



الجمهورية الجزائرية الديمقراطية الشعبية
République Algérienne Démocratique et Populaire
وزارة التعليم العالي والبحث العلمي
Ministère de L'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique
جامعة عبد الحميد بن باديس - مستغانم
Université Abdel Hamid Ben Badis – Mostaganem
فakية العلوم والتكنولوجيا
Faculté des Sciences et de la Technologie



N° d'ordre : M2/IP/2020

MEMOIRE DE FIN D'ETUDES DE MASTER ACADEMIQUE

Filière : Industries pétrochimiques
Spécialité : Génie pétrochimique

*Modélisation et Simulation de l'Éffet de la Fraction
Molaire sur les Propriétés de Transport des
Superréseaux $Al_xGa_{1-x}As/GaAs$*

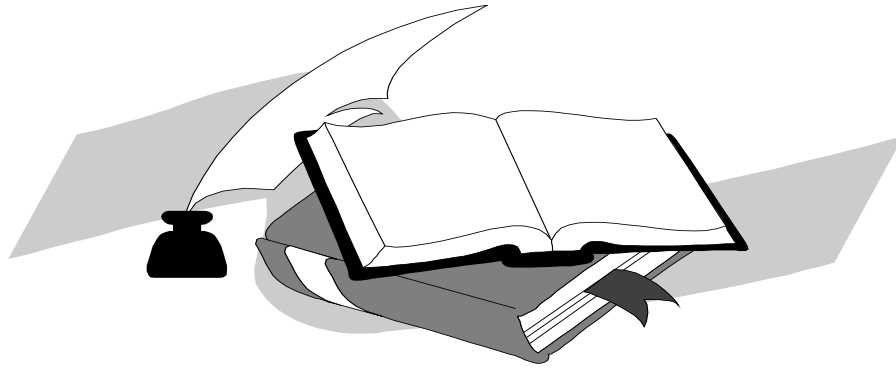
Présenté par :

1. Bechelaghem Soufiane
2. Aichour Abdelkrim

Soutenu le 24/06/ 2020 devant le jury composé de :

Président :	Zitouni Ali	Grade	MCA	U - Mostaganem
Examineur:	Sefir Yamina	Grade	MCB	U - Mostaganem
Encadreur :	Bendahma Fatima	Grade	MCA	U - Mostaganem

Année Universitaire : 2019 / 2020

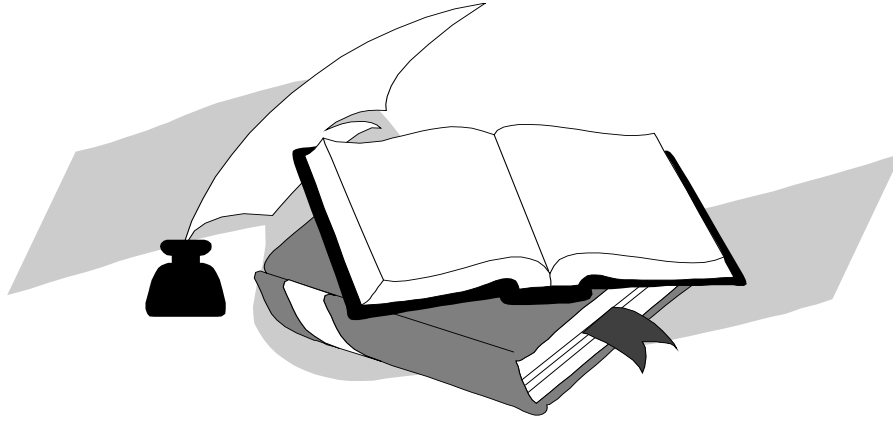


Remerciements

*Nous aimerons tout d'abord remercier notre directeur de mémoire, docteur **Bendahma Fatima** maître de Conférences à l'université de Mostaganem, pour nous avoir guidé dans notre travail de recherche. Son soutien, ses connaissances techniques et théoriques, à grande disponibilité ont fait le succès de ce travail.*

*Nous remercions docteur **Zitouni Ali**, maître de Conférences à l'université de Mostaganem, d'avoir assuré la présidence du jury. Nos vifs remerciements s'adressent au docteur **Sefir Yamina** maître de Conférences à l'université de Mostaganem, d'être l'examinatrice de ce travail.*

Enfin, nous souhaiterons aussi remercier tous les autres collègues que nous avons côtoyé pendant ces années.



Dédicaces

Louange à Allah le tout puissant, qui nous a donné la volonté, la force, et qui nous a éclairé le bon chemin, que nul ne peut se faire sans son désir.

Nous dédions ce travail :

A nos très chers parents qui ont tout sacrifié en notre faveur, c'est eux qui nous ont aidé dans notre vie. Nous les porterons toujours dans nos cœurs.

À nos Frères

À nos Familles

À nos Amis

Résumé

Notre travail consiste à étudier par modélisation et simulation l'effet de la variation de la fraction molaire (x) sur les propriétés de transport des Superréseaux $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$. L'étude de la transmission électronique permet de déterminer les différents états existants dans ces matériaux, de prévoir la possibilité ou non de la conduction électrique et de réaliser l'émission laser dans un superréseau à désordre structural. Les plus puissantes diodes laser sont utilisées en chirurgie précisément pour brûler les tissus, et dans le traitement des matériaux (Soudure, Perçage, Découpage, Gravure). Durant ce travail, les propriétés optoélectroniques du superréseau en question, ont été étudiées en résolvant l'équation de Schrödinger par utilisation du modèle de la matrice de transfert. Nous avons calculé numériquement le coefficient de transmission (T) dans un cadre d'approximation de la masse effective. Les résultats trouvés pour ces systèmes montrent l'existence d'une seule émission laser pour le dimer et trois pour le trimer, d'où les longueurs d'onde obtenues sont dans le moyen infrarouge (MIR).

Mots clés: Superréseau, (DHB), (THB), émission laser, moyen infrarouge (MIR).

Abstract

Our work consists in studying by modeling and simulation the effect of the variation of the molar fraction (x) on the transport properties of the $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As} / \text{GaAs}$ Superlattices. The study of electronic transmission makes it possible to determine the different states existing in these materials, to predict the possibility or not of electrical conduction and to carry out the laser emission in a super-network of structural disorder. The most powerful laser diodes are used in surgery precisely to burn tissue, and in the treatment of materials (Welding, Drilling, Cutting, Engraving). During this work, the optoelectronic properties of the superlattice in question were studied by solving the Schrödinger equation by using the model of the transfer matrix. We have calculated the transmission coefficient (T) numerically as part of an approximation of the effective mass. The results found for these systems show the existence of a single laser emission for the dimer and three for the trimer, hence the wavelengths obtained are in the medium infrared (MIR).

Keywords: Superlattice, (DHB), (THB), laser emission, medium infrared (MIR).

ملخص

يهدف عملنا من الدراسة عن طريق النمذجة والمحاكاة تأثير تغير الجزء المولي (x) على خصائص النقل لـ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As} / \text{GaAs}$ Superlattices. تتيج دراسة الإرسال الإلكتروني تحديد الحالات المختلفة الموجودة في هذه المواد ، والتنبيؤ باحتمالية التوصيل الكهربائي أو عدمه وتنفيذ انبعاث الليزر في شبكة فائقة من الاضطرابات الهيكلية. أقوى الثنائيات الليزرية تستخدم في الجراحة بدقة لحرق الأنسجة ، وفي معالجة المواد (اللحام ، الحفر ، القطع ، النقش). خلال هذا العمل ، تمت دراسة الخصائص الإلكترونية الضوئية للشبكة الفائقة المعنية عن طريق حل معادلة شرودنجر باستخدام نموذج مصفوفة التحويل. لقد حسينا معامل الإرسال (T) عدديًا كجزء من تقريب الكتلة الفعالة. أظهرت النتائج التي تم العثور عليها لهذه الأنظمة وجود انبعاث ليزر واحد للمُخفف وثلاثة لمزبل التشذيب ، وبالتالي فإن الأطوال الموجية التي تم الحصول عليها موجودة في الأشعة تحت الحمراء المتوسطة (MIR).

الكلمات المفتاحية: Superlattice ، (DHB) ، (THB) ، انبعاث الليزر ، الأشعة تحت الحمراء المتوسطة (MIR).

Sommaire

Introduction	1
Références	3
Chapitre 1: Semi-conducteurs et superréseaux.....	4
1.1 Semi-conducteurs.....	5
1.1.1 Définition	5
1.1.2 Types de semi-conducteurs	5
1.1.2.1 Semi-conducteurs intrinsèques	5
1.1.2.2 Semi-conducteurs extrinsèques	6
1.1.3 Semi-conducteurs GaAs et AlGaAs.....	6
1.1.3.1 Propriétés cristallines.....	7
1.2 Superréseaux.....	8
1.2.1 Définition.....	8
1.2.2 Technique de fabrication.....	9
1.2.2.1 Epitaxie par jet moléculaire.....	9
1.2.3.1 Superréseau à puits et à barrières rectangulaires	10
1.2.4 Propriétés de transport (L'effet laser).....	11
1.2.4.1 Diode laser.....	11
1.2.4.2 Applications des lasers à superréseaux.....	12
Références.....	13
Chapitre 2: Simulation et modélisation	14
2.1 Introduction.....	15
2.2. Modèles et méthodes théoriques.....	15
2.3. Calcul du coefficient de transmission	16
2.3.1 Fonctions d'Airy	16
Références	19
Chapitre 3: Résultats et discussions	20
3.1 Introduction	21

3.2 Superréseau désordonné	21
3.2.1 Paramétrisations	21
3.2.2 Dimer en hauteur de barrières (D.H.B)	21
3.2.3 Trimer en hauteur de barrières (T.H.B)	23
3.2.4 Effet des paramètres de superréseau sur la transmission électronique	24
3.2.4.1 Largeur de puits	24
3.2.4.2 Épaisseur de la barrière	24
3.2.4.3 Hauteur de barrière.....	27
3.3 Effet de la Fraction Molaire sur la longueur d'onde laser	28
Références	31
Conclusion générale	32

Introduction

Grâce aux travaux amorcés dans les années 70 par Tsu et Esaki, les physiciens sont arrivés à élaborer les premières couches minces semi-conductrices. Cette traversée scientifique a ouvert un vaste champ de recherche sur les hétérostructures semi-conductrices [1]. Les puits quantiques et les superréseaux furent les premières structures réalisées. Elles se distinguent du matériau massif par leur caractère bidimensionnel et la quantification partielle des excitations électroniques induite par le confinement. L'effet de ce dernier modifie totalement les propriétés physiques du semi-conducteur [2].

Les semi-conducteurs III-V à gap direct utilisés au cours de ce travail, sont devenus le pilier de l'optoélectronique moderne pour la réalisation de lasers [3] et de photodétecteurs à base de puits quantiques de plus performants [4]. Ce développement a été en partie rendu possible grâce à l'utilisation des techniques de la croissance épitaxiale, comme l'épitaxie par jets moléculaires (EJM) ou l'épitaxie en phase vapeur sur les organométalliques (EPVOM). Ces techniques ont permis la fabrication de très grandes variétés d'hétérostructures semi-conductrices à puits quantiques très performantes en termes de rendement quantiques [5].

L'avantage de ces systèmes est que leurs propriétés optiques puissent être modifiées en changeant leurs paramètres structuraux, typiquement la largeur et la composition. En plus, grâce à leur structure de bande transformée en mini-bandes par effet tunnel résonnant [6], les porteurs excités du système sont mieux protégés contre les relaxations par les phonons optiques considérés comme des éléments réducteurs de la transmission électronique [7]. Dans un système désordonné, les impuretés présentes à des positions aléatoires, rend difficile le déplacement des électrons, ce qui pose le problème de la conduction de l'électricité.

Dans ce contexte, notre travail consiste à étudier par modélisation et simulation l'effet de la variation de la fraction molaire sur les propriétés de transport des Superréseaux $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$. L'étude de la transmission électronique permet de déterminer les différents états existants dans ces matériaux et prévoir la possibilité

ou non de la conduction électrique. Pour cela, nous présentons brièvement dans le premier chapitre, un rappel sur les semi-conducteurs à base des systèmes étudiés, et des généralités sur les superréseaux. Le second chapitre présente les différentes méthodes de calcul pour déterminer le coefficient de transmission à l'aide des fonctions d'Airy. Le troisième chapitre est consacré à l'étude de la nature des états électroniques dans les superréseaux à désordre corrélé et l'effet de plusieurs paramètres tels que la largeur du puits, l'épaisseur et la hauteur de la barrière (la fraction molaire X) sur la transmission électronique.

Enfin, les résultats de notre étude sont obtenus à l'aide du logiciel «**SUPERRESEAUX**» capable de grouper tous nos programmes de calcul et faciliter la tâche des chercheurs dans ce domaine.

Références

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

Chapitre 1

Semi-conducteurs et superréseaux

1.1 Semi-conducteurs

1.1.1 Définition

Les semi-conducteurs (SC) sont des matériaux présentant une conductivité électrique intermédiaire entre les métaux et les isolants, elle est aussi directement proportionnelle à la température. Lorsque $T=0^{\circ}\text{K}$ la bande de valence est saturée, toutes les places sont occupées alors que la bande de conduction qui offre des places vides et le semi-conducteur devient un isolant. Tandis que la température s'élève, l'agitation thermique désordonne la configuration du SC et provoque des porteurs de charges libres capables de se déplacer dans le cristal et autorisant la circulation d'un courant électrique, le SC devient alors un conducteur.

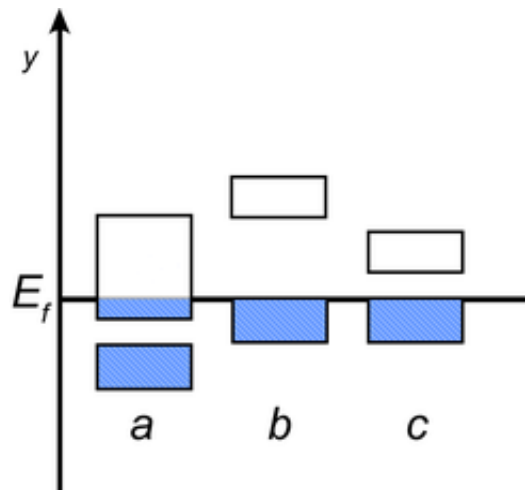


Figure 1.1: a) Métal ; b) Isolant ; c) Semi-conducteur ;
y) Énergie ; E_f) Niveau de Fermi.

1.1.2 Types de semi-conducteurs

1.1.2.1 Semi-conducteurs intrinsèques

Un semi-conducteur est dit intrinsèque lorsqu'il est pur, bien cristallisé (périodique). Il est possible de le produire avec un haut degré de pureté (moins d'un atome étranger pour 10^{13} atomes de semi-conducteurs).

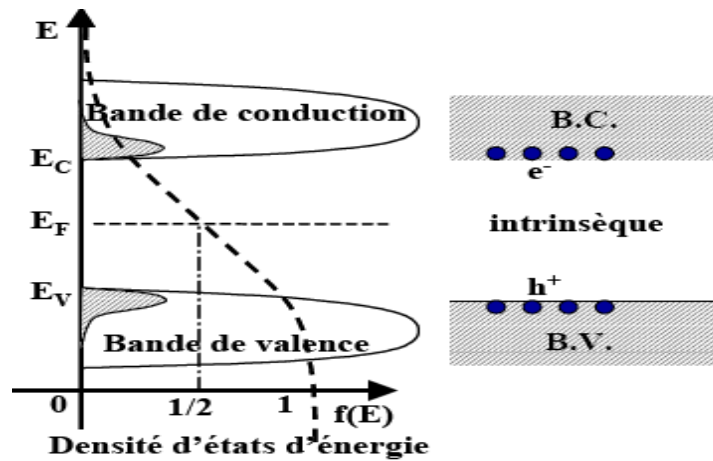


Figure 1.2: Schéma d'un semi-conducteur intrinsèque.

1.1.2.2 Semi-conducteurs extrinsèques

On peut modifier de façon considérable la concentration de porteurs de charge d'un semi-conducteur intrinsèque en lui ajoutant de faibles quantités d'atomes astucieusement choisis appelés impuretés dopantes ou tout simplement dopants. On obtient alors un semi-conducteur extrinsèque ou dopé.

1.1.3 Semi-conducteurs GaAs et AlGaAs.

Les éléments de la colonne III et ceux de la colonne V permettent de faire des composés ternaires comme le $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ qui peut être considéré comme un alliage de GaAs et AlAs. La variation de la concentration «x» change radicalement les propriétés du matériau, comme la valeur du gap, la masse effective et son paramètre de maille.

Tableau 1.1: Les principaux éléments des semi-conducteurs

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

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

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

1.1.3.1 Propriétés cristallines

L'arséniure de gallium possède une structure cristalline de type blende. Si l'on considère que les atomes de gallium suivent une structure de type cubique face centrée, les atomes d'arsenic occupent quant à eux 4 des 8 sites tétraédriques de cette maille (et vice-versa) (figure 1.3).

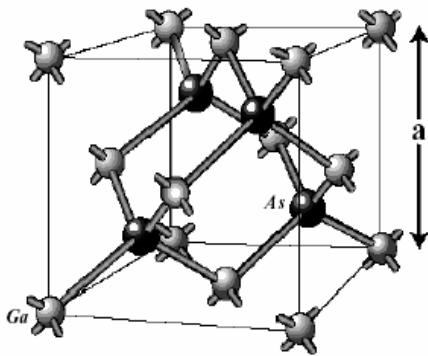


Figure 1.3: Structure du GaAs.

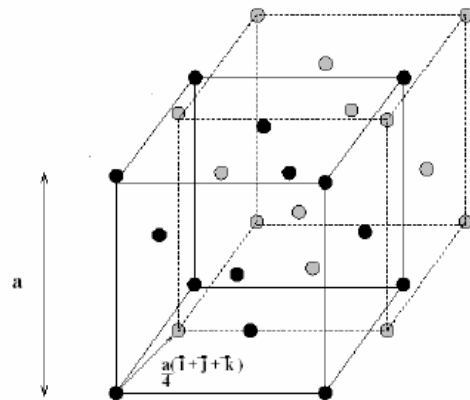


Figure 1.4: Structure d'AlGaAs.

La structure de l'alliage $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ est formée de deux réseaux cubiques à faces centrées (CFC) décalés l'un par rapport à l'autre d'un quart de diagonale du cube (figure 1.4), les atomes d'Arsenic occupant un des réseaux CFC les atomes d'Aluminium et de Gallium occupant l'autre réseau. Le paramètre de maille de l'alliage $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ est obtenu par interpolation linéaire en utilisant les paramètres de maille de GaAs et de AlAs. Il est donné par la loi de Vegard [2]:

$$a_{\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}} = xa_{\text{AlAs}} + (1-x)a_{\text{GaAs}} \quad (1.1)$$

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

Les propriétés du GaAs et $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ sont résumées dans le tableau 1.2.

Tableau 1.2: Le gap et la masse effective du GaAs et $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ à 300 °K

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

Pour l'alliage $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, la nature de la transition énergétique change selon le taux d'aluminium x , où $0 < x < 1$ [3, 4].

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

1.2 Superréseaux

Depuis les premiers travaux en 1970 de L. Esaki et R. Tsu [5] sur les couches minces semi-conductrices, grâce à l'évolution de la nanotechnologie, la recherche fondamentale et appliquée sur les hétérostructures semi-conductrices a bien avancé.

Les puits quantiques sont les premières structures réalisées. En 1978, pour la première fois la technique de dopage sélectif a été appliquée dans les hétérojonctions GaAs/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ par Dingle et Störmer [6]. Les multipuits quantiques et l'hétérojonction à dopage modulé font l'objet de nombreuses études dans la physique mésoscopique.

1.2.1 Définition

Les superréseaux sont des empilements de couches ultrafines de semi-conducteurs alternées suivant l'axe de croissance. Ils peuvent être assimilés à un système périodique. La période du superréseau est égale à la somme de la largeur de puits et de l'épaisseur de la barrière [7].

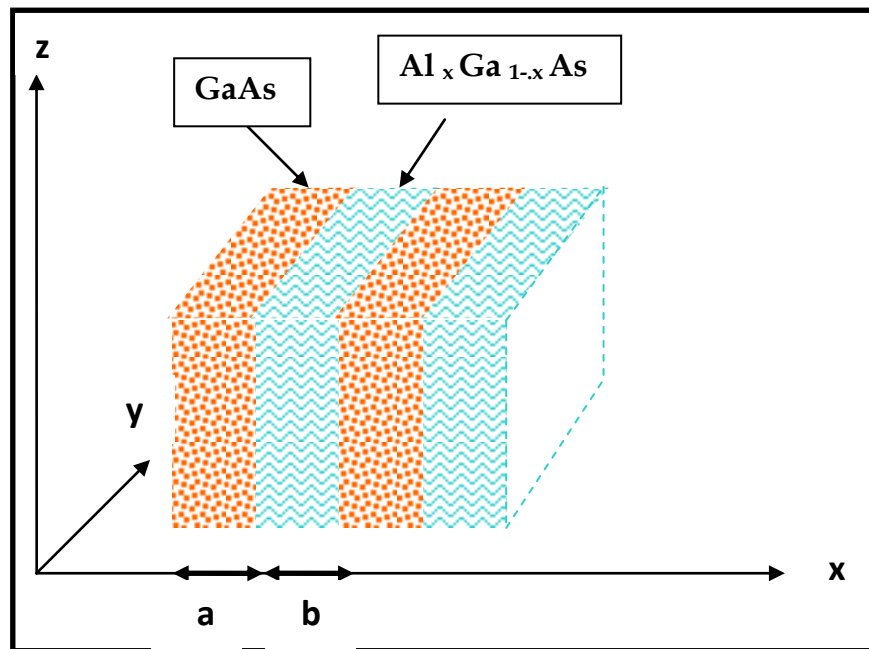


Figure 1.5 : Constitution d'un superréseau de période $a+b$, de GaAs / $\text{Al}_x \text{Ga}_{1-x} \text{As}$

1.2.2 Technique de fabrication

La diversité des applications de superréseaux dans les systèmes optiques et électroniques tels que les diodes laser et les photo-détecteurs ont permis le développement de plusieurs techniques de fabrication de tels matériaux. On cite principalement la plus utilisée.

1.2.2.1 Epitaxie par jet moléculaire

Cette technique dite d'«épitaxie par jets moléculaires » en anglais «molecular beam epitaxy» M.B.E. L'épitaxie est une étape technologique consistant à faire croître du cristal sur du cristal [8]. Etymologiquement, "épi" signifie "sur" et "taxis", "arrangement". La technique va donc consister à utiliser le substrat comme germe cristallin de croissance et à faire croître la couche par un apport d'éléments constituant la nouvelle couche (figure 1.6).

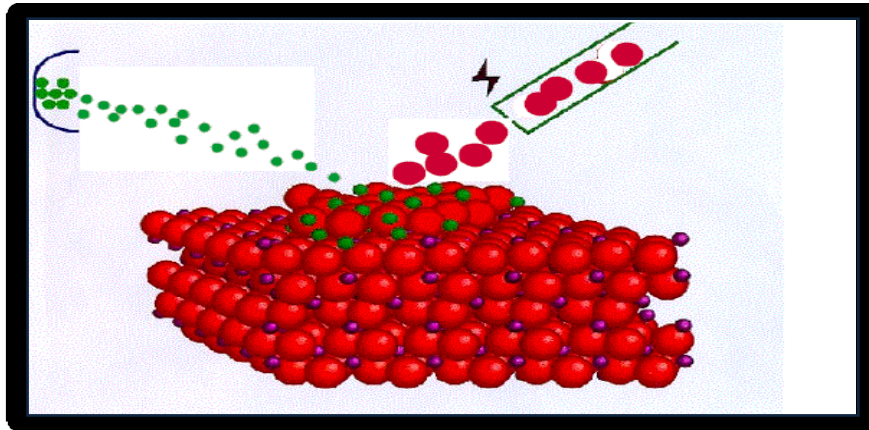


Figure 1.6: Principe d'épitaxie par jet moléculaire

Cette technique consiste à envoyer des molécules à la surface d'un substrat dans un vide très poussé afin d'éviter tout choc ou contamination sur le parcours. Les multicouches peuvent être réalisées avec les épaisseurs de l'ordre de la monocouche atomique (2.8 à 2.9Å) avec des vitesses de croissance extrêmement faibles (inférieur à 100Å/min) et des températures de croissance allant de 400°C Jusqu'à 1000°C [9]. (figure1.7).

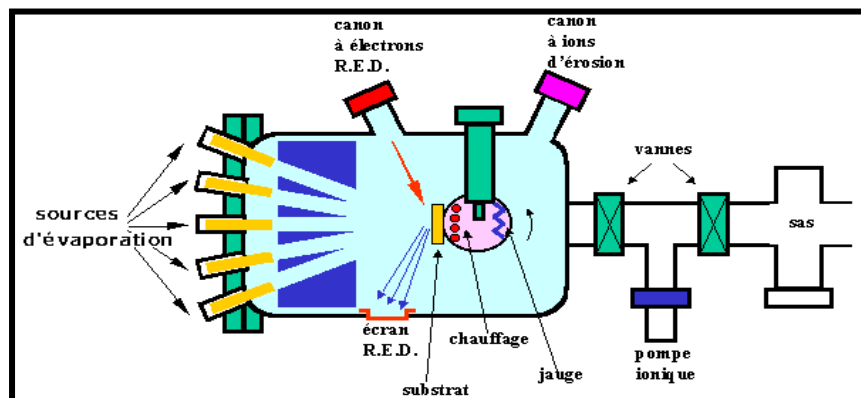


Figure 1.7: Bâti d'épitaxie par jet moléculaire, EJM.

1.2.3.1 Superréseau à puits et à barrières rectangulaires

Cette structure constitue la superposition de deux matériaux possédant des mailles presque idéales et de structures de bandes différentes telles que GaAs/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$. Ce type de superréseau constitue un élément de base dans la fabrication des diodes laser [10] et photodétecteurs [11].

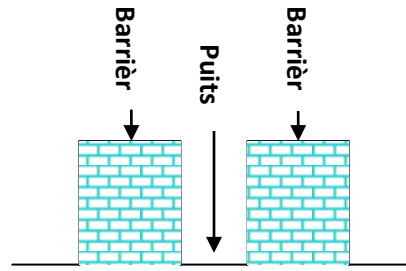


Figure 1.8: SR à puits et à barrières rectangulaires.

1.2.4 Propriétés de transport (L'effet laser)

Les superréseaux présentent des propriétés qui ont fait l'intérêt de plusieurs applications dans le domaine optoélectronique. Les électrons et trous injectés sont confinés dans la zone active du laser de p-GaAs. Les deux couches d'AlGaAs de part et d'autre de la zone active s'appellent les couches de confinement.

1.2.4.1 Diode laser

Une diode laser est un composant opto-électronique à base de matériaux semi-conducteurs. Elle est utilisée pour réaliser l'effet laser, conçue pour la première fois en 1962 [12, 13], et devenue un dispositif très important avec des différents types en 1994 [14, 15]. La figure 1.9 représente la structure d'une diode laser à base GaAs. Les dimensions de la couche active de type p sont de 200 μm de longueur, 2 à 10 μm de largeur et 0.1 μm d'épaisseur, est prise en sandwich entre deux couches de $\text{Ga}_{0,7}\text{Al}_{0,3}\text{As}$, dopées respectivement n et p. Ce sandwich confine dans la région active, à la fois les électrons et les photons.

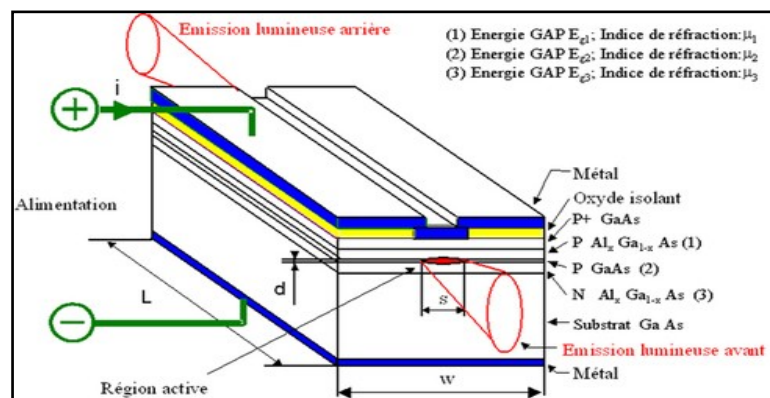


Figure 1.9: Structure d'une diode Laser au GaAs.

1.2.4.2 Applications des lasers à superréseaux

Les diodes laser à superréseaux sont largement utilisés dans les télécommunications car ils sont facilement modulés et deviennent des sources lumineuses couplées pour des fibres optiques de communication. Des diodes laser infrarouge et rouge sont courantes dans les lecteurs de CD, DVD, HD-DVD et disques Blu-ray [16]. Les plus puissantes diodes laser sont utilisées en chirurgie précisément pour brûler les tissus, et dans le traitement des matériaux (Soudure, Perçage, Découpage, Gravure) [17].

Références

- [1] S.M.SZE, Physics of Semiconductor Devices, John Wiley & Sons, (1981).
- [2] S.Tiwari, D.J.Frank, Appl.phys.Lett, **60**(5), (1992).
- [3] S.Adachi, J.Appl.phys **58**(3),(1985).
- [4] Thèse Rachid KHLIL, Université de Reims Champagne-Ardenne, P45-47, (2005).
- [5] H.Mathieu, Physique des semiconducteurs et des composants électroniques, edt Masson (1987).
- [6] D.P. Nguyen, Confinements non usuels dans les boites quantiques semi-conductrices.Thèse de doctorat. Année 2005.
- [7] L. Esaki, R. Tsu, IBM J. Res. Dev. **14** (1970) 61.
- [8] F.Rinaldi, Annual Report, Optoelectronics Department, University of Ulm (2002).
- [9] D.V.Morgan and K.Boar, "An introduction to semiconductor technology", 2nd edition, John Wiley & sons, (1990).
- [10] R.Q.Yang and J.M.Xu, App.Phys.Lett. **59**, 181 (1991).
- [11] A. Fiore, E. Rosencher, P. Bois, J. Nagle and N. Laurent App.Phys.Lett. **64**, 478 (1994).
- [12] Dupuis R.D, IEEE J.Quantum Electron., QE-**23**, 651-657, (1987).
- [13] Redike R.H., IEEE J.Quantum Electron., QE-**23**,692-695,(1987).
- [14] Anderson S.G., Laser Focus World, **30**, 62-76, (1994).
- [15] N.L.Thomas, R.Houdré, M.V.Kotlyar, D.O'Brien, and T.F.Krauss J.Opt.Soc.Am.B **24**, No.12 (2007).
- [16] Robert V. Steele, « Diode-laser market grows at a slower rate », dans Laser Focus World, vol. 41, n° 2, 2005.
- [17] Kathy Kincade, Stephen Anderson, « Laser Marketplace 2005: Consumer applications boost laser sales 10% », dans Laser Focus World, vol. 41, n° 1, 2005.

Chapitre 2
Simulation et modélisation

2.1 Introduction

La naissance de la simulation numérique remonte aux débuts des années 1950 où les premiers ordinateurs purent être utilisés pour un usage civil.

Les simulations numériques jouent un rôle de plus en plus important dans différents domaines scientifiques en particulier la physique. Elles représentent un outil indispensable qui permet de comprendre les expériences et expliciter les résultats théoriques et repousser les limites de nos connaissances.

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

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

2.2 Modèles et méthodes théoriques

L'équation d'onde de Schrödinger d'un électron d'énergie incidente E et une masse effective $m^*(z)$ traversant un profil de potentiel $V(z)$ dans un état stationnaire, s'écrit sous la forme suivante [4-6]:

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

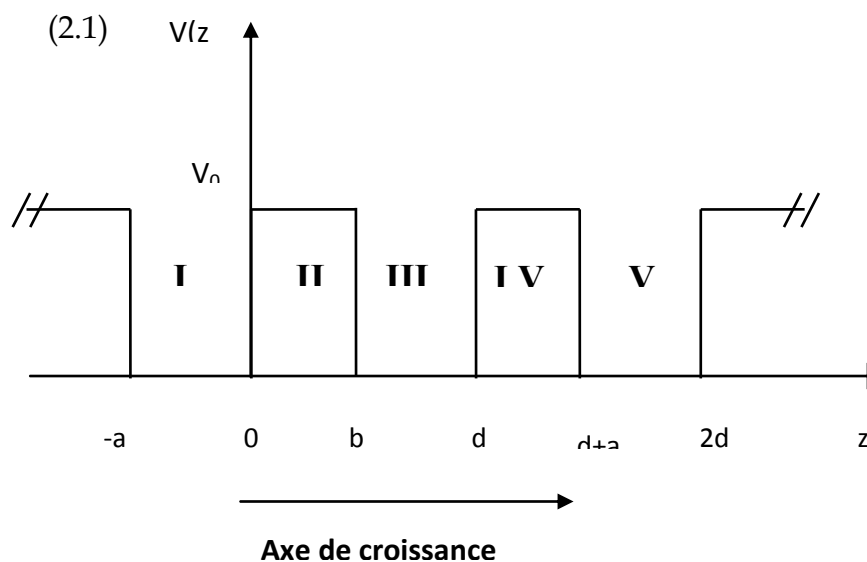


Figure 2.1: Profil de potentiel d'un SR à puits et barrières rectangulaires.

Le profil $V(z)$ est considéré comme l'énergie du minimum de la bande de conduction par rapport à une origine supposée prise au niveau de la BC du matériau jouant le rôle du puits (figure 2.1).

2.3 Calcul du coefficient de transmission

Pour calculer le coefficient de transmission T d'un superréseau double barrière rectangulaire soumis à une tension extérieure V_a (figure 2.2), l'équation de Schrödinger est résolue d'une façon exacte en utilisant les fonctions d'Airy.

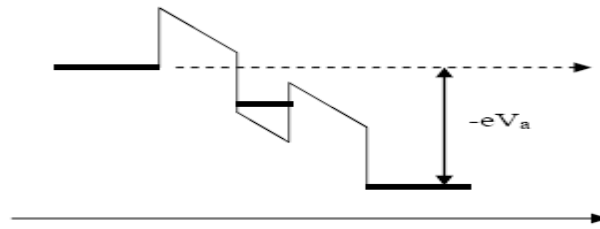


Figure 2.2: Structure soumise à une tension extérieure V_a .

2.3.1 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:

$$\frac{1}{m^*(z)} \frac{\partial}{\partial z^2} \cdot \psi(z) + \frac{2}{\hbar^2} [E - V(z)] \cdot \psi(z) = 0 \quad (2.2)$$

Les solutions de l'équation (2.2) dans chaque région du potentiel sont données par les relations suivantes:

Région (I): $V(z) = 0$ et $m^*(z) = m_a$ (2.3)

$$\psi_I(z) = 1 e^{ikz} + R e^{-ikz} \quad (2.4)$$

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

Région (II): $V(z) = V_0 - \frac{eV_a}{L} z$ et $m^*(z) = m_b$ (2.5)

Soit le changement de variable,

$$\rho(z) = \left(\frac{2em_b V_a}{L\hbar^2} \right)^{1/3} \left(\frac{V_0 - E}{eV_a/L} - z \right) = Z(\eta - z) \quad (2.6)$$

L'équation (2.2) devient,

$$\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} \psi_2(\rho) - \rho \psi_2(\rho) = 0 \quad (2.7)$$

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

$$\psi_2(\rho) = C_2^+ A_i(\rho) + C_2^- B_i(\rho) \quad (2.8)$$

Où A_i et B_i représentent les fonctions d'Airy.

Région (III):

$$V(z) = -\frac{eV_a}{L} (z+b) \quad \text{et} \quad m^*(z) = m_a \quad (2.9)$$

Région (IV)

$$V(z) = 0 \quad \text{et} \quad m^*(z) = m_a \quad (2.10)$$

$$\psi_5(z) = 0 e^{-ikz} + \tau e^{ikz} \quad (2.11)$$

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

La première amplitude dans la relation (2.3) 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:

$$\begin{pmatrix} 1 \\ R \end{pmatrix} = -\frac{m_a}{2ik} \begin{pmatrix} -\frac{ik}{m_a} & -1 \\ -\frac{ik}{m_a} & 1 \end{pmatrix} \mathbf{S}(0, L) \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ \frac{ik'}{m_a} & -\frac{ik'}{m_a} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tau \\ 0 \end{pmatrix} \quad (2.12)$$

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

$$\begin{pmatrix} 1 \\ R \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} \tau \\ 0 \end{pmatrix} \quad (2.13)$$

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 :

$$T = \frac{k'}{k} \tau^* \tau \quad \text{avec} \quad \tau = \frac{1}{M_{11}} \quad (2.14)$$

Soient A, B, C et D les éléments de la matrice $S(O, l)$, des relations (3.34) et (3.37),

$$M_{11} = \frac{1}{2} \left[\left(A + \frac{k'}{k} D \right) + i \left(\frac{k' B}{m_a} - \frac{C m_a}{k} \right) \right] \quad (2.15)$$

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

$$\begin{pmatrix} 1 \\ R \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} \tau \\ 0 \end{pmatrix} \quad (2.16)$$

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

$$T = \frac{\left(4 \frac{k'}{k} \right)}{\left(S_{11} + \frac{k'}{k} S_{22} \right)^2 + \left(\frac{k'}{m_a} S_{12} - \frac{m_a}{k} S_{21} \right)^2} \quad (2.17)$$

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

Références

- [1] Elateche Zahia, «Etude de l'interaction électron-matière par la méthode Monte Carlo Application sur Silicium ». Mémoire de magister, Université de Batna (2005).
- [2] L. N. Pandey, D. Sahu, and T. F. George, *App. Phys. Lett.* 56, 277 (1990).
- [3] A. Brezini and N. Zekri, *Solid. Stat. Comm.* 86, 613 (1993).
- [4] H.S.Cho and P.R.Prucnal, *Phys.Rev.B* 36, 3237 (1987).
- [5] D.J.Ben Daniel and C.B.Duck, *Phys.Rev.* 152, 683 (1966).
- [6] A.Nogaret, L.A.Cury, D.K.Maude, J.C.Portal, and D.L.Sivco, *Semi.Sci.Tech.* 8,1819 (1993).

Chapitre 3

Résultats et discussions

3.1 Introduction

Ce chapitre traite les systèmes à potentiels désordonnés avec un désordre corrélé en dimer et trimer. Notre travail consiste à étudier la nature des états électroniques dans ces systèmes par la détermination de leurs coefficients de transmission.

3.2 Superréseau désordonné

3.2.1 Paramétrisations

Notre système se compose de 200 barrières rectangulaires périodiques de période $P = a + b$. a et b représentent respectivement la largeur du puits et l'épaisseur de barrière. Dans ce modèle désordonné de S.R nous considérons que la hauteur des barrières prend au hasard deux valeurs d'énergie, à savoir V_1 et V_2 aléatoirement réparties dans la structure du superréseau. V_1 et V_2 sont proportionnels aux deux valeurs de la concentration d'Al dans les barrières du superréseau $\text{GaAs}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, avec $x \leq 0.45$.

Les potentiels choisis sont $V_1 = 0.22$ eV et $V_2 = 0.33$ eV. V_1 et V_2 désignent respectivement la hauteur de la barrière du système et le potentiel de la cellule élémentaire du Dimer ou Trimer. Les masses effectives correspondantes dans chaque région du potentiel sont : $m_a = 0.067m_0$, $m_b = 0.091m_0$ et $m_d = 0.103m_0$. m_b et m_d correspondent respectivement aux masses effectives dans les barrières de hauteur V_1 et V_2 , m_a est la masse effective dans le puits et m_0 désigne la masse d'électron libre. Le coefficient de transmission est calculé pour une moyenne de 500 réalisations et une concentration du Dimer/Trimer $C = 0.2$. Cette concentration est définie comme le rapport entre le nombre de barrières de hauteur V_2 et le nombre total de barrières du superréseau.

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

Ce modèle consiste à introduire un désordre par doublet de barrières de hauteur V_2 différente de V_1 , distribuées aléatoirement dans la structure du superréseau [1-3].

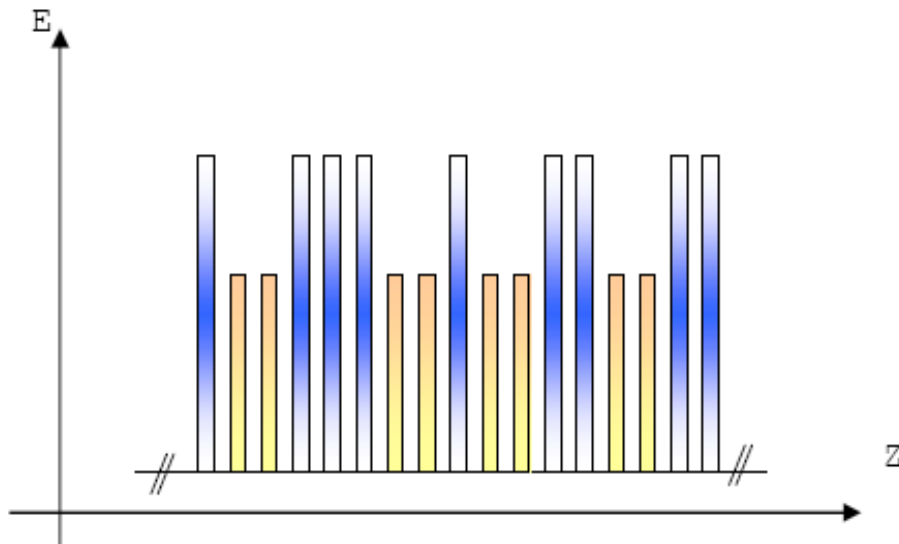


Figure 3.1: Superréseau en dimer hauteur de barrière.

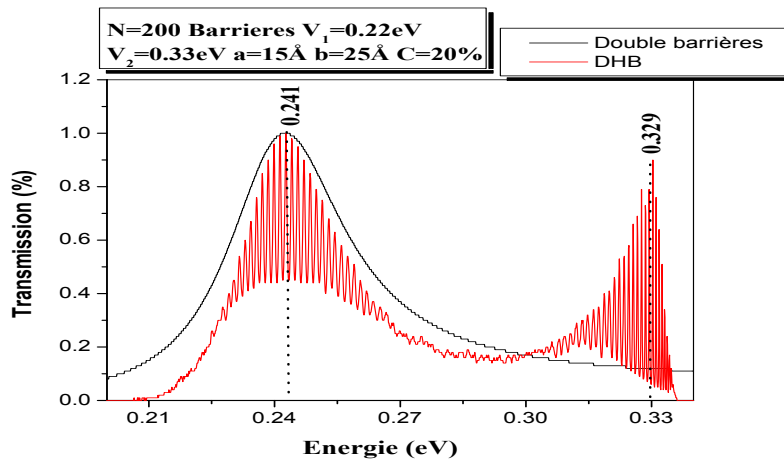


Figure 3.2: Coefficient de transmission d'une structure désordonnée en DHB en fonction de l'énergie.

D'après la figure 3.2, l'évolution du coefficient de transmission en fonction de l'énergie de l'électron, montre l'existence d'une seule minibande à l'intérieur du puits s'étendant de 0.209 eV à 0.335 eV, confiné par le potentiel du dimer. La minibande est subdivisée en trois régions désignées par deux pics localisés aux deux résonances $E_{r1}=241\text{meV}$ et $E_{r2}=329\text{meV}$, séparées par une large vallée centrée en $E_v=295\text{meV}$. On constate aussi trois types d'états propres à l'intérieur de la minibande :

- Des états étendus situés au voisinage des résonances et possédant une grande valeur de transmission.

- Des états fortement localisés proches des bords de bande et ayant une faible transmission.
 - Un état délocalisé (faiblement localisé) se trouvant au voisinage de la vallée.
- Ce résultat est en parfait accord avec ceux trouvés de la littérature [4-6].

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

La figure 3.3 montre une structure présentant un désordre corrélé en trimer hauteur de barrière.

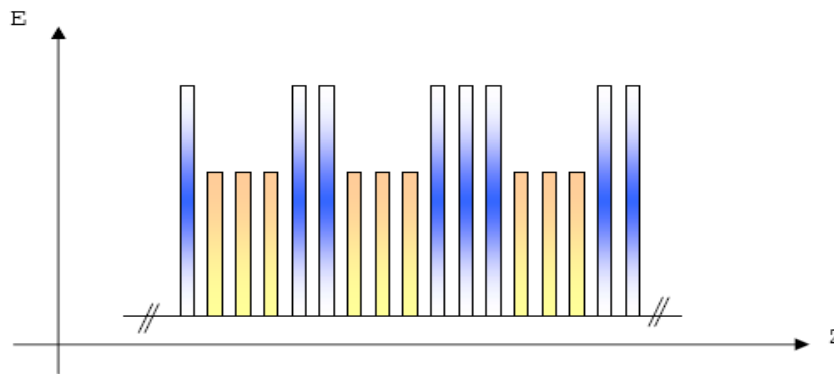


Figure 3.3: Schéma d'un superréseau en trimer hauteur de barrière

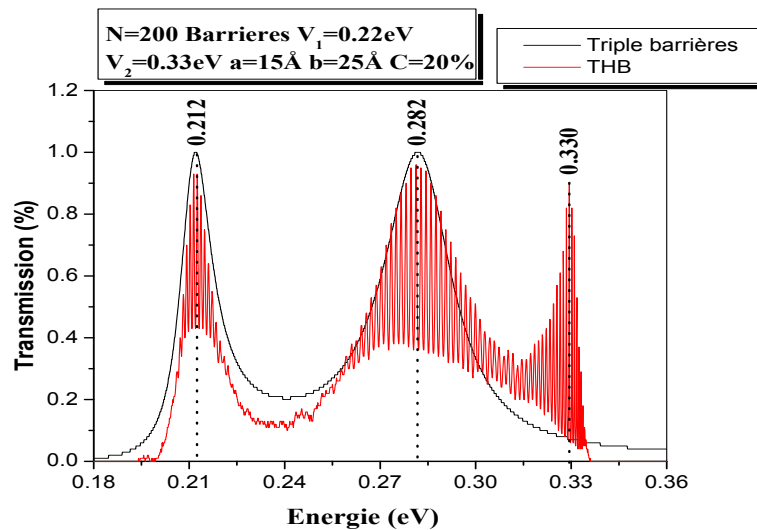


Figure 3.4: Coefficient de transmission d'une structure désordonnée en THB en fonction de l'énergie.

La variation du coefficient de transmission en fonction de l'énergie pour une structure désordonnée en THB (figure 3.4), montre l'existence d'une minibande s'étendant

de 197 meV jusqu'à 336 meV, elle est subdivisée en cinq régions : trois pics situés aux énergies résonnantes $E_{r1}=212\text{meV}$, $E_{r2}=282\text{meV}$ et $E_{r3}=330\text{meV}$, séparés par deux vallées $E_{V1}=233\text{meV}$ et $E_{V2}=238\text{meV}$. Les deux premiers pics sont dûs à la cellule trimer, l'autre à la commutation des deux potentiels (V_1 et V_2) [7].

3.2.4 Effet des paramètres de superréseau sur la transmission électronique

3.2.4.1 Largeur de puits

a) Cas du dimer

La figure 3.5 montre une structure de minibande permise avec deux pics de résonance pour chaque valeur de a . Une translation vers les basses énergies est observée pour ces structures à large puits ($a=20, 30$ et 40 \AA). La largeur des minibandes diminue tout en augmentant la largeur a . Ce phénomène est dû au confinement des états énergétiques à l'intérieur des puits. Pour $a=50\text{\AA}$, on remarque l'apparition d'un troisième pic correspondant à $E_r=0.325 \text{ eV}$. Ceci peut être expliqué par l'existence des états d'énergie situés au dessus de la bande de conduction.

b) Cas du trimer

Le même phénomène est observé dans le cas du trimer que celui du dimer, mais avec trois pics de résonance (voir figure 3.5).

3.2.4.2 Épaisseur de la barrière

a) Cas du dimer

La courbe représentative de la transmission de l'électron en fonction de son énergie schématisée par la figure 3.6, présente toujours une structure de minibande avec deux pics de résonance comme la précédente, sauf que celle-ci montre un rétrécissement des minibandes vers le centre avec l'augmentation de b . La différence relative entre les deux pics devient de plus en plus faible jusqu'à son annulation pour $b=40 \text{ \AA}$. Pour une épaisseur de barrières atteignant la valeur de 50 \AA , l'énergie électronique a aucun effet sur la transmission qui reste toujours nulle ou la portée de l'onde diminue tout en augmentant l'épaisseur de la barrière. Ce phénomène s'explique par le fait que b est supérieur à la longueur d'onde λ de l'électron. Dans cette situation les puits sont découplés et les états deviennent liés dans les puits. La barrière se présente à la particule comme une marche de potentiel infinie.

b) Cas du trimer

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

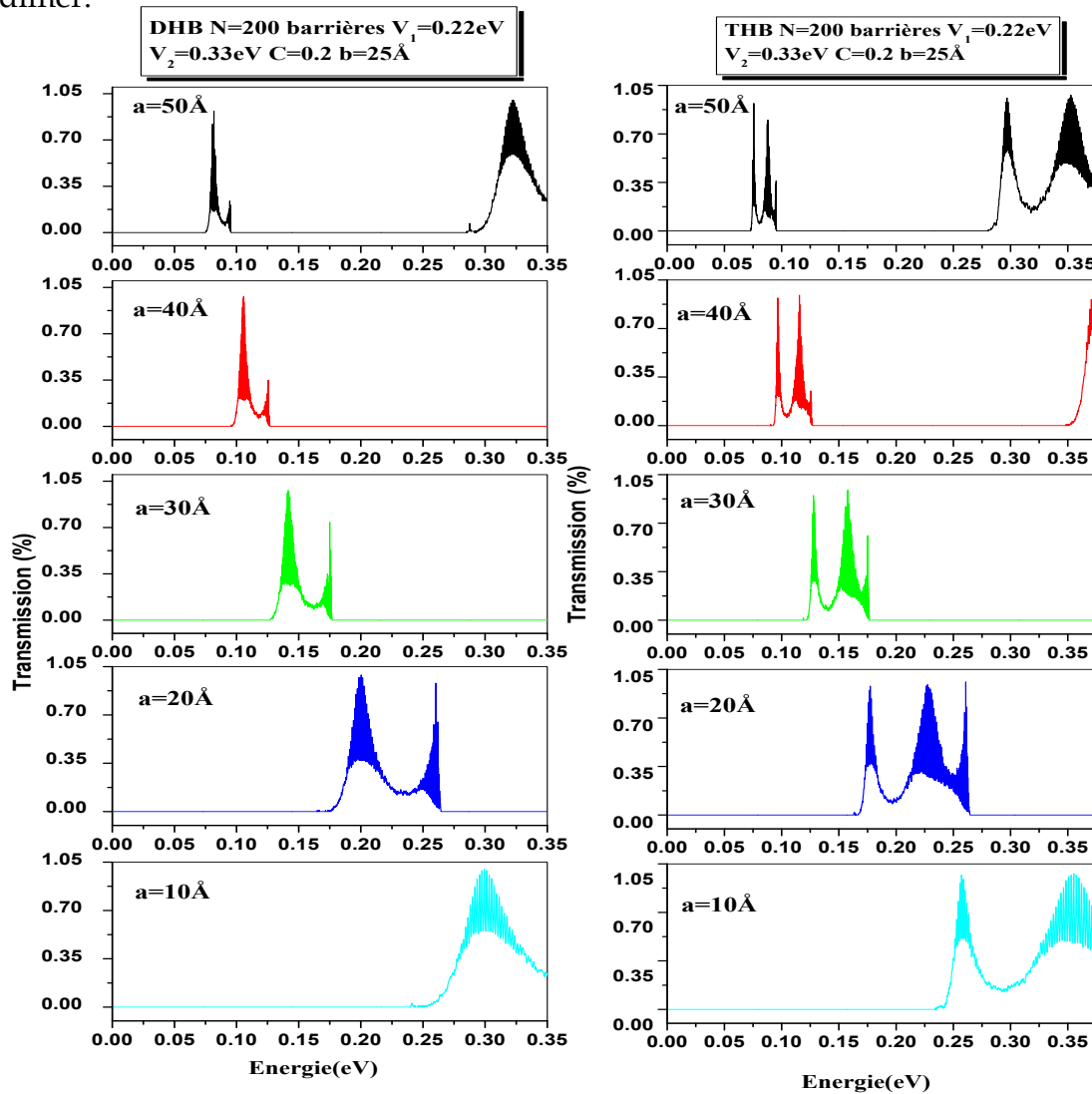


Figure 3.5: Coefficient de transmission en fonction de l'énergie des deux structures en DHB et THB.

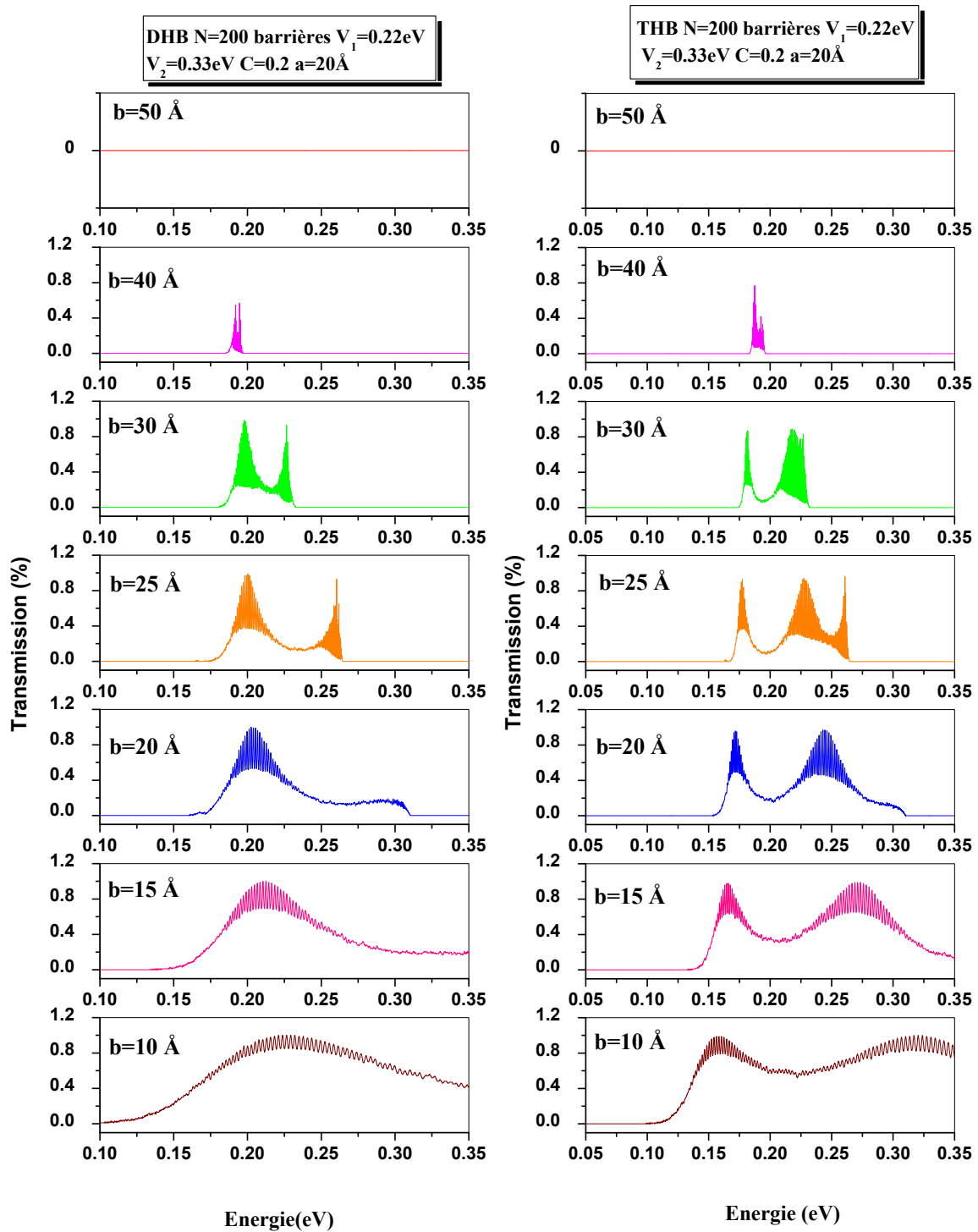


Figure 3.6 : Transmission électronique du DHB et THB en fonction de l'énergie pour différentes épaisseurs de barrière.

3.2.4.3 Hauteur de barrière

Le graphe représenté sur la figure 3.7, montre la variation du coefficient de transmission (T) en fonction de l'énergie (E) de l'électron pour un potentiel constant du dimer $V_2=0.33$ eV et à différentes valeurs du potentiel de la barrière V_1 .

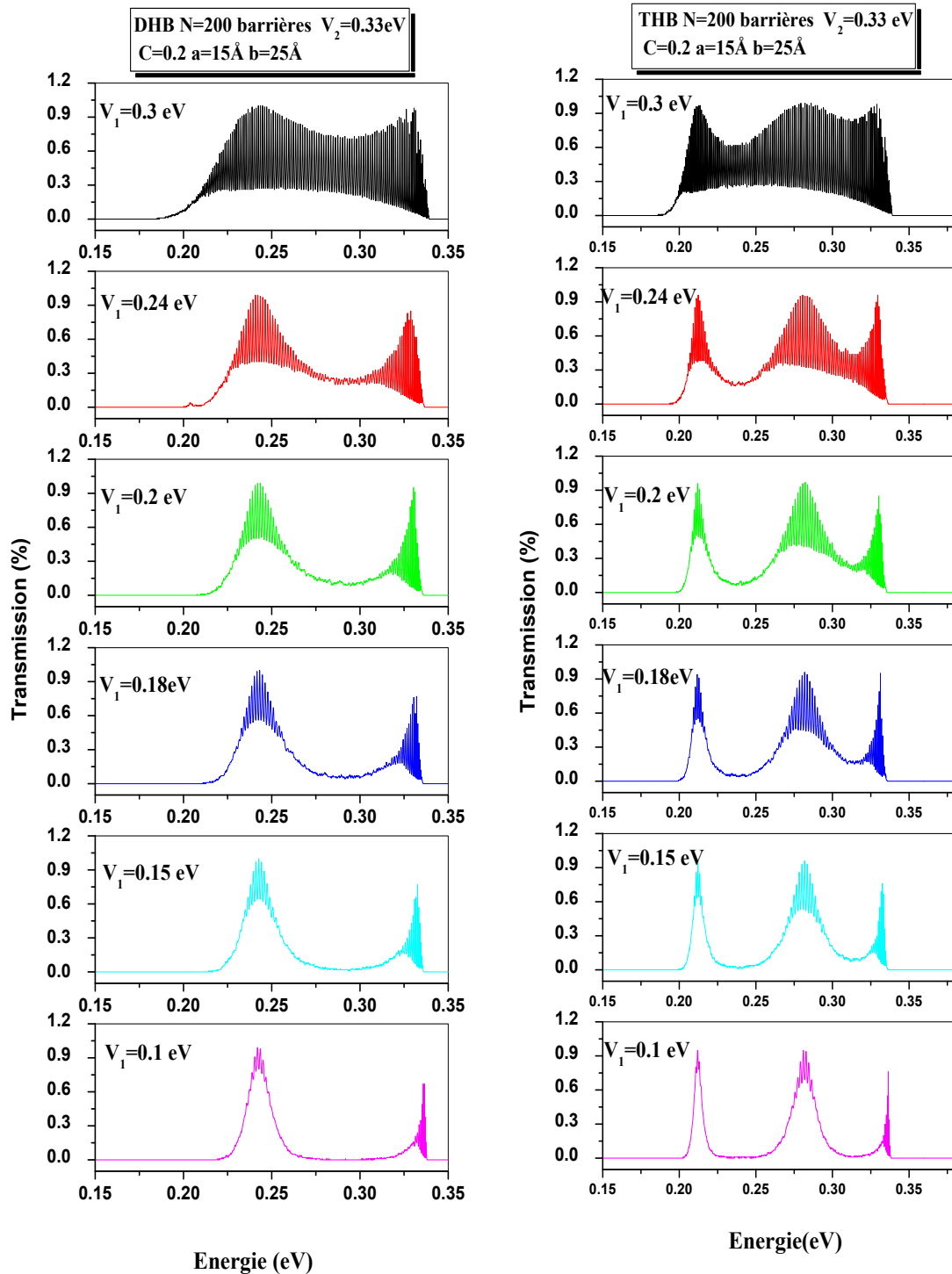


Figure 3.7: Coefficient de transmission des deux profils en DHB et THB

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

b) Cas du trimer

Les mêmes phénomènes sont observés dans le cas du trimer, c.-à-d. l'effet du désordre va disparaître lorsque la différence V_2-V_1 devient nulle.

3.3 Effet de la Fraction Molaire sur la longueur d'onde laser

Le choix d'étudier un SR type GaAs/ $Al_xGa_{1-x}As$ est justifié dans la mesure où la littérature procure tous les paramètres expérimentaux utilisés dans notre calcul numérique. En particulier, l'expression du potentiel de ce SR en fonction de la fraction molaire x d'Aluminium introduite lors de l'épitaxie, utilisant la règle des 60% des queues de bande de conduction (BC) donnée par la relation :

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

L'intervalle de x dans l'équation (3.1) délimite la région du gap direct du matériau $Al_xGa_{1-x}As$.

Dans ce cas, pour développer des sources laser dans le domaine infrarouge, l'approche la plus courante a été d'étendre le fonctionnement des diodes laser à puits quantiques vers les plus grandes longueurs d'onde. Pour cela, notre travail consiste d'abord à faire varier la valeur de la concentration d'Aluminium X_1 entre 0.1 et 0.3 relative à la hauteur de barrière V_1 tout en fixant X_2 à 0.33 pour V_2 du DHB ou THB.

Les valeurs calculées de la longueur d'onde de l'électron à partir de l'équation (3.2) en fonction de X_1 sont schématisées par les figures 3.8.a et 3.8.b.

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

$$\lambda = \frac{hc}{\Delta E} \quad (3.2)$$

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

Les figures 3.8 (a- b) nous indiquent une augmentation des longueurs d'onde tout en restant dans le moyen infrarouge. Cette augmentation est le résultat d'une diminution de la différence d'énergie entre deux pics de résonance successifs. Ce phénomène est dû à la corrélation du désordre en DHB ou en THB. En effet, l'énergie de transition électronique séparant deux niveaux résonants se déplace vers les plus basses valeurs. Ce déplacement spectral responsable de la variation de la longueur d'onde laser est dû à la variation de la bande interdite du matériau $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ en fonction de la concentration X_1 .

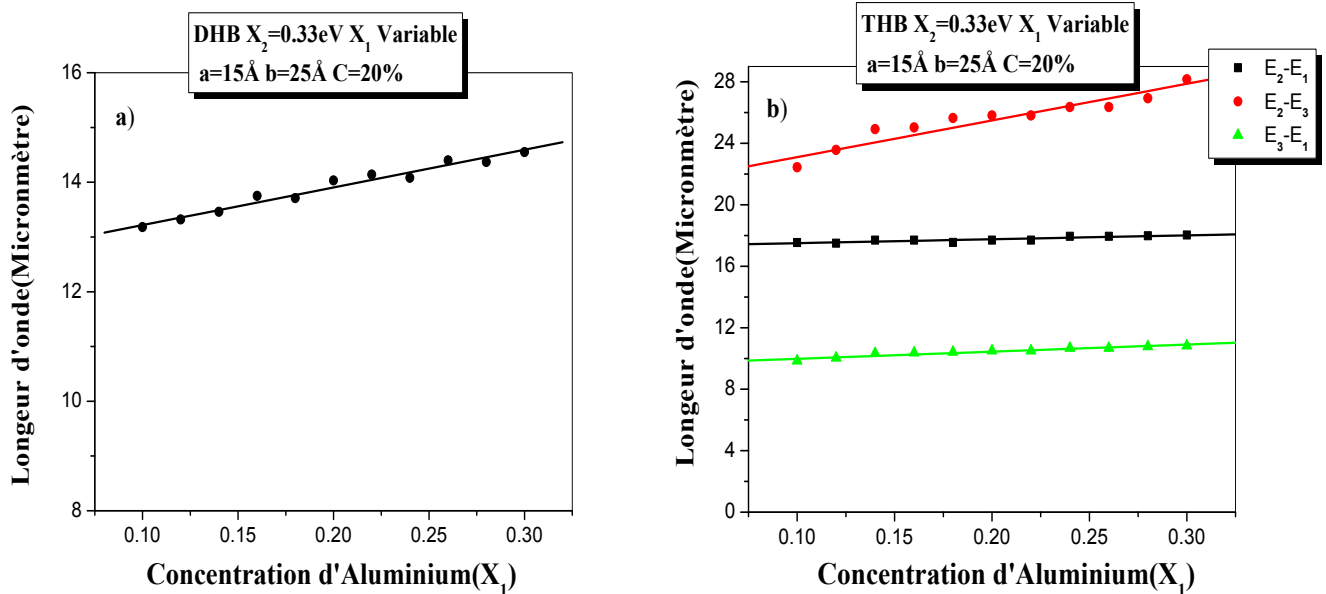


Figure 3.8: Longueur d'onde laser du DHB (a) et THB (b) en fonction de la concentration d'Aluminium.

Pour $X_1 = 0.18$ eV et dans le cas du dimer, l'électron émet sur une longueur d'onde de 13.71 μm correspondante au saut de 0.0904 eV, alors que pour la structure en trimer, il émet sur trois longueurs d'onde (10.42 μm , 17.55 μm et 25.65 μm) correspondant respectivement aux sauts de (0.1189 eV, 0.0706 eV et 0.0483 eV). Cette plage de longueur d'onde correspond à celle des photodétecteurs à infrarouge (4 à 20 micromètres) et appareils photo infrarouges (entre 8 et 12 micromètres) [8-12].

Helm et al [13], ont démontré pour la première fois, l'émission des radiations infrarouge de 110, 70 et 50 μm , basée sur des structures avec 5 à 6 minibandes dans le

puits. En s'inspirant de cette expérience, Choe et al [14] ont proposé la possibilité d'avoir des émissions de l'ordre de 3 à 5 μm .

Références

- [1] J.C.Flores, *J.Phys.Condens.Matter*, **1** 8471(1989).
- [2] K.Senouci, *J.Phys.Condens.Matter* **19** 076202 (2007).
- [3] V.Bellani, M.Amado E.Diez. C.Koerdt, M.Potemski and R.Hey, arXiv:070162.v1 Cond-mat.mes-hall,(2007).
- [4] F.Dominguez-Adame, V.A.Malyshev, *Am.J.Phys*,72 227(2004).
- [5] S.Bentata, *Superlattices and Microstructures*, **37** 297 (2005).
- [6] V.Bellani, E.Diez, R.Hey, L.Toni, L.Tarricone, G.B. Parravicini, F.Domínguez-Adame, R. Gómez-Alcalá,*Phys.Rev.Lett*, **82** 2159(1999).
- [7] S.Bentata, B.Ait Saadi, H.Sediki, *Superlattices and Microstructure*, **30** 300(2001).
- [8] S. Smith, L. C. Chiu, S. Margalit, A. Yariv, and A. Y. Cho, *J. Vac. Sci. Technol. B* **1**, 376 (1983).
- [9] D. Coon and R. P. G. Karunasiri, *App. Phys. Lett.* **45**, 649 (1984).
- [10] I.Vurgaftman, C.L. Felix, W.W. Bewley, D.W. Stokes, R.E. Bartolo, J.R Meyer, «Mid-infraredW lasers », *Phil. Trans. Roy. Soc. Lond. A* **359**, p. 489, (2001).
- [11] J.Faist, F.Capasso, D. L. Sivco, C.Sirtori, A.L.Hutchinson, A. Y.Cho, « Quantum Cascade Laser », *Science* **264**, 553, (1994).
- [12] R.Teissier, D. Barate, A.Vicet, C.Alibert, A.N.Baranov, X.Maracadet, C.Renard, M.Garcia, C.Sirtori, D.Revin, J.Cockburn, « Room temperature operation of InAs/AlSb quantum cascade lasers », *Appl. Phys.Lett.* **85**, (2), 167, (2004).
- [13] M. Helm, P. England, E. Colas, F. De Rosa, and S. J. Allen, Jr. *Phys. Rev. Lett.* **63**, 74 (1989).
- [14] J. W. Choe, A. G. U. Perera, M. H. Francombe, and D. D. Coon, *App. Phys. Lett.* **59**, 54 (1991).

Conclusion générale

Ce mémoire présente une étude qualitative par modélisation et simulation l'effet de la variation de la fraction molaire sur les propriétés de transport des Superréseaux $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$. Après avoir présenté les méthodes numériques de calcul utilisées, nous avons abordé l'étude de la transmission électronique dans les systèmes désordonnés.

Les structures désordonnées ont été étudiées pour le type de désordre (structural). Le désordre structural consiste à introduire par doublet et triplet des barrières de hauteur V_2 différentes de V_1 , distribuées aléatoirement dans la structure du superréseau.

L'évolution du coefficient de transmission en fonction de l'énergie électronique pour une structure dimer hauteur de barrière présente une structure de minibande à deux pics de résonance, l'un est dû à la cellule dimer et l'autre à la commutation entre les deux potentiels V_1 et V_2 . Ces résultats sont en parfait accord avec ceux trouvés par Dominguez et Bellani. L'élévation de la largeur de puits influe sur la transmission électronique dans les superréseaux désordonnés en provoquant une translation des pics de résonance vers les basses énergies à cause de l'effet de confinement des états électroniques à l'intérieur du puits du dimer ou trimer. L'augmentation de l'épaisseur de la barrière b fait rétrécir la structure de la minibande vers le centre jusqu'à sa disparition complète à des valeurs dépassant 50 \AA du fait que b est supérieur à la longueur d'onde λ de l'électron. Dans cette situation les puits sont découplés et les états deviennent liés dans les cas du dimer et trimer. La barrière se présente à la particule comme une marche de potentiel infinie. L'effet de la hauteur de la barrière sur la transmission a été étudié dans deux cas (dimer ou le trimer). Tous les pics de résonance relatifs au dimer ou le trimer apparaissent jusqu'à ce que la différence $(V_2 - V_1)$ devienne approximativement nulle, dans ce cas, ces pics se transforment en minibande, du fait que l'électron ne peut pas faire la différence entre les hauteurs de potentiel V_1 et V_2 . Il franchit les barrières comme si c'était un système ordonné

Finalement, les structures étudiées de $\text{GaAs}-\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ possédant un désordre corrélé montrent une seule émission laser pour le dimer et trois pour le trimer, ce qui permet d'envisager des dispositifs très prometteurs dans la conception des lasers à longueur d'onde contrôlable dans le moyen infrarouge.