

الجمهورية الجزائرية الديمقراطية الشعبية

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE
MINISTRE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET DE LA RECHERCHE
SCIENTIFIQUE
UNIVERSITE HASSIBA BEN BOUALI DE CHLEF



Faculté des Sciences Exactes et Informatique
Département de Physique

Mémoire

En vue de l'obtention du diplôme de

Master en physique

Option : Sciences des matériaux

Préparé par

M. Tariq Hadji

Thème

Les défauts composés résonants dans
les hétérostructures unidimensionnelles

Présenté le 02 / 06 / 2016, devant le jury:

Pr. Mohamed Benarous
Dr. Saida Bourahla
Dr. Djamila Mekam
Dr. Hafid Khalfoun

Professeur
MCB
MCB
MCA

Président
Examineur
Examineur
Encadreur

Année universitaire 2015/2016

REMERCIEMENTS

Je voudrai tout d'abord remercier Allah pour m'avoir donné la santé et le courage, la patience et surtout de la bonne volonté pour pouvoir persévérer dans ce travail.

Je voudrai aussi remercier mon encadreur Dr. Hafid Khalfoun. J'ai beaucoup appris de sa rigueur de travail, de ses conseils et de ses encouragements. Sa présence pendant les moments difficiles m'a apporté beaucoup d'aide.

Mes remerciements vont aussi à tous les membres du jury : Pr. Mohamed Benarous, Dr. Bourahla S. et Dr. Mekam D. pour avoir accepté de participer au jury de délibérations.

Enfin je souhaite remercier tous mes amies, mes enseignements et collègues de la faculté de sciences,

DEDICACES

Mes parents.

À mon petit frère *Abdu Elrahmèn*.

Mes sœurs, Ferial, Ismahane.

Mes familles, et spécialement à mon oncle B. Elhadj.

À bonnes amies : T. Ahmed, M. Maya, Y. Hanane

Les défauts composés résonants dans les hétérostructures unidimensionnelles

Résumé

Les structures multicouches artificielles à semi-conducteurs ont stimulé le développement rapide de micro-dispositifs électroniques fonctionnels. En effet, avec la présence de l'effet tunnel résonant comme processus de transmission dans les hétérostructures électroniques, ces structures ont été pourvues de propriétés de transport très intéressantes par rapport aux matériaux massifs.

Dans ce travail, nous considérerons le cas de défauts résonants distincts. Nous aborderons les différentes combinaisons possibles de ces motifs défauts en fonction de l'ajustement approprié de leurs paramètres structuraux. Chaque situation sera caractérisée par l'étude de ses propriétés de transmission.

Mots clés : localisation d'Anderson, corrélation de désordre, modèle du dimère et trimère aléatoires, résonances

Table des matières

Introduction générale.....	1
----------------------------	---

Chapitre I: Généralités sur l'ordre et le désordre

I.1 Introduction.....	6
I.2 Généralités sur les semi-conducteurs.....	7
a- Définition.....	7
b- Types de semi-conducteurs.....	7
- Semi-conducteurs intrinsèque.....	7
- Semi-conducteurs extrinsèques.....	7
c- Les matériaux semi-conducteurs.....	8
d- La structure de bandes.....	8
- Propriété cristalline.....	8
- Méthodes de calculs de la structure de bandes.....	11
I.3 Généralités sur les super réseaux.....	13
a- Définition et concept des super réseaux.....	13
b- Techniques de fabrication.....	14
c- Différents types de super réseaux.....	15
d- Formation de structure de mini bandes dans les super réseaux.....	16
I.4 Généralités sur les systèmes désordonnés.....	18
a- Définition.....	18
b- Modèle d'Anderson.....	19
c- L'approche de Thouless.....	21
d- L'effet de la localisation sur la résistance de Landauer ρ	22
e- La résistance non Ohmique :.....	23
f- Conséquence de la résistance non-Ohmique.....	24
I.5 Conclusion.....	26

Chapitre II: Formalismes mathématique

II.1 Introduction.....	29
II.2 Modèle analytique de Kronig-Penney.....	30
II.3 Formule de Poincaré.....	32
II.4 Energies de résonance.....	37
II.5 Matrice de transfert pour les structures 1D (super réseaux).....	39

II.6 Conclusion	43
-----------------------	----

Chapitre III: Résultats et discussion

III.1 Introduction	46
III.2 Système ordonné	47
a- La structure simple période	47
b- La structure double période.....	48
c- Structure à N périodes (N fini).....	51
d- L'influence de largeur de puits	57
III.3 Système désordonné.....	58
a- Non corrélation et corrélation de désordre (intra-bande)	58
1- Corrélation de désordre en dimère	58
2- Corrélation de désordre en trimère.....	60
b- Non corrélation et corrélation de désordre (inter-bande)	62
Conclusion générale	68
Bibliographie.....	70

Introduction générale

L'apparition des théories quantiques et le développement des techniques de calcul moderne ont donné aux sciences des matériaux une avancée considérable dans la modélisation des matériaux ordonnés. A partir de la structure de bandes d'énergie, les porteurs de charges peuvent ainsi disposer d'un environnement leur permettant de se déplacer quasi-librement dans le champ d'un potentiel moyen sous l'application d'excitations extérieures : La réponse de l'interaction effective de l'onde permise avec le milieu de propagation définit les domaines de la propagation des ondes électroniques permises. Les matériaux cristallins sont des matériaux à paramètres structuraux universels. La propagation électronique est gouvernée par ces paramètres. Les propriétés physiques qui en découlent sont des propriétés intrinsèques à la structure cristalline.

Dans les super réseaux, les matériaux peuvent être modélés en fonction des propriétés électroniques désirées. Comparativement aux matériaux massifs (dont le paramètre du réseau est de l'ordre des liaisons atomiques), ces matériaux artificiels présentent des bandes permises ajustables. L'idée d'une structure électronique résonante a été initialement proposée par L. Esaki en 1973[1] : En juxtaposant deux matériaux semi-conducteurs différents, des états quantiques sont apparus à l'interface. L'exploitation de ces états dans la diode à effet tunnel résonant a révolutionné les jonctions classiques de matériaux massifs. Avec l'apparition de l'effet tunnel résonant comme processus de transmission, l'onde électronique propagatrice se retrouve dans des conditions de transmission très favorable.

Dans notre travail, nous nous intéressons à la propagation des ondes électroniques dans les hétérostructures quantiques comme milieu de propagation [2]. Par un choix judicieux des paramètres structuraux, nous composons le motif défaut sur deux et trois périodes consécutives pour en faire des motifs défauts résonants [3]. Nous considérerons des configurations aléatoires pour la distribution de ces défauts dimères [2] et trimères [3]. Nous comparerons des réponses de transmission telles que le coefficient de transmission et la longueur de localisation.

Ce manuscrit est présenté comme suit :

Le chapitre I consiste à introduire des rappels des notions fondamentales sur l'ordre parfait et le désordre. Dans le cas de l'ordre parfait, nous évoquons des matériaux semi-conducteurs et décrivons leurs propriétés physiques et montrons le principe d'utilisation dans les super réseaux. Avec l'apport de la technique de l'épitaxie par jets moléculaires, des perspectives intéressantes peuvent être ouvertes dans la conception de ces matériaux artificiels. Quant au désordre, nous introduisons ses définitions de base : Le modèle d'Anderson est ainsi présenté suivi des conséquences du désordre sur les propriétés de transport électroniques [6].

Le chapitre II traite les différents formalismes mathématiques utilisés pour déterminer les propriétés de transmission en se basant uniquement sur les conditions de continuité d'un site à un autre. Parmi ces formalismes : le modèle de Kronig et Penney, la formule de Poincaré et le formalisme de la matrice de transfert.

Le chapitre III propose une étude quantitative sur les propriétés de transmission de structures désordonnées unidimensionnelles contenant des défauts résonants. Nous considérons l'ajustement des paramètres structuraux du motif défaut comme un moyen qui permet de composer les motifs défauts et le motif hôte dans la structure désordonnée en se basant uniquement sur l'alignement des résonances [9]. Nous discuterons les différentes situations d'apparition et d'extinction des résonances probables. Deux cas sont considérés :

- Non corrélation et corrélation du désordre (intra- bande) [7].
- Non corrélation et corrélation du désordre (inter- bande).

Ce manuscrit se termine par une conclusion générale.

Chapitre I

Généralités sur l'ordre et le désordre

Sommaire

I.1 Introduction.....	6
I.2 Généralités sur les semi-conducteurs.....	7
a- Définition.....	7
b- Types de semi-conducteurs.....	7
- Semi-conducteurs intrinsèque.....	7
- Semi-conducteurs extrinsèques.....	7
c- Les matériaux semi-conducteurs.....	8
d- La structure de bandes.....	8
- Propriété cristalline.....	8
- Méthodes de calculs de la structure de bandes.....	11
I.3 Généralités sur les super réseaux.....	13
a- Définition et concept des super réseaux.....	13
b- Techniques de fabrication.....	14
c- Différents types de super réseaux.....	15
d- Formation de structure de mini bandes dans les super réseaux.....	16
I.4 Généralités sur les systèmes désordonnés.....	18
a- Définition.....	18
b- Modèle d'Anderson.....	19
c- L'approche de Thouless.....	21
d- L'effet de la localisation sur la résistance de Landauer ρ	22
e- La résistance non Ohmique :.....	23
f- Conséquence de la résistance non-Ohmique.....	24
I.5 Conclusion.....	26

1.1 Introduction

L'étude de structures cristallines est une branche principale dans la physique des matériaux. L'identification chimique des éléments qui constituent le motif et sa construction physique sur une base quantique sont les fondements même de la théorie des bandes nécessaires à l'identification du matériau à l'échelle atomique. L'application des conditions de continuité périodiques donne la structure de bandes. Celle-ci constitue l'information de base pour identifier les matériaux à l'échelle macroscopique.

Dans ce chapitre, nous commençons par faire appel aux propriétés électroniques des matériaux semi-conducteurs pour définir le super réseau. Ce dernier est construit sur une extension spatiale des concepts fondamentaux de la physique du solide, tels qu'établis sur les matériaux massifs à l'échelle même des atomes et des paramètres du réseau cristallin [4]. Nous abordons les techniques de fabrication de ces matériaux artificiels pour mettre en évidence les possibilités offertes par la technologie actuelle dans le contrôle des paramètres structuraux et la fabrication de ces super structures [5].

En absence de désordre, ces structures sont considérées parfaites. C'est ainsi que dans la seconde partie, nous définissons le désordre et ses différents types. Nous abordons le modèle d'Anderson et nous évoquons les conséquences du désordre sur les propriétés de transport électronique, notamment la conductance (résistance) quantique [6].

1.2 Généralités sur les semi-conducteurs

a– Définition

Les semi-conducteurs sont des matériaux solides présentant une conductivité électrique intermédiaire entre celles des métaux et des isolants. À température nulle, le matériau semi-conducteur se comporte comme un isolant, car sa bande de valence est pleinement saturée et la bande de conduction est totalement vide : Aucun porteur de charge de la bande de conduction ne participe à la conduction électrique. Par ailleurs, lorsque les électrons sont excités thermiquement, ces derniers peuvent se déplacer vers la bande de conduction : le matériau deviendrait conducteur [4].

b– Types de semi-conducteurs

- Semi-conducteurs intrinsèque

Le semi-conducteur intrinsèque ne comporte aucune impureté et son comportement électrique ne dépend que de la structure du matériau pur. Son comportement correspond à un semi-conducteur parfait (structure cristalline), c'est-à-dire sans défaut structural ou impureté chimique.

Dans un semi-conducteur intrinsèque, les porteurs de charge ne sont créés que par excitation thermique. Le nombre d'électrons dans la bande de conduction est égal au nombre de trous dans la bande de valence. Ces semi-conducteurs ne conduisent pratiquement pas le courant, sauf si on les porte à haute température. A basse température, ces matériaux se comportent comme des isolants [4].

- Semi-conducteurs extrinsèques

Ces matériaux présentent un nombre important d'impuretés soigneusement sélectionnées ceci est possible grâce aux processus de dopages. Le dopage consiste à augmenter la densité en particules libres dans le semi-conducteur. Pour ce faire, un certain nombre d'atomes riches (ou pauvres) en électrons est inclut dans le semi-conducteur. Ces derniers constitueront de réservoirs de charges négatives (ou positives), susceptibles de se porter dans la bande de conduction (ou de valence) à faibles températures. L'apport de ces charges consiste donc à altérer la conductivité électrique du matériau hôte [4].

c- Les matériaux semi-conducteurs

Les principaux éléments de semi-conducteur sont les Silicium et le Germanium, éléments principaux de la colonne IV du tableau périodique. Ces éléments et d'autres peuvent entrer dans la composition de semi-conducteurs. Il s'agit de composés résultant d'alliages binaires, ternaires ou quaternaires pour lesquels deux, trois, voire quatre éléments chimiques peuvent constituer les matériaux tels que GaAs, GaAsN et AlGaAsN.

II	III	IV	V	VI
	B	C	N	
Mg	Al	Si	P	S
Zn	Ga	Ge	As	Se
Cd	In	Sn	Sb	Te
Hg		Pb		

Tableau I.1 : Extrait de tableau de Mendeleïev.

L'intérêt de ces compositions consiste à combiner les propriétés physico chimiques que peut fournir chaque élément afin d'en tirer profit des propriétés physiques résultantes dans l'alliage. Cet intérêt est porté les propriétés mécaniques (pour la robustesse), les propriétés électriques (pour la conductivité) et les propriétés opto - électroniques (largeur de la bande interdite).

d- La structure de bandes

- Propriété cristalline

Un cristal parfait est construit par la répétition périodique et régulière dans tout l'espace, de motifs. Ces derniers peuvent être constitués d'atomes ou de molécules (figure (I.1)).

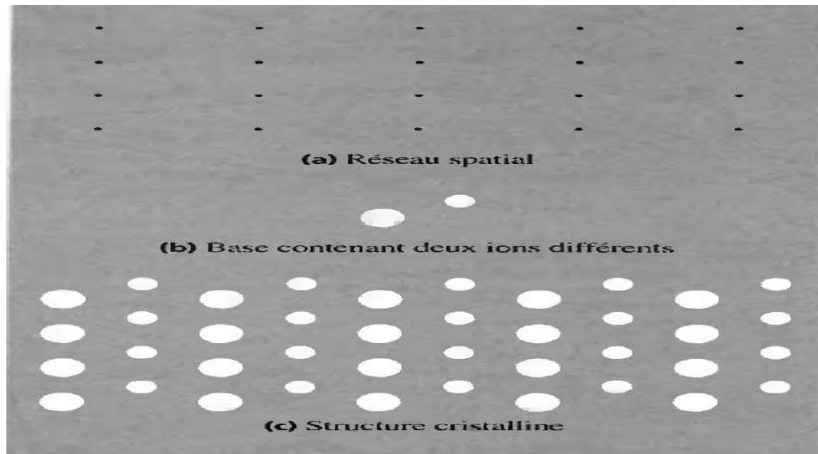


Figure I.1: La structure cristalline est formée de l'addition de la base (b) à chaque nœud du réseau (a). Ainsi en observant (c) il est possible de reconnaître la base qui construit le réseau [10].

L'édifice cristallin est défini par trois vecteurs de translations principaux \mathbf{a}_1 , \mathbf{a}_2 et \mathbf{a}_3 appelés vecteurs primitifs. La position de chaque site autorisé dans le cristal est appelé un nœud. Celui-ci est défini par un vecteur de translation \mathbf{T} :

$$\mathbf{T} = n_1\mathbf{a}_1 + n_2\mathbf{a}_2 + n_3\mathbf{a}_3 \quad (\text{I.1})$$

n_1 , n_2 et n_3 sont des entiers positifs ou négatifs.

L'ensemble des points définis par le vecteur \mathbf{T} pour toutes les valeurs de n_1 , n_2 et n_3 constitue les sites du réseau cristallin. Les trois vecteurs primitifs construisent un parallélépipède. Si ce dernier contient un nœud propre, alors le volume engendré par ces trois vecteurs constitue la maille primitive (connue aussi sous le nom de la maille élémentaire) (figure (I.2.b)). En conséquence, tout l'espace peut être rempli seulement en appliquant à la maille primitive des opérations de translation engendrées par le vecteur de translation. Le volume de la maille élémentaire est défini par le produit mixte (produit vectoriel et scalaire)

$$v = |\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2 \cdot \mathbf{a}_3|. \quad (\text{I.2})$$

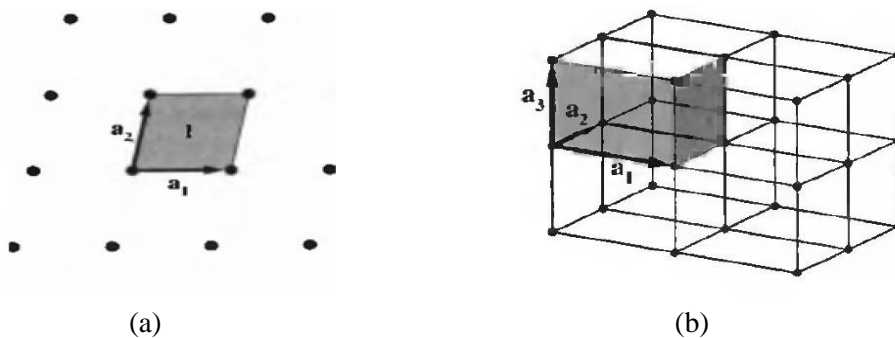


Figure I.2: (a) nœud d'un réseau à 2 dimensions. (b) maille élémentaire d'un réseau à 3 dimensions [10].

Au vu de la diversité et la complexité des combinaisons possible entre les vecteurs de translation et les angles entre ces derniers, il existe un nombre infini d'édifices probables. Seules certaines structures peuvent reproduire des opérations de symétries spécifiques limitant ainsi le nombre de systèmes cristallins. Ce sont les réseaux de Bravais au nombre de 14 [10].

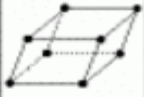
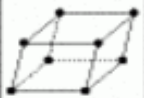
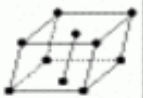
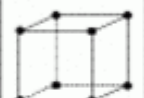
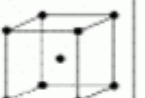
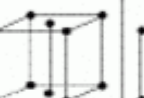
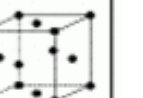
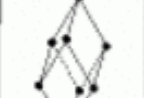

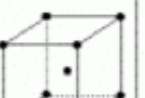


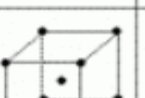
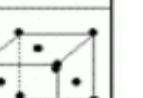
Nom du Système	simple	corps centré	2 faces centrées	faces centrées
triclinique $a \neq b \neq c$ $\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$				
monoclinique $a \neq b \neq c$ $\alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta$				
orthorhombique $a \neq b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$				
rhomboédrique $a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$				
quadratique $a = b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$				
hexagonal $a = b \neq c$ $\alpha = \beta = 120^\circ \neq \gamma = 90^\circ$				
cubique $a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$				

Figure I.3 : Les 7 systèmes cristallins et les 14 réseaux de Bravais correspondants [Wikipédia].

L'opérateur translation et ses conséquences

L'Hamiltonien d'un électron dans un cristal est donné par :

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\mathbf{r}) \quad (\text{I.3})$$

où

$$V(\mathbf{r}+\mathbf{T})=V(\mathbf{r}) \quad (\text{I.4})$$

Soit T l'opérateur de translation. En agissant sur une fonction d'onde $\psi_k(\mathbf{r})$ définie à la position \mathbf{r} ,

$$T\psi_k(\mathbf{r}) = \psi_k(\mathbf{r} + \mathbf{T}) \quad (\text{I.5})$$

Celle-ci subira une translation à la position $\mathbf{r} + \mathbf{T}$.

Cet opérateur est très intéressant du fait qu'il commute avec l'Hamiltonien du système.

$$[H, T_T] = 0. \quad (\text{I.6})$$

Par conséquent, les deux opérateurs T et H peuvent être diagonalisés sur une base commune. Le théorème de Bloch permet de caractériser les fonctions d'ondes auxquelles le potentiel est périodique. Grâce à ce théorème les fonctions d'ondes sont exprimées par les ondes de Bloch :

$$\psi_k(\mathbf{r}) = u_k(\mathbf{r})\exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}) \quad (\text{I.7})$$

pour lesquelles la fonction enveloppe $u_k(\mathbf{r})$ reproduit la périodicité du potentiel cristallin

$$u_k(\mathbf{r}) = u_k(\mathbf{r} + \mathbf{T}). \quad (\text{I.8})$$

L'opérateur T admettra une valeur propre complexe $\exp(i\mathbf{k}\mathbf{T})$

$$\psi_k(\mathbf{r}+\mathbf{T}) = \exp(i\mathbf{k}\mathbf{T}) \psi_k(\mathbf{r}) \quad (\text{I.9})$$

pour laquelle k (vecteur de Bloch) doit être réel et aussi une énergie propre

$$E(k) = E(k + \mathbf{G}) \quad (\text{I.10})$$

Périodique dans l'espace réciproque. Sa périodicité est valable pour tout vecteur du réseau réciproque \mathbf{G} [10].

- Méthodes de calculs de la structure de bandes

Il s'agit de résoudre l'équation de Schrödinger mono électronique dans l'approximation du champ moyen $V_c(\mathbf{r})$:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V_c(\mathbf{r}) \right] \psi_n(k, r) = E_n(k) \psi_n(k, r). \quad (\text{I.11})$$

où $\psi_n(k, r)$ est la fonction d'onde cristalline.

En fonction des hypothèses émises sur l'expression du potentiel cristallin $V_c(\mathbf{r})$ et du choix de la base de la fonction d'onde $\psi_n(k, r)$, il existe plusieurs méthodes de calculs donnant les structures de bandes. Son domaine de validité reste tributaire du domaine d'énergie considéré.

Les méthodes de calculs :

a. Méthode LCAO (*Linear Combinations of Atomic Orbitals*)

Cette méthode consiste à développer les fonctions d'ondes sous forme de combinaisons linéaire d'orbitales atomiques. Elle est mieux adaptée lorsque les orbitales atomiques sont très localisées autour des noyaux (les états de cœur).

b. Méthode OPW (*orthogonalized plane waves*)

La méthode OPW consiste à développer les fonctions d'ondes sur la base des fonctions d'ondes des électrons libres (ondes planes). Elle est mieux adaptée à l'étude de la bande de conduction.

c. Méthode du pseudopotentiel

La méthode du pseudopotentiel, comme la méthode OPW, utilise les propriétés d'orthogonalité des états de valence et conduction avec les états du cœur. Mais dans le formalisme du pseudopotentiel l'effet de l'orthogonalité est inclu dans le potentiel sous la forme d'un potentiel équivalent appelé pseudopotentiel.

Exemples figures : structure cristallines - structures de bandes (Si, Ge, GaAs)

Les structures (Si, Ge) se cristallisent en phase cubique dans la structure diamant, et la structure binaire GaAs se cristallise en phase cubique dans la structure Zinc Blende.

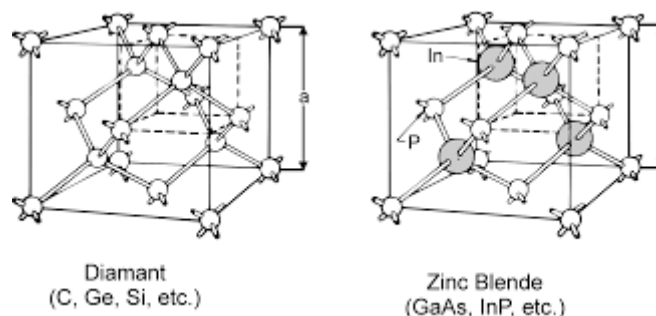


Figure I.4 : la structure cristalline de silicium Si, du Germanium Ge et de l'Arséniure Gallium GaAs [Wikipédia].

Les structures de bandes électroniques de chaque structure sont illustrées sur la figure suivante.

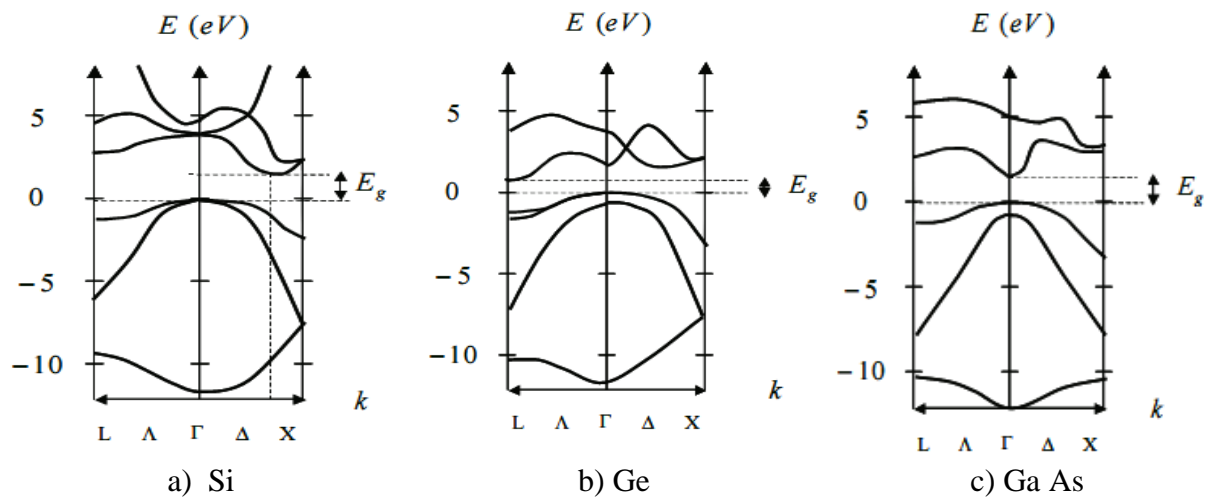


Figure I.5 : La structure de bandes du Si, du Ge et du GaAs suivant les directions de haute symétrie [4].

Les structures de Silicium et du Germanium présentent une bande interdite indirecte, et la structure binaire de l'Arséniure de Gallium présente une bande interdite directe.

1.3 Généralités sur les super réseaux

a- Définition et concept des super réseaux

Les super réseaux sont des structures artificielles basées sur l'alternance de deux couches fines de semi-conducteurs différents (SC1 et SC2) [5].

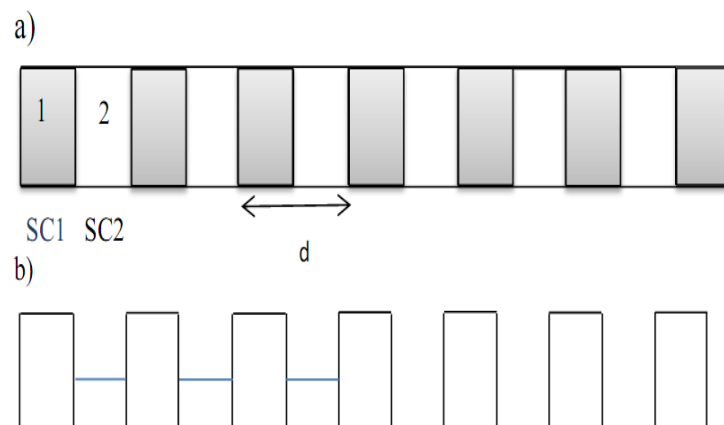


Figure I.6 : a) structure de super réseau de période d . b) le profil de potentiel (en barrière et puits quantiques rectangulaire dans la bande de conduction).

Les deux couches semi-conductrices sont caractérisées par des bandes interdites à largeurs différentes. La couche SC1 présentant une large bande interdite joue le rôle de la barrière de potentiel tandis que la couche SC2 de faible largeur de bande interdite joue le rôle du puit quantique. Les deux couches successives forment un motif (de période d) et l'application d'un vecteur de translation permet de construire *le super réseau*. Par analogie avec les matériaux massifs (bulk materials), les puits quantiques seront le siège d'états quantiques permis. Le recouvrement périodique de ces états disponibles au sein des puits quantiques adjacents donne des mini bande d'énergie [2].

b- Techniques de fabrication

Le procédé de fabrication des super réseaux est la croissance épitaxiale de couches minces, sur la base d'un substrat soigneusement choisi : Les trois matériaux : substrat, SC1 et SC2 doivent avoir la même structure cristalline (pas de réseaux très proches) pour éviter toutes éventuelles dislocations au niveau des interfaces du bâti épitaxial [5]. La figure suivante illustre assez bien les combinaisons possibles entre différents matériaux dans une construction épitaxiale en fonction du pas de réseau, largeur et nature de la bande interdite.

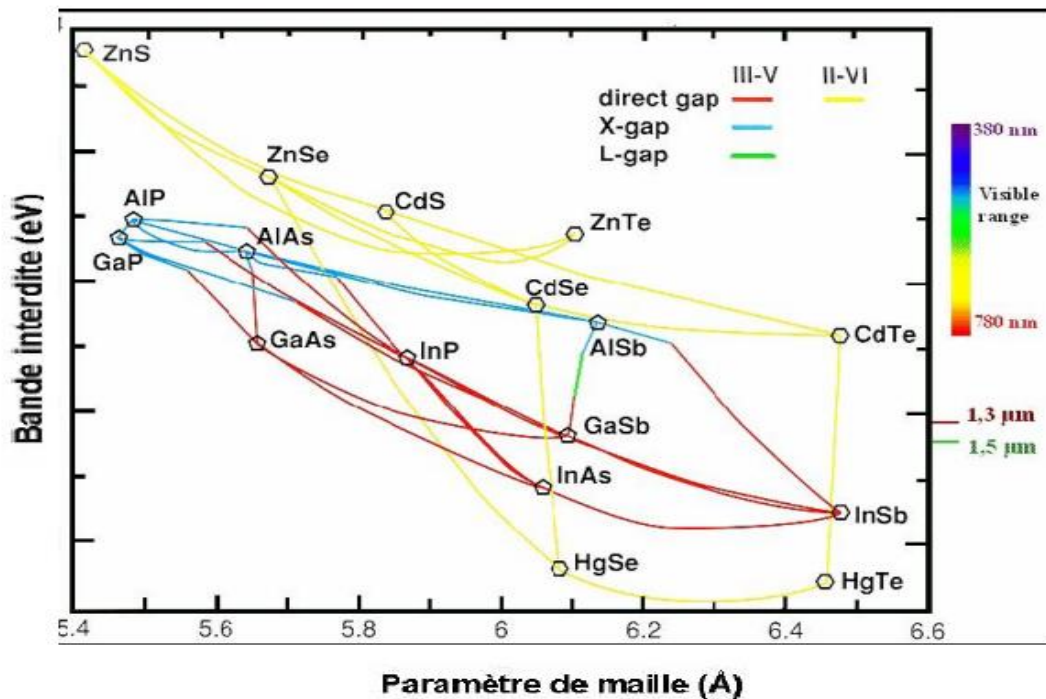


Figure I.7 : Relation entre matériaux, structure atomique, paramètre de maille et gap électronique [3].

Contrairement aux réseaux cristallins, il existe des techniques précises pour fabriquer ces matériaux artificiels telles que l'épithaxie par jets moléculaire, le dépôt en phase vapeur et le dépôt en phase liquide. Dans notre travail, nous nous contenterons de décrire la technique de

fabrication la plus approprié pour le control et le suivi de la croissance cristalline des super réseaux : L'épitaxie par jets moléculaires.

Épitaxie par jets moléculaires

Le terme « épitaxie » vient des mots grecs « épi » - pour dessus et « taxie » pour ordre), l'épitaxie par jets moléculaires permet de réaliser dans un environnement suffisamment propre (dans l'ultravide (10^{-10} à 10^{-11} torr)) la croissance épitaxiale de couches fines de semi-conducteurs. Cette technique consiste à envoyer de manière appropriée des atomes ou des molécules (soigneusement choisies) vers la surface d'un substrat. Les éléments chimiques sont chauffés à haute température à l'intérieur des cellules d'évaporation. Les composantes s'échappent par une ouverture dans la cellule cylindrique et forment ainsi faisceau moléculaire orienté vers le substrat. Les atomes s'y déposent en plans successifs avec une vitesse de croissance de la couche pouvant atteindre 1nm par minute. Parmi les avantages de cette technique, est la possibilité de contrôler (lors du processus de fabrication) *in situ* les conditions de croissance par différentes techniques spectroscopiques comme la diffraction d'électron de haute énergie en incidence rasante (RHEED).

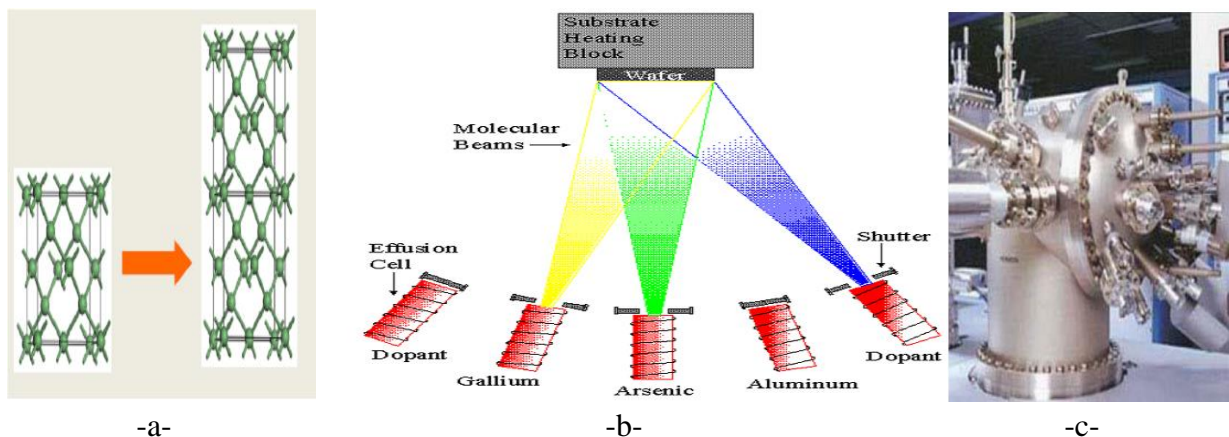


Figure 1.8 : schémas représentant a) la croissance épitaxiale b) principe de fonctionnement dans une chambre de croissance et c) le dispositif expérimental de l'épitaxie à jets moléculaires [8].

c- Différents types de super réseaux

Avec la possibilité du contrôle de la concentration des éléments chimiques déposés et la maîtrise de l'épaisseur des couches déposées, plusieurs profils de potentiel peuvent être conçus [2, 3] :

- SR à profil rectangulaire (pour les matériaux homogènes)
- SR à puit quantique parabolique.
- SR à dents de scie, triangulaire
- SR quasi périodique.

d- Formation de structure de mini bandes dans les super réseaux

Dans un super réseau, il s'agit de considérer un motif (SC1 – SC2) et de le reproduire de manière périodiques sur un nombre de périodes assez grand. Cette approche permet de construire le super réseau d'une manière analogue à celle du réseau cristallin. Il existe des modèles mathématiques fondamentaux pour décrire les structures de mini-bandes correspondantes :

1. *Modèle analytique de Kronig et Penney* : ce modèle se base sur la résolution de l'équation de Schrödinger sur le motif. L'introduction de l'onde de Bloch dans les conditions de continuité aux interfaces délimitant le motif donnera la structure de bande correspondante.

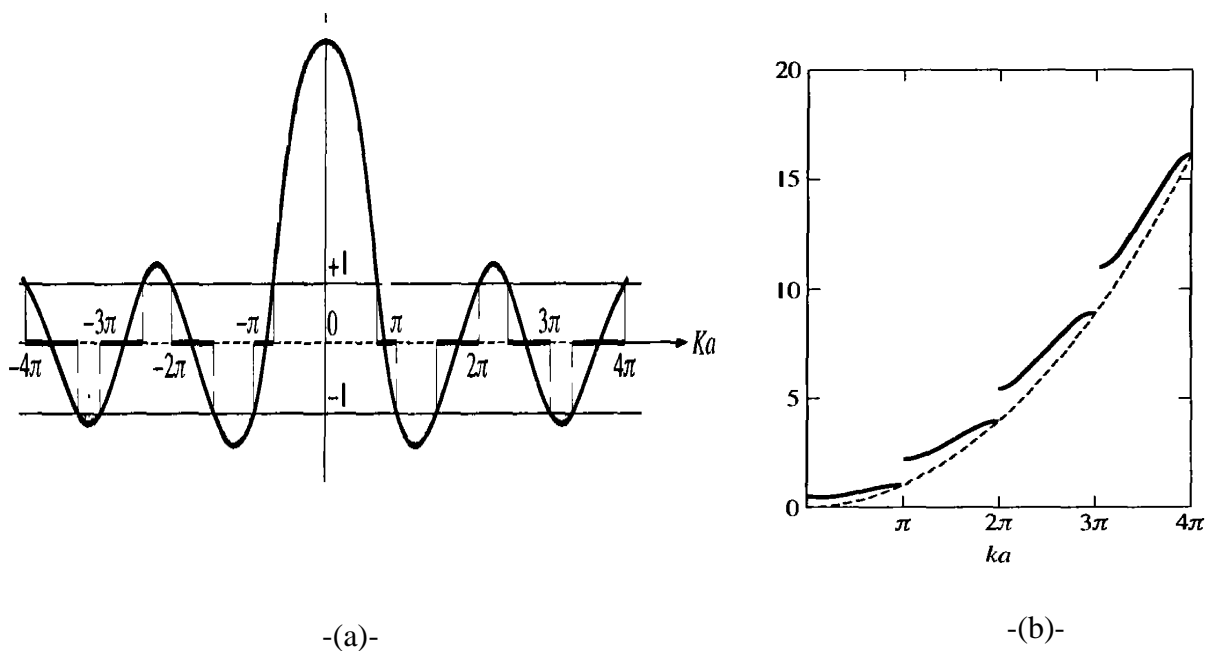


Figure I.9 : (a) la représentation de l'équation caractéristique de modèle de Kronig-Penney, (b) structure de bande relative au modèle de Kronig-Penney [17].

2. *Modèle des électrons faiblement liés* : ce modèle est basé sur la théorie des faibles perturbations indépendantes de temps. La reproduction régulière du motif définit un potentiel périodique dont la décomposition spectrale sur la base des vecteurs du réseau réciproques K permet d'identifier les bandes interdites aux limites des différents ordres des zones de Brillouin.

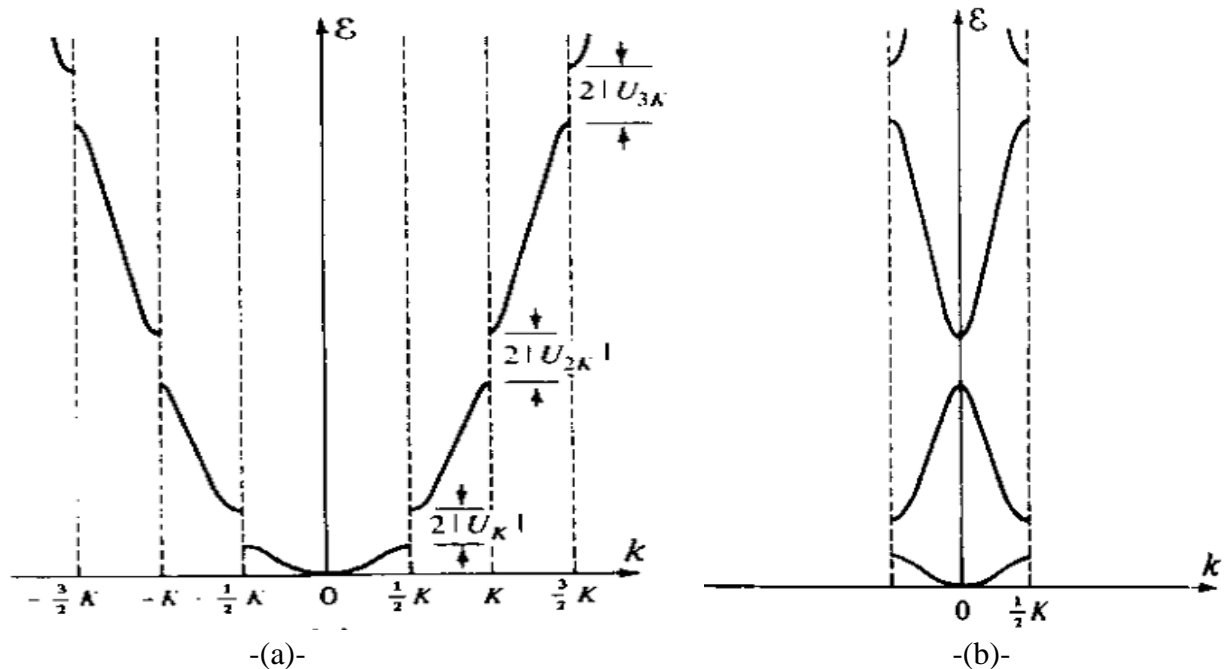


Figure I.10 : structure de bande (a) schéma en zone étendue, (b) schéma réduit de la structure de bandes [23].

3. *Le modèle de liaisons fortes* : ce modèle se base sur l'interaction périodique entre les états permis voisins appartenant aux puits quantiques adjacents. La largeur de la mini bande permise dépend des termes et de l'ordre d'interaction entre les états plus proche voisin. Ceci est conditionné par le recouvrement à travers la barrière quantique séparatrice [10].

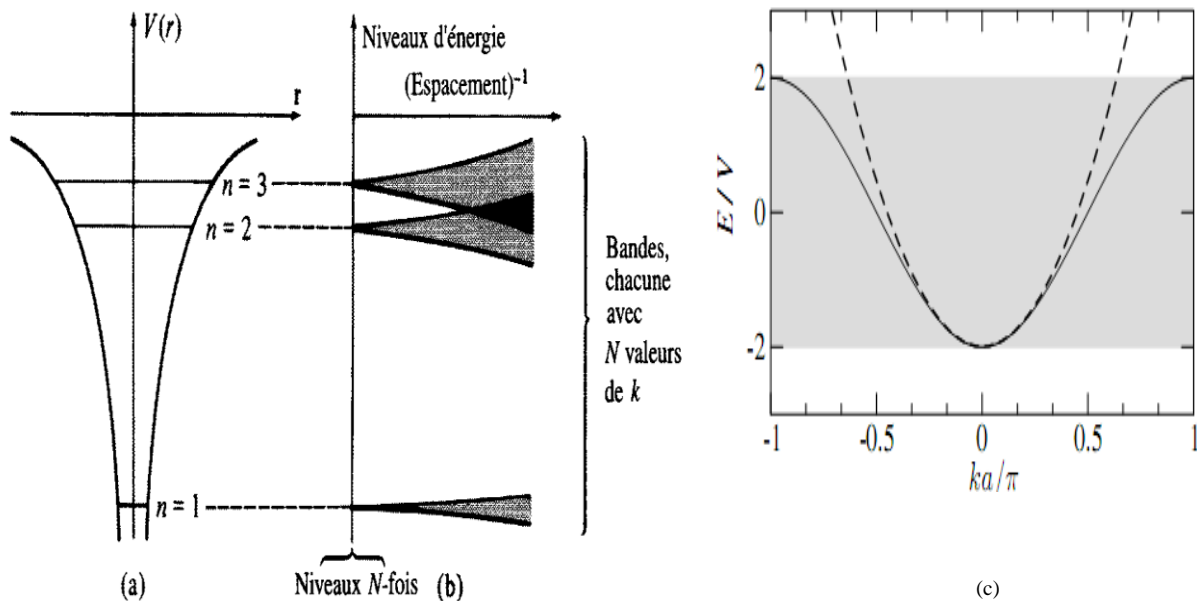


Figure I.11 : (a) Représentation schématique des niveaux électroniques dans un potentiel atomique. (b) effets d'éclatement de ces niveaux en bandes permises. (c) représentation de la relation de dispersion en liaisons fortes $E(k) = -2V \cos ka$ où V est le terme d'interaction et a définit la périodicité (largeur de motif) [23, 11].

4. *Formalisme mathématique de la matrice de transfert* : les propriétés de transmission sur un motif de période d donnent une matrice diffusion S . Celle-ci définira les bandes permises à partir de la condition

$$\text{Tr}(S) = \frac{1}{2} \cos(qd) \quad (\text{I.12})$$

L'apparition des ondes propagatrices dans le super réseau correspond à la présence du vecteur de Bloch q (réel) [11].

I.4 Généralités sur les systèmes désordonnés

a- Définition

Dans le cristal, l'ordre est parfait : le motif (un atome ou un groupement d'atomes) est réparti de manière régulière sur des sites arrangés de manière *impeccable*. Le système désordonné est une structure dont la symétrie de translation est perdue à cause de la présence d'irrégularité appelée défaut. Le défaut peut être [12] :

- Topologique, lorsque la distance séparant entre deux voisins successifs n'est plus la même qu'ailleurs dans le cristal.
- Compositionnel, lorsque la nature chimique du motif n'est plus la même qu'ailleurs dans le cristal.
- Structural : lorsqu'il s'agit d'un motif différent et de périodicités différentes.

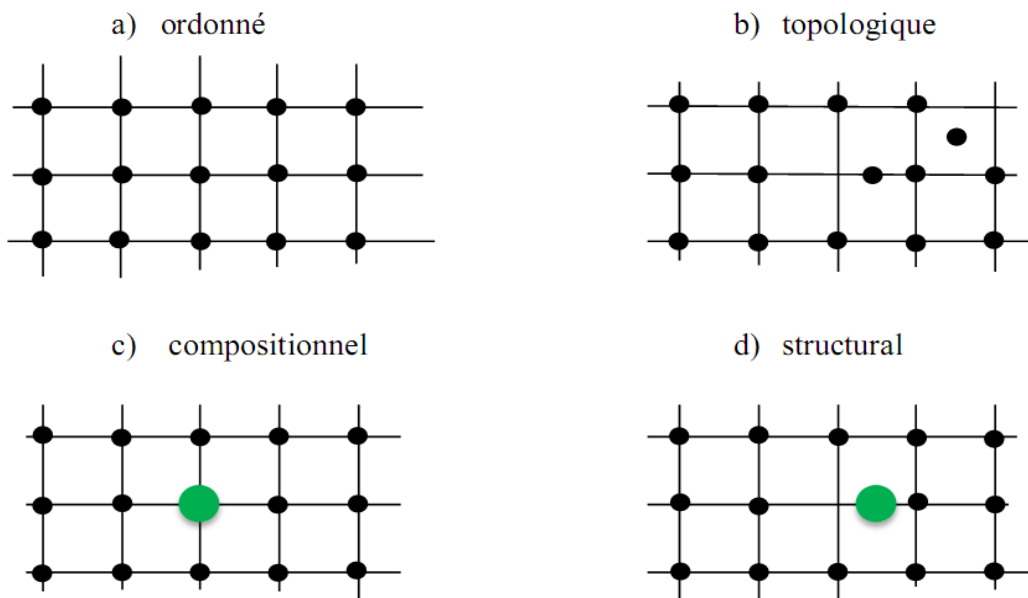


Figure I.12 : les différents type de désordre.

Contrairement au cas de l'ordre parfait, les réponses des systèmes désordonnés ne sont pas déterministes. La rupture des invariances par symétries induira des fluctuations statistiques sur les quantités physiques observables. Ainsi, il deviendra nécessaire de considérer plusieurs configurations liées au même désordre. Une approche statistique permettra de définir la moyenne des quantités physiques considérées.

b- Modèle d'Anderson

En 1958, P. W. Anderson s'est intéressé à la propagation des électrons dans un milieu désordonné. Il a démontré, les fonctions d'ondes associées vont se localiser dans une région de l'espace figure I.13 (b) [6].

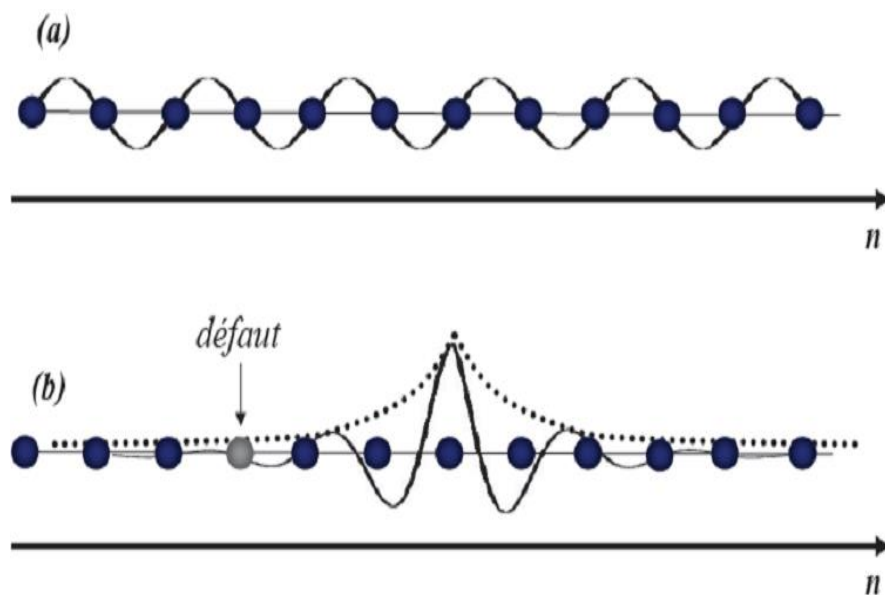


Figure I.13: (a) onde de Bloch (état étendu), (b) onde d'Anderson (état localisé)

Ce résultat porte le nom de la localisation d'Anderson. Contrairement au cas d'un cristal parfait, où tous les états permis sont étendus sur tout le cristal, l'ajout d'un défaut confine l'état électronique dans la structure désordonnée et confine la particule sur une région finie de l'espace.

Le modèle mathématique d'Anderson est basé sur la construction d'un Hamiltonien des liaisons fortes sur la base des états électroniques $|i\rangle$:

$$H = \sum_i \varepsilon_i |i\rangle\langle i| + \sum_{i,j} V_{ij} |i\rangle\langle j|. \tag{I.13}$$

où les éléments diagonaux ε_i représentent les énergies de site $|i\rangle$, et les éléments non diagonaux V_{ij} caractérisent l'interaction entre les voisins $|i\rangle$ et $|j\rangle$. Dans le modèle d'Anderson, le désordre est introduit uniquement sur les énergies de sites en considérant ε_i des variables aléatoires réparties dans une distribution rectangulaire sur l'intervalle $\left[-\frac{W}{2}, \frac{W}{2}\right]$, W mesurant le taux du désordre.

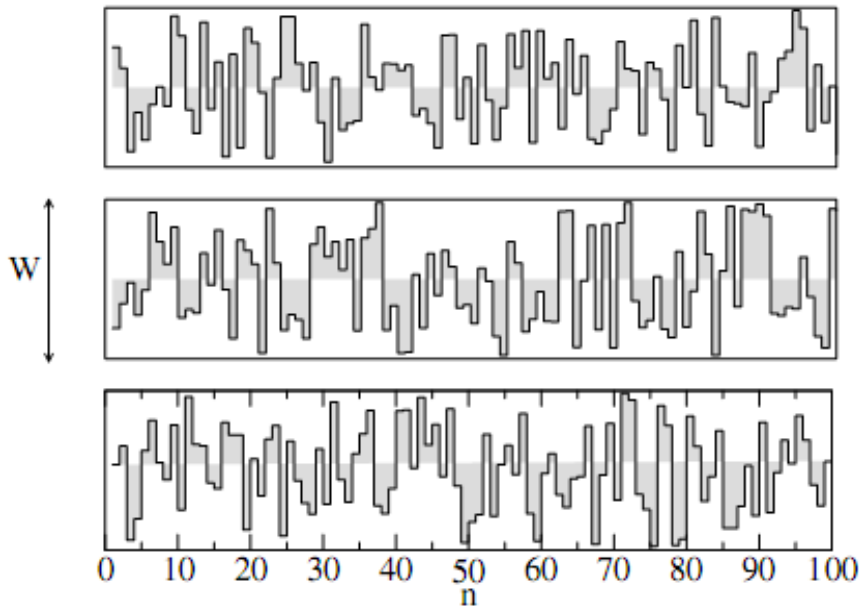


Figure I.14 (a) : trois configurations microscopiques des énergies des sites ε_i sur un réseau de 100 sites [11].

Dans le travail original de P.W. Anderson, il a été montré dans un système 3D désordonné l'apparition d'un front de mobilité E_c séparant les états étendus des états localisés. Cette situation correspond à une transition de phase métal – isolant dont la condition d'apparition dépend uniquement du paramètre d'ordre critique $W/V = 16.5$. Ceci a été également à l'origine de l'explication de l'apparition du minimum de conductance dans les structures désordonnées par Mott (1961) [13].

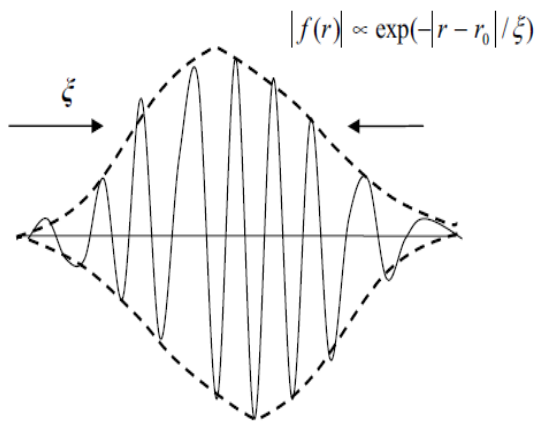


Figure I.15 (b) : nature de la fonction d'onde dans un système désordonné.

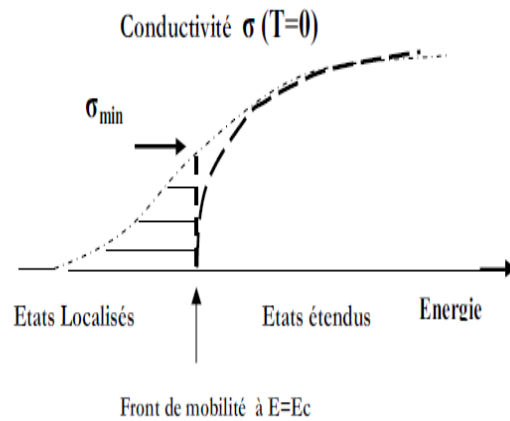


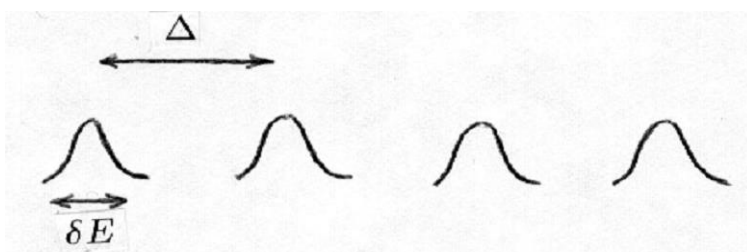
Figure I.15 (c) Transition de Mott au front de mobilité $E = E_c$.

c- L'approche de Thouless

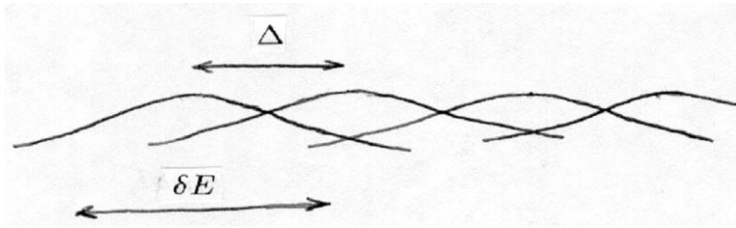
Quelques années plus tard, Thouless a eu l'ingénieuse idée de définir le concept de la conductance microscopique [14]. Thouless considéra un échantillon désordonné de taille L et discuta les conditions de la diffusion d'un électron à l'échantillon voisin (aussi désordonné) de taille L . Le désordre du matériau se reflète directement sur son spectre qui est aléatoire. Un électron diffusant à travers ce cube durant en temps $t_D = L^2 / D$ a une incertitude en énergie δE donnée par la relation d'incertitude d'Heisenberg $\delta E \times t_D \approx \hbar$, où D est la constante de diffusion:

$$\delta E \approx \frac{\hbar D}{L^2} \tag{I.14}$$

Un électron d'énergie E_1 ne pourra passer dans l'échantillon voisin que si $|E_2 - E_1| \leq \delta E$ où E_2 est le niveau d'énergie permis dans l'échantillon 2. Par suite, la diffusion d'échantillon en échantillon adjacents dans une structure désordonnée de taille double dépendra uniquement du rapport $\delta E / \Delta$ où Δ est l'espacement moyen entre niveau d'énergies voisines.



$\frac{\delta E}{\Delta} < 1$, les états sont localisés



$\frac{\delta E}{\Delta} \gg 1$, les états sont étendus

D'après Thouless, seul le paramètre $\delta E / \Delta$ décidera du comportement métallique ou isolant du système désordonné ainsi obtenu : Si la relation d'Einstein pour un échantillon de dimension L^d est utilisée, la conductivité est proportionnelle à D et donc à δE . Ainsi

$$\sigma = e^2 D \frac{dn}{dE} = e^2 D \left\langle \frac{1}{\Delta} \right\rangle L^{-d}, \quad (\text{I.15})$$

le rapport $\delta E / \Delta$ est donc l'expression de la conductance sans dimension g en unités de e^2 / \hbar et s'écrit :

$$\frac{\delta E}{\Delta} = \frac{\hbar \sigma}{e^2} L^{d-2} = \frac{\hbar G}{e^2}. \quad (\text{I.16})$$

Ce paramètre $g = \hbar G / e^2$ sans dimension est donc proportionnel à une conductance et non à une conductivité. Donc le cas où les états sont localisés, $\delta E \ll \Delta$ d'où $g \ll 1$, le matériau est isolant. Dans le cas où δE est grand (recouvrement des états est favorable) : $\delta E \gg \Delta$ et donc $g \gg 1$, le matériau désordonné présentera un comportement métallique.

d- L'effet de la localisation sur la résistance de Landauer ρ

Dans un système désordonné, la conductance (la résistance) résulte de la superposition des multiples ordres de transmission et de réflexion obtenus à partir du phénomène de la rétrodiffusion quantique sur les différents éléments diffuseurs. La résistivité s'exprime en fonction des coefficients de transmission et de réflexion de cette structure. Celle-ci est donnée par la relation de Landauer [15] :

$$\rho = \frac{\pi \hbar}{e^2} \frac{R}{T} = \frac{\pi \hbar}{e^2} \frac{1-T}{T} \quad (\text{I.17})$$

par convention, nous omettons la constante $\frac{\pi \hbar}{e^2}$, la résistance de Landauer s'écrit:

$$\rho = \frac{R}{T} = \frac{1-T}{T} \quad (\text{I.18})$$

cette résistance est donné par l'unité de $\frac{e^2}{\pi\hbar}$.

e- La résistance non Ohmique :

Soit une structure à double barrières de potentiel, chaque barrière constituant un élément diffuseur. L'expression du coefficient de transmission T_{12} est donnée par:

$$T_{12} = \frac{T_1 T_2}{1 + R'_1 R_2 - 2\sqrt{R'_1 R_2} \cos \phi}, \quad (\text{I.19})$$

où T_1, T_2 représentent le coefficient de transmission de chaque barrière isolée, et la phase ϕ est donné par [11]:

$$\phi = \phi(kd) = \phi_{r1} + \phi_{r2} - 2kd. \quad (\text{I.20})$$

Dans le cadre de la symétrie de renversement de temps ($R'_1 = R_1$), le coefficient de réflexion obéit à:

$$R_{12} = 1 - T_{12} = \frac{R_1 + R_2 - 2\sqrt{R_1 R_2} \cos \phi}{1 + R_1 R_2 - 2\sqrt{R_1 R_2} \cos \phi}. \quad (\text{I.21})$$

La formule de Landauer prend ainsi la forme [11]:

$$\rho_{12} = \frac{R_{12}}{T_{12}} = \frac{R_1 + R_2 - 2\sqrt{R_1 R_2} \cos \phi}{T_1 T_2}, \quad (\text{I.22})$$

Le développement de cette équation donne [11]:

$$\rho_{12} = \rho_1 + \rho_2 + 2\rho_1 \rho_2. \quad (\text{I.23})$$

Si on considère qu'on a N barrières identiques, chaque barrière est caractérisé par le même coefficient de transmission T_1 et de réflexion R_1 que les barrières sont distribués aléatoirement le long d'une chaîne linéaire de longueur, la distance moyenne entre deux barrières vérifie la condition :

$$\langle l \rangle = \frac{L}{N} \gg \frac{1}{k} \quad (\text{I.24})$$

Nous avons besoin de remplacer la résistance de Landauer par sa valeur moyen, c'est à dire. $\langle \rho_1 \rangle$ et $\langle \rho_2 \rangle$ qui représentent les résistances de Landauer des structures de N_1 et N_2 barrières respectivement. Pour $N = N_1 + N_2$ la résistance est donnée par :

$$\langle \rho \rangle = \langle \rho_1 \rangle + \langle \rho_2 \rangle + 2\langle \rho_1 \rangle \langle \rho_2 \rangle. \quad (\text{I.25})$$

Ce résultat montre que la résistance de Landauer n'obéit pas à la loi d'Ohm et que cette résistance ne dépend pas de la longueur du système [11].

f- Conséquence de la résistance non-Ohmique

Considérant un système de N barrières, chaque barrière a son propre coefficient de transmission et de réflexion T_1 et R_1 respectivement, le coefficient de transmission et de réflexion de toute la structure est : T_N et R_N . Avec l'addition d'une barrière supplémentaire à ce système, il en résulte un coefficient de transmission et de réflexion : T_{N+1} et R_{N+1} . La résistance de Landauer de ce système est donnée par [11]:

$$\rho_{N+1} = \frac{R_{N+1}}{T_{N+1}} = \frac{R_N + R_1 - 2\sqrt{R_1 R_N} \cos \phi_N}{(1 - R_N)(1 - R_1)} \quad (\text{I.26})$$

En calculant la moyenne sur ϕ_N , et après les simplifications :

$$\langle \rho_{N+1} \rangle = \left(\frac{1 + R_1}{1 - R_1} \right) \left(\frac{R_N}{1 - R_N} \right) + \left(\frac{R_1}{1 - R_1} \right) \quad (\text{I.27})$$

où

$$\langle \rho_N \rangle = \left(\frac{R_N}{1 - R_N} \right) \quad (\text{I.28})$$

en posant :

$$\Lambda = \left(\frac{1 + R_1}{1 - R_1} \right) \quad (\text{I.29})$$

$$\langle \rho_{N+1} \rangle = \Lambda \langle \rho_N \rangle + \frac{1}{2}(\Lambda - 1) \quad (\text{I.30})$$

Le paramètre Λ est défini pour caractériser les propriétés d'une barrière individuelle. $\Lambda > 1$ pour toute valeur de R_1 . L'expression de $\langle \rho_N \rangle$ peut s'écrire de la façon suivante [13]:

$$\langle \rho_N \rangle = \frac{1}{2}(\Lambda^N - 1) \quad (\text{I.31})$$

Et puisque, $\Lambda > 1$ on constate que $\langle \rho_N \rangle$ est exponentiellement croissante.

$$\langle \rho(L) \rangle = \frac{1}{2} \left(\exp \left(\frac{2L}{\xi'} \right) - 1 \right) \quad (\text{I.32})$$

où

$$\xi' = \frac{2\langle l \rangle}{\ln \Lambda} \quad (\text{I.33})$$

ce qui signifie que la résistance est exponentiellement croissante avec la longueur d'un système désordonné [11].

1.5 Conclusion

La conception du super réseau se base sur une analogie avec les concepts fondamentaux des structures cristallines : motif + vecteurs primitifs. Le matériau massif est construit sur l'échelle du pas du réseau tandis que le super réseau est construit sur l'échelle de matériaux (quelques mono- couches suffisent).

Le réseau cristallin donne une structure de bandes, alors que le super réseau donne une structure de mini-bandes. Celle-ci présente l'avantage d'être ajustable grâce à la technologie de fabrication de ces matériaux.

Le désordre consiste à introduire des défauts dans les structures hôtes. La brisure de symétrie détruit la structure de bandes et provoque le phénomène de la localisation. Comme conséquences, la loi d'Ohm n'est plus valable et la résistivité du système obéit à une loi exponentiellement croissante en fonction de la taille du système.

Chapitre II
Formalismes mathématiques

Sommaire

II.1 Introduction	29
II.2 Modèle analytique de Kronig-Penney	30
II.3 Formule de Poincaré	32
II.4 Energies de résonance	37
II.5 Matrice de transfert pour les structures 1D (super réseaux)	39
II.6 Conclusion	43

II.1 Introduction

Dans ce chapitre, nous allons décrire les modèles mathématiques nécessaires à la propagation des ondes [7] :

Nous commençons par définir le modèle analytique de Kronig - Penney pour mettre en évidence sa relation de dispersion analytique. Celle-ci est obtenue uniquement à partir des caractéristiques de transmission de son motif.

La formule de Poincaré est ensuite explorée pour définir la relation de récursion à laquelle obéit la fonction d'onde dans sa propagation aussi bien dans une structure désordonnée qu'ordonnée. Dans l'ordre parfait, la relation de Kronig - Penney est de nouveau mise en évidence.

Par la suite, nous introduisons la matrice d'évolution telle que définie dans le modèle des liaisons fortes. Une description analytique permet de mettre en relation les niveaux d'énergie permis en fonction du terme de recouvrement. Celui-ci caractérise l'interaction entre plus proches voisins.

Enfin, nous évoquerons le formalisme général de la matrice de transfert. Celui-ci est approprié pour donner les propriétés de transmission de structures aussi bien ordonnées et désordonnées. Nous mettrons en évidence les matrices diffusion nécessaire à la détermination du coefficient de transmission.

II.2 Modèle analytique de Kronig-Penney

Soit un système unidimensionnel, dont le motif est défini par

$$V(z) = \begin{cases} 0 & 0 \leq z \leq a \\ V_0 & a \leq z \leq a+b \end{cases} \quad (\text{II.1})$$

Définie sur une période $d = a + b$. Ce motif est constitué de deux régions homogènes voisines d'épaisseur a et b .

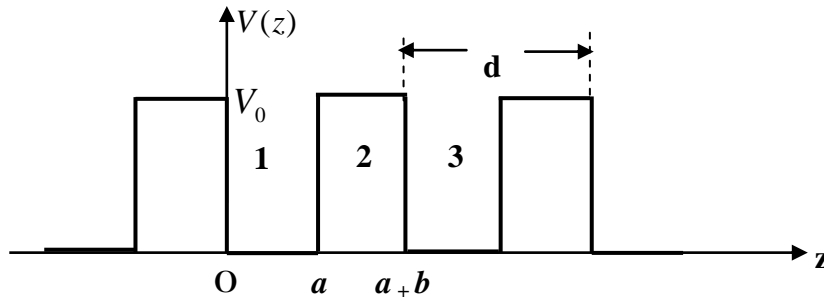


Figure II.1 Représentation du profil de potentiel relatif au modèle de Kronig-Penney

Dans ce système unidimensionnel, l'équation de la propagation de l'onde dans chaque région i de vecteur d'onde k_i et masse effective m_i est donnée par :

$$\frac{\partial^2 \psi_i(z)}{\partial z^2} + k_i^2 \psi_i(z) = 0. \quad (\text{II.2})$$

où :

$$k_i = \sqrt{\frac{2m_i}{\hbar^2} (E - V_i)}. \quad (\text{II.3})$$

$\hbar = \frac{h}{2\pi}$: étant la constant de Planck réduite

Les solutions de l'équation différentielle (II.2) dans la région (1) et (2) sont exprimées à partir d'ondes planes progressives et régressives comme suit :

$$\psi_1(z) = A_1 \sin(k_1(z-a)) + B_1 \cos(k_1(z-a)). \quad (\text{II.4})$$

$$\psi_2(z) = A_2 \sin(k_2(z-a)) + B_2 \cos(k_2(z-a)). \quad (\text{II.5})$$

Où k_1 et k_2 , sont les vecteurs d'ondes relatifs à la région 1 et 2 respectivement.

En utilisant le théorème de Bloch, la fonction d'onde dans la région (3) est déduite à partir d'un terme de phase e^{iqd} relatif à la translation de la région 1 sur la période d . En conséquence :

$$\psi_3(z) = e^{iqd}\psi_1(z). \quad (\text{II.6})$$

q : étant le vecteur d'onde de Bloch

$$\psi_3(z) = e^{iqd}[A_1 \sin(k_1(z-d)) + B_1 \cos(k_1(z-d))]. \quad (\text{II.7})$$

L'utilisation des conditions de continuité de la fonction d'onde et de sa dérivée pondérée par la masse effective, permet d'écrire :

$$\begin{cases} \psi_1(z=a) = \psi_2(z=a) \\ \frac{1}{m_1} \left. \frac{d\psi_1(z)}{dz} \right|_{z=a} = \frac{1}{m_2} \left. \frac{d\psi_2(z)}{dz} \right|_{z=a} \end{cases} \quad (\text{II.8})$$

$$\begin{cases} \psi_2(z=d) = \psi_3(z=d) \\ \frac{1}{m_2} \left. \frac{d\psi_2(z)}{dz} \right|_{z=d} = \frac{1}{m_1} \left. \frac{d\psi_3(z)}{dz} \right|_{z=d} \end{cases} \quad (\text{II.9})$$

En explicitant les expressions de $\psi(z)$ et $\psi'(z)$, ces conditions se traduisant en un système homogène d'équations linéaires.

$$\begin{pmatrix} \sin(k_1 a) & \cos(k_1 a) & 0 & -1 \\ \frac{k_1}{m_1} \cos(k_1 a) & -\frac{k_1}{m_1} \sin(k_1 a) & -\frac{\beta}{m_2} & 0 \\ 0 & -e^{iqd} & \sin(k_2 b) & \cos(k_2 b) \\ -\frac{k_1}{m_1} e^{iqd} & 0 & \frac{k_2}{m_2} \cos(k_2 b) & -\frac{k_2}{m_2} \sin(k_2 b) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \\ A_2 \\ B_2 \end{pmatrix} = 0. \quad (\text{II.10})$$

Celui-ci admet des coefficients A_i, B_i non nuls dans chaque région, si et seulement si :

$$\begin{vmatrix} \sin(k_1 a) & \cos(k_1 a) & 0 & -1 \\ \frac{k_1}{m_1} \cos(k_1 a) & -\frac{k_1}{m_1} \sin(k_1 a) & -\frac{\beta}{m_2} & 0 \\ 0 & -e^{iqd} & \sin(k_2 b) & \cos(k_2 b) \\ -\frac{k_1}{m_1} e^{iqd} & 0 & \frac{k_2}{m_2} \cos(k_2 b) & -\frac{k_2}{m_2} \sin(k_2 b) \end{vmatrix} = 0 \quad (\text{II.11})$$

Le développement de ce déterminant permet de trouver la relation de dispersion du modèle de Kronig-Penney. Celle-ci s'exprime par :

$$\kappa(E) \equiv \cos(qd) = \cos(k_1 a) \cos(k_2 b) - \frac{1}{2} \left(\frac{m_1 k_2}{m_2 k_1} + \frac{m_2 k_1}{m_1 k_2} \right) \sin(k_1 a) \sin(k_2 b). \quad (\text{II.12})$$

Les ondes permises correspondent à q réel ($|\kappa(E)| < 1$), les ondes interdites correspondent à q imaginaire ($|\kappa(E)| > 1$). Pour rappel q est le vecteur d'onde de Bloch.

II.3 Formule de Poincaré

La formule de Poincaré consiste à introduire une formule récursive qui permet de décrire l'évolution de la fonction d'onde à travers les différents sites [7].

Soient deux couches homogènes (barrière et puit quantique) voisines d'indice j et $j+1$, de masses effectives m_j et m_{j+1} et d'épaisseurs d_j et d_{j+1} respectivement

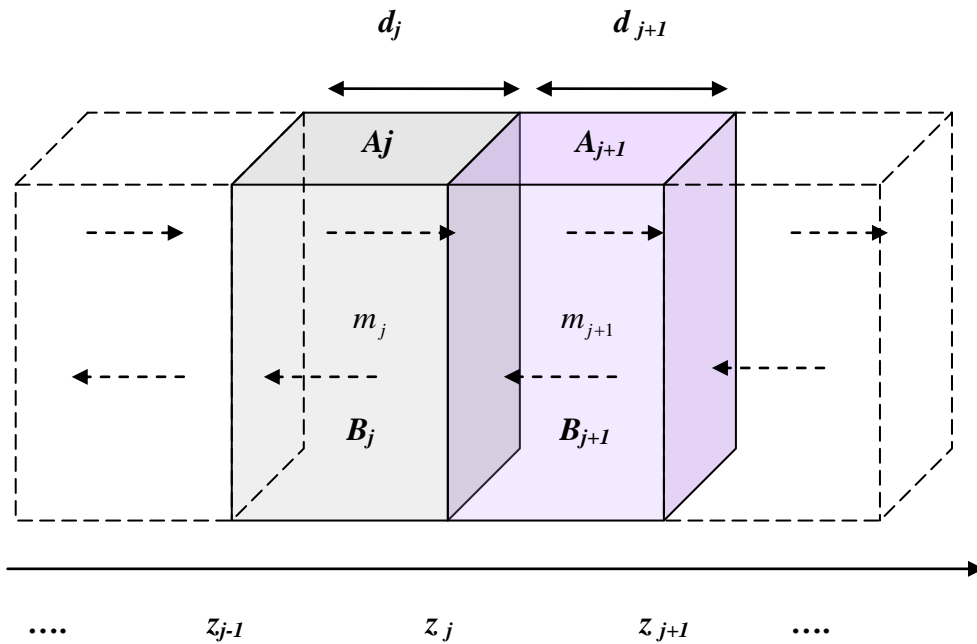


Figure II.2 : Interface entre deux régions successives à masses effectives différentes

La solution de l'équation de Schrödinger et sa dérivée pondérée par la masse effective dans chaque région est donnée par :

$$\psi_j(z) = A_j \exp(ik_j z) + B_j \exp(-ik_j z) \text{ pour } z_{j-1} < z < z_j, \quad (\text{II.13})$$

$$\frac{1}{m_j} \frac{d\psi_j(z)}{dz} = i \frac{k_j}{m_j} A_j \exp(ik_j z) - i \frac{k_j}{m_j} B_j \exp(-ik_j z) \text{ pour } z_{j-1} < z < z_j. \quad (\text{II.14})$$

Posons

$$\Gamma_j(z) = \begin{pmatrix} \psi_j(z) \\ \frac{1}{m_j} \frac{d\psi_j(z)}{dz} \end{pmatrix}. \quad (\text{II.15})$$

et définissons la matrice Wronksien $W_j(z)$ telle que :

$$\Gamma_j(z) = W_j(z) \begin{pmatrix} A_j \\ B_j \end{pmatrix}. \quad (\text{II.16})$$

Où, $W_j(z)$ s'écrit:

$$W_j(z) = \begin{pmatrix} \exp(ik_j z) & \exp(-ik_j z) \\ i \frac{k_j}{m_j} \exp(ik_j z) & -i \frac{k_j}{m_j} \exp(-ik_j z) \end{pmatrix}. \quad (\text{II.17})$$

L'application des conditions de continuité aux interfaces donne :

$$\Gamma_j(z_j) = \Gamma_{j+1}(z_j). \quad (\text{II.18})$$

Sachant que

$$\Gamma_j(z_j) = W_j(z_j) \begin{pmatrix} A_j \\ B_j \end{pmatrix}, \text{ et } \Gamma_j(z_{j+1}) = W_j(z_{j+1}) \begin{pmatrix} A_j \\ B_j \end{pmatrix}. \quad (\text{II.19})$$

Les conditions de raccord entre deux régions successives sont données par

$$\Gamma_{j+1}(z_{j+1}) = S_{j+1}(z_{j+1}, z_j) \Gamma_j(z_j). \quad (\text{II.20})$$

Où la matrice de transfert

$$S_{j+1} = W_{j+1}(z_{j+1}) W_{j+1}^{-1}(z_j). \quad (\text{II.21})$$

A partir de l'expression de la matrice Wronskien (II.17), la matrice de diffusion s'écrit :

$$S_{j+1}(z_{j+1}, z_j) = \begin{pmatrix} \exp(ik_{j+1}z_{j+1}) & \exp(-ik_{j+1}z_{j+1}) \\ i \frac{k_{j+1}}{m_{j+1}} \exp(ik_{j+1}z_{j+1}) & -i \frac{k_{j+1}}{m_{j+1}} \exp(-ik_{j+1}z_{j+1}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \exp(ik_{j+1}z_j) & \exp(-ik_{j+1}z_j) \\ i \frac{k_{j+1}}{m_{j+1}} \exp(ik_{j+1}z_j) & -i \frac{k_{j+1}}{m_{j+1}} \exp(-ik_{j+1}z_j) \end{pmatrix}^{-1}. \quad (\text{II.22})$$

Le développement de la matrice inverse permet d'obtenir :

$$S_{j+1}(z_{j+1}, z_j) = \frac{1}{-2i \frac{k_{j+1}}{m_{j+1}}} \begin{pmatrix} \exp(ik_{j+1}z_{j+1}) & \exp(-ik_{j+1}z_{j+1}) \\ i \frac{k_{j+1}}{m_{j+1}} \exp(ik_{j+1}z_{j+1}) & -i \frac{k_{j+1}}{m_{j+1}} \exp(-ik_{j+1}z_{j+1}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -i \frac{k_{j+1}}{m_{j+1}} \exp(-ik_{j+1}z_j) & -\exp(-ik_{j+1}z_j) \\ -i \frac{k_{j+1}}{m_{j+1}} \exp(ik_{j+1}z_j) & \exp(ik_{j+1}z_j) \end{pmatrix}. \quad (\text{II.23})$$

En posant le terme de phase $\delta_j = k_j d_j$ pour lequel k_j et $d_{j+1} = z_{j+1} - z_j$ représentent le vecteur d'onde dans la région d'indice j et son épaisseur physique respectivement, la matrice de diffusion S s'écrit [11]:

$$S_{j+1}(z_{j+1}, z_j) = \begin{pmatrix} \cos(\delta_{j+1}) & \frac{1}{\frac{k_{j+1}}{m_{j+1}}} \sin(\delta_{j+1}) \\ -\frac{k_{j+1}}{m_{j+1}} \sin(\delta_{j+1}) & \cos(\delta_{j+1}) \end{pmatrix}. \quad (\text{II.24})$$

Cette matrice définit l'évolution de la fonction d'onde de la position z_j à la position z_{j+1} , le long de la couche d'indice $(j+1)$. Par la suite, cette matrice sera notée $S_{j+1}(z_j, z_{j+1}) \equiv S_{j+1}$. Sur deux régions successives soit sur une épaisseur $D_i = d_i + d_{i+1}$, nous pouvons écrire :

$$\Gamma_2(z_2) = S(D_1)\Gamma_0(z_0). \quad (\text{II.25})$$

Où :

$$S(D_1) = S_2 S_1. \quad (\text{II.26})$$

Cette expression décrit l'évolution de la propagation de l'onde entre les positions $z_0 = 0$ et $z_2 = z_0 + D_1$, nous pouvons écrire :

$$S_1 = \begin{cases} \begin{pmatrix} \cos \delta_1 & \frac{m_1}{k_1} \sin \delta_1 \\ -\frac{k_1}{m_1} \sin \delta_1 & \cos \delta_1 \end{pmatrix} & \text{si } E > V_0 \\ \text{ou} \\ \begin{pmatrix} \cosh \bar{\delta}_1 & \frac{m_1}{\rho_1} \sinh \bar{\delta}_1 \\ \frac{\rho_1}{m_1} \sinh \bar{\delta}_1 & \cosh \bar{\delta}_1 \end{pmatrix} & \text{si } E < V_0, \text{ avec } \begin{cases} \delta_1 = k_1 d_1 \\ \delta_2 = k_2 d_2 \\ \bar{\delta}_1 = \rho_1 d_1 \end{cases} \\ \text{et} \\ \begin{pmatrix} \cos \delta_2 & \frac{m_2}{k_2} \sin \delta_2 \\ -\frac{k_2}{m_2} \sin \delta_2 & \cos \delta_2 \end{pmatrix} \end{cases} \quad (\text{II.27})$$

Et

$$\begin{cases} k_1 = \sqrt{\frac{2m_1(E-V)}{\hbar^2}} & \text{si } E > V_0 \\ \rho_1 = \sqrt{\frac{2m_1(V-E)}{\hbar^2}} & \text{si } E < V_0 \\ k_2 = \sqrt{\frac{2m_2 E}{\hbar^2}} \end{cases} \quad (\text{II.28})$$

Les éléments de $S(D_1)$ sont donnés par :

$$S(D_1) = \begin{cases} \left\{ \begin{array}{l} S_{11} = \cos \delta_1 \cos \delta_2 - \frac{m_1 k_2}{m_2 k_1} \sin \delta_1 \sin \delta_2 \\ S_{12} = \frac{m_2}{k_2} \cos \delta_1 \sin \delta_2 + \frac{m_1}{k_1} \sin \delta_1 \cos \delta_2 \\ S_{21} = -\frac{k_1}{m_1} \sin \delta_1 \cos \delta_2 - \frac{k_2}{m_2} \cos \delta_1 \sin \delta_2 \\ S_{22} = \cos \delta_1 \cos \delta_2 - \frac{m_2 k_1}{m_1 k_2} \sin \delta_1 \sin \delta_2 \end{array} \right. & \text{si } E > V_0 \\ \text{ou} & \\ \left\{ \begin{array}{l} S_{11} = \cosh \bar{\delta}_1 \cos \delta_2 - \frac{m_1 k_2}{m_2 \rho_1} \sinh \bar{\delta}_1 \sin \delta_2 \\ S_{12} = \frac{m_2}{k_2} \cosh \bar{\delta}_1 \sin \delta_2 + \frac{m_1}{\rho_1} \sinh \bar{\delta}_1 \cos \delta_2 \\ S_{21} = \frac{\rho_1}{m_1} \sinh \bar{\delta}_1 \cos \delta_2 - \frac{k_2}{m_2} \cosh \bar{\delta}_1 \sin \delta_2 \\ S_{22} = \cosh \bar{\delta}_1 \cos \delta_2 + \frac{m_2 \rho_1}{m_1 k_2} \sinh \bar{\delta}_1 \sin \delta_2 \end{array} \right. & \text{si } E < V_0 \end{cases} \quad (II.29)$$

Nous pouvons ainsi vérifier que

$$\frac{1}{2} Tr(S) = \begin{cases} \cos \delta_1 \cos \delta_2 - \frac{1}{2} \left(\frac{m_2 k_1}{m_1 k_2} + \frac{m_1 k_2}{m_2 k_1} \right) \sin \delta_1 \sin \delta_2 & E > V_0 \\ \cosh \bar{\delta}_1 \cos \delta_2 - \frac{1}{2} \left(\frac{m_1 k_2}{m_2 \rho_1} - \frac{m_2 \rho_1}{m_1 k_2} \right) \sinh \bar{\delta}_1 \sin \delta_2 & E < V_0 \end{cases} \quad (II.30)$$

Cette équation est d'une grande importance. Celle-ci permet de relier la structure de bandes (telle que identifiée dans le modèle de Kronig-Penney) aux éléments de la matrice S , relative à une période [11].

$$\frac{1}{2} Tr(S) = \cos(qd) \quad (II.31)$$

D'autre part, les éléments de la matrice $S(D_1)$ peuvent s'écrire sous la forme [11]:

$$f_2 = S_{11}(D_1)f_0 + S_{12}(D_1)f'_0 \quad (II.32)$$

$$f'_2 = S_{21}(D_1)f_0 + S_{22}(D_1)f'_0 \quad (II.33)$$

Où

$$f_n = \psi_n(z_n) \quad \text{et} \quad f'_n = \frac{1}{m_n} \frac{d\psi_n(z)}{dz} \Big|_{z=z_n}. \quad (\text{II.34})$$

En éliminant les expressions des dérivées, nous pouvons obtenir la relation de Poincaré. Celle-ci prend la forme d'une relation tri-réursive reliant les fonctions d'ondes $f(z)$ sur une période de translation:

$$f_4 = [S_{11}(D_2) + \frac{S_{12}(D_2)}{S_{12}(D_1)} S_{22}(D_2)] f_2 + \frac{S_{12}(D_2)}{S_{12}(D_1)} [S_{12}(D_1) S_{12}(D_1) - S_{11}(D_1) S_{22}(D_1)] f_0. \quad (\text{II.35})$$

Aussi, sachant que le det $[S(D_1)] = 1$,

$$f_4 = [S_{11}(D_2) + \frac{S_{12}(D_2)}{S_{12}(D_1)} S_{22}(D_2)] f_2 - \frac{S_{12}(D_2)}{S_{12}(D_1)} f_0. \quad (\text{II.36})$$

En remplaçant chaque indice pair $i=2N$ par le nombre de période N correspondant, la matrice d'évolution P_{12} définie par

$$\begin{pmatrix} f_2 \\ f_1 \end{pmatrix} = P_{12} \begin{pmatrix} f_1 \\ f_0 \end{pmatrix}, \quad (\text{II.37})$$

S'écrit :

$$P_{12} = \begin{pmatrix} S_{11}(D_1) + \frac{S_{12}(D_2)}{S_{12}(D_1)} S_{22}(D_2) & -\frac{S_{12}(D_2)}{S_{12}(D_1)} \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (\text{II.38})$$

Or comme dans un ordre parfait, les éléments de matrices S_{11} et S_{12} sont identiques sur les épaisseurs D_1 et D_2 respectivement

$$\frac{S_{12}(D_1)}{S_{12}(D_2)} = 1, \quad \text{et} \quad S_{11}(D_1) = S_{11}(D_2). \quad (\text{II.39})$$

La matrice de translation $P_D = P_{12}|_{D_1=D_2}$ définie sur une période D est donnée par :

$$P_D = \begin{pmatrix} S_{11}(D) + S_{22}(D) & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \text{Tr}(S_D) & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (\text{II.40})$$

$$P_D = \begin{pmatrix} 2\kappa & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 \left\{ \cos(\delta_1) \cos(\delta_2) - \frac{1}{2} \left(\frac{m_2 k_1}{m_1 k_2} + \frac{m_1 k_2}{m_2 k_1} \right) \sin(\delta_1) \sin(\delta_2) \right\} & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (\text{II.41})$$

Cette matrice dépendra aussi de $\kappa = \cos(qd)$. Ce terme représente la relation de dispersion du modèle de Kronig-Penney.

II.4 Energies de résonance

Dans le modèle des liaisons fortes, la fonction d'onde cristalline est décrite sur la base des fonctions d'onde locales telles que définie sur chaque site. En partant sur des interactions avec les premiers plus proches voisins, l'équation de Schrödinger donne [18] :

$$(E - \varepsilon)c_n - V(c_{n+1} + c_{n-1}) = 0. \quad (\text{II.42})$$

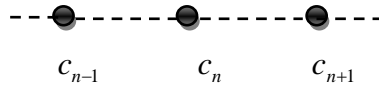


Figure II.3 : représentations de trois sites successifs de la chaîne 1D.

Où ε est l'énergie de chaque site, c_n et $c_{n\pm 1}$ sont les amplitudes de probabilités des sites n et $n\pm 1$ et V est le terme de couplage entre les deux sites successifs. De manière équivalente, l'équation (II.42) prend une forme matricielle

$$\begin{pmatrix} c_{n+1} \\ c_n \end{pmatrix} = P_n \begin{pmatrix} c_n \\ c_{n-1} \end{pmatrix}, \quad (\text{II.43})$$

et

$$P_n = \begin{pmatrix} \frac{E - \varepsilon}{V} & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (\text{II.44})$$

Où P_n est la matrice d'évolution reliant les amplitudes de probabilités de présence sur trois sites successifs : c_n et $c_{n\pm 1}$. Sur N sites, la matrice $P(N)$ est donnée par

$$\begin{pmatrix} c_{N+1} \\ c_N \end{pmatrix} = P(N) \begin{pmatrix} c_1 \\ c_0 \end{pmatrix}, \quad (\text{II.45})$$

$$P(N) = P_N P_{N-1} \dots P_1. \quad (\text{II.46})$$

Celle-ci s'écrira :

$$P(2) = \begin{pmatrix} \left(\frac{E-\varepsilon}{V}\right)^2 - 1 & -\left(\frac{E-\varepsilon}{V}\right) \\ \left(\frac{E-\varepsilon}{V}\right) & 1 \end{pmatrix}, \quad (\text{II.47})$$

et

$$P(3) = \begin{pmatrix} \left(\frac{E-\varepsilon}{V}\right)\left(\left(\frac{E-\varepsilon}{V}\right)^2 - 1\right) - \left(\frac{E-\varepsilon}{V}\right) & -\left(\left(\frac{E-\varepsilon}{V}\right)^2 - 1\right) \\ \left(\left(\frac{E-\varepsilon}{V}\right)^2 - 1\right) & 1 \end{pmatrix}, \quad (\text{II.48})$$

pour $N = 2$ et 3 respectivement. De manière générale :

$$P(N) = \begin{pmatrix} a_N & -a_{N-1} \\ a_{N-1} & a_{N-2} \end{pmatrix}, \quad (\text{II.49})$$

où

$$a_N = \left(\frac{E-\varepsilon}{V}\right) a_{N-1} - a_{N-2}. \quad (\text{II.50})$$

En tenant compte des conditions initiales : $a_0=1$ et $a_{-1}=0$. Dans le cas où la matrice d'évolution provient de la formule de Poincaré, le terme a_N s'exprime par :

$$a_N = 2\kappa a_{N-1} - a_{N-2}. \quad (\text{II.51})$$

En tenant compte des amplitudes de transmission et réflexion respectivement (t) et (r), Les amplitudes de probabilités de chaque site sont données par :

$$c_n = \begin{cases} z^n + rz^{-n} & \text{si } n \leq 1 \\ tz^n & \text{si } n \geq N+1 \end{cases}, \quad (\text{II.52})$$

où $z = \exp(ik)$. Selon Wu et al. L'amplitude de réflexion r est donnée par [18] :

$$r = -z^{2N} \frac{\alpha^T \Gamma P(N) \alpha}{\alpha^T \Gamma P(N) \alpha^*}. \quad (\text{II.53})$$

$\Gamma = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}$, le vecteur $\alpha = \begin{pmatrix} z \\ 1 \end{pmatrix}$ et α^T est le transposé de α . La condition de résonance correspond à un coefficient de réflexion nul. Ceci n'est vrai que si la matrice :

$$\Gamma P(N) = \begin{pmatrix} a_{N-1} & -a_{N-2} \\ -a_N & a_{N-1} \end{pmatrix}. \quad (\text{II.54})$$

Est antisymétrique. Pour cela, il suffit de poser :

$$a_N + a_{N-2} = 0, \quad (\text{II.55})$$

Et par conséquence $a_{N-1} = 0$. Nous pouvons ainsi dire que pour $N+1$ sites la condition de résonance s'écrit :

$$a_N = 0. \quad (\text{II.56})$$

De manière générale, cette condition permettra de déterminer toutes les énergies de résonance dans un super réseau.

II.5 Matrice de transfert pour les structures 1D (super réseaux)

Dans cette partie, nous décrivons le formalisme de la matrice de transfert. Ce formalisme est adéquat pour la description des propriétés de transmission des structures multicouches dont le nombre de périodes est fini. Nous allons expliciter le coefficient de transmission, afin d'exprimer la longueur de localisation, qui traduit l'extension spatiale de la fonction d'onde le long du système. Sur cette échelle de longueur, la reproduction successive des conditions de continuité permettra de décrire la propagation de l'onde à travers l'ensemble des N puits quantiques depuis le milieu d'incidence en $z = 0$ vers le milieu d'émergence $z = z_N = L$. Ceci est décrit par l'équation suivante [7,11] :

$$\Gamma_0(z_0) = S(N)\Gamma_N(z_N). \quad (\text{II.57})$$

Pour laquelle la matrice globale de diffusion $S(N)$, relative à N périodes est donnée par :

$$S(N) = \prod_{j=1}^N S(D_j), \quad (\text{II.58})$$

sachant que

$$\Gamma_j(z_j) = W_j(z_j) \begin{pmatrix} A_j \\ B_j \end{pmatrix}. \quad (\text{II.59})$$

Les amplitudes dans les milieux d'émergence et d'incidence sont reliées par

$$\begin{pmatrix} A_i \\ B_i \end{pmatrix} = M(N) \begin{pmatrix} A_s \\ B_s \end{pmatrix}, \quad (\text{II.60})$$

où $M(N)$ est la matrice globale de transfert. Celle-ci est obtenue par :

$$M(N) = W_i^{-1}(z_0) S(N) W_s(z_{N+1}), \quad (\text{II.61})$$

avec

$$W_i^{-1}(z_0) = \frac{m_i}{-2ik_i} \begin{pmatrix} \frac{-ik_i}{m_i} & -1 \\ -ik_i & m_i \end{pmatrix}, \text{ et } W_s(z_{N+1}) = \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ ik_s & m_s \end{pmatrix}. \quad (\text{II.62})$$

Cette expression est générale. Elle permet de décrire la propagation de l'onde en fonction des paramètres intrinsèques de chaque partie de la structure. Des réponses de transmission (telles que le coefficient de la transmission, la longueur de localisation.), peuvent ainsi être aisément déterminés. Pour cela, nous développons les éléments de la matrice de transfert comme suit :

$$\begin{cases} M_{11} = \frac{1}{2} \left(S_{11} + \frac{k_s m_i}{k_i m_s} S_{22} + i \left(\frac{k_s}{m_s} S_{12} - \frac{m_i}{k_i} S_{21} \right) \right) \\ M_{12} = \frac{1}{2} \left(S_{11} - \frac{k_s m_i}{k_i m_s} S_{22} - i \left(\frac{k_s}{m_s} S_{12} + \frac{m_i}{k_i} S_{21} \right) \right) \\ M_{21} = \frac{1}{2} \left(S_{11} - \frac{k_s m_i}{k_i m_s} S_{22} + i \left(\frac{k_s}{m_s} S_{12} - \frac{m_i}{k_i} S_{21} \right) \right) \\ M_{22} = \frac{1}{2} \left(S_{11} + \frac{k_s m_i}{k_i m_s} S_{22} - i \left(\frac{k_s}{m_s} S_{12} + \frac{m_i}{k_i} S_{21} \right) \right) \end{cases}, \quad (\text{II.63})$$

ces éléments vérifient $M_{22} = M_{11}^*$ et $M_{21} = M_{12}^*$. En imposant au niveau de collecteur qu'il n'y a pas d'une onde qui vient de l'infinie $z = +\infty$, le système d'équation (II. 60) devient :

$$\begin{cases} A_i = M_{11} A_s \\ B_i = M_{12} A_s \end{cases}. \quad (\text{II.64})$$

Par conséquent, les amplitudes de transmission et de réflexion t et r sont obtenues à partir de:

$$\begin{cases} t = \frac{A_s}{A_i} = \frac{1}{M_{11}} \\ r = \frac{B_i}{A_i} = \frac{1}{M_{21}} \end{cases}. \quad (\text{II.65})$$

Sachant que, la densité de probabilité des particules s'exprime par :

$$J(z) = \frac{i\hbar}{2m} \left(\psi \frac{d\psi^*}{dz} - \psi^* \frac{d\psi}{dz} \right), \quad (\text{II.66})$$

Le coefficient de transmission est défini à partir du rapport entre la densité de probabilité des particules transmises J_s dans le milieu d'émergence et la densité de probabilité des particules incidentes J_i depuis le milieu d'incidence :

$$T = \frac{J_s}{J_i}. \quad (\text{II.67})$$

Pour les ondes planes, la densité de probabilité relative à ces ondes s'écrit par :

$$J = \frac{\hbar k}{m} |A|^2. \quad (\text{II.68})$$

Par conséquent le coefficient de transmission T est donné par :

$$T = \frac{\frac{\hbar k_s}{m_s} |A_s|^2}{\frac{\hbar k_i}{m_i} |A_i|^2}. \quad (\text{II.69})$$

En supposant que les masses et le vecteur d'ondes des régions incidence et émergence sont toutes identiques, le coefficient de transmission d'un système multi-couches est donné par :

$$T = \frac{2}{(S_{11} + S_{22})^2 + \left(\frac{k_0}{m_0} S_{12} - \frac{m_s}{k_s} S_{21} \right)^2}. \quad (\text{II.70})$$

Cette expression dépend seulement des éléments de la matrice de diffusion globale S .

La détermination du coefficient de transmission conduit au coefficient de Lyapunov $\gamma = \frac{1}{\xi}$

ou ξ la longueur de localisation. Estimée par rapport à la longueur du système.

$$\frac{L}{\xi} = \frac{1}{2} \log(T). \quad (\text{II.71})$$

Le coefficient de Lyapunov normalisé permet de définir l'extension spatiale de la fonction d'onde par rapport à la longueur du système. La valeur critique

$$\left. \frac{L}{\xi} \right|_{\xi=\xi_c} = 1, \quad (\text{II.72})$$

séparera les modes localisés des modes délocalisés.

II.6 Conclusion

L'utilisation du théorème de Bloch dans les conditions de continuité périodiques appliquées à un motif permet de définir la relation de dispersion dans le modèle de Kronig-Penney.

La formule de Poincaré est une représentation récursive de la résolution de l'équation de Schrödinger sur les sites successifs d'une structure aussi bien ordonnée que désordonnée. L'évolution de la fonction d'onde sur ces sites successifs permet de définir une matrice d'évolution P . En présence de l'ordre parfait (y compris à courte échelle), une relation de récurrence permet d'identifier les énergies de résonance en fonction du terme de d'interaction entre premiers plus poches voisins.

Le formalisme de matrice de transfert permet de calculer le coefficient de transmission. La propagation de l'onde est gouvernée par la matrice de diffusion globale S et les conditions aux interfaces avec l'émetteur et le collecteur.

Chapitre III

Résultats et discussion

Sommaire

III.1 Introduction	46
III.2 Système ordonné	47
a- La structure simple période	47
b- La structure double période.....	48
c- Structure à N périodes (N étant fini)	51
d- L'influence de largeur de puits.....	57
III.3 Système désordonné.....	58
a- Non corrélation et corrélation de désordre (intra-bande)	58
1- Corrélation de désordre en dimère.....	58
2- Corrélation de désordre en trimère	60
b- Non corrélation et corrélation de désordre (inter-bande)	62

III.1 Introduction

Dans cette partie, nous étudions les propriétés de transmission des hétérostructures en utilisant le formalisme de la matrice de transfert. Dans notre démarche, nous avons jugé utile de commencer par les approches fondamentales menant aux propriétés de transmission dans les super réseaux. Nous montrons comment aboutir à une structure de bandes à partir de l'étude de propriété de transmission d'une structure résonante double période. Des correspondances avec les autres modèles mathématiques sont aussi présentées dans le but de mettre en évidence la complémentarité entre ces différentes approches.

Quant au désordre, nous nous sommes intéressés aux systèmes binaires avec et sans corrélation de désordre à courte portée [19]. Ceci nous amène à décrire les modèles des dimères et trimères aléatoires. Nous montrons les conditions conventionnelles d'apparition des résonances en se basant essentiellement sur les relations de dispersion du modèle de Kronig – Penney relative à chaque motif. Les résonances sont intra- bandes.

Enfin, nous présentons la possibilité de composer entre deux motifs résonants dans une approche inter bandes. Dans cette approche originale, il est question d'adapter les conditions de résonances généralisée à cette situation afin d'identifier la nouvelle condition d'apparition de la résonance de commutation inter bande qui en découle. Une perspective clos ce chapitre.

III.2 Système ordonné

a- La structure simple période

Dans une structure simple période, nous considérons une barrière de potentiel (de hauteur V_0 et d'épaisseur L_B) et un puits quantique, dont la profondeur est égale à celle de l'émetteur et du collecteur [11].

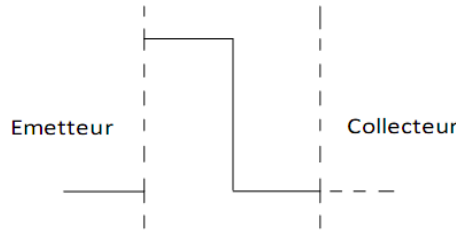


Figure III.1 : motif d'une structure rectangulaire.

La barrière de potentiel de hauteur V_0 définit un vecteur d'onde k_B , alors que la région du puits quantique définit un vecteur d'onde k_P tels que

$$\begin{cases} k_B = \sqrt{\frac{2m_B(E-V)}{\hbar^2}} & \text{si } E > V_0 \\ \rho_B = \sqrt{\frac{2m_B(V-E)}{\hbar^2}} & \text{si } E < V_0, \\ k_P = \sqrt{\frac{2m_P E}{\hbar^2}} \end{cases} \quad (\text{III.1})$$

L'application des conditions de continuité aux interfaces permet de relier de part et d'autre de la barrière de potentiel, les fonctions d'ondes transmises et incidentes.

Le coefficient de transmission $T(E)$ est donnée par :

$$T(E) = \begin{cases} \frac{1}{1 + \frac{1}{4} \left(\frac{k_P m_B}{\rho_B m_P} + \frac{\rho_B m_P}{k_P m_B} \right)^2 \sinh^2 \bar{\delta}_B} & E < V_0 \\ \frac{1}{1 + \frac{1}{4} \left(\frac{k_P m_B}{k_B m_P} - \frac{k_B m_P}{k_P m_B} \right)^2 \sin^2 \delta_B} & E > V_0 \end{cases} \quad (\text{III.2})$$

où les termes de phase $\delta_B = k_B L_B$ et $\bar{\delta}_B = k_B \rho_B$.

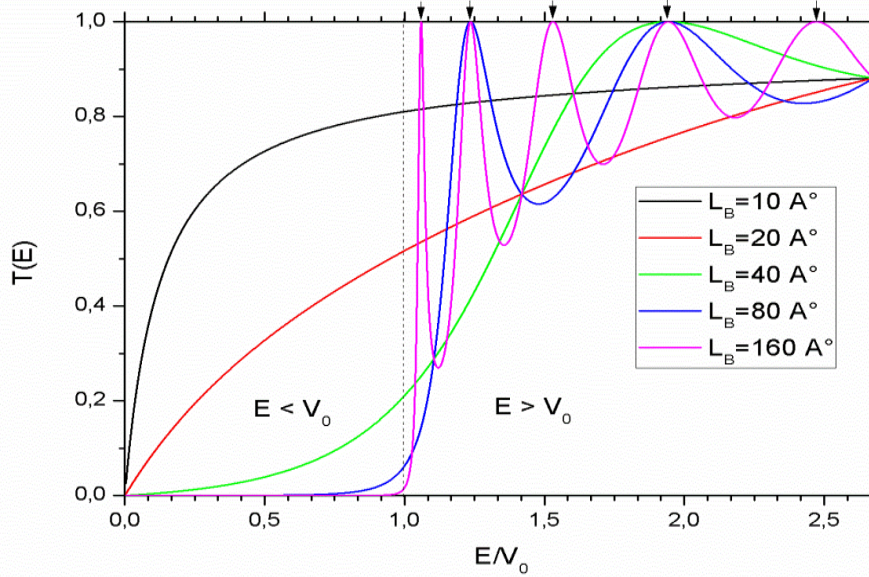


Figure III.2 : la probabilité de transmission en fonction de l'énergie relative au un seul motif de $L_p = 90 \text{ \AA}$ et $V_0 = 0.26 \text{ eV}$, et pour différentes épaisseur de barrière.

La figure III.2 montre le coefficient de transmission pour différentes épaisseur de barrière, $L_B = 10, 20, 40, 80, 160 \text{ \AA}$: Lorsque $E < V_0$, la probabilité de transmission est différente de zéro : celle-ci est considérable pour les barrières fine et devient faible au fur et à mesure que la barrière est de plus en plus épaisses [11].

Par ailleurs, lorsque l'énergie est supérieure à la hauteur de barrière $E > V_0$, le coefficient de transmission fluctue donnant lieu à des pics résonants $T_n = 1$ (indiqués par des flèches). Ces états résonants apparaissent à chaque fois que $\delta_B = k_B L_B = n\pi$ [11]. Pour une épaisseur de barrière très importante $L_B = 160 \text{ \AA}$, les trois premières résonances se positionnent aux énergies :

$$\delta_B = 1\pi \Rightarrow E_{r_1} = 1.0589 \text{ eV.}$$

$$\delta_B = 2\pi \Rightarrow E_{r_2} = 1.2357 \text{ eV.}$$

$$\delta_B = 3\pi \Rightarrow E_{r_3} = 1.5304 \text{ eV.}$$

b- La structure double période

Une structure double période consiste à juxtaposer un motif supplémentaire à la structure précédente :

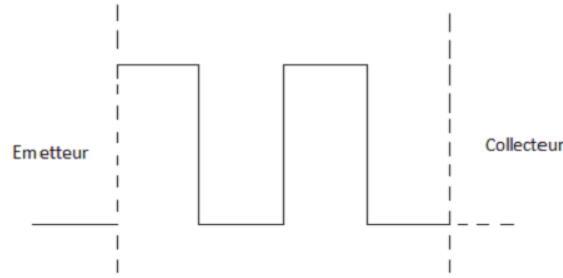


Figure III.3: une structure de double période

Le coefficient de transmission peut se mettre sous la forme [11]:

$$T(E) = \frac{1}{1 + \frac{1}{4} \left(\frac{\sin(2qd)}{\sin(qd)} \right)^2 \left(\frac{k_p m_B}{\rho_B m_P} + \frac{\rho_B m_P}{k_p m_B} \right)^2 \sinh^2 \bar{\delta}_B}, \quad (\text{III.3})$$

où l'épaisseur de motif est notée d , q représente le vecteur d'onde.

Dans cette expression nous notons l'apparition du terme $\left(\frac{\sin(2qd)}{\sin(qd)} \right)$ dans le dénominateur.

L'annulation de ce terme fournit au système des résonances lorsque $E < V_0$. Pour les paramètres : $L_B = 30 \text{ \AA}$, $L_P = 90 \text{ \AA}$ et $V_0 = 0.26 \text{ eV}$, la probabilité de transmission $T(E)$ est illustrée sur la figure III.4

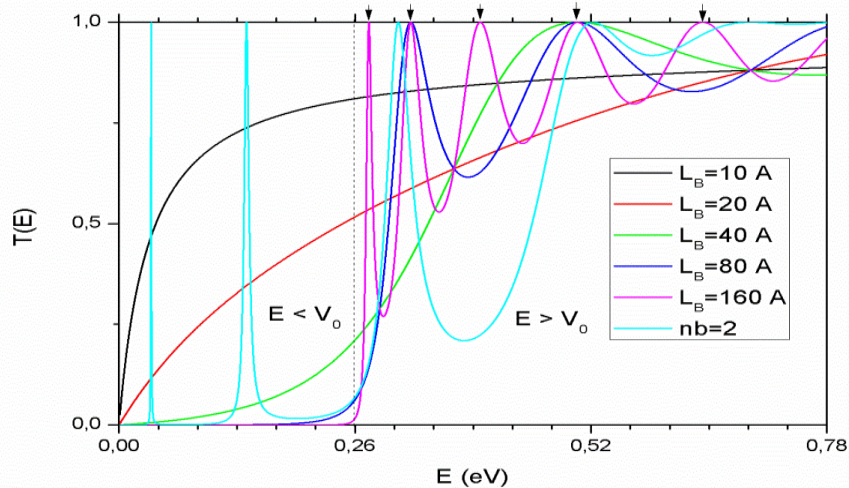


Figure III.4: correspondance entre le coefficient de transmission de double périodes et simple période

Deux pics de transmission unité apparaissent aux énergies de résonance $E_{r1} \approx 0.03 \text{ eV}$ et $E_{r2} \approx 0.13 \text{ eV}$. Physiquement l'apparition de ces états est due au phénomène de la

rétrodiffusion quantique sur la deuxième barrière de potentiel. Des interférences constructives vont créer des ondes confinées dans le puit quantique [11].

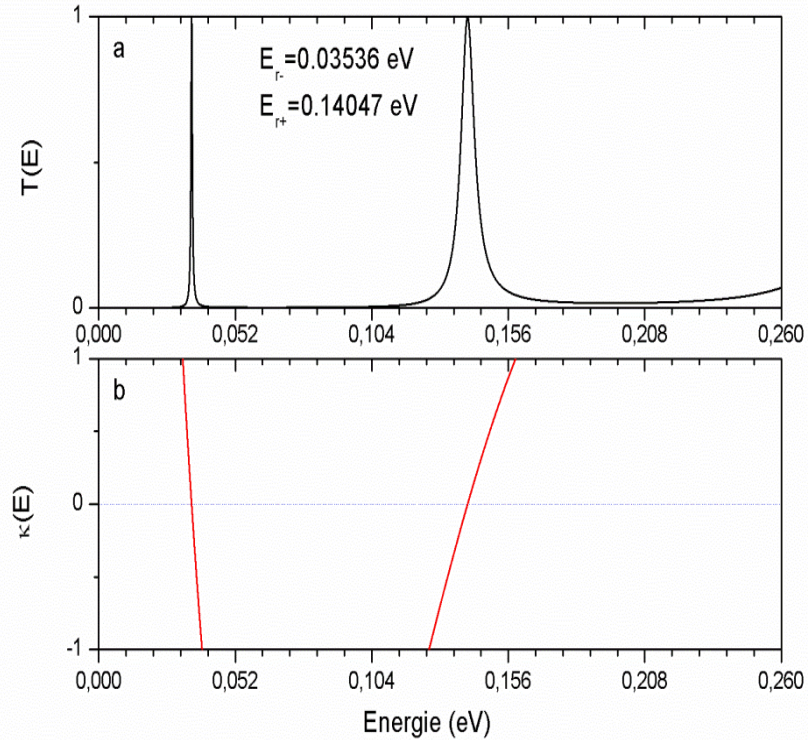


Figure III.5: la correspondance entre le coefficient de transmission (a) de double période, et l'équation caractéristique de Kronig – penney (b) de la simple période.

D'autre part , sachant que

$$\cos(qd) = \frac{1}{2} \text{Tr}(M). \quad (\text{III.4})$$

M étant la matrice de transfert relative a une periode , nous pouvons corréler les pics de transmission à la relation de dispersion du modèle de Kronig-Penney tel que $\cos qd = 0$ [11].

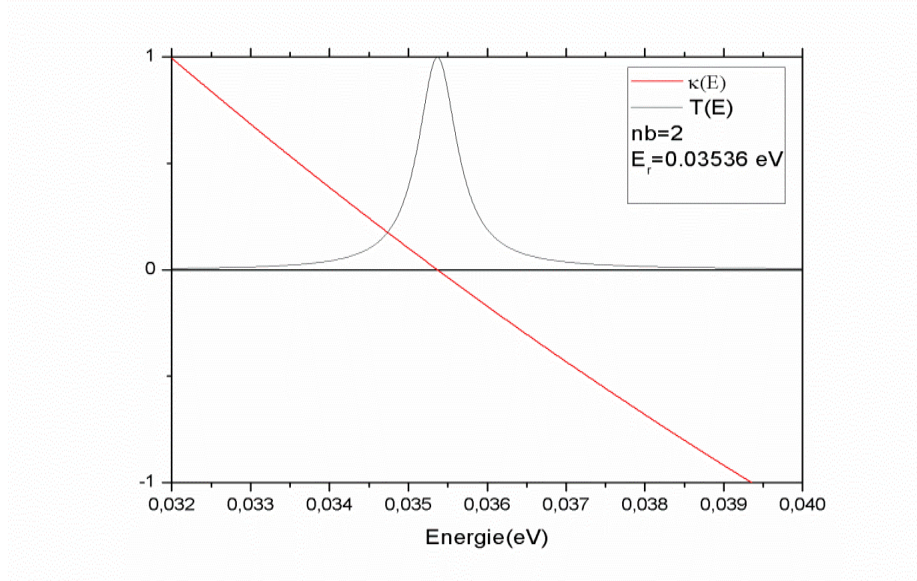


Figure III.6 : le coefficient de transmission d'une structure double période VS la relation de dispersion du modèle de Kronig-Penney, cette relation est vérifiée conformément à l'équation III.3.

c- Structure à N périodes (N fini)

Un super réseau est construit à partir de l'arrangement ordonné d'un motif sur N périodes consécutives. Soit \bar{S} la matrice de diffusion globale du super réseau, celle-ci est donnée par :

$$\bar{S} = S_1 S_2 \dots S_N = S^N \quad (\text{III.5})$$

Chebyshev a trouvé par récurrence la formule générale de la matrice de diffusion globale à partir les caractéristiques de la matrice de diffusion d'un seul motif [11].

$$\bar{S} = \begin{pmatrix} (U_{N-1} - U_{N-2})S_{11} & U_{N-1}S_{12} \\ U_{N-1}S_{21} & (U_{N-1} - U_{N-2})S_{22} \end{pmatrix}, \quad (\text{III.6})$$

avec

$$U_N = \left(\frac{\sin(Nqd)}{\sin(qd)} \right), \quad \text{et} \quad S_1 = S = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{pmatrix} \quad (\text{III.7})$$

Après le remplacement des éléments de la matrice de diffusion globale \bar{S} le coefficient de transmission cité précédemment s'écrit [11]:

$$T(E) = \frac{1}{1 + \frac{1}{4} (U_N)^2 \left(\frac{k_P m_B}{\rho_B m_P} + \frac{\rho_B m_P}{k_P m_B} \right)^2 \sinh^2 \bar{\delta}_B} \quad (\text{III.8})$$

De même que le cas précédent, le terme (U_N) est responsable de l'apparition de résonances quand il s'agit d'une structure à N périodes. L'étude de la probabilité de transmission pour les paramètres $L_B = 30 \text{ \AA}$, $L_P = 90 \text{ \AA}$ et $V_0 = 0.26 \text{ eV}$ sont représenté sur la figure III.7. Les conditions de résonances ($U_N = 0$) sont développées et résumées dans le tableau suivant.

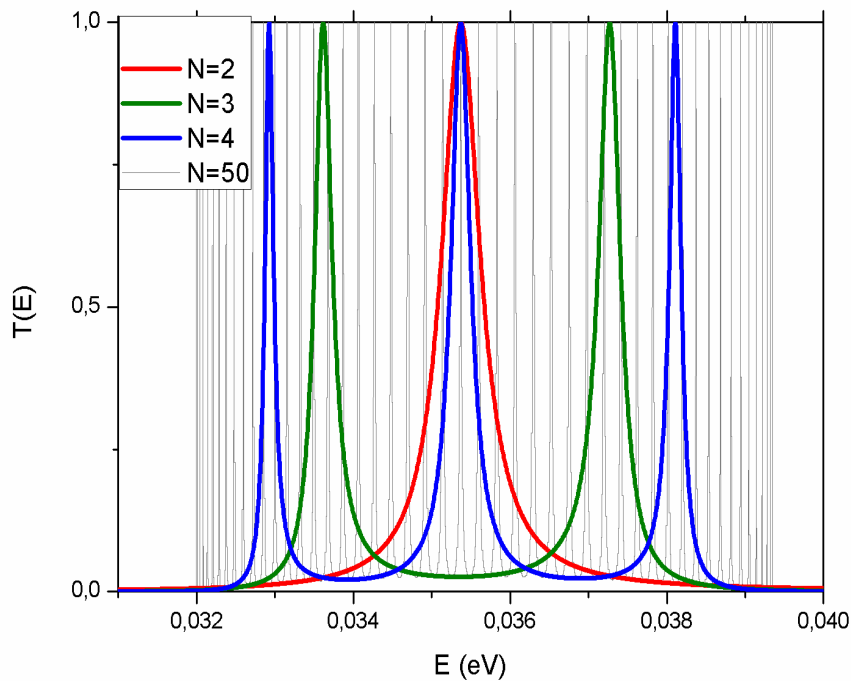


Figure III.7: T (E) pour N périodes.

N	U_N	condition	Solution	état	motif
1	$U_1 \neq 0$				monomère
2	$U_2 = 0$	$\cos(qd) = 0$	$qd = \frac{\pi}{2}$	singulet	dimère
3	$U_3 = 0$	$\cos(qd) = +\frac{1}{2}$	$qd = \frac{\pi}{3}$	doublet	trimère
		$\cos(qd) = -\frac{1}{2}$	$qd = \frac{2\pi}{3}$		
4	$U_4 = 0$	$\cos(qd) = +\frac{1}{\sqrt{2}}$	$qd = \frac{1\pi}{4}$	triplet	quadrimère
		$\cos(qd) = 0$	$qd = \frac{2\pi}{4}$		
		$\cos(qd) = -\frac{1}{\sqrt{2}}$	$qd = \frac{3\pi}{4}$		
La généralisation sur N périodes					
N	$U_N = 0$		$qd = \frac{1\pi}{N}$ $qd = \frac{2\pi}{N}$ \vdots $qd = \frac{(N-1)\pi}{N}$		N-mère

Tableau III.1: les conditions de résonance relatives à la formule de Chebyshev [11].

Ainsi, nous pouvons vérifier que pour un super réseau de N périodes, il existe $N-1$ résonances possibles conformément à la condition générale :

$$qd = \frac{n\pi}{N} \Big|_{n=1,2,\dots,N-1} \quad (\text{III.9})$$

L'apparition des pics de résonances est en accord avec $\kappa = \cos(qd)$. La disposition des pics secondaires ($N=3$, $N=4$, ...) autour du singulet ($N=2$) décrit l'effet d'éclatement de l'état principal en interaction avec le pic principal voisin dans le super réseau. [20].

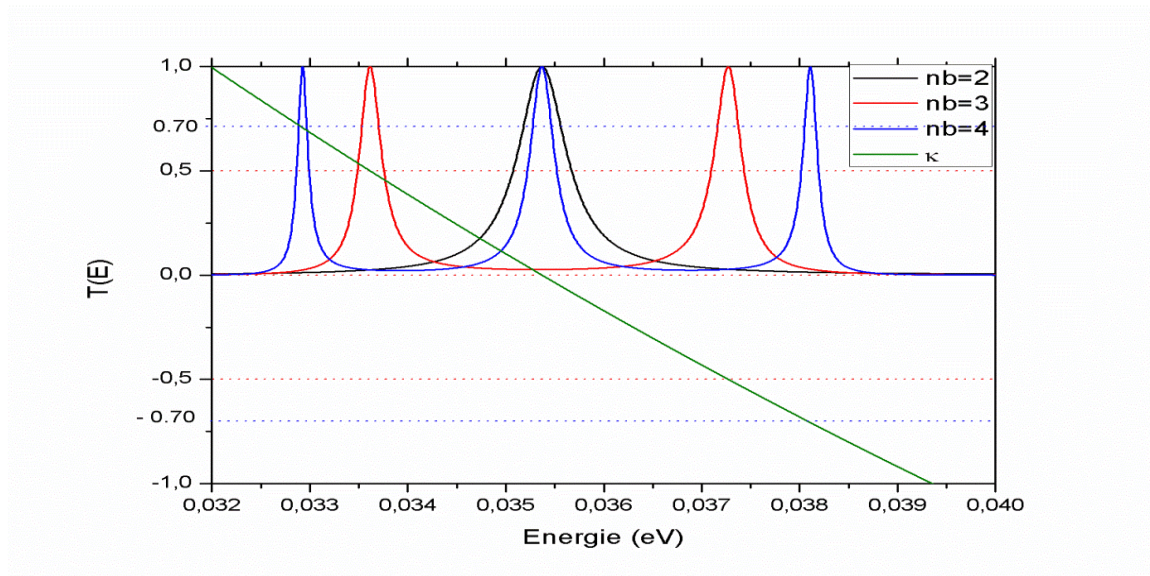


Figure III.8: la probabilité de transmission pour différents nombres de motif

Estimation du terme de couplage V

La relation itérative (équation II.50), développée précédemment permet d'identifier les résonances dans une structure à $(N+1)$ périodes. La condition de résonance est donnée par $a_N = 0$ [équation II.56].

Nous avons développé cette condition afin de pouvoir situer les niveaux résonants par rapport au singulet principal et d'estimer numériquement par la même occasion le terme de couplage V (terme d'interaction entre premiers plus proches voisins).

$N+1$	a_N	condition	Energies de résonance	$V (eV)$
0	a_{-1}	$a_{-1} = 0$		
1	a_0	$a_0 = 1$		
2	a_1	$\left(\frac{E-\varepsilon}{V}\right) a_0 - a_{-1} = 0$	$E = \varepsilon$	
3	a_2	$\left(\frac{E-\varepsilon}{V}\right) a_1 - a_0 = 0$	$E_+ = \varepsilon + V$	0.00182
			$E_- = \varepsilon - V$	
4	a_3	$\left(\frac{E-\varepsilon}{V}\right) a_2 - a_1 = 0$	$E_+ = \varepsilon + \sqrt{2}V$	0.00183
			$E = \varepsilon$	
			$E_- = \varepsilon - \sqrt{2}V$	
Tableau III.2 : les énergies de résonance et le terme d'interaction V .				

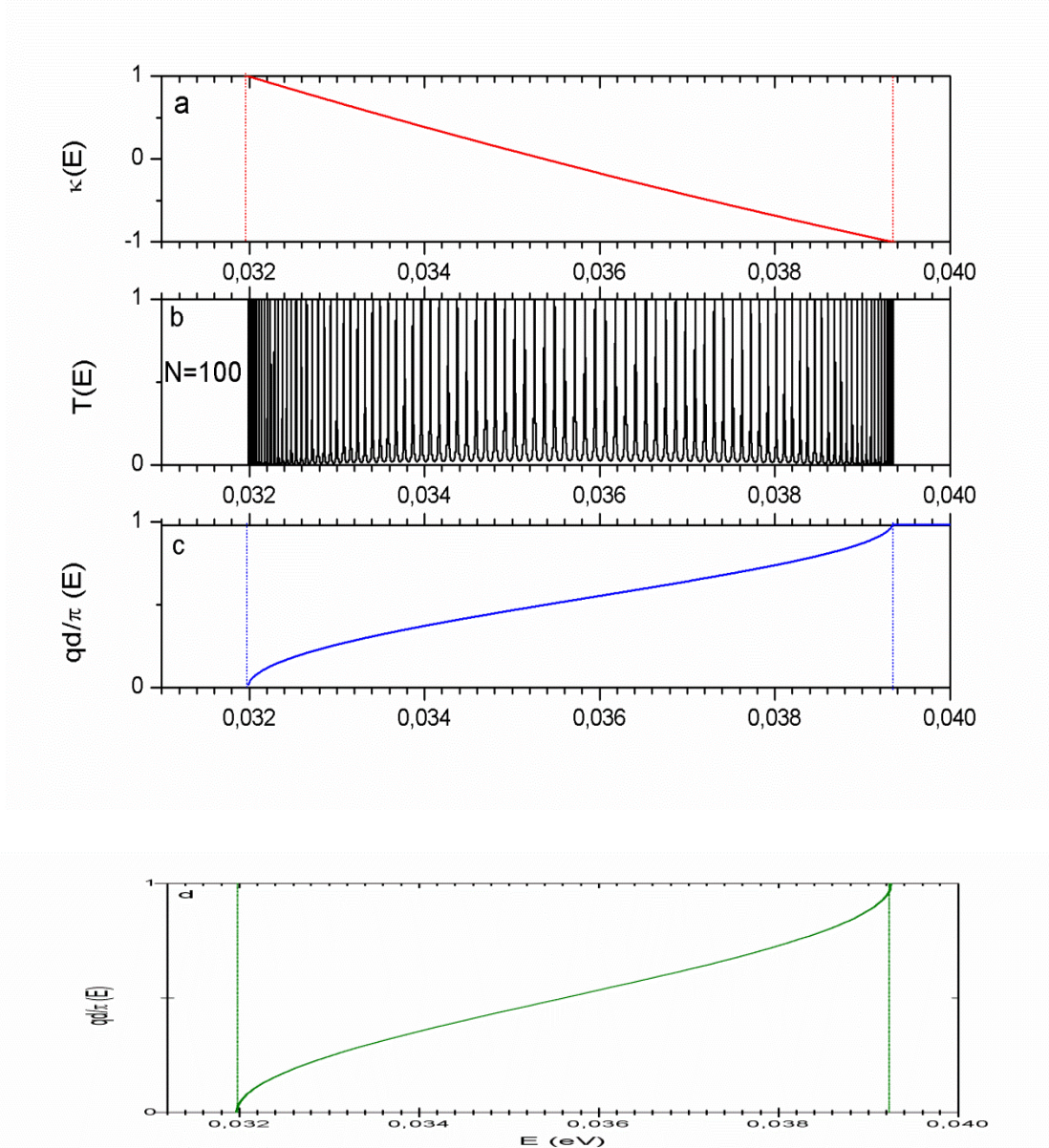


Figure III.9: Correspondance entre, (a) l'équation caractéristique du modèle de Kronig – Penney, (b) le coefficient de transmission, (c) la structure de bande relative au modèle de Kronig – Penney et (d) la structure de bande relative au modèle de liaisons fortes (d). $N = 100$ périodes [8].

Lorsque le nombre de périodes N est suffisamment grand, l'effet d'éclatement disposera les états résonants autour du singulet principal dans une bande transparente. Celle-ci correspondra à des états de Bloch $|\kappa| < 1$ (q réel). Ces états définiront la bande permise. Les bandes permises sont séparés par des bandes interdites $|\kappa| > 1$ (q imaginaire). Cette structure de bande est en accord avec celle de modèle des liaisons fortes $E(q) = \varepsilon + C + 2V \cos(qd)$, avec : $\varepsilon = 0.03536 \text{ eV}$, $C = 0.00025 \text{ eV}$ et $V = 0.00182 \text{ eV}$, tels que estimés précédemment.

d- L'influence de largeur de puits

L'équation caractéristique du modèle de Kronig-Penney dépend explicitement des paramètres structuraux (δ_B, δ_p) du motif. L'ajustement de ces paramètres déterminera la structure de bandes correspondante $\cos(qd) = (1/2) Tr(M)$ (M étant la matrice de transfert d'une période). Pour rappel, le singulet correspond $\cos qd = 0$ et la largeur de bande permise correspond à $|\cos qd| < 1$.

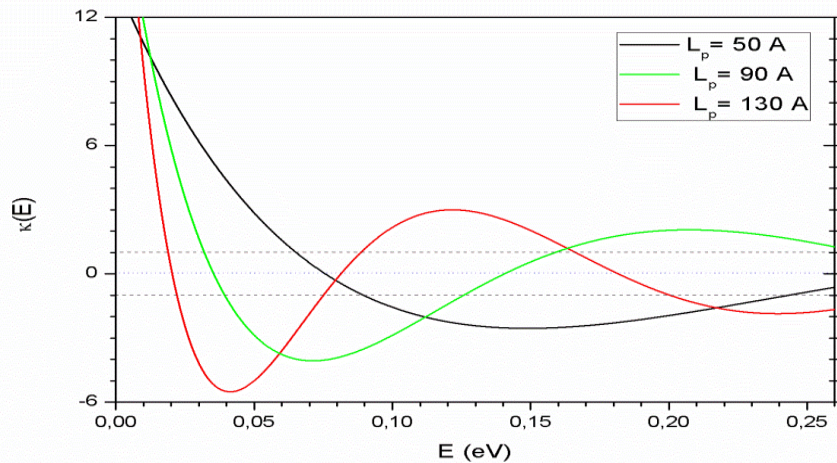


Figure III.10: l'équation caractéristique de Kronig-Penney d'une structure double barrière (N=2), pour différentes largeurs de puits.

L'augmentation de la largeur de puit provoque la translation de la courbe de dispersion vers les basses énergies. Le niveau singulet se confine de plus en plus dans son puit quantique et la bande permise (B.P) devient de plus en plus étroite. Ceci est dû à la diminution du terme d'interaction V .

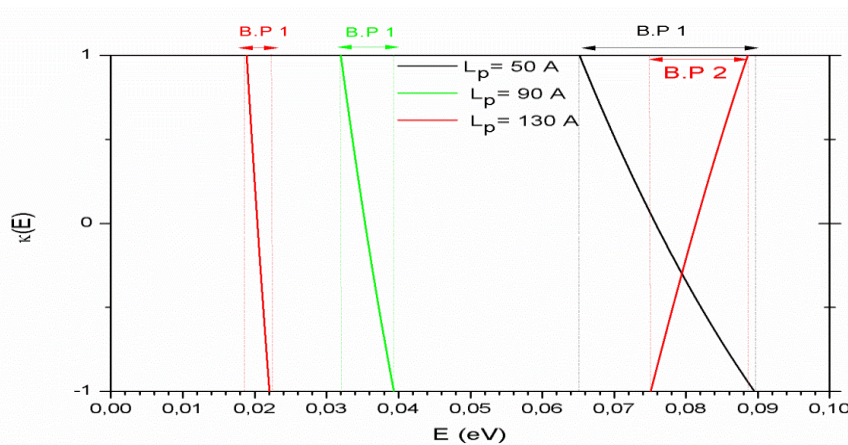


Figure III.11: l'équation caractéristique de Kronig-Penney entre 1 et -1 d'une structure simple période (N=1) pour différentes largeurs de puits [21].

III.3 Système désordonné

Nous appellerons un système désordonné toute structure ayant perdu la symétrie de translation. Ceci est dû à l'introduction de défauts. La réponse de ce système n'est plus déterministe et nécessite en conséquence une approche probabiliste. Pour un désordre donné, nous avons été jusqu'à générer une centaine de configurations équivalentes.

Structure binaire

Les systèmes désordonnés binaires sont caractérisés par deux types de motifs : Le motif hôte pour générer la structure hôte ordonnée et un motif défaut distribué aléatoirement dans la structure hôte. Une concentration faible de défauts est considérée. Dans notre travail, nous examinerons uniquement le défaut topologique par l'introduction d'un puit quantique défaut de largeur L_{PD} par rapport à la largeur du puit hôte $L_p = 90 \text{ \AA}$

a- Non corrélation et corrélation de désordre (intra-bande)

Dans une structure désordonnée, le motif défaut peut être généré avec ou sans corrélation de désordre. La corrélation de désordre consiste à définir une contrainte à laquelle doit obéir le défaut dans sa distribution aléatoire. En absence de cette contrainte, la distribution aléatoire est dite non-corrélée [11]. Dans notre étude, le motif défaut (simple période) est considéré comme non-corrélé tandis que le motif dimère (la structure double périodes) est vu comme une corrélation de désordre à courte portée : le défaut est introduit en paire [7,18].

1- Corrélation de désordre en dimère

Dans le motif dimère corrélé, le motif défaut est donc généré aléatoirement par paires, c'est-à-dire en structure double période distribuée aléatoirement dans la structure hôte (sans effets d'agrégats) (voir figure suivante). C'est le modèle du dimère aléatoire [7,19]

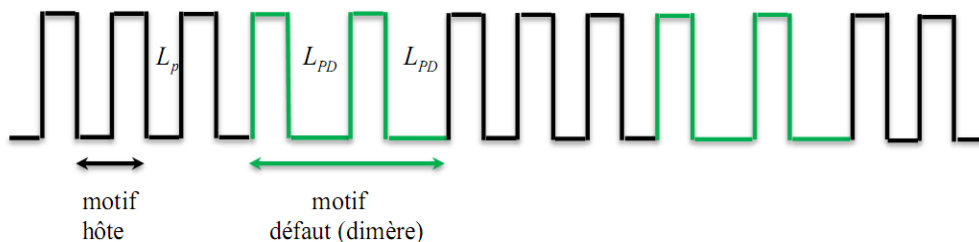


Figure III.12: le dimère aléatoire en largeur de puit

Pour la largeur de puit défaut $L_{PD} = 95 \text{ \AA}$, l'examen de coefficient de transmission et l'exposant de Lyapunov ont été calculés puis illustrés sur la figure III.13:

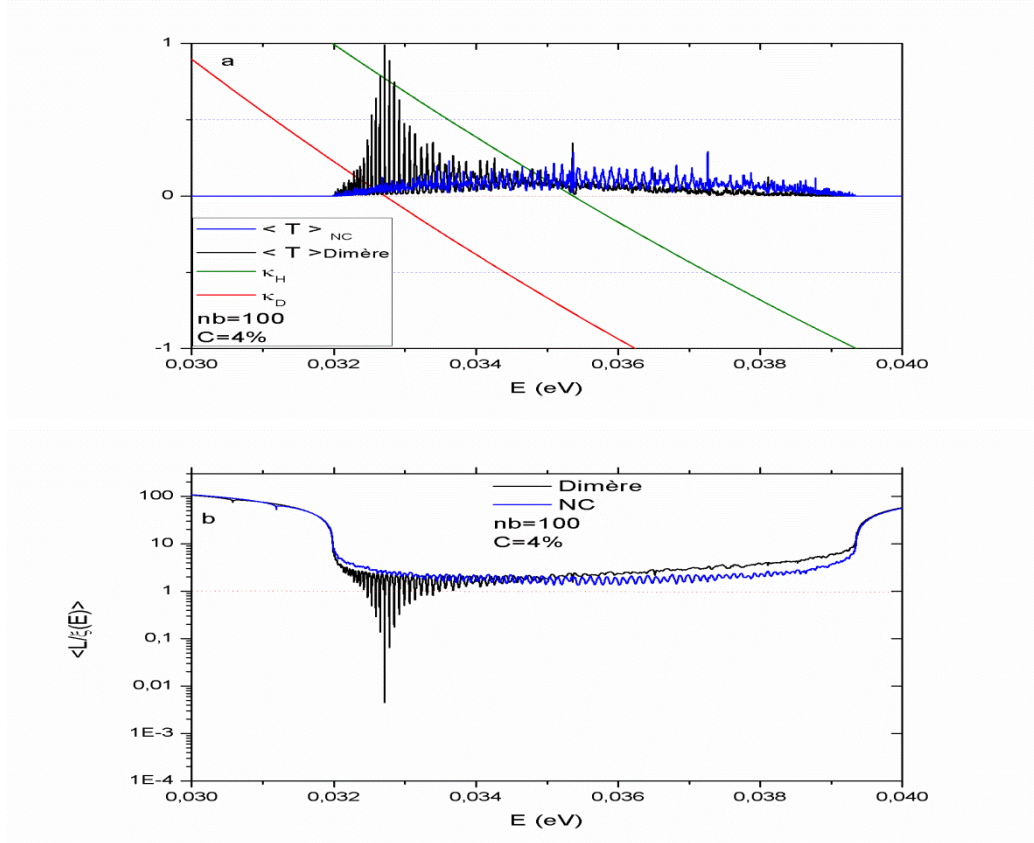


Figure III.13: la correspondance entre (a) le coefficient $\langle T \rangle$ et (b) l'exposant de Lyapunov réduit $\langle L / \xi \rangle$ dans les cas des désordres corrélés et non corrélés.

Dans le cas du désordre non corrélé, nous constatons que la bande permise (délimitée par la courbe $\kappa_h(E)$ (en vert) du réseau hôte est complètement détruite, à tel point que la probabilité de transmission moyenne ne dépasse (dans le meilleur des cas) 0.30 . Ces états correspondent à des états localisés du fait que $\langle L / \xi \rangle > 2$. (cad $\xi = 0.5 L$), L étant la taille du système ($N = 100$).

Par ailleurs, lorsque le désordre est corrélé, nous constatons que la probabilité de transmission atteint un pic de résonance proche de l'unité [7]. A cette énergie, une singularité apparaît dans le profil de la longueur de localisation réduite donnant lieu à une mini bande d'états délocalisés ($\langle L/\xi \rangle < 1$) autour de l'énergie de résonance. Conformément au comportement de $\kappa_D(E)$, cette énergie correspond à l'énergie de transparence du motif défaut ($\kappa_D(E) = 0$ courbe en rouge). La condition de transparence du motif défaut double période fournit (dans ce cas particulier) à la structure désordonnée des états étendus. Pour le cas étudié, les états résonants présentent une longueur de localisation $\langle \xi \rangle = 10^3 L$

Conformément au travail de 2002 [18], la condition généralisée de résonance est donné par

$$P_d = \xi P_h + \eta l, \quad (\text{III.10})$$

Où P_d est la matrice d'évolution du motif défaut, P_h est la matrice d'évolution du motif hôte et I est la matrice identité, ξ, η sont des constantes. Pour un motif dimère

$$P_{\text{dim}} = \begin{pmatrix} 2\kappa_d & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2\kappa_d & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 4\kappa_d^2 - 1 & -2\kappa_d \\ 2\kappa_d & -1 \end{pmatrix}, \quad (\text{III.11})$$

et celle de hôte est caractérisée par :

$$P_h = \begin{pmatrix} 2\kappa_h & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad (\text{III.12})$$

avec $\kappa_i = \cos(qd_i)$: i caractérisant le type de motif : h (hôte) ou d (défaut).

L'égalité (III.10) est vérifiée si seulement si [9] :

$$\kappa_d(\kappa_h - \kappa_d) = 0 \quad (\text{III.13})$$

Celui-ci est en accord avec le profil de transmission, l'état de résonance vérifie $\kappa_d = 0$. À cette énergie particulière, le motif défaut est transparent dans la structure hôte. Une onde incidente se propagera dans la structure désordonnée tout en 'voyant' le motif défaut totalement transparent.

2- Corrélation de désordre en trimère

La corrélation du désordre en trimère consiste à disposer le motif défaut sur trois sites successifs. Le modèle du trimère aléatoire consiste donc à générer une structure triple période de manière aléatoire dans la structure ordonnée [2, 19].

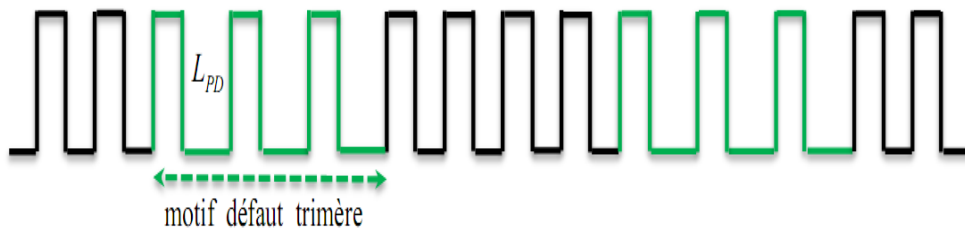


Figure III.14 : le trimère aléatoire en largeur de puit

Le coefficient de transmission et l'exposant de Lyapunov réduit ont été calculés puis illustrés sur la figure suivante. Le défaut considéré présente un puit de largeur $L_{PD} = 95 \text{ \AA}$.

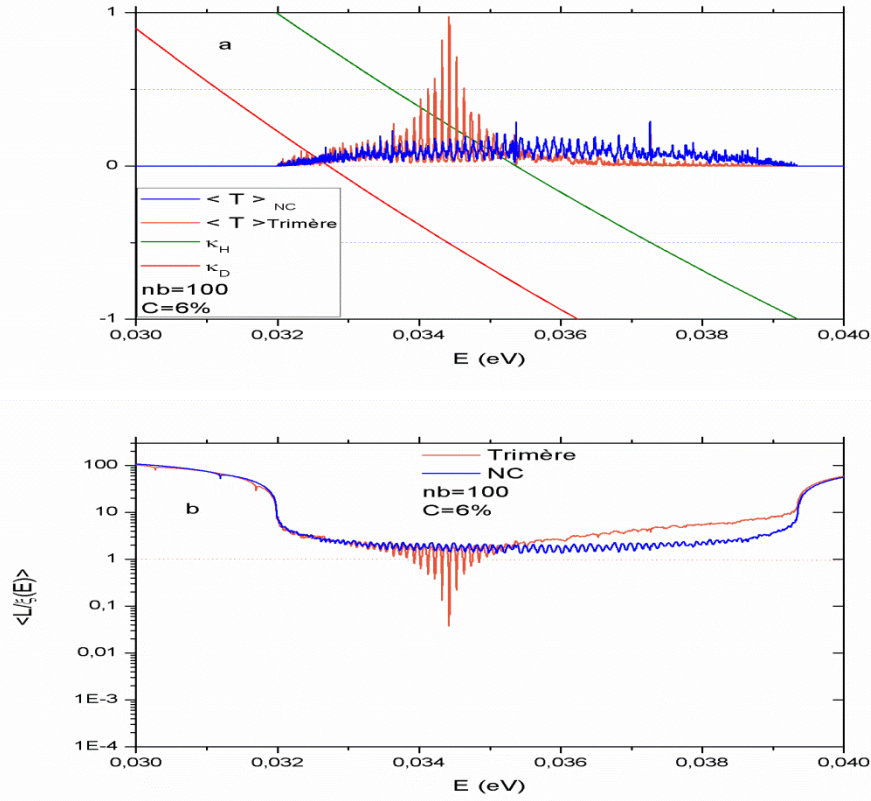


Figure III.15 : Correspondance entre (a) le coefficient de transmission (a) et (b) l'exposant de Lyapunov dans le modèle du dimère aléatoire.

Les résultats obtenus montrent l'apparition d'autres états étendus en présence de motif trimères aléatoires sauf que, l'énergie de transparence du motif trimère se situe à une énergie différente. L'exploitation de la condition de résonance généralisée permet de définir la matrice d'évolution du motif trimère comme suit :

$$P_{trim} = \begin{pmatrix} 2\kappa_d & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2\kappa_d & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2\kappa_d & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2\kappa_d(4\kappa_d^2 - 1) - 2\kappa_d & -(4\kappa_d^2 - 1) \\ (4\kappa_d^2 - 1) & -2\kappa_d \end{pmatrix}. \quad (\text{III.14})$$

L'égalité (III.10) est de nouveau vérifiée si seulement si :

$$(4\kappa_d^2 - 1)(\kappa_h - \kappa_d) = 0. \quad (\text{III.15})$$

$$\Rightarrow \begin{cases} \kappa_h = \kappa_d \\ \kappa_d = \pm \frac{1}{2} \end{cases}. \quad (\text{III.16})$$

Ainsi nous constatons que la résonance obtenue correspond seulement à la condition $\kappa_d = -1/2$. L'absence de la seconde résonance ($\kappa_d = +1/2$) réside dans le fait que celle-ci se situe en dessous de la bande permise (à l'intérieur même de la bande interdite de la

structure hôte). Un ajustement de la largeur du puit défaut à $L_{PD} = 92 \text{ \AA}$ a tendance à déconfiner le singulet principal jusqu'à le déplacer vers des énergies plus élevée.

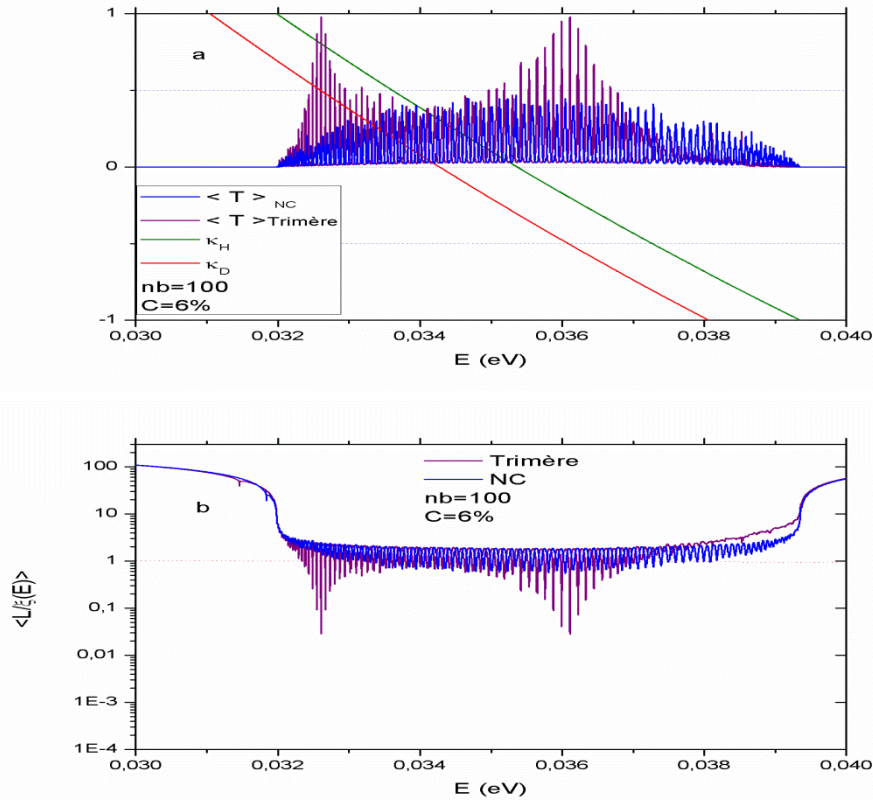


Figure III.16 : Correspondance entre (a) le coefficient de transmission (a) et (b) l'exposant de Lyapunov dans le modèle du dimère aléatoire. Le paramètre défaut est ajusté.

les conditions de résonance étant vérifiée dans les deux cas : $\kappa_d = \pm \frac{1}{2}$, deux pics de résonances de transmission unité apparaissent dans le spectre de transmission. A ces états correspond une bande d'états étendus $\langle L / \xi \rangle < 1$ avec des singularités pouvant atteindre 10^{-2} . Comme conclusion, les conditions de transparence du motif défaut doivent être vérifiées dans le domaine de la bande passante du motif hôte (à savoir $|\kappa_h| < 1$) [16].

b- Non corrélation et corrélation de désordre (inter-bande)

Dans le modèle de la corrélation du désordre à courte portée, l'introduction du motif défaut a été réalisée en considérant les bandes permises hôtes et défauts de même rang (décroissante par rapport à l'énergie E) conformément au modèle conventionnel. Ceci nous a implicitement amené à considérer l'effet dimère et l'effet trimère dans le même rang de bande, d'où la notation d'intra bandes.

Dans cette partie, nous allons examiner l'effet de corrélation de désordre à courte portée inter bande : nous allons ajuster convenablement la largeur du puit défaut (L_{PD}) de telle sorte que les deux bandes aient des rangs successifs. Avec l'oscillation de la relation de dispersion du modèle de Kronig – Penney (figure I.9 et III.10), nous allons considérer la 1ere bande permise pour le motif hôte et la seconde bande permise pour le motif défaut. Ceci nous amènera à explicitement considérer les deux bandes permises, l'une décroissante et l'autre forcément croissante respectivement.

Ceci correspond à des puits quantiques défauts dont la largeur ajustée : $210 \text{ \AA} < L_{PD} < 222.3 \text{ \AA}$. Les réponses de transmission correspondantes ont été calculées et présentées dans les figures suivantes pour différentes valeurs de L_{PD} .

Comparativement au cas précédent, nous pouvons distinguer des similitudes et des différences. Ainsi les conditions de transparences dimères et trimères restent inchangées $\kappa_d = 0$ et $\kappa_d = \pm \frac{1}{2}$ respectivement à l'intérieur de la bande permise hôte. La différence majeure réside dans l'apparition d'une résonance supplémentaire qui (selon la réponse des structures non corrélée) coïncide avec la résonance de commutation [23].

Théoriquement, cette résonance doit vérifier (aussi bien dans le cas du motif dimère que trimère l'une des conditions de transparence généralisée à savoir la condition de commutation $\kappa_h = \kappa_d$). Or en observant le comportement de $\kappa_h(E)$ et $\kappa_d(E)$ nous pouvons clairement observer que l'apparition du pic de résonance de commutation Ec correspondrait plutôt à $\kappa_h(Ec) = -\kappa_d(Ec)$. Ce signe provient du passage de la résonance d'ordre 1 à la résonance d'ordre 2 dans la bande permise du motif défaut. En effet ce passage doit être accompagné d'une translation du vecteur d'onde kd à $kd + \pi$ dans la structure de bandes du motif défaut. Ceci équivaut à $\kappa_d(kd) \rightarrow \kappa_d(kd + \pi) = -\kappa_d$.

Finalement avec l'ajustement des paramètres du motif défaut, il devient possible d'effectuer des alignements des résonances. Ceci a tendance non seulement à contrôler le nombre de résonances mais aussi à influencer fort probablement sur la nature même des états résonants ainsi obtenus.

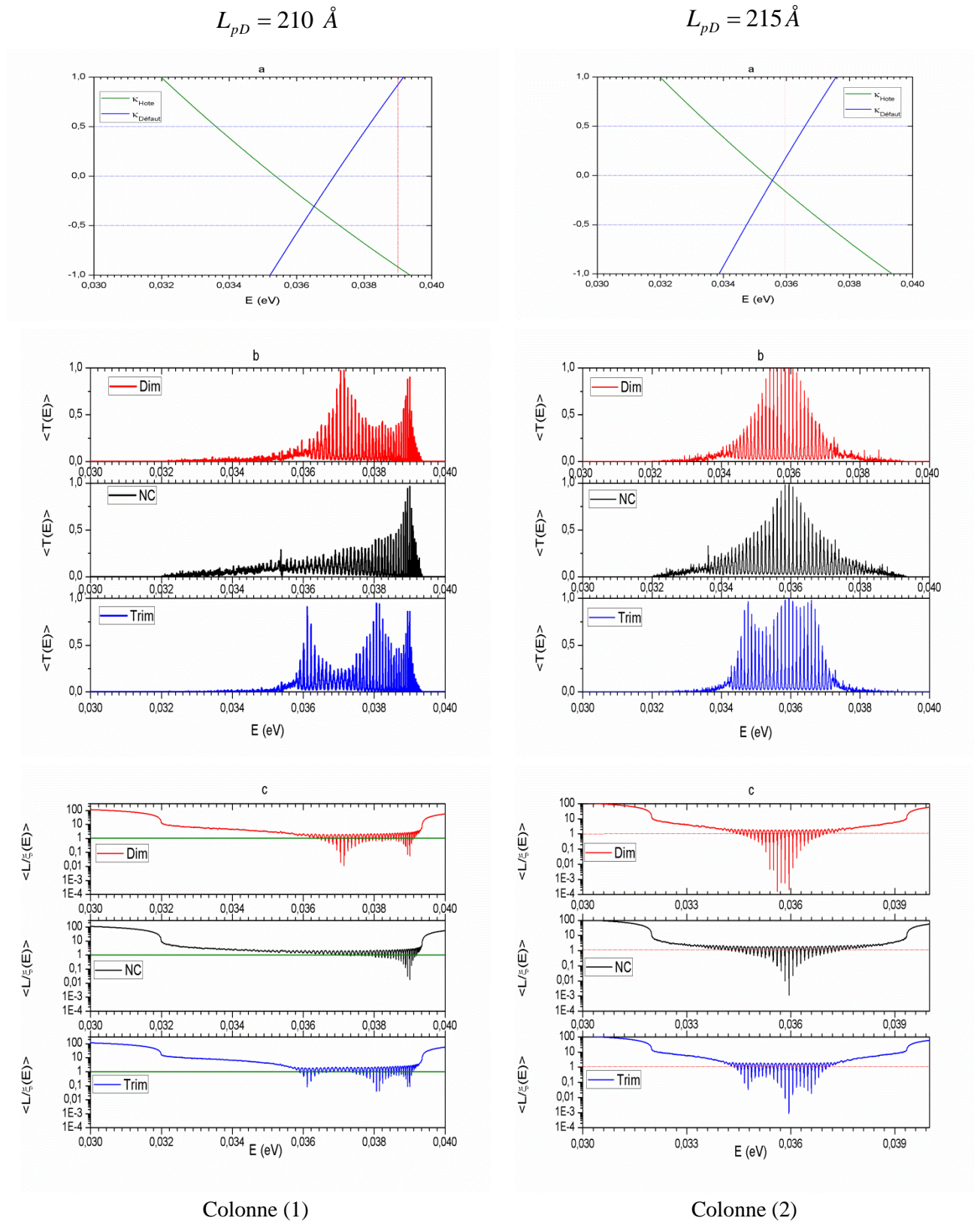


Figure III.17 : comparaison de coefficient de transmission avec l'exposant de Lyapunov dans chaque type de défaut, colonne A relative au $L_{pD} = 210 \text{ \AA}$ et colonne B correspond au $L_{pD} = 215 \text{ \AA}$

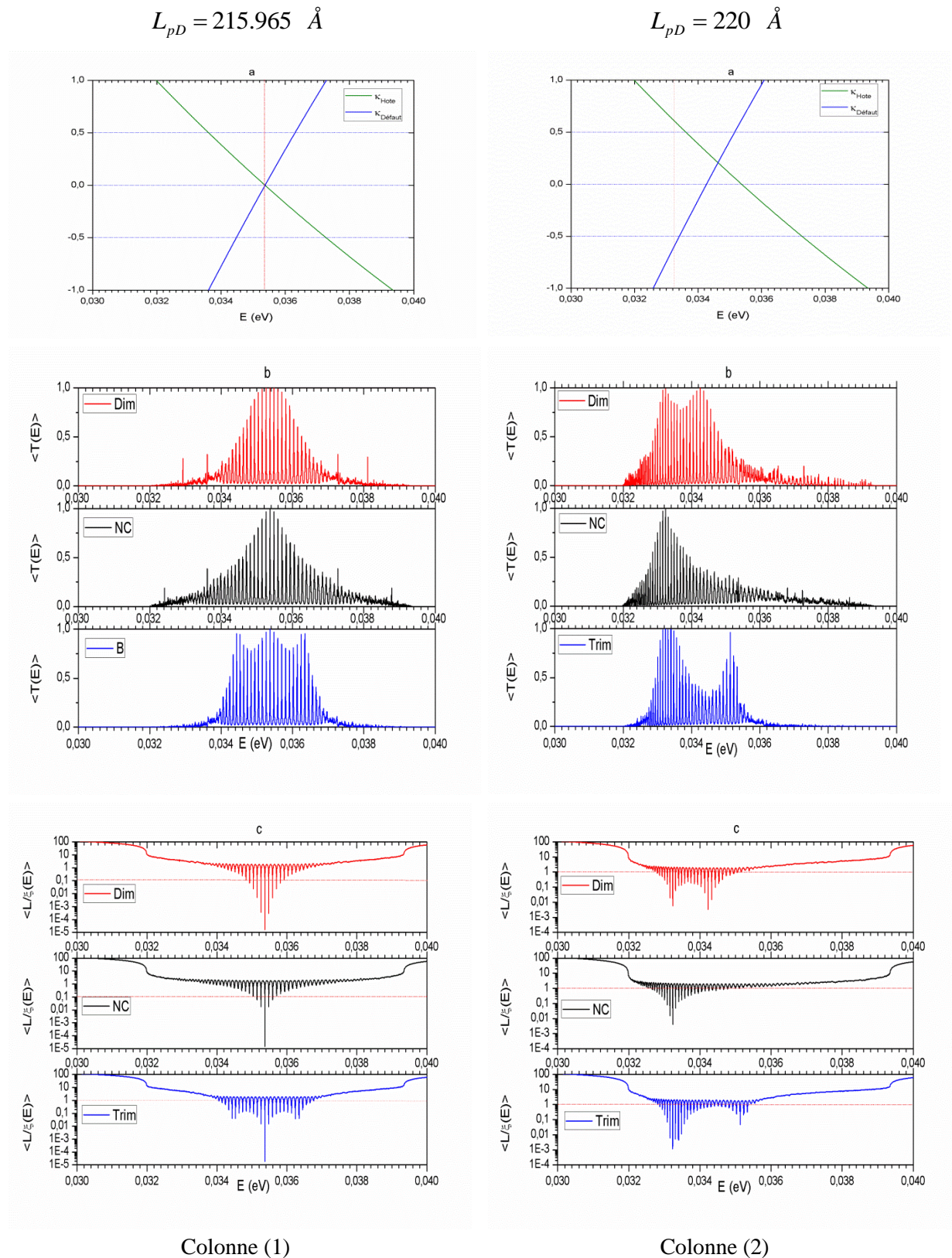


Figure III.18 : comparaison de coefficient de transmission avec l'exposant de Lyapunov dans chaque type de défaut, colonne (1) relatif au $L_{pD} = 215.965 \text{ \AA}$ et colonne (2) correspond au $L_{pD} = 220 \text{ \AA}$

$$L_{pD} = 222.33 \text{ \AA}$$

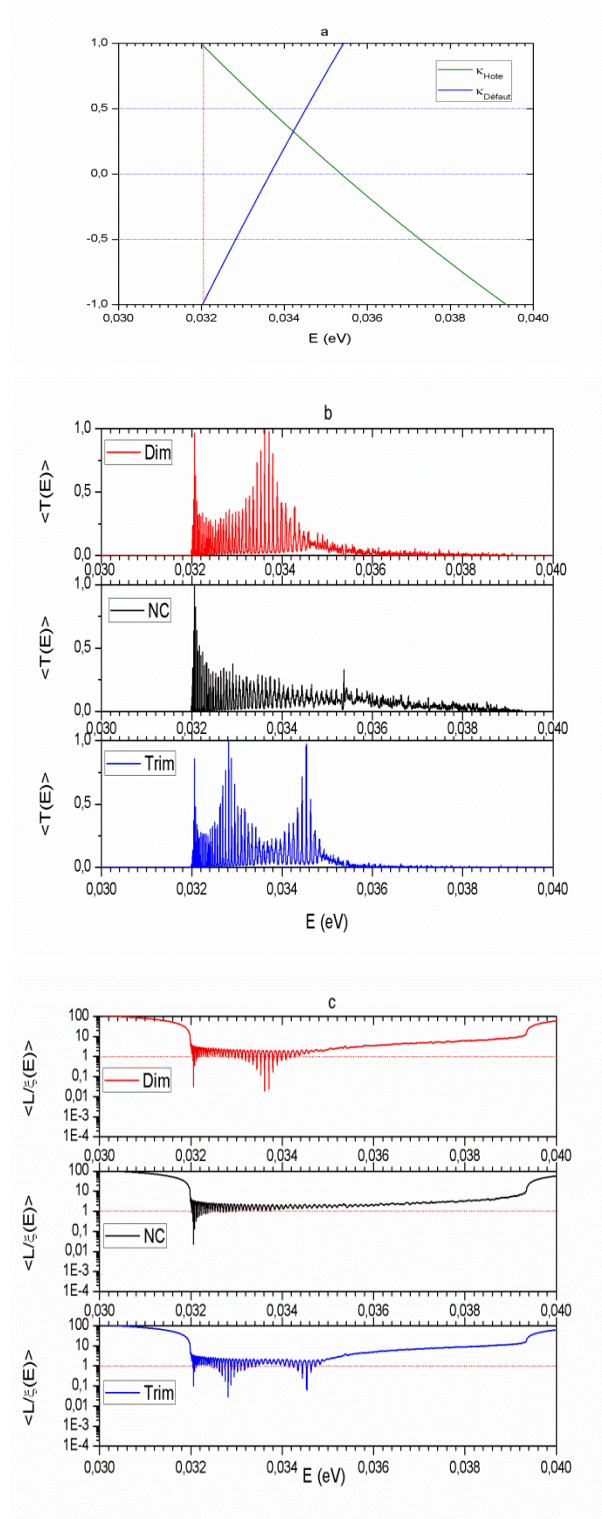


Figure III.19 : comparaison de coefficient de transmission avec l'exposant de Lyapunov pour $L_{pD} = 222.33 \text{ \AA}$.

Une perspective intéressante consisterait à considérer un modèle de système ternaire pour lequel, deux défauts A et B présenteraient des bandes permises de rangs différents. Contrairement au modèle des dimères et trimères aléatoires conventionnels, les différentes combinaisons possibles de ces états résonants différents peuvent s'avérer utile pour ajuster convenablement les filtres que peuvent bien constituer ces structures désordonnées résonantes. Ceci fera l'objet d'investigations futures.

Conclusion générale

Notre étude a eu pour objectif la description de la propagation des ondes électroniques dans les hétérostructures électroniques désordonnées unidimensionnelles. Nous avons choisi de considérer des défauts résonants dans des structures binaires à défauts topologiques. Dans le motif défaut topologique, c'est la largeur du puit quantique qui est modifiée.

Pour se faire, nous avons commencé par définir dans le chapitre 1 le super réseau. Ce matériau artificiel ordonné présente une structure de mini bandes d'énergie. L'utilisation de l'épitaxie par jets moléculaire permet de concevoir et de fabriquer des structures - sur mesure- présentant des bandes totalement ajustables.

L'utilisation de formalismes mathématiques appropriés, a permis par la suite de caractériser chaque motif par une relation de dispersion, nécessaire à la détermination des états résonants ($T = 1$) disponibles dans les structures hôtes et défauts. Nous avons décrit le processus de formation de la structure de bandes permises. Ceci est défini à partir de l'interaction des états singulets dans une situation de premiers plus proches voisins.

Pour le système désordonné, nous avons commencé par étudier le système binaire aussi bien en non-corrélation du désordre qu'en corrélation de désordre à courte portée, connues communément par les modèles des dimères et trimères aléatoires respectivement. Doté de bandes permises de même rang, les motifs défauts et hôte composent ensemble pour vérifier uniquement la condition de transparence. Ceci correspond à $\kappa_d = 0$ et $\kappa_d = \pm 0.5$ respectivement.

Par ailleurs, l'ajustement convenable de la largeur du puit défaut permet de translater le second pic singulet jusqu'à alignement de ce dernier avec le niveau du singulet hôte principal. Ainsi les deux défauts se retrouvent en train de composer ensemble dans cette structure aléatoire pour laquelle les deux défauts n'ont plus le même rang dans la structure de bandes.

En conséquence, nous avons réalisé la condition d'apparition d'une résonance de commutation intra bandes. Dans l'expression de la condition de résonance généralisée, κ_d sera accompagné d'un signe (-). Celui-ci provient de la translation du vecteur d'onde k de la bande de rang 1 à la bande suivante.

Bibliographie

1. L.Esaki and R.Tsu, IBM J. Res. Develop. 14,61 (1970).
2. S.Bentata, Etude des phénomènes de transport dans les systèmes à une dimension Thèse de Doctorat, USTO, Algérie, (2001) ; Hafid Magistère,
3. R.Djelti, influence des N-mers sur les propriétés de transport du superréseau. Thèse de Doctorat Es-Sciences. Université Abdelhamid Ibn Badis-Mostaganem.,(2008).
4. H. Mathieu, physique des semi-conducteurs et des composants électroniques, édition Masson, Paris, France (1996).
5. S.M. Sze, *Semiconductor devices: Physics and technology*, John Wiley and Sons, (2001)
6. P.W.Anderson, Phys. Rev. **109**, 1492 (1958).
7. A. Sánchez, E. Maciá, and F. Dominguez-Adame, Phys. Rev. B **49**,147 (1994), Macia 96, H.-L. Wu, W. Goff, and P.Phillips, Phys. Rev. B **45**, 1623 (1992); D.H.Dunlap, H-L Wu and P.Phillips, Phys. Rev. Lett.65, 88 (1990), H-LWi and P.Phillips, J.Chem. Phys.93, 7369 (1990), Science 252, 1805 (1991).
8. D.Benfriha et S. Mameur-Sameut, Le transport quantique dans les hétérostructures désordonnées, Mémoire de Master, UHBC (2012); A. Samah, Le transport unidimensionnel en présence de défauts intentionnelles, Mémoire de Master, UHBC (2011-2012) ; Benbaghdad. Nabila et Tlemçani Souad, Les propriétés de transmission électroniques dans les hétérostructures 1D en présence de défauts composés, Mémoire de Master, UHBC (2012)
9. H. Khalfoun, étude des propriétés des hamiltoniens unidimensionnels aléatoires. Application au cas dimer. Thèse de Doctorat Es-Sciences (option : physique théorique). Université Abou Bekr Belkaid-Tlemcen (2010).
10. P.Kiréev, La physique des semi-conducteurs, édition Mir, Moscou, (1975).
11. Peter Markos et C.M. Soukoulis, Wave Propagation, from Electrons to Photonic Crystals and Left-Handed Materials; édition Princeton University, (2008).
12. B. Kramer and A. MacKinnon, Rep. Prog. Phys. **56**, 1469 (1993)
13. N.F..Mott, J. Non-Crys. Solids **1**, 1(1968); in Electronics and Structural Properties of Amorphous Semi Conductors, p1, Academic Press, London (1973). N.F. Mott and E.A.Davids, Electrical Process in Non-Crystalline Materials , 2nd Ed., Calrendon, Oxford (1979)
14. D.J. Thouless, Phys. Rev. Lett.**39**, 1167 (1977).
15. S. Datta, *Electronic transport in mesoscopic systems*, Cambridge studies in semiconductor physics and microelectronic engineering, Cambridge university press, Cambridge, England (1995).
16. R. de L. Kronig and W.G. Penney, *Quantum mechanics of electrons in crystal lattices*, Proc. Roy. Soc. (London) A **130**, 499 (1931).
17. C.Kittel, Physique de l'état solide (7ème édition); édition Dunod

18. D. H. Dunlap, H-L Wu and P. Phillips, *Phys. Rev. Lett.* **65**, 88 (1990), H-L Wu and P. Phillips, *J. Chem. Phys.* **93**, 7369 (1990), *Science* **252**, 1805 (1991) ; H-L Wu, W. Goff and P. Phillips, *Phys. Rev. B* **45**, 1623 (1992)
19. F. Bendahma, S. Bentata, R. Djelti, Z. Aziz, *Physica B* **449**, 150 (2014) ; Samira Cherid, Samir Bentata, Ali Zitouni, Radouan Djelti, *Solid State Communications* **183**, 47 (2014) ; S. Terkhi, Z. Aziz, B. Bouadjemi, S. Bentata, *Superlattices and Microstructures* **56**, 16 (2013) ; S. Terkhi, S. Bentata, R. Djelti, B. Bouadjemi, *Results in Physics* **2**, 198 (2012).
20. Xue.Wen.Liu et A.P.Stamp, *Phys. Rev. B* **47**, (1993).
21. S. Cordero, G. Garcia-Calderon, *Phys. Rev. A* **90**, 062101 (2014).
22. I. Gómez, F. Domínguez-Adame and E. Diez; *Physica B* **324**, 235 (2002) ; S. Bentata, B. Ait Saadi and H. Sediki, *Superlatt. and Microstruct.* **30**, 297 (2001).
23. Édition originale : *Solid State Physics*, Niel W. Ashcroft and N. David Mermin. © Saunders College Publishing, 1976

