

NATURE DES ETATS ELECTRONIQUES DES SUPERRESEAUX (TYPE DIMER / TRIMER) DESORDONNES EN HAUTEUR DE BARRIERE

Redouane Djelti, Samir Bentata et Zoubir Aziz

Département de Physique, Faculté des Sciences, Université Abdelhamid Ibn Badis, B.P. 227,
Mostaganem, Algérie
m.univ@caramail.com

(Received 28 February 2006 - Accepted 2 October 2006)

RESUME

Une étude comparative des propriétés électroniques du superréseau (SR) GaAs/Al_xGa_{1-x}As type dimer / trimer avec désordre corrélé tout en gardant la même périodicité du système a été réalisée. La transmission en fonction de l'énergie ainsi que la longueur de localisation sont étudiées au moyen du formalisme de la matrice de transfert.

Les états électroniques du SR traités par un calcul théorique du coefficient de transmission de la structure de minibande ont révélé la présence d'une forte délocalisation pour le cas d'un désordre corrélé, confirmant ainsi les prévisions théoriques.

Mots clés : superréseaux (SR), dimer en hauteur de barrière (DHB), trimer en hauteur de barrière (THB), désordre aléatoire, longueur de localisation

ABSTRACT

A comparative study of the electronic properties of the superlattices GaAs/Al_xGa_{1-x}As type dimer/trimer with correlated disorder by keeping the same period of the system was realised. Transmissions versus electron energy and localization length are studied by means of the formalism of transfer matrix.

The electronic states of SL treated by a theoretical calculation of the transmission coefficient of the miniband structure revealed the presence of a strong delocalization for correlated disorder case, confirming then the theoretical hopes.

Keywords : superlattices (SL), height barriers dimer (HBD), height barriers trimer (HBT) random disorder, localization length

INTRODUCTION

Les hétérostructures GaAs/Al_xGa_{1-x}As à multi puits quantiques peuvent être utilisées dans divers types de composants optoélectroniques (lasers, détecteurs, modulateurs...). L'arséniure de gallium (GaAs) ainsi que le composé ternaire Al_xGa_{1-x}As ont une structure de bande directe, ils constituent un matériau propice à la fabrication des diodes électroluminescentes, leurs spectres d'émission se trouvent proches de l'I.R.

Depuis le travail original (Anderson, 1981), le problème de la localisation d'une particule dans n'importe quelle quantité de désordre, est toujours d'intérêt continu pour des physiciens. Il a montré que la présence du désordre peut localiser les fonctions d'onde d'un système sans interaction grâce aux interférences quantiques, les électrons ne pouvant plus être décrits par les fonctions de Bloch mais par des fonctions d'onde localisées.

Les superréseaux faiblement couplés de semi-conducteur représentent un système non linéaire dû à l'effet tunnel résonnant (ETR) entre les sous bandes dans les puits adjacents (Bergmann, 1982). L'ETR dans les barrières multiples (SR) a été traité pour la première fois par (Tsu & Esaki, 1973). Ces auteurs ont observé une division de chaque pic de résonance en N-1 autres pics. Comme explication, ils ont lié cet effet à une levée de dégénérescence dans les puits couplés.

Des travaux effectués par la suite ont précisé la suppression possible de la localisation dans les systèmes désordonnés unidimensionnels induits par la non linéarité (Kivshar *et al.*, 1990), la corrélation dans le désordre (Dunlap *et al.*, 1990) ou les interactions à longue portée (Rodríguez *et al.*, 2000).

La généralisation du modèle de dimer au cas de N-mer a été considérée par pas mal de chercheurs tels que Evangelou & Wang (1993) et Hilke (1994).

Le présent travail porte sur l'étude comparative de deux systèmes (dimer / trimer) asymétriques à désordre corrélé tout en préservant la périodicité des systèmes.

Dans ce contexte le théorème de Bloch n'est plus valable, car on perd toute symétrie par translation. La position, la largeur de la mini-bande ainsi que la nature des états (localisé, délocalisé) sont largement traitées.

L'énergie d'électron utilisée est inférieure à la hauteur de barrière ($E < V_0$) ce qui conduit à un transport électronique par effet tunnel (ETR).

L'article est organisé comme suit : la deuxième section comporte le formalisme utilisé, basé sur la méthode de la matrice de transfert. La troisième section comporte les résultats et discussion de l'étude du transport électronique dans le SR, par mesure du coefficient de transmission ainsi que la longueur de localisation. La quatrième section conclue l'article avec un bref sommaire des principaux résultats.

FORMALISME

Un programme de simulation basé sur le formalisme de l'équation de Schrödinger associée au potentiel des systèmes étudiés a été réalisé pour l'étude des hétéro structures, il permet de déterminer la transmission électronique à travers les différentes barrières quantiques, ainsi que d'autres paramètres physiques, ce qui nous permet d'avoir un aperçu général sur les différents états électroniques de la structure (localisation, délocalisation...).

Les propriétés électroniques du trimer désordonné aléatoirement RTBSL sont étudiées dans le cas stationnaire.

L'équation d'onde de Schrödinger s'écrit sous la forme suivante :

$$\left[\frac{\mathbf{I}}{m^*(z)} \frac{\delta^2}{\delta z^2} \right] \psi(z) + \frac{2}{\hbar^2} [E - V(z)] \psi(z) = 0 \quad (1)$$

où z est la distance le long de l'axe de croissance, m^* est la masse effective de chaque monocouche, \hbar la constante de Planck divisée par 2π , $\Psi(z)$ est la fonction d'onde dans la direction croissante du SR, E l'énergie de l'électron et $V(X)$ représente la distribution du Potentiel électrique.

Le profil de potentiel des structures étudiées (Fig.1), est résolu en employant le formalisme de la matrice de transfert (Gomez *et al.*, 2002), dans ce cas-ci les amplitudes entrantes et sortantes sont reliées par une matrice complexe 2×2 , l'interprétation physique est directe, elle introduit la réponse du système en terme de matrice obtenue à partir d'une relation linéaire liant les fonctions d'onde et leurs premières dérivées au niveau des interfaces (Nimour *et al.*, 1998).

En utilisant les conditions de continuité de (Bastard, 1981) pour un électron incident venant de la gauche, on a la relation entre d'amplitudes réfléte τ et transmise R .

$$\begin{pmatrix} R_1 \\ R_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tau_1 \\ \tau_2 \end{pmatrix} \quad (2)$$

Le coefficient de transmission est alors

$$T = \frac{1}{|M_{22}|} \quad (3)$$

La longueur de localisation dans les systèmes unidimensionnels correspond à l'inverse de l'exposant de Lyapunov γ (Kirkman & Pendry, 1984).

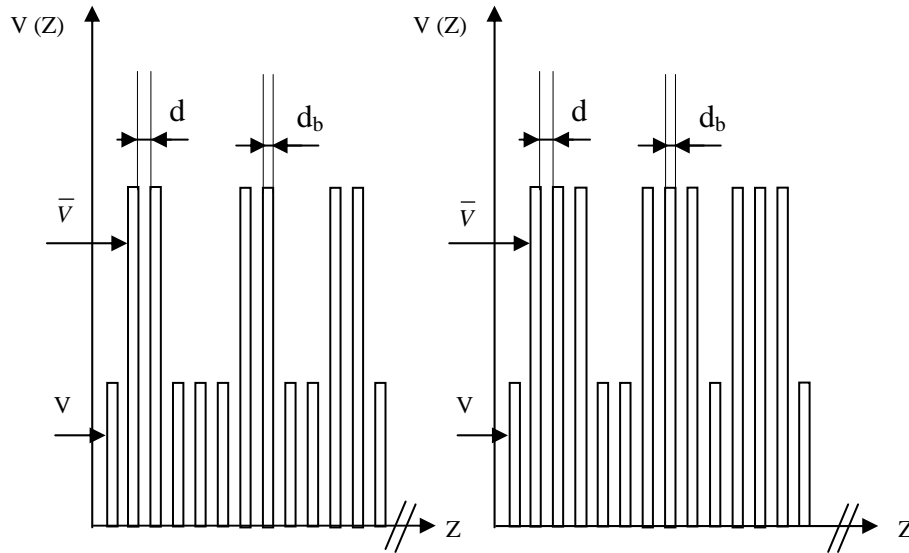
$$\gamma = -\frac{1}{2N} \ln T \quad (4)$$

avec T la transmission et N le nombre de barrières.

Le profil du potentiel étudié est représenté par la Figure 1.

RESULTATS ET DISCUSSIONS

Les valeurs des paramètres physiques sont choisies de telle façon que l'on ait des minibandes permises en-dessous des barrières : on considère un SR constitué de deux semi-conducteurs ayant la même largeur du puits et la même épaisseur de barrière $d_w = d_b = 26 \text{ \AA}$. La période du système $P = d_w + d_b$ est constante le long de la structure. Le nombre de barrières est pris égal à 1000.



**Figure 1. Profil de potentiel des structures étudiées avec $d_w=d_b=26\text{\AA}$ $V=0.33\text{eV}$
 $\bar{V}=0.2\text{eV}$.**

- a) Dimer aléatoire en hauteur de barrière.**
- b) Trimer aléatoire en hauteur de barrière.**

Les hauteurs de barrière choisies sont $V = 0.22 \text{ eV}$ et $\bar{V} = 0.33 \text{ eV}$ respectivement pour la cellule élémentaire et la cellule désordonnée. Les masses effectives dans chaque région du potentiel sont $m_a = 0.067 m_0$, $m_b = 0.091 m_0$ et $m_b = 0.103 m_0$.

m_b et m_b correspondent respectivement aux masses effectives dans les barrières de hauteur V et \bar{V} , et m_a la masse effective dans le puits. m_0 désigne la masse de l'électron libre.

Le fond des puits de GaAs a été choisi comme référence d'énergie, le coefficient de transmission est calculé pour une moyenne de 1000 réalisations.

La Figure 2 montre la position des bords inférieurs et supérieurs de la minibande pour les deux cas de structure ordonnée avec les deux hauteurs de barrières V et \bar{V} .

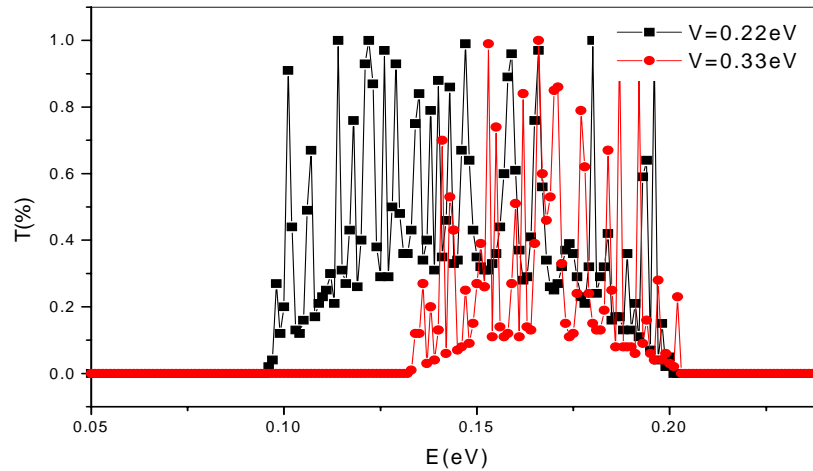


Figure 2. Coefficient de transmission en fonction de l'énergie d'électron incident pour deux structures ordonnées.
 $N=1000$ $d_w = d_b = 26\text{\AA}$

On peut observer l'existence d'une minibande s'étendant de 99 jusqu'à 200 meV pour V et de 133 jusqu'à 202 meV pour \bar{V} .

Pour les deux structures ordonnées nous constatons que pour la faible hauteur de barrière (0.22 eV) on a une épaisseur de la minibande plus significative ($\Delta E \approx 0.11\text{eV}$), conduisant à une réponse rapide du système (temps de la transmission). Le nombre des pics est lié au nombre de puits dans le SR.

On remarque que dans le cas du trimer, la minibande est scindée en trois sous-minibandes (pics) tandis que celle du dimer se trouve divisée en deux, résultat en parfait accord avec celui de (Bentata *et al.*, 2001).

Les Figures 3a et 3b montrent que quelque soit la valeur du taux de désordre ($C=0.05$ ou $C=0.25$), le pic relatif à la première énergie de résonance du trimer se situe toujours à des énergies inférieures à celles du dimer, en d'autres termes la minibande du trimer apparaît avant celle du dimer.

Pour le cas du trimer nous constatons l'apparition de trois pics, les deux premiers sont dus au trimer car ils présentent des énergies de résonances égales à celle de la cellule élémentaire (système à trois barrières) (Figure 4), tandis que le troisième pic est dû à la commutation (Gomez *et al.*, 2002) c'est à dire à l'imbrication l'un dans l'autre, des deux systèmes à potentiel V et \bar{V} l'un dans l'autre, ce dernier pic n'apparaît que s'il se trouve dans la région d'intersection des deux structures de minibandes des systèmes ordonnées (voir Fig. 2).

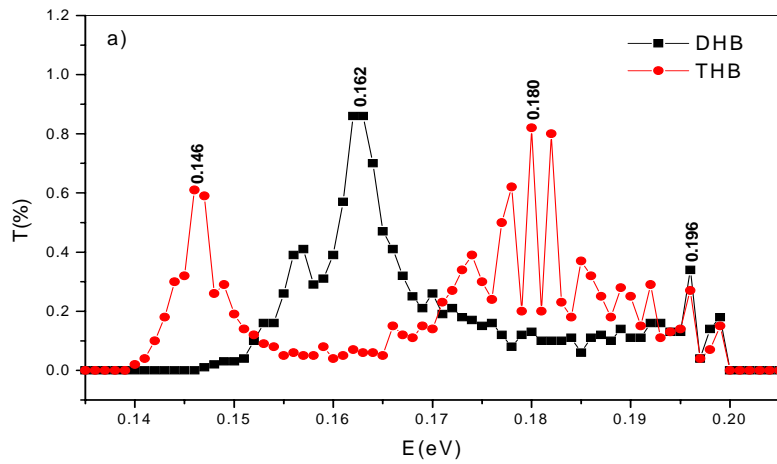


Figure 3a. Coefficient de transmission en fonction de l'énergie d'électron pour différentes concentrations du désordre.

$N=1000$ $d_w=d_b=26\text{\AA}$ $V=0.22\text{eV}$ $\bar{V}=-0.33\text{eV}$
 a) $C=0.05$

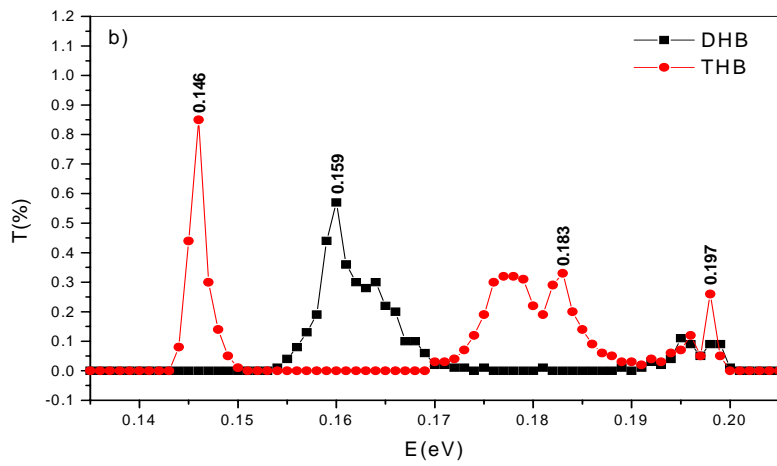


Figure 3b. Coefficient de transmission en fonction de l'énergie d'électron pour différentes concentrations du désordre.

$N=1000$ $d_w=d_b=26\text{\AA}$ $V=0.22\text{eV}$ $\bar{V}=-0.33\text{eV}$
 b) $C=0.25$

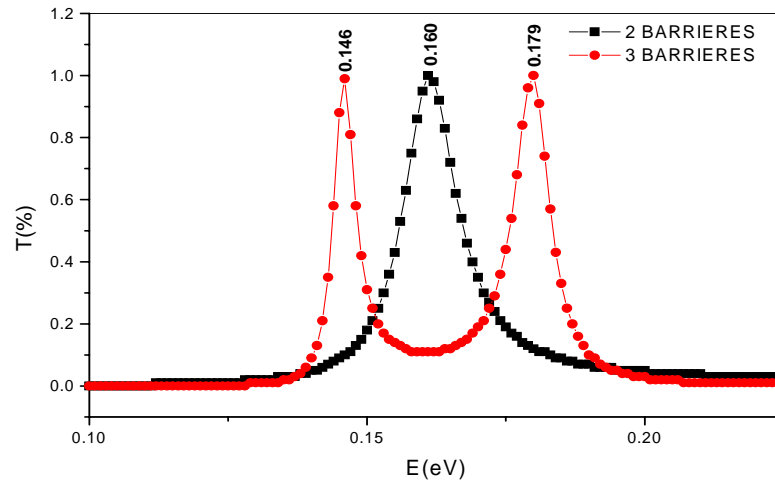


Figure 4. Coefficient de transmission en fonction de l'énergie d'électron pour les cellules élémentaires.
 $d_w=d_b=26\text{\AA}$ $V=0.33\text{eV}$

La même explication est valable pour le dimer sauf qu'ici il y a deux pics, le premier étant dû à la structure double barrière (dimer) et le deuxième à la commutation. Ce résultat est en parfait accord avec celui de Bentata (2005).

Pour un faible taux du désordre (Fig.3a), le pic intense du trimer correspond à la deuxième énergie de résonance, alors qu'avec l'augmentation du désordre, il se trouve à la première énergie de résonance. La constatation majeure faite dans le cas du trimer c'est que quelque soit la valeur du taux de désordre le pic intense n'est jamais celui dû à la commutation.

L'épaisseur de la minibande est légèrement plus grande dans le cas du trimer ($\Delta E \approx 0.06$ eV) que celle du dimer ($\Delta E \approx 0.054$ eV), ce qui conduit à des réponses des dispositifs électroniques d'une manière très rapide.

Les Figures 5a et 5b montrent la structure du trimer présentant des états délocalisés plus étendus que ceux du dimer.

Une fois que la concentration du désordre n'est pas nulle, il apparaît des états localisés, ces derniers pouvant être créés par des ruptures de périodicité en absence même d'atomes étrangers, soit à la surface du cristal, soit au voisinage de défauts d'empilement. Les états localisés jouent un rôle physique important.

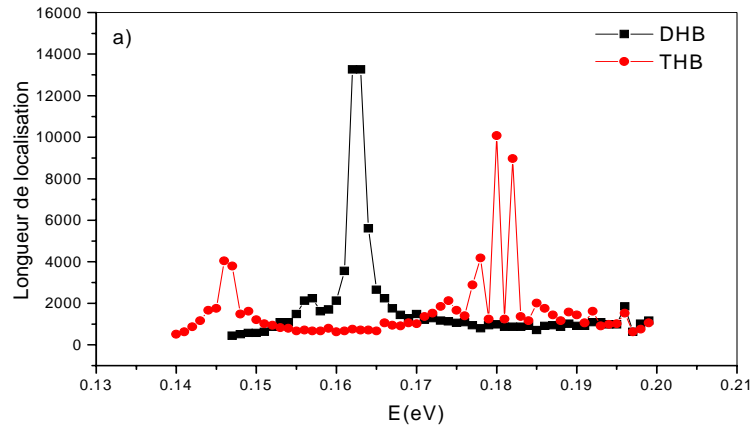


Figure 5a. Longueur de localisation en fonction de l'énergie d'électron pour la structure désordonnée en dimer/trimer.

$N=1000$ $d_w=d_b=26\text{\AA}$ $V=0.22\text{eV}$ $\bar{V}=0.33\text{eV}$
 a) $C=0.05$

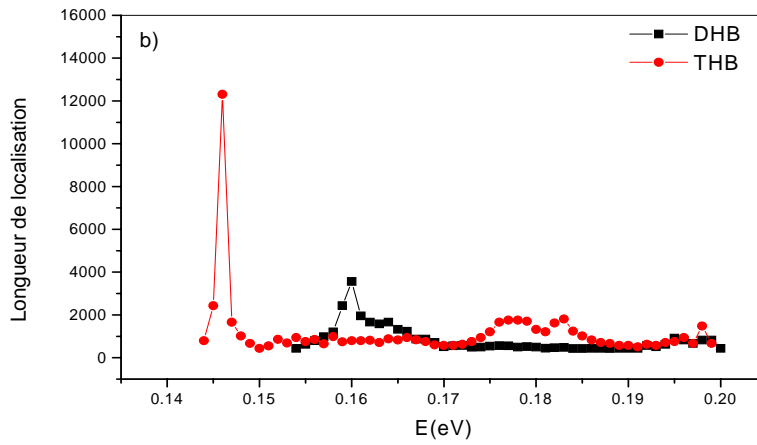


Figure 5b. Longueur de localisation en fonction de l'énergie d'électron pour la structure désordonnée en dimer/trimer.

$N=1000$ $d_w=d_b=26\text{\AA}$ $V=0.22\text{eV}$ $\bar{V}=0.33\text{eV}$
 b) $C=0.25$

Si la concentration du désordre demeure faible, ces états localisés coexistent avec des états qui, sans être de Bloch sont des états étendus. Cette localisation tend à diminuer la conductivité électronique à basse température par diminution du nombre de porteur.

Les états prolongés dus à la commutation ne sont pas propres seulement au dimer, mais aussi au trimer. On constate aussi qu'avec un taux important de désordre corrélé ($C=0.25$) on a des états de délocalisation prolongé. Selon des études théoriques, ces états prolongés en dimer et trimer du superréseau ne reflètent pas Bloch comme ceux dans le cas ordonné.

CONCLUSION

SR empêche la localisation et provoque des états de délocalisation étendus.

Deux ingrédients fondamentaux ont été présentés pour contrecarrer l'influence destructive du désordre : le maintien de la même période le long de l'axe de croissance du SR ainsi que la corrélation du désordre à courte portée. Ces deux mécanismes créent les conditions favorisant le transport électronique par effet tunnel résonnant.

La structure trimer en hauteur de barrière présente une délocalisation plus étendue que celle du dimer.

On a constaté que les états prolongés dus à la commutation ne sont pas propres seulement au dimer, mais aussi au trimer.

REFERENCES

- Anderson, P.W. 1981. New method for scaling theory of localization II multichannel theory of a "wire" and possible extension to higher dimensionality. *Phys. Rev.*, B 23: 4828-4836.
- Bastard, G. 1981. Superlattice band structure in the envelope-function approximation. *Phys. Rev.*, B 24: 5693-5697.
- Bentata, S. 2005. Two types of extended states in random dimer barrier superlattices. *Superlattices and Microstructures*, 37: 297-303.
- Bentata, S., Ait Saadi, B. and Sediki, H. 2001. Nature of the eigenstates in the miniband of random dimer-barrier superlattices. *Superlattices and Microstructures*, 30: 301-308.
- Bergmann, G. 1982. Measurement of the magnetic scattering time by weak localization. *Phys. Rev. Lett.*, 49: 162-164.
- Dunlap, D., Wu, H.L. and Phillips, P. 1990. Absence of localization in a random-dimer model. *Phys. Rev. Lett.*, 65: 88-91.
- Evangelou, S.N. and Wang, A.Z. 1993. Localization in paired correlated random binary alloys. *Phys. Rev.*, B 47: 13126-13136.
- Gomez, I., Dominguez-Adame, F. and Diez, E. 2002. Transport in random quantum dot superlattices. *J. App. Phys.*, 92 : 4486-4489.
- Gomez, I., Dominguez-Adame, F. and Diez, E. 2002. Nature of the extended states in random dimer-barrier superlattices. *Phys. Rev.*, B 324: 235-239.
- Hilke, M. 1994. Local correlations in one- and two-dimensional disordered systems. *J. Phys. A: Math. Gen.*, 27: 4773-4782.

- Kirkman, P.D. and Pendry, J.D. 1984. The statistics of one-dimensional resistances. *J. Phys.*, C 17: 4327-4344.
- Kivshar, Y.S., Gredesku, S.A., Sanchez, A. and Vazquez, L. 1990. Localization decay induced by strong nonlinearity in disordered systems. *Phys. Rev. Lett.*, 64: 1693-1696.
- Nimour, S.M.A., Ouasti, R. and Zekri, N. 1998. Effect of spatially disordered barriers on the band structure of finite superlattices. *Phys. Stat. Sol.*, B 209: 311-318.
- Rodriguez, A., Malyshev, V.A. and Dominguez-Adame, F. 2000. Quantum diffusion and lack of universal one-parameter scaling in one-dimensional disordered lattices with long-range coupling. *J. Phys. A: Math. Gen.*, 33: L161-L166.
- Tsu, R. and Esaki, L. 1973. Tunneling in a finite superlattice. *App. Phys. Lett.*, 22: 562-564.