

EFFET D'UN TRIMER EN HAUTEUR DE BARRIERE SUR LA NATURE  
DES ETATS ELECTRONIQUES DU SUPERRESEAU GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As

TRIMER BARRIER HEIGHT EFFECT ON THE NATURE OF THE  
ELECTRONIC STATE OF THE SUPERLATTICE GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As

R. DJELTI, S. BENTATA and Z. AZIZ

*Département de physique, Faculté des sciences, Université Abdelhamid Ibn badis,  
BP 227 Mostaganem, Algérie  
Email-address: m.univ@caramail.com*

Received 27 February 2006      Accepted 29 November 2006  
Online 23 February 2007

**Résumé.** Par le formalisme de la matrice de transfert, le coefficient de transmission ainsi que la longueur de localisation sont étudiés dans le cas d'un superréseau (SR) à base de semi-conducteur en trimer hauteur de barrière (THB). Nous nous sommes intéressés au superréseau, formé par un empilement de couche d'épaisseur constante du semi-conducteur GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As. La concentration  $x$  en aluminium prend au hasard, deux valeurs différentes, avec la condition que l'une d'entre elles apparaît seulement en triplée. Les états électroniques du SR ont été étudiés par le calcul théorique du coefficient de transmission de la structure de minibande. Nous avons observé que le processus de délocalisation existe quand le désordre est corrélé, résultat confirmant les espérances théoriques déjà trouvé pour le cas du dimer.

**Abstract.** By the formalism of transfer matrix, transmission coefficient and localization length are studied in the case of a superlattice containing semiconductor in barrier height trimer (HBT). We are interested in the GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As layers, having identical thickness, where the aluminium concentration  $x$  takes at random two different values, with the constraint that one of them appears only triply, i.e. it is a random trimer barrier (RTB). The electronic states of SR were studied by theoretical calculation of transmission coefficient of the miniband structure. We observed that the process of delocalization exists when the disorder is correlated, the result confirming the theoretical studies already found for the case of the dimer.

PACS numbers: 85.30.Vw, 61.72.Ji

UDC 538.915

Mots clés: super-réseaux, coefficient de transmission, trimer en hauteur de barrière état délocalisé

Keywords: superlattices, transmission coefficient, trimer in height of barrier delocalized state

## 1. Introduction

Les études du transport électronique dans des superréseaux à base de semi-conducteur remonte aux travaux effectués par Esaki et Tsu [1].

Les hétérostructures GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>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<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As ont une structure de bande directe, ils constituent un matériau propice à la fabrication des diodes électroluminescentes, leurs spectres d'émission se trouvent proche de l'IR.

Depuis le travail original d'Anderson [2], le problème de la localisation d'une particule dans n'importe quelle quantité de désordre, est d'un intérêt constant pour les 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 peuvent plus être décrits par des fonctions de Bloch mais par des fonctions d'onde localisées.

Mott et Twose [3] ont prouvé que tous les états sont localisés dans le cas d'un système à une dimension, aléatoirement désordonné. Le modèle le plus simple qui montre la suppression de la localisation dans les systèmes désordonnés est le modèle du dimer [4], c'est-à-dire l'introduction d'un désordre (impureté) se reproduisant que par paire.

Dans ce contexte, des recherches effectuées ont précisé la suppression possible de la localisation pour les systèmes désordonnés unidimensionnels induits par la non linéarité [5], la corrélation dans le désordre [6] ou les interactions à longue portée [7].

Les récentes expériences sur l'étude des propriétés électroniques de GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As avec introduction d'un désordre intentionnellement corrélé au moyen de photoluminescence ont soutenu l'existence d'une délocalisation des états en dimère aléatoire SL [8].

D'après la synthèse bibliographique effectuée, très peu de travaux ont été réalisés jusqu'à présent dans le cas d'une structure présentant un désordre corrélé en trimer hauteur de barrière. Ceci nous a motivé à entamer cette étude.

L'article est organisé comme suit: la section 2 comporte le formalisme utilisé, basé sur la méthode de la matrice de transfert. La section 3 comporte les résultats et discussions de l'étude du transport électronique dans le SR, par mesure du coefficient de transmission et de la longueur de localisation. La section 4 conclut l'article avec un bref sommaire des résultats principaux.

## 2. 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 hétérostructures. Il permet de déterminer la transmission électronique à travers les différentes barrières quantiques, ainsi que d'autres paramètres physiques, ce qui nous per-

met d'avoir un aperçu général sur les différents états électroniques de la structure (localisation, délocalisation ...).

Nous étudions les propriétés électroniques du trimer désordonné aléatoirement dans le cas stationnaire. L'équation d'onde de Schrödinger s'écrit sous la forme suivante,

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

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

Le profil du potentiel des structures étudiées (Fig. 1), est résolu en employant le formalisme de la matrice de transfert [9]. Dans ce cas les amplitudes entrantes et sortantes sont reliées par une matrice complexe  $2 \times 2$ . 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 leur première dérivée au niveau des interfaces [10].

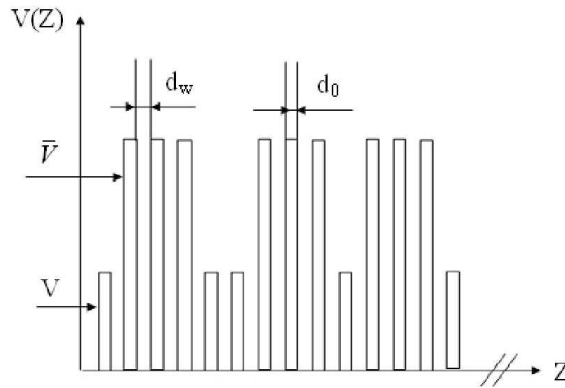


Fig. 1. Profil du potentiel étudié (THB).

En utilisant les conditions de continuité de Ref. [11] pour un électron incident venant de la gauche on a la relation entre amplitude reflétés  $\tau$  et transmis  $R$ , respectivement

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

Le coefficient de transmission  $T$  est alors

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

Afin de mesurer le degré de localisation, nous employons l'exposant de Lyapunov  $\gamma$  [12], qui est dans les systèmes unidimensionnels l'inverse de la longueur de local-

isation,

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

avec  $N$  le nombre de barrière.

Le potentiel étudié est schématisé par la Fig. 1.

Le système se compose de 300 barrières rectangulaires, aléatoirement réparties. Nous considérons que la hauteur des barrières prend au hasard deux valeurs d'énergie, à savoir  $V$  et  $\bar{V}$ . Ces dernières sont proportionnelles aux deux valeurs possibles de la fraction molaire d'Al dans les barrières du superréseau, avec  $x \leq 0.45$ .

### 3. Résultats et discussions

Les valeurs des paramètres physiques sont choisies afin d'avoir des minibandes permises au-dessous des barrières. Nous considérons un superréseau constitué de deux semi-conducteur ayant une largeur de puit  $d_W = 2$  nm et une épaisseur de barrière  $d_b = 2.6$  nm. La période du système  $P = d_W + d_b$  est constante le long de la structure. Les hauteurs de barrière choisies sont  $V = 0.22$  eV et  $\bar{V} = 0.33$  eV, respectivement pour la cellule élémentaire et le trimer.

Les masses effectives correspondantes dans chaque région du potentiel sont  $m_a = 0.067m_0$ ,  $m_b = 0.091m_0$  et  $\bar{m}_b = 0.103m_0$ .  $m_b$  et  $\bar{m}_b$  correspondent respectivement aux masses effectives dans les barrière de hauteur  $V$  et  $\bar{V}$ , et  $m_a$  est la masse effective dans le puit.  $m_0$  désigne la masse de l'électron libre.

Le fond du puit de GaAs a été choisi comme référence d'énergie. Le coefficient de transmission est calculé pour une moyenne de 300 réalisations.

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

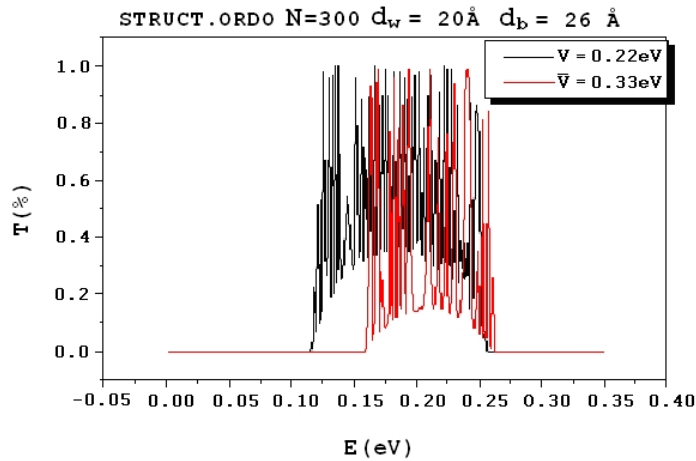


Fig. 2. Coefficient de transmission en fonction de l'énergie d'électron incident pour deux structures ordonnées.

Nous pouvons observer l'existence d'une minibande s'étendant de 115 meV à 256 pour  $V$  et de 158 meV à 262 pour  $\bar{V}$ . Nous constatons pour les deux structures ordonnées que pour la faible hauteur de barrière (0.22 eV) on a une épaisseur de la minibande plus significative ( $\Delta E \approx 0.141$  eV). Le temps de réponse du système dans ce cas est très rapide. La Fig. 3 montre la variation de la transmission en fonction de l'énergie incidente d'électron pour la structure du SR en THB avec un taux de désordre  $C = 0.20$ . Cette fraction est définie par le rapport du nombre de barrière de hauteur  $\bar{V}$  sur le nombre de barrière total du superréseau.

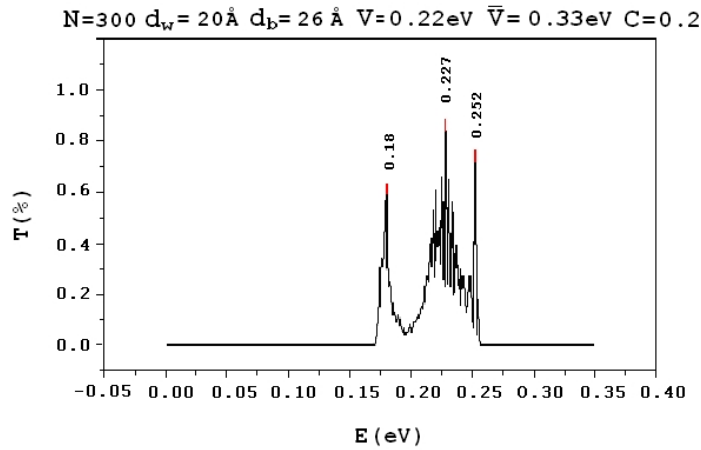


Fig. 3. Coefficient de transmission en fonction de l'énergie pour le trimer en hauteur de barrière (THB) avec un taux de désordre  $C = 0.20$ .

Le profil de la transmission pour la structure ordonnée diffère nettement de celui en THB. Nous observons le processus de la formation de la structure de la minibande à l'intérieur du puits qui peut être expliqué par l'existence de  $N - 1$  états permis dans  $N - 1$  puits s'étendant entre les barrières. Une augmentation de la longueur de la structure du SR, conduit à ce que chaque ensemble de pics près de l'unité forme une structure de minibande, tandis que les autres secteurs d'énergies sont des états interdits.

Pour le cas du trimer nous pouvons observer l'existence d'une minibande s'étendant de 168 meV à 257 meV, subdivisée en cinq régions: trois pics (sub-minibandes) situés aux énergies résonnantes  $E_{r_1} = 180$  meV,  $E_{r_2} = 227$  meV et  $E_{r_3} = 252$  meV, séparés par deux vallées  $E_{v_1} = 195$  meV et  $E_{v_2} = 244$  meV.

L'origine de ces régions est directement liée à la perte de la concordance des quantum de l'électron [13] à longue portée.

Nous constatons dans le cas du THB l'apparition de trois pics. Les deux premiers pics sont dus au trimer car ils présentent des énergies de résonances égales à celle de la cellule élémentaire, c'est à dire un système à trois barrières (Fig. 4), tandis que le troisième pic est dû à la commutation [14], c'est à dire à l'imbrication des deux systèmes à potentiel  $V$  et  $\bar{V}$  l'un dans l'autre. Ce dernier pic n'apparaît que s'il se

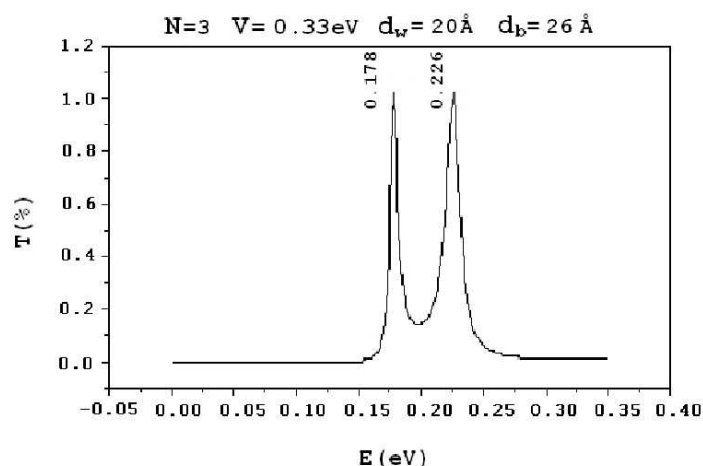


Fig. 4. Coefficient de transmission de la structure ordonnée triple barrière.

trouve dans la région d'intersection des deux structures de minibandes des systèmes ordonnés (Fig. 2), ce résultat est en parfait accord avec celui obtenu par Bentata [15].

Nous remarquons que la position des énergies de résonances ne dépend pas du degré de désordre. Elles sont identiques quelle que soit la concentration (Fig. 5), ceci est directement lié à la périodicité du superréseau.

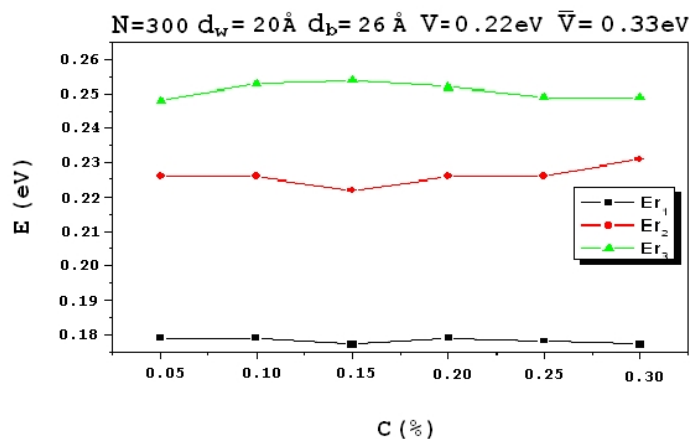


Fig. 5. Energie de résonance en fonction de la concentration du désordre pour le THB.

En outre, la largeur de chacune des sub-minibandes est sensible au degré de désordre elle diminue avec son augmentation. Nous pouvons conclure que ces

énergies dépendent seulement de la structure du SR, c'est à dire de la largeur de barrière et de puits, la hauteur du potentiel ainsi que des masses effectives.

La Fig. 6 montre la variation de la longueur de localisation en fonction de l'énergie incidente d'électron pour la structure du SR en THB pour un désordre  $C = 0.20$ .

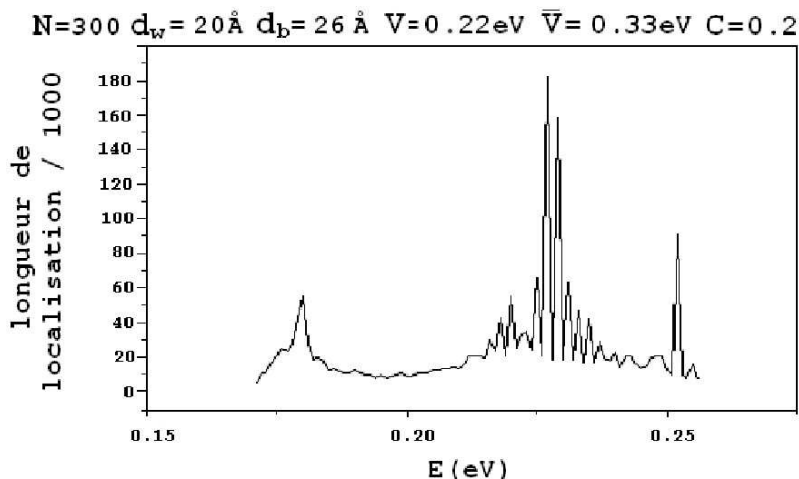


Fig. 6. Longueur de localisation en fonction de l'énergie incidente d'électron pour THB avec un taux de désordre  $C = 0.20$ .

Nous constatons que la longueur de localisation est très grande près des énergies de résonance, tandis qu'elle est presque nulle dans les régions des états interdits.

Le comportement particulier de la longueur de localisation suggère l'existence d'un pont séparant la phase des états fortement localisés dans les queues de bande et la phase des états délocalisés près des énergies de résonances.

Nous avons trouvé que des états délocalisés dus à la commutation ne sont pas propres seulement au cas du dimer [14], mais également pour le trimer.

#### 4. Conclusion

En résumé nous avons présenté une méthode théorique pour le calcul des propriétés électroniques des microstructures fortement désordonnées.

Les fluctuations de la transmission dues au désordre dans les SR ont des valeurs différentes dans les diverses régions du spectre caractérisant ainsi les propriétés de la localisation. Il existe un grand nombre d'états électroniques qui demeurent dispersés ou presque par les défauts du trimer.

L'énergie à laquelle une déviation de la branche de la structure périodique se produit est directement liée à l'endroit spatial d'une imperfection (désordre) dans l'échantillon.

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

## References

- [1] [1] L. Esaki and R. Tsu, IBM J. Res. Dev. **14** (1970) 61.
- [2] P. W. Anderson, Phys. Rev. B **23** (1981) 4828.
- [3] N. F. Mott and W. D. Twose, Adv. Phys. **10** (1961) 107.
- [4] J. C. Flores, J. Phys. Condens. Matter. **1** (1989) 8471.
- [5] Yu. S. Kivshar, S. A. Gredeskul, A. Sanchez and L. Vazquez, Phys. Rev. Lett. **64** (1990) 1693.
- [6] D. Dunlap, H. L. Wu and P. Phillips, Phys. Rev. Lett. **65** (1990) 88.
- [7] A. Rodriguez, V. A. Malyshev and F. Domínguez-Adame, J. Phys. A: Math. Gen. **33** (2000) L161.
- [8] V. Bellani, E. Diez, R. Hey, L. Toni, L. Tarricone, G. B. Parravicini, F. Domínguez-Adame, and R. Gómez-Alcalá, Phys. Rev. Lett. **82** (1999) 2159.
- [9] J. S. Walker and J. Gathright, Amer. J. Phys. **62** (1994) 408.
- [10] G. P. Berman, F. Domínguez-Adame and A. Sanchez, Physica D **107** (1997) 166.
- [11] G. Bastard, Phys. Rev. B **24** (1981) 5693.
- [12] P. D. Kirkman and J. D. Pendry, J. Phys. C **17** (1984) 4327.
- [13] I. Gomez, F. Domínguez-Adame and E. Diez, Phys. Rev. B **324** (2002) 238.
- [14] S. Bentata, B. Ait Aadi and H. Sediki, Superlattices and Microstructure **30** (2001) 300.
- [15] S. Bentata, Superlattices and Microstructures, **37** (2005) 297.

UČINAK TROJNOG POTENCIJALNOG BEDEMA NA SVOJSTVA  
ELEKTRONSKOG STANJA SUPRAREŠETKE GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As

Primjenom formalizma matrice prijenosa, proučavamo koeficijent propusnosti i duljinu lokalizacije suprarešetke koja sadrži u poluvodiču trojni potencijalni bedem. Zanimaju nas slojevi GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As, jednake debljine, u kojima su slučajno odabrane dvije koncentracije  $x$ , uz uvjet da se jedna javlja tri puta, tj. proučavamo slučajan trojni bedem. Elektronska stanja suprarešetke izvodimo teorijskim razmatranjem koeficijenta propusnosti strukture minivrpca. Opažamo postojanje procesa delokalizacije ako postoji koreliran nered, što potvrđuje teorijske rezultate već poznate za slučaj dvojnog sloja.