ✓ Les énergies de résonances, pour lesquelles le coefficient de transmission décrit des pics caractérisant le passage de la particule par effet tunnel.
- ✓ Le temps de transit, c.à.d. temps de l'effet tunnel obtenu par l'inverse de la largeur à mi-hauteur du pic. Ce temps est très important car il permet

l'application de ces dispositifs dans les systèmes électroniques à réponse rapide.

- ✓ La conductance de Landauer ($G = \frac{I}{V}$) décrivant la conductivité microscopique sans dimension du système.
- ✓ La résistance de Landauer ($R = \frac{V}{I}$).

La forme des pics du coefficient de transmission T révèle la nature des états responsables de ceux là, car plus le pic est étroit, l'énergie lui correspondant est celle d'un état lié. Donc le calcul du coefficient T pour les structures à ETR présente un intérêt physique considérable. C'est pourquoi une méthode est présentée dans ce paragraphe pour déterminer T pour une structure à barrière rectangulaire soumise à un champ électrique. Cette méthode procure des solutions exactes de l'équation de Schrödinger, elle est basée sur les fonctions d'Airy [III.36-41].

III.3.1.2. En présence de tension appliquée (V_a)

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

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

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

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

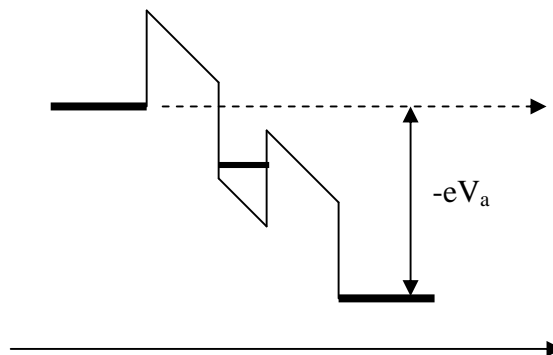


Fig.III.3 Structure soumise à la tension V_a .

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

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

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

Région (II) :

$$V(z) = V_0 - \frac{eV_a}{L} z \quad \text{et} \quad m^*(z) = m_b \quad \text{(III.29)}$$

Soit le changement de variable,

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

L'équation (III.26) devient,

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

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

$$\psi_2(\rho) = C_2^+ A_i(\rho) + C_2^- B_i(\rho) \quad \text{(III.32)}$$

Où A_i et B_i représentent les fonctions d'Airy.

Région (III) :

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

(III.33)

En effectuant ce changement de variable

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

L'équation (III.26) devient,

$$\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} \Psi_3(\rho) - \rho \Psi_3(\rho) = 0 \quad (\text{III.35})$$

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

$$\Psi_3(\rho) = C_3^+ A_i(\rho') + C_3^- B_i(\rho') \quad (\text{III.36})$$

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

Région (V)

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

$$\Psi_5(z) = 0 \quad e^{-ik'z + \tau} \quad e^{ik'z} \quad (\text{III.38})$$

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

La première amplitude dans la relation (III.38) est nulle, car la particule est supposée venir de $z = -\infty$.

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Soient A , B , C et D les éléments de la matrice $S(\mathbf{0}, l)$, des relations (III.39) et (III.42),

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

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

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

III.3.2. Temps de l'effet tunnel résonant

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

- **Modèle de la Lorentzienne**

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

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

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

Les structures étudiées dans ce travail possédant des barrières fines, cette approximation ne peut être appliquée, d'où ΔE est obtenu en l'identifiant à la largeur à mi-hauteur du pic de résonance du coefficient T [III.41]. En vertu du principe d'incertitude de Heisemberg, le temps de l'ETR est inversement proportionnel à ΔE :

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

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

III.4. CONCLUSION

Différents formalismes ont été présentés traitant les caractéristiques des SR utilisant l'approximation de la masse effective et celle de la fonction enveloppe ainsi que les conditions de continuités de Bastard dans le modèle de la matrice du transfert.

Chaque modèle présenté dans ce chapitre expose au moins une propriété importante du SR. Ces formalismes sont appliqués dans le chapitre IV pour discuter les résultats en illustrant les avantages et les inconvénients des méthodes proposées et en essayant d'interpréter les phénomènes physiques observés.

III.5.REFERENCES

- [1] Elateche Zahia, « Etude de l'interaction électron -Matière par la méthode Monte Carlo - Application sur Silicium». Mémoire de magister, Université de Batna (2005).
- [2] L. N. Pandey, D. Sahu, and T. F. George, *App. Phys. Lett.* 56, 277 (1990).
- [3] A. Brezini and N. Zekri, *Solid. Stat. Comm.* 86, 613 (1993).
- [4] G.Bastard. *Semiconductors Heterostructures*”Edition de Physique (1989).
- [5] P. Kiréev, *La physique des semiconducteurs*, edt. Mir. Moscou (traduction Française) (1975).
- [6] R. D. Kronig and W. J. Penney, *Proc. R.Soc. London Ser. A.* 130 499, (1931).
H. Pruszkarski, *Physica B.* 125, 179 (1984).
- [7] T. Ando and S. Moris, *Phys. Rev. B* 40, 11609 (1989).
- [8] Q. G. Zhu and H. Kroemer, *Phys. Rev. B* 27, 3519 (1989).
- [9] R. de L. Kronig et W. J. Penney, *Proc. R. Soc. London, Ser. A* 130, 499 (1930).
- [10] D. J. Ben Daniel and C. B. Duke, *Phys. Rev.* 152, 683 (1966).
- [11] G. Bastard, *Phys. Rev. B* 24, 5693 (1981).
- [12] Galbraith and G. Duggan, *Phys. Rev. B* 38, 10057 (1988).
- [13] K. F.Brennan and C. J. Summers, *J. App. Phys.* 61, 614 (1987).
- [14] J. P. Peng, H. Chen, and S. X. Zhou, *J. Phys. Cond. Matter* I 5451 (1989).
- [15] S. S. Allen and S. L. Richardson, *Phys. Rev. B* 50, 11 693 (1994).
- [16] S. S. Allen and S. L. Richardson, *J. App. Phys.* 79, 886 (1996).
- [17] A. N. Khonder, M. R. Khan, and A. F. N. Anwar, *J. App. Phys.* 63, 5192 (1988).
- [18] Y. Zebda and A. M. Kan'an, *J. App. Phys.* 72, 559 (1992).
- [19] A. M. Tan, J. M. Xu, and S. Zukotynski, *J. App. Phys.* 67, 3011 (1990).
- [20] A. Nogaret, L. A. Cury, D. K. Maude, J. C. Portal, and D. L. Sivco, *Semi. Sci. Tech.* 8, 1819 (1993).
- [21] Cohen-Tannoudji, C,B. Diu, and F, Lalce, *Quantum Mechanics.* John Wiley & Sons. New York (1977).
- [22] Landau, L. D, and E. M. Lifshitz, *Quantum Mechanics-* Pergamon, Oxford (1984).
- [23] Merzbacher, *Quantum Mechanics*, 3rd. ed. John Wiley & Sons. New York (1998).
- [24] T. Ando, S. Wakara, and H. Akera, *Phys. Rev. B* 40, 11 610 (1989).

- [25] N. Sekkal, H. Aourag, N. Amrane, and B. Soudini, *Phys. Rev. B* 215, 171 (1995).
- [26] F. Bechstedt, H. Geecke, and H. Grille, *Phys. Rev. B* 47, 13 540 (1993).
- [27] S.S.Allen and S.L.Richardson, *Phys.Rev.B* 50, 11 693 (1994).
- [28] S.S.Allen and S.L.Richardson, *J.App.Phys.* 79, 886 (1996).
- [29] D.J.Fisher and C.Zhang, *J.App.Phys.* 76, 606 (1994).
- [30] Tsung L. Li and Kelin J. Kuhn, *Phys. Rev. B* 49, 2608 (1994).
- [31] Yeh, p, *Optical Waves in Layered Media*, 2nd ed. Wiley series in Pure and applied Optics. John Wiley & Sons. New York (2005).
- [32] Mell, P.A, and N. Kumar, *Quantum transport in Mesoscopic systems; Complexily and statistical fluctuations*. Oxford University Press. Oxford (2004).
- [33] R. C. Miller, A. C. Grossard, D. A. Kleinman, and O. Munteanu, *Phys. Rev. B* 29, 3740 (1984).
- [34] Walker. J. S and Gathright 1994 *J Amer. J.Phys.*62 408
- [35] R.Djelti, S.Bentata and Z.Aziz. *FIZIKA A* 15, 219-226 (2006)4.
- [36] J. Leo and J. A. Toombs, *Phys. Rev. B* 43, 1944 (1994).
- [37] F. Berz, *Semi. Sci. Tech.* 8, (1993).
- [38] J. P. Peng, H. Chen, and S. X. Zhou, *J. Phys. Cond. Matter I* 5451 (1989).
- [39] D. J. Fisher and C. Zhang, *J. App. Phys.* 76, 606 (1994).
- [40] S. S. Allen and S. L. Richardson, *J. App. Phys.* 79, 886 (1996).
- [41] S. S. Allen and S. L. Richardson, *Phys. Rev. B* 50, 11 693 (1994).

CHAPITRE IV

RESULTATS ET DISCUSSIONS

CHAPITRE IV

RESULTATS ET DISCUSSIONS

IV.1 INTRODUCTION

Dans ce chapitre, on décrit les différentes méthodes et approximations utilisées dans la résolution de l'équation de Schrödinger, pour étudier les différentes hétérostructures à profil de potentiel rectangulaire, ceci nous permet d'avoir un aperçu général sur la nature des états électroniques dans ces systèmes en particuliers les superréseaux quasipériodiques.

Dans ce chapitre, le comportement du coefficient de transmission est étudié pour des structures ordonnées permettant une comparaison de leurs états électroniques avec des structures quasipériodiques en absence et en présence de champs électrique appliqué.

Le choix des matériaux $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ est justifié dans la mesure où la littérature procure tous les paramètres expérimentaux utilisés dans notre calcul numérique. L'expression du potentiel de ce SR en fonction de la concentration x de la composition en Aluminium introduite lors de l'épitaxie, utilisant la règle des 60% des queux de bande de conduction, est donnée par la relation :

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

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

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

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

m_0 étant la masse de l'électron libre.

IV.2. STRUCTURES ORDONNEES

L'utilisation des formalismes précédents nous permet de tracer le coefficient de transmission pour un certain nombre de cas ; simple, double, triple et N barrières rectangulaires.

IV.2.1. Une barrière rectangulaire

La figure (IV.1) montre l'évolution du coefficient de transmission en fonction de l'énergie incidente de l'électron ($E < V_0$) pour une barrière de différentes épaisseurs, et de hauteur fixe ($V_0 = 300 \text{ meV}$). L'augmentation de l'épaisseur des barrières provoque une diminution de la transmission Jusqu'à son annulation complète pour une épaisseur de barrière $b = 80 \text{ \AA}$.

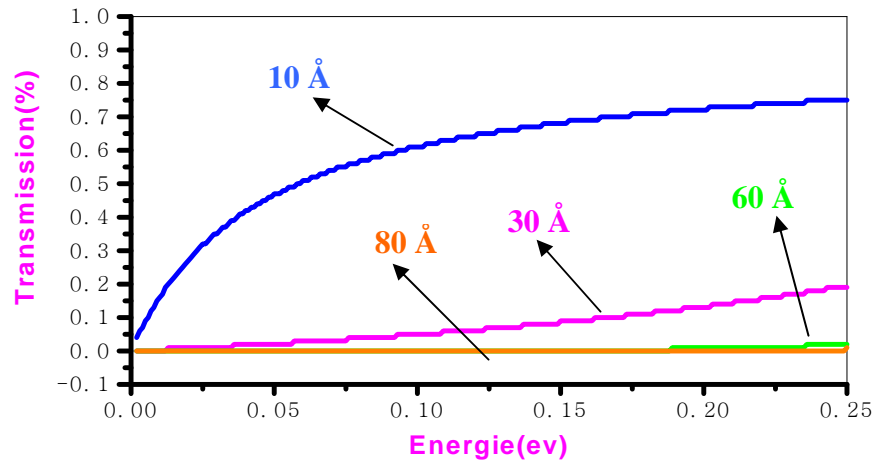


Fig IV.1. Coefficient de transmission en fonction de l'énergie pour différentes épaisseurs b d'une barrière rectangulaire de hauteur $V_0 = 300 \text{ meV}$.

Pour une épaisseur inférieure à 60 \AA l'électron a une probabilité non nulle de franchir celle-ci, la fonction d'onde dans cette région de potentiel n'est pas nulle mais elle se comporte comme "onde évanescente". En terme de longueur d'onde de l'électron ($\lambda = 2\pi/\rho$; ρ : la portée de l'onde) tant que la relation $2\pi b \leq \lambda$ est vérifiée, une probabilité de passage par effet tunnel existe toujours. Dans le cas contraire, c.à.d. pour des épaisseurs de barrières très grand, la particule voit la barrière comme un mur de potentiel infini, d'où le coefficient de transmission s'annule pour des épaisseurs de barrières supérieur ou égale à 80 \AA .

IV.2.2. Double barrières rectangulaires

IV.2.2.1. Coefficient de transmission

Les résultats numériques concernant le coefficient de transmission sont donnés en fonction de l'énergie pour une structure double barrières rectangulaires GaAs/Al_xGa_{1-x}As à interfaces abruptes, avec les paramètres suivants [IV.1-3]: $a=b=17 \text{ \AA}$, $m_a=0.067m_0$, $m_b=0.1087m_0$ et $V_0=300\text{meV}$, soumise respectivement à une tension V_a induisant des champs électriques $E=V_a/L$, (L étant la longueur du superréseau).

Le coefficient de transmission possède un comportement oscillatoire, c.à.d. la probabilité de passage par effet tunnel est proche de l'unité pour des énergies précises, dites énergies de résonances, puis diminue pour d'autres.

L'électron dans ces structures de potentiel possède un état permis confiné à l'intérieur du puits lui permettant de transpercer les deux barrières, c'est le phénomène d'effet tunnel résonnant (ETR).

La figure (IV.2) montre la courbe de $T(E)$ obtenus à partir de la résolution de l'équation de Schrödinger utilisant les ondes planes pour $V_a = 0.0 \text{ Volt}$ et les fonctions d'Airy pour $V_a = 0.09 \text{ Volt}$ et 0.18 Volt .

En augmentant la tension appliquée, le pic se déplace vers les basses énergies avec une diminution considérable de la probabilité de transmission, cela est dû principalement à la pente de la barrière du potentiel, qui devient de

plus en plus grande $V(z)=V_0-\frac{eV_a}{b}$ (voir figure IV.4). Ce résultat est similaire à ceux obtenus dans la littérature [IV.4-6].

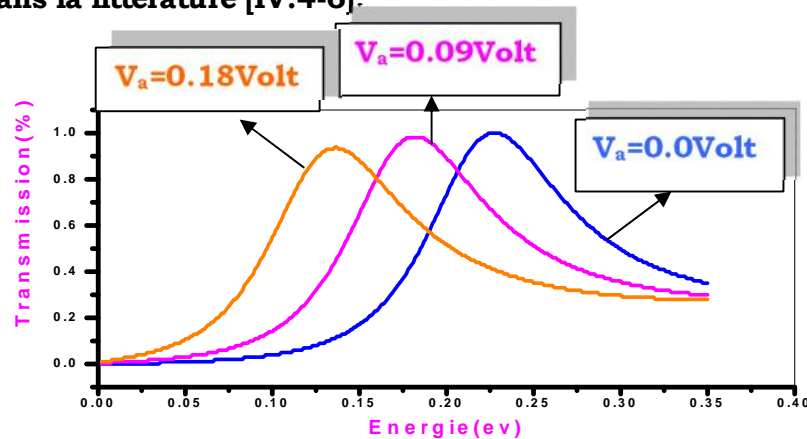


Fig.IV.2. Coefficient de transmission en fonction de l'énergie pour une structure double barrière de hauteur $V_0= 300 \text{ meV}$ soumise à des tensions $V_a=0.0 \text{ Volt}$, $V_a=0.09\text{Volt}$ et $V_a=0.018\text{Volt}$.

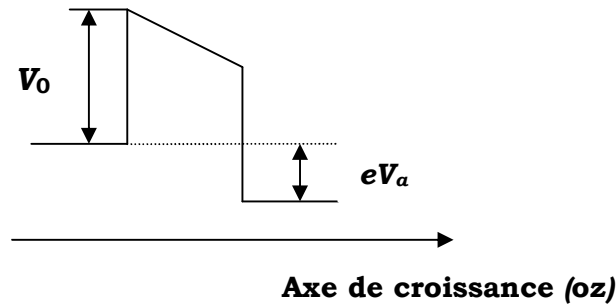


Fig.IV.3. Profil d'une barrière de potentiel soumise à une tension V_a .

IV.2.2.2. Temps de l'effet tunnel résonnant

Le temps d'effet tunnel résonnant est calculé à partir de la largeur à mi-hauteur de la Lorentzienne ($t = \frac{\hbar}{E}$) qui correspond au pic de transmission.

Pour les valeurs élevées du champ externe, la probabilité de passage par effet tunnel décroît ; l'onde en grande partie est réfléchi.

En général l'électron exploite les états permis de la structure double et triple barrières soumises à un potentiel extérieur V_a en un temps de l'ordre du Femtoseconde (10^{-15} s).

La vitesse atteint des valeurs très importantes de l'ordre du un millième de la vitesse de la lumière. Les valeurs du temps calculé sont en bon accord avec celles trouvées par la littérature [IV.7-8] pour des conditions comparables.

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

V_a (V)	E_r	T_r	ΔE (meV)	t (s) $\times 10^{-15}$	V (m/s) $\times 10^5$
0.00	0.229	1.00	092	1.14	44.73
0.09	0.182	0.98	182	0.53	96.22
0.18	0.137	0.94	153	0.68	75

V.2.3. Triple barrières

En gardant les mêmes paramètres que ceux de la structure double barrières : $a=b=17 \text{ \AA}$; $V_0=300\text{meV}$, on observe dans la figure (IV.4) deux pics de résonances au lieu d'un seul, ou' chacun correspond à un état électronique permis dans chaque puits de potentiel.

Quand la largeur du puits $a=17 \text{ \AA}$ et l'épaisseur de barrière $b=30 \text{ \AA}$, on remarque dans la même figure deux pics de résonances étroits séparés par une vallée localisé à $E_v=207\text{meV}$, dans le cas contraire : $a=30 \text{ \AA}$; $b=17 \text{ \AA}$ et $V_0=300\text{meV}$, on observe un élargissement des pics qui facilite le passage de l'électron et l'augmentation de l'amplitude de la vallée. Ces effets sont la cause d'un confinement des états vers le bas, dans ce cas la particule rencontre un potentiel avec deux barrières plus fine et un puit très large. Ce résultat est similaire à ceux obtenus dans la littérature [IV.9-13].

En variant la hauteur de barrière $V_0=244\text{meV}$ tout en gardant les mêmes paramètres: $a=30 \text{ \AA}$; $b=17 \text{ \AA}$, on observe dans la figure (IV.5) un élargissement des pics de résonances vers les faibles énergies. On déduit que pour de faible hauteur de barrière, les états sont plus confinés.

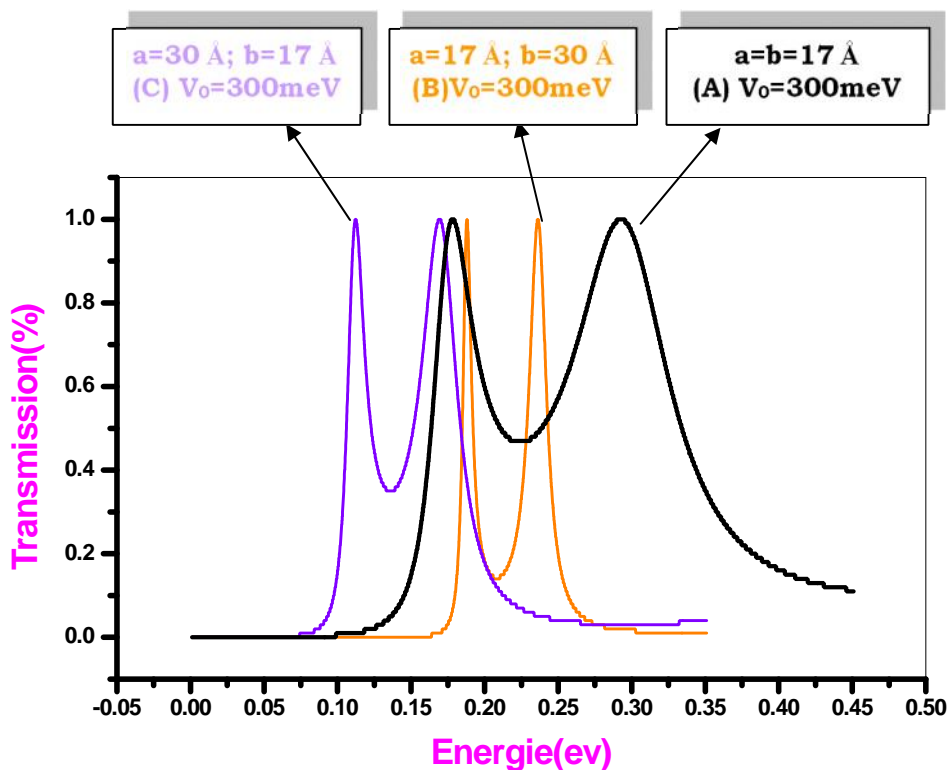


Fig IV.4. Coefficient de transmission en fonction de l'énergie pour une structure triple barrière de hauteur $V_0= 300 \text{ meV}$ pour le cas (A), (B) et (C).

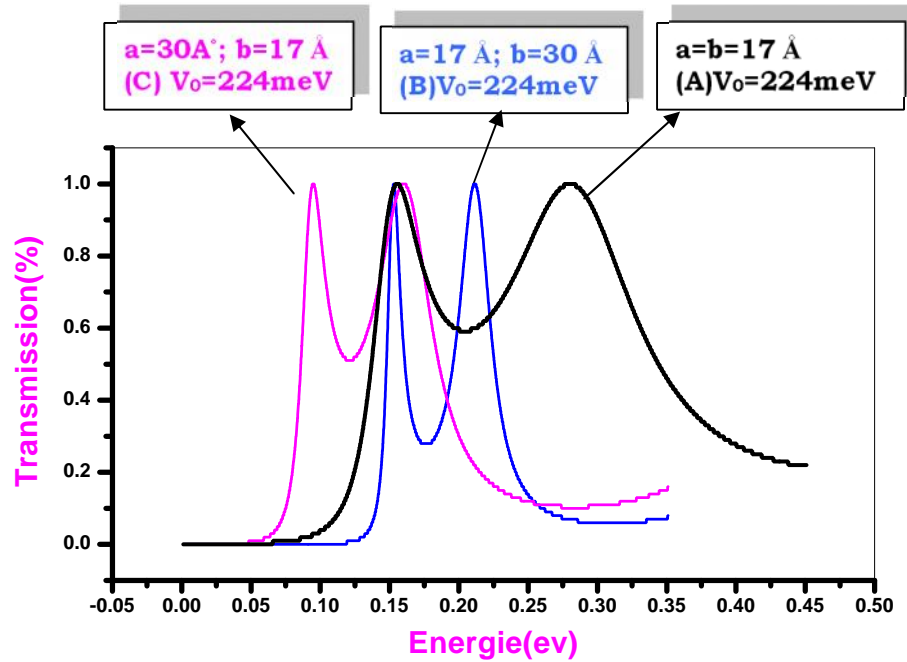


Fig IV.5. Coefficient de transmission en fonction de l'énergie pour une structure triple barrière de hauteur $V_0 = 244 \text{ meV}$ pour le cas (A), (B) et (C).

IV.2.4. N Barrières (N>3)

Lorsque l'énergie des électrons coïncide avec les états permis à l'intérieur du puits de potentiel. Les électrons passent par effet tunnel résonnant.

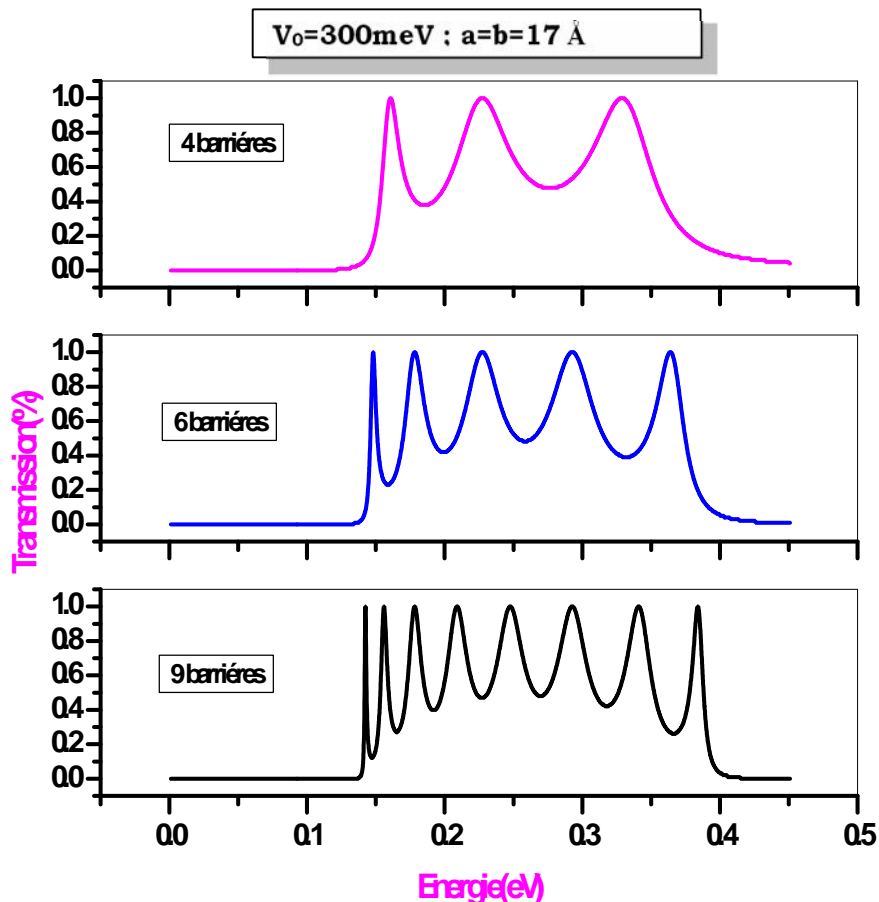


Fig IV.6. Coefficient de transmission en fonction de l'énergie de l'électron incident d'une structure périodique pour (A) 4 barrières, (b) 6 barrières, (c) 9 barrières.

Cela a permis de mettre en évidence la formation de minibandes dans les bandes d'énergie. Ce phénomène est assez bien décrit par le coefficient de transmission qui présente des pics de résonance ($N-1$) fois dégénérés (N étant le nombre de barrières) comme le présente la figure (IV.6).

En augmentant le nombre de barrières et de puits de façon périodiques dans le cas $a=b=17 \text{ \AA}$; $V_0=300\text{meV}$ pour $N= 50$ barrières, $N=377$ barrières et $N=1000$ barrières. On observe le processus de formation de la structure de minibandes à l'intérieur du puits, cela est dû à l'existence des ($N-1$) états permis dans les ($N-1$) puits compris entre les N barrières voir figure (IV.7).

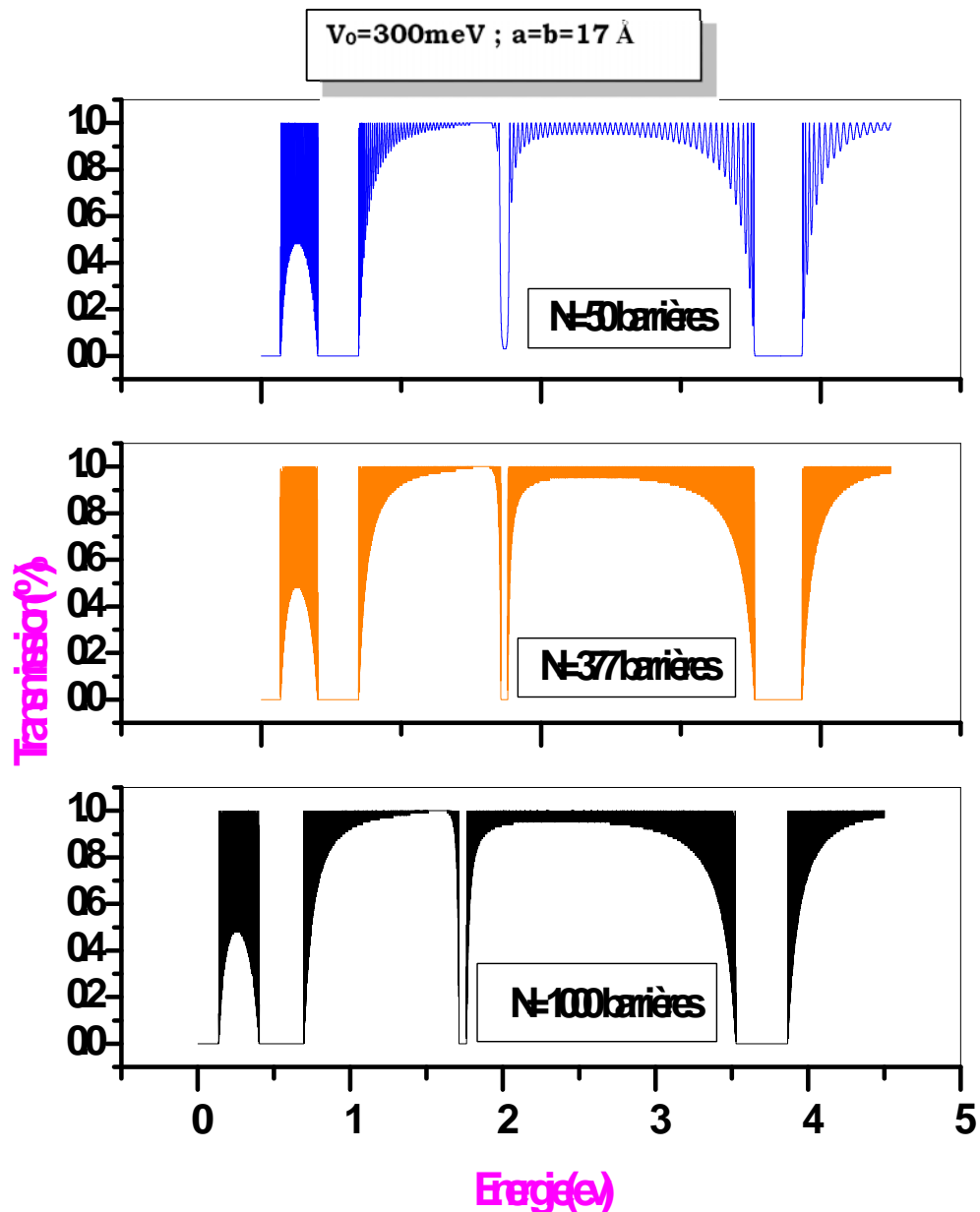


Fig IV.7. Coefficient de transmission en fonction de l'énergie de l'électron incident d'une structure périodique pour (A) 50 barrières, (b) 377 barrières, (c) 1000 barrières.

L'augmentation de la taille du système par prolongement de la périodicité est nécessaire pour évaluer l'évolution spatiale d'un état résonnant. La figure (IV.8) représente le coefficient de transmission en fonction du nombre de barrière pour $E_r=250\text{meV}$. On remarque que T présente des oscillations périodique pondéré par une fonction enveloppe de période $P = 850 \text{ \AA}$. Celle ci a une relation avec la période du SR. Cet état est un état étendu de Bloch.

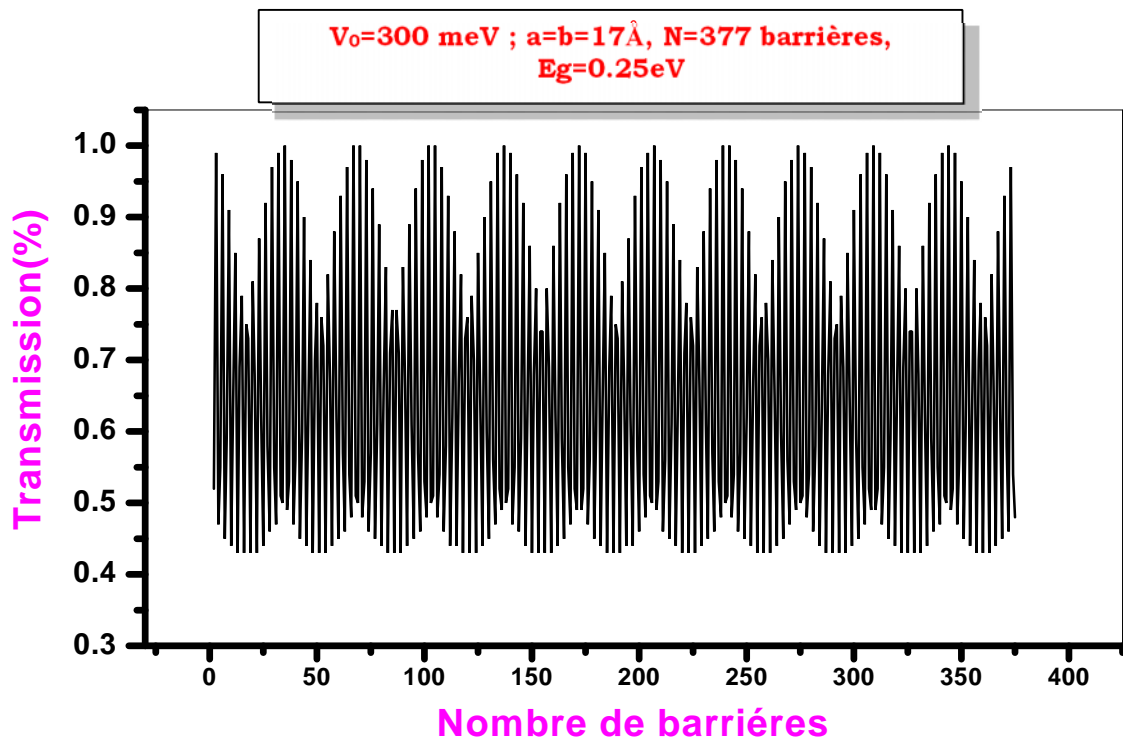


Fig.IV.8. Coefficient de transmission d'un SR ordonné en fonction du nombre de barrière

IV.3. STRUCTURES QUASIPERIODIQUES

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

C'est le cas des superréseaux de Fibonacci.

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

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

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

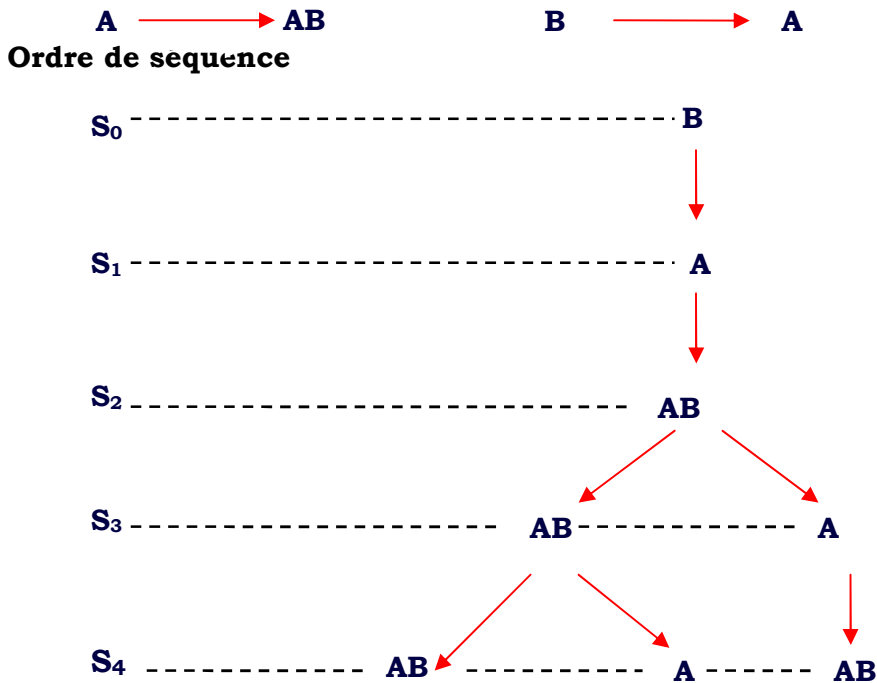


Fig.IV.9. Superréseau quasipériodique de Fibonacci

Dans la description de ce type de superréseau, plusieurs paramètres peuvent être variés, notamment : la largeur du puits a , l'épaisseur de barrière b , la hauteur de potentiel V , ainsi que la largeur de la structure L à travers le nombre de barrière N .

Chacun de ces paramètres a son influence physique sur le système : la largeur a détermine le nombre de minibande permise à l'intérieur du puits, l'épaisseur b agit sur la largeur de ces minibandes en contrôlant la force d'interaction entre les états propres voisins et L mesure le degré du désordre introduit.

IV.3.1. STRUCTURE QUASIPÉRIODIQUE EN LARGEUR DU PUIITS

La figure (IV.10) schématise le profil du potentiel de la quatrième séquence ($aaafaaaaf$) pour une structure de Fibonacci en largeur du puits.

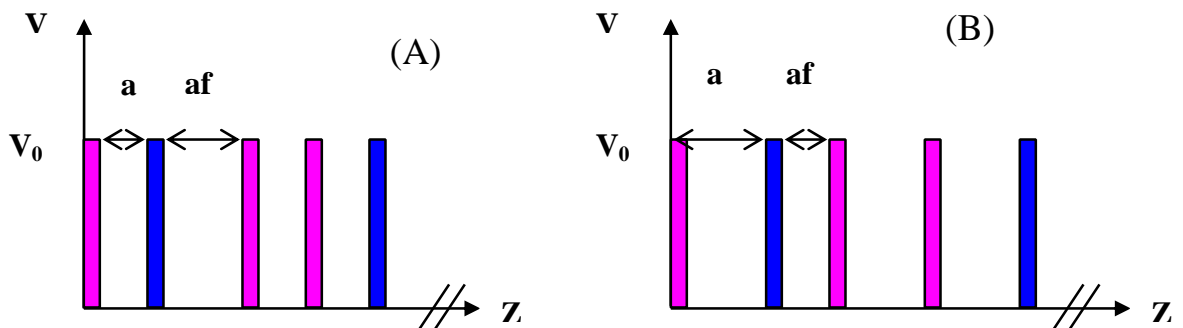


Fig.IV.10. Représentation d'une structure de Fibonacci de la quatrième séquence pour (A) $af > a$ et (B) $af < a$.

En traçant le coefficient de transmission pour la structure a une hauteur $V_0=300meV$ et une épaisseur $b=17\text{Å}$ séparée par :

- A. Des puits de largeur $a=17\text{Å}$ et $af=25\text{Å}$ pour $N=377$ barrières.
- B. Des puits de largeur $a=25\text{Å}$ et $af=17\text{Å}$ pour $N=377$ barrières.

On constate dans la figure (IV.11) une fragmentation de la minibande principale en plusieurs subminibandes et minigaps. Celle-ci est due à l'introduction de la quasipériodicité dans le profil de potentiel, des états singulièrement localisés sont constatés à l'intérieur des subminibandes. Cela est une conséquence directe des interférences destructives des ondes électroniques sur les parois des barrières de la structure. Quand on introduit des largeurs af , on observe la perte de la périodicité du superréseau. La petite figure de gauche représente les deux minibandes principales des structures périodiques de base. Ce phénomène observé est similaire avec celui de Gellermann et Lusk [IV.14-15].

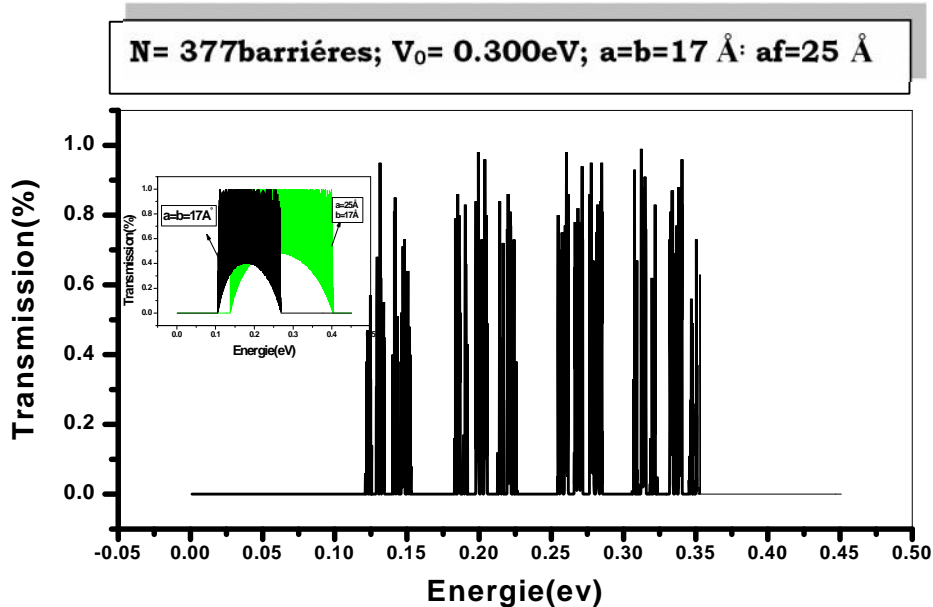


Fig.IV.11. Coefficient de transmission en fonction de l'énergie de l'électron incident d'une structure quasipériodique en largeur de puits (casA)

On trace le coefficient de transmission en fonction du nombre de barrières pour les mêmes valeurs des paramètres précédents à des valeurs d'énergies ayant un coefficient de transmission nulle et égale à l'unité (voir la figure (IV.12). Quand le coefficient de transmission est ($T=1$), ce dernier garde son comportement oscillatoire et la fonction enveloppe perd son aspect cohérent en absence de la notion de périodicité ; cet état représente un état étendu mais pas

de Bloch. Par contre lorsque ($T=0$) le coefficient de transmission présente une diminution en exponentiel de la fonction enveloppe jusqu'à son annulation, cet état correspond à un état localisé.

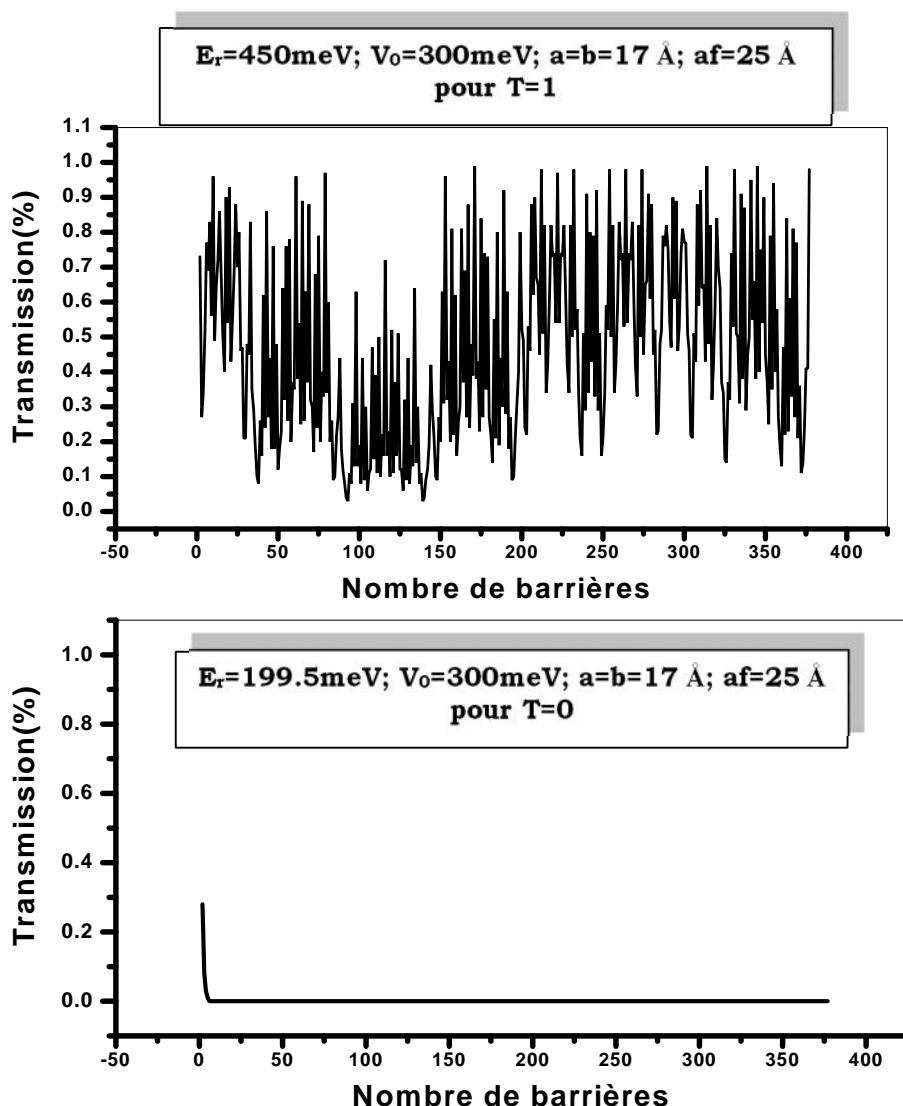


Fig.IV.12. Coefficient de transmission en fonction du nombre de barrières pour une structure quasipériodique de Fibonacci en largeur de puits à (A) $E_r= 199.5\text{meV}$ et (B) $E_0=450\text{meV}$

La figure (IV.13) montre une fragmentation plus importante c.à.d les minigaps deviennent plus larges et les subminibandes plus restreintes cela est dû au confinement des états à l'intérieur des puits de la structure haute. Plus la différence entre les puits a et af est considérable par rapport à la précédente l'effet de la quasipériodicité est mieux senti par l'électron.

En traçant le coefficient de transmission en fonction du nombre de barrières pour les mêmes valeurs des paramètres précédents à des valeurs d'énergies correspondantes à un coefficient de transmission nulle ($T=0$) et à

l'unité ($T=1$) figure (IV.14), on remarque les mêmes effets observés dans la figure (VI.12) sauf que dans la figure (IV.14A) la fonction enveloppe est plus fragmentée. Ce résultat est similaire à celui de Dominguez-Adame et al [IV.16].

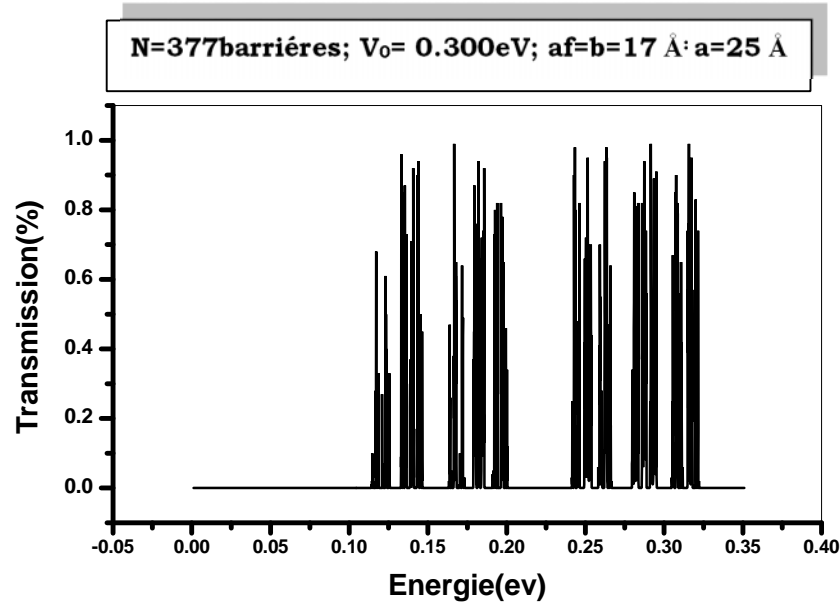


Fig.IV.13. Coefficient de transmission en fonction de l'énergie de l'électron incident d'une structure quasipériodique en largeur de puits (casB)

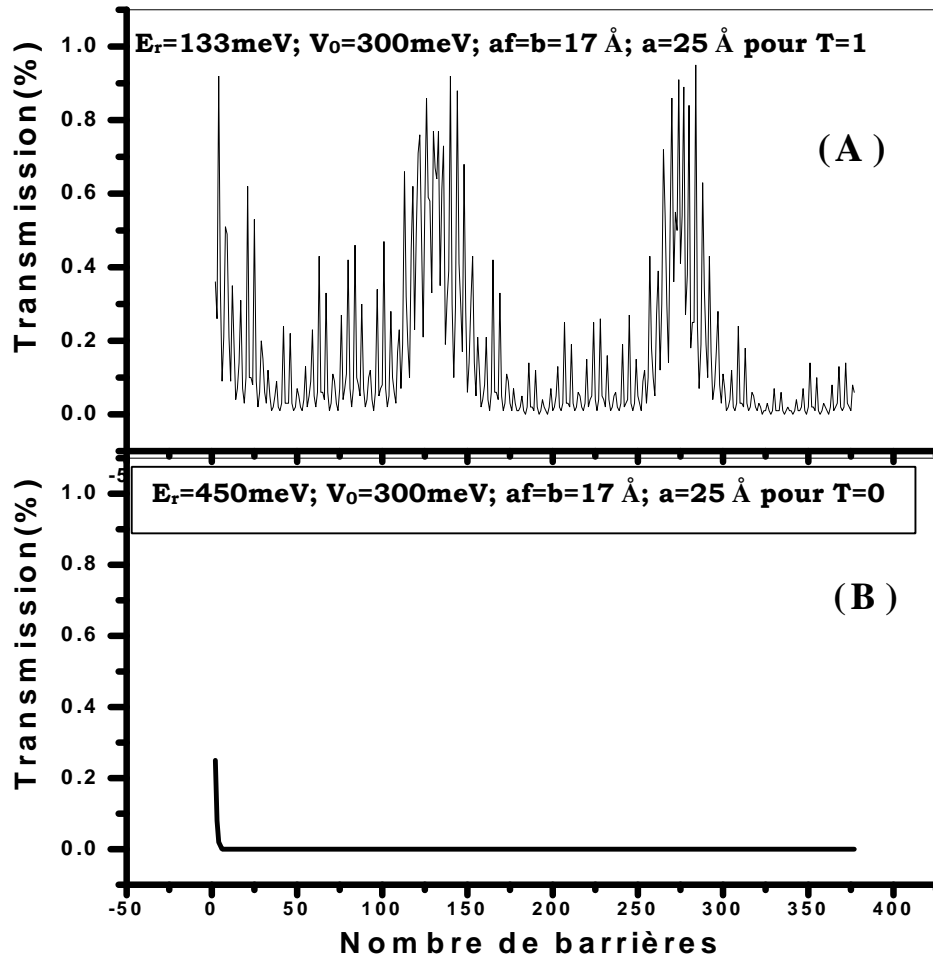


Fig.IV.14. Coefficient de transmission en fonction du nombre de barrières pour une structure quasipériodique de Fibonacci en largeur de puits à (A) $E_r= 133\text{meV}$ et (B) $E_o=450\text{ meV}$

IV.3.2. STRUCTURE QUASIPÉRIODIQUE EN ÉPAISSEUR DE BARRIÈRE

Dans ce paragraphe on étudie une structure de Fibonacci en épaisseur de barrière. Le profil de potentiel de la quatrième séquence ($bbfbbbf$) est représenté dans la figure suivante :

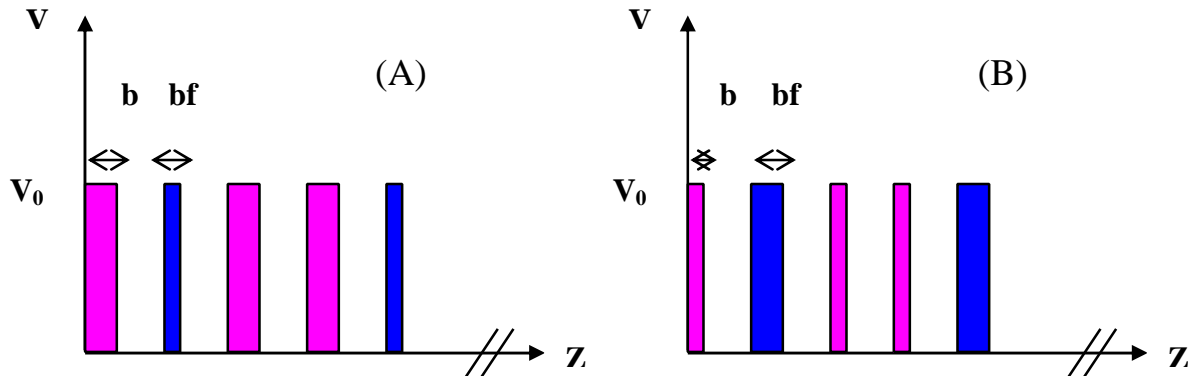


Fig.IV.15. Représentation d'une structure de Fibonacci de la quatrième séquence pour (A) $bf < b$ et (B) $bf > b$.

Dans la figure (IV.16), le coefficient de transmission est tracé en fonction de l'énergie de l'électron incident pour :

- A. Une structure d'une hauteur de barrière $V_0 = 300 \text{ m eV}$, d'épaisseur $b = 25 \text{ \AA}$ et $bf = 17 \text{ \AA}$ séparés par des puits de largeur $a = 17 \text{ \AA}$ pour $N = 377$ barrières.
- B. Une structure d'une hauteur de barrière $V_0 = 300 \text{ m eV}$, d'épaisseur $b = 17 \text{ \AA}$ et $bf = 25 \text{ \AA}$ séparés par des puits de largeur $a = 17 \text{ \AA}$ pour $N = 377$ barrières.

On observe dans la figure (IV.16.A) une fragmentation en six subminibandes séparées par cinq subminigaps celle-ci est due à l'introduction de la quasipériodicité. Des états singulièrement localisés sont observés à l'intérieur des subminibandes, cela est une conséquence directe des interférences destructives des ondes électroniques. Quand la fragmentation est plus importante, cette dernière conduit à l'apparition des minigaps de largeurs importantes au moment de l'introduction d'une barrière de Fibonacci plus large que la première, l'apparition des états singulièrement étendus diminue considérablement lors du passage du nombre des états par effet tunnel.

La figure (IV.17) représente le coefficient de transmission en fonction du nombre de barrières pour les mêmes valeurs des paramètres précédents à des valeurs d'énergies correspondantes à un coefficient de transmission nulle ($T=0$) et à l'unité ($T=1$) dans le cas (A). On constate dans la figure (IV.17.A) que le coefficient de transmission garde son comportement oscillatoire et la fonction enveloppe a perdu son aspect cohérent due à l'absence de la notion de

périodicité ; cet état représente un état étendu mais pas de Bloch. Dans la figure (IV.17.B), le coefficient de transmission a un comportement oscillatoire avec une diminution en exponentiel de la fonction enveloppe jusqu'à son annulation à partir de

$N= 43$ barrières. Pour les petites valeurs de N , la structure joue le rôle d'une structure ordonnée. Avec l'augmentation de la taille du superréseau, l'électron commence à sentir l'effet du défaut quasipériodique avec la diminution du coefficient de transmission jusqu'à son annulation, car à grande portée la quasipériodicité tend vers le désordre.

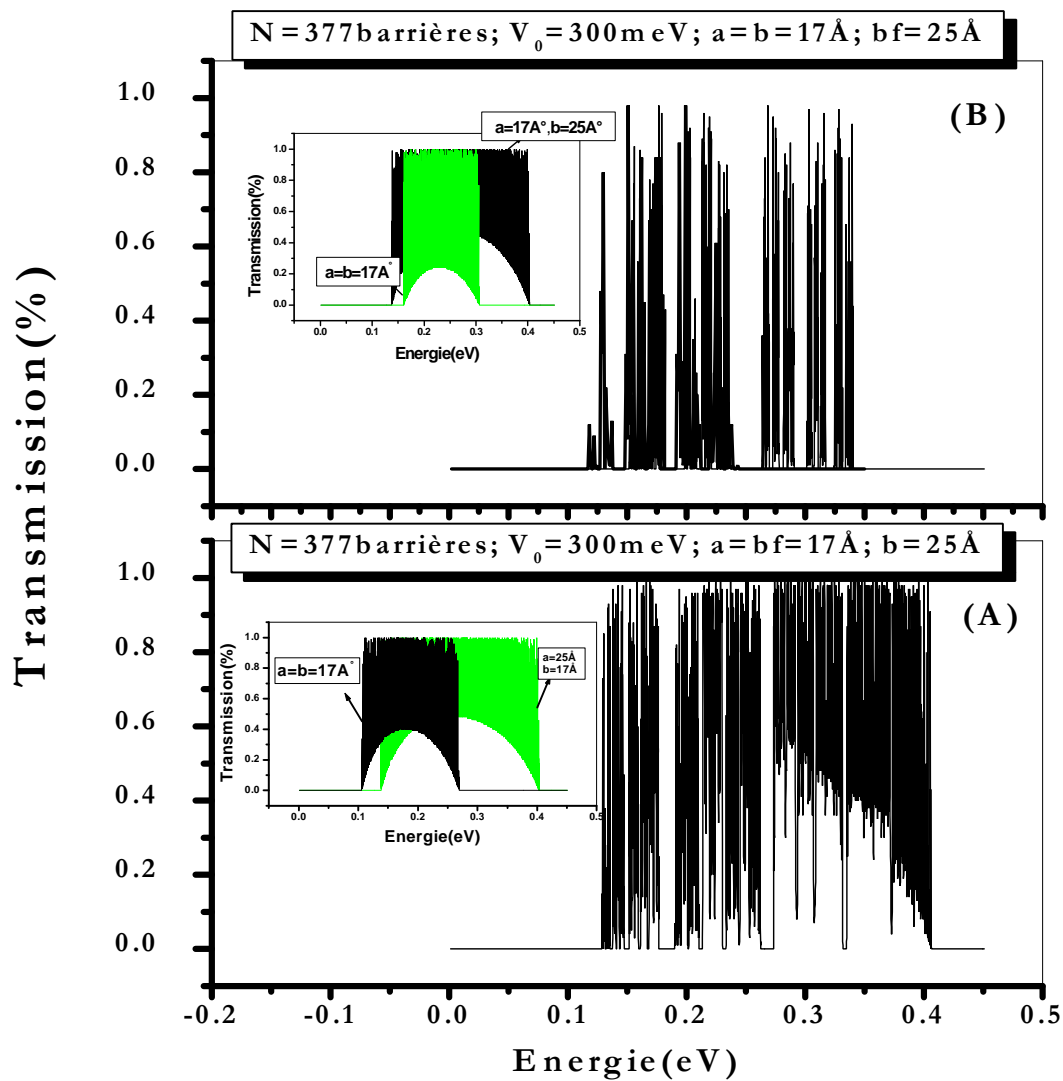


Fig.IV.16. Coefficient de transmission en fonction de l'énergie de l'électron incident pour une structure quasipériodique en épaisseur de barrière pour les cas (A) $bf < b$ et (B) $bf > b$.

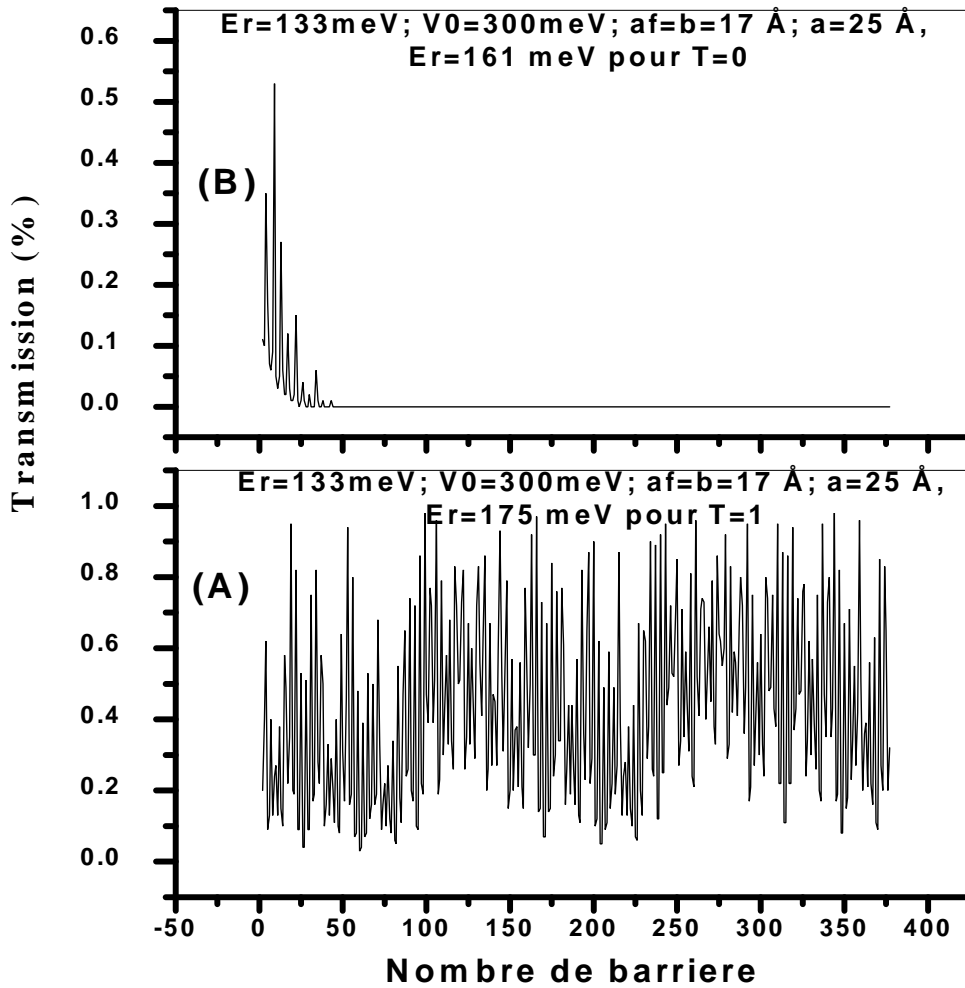


Fig.IV.17. Coefficient de transmission en fonction du nombre de barrières pour une structure quasipériodique de Fibonacci en largeur de puits à (A) $E_r=175$ meV et (B) $E_r=161$ meV

IV.3. 3. STRUCTURE QUASIPÉRIODIQUE EN HAUTEUR DE BARRIÈRE

La variation de la hauteur de barrière pour une structure composée de 377 barrières est étudiée, tout en variant la valeur de la fraction molaire en aluminium (voir la figure (IV.18)).

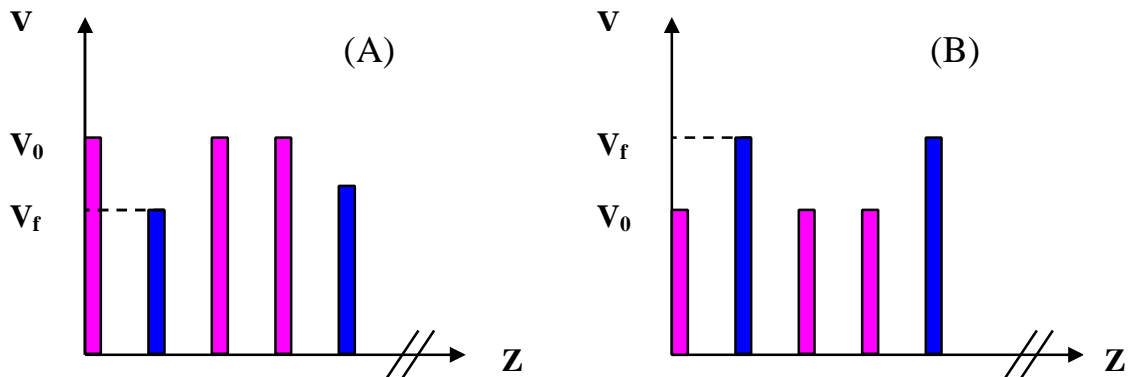


Fig.IV.18. Représentation d'une structure de Fibonacci de la quatrième séquence pour (A) $V_f < V_0$ et (B) $V_f > V_0$.

Le coefficient de transmission est représenté selon l'énergie de l'électron pour une structure ayant un potentiel $V_0=300\text{meV}$ pour différentes valeurs de potentiel de Fibonacci :

(A₁) $V_f=250\text{meV}$; (A₂) $V_f=200\text{meV}$ et (A₃) $V_f=150\text{meV}$ correspondant respectivement à $x=0.33$, $x=0.26$ et $x=0.20$ pour le premier cas et (B₁) $V_f=314\text{meV}$, (B₂) $V_f=321\text{meV}$ et (B₃) $V_f=329\text{meV}$ correspondant à $x=0.42$, $x=0.43$ et $x=0.44$ pour le deuxième cas.

On remarque dans la figure (IV.19.A₁) trois régions de largeur différentes et chaque région contient des subminibandes et minigaps. En diminuant la hauteur de la barrière, on remarque l'élargissement des minigaps jusqu'à la disparition de quelques pics avec une augmentation du nombre des états singulièrement localisés à l'intérieur des subminibandes.

Les deux premières régions contiennent uniquement des états singulièrement étendus pour $V_f=200\text{meV}$, dans ce cas la dernière subminibande résiste à l'effet de la quasipériodicité car ses électrons possèdent des énergies supérieures au défaut.

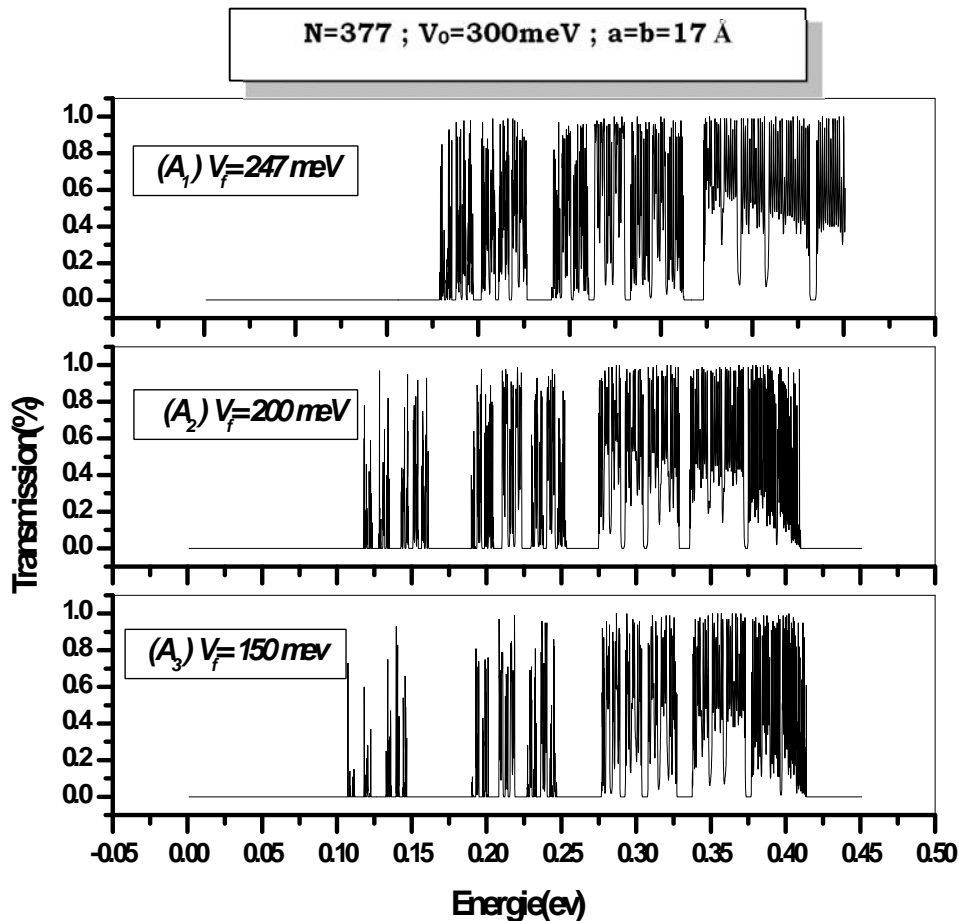


Fig.IV.19. Coefficient de transmission en fonction de l'énergie de l'électron incident pour une structure de Fibonacci en hauteur de barrière avec $N=377$ barrières pour différentes valeurs de potentiel de Fibonacci cas (A).

On observe dans la figure (IV.20) le même phénomène que dans le cas (A) sauf que la largeur des minigaps devient rétrécie et l'apparition des états singulièrement étendus dans les premières subminibandes, car l'électron possédant des énergies proche de V_0 ne sent pas l'effet de la quasipériodicité et la structure tends vers une structure ordonnée à longue portée.

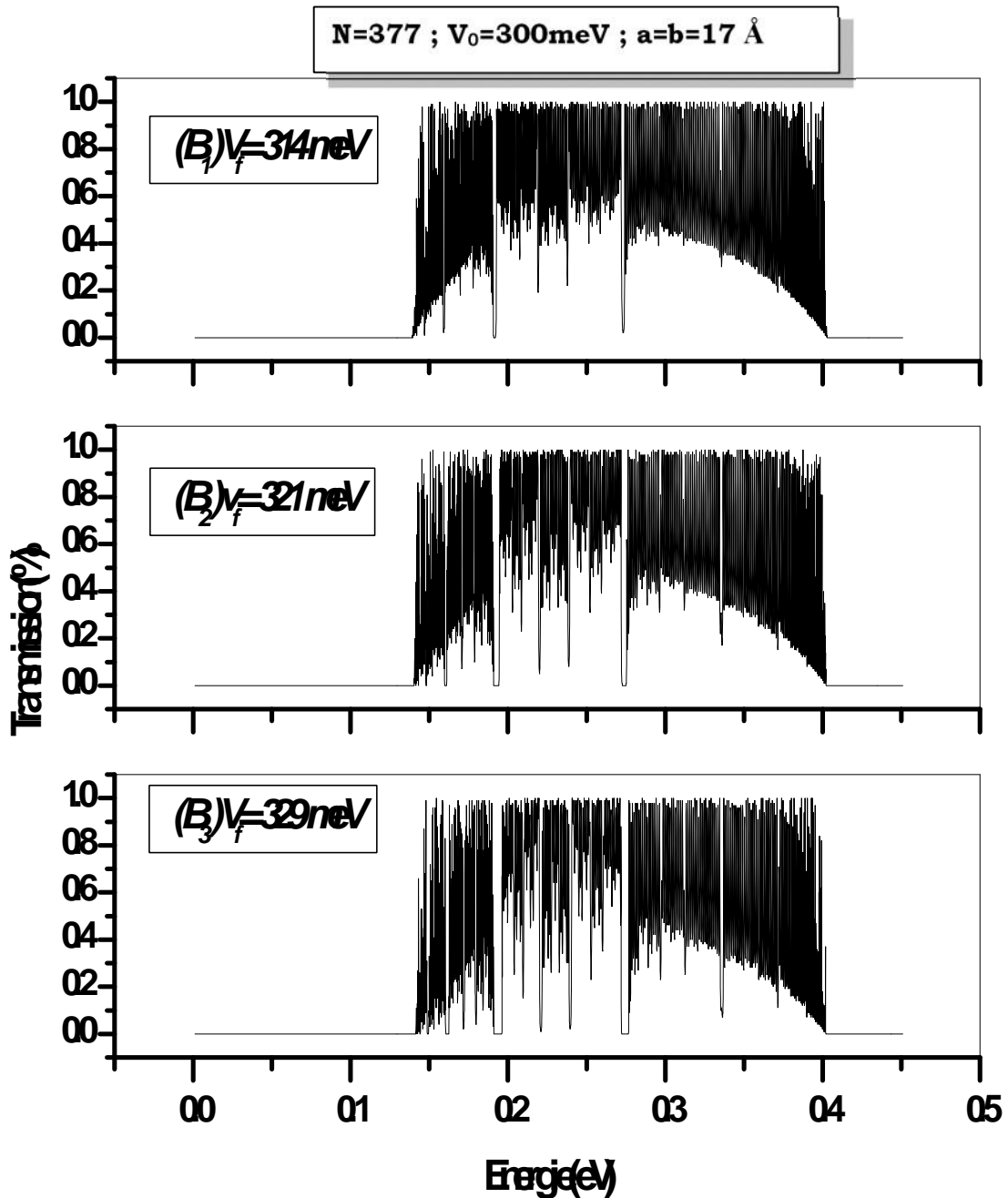


Fig.IV.20. Coefficient de transmission en fonction de l'énergie de l'électron incident pour une structure de Fibonacci en hauteur de barrière avec $N=377$ barrières pour différentes valeurs de potentiel de Fibonacci cas (B).

Le coefficient de transmission est tracé en fonction du nombre de barrières pour les mêmes valeurs des paramètres précédentes à des valeurs des énergies de résonances voire figure (IV.21), ce dernier garde son comportement oscillatoire et la fonction enveloppe a perdu son aspect cohérent due à l'absence de la périodicité.

Les figures (IV.21.A₁), (IV.21.A₂) et (IV.21.A₃) montre que l'électron a senti l'effet de la quasipériodicité et les états sont des états étendus mais pas de Bloch car l'énergie de l'électron est inférieure au potentiel de Fibonacci donc le système tend vers une structure désordonnée.

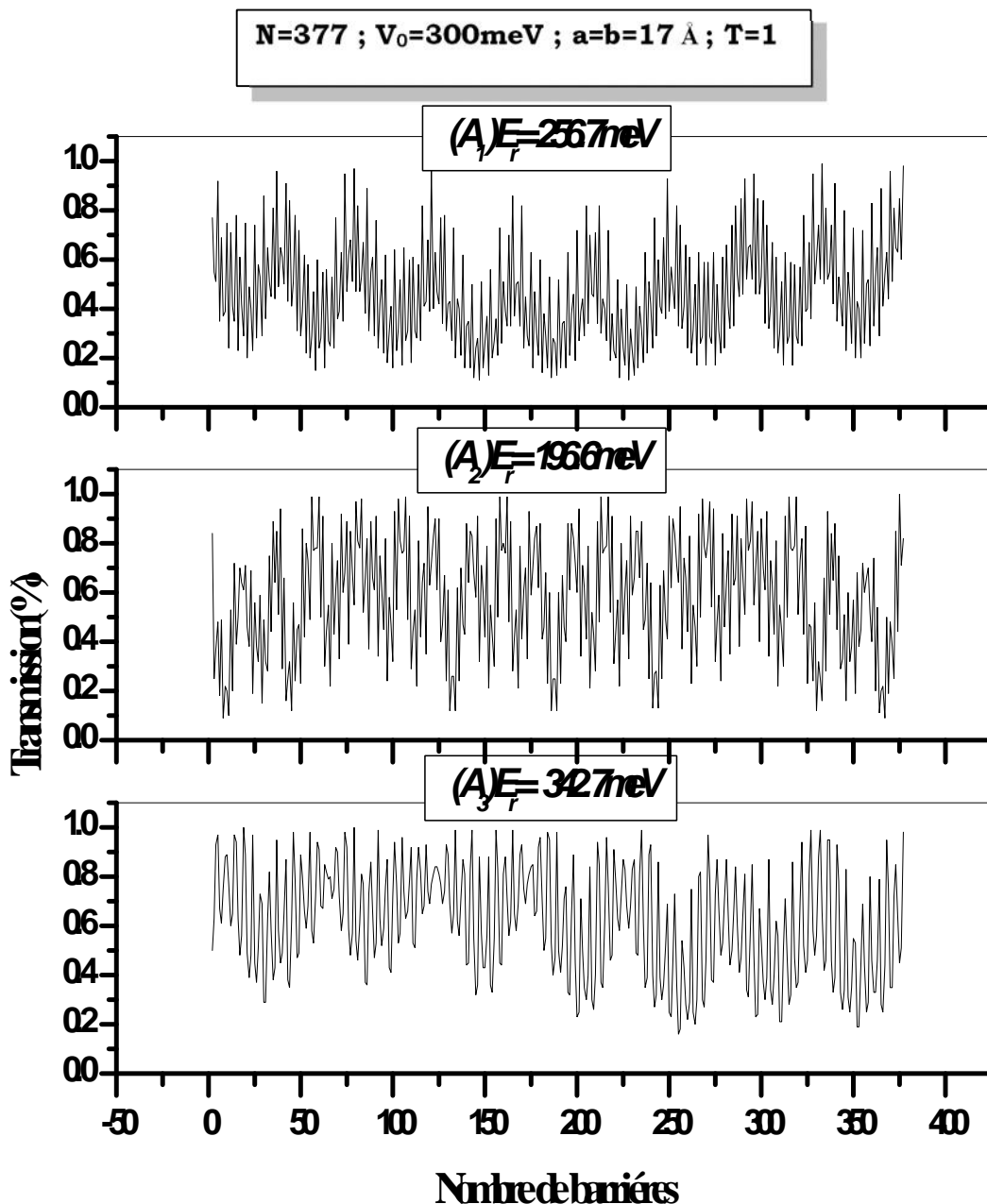


Fig.IV.21. Coefficient de transmission en fonction du nombre de barrières pour une structure quasipériodique de Fibonacci en hauteur de barrière à différentes valeurs d'énergies cas(A).

IV.4. EFFET DE LA TENSION APPLIQUEE SUR LES STRUCTURES QUASIPERIODIQUES

En dernier lieu, nous avons étudié l'effet de la tension appliquée sur les différents types structures quasipériodiques en présentant le coefficient de transmission en fonction de l'énergie de l'électron incident, pour différentes valeurs de tensions appliquées : $V_a=0.0$ Volt ; $V_a=0.015$ Volt et $V_a=0.03$ Volt (figure IV.22).

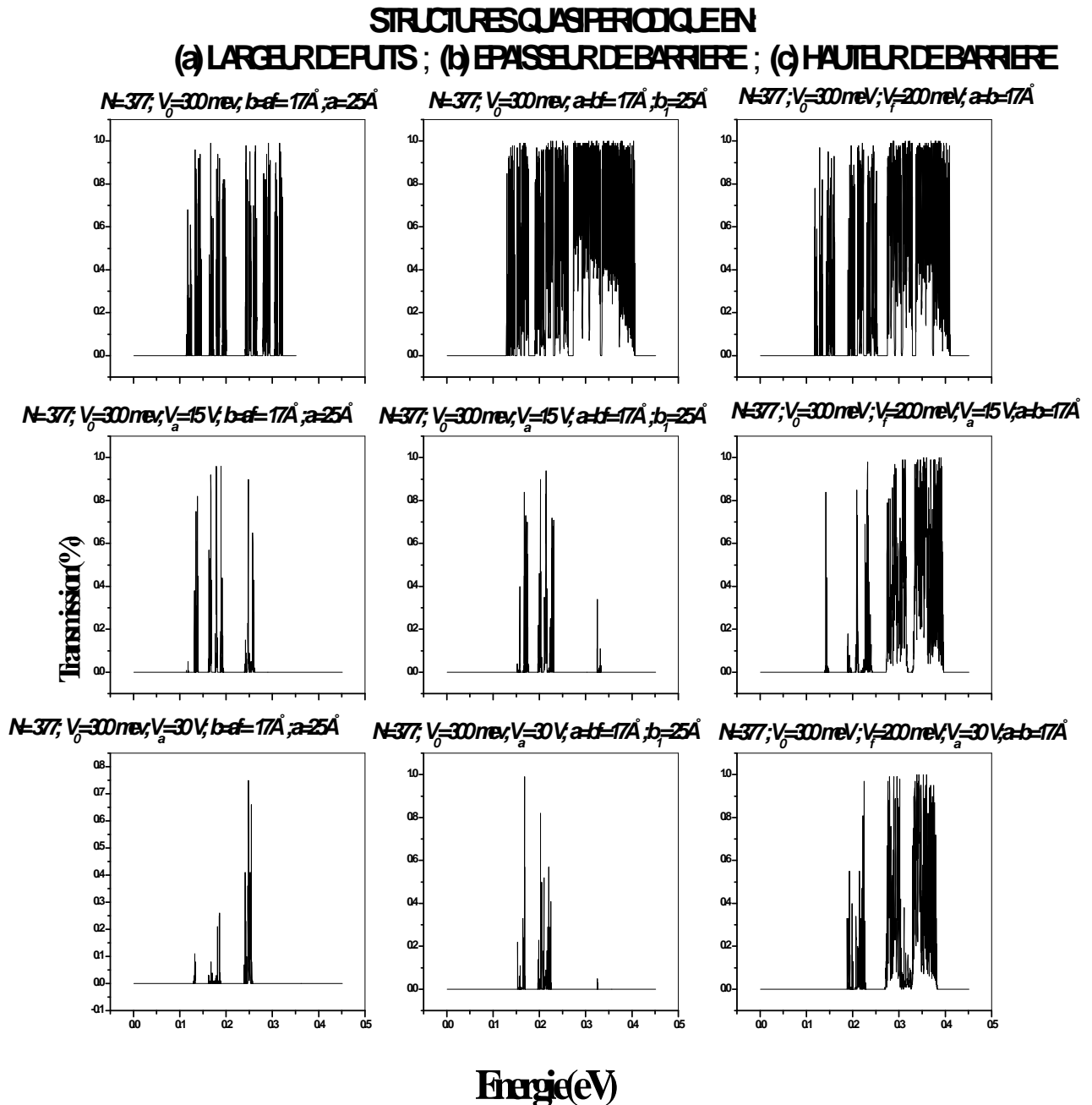


Fig.IV.22. Coefficient de transmission en fonction de l'énergie de l'électron incident pour une structure quasipériodique en(a) largeur de puits, (b) épaisseur de barrière et (c) hauteur de barrière soumise aux différentes valeurs de tensions appliquées.

En comparant des figures (IV.22.a, b, c), on observe une forte réduction de la valeur du coefficient de transmission, particulièrement au bord de la subminibande inférieure, où plusieurs pics de transmission disparaissent complètement. L'augmentation du champ électrique provoque le confinement des états électroniques (rétrécissement des subminibandes), leur translation vers les basses énergies jusqu'à leur disparition cela est dû à l'effet Wannier-Stark. Ainsi on peut conclure que l'effet du champ électrique entre l'ordre à longue portée et la localisation des états des superréseaux de Fibonacci est plus complexe que celles dans les superréseaux périodiques. Cette différence résulte de la nature différente des états dans les deux types de superréseaux. En particulier, nous déduisons que les propriétés de localisation due au champ électrique sont prononcées dans le cas de superréseau de Fibonacci. Ce résultat est en parfait accord avec la littérature [IV.17-21].

IV.5. REFERENCES

- [1] Y. Zebda and A. M. Kanan, *J. App. Phys.* 72, 559 (1992).
- [2] S. S. Allen and S. L. Richardson, *Phys. Rev. B* 50, 11 693 (1994).
- [3] S. S. Allen and S. L. Richardson, *J. App. Phys.* 79, 886 (1996).
- [4] M. Consuelo, A. Lima, G. A. Farias, and V. N. Freire, *Superlattices and Microstructures* 17, 235 (1995).
- [5] Masayuki, H. Hamaguchi , H. Yamamoto and N. Yamada. *Electronics and communications in Japan (Part II: Electronics)*, Vol 88, N° 3(2005).
- [6] H. Yamamoto. *Physica Status Solidi (B)*, Vol 141, N° 2 (2006).
- [7] C.Zinoni, B.Alloing, C.Monat, V.Zwiller, L.H.Li, A.Fiore L.Lunghi, A.Gerardino, H.de Riedmatten, H. Zbinden, and N.Gisin, *Appl.Phys.Lett* 88, 131102(2006).
- [8] L.Balet, M.Francardi, A.Gerardino, N.Chauvin, B.Alloing, C.Zinoni, C.Monat, L.H.Li, N.Le Thomas,R. Houdré, and A.Fiore, *Appl.Phys.Lett* 91, 123115 (2007).
- [9] M. Arakawa, H. Yamamoto, S. Tanaka and N. Yamada, *Electronics and Communications in Japan (Part II: Electronics)*, Vol 85 (2002).
- [10]H.Hamaguchi, H.Yamamoto and N.Yamada. *Electronics and Communications in Japan (Part II: Electronics)*, Vol 87, 9 (2004).
- [11] H. Yamamoto, K. Tsuji and K. Taniguchi. *Physica Status Solidi (B)*Vol 188 , N°2(1995).
- [12] E. Simion and I. Ciucu. *Romanian Reports in Physics*, Vol 59, N° 3, P.803-814 (2007).
- [13] H. Takura and H. Yamamoto.*Electronics and Communications in Japan (Part II: Electronics)*, Vol 90, 25 (2007).
- [14] Gellermann, W., M. Kohmoto, B. Sutherland, and P. C. Taylor, *Physical Review Letters*, Vol. 72, 633, 1994.
- [15] Lusk, D., I. Abdulhalim, and F. Placido, *Optics Communications*, Vol. 198, 273, 2001.
- [16] F. Dominguez-Adame, E. Macia, and B. Méndez, *Cond-Mat*,55 (534) 2007.
- [17] M. Castro and Francisco Dominguez-Adame. *Physics Letters A* 225 (1997).
- [18] Jyotirmayee Nanda, P.K. Mahapatra and C.L. Roy. *Physica B: Condensed Matter*,Vol;383,N°2,(2006).
- [19] P.Panchadhyayee;R.Biswas, Khan Arif et P.K.Mahapatra. *Physi*814 (2007).cs. *Condensed matter*, vol. 20, no27 (2008).
- [20] P.K. Mahapatra, P. Panchadhyayee, S.P. Bhattacharya and Arif Khan. *Physica B Condensed Matter*, Vol 403, N° 1 (2008).

[21] **Z. Aziz, S. Bentata, R. Djelti and E. Elandaloussi. Modern Physics Letter B journal Vol 23, N° 19 (2009).**

CONCLUSION ET PERSPECTIVE

CONCLUSION GENERALE ET PERSPECTIVES

Depuis une vingtaine d'années, les matériaux à bande interdite font l'objet de nombreuses études. Les superréseaux à semi-conducteurs III-V sont devenus le pilier de l'optoélectronique pour la réalisation de laser et de photodétecteur à base de puits quantiques.

L'objectif principal de ce mémoire est d'étudier les propriétés de transport électronique du superréseau $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$.

Différents formalismes ont été présentés dans ce travail traitant l'effet tunnel résonant en utilisant l'approximation de la masse effective et les conditions de continuité de Bastard dans le modèle de la matrice du transfert. Ces derniers ont été modélisés et simulés pour produire un logiciel dit « *SUPERRESEAUX* » pour effectuer le calcul du coefficient de transmission regroupant plusieurs programmes permettant d'étudier une gamme de configuration diverses de structure périodiques et quasipériodiques.

En premier lieu, on a étudié plusieurs structures ordonnées de profil rectangulaire en commençant par une structure à simple barrière ou l'électron a une probabilité non nulle pour franchir les barrières fines par effet tunnel. Puis, une structure double barrière soumise à différentes valeurs de tensions appliquées, a été étudié. Concernant le calcul du coefficient de transmission, celui-ci a un comportement oscillatoire en fonction de l'énergie d'électron. Un pic de résonance est observé à une énergie précise, l'augmentation de la tension appliquée déplace le pic de résonance vers les basses énergies, ceci est lié à l'effet Stark qui représente le confinement des états électroniques. Le temps de passage de l'électron par effet tunnel résonant dans ces structures est de l'ordre du femtosecondes (10^{-15} seconde).

Dans les structures triples barrières, on a observé deux pics de résonances des deux états permis. Leurs positions et leurs largeurs dépendent des paramètres structuraux du système. L'augmentant du nombre de barrière dans les structures ordonnées donne un spectre de transmission représentant

une structure de minibande dû à l'existence des $(N-1)$ états permis dans les $(N-1)$ puits correspondants aux états étendus de Bloch.

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

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

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

Dans l'effet de la variation de la hauteur de barrière sur les systèmes quasipériodiques, on a remarqué que la diminution de la fraction molaire de l'aluminium mène à l'augmentation des états singulièrement localisés, Ce qui conduit à une naissance des états singulièrement étendus. Par contre, l'augmentation de la fraction molaire donne des états singulièrement étendus.

Enfin, Nous avons étudié l'effet de l'application d'un champ électrique sur les structures quasipériodiques de Fibonacci qui provoque le rétrécissement des subminibandes et la translation des états vers les basses énergies. Ceci est du à l'effet Stark qui représente le confinement des états électroniques.

En perspectives, on compte introduire l'effet de la température et les interactions électron-électron, électron-photon,...etc. dans l'équation de Schrödinger.

