République Algérienne Démocratique et Populaire
Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique
Université de Médéa
Faculté des Sciences
Département de Sciences de la Matière



Mémoire

Présenté pour obtenir le diplôme de :

Master en Physique :

Spécialité : Physique Théorique

par :
Kamel Messaoudene

Thème :

Hétérostructure Quantique dans les Champs Électromagnétique : Théorie et Applications.

07 Septembre 2021

Membres de jury :

Dr. Karim Bouchachia	MCB	Université de Médéa	President
Dr. Lies Dekar	MCA	Université de Médéa	Examinateur
Dr. Mohamed Ahmed Ammar	MCA	Université de Médéa	Examinateur
Dr. Oussama Houhou	MCB	Université de Médéa	Encadreur
Dr. Djamel Sebbar	MCB	Université de Médéa	Co-encadreur

Année universitaire : 2020/2021

Déclaration de l'auteur

Je déclare par la présente que je suis le seul auteur de ce memoire. Il s'agit d'une copie conforme du memoire, y compris toutes les révisions finales requises, telles qu'acceptées par mes examinateurs.

إهداء

أتقدم بأطيب إهداءاتي الخالصة للولدين العزيزين اللذان قدما أكبر التضحيات التي لا تنسى في سبيل مساعدتي على إكمال مشواري الدراسي.

Remerciements

J'étends toutes mes salutations, mes respects et mes remerciements à tous les enseignants qui m'ont appris quelque chose, même s'il s'agissait d'une lettre, depuis mon entrée à l'école le premier jour jusqu'à nos jours.

Sans oublier mon encadreur Dr. Oussama Houhou que je remercie pour tous ses efforts et ses conseils durant ce travail.

Merci à tous les membres de jury pour avoir évalué mon travail.

Logiciels utilisés dans ce travail

TeXstudio® :

TeXstudio[1] est un éditeur LaTeX open-source multiplateforme. Nous avons utilisé ce logiciel pour écrire le contenu de ce travail.

Wolfram Engine® pour les développeurs :

Wolfram Engine[2] est le système logiciel qui exécute Wolfram Langage, ses interfaces et connexions à travers un large éventail d'environnements de calcul. Il a été utilisé dans l'écriture de programme Wolfram pour calculer les valeurs du coefficient de transmission en fonction de l'énergie électronique.

Python® :

Python[3] est un langage de programmation généraliste de haut niveau. Nous avons utilisé ce langage pour écrire un programme qui trace les courbes de la variation du coefficient de transmission en fonction de l'énergie électronique.

Canva® :

Canva[4] est une plate-forme de conception graphique australienne, utilisée pour créer des graphiques de médias sociaux, des présentations, des affiches, des documents et d'autres contenus visuels. Nous avons utilisé la plate-forme dans le but de concevoir des illustrations.

1. www.texstudio.org
2. www.wolfram.com
3. www.python.org
4. www.canva.com

Table des matières

Table des figures **vii**

Liste des tableaux **x**

1 Introduction **1**
1.1 Semi-conducteurs . . . 1
1.2 Hétérojonctions . . . 2
1.3 Bandes d'énergie . . . 3
1.4 L'approximation de la masse effective . . . 3
1.5 Hétérostructures . . . 4
1.6 Motivation de ce travail . . . 4
1.7 Organisation du manuscrit . . . 5

2 Hétérostructures libres **7**
2.1 Diagramme de l'énergie potentielle d'une hétérostructure libre . . . 7
2.2 Equation de Schrödinger et fonctions d'onde . . . 7
2.3 Conditions de continuité de BenDaniel-Duke . . . 9
2.4 Matrice de transfert . . . 9
2.5 Coefficient de transmission . . . 10
2.6 Niveaux d'énergie . . . 11

3 Hétérostructures dans un champ éléctromagnétique **13**
3.1 Définition du système . . . 13
3.2 Hamiltonien du système . . . 13
3.3 Solutions de l'équation de Schrödinger . . . 17
3.4 Matrice de transfert . . . 19
3.5 Coefficient de transmission . . . 21

4 L'effet des champs éléctromagnétique sur les niveaux d'énergie des hétérostructures **22**
4.1 Hétérostructure à double barrières quantiques . . . 22
4.1.1 Hétérostructure à double barrières quantiques en présence d'un champ électrique extérieur . . . 23
4.1.2 Hétérostructure à double barrières quantiques en présence d'un champ électromagnétique extérieur . . . 26

4.2 Hétérostructure à triple barrières quantiques 34
4.2.1 Hétérostructure à triple barrières quantiques en présence d'un champ électrique extérieur 34
4.2.2 Hétérostructure à triple barrières quantiques en présence d'un champ électromagnétique extérieur 37

Conclusion **45**

A Les dérivées des fonctions d'ondes ($\nabla\psi_j$) **47**
A.1 Dérivée de la fonction d'onde pour le cas d'une hétérostructure libre 47
A.2 Dérivée de la fonction d'onde pour le cas d'une hétérostructure en présence des champs électromagnétiques 48

B Démonstration d'existence de la matrice inverse de M_{2j} **50**
B.1 Le cas d'une hétérostructure libre 50
B.2 Le cas d'une hétérostructure en présence des champs électromagnétiques 51

C Les fonctions d'Airy **52**

D Les fonctions hypergéométriques **53**

E Codes de simulation **56**

Table des figures

1.1 Représentation graphique d'une homojonction (a) et d'une hétérojonction (b). . . . 2
1.2 Formation des bandes d'énergie pour les électrons d'atomes de silicium. . . . 4
1.3 La distribution de la masse effective de l'électron dans **GaAs** par rapport à la masse de l'électron dans le vide. . . . 5
1.4 Structure de cinq couches de semi-conducteurs avec un profil arbitraire d'énergie potentielle. . . . 6

2.1 Diagramme de l'énergie potentielle d'une hétérostructure libre de N couches. . . . 8
2.2 Propagation d'une onde incident par une barrière quantique ; (a) : cas de la mécanique classique ; (b) : cas de la mécanique quantique. 12
2.3 La variation du coefficient de transmission en fonction de l'énergie de l'électron pour une hétérostructure à simple puits quantique ; les nivaux d'energies : $E_1 = 12.93$ et $E_2 = 300.63$ [1]. . . . 12

3.1 Diagramme de l'énergie potentielle d'une hétérostructure de N couches en l'absence des champs électromagnétiques extérieurs. . 14
3.2 Diagramme de l'énergie potentielle d'une hétérostructure de N couches dans un champ électromagnétique exterieur. Seul le champ électrique a un effet sur la structure. . . . 15

4.1 Hétérostructure à double barrières quantiques : (a) la structure de double barrières quantiques. (b) Le profil de l'énergie potentielle de cette structure, $V_0 = 0.225$eV. . . . 23
4.2 La variation du coefficient de transmission en fonction de l'énergie en présence d'un champ électrique extérieur pour un double barrière. Les paramètres utilisés sont $V_a = 0.20$ V, $p = 8$nm, $s = 2.8$nm, $m_w = 0.067m_0$ et $m_b = 0.0919m_0$. . . . 24
4.3 L'effet de différents champs électriques ($V_a^{(1)} = 0.08$V, $V_a^{(2)} = 0.12$V, $V_a^{(3)} = 0.18$V) sur les niveaux d'énergie pour une double barrière avec $p = 8$nm, $s = 2.8$nm, $m_w = 0.067m_0$ et $m_b = 0.0919m_0$. . . . 25

4.4 La variation du coefficient de transmission en fonction de l'énergie en présence d'un champ électrique extérieur pour différentes valeurs d'épaisseurs d'une double barrière : $V_a = 0.20\text{V}$, $p = 8\text{nm}$, $s = 2.8\text{nm}$, $m_w = 0.067m_0$ et $m_b = 0.0919m_0$. 26
4.5 L'effet de la variation de l'épaisseur des puits sur les niveaux d'énergie d'une structure à double barrières. Les paramètres sont $V_a = 0.12\text{V}$, $p_1 = 2\text{nm}$, $p_2 = 5\text{nm}$, $p_3 = 8\text{nm}$, $s = 2.8\text{nm}$, $m_w = 0.067m_0$ et $m_b = 0.0919m_0$. 27
4.6 Structure à double barrières : (a) La variation du coefficient de transmission en fonction de l'énergie en présence d'un champ électromagnétique extérieur où $V_a = 0.09\text{V}$, $B = 5\text{T}$, $p = 8\text{nm}$, $s = 2.8\text{nm}$, $m_w = 0.067m_0$ et $m_b = 0.0919m_0$. (b) Les niveaux d'énergie sont extraits de la courbe. 29
4.7 Structure à double barrières : (a) La variation du coefficient de transmission en fonction de l'énergie en présence d'un champ électromagnétique extérieur où $B_1 = 10\text{T}$, $B_2 = 15\text{T}$, $B_3 = 20\text{T}$, $V_a = 0.12\text{V}$, $p = 8\text{nm}$, $s = 2.8\text{nm}$, $m_w = 0.067m_0$ et $m_b = 0.0919m_0$. (b) Les niveaux d'énergie sont extraits des courbes. . . 30
4.8 Structure à double barrières : (a) La variation du coefficient de transmission en fonction de l'énergie en présence d'un champ électromagnétique extérieur où $B = 10\text{T}$, $V_a^{(1)} = 0.08\text{V}$, $V_a^{(2)} = 0.12\text{V}$, $V_a^{(3)} = 0.18\text{V}$, $p = 8\text{nm}$, $s = 2.8\text{nm}$, $m_w = 0.067m_0$ et $m_b = 0.0919m_0$. (b) Les niveaux d'énergie sont extraits des courbes. 31
4.9 Structure à double barrières : (a) La variation du coefficient de transmission en fonction de l'énergie en présence d'un champ électromagnétique extérieur où $B = 10\text{T}$, $V_a = 0.2\text{V}$, $p = 8\text{nm}$, $s_1 = 3\text{nm}$, $s_2 = 6\text{nm}$, $s_3 = 6.8\text{nm}$, $m_w = 0.067m_0$ et $m_b = 0.0919m_0$. (b) Les niveaux d'énergie sont extraits des courbes. 32
4.10 Structure à double barrières : (a) La variation du coefficient de transmission en fonction de l'énergie en présence d'un champ électromagnétique extérieur où $B = 10\text{T}$, $V_a = 0.18\text{V}$, $p_1 = 7\text{nm}$, $p_2 = 10\text{nm}$, $p_3 = 12\text{nm}$, $s = 2.8\text{nm}$, $m_w = 0.067m_0$ et $m_b = 0.0919m_0$. (b) Les niveaux d'énergie sont extraits des courbes. . . 33
4.11 Hétérostructure à double barrières quantiques : (a) la structure de double barrières quantiques. (b) Le profil de l'énergie potentiel de cette structure, $V_0 = 0.225\text{eV}$. 34
4.12 Structure à triple barrières : (a) La variation du coefficient de transmission en fonction de l'énergie en présence d'un champ électrique extérieur où $V_a = 0.2\text{V}$, $p = 8\text{nm}$, $s = 2.8\text{nm}$, $m_w = 0.067m_0$ et $m_b = 0.0919m_0$. (b) Les niveaux d'énergie sont extraits de la courbe. 35

4.13 Structure à triple barrières : (a) La variation du coefficient de transmission en fonction de l'énergie en présence d'un champ électrique extérieur où $V_a^{(1)} = 0.25\text{V}$, $V_a^{(2)} = 0.30\text{V}$, $V_a^{(3)} = 0.37\text{V}$, $p = 8\text{nm}$, $s = 2.8\text{nm}$, $m_w = 0.067m_0$ et $m_b = 0.0919m_0$. (b) Les niveaux d'énergie sont extraits des courbes. 36
4.14 Structure à triple barrières : (a) La variation du coefficient de transmission en fonction de l'énergie en présence d'un champ électrique extérieur où $V_a = 0.30\text{V}$, $p = 8\text{nm}$, $s_1 = 3.2\text{nm}$, $s_2 = 6.4\text{nm}$, $s_3 = 8.3\text{nm}$, $m_w = 0.067m_0$ et $m_b = 0.0919m_0$. (b) Les niveaux d'énergie sont extraits des courbes. 38
4.15 Structure à triple barrières : (a) La variation du coefficient de transmission en fonction de l'énergie en présence d'un champ électrique extérieur où $V_a = 0.30\text{V}$, $p_1 = 6\text{nm}$, $p_2 = 8.5\text{nm}$, $p_3 = 9.9\text{nm}$, $s = 2.8\text{nm}$, $m_w = 0.067m_0$ et $m_b = 0.0919m_0$. (b) Les niveaux d'énergie sont extraits des courbes. 39
4.16 Structure à triple barrières : (a) La variation du coefficient de transmission en fonction de l'énergie en présence d'un champ électromagnétique extérieur où $V_a = 0.25\text{V}$, $B = 10\text{T}$, $p = 8\text{nm}$, $s = 2.8\text{nm}$, $m_w = 0.067m_0$ et $m_b = 0.0919m_0$. (b) Les niveaux d'énergie sont extraits de la courbe. 40
4.17 Structure à triple barrières : (a) La variation du coefficient de transmission en fonction de l'énergie en présence d'un champ électromagnétique extérieur où $B_1 = 13\text{T}$, $B_2 = 15\text{T}$, $B_3 = 20\text{T}$, $V_a = 0.60\text{V}$, $p = 8\text{nm}$, $s = 2.8\text{nm}$, $m_w = 0.067m_0$ et $m_b = 0.0919m_0$. (b) Les niveaux d'énergie sont extraits des courbes. . . 41
4.18 Structure à triple barrières : (a) La variation du coefficient de transmission en fonction de l'énergie en présence d'un champ électromagnétique extérieur où $B = 10\text{T}$, $V_a^{(1)} = 0.40\text{V}$, $V_a^{(2)} = 0.50\text{V}$, $V_a^{(3)} = 0.54\text{V}$, $p = 8\text{nm}$, $s = 2.8\text{nm}$, $m_w = 0.067m_0$ et $m_b = 0.0919m_0$. (b) Les niveaux d'énergie sont extraits des courbes. 42
4.19 Structure à triple barrières : (a) La variation du coefficient de transmission en fonction de l'énergie en présence d'un champ électromagnétique extérieur où $B = 10\text{T}$, $V_a = 0.50\text{V}$, $p = 8\text{nm}$, $s_1 = 3.2\text{nm}$, $s_2 = 5.3\text{nm}$, $s_3 = 6.4\text{nm}$, $m_w = 0.067m_0$ et $m_b = 0.0919m_0$. (b) Les niveaux d'énergie sont extraits des courbes. . . 43
4.20 Structure à triple barrières : (a) La variation du coefficient de transmission en fonction de l'énergie en présence d'un champ électromagnétique extérieur où $B = 10\text{T}$, $V_a = 0.38\text{V}$, $p_1 = 5.6\text{nm}$, $p_2 = 6.3\text{nm}$, $p_3 = 7.4\text{nm}$, $s = 2.8\text{nm}$, $m_w = 0.067m_0$ et $m_b = 0.0919m_0$. (b) Les niveaux d'énergie sont extraits des courbes. . . 44

Liste des tableaux

4.1 Les niveaux d'énergie de la configuration $V_a = 0.20$V, $p = 8$nm, $s = 2.8$nm, $m_w = 0.067m_0$ et $m_b = 0.0919m_0$. 24
4.2 Les niveaux d'énergie pour la configuration $p = 8$nm, $s = 2.8$nm, $m_w = 0.067m_0$ et $m_b = 0.0919m_0$, et pour les tensions $V_a^{(1)} = 0.08$V, $V_a^{(2)} = 0.12$V et $V_a^{(3)} = 0.18$V. 25
4.3 Les niveaux d'énergie du système associé à la **Figure.** 4.4. 27
4.4 Les niveaux d'énergie de la configuration de la **Figure.** 4.5. . . . 28

Chapitre 1

Introduction

Ce premier chapitre est une introduction générale aux hétérostructures, où nous allons essayer d'introduire les concepts de semi-conducteurs, hétérojonctions, et hétérostructures.

1.1 Semi-conducteurs

Les semi-conducteurs sont des matériaux ayant certaines propriétés qui peuvent être observées lorsqu'un courant électrique passe entre les extrémités de cette substance [2].

Au début du XIX$^{\text{ème}}$ siècle, certaines expériences ont été menées sur les propriétés électriques des matériaux [3]. Ces expériences ont aidé les scientifiques à comprendre les semi-conducteurs pour la première fois [4].

Les points suivants montreront les événements historiques les plus importants qui ont joué un rôle majeur dans la compréhension de la nature des semi-conducteurs :

- En 1833, Michael Faraday a observé un effet semi-conducteur pour la première fois [5]. Il observa que la résistance électrique au sulfure d'argent diminuait à basse température.
- Le premier effet de diode semi-conductrice a été découvert par Karl Braun en 1874 [6]. Braun a relié un courant électrique entre les extrémités d'une pointe métallique et un cristal de galène. Il observa que le courant électrique circule librement dans une direction seulement.
- Le premier brevet enregistré pour le dispositif à semi-conducteur date de 1901 [7]. Le dispositif connu sous le nom de *moustaches de chat*, inventé par Chandra Bose pour être utilisé pour détecter les ondes radio.
- En 1947, John Bardeen, Walter Brattain et William Shockley ont participé à l'invention du dispositif de transistors dans les Laboratoires Bell [8]. Un transistor est fabriqué d'un matériau semi-conducteur.

Dans ce qui suit, nous résumons certaines caractéristiques des semi-conducteurs :

— Leur valeur de conductivité électrique (mesurée en siemens par mètre S/m , noté σ) est limitée entre 10^{-8} et 10^{4} [9].
— Ce sont des matériaux caractérisés par une grande conductivité électrique dans certaine direction comparée à la direction opposée [6].
— Leur conductivité électrique est inversement proportionnelle à la température. Ce phénomène est connu sous le nom de dopage [10].
— Les semi-conducteurs sont directement affectés par l'application des champs électromagnétiques extérieurs [11]. C'est ce que nous allons étudier dans ce travail.

Les semi-conducteurs sont très utilisés dans le domaine de la fabrication électronique comme des diodes, des transistors et de nombreuses cellules photovoltaïques. Parmi les matériaux semi-conducteurs les plus célèbres, nous mentionnons : les éléments silicium et germanium, et les composés arséniure de gallium, sulfure de plomb ou phosphure d'indium, etc [12].

1.2 Hétérojonctions

D'abord, laissez-nous connaitre les jonctions. Les jonctions constituées par la mise en contact de deux régions différemment fabriquées d'une même substance semi-conductrice, sont appelées homojonctions [13], voir **Figure.** 1.1–(a). Il existe deux zones dopées différemment dans chaque partie. La première est de type (n) et la deuxième est de type (p). Par contre, les jonctions réalisées par la juxtaposition de deux matériaux différents sont appelées hétérojonctions [13], voir **Figure.** 1.1–(b). Les hétérojonctions sont réalisées par des semi-conducteurs ayant des propriétés cristallines voisines (la taille des atomes doit être proche) [14].

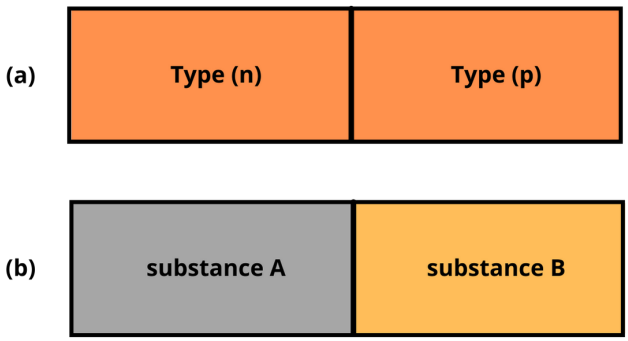


FIGURE 1.1 – Représentation graphique d'une homojonction (a) et d'une hétérojonction (b).

La principale caractéristique des hétérojonctions liée à la différence des

bandes interdites des deux matériaux "gap" (un grand gap et un petit gap) [13], ainsi que de la différence ou non du type de dopant [13], il existe plusieurs types d'hétérojonctions. Ces types varient en fonction des différents objectifs et applications (diode laser à hétérojonction [15], photodiode à hétérojonction [16], composants utilisant un "gaz 2D" [17], transistors bipolaires à hétérojonction [18], ...).

1.3 Bandes d'énergie

Les bandes d'énergies d'un semi-conducteur séparés par une bande interdite d'une valeur moyenne comparée à ce qui se trouve dans les isolants et les conducteurs, ce qui rend les semi-conducteurs largement utilisé dans l'industrie électronique. Les bandes d'énergies sont définie comme suit : considérons un atome isolé ; les niveaux d'énergies électroniques de cet atome sont discrets, comme l'explique le modèle Bohr [19]. Lorsque l'on pose dans une structure cristalline (les atomes sont groupés en réseaux régulièrement disposés dans l'espace), les niveaux d'énergies électroniques de chaque atome se scindent en deux sous l'effet d'interactions de nature électrostatique entre les autres atomes, ce qui produit des bandes d'énergie continue ayant une relation avec la distance interatomique [20].

Prenons comme exemple un cristal de silicium **Si**. Les deux niveaux les plus énergétiques sont repérés par E_1 et E_2. Les états d'énergie électronique se scindent et forment deux bandes continues appelées bande de conduction (**BC**) et bande de valence (**BV**), ces bandes sont séparées par une bande interdite puisqu'il y a une énergie inaccessible aux électrons. Cette région interdite est appelée "gap" et sa largeur E_g est caractéristique du matériau, où : $E_g = E_c - E_v$ [21], voir **Figure.** 1.2 qui représente la formation de ces bandes en fonction de la distance interatomique.

1.4 L'approximation de la masse effective

La masse effective est un paramètre largement utilisé dans la physique des semi-conducteurs et l'étude du transport des électrons [22]. Lorsqu'un électron se déplace au milieu d'un matériau ayant une structure cristalline, l'énergie de cet électron varie d'une manière très compliquée, à cause des effets des champs électromagnétiques produits par les atomes du réseau cristallin. Pour simplifier les équations décrivant la dynamique de l'électron dans le réseau cristallin, on considère que l'énergie électronique est constante et que la masse de l'électron prend une valeur différente qui dépend du matériau. Cette masse est appelée *la masse effective* [23]. **Figure.** 1.3 représente un exemple de distribution de la masse effective de l'électron dans **GaAs** par rapport à la masse de l'électron dans le vide.

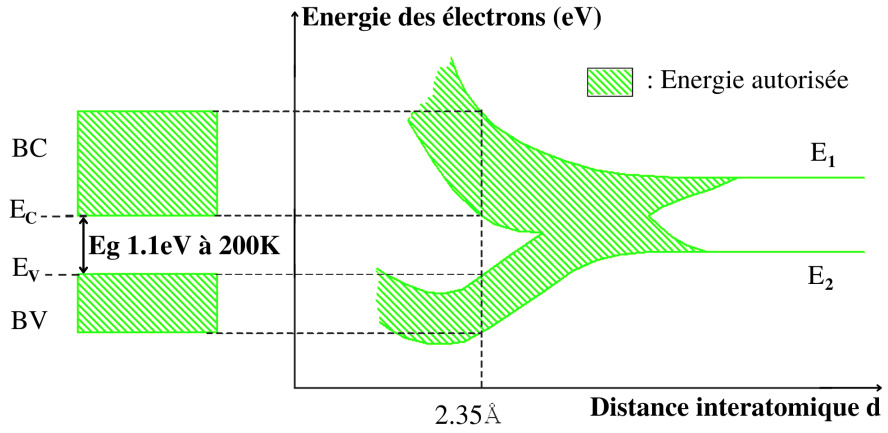


FIGURE 1.2 – Formation des bandes d'énergie pour les électrons d'atomes de silicium.

1.5 Hétérostructures

Une hétérostructure représente la composition des plusieurs couches minces des semi-conducteurs à gaps différents [24]. La différence entre les gaps d'énergie des couches d'hétérostructure joue un rôle principal pour créer des puits quantiques ou bien des barrières quantiques [24]. Dans **Figure.** 1.4 nous montront une hétérostructure constituée de cinq couches de semi-conducteurs avec un profile arbitraire d'énergie potentielle.

1.6 Motivation de ce travail

Les hétérostructures ont vu de nombreuses utilisations dans le domaine de la technologie électronique [12]. Dans plusieurs applications, les hétérostructures sont sous l'effet de champs électromagnétiques extérieurs. Ces champs peuvent provenir de composants électroniques proches. Par conséquent, on se poserait la question de ***savoir comment ces champs affecteront la transmission électronique et les niveaux d'énergie ?***

Pour répondre à cette question, nous ferons une étude théorique sur l'effet des champs électromagnétiques sur l'hétérostructure, où nous allons trouver le coefficient transimission électronique. Ce dernier permet de calculer les niveaux d'énergie d'un électron qui se déplace dans les couches d'hétérostructures.

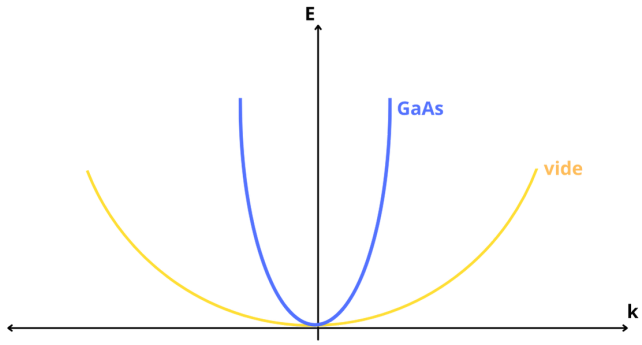


FIGURE 1.3 – La distribution de la masse effective de l'électron dans **GaAs** par rapport à la masse de l'électron dans le vide.

1.7 Organisation du manuscrit

Dans le **Chapitre 2**, nous faisons une étude analytique sur une hétrostructure libre de N couches de semi-conducteurs, pour essayer d'obtenir l'expression de la fonction d'onde d'un électron se propageant dans les couches de l'hétérostructure. Puis, nous utilisons la méthode de la matrice de transfert pour écrire l'expression du coefficient de transmission en fonction de l'énergie électronique.

Le **Chapitre 3** est une étude identique avec l'étude du chapitre 2, sauf que cette étude sera menée sur une hétrostructure de N couches plongée dans un champ électromagnétique.

Dans le **Chapitre 4**, nous utilisons les résultats des **Chapitres 2 et 3** avec l'aide d'un programme de simulation pour trouver les valeurs numériques d'énergie électronique, au but de faire une analyse sur l'effet des champs électromagnétiques sur les niveaux d'énergie des hétérostructures.

Ce travail est conclue par une discussion générale sur tout les résultats analytique et numérique des notre études précédentes.

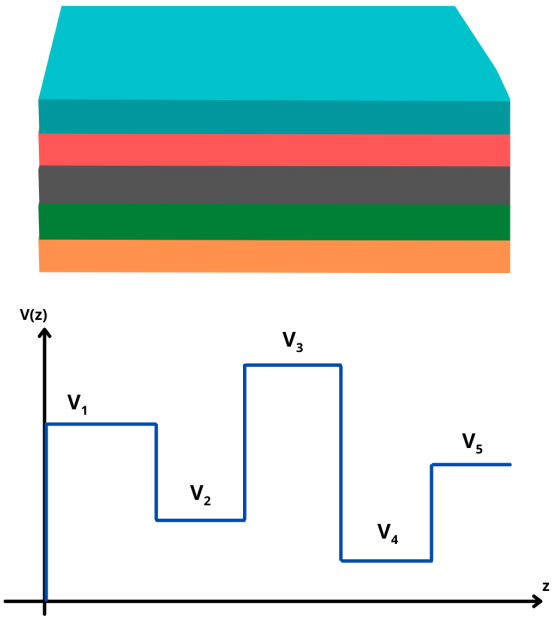


FIGURE 1.4 – Structure de cinq couches de semi-conducteurs avec un profil arbitraire d'énergie potentielle.

Chapitre 2

Hétérostructures libres

Ce chapitre est une étude analytique d'un système physique composé par une hétrostructure libre (absence des champs électromagnétiques), où nous allons écrire l'expression de la fonction d'onde, comme un premier pas. Puis, on va essayer d'obtenir l'expression du coefficient de transmission par l'utilisation de la méthode de la matrice de transfert.

2.1 Diagramme de l'énergie potentielle d'une hétérostructure libre

Par *hétérostructure libre* nous voulons dire toute hétérostructure dans un espace libre de tous champs électromagnétiques extérieurs. Dans la suite, on considère une hétérostructure de N couches de semi-conducteurs. Son diagramme d'énergie potentielle est représenté dans **Figure.** 2.1.

2.2 Equation de Schrödinger et fonctions d'onde

L'équation de Schrödinger dans la région j ($j = 0, \ldots, 2N$, voir **Figure.** 2.1) s'écrit :

$$\frac{-\hbar^2}{2m_j}\Delta\psi_j + V_j\psi_j = E\psi_j \ , \tag{2.1}$$

avec $\psi_j(x, y, z)$ la fonction d'onde d'un électron, E l'énergie de l'électron dans la région j, $\hbar = h/2\pi$, h est la constante de Planck, m_j est la masse effective de l'électron dans région j, et Δ dénote le laplacien,

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \ . \tag{2.2}$$

L'équation (2.1) peut être écrite comme suit :

$$\Delta\psi_j + k_j^2\psi_j = 0 \ , \tag{2.3}$$

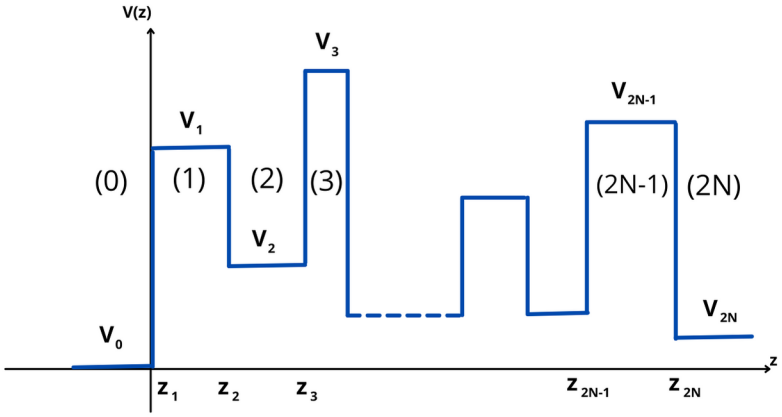


FIGURE 2.1 – Diagramme de l'énergie potentielle d'une hétérostructure libre de N couches.

avec :

$$k_j = \sqrt{\frac{2m_j}{\hbar^2}(E - V_j)} \ . \tag{2.4}$$

Si $E < V_j$ alors k_j est un nombre imaginaire et si $E > V_j$ alors k_j est un nombre réel.

La solution de l'équation de Schrödinger dans la région j s'écrit :

$$\psi_j(x, y, z) = \mathrm{e}^{ik_{j,x}x}\mathrm{e}^{ik_{j,y}y}\left(A_j\mathrm{e}^{ik_{j,z}z} + B_j\mathrm{e}^{-ik_{j,z}z}\right) \ , \tag{2.5}$$

où A_j et B_j sont des nombres complexes et dénotent les amplitudes d'ondes incidente et réfléchie, respectivement ; et :

$$k_{j,x} = \sqrt{\frac{2m_j}{\hbar^2}E_x} \ , \tag{2.6}$$

$$k_{j,y} = \sqrt{\frac{2m_j}{\hbar^2}E_y} \ , \tag{2.7}$$

$$k_{j,z} = \sqrt{\frac{2m_j}{\hbar^2}(E_z - V_j)} \ , \tag{2.8}$$

avec $E = E_x + E_y + E_z$.

2.3 Conditions de continuité de BenDaniel-Duke

Les expressions généralisées des conditions de continuités à un point d'intersection entre les régions j et $j+1$, i.e. le point z_{j+1}, sont comme suit [25] :

$$\psi_j\left(z_{j+1}\right) = \psi_{j+1}\left(z_{j+1}\right) \ , \tag{2.9}$$

$$\frac{1}{m_j}\vec{\nabla}\psi_j\left(z_{j+1}\right) = \frac{1}{m_{j+1}}\vec{\nabla}\psi_{j+1}\left(z_{j+1}\right) \ , \tag{2.10}$$

avec $j = 0, \ldots, 2N-1$.

Le calcul de $\nabla\psi_j$ donne (voir **Annexe** A pour détail) :

$$\vec{\nabla}\psi_j(x,y,z) = \Big[ik_{j,x}\left(A_j\mathrm{e}^{ik_{j,z}z} + B_j\mathrm{e}^{-ik_{j,z}z}\right)\vec{e}_x + ik_{j,y}\Big(A_j\mathrm{e}^{ik_{j,z}z} + B_j\mathrm{e}^{-ik_{j,z}z}\Big)\vec{e}_y + ik_{j,z}\left(A_j\mathrm{e}^{ik_{j,z}z} - B_j\mathrm{e}^{-ik_{j,z}z}\right)\vec{e}_z\Big]\mathrm{e}^{ik_{j,x}x}\mathrm{e}^{ik_{j,y}y} \ . \tag{2.11}$$

Pour simplifier les calculs, on va supposer que $k_{j,x} = k_{j,y} = 0$, alors l'expression de $\vec{\nabla}\psi_j$ devient :

$$\vec{\nabla}\psi_j(x,y,z) = ik_{j,z}\left(A_j\mathrm{e}^{ik_{j,z}z} - B_j\mathrm{e}^{-ik_{j,z}z}\right)\vec{e}_z \ . \tag{2.12}$$

Remplaçant la solution (2.5) et l'expression (2.12) dans les conditions de continuité (2.9) et (2.10) , on obtient :

$$\Theta(k_{j,z};z_{j+1})A_j + \Phi(k_{j,z};z_{j+1})B_j = \Theta(k_{j+1,z};z_{j+1})A_{j+1} + \Phi(k_{j+1,z};z_{j+1})B_{j+1} \tag{2.13}$$

et

$$\frac{\Theta'(k_{j,z};z_{j+1})}{m_j}A_j + \frac{\Phi'(k_{j,z};z_{j+1})}{m_j}B_j = \frac{\Theta'(k_{j+1,z};z_{j+1})}{m_{j+1}}A_{j+1} + \frac{\Phi'(k_{j+1,z};z_{j+1})}{m_{j+1}}B_{j+1} \ , \tag{2.14}$$

où on a définit les fonctions Θ et Φ par les deux expressions suivantes :

$$\Theta(k;z) = \mathrm{e}^{ikz} \ , \tag{2.15}$$

$$\Phi(k;z) = \mathrm{e}^{-ikz} \ , \tag{2.16}$$

et Θ' et Φ' sont les fonctions dérivées par rapport à z.

2.4 Matrice de transfert

Les équations (2.13) et (2.14) peuvent être écrites sous la forme matricielle suivante :

$$M_{2j}\begin{pmatrix}A_j\\B_j\end{pmatrix} = M_{2j+1}\begin{pmatrix}A_{j+1}\\B_{j+1}\end{pmatrix} \ , \tag{2.17}$$

où les matrices M_{2j} et M_{2j+1} sont définies comme :

$$M_{2j} = \begin{pmatrix} \Theta(k_{j,z}; z_{j+1}) & \Phi(k_{j,z}; z_{j+1}) \\ \frac{\Theta'(k_{j,z}; z_{j+1})}{m_j} & \frac{\Phi'(k_{j,z}; z_{j+1})}{m_j} \end{pmatrix} , \tag{2.18}$$

$$M_{2j+1} = \begin{pmatrix} \Theta(k_{j+1,z}; z_{j+1}) & \Phi(k_{j+1,z}; z_{j+1}) \\ \frac{\Theta'(k_{j+1,z}; z_{j+1})}{m_{j+1}} & \frac{\Phi'(k_{j+1,z}; z_{j+1})}{m_{j+1}} \end{pmatrix} . \tag{2.19}$$

Puisque l'inverse de la matrice M_{2j} existe toujours (voir **Annexe** B), on obtient :

$$\begin{pmatrix} A_j \\ B_j \end{pmatrix} = M_{2j}^{-1} M_{2j+1} \begin{pmatrix} A_{j+1} \\ B_{j+1} \end{pmatrix} . \tag{2.20}$$

Alors, on peut écrire les coefficients de la première région en fonction de celles de la dernière par la relation :

$$\begin{pmatrix} A_0 \\ B_0 \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} A_{2N} \\ B_{2N} \end{pmatrix} , \tag{2.21}$$

avec

$$M = \prod_{j=0}^{2N-1} M_{2j}^{-1} M_{2j+1} . \tag{2.22}$$

La matrice M est dite *matrice de transfert* [26].

2.5 Coefficient de transmission

Le coefficient de transmission T est défini par le rapport entre le courant de probabilité transmis J_{trans} et le courant de probabilité incident J_{inc} [27], c-à-dire :

$$T = \frac{J_{\text{trans}}}{J_{\text{inc}}} , \tag{2.23}$$

où les courants de probabilité incident et transmis sont définis par les relations :

$$J_{\text{inc}} = \frac{i\hbar}{2m} \left[\phi_{\text{inc}}(x,y,z) \vec{\nabla} \phi^*_{\text{inc}}(x,y,z) - \phi^*_{\text{inc}}(x,y,z) \vec{\nabla} \phi_{\text{inc}}(x,y,z) \right] , \tag{2.24}$$

$$J_{\text{trans}} = \frac{i\hbar}{2m} \Big[\phi_{\text{trans}}(x,y,z) \vec{\nabla} \phi^*_{\text{trans}}(x,y,z) - \phi^*_{\text{trans}}(x,y,z) \vec{\nabla} \phi_{\text{trans}}(x,y,z) \Big] , \tag{2.25}$$

tels que :

$$\phi_{\text{inc}} = A_0 \mathrm{e}^{ik_{0,z}z} , \tag{2.26}$$

$$\phi_{\text{trans}} = A_{2N} \mathrm{e}^{ik_{2N,z}z} . \tag{2.27}$$

Alors, on obtient les résultats suivants :

$$J_{\text{inc}} = \frac{\hbar k_{2N,z}}{m_{2N}} |A_{2N}|^2 \ , \tag{2.28}$$

$$J_{\text{trans}} = \frac{\hbar k_{0,z}}{m_0} |A_0|^2 \ , \tag{2.29}$$

et l'expression du coefficient de transfert devient :

$$T = \frac{k_{2N,z} m_0}{k_{0,z} m_{2N}} \left| \frac{A_{2N}}{A_0} \right|^2 \ . \tag{2.30}$$

D'autre part, si on pose :

$$M = \begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{pmatrix} \ , \tag{2.31}$$

on peut écrire l'équation **Eq.** (2.21) sous la forme suivante :

$$\begin{pmatrix} A_0 \\ B_0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_{2N} \\ 0 \end{pmatrix} \ . \tag{2.32}$$

Dans cette dernière relation on a $B_{2N} = 0$ car dans la région $2N$, l'onde transmise tend vers à l'infinie (elle se propage librement dans l'espace), elle ne se réfléchit jamais parce qu'il n'y a plus de barrières après cette région. Alors on trouve :

$$A_0 = M_{11} A_{2N} \ . \tag{2.33}$$

Alors l'expression du coefficient de transmission T devient :

$$T \equiv T(E) = \frac{k_{2N,z} m_0}{k_{0,z} m_{2N}} |M_{11}|^{-2} \ . \tag{2.34}$$

2.6 Niveaux d'énergie

L'émission électronique d'une hétérostructure est réalisée en fonction du phénomène de l'effet tunnel [28]. En mécanique classique, il est impossible de trouver une particule possédant une énergie E peut franchir une barrière de potentiel dont la hauteur V_0 est supérieure à son énergie, voire **Figure.** 2.2-(a).

Mais, en mécanique quantique, un électron décrit par son énergie E, masse m_0 et par sa fonction d'onde ψ, peut franchir la barrière même si $E < V_0$; par un état lié, tel que la probabilité de le trouver de l'autre côté de la barrière n'est pas nulle, voir **Figure.** 2.2-(b). on appelle ce phénomène l'effet tunnel [29].

La méthode que nous allons adopter pour trouver les états énergétiques d'un électron dans une hétérostructure est la méthode de la matrice de transfert [30]. Cette méthode consiste à trouver les valeurs maximales de la variation du coefficent de transmission en fonction de la variation de l'énergie. Ces valeurs maximales représentent les niveaux d'énergie [31], voir **Figure.** 2.3.

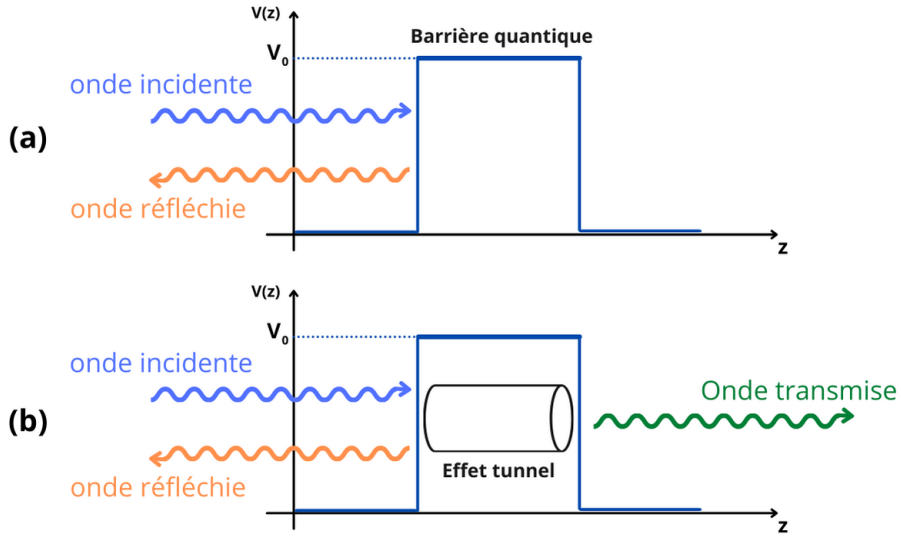


FIGURE 2.2 – Propagation d'une onde incident par une barrière quantique ; (a) : cas de la mécanique classique ; (b) : cas de la mécanique quantique.

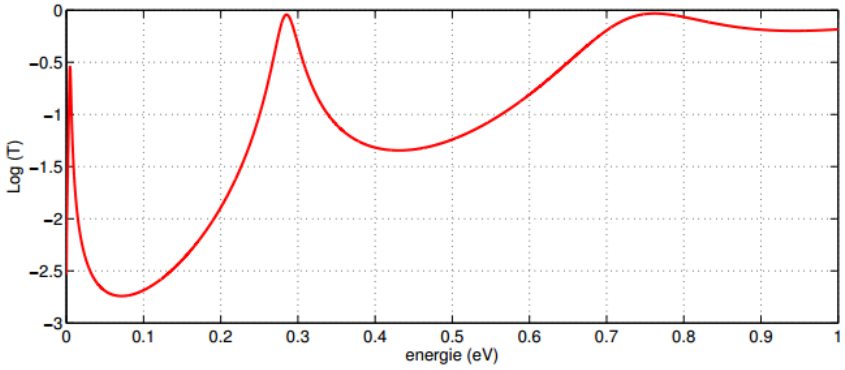


FIGURE 2.3 – La variation du coefficient de transmission en fonction de l'énergie de l'électron pour une hétérostructure à simple puits quantique ; les nivaux d'energies : $E_1 = 12.93$ et $E_2 = 300.63$ [1].

Chapitre 3

Hétérostructures dans un champ éléctromagnétique

Ce chapitre présente une étude analytique de la transmission électrique d'une hétérostructure sous l'effet de champs électromagnétiques extérieurs. En particulier, le coefficient de transmission T est obtenu en utilisant la méthode de la matrice de transfert [30]. Les résultats de ce chapitre seront utilisés dans le **Chapitre** 4 pour déterminer les niveaux d'énergie des hétrostructures.

3.1 Définition du système

Le système à étudier consiste en une hétérostructure de N couches, voir **Figure.** 3.1 pour la représentation du profil de l'énergie potentielle. De plus, on applique un champ électromagnétique dans les régions $1, \ldots, 2N-1$. Les champs sont nulles dans la première région ($j = 0$) et la dernière ($j = 2N$). Alors, l'énergie potentielle du système est modifiée à cause des champs électromagnétiques. Il faut mentionner que la structure de l'énergie potentielle n'est affectée que par la composante électrique du champ extérieur [32]. Pour simplifier l'étude, on considère le cas où les champs électrique et magnétique sont uniformes dans chaque région. Par conséquent, le diagramme d'énergie potentielle de l'hétrostructure devient comme indiqué sur **Figure.** 3.2.

3.2 Hamiltonien du système

L'équation de Schrödinger dans la région j s'écrit :

$$H_j \psi_j = E \psi_j \ , \tag{3.1}$$

H_j dénote l'hamiltonien du système dans la région j ($j = 0, \ldots, 2N$). Dans la suite, on écrit la fonction d'onde sous la forme [32]

$$\psi_j(x, y, z) = \mathrm{e}^{ik_{j,x}x} \mathrm{e}^{ik_{j,y}y} \varphi_j(z) \ , \tag{3.2}$$

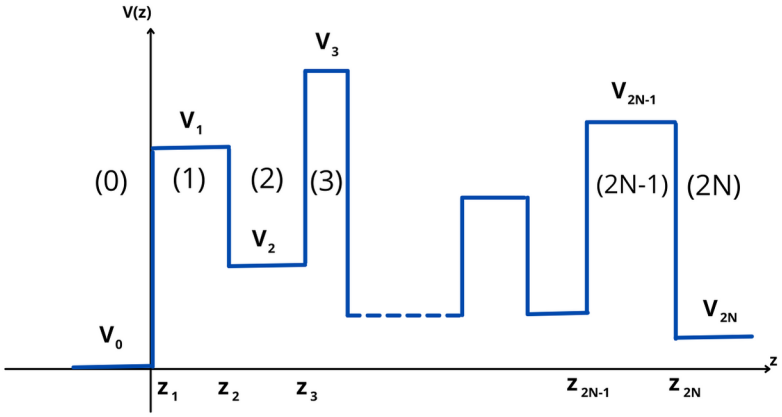


FIGURE 3.1 – Diagramme de l'énergie potentielle d'une hétérostructure de N couches en l'absence des champs électromagnétiques extérieurs.

avec $\varphi_j(z)$ est une fonction de z. Par ailleurs, pour simplifier l'étude et les expressions on prend dans la suite $k_{j,x} = k_{j,y} = 0$.

L'hamiltonien du système H_j s'écrit [32] :

$$H_j = \frac{1}{2m_j}(P_x^2 + P_y^2 + P_z^2 + 2eB\ zP_y) + \frac{e^2B^2}{2m_j}z^2 + V_j(z) - eF_j\ (z - z_j) - \sum_{i=1}^{j-1} eF_i\ (z_{i+1} - z_i)\ , \quad (3.3)$$

avec m_j la masse effective, e la charge électrique de l'électron, B l'intensité du champ magnétique, $V_j(z)$ est le potentil de structure dans la région j (**Figure.** 3.1), F_j l'intensité du champ électrique dans la région j, P_y, P_x et P_z sont respectivement les composantes de l'opérateur impulsion sur les axes x, y et z.

L'application des conposantes de l'opérateur de la quantité de mouvement,

$$P_x = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\ , P_y = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial y}\ , P_z = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial z}\ , \quad (3.4)$$

sur la fonction d'onde $\psi_j(x, y, z)$ donne :

$$P_x^2\psi_j = P_y^2\psi_j = 0\ , \quad (3.5)$$

$$P_z^2\psi_j = -\hbar^2\varphi_j''(z)\ . \quad (3.6)$$

On remplace ces dernières équations dans **Eq.** (3.3) pour trouver l'expression

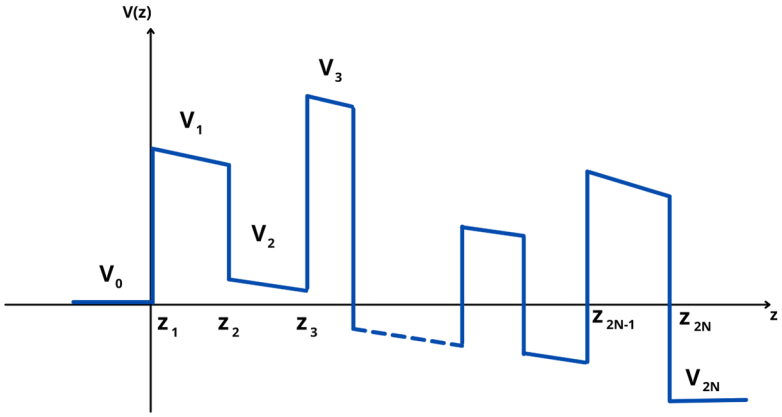


FIGURE 3.2 – Diagramme de l'énergie potentielle d'une hétérostructure de N couches dans un champ électromagnétique exterieur. Seul le champ électrique a un effet sur la structure.

de $H_j\psi_j$, on obtient

$$H_j\psi_j = \frac{-\hbar^2}{2m_j}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}z^2}\varphi_j(z) + \left[\frac{e^2B^2}{2m_j}z^2 + V_j(z) - eF_j\ (z - z_j) - \sum_{i=1}^{j-1} eF_i\ (z_{i+1} - z_i)\right]\varphi_j(z)\ . \quad (3.7)$$

Alors, l'équation de Schrödinger, **Eq.** (3.1), devient :

$$H_j\varphi_j(z) = E\varphi_j(z)\ , \quad (3.8)$$

où H_j est le hamiltonien du système :

$$H_j = -\frac{\hbar^2}{2m_j}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}z^2} + \frac{e^2B^2}{2m_j}z^2 - eF_jz + V_j(z) + eF_jz_j - \sum_{i=1}^{j-1} eF_i\,(z_{i+1} - z_i)\ . \quad (3.9)$$

En prenant le terme $\frac{1}{2}\frac{e^2B^2}{m_j}$ comme facteur commun on trouve :

$$H_j = \frac{-\hbar^2}{2m_j}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}z^2} + \frac{1}{2}\frac{e^2B^2}{m_j}\left[z^2 - \frac{2m_jF_j}{eB^2}z\right] + V_j(z) + eF_jz_j - \sum_{i=1}^{j-1} eF_i\,(z_{i+1} - z_i)\ . \quad (3.10)$$

Dans la dernière équation, le terme entre deux crochets peut être écrit sous la forme suivant :

$$z^2 - 2z\,\frac{m_j F_j}{eB^2} = \left[z - \frac{m_j F_j}{eB^2}\right]^2 - \left(\frac{m_j F_j}{eB^2}\right)^2 \ . \tag{3.11}$$

En remplaçant **Eq.** (3.11) dans **Eq.** (3.10) on obtient :

$$H_j = \frac{-\hbar^2}{2m_j}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}z^2} + \frac{1}{2}m_j\left(\frac{eB}{m_j}\right)^2\left[z - \frac{m_j F_j}{eB^2}\right]^2 + V_j(z) + eF_j z_j - \left[\sum_{i=1}^{j-1} eF_i\left(z_{i+1} - z_i\right)\right] - \frac{m_j F_j^2}{2B^2} \ . \tag{3.12}$$

On peut aussi écrire cet hamiltonien comme suit :

$$H_j = \frac{-\hbar^2}{2m_j}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}z^2} + \frac{1}{2}m_j\omega_j^2(z - z_{0j})^2 + C_j \ , \tag{3.13}$$

où on a défini les grandeurs suivantes :

$$\omega_j = \frac{eB}{m_j} \ , \tag{3.14}$$

$$z_{0j} = \frac{m_j F_j}{eB^2} \ , \tag{3.15}$$

$$C_j = V_j(z) + eF_j z_j - \left[\sum_{i=1}^{j-1} eF_i\left(z_{i+1} - z_i\right)\right] - \frac{m_j F_j^2}{2B^2} \ , \tag{3.16}$$

pour $j = 1, \ldots, 2N-1$, et

$$\omega_\ell = 0 \ , \tag{3.17}$$

$$z_{0\ell} = 0 \ , \tag{3.18}$$

$$C_\ell = V_\ell - \sum_{i=1}^{\ell-1} eF_i(z_{i+1} - z_i) \ , \tag{3.19}$$

pour $\ell = 0$ ou $\ell = 2N$.

On doit mentionner ici que pour un champ magnétique nul, l'hamiltonien du système s'écrira :

$$H_j = \frac{-\hbar^2}{2m_j}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}z^2} - eF_j z + V_j(z) + eF_j z_j - \sum_{i=1}^{j-1} eF_i\left(z_{i+1} - z_i\right) \ . \tag{3.20}$$

3.3 Solutions de l'équation de Schrödinger

Régions 0 et $2N$

Dans ces deux régions, on suppose qu'il n'y a pas de champs électriques ou magnétiques. Alors l'hamiltonien s'écrit

$$H_0 = \frac{-\hbar^2}{2m_0}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}z^2} + V_0(z) \ , \tag{3.21}$$

pour la région 0, et

$$H_{2N} = \frac{-\hbar^2}{2m_{2N}}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}z^2} + V_{2N}(z) - \sum_{i=1}^{2N-1} eF_i\left(z_{i+1} - z_i\right) \ , \tag{3.22}$$

pour la région $2N$.

En utilisant une notation similaire à celle du **Chapitre 2**, nous pouvons écrire la fonction d'onde sous la forme :

$$\varphi_0(z) = A_0\Theta(k_0; z) + B_0\Phi(k_0; z) \ , \tag{3.23}$$

$$\varphi_{2N}(z) = A_{2N}\Theta(k_{2N}; z) + B_{2N}\Phi(k_{2N}; z) \ , \tag{3.24}$$

où les fonctions Θ et Φ sont données dans **Eq.** (2.15) et **Eq.** (2.16) respectivement, et k_0 et k_{2N} sont définies par

$$k_0 = \sqrt{\frac{2m_0(E - V_0)}{\hbar^2}} \ , \tag{3.25}$$

$$k_{2N} = \sqrt{\frac{2m_{2N}\left(E - V_{2N} + \sum_{i=1}^{2N-1} eF_i(z_{i+1} - z_i)\right)}{\hbar^2}} \ . \tag{3.26}$$

Régions $1, \ldots, 2N-1$

On a deux possibilités, le cas d'un champs magnétique nul, $B = 0$, et l'autre cas où $B \neq 0$.

Pour $B = 0$, l'hamiltonien correspondant à la région j ($j = 1, \ldots, 2N-1$) est donné par **Eq.** (3.20). Alors la fonction d'onde s'écrit pour $F_j \neq 0$ par l'expression suivante [1] [33] [34] :

$$\varphi_j(z) = A_j\Theta(\lambda_j, z_{0j}; z) + B_j\Phi(\lambda_j, z_{0j}; z) \ , \tag{3.27}$$

où λ_j et z_{0j} sont donnés par

$$\lambda_j = \left(\frac{-2m_j eF_j}{\hbar^2}\right)^{\frac{1}{3}} \ , \tag{3.28}$$

$$z_{0j} = z_j + \frac{V_j - E - \sum_{\ell=1}^{j-1} eF_\ell\ \left(z_{\ell+1} - z_\ell\right)}{eF_j} \ , \tag{3.29}$$

et Θ et Φ sont les fonctions paramétriques suivantes :

$$\Theta(\lambda, \tilde{z}; z) = \mathrm{Ai}\left(\lambda(z - \tilde{z})\right) \ , \tag{3.30}$$

$$\Phi(\lambda, \tilde{z}; z) = \mathrm{Bi}\left(\lambda(z - \tilde{z})\right) \ , \tag{3.31}$$

Ai et Bi sont les fonctions de Airy de première et deuxième espèce respectivement [35].

Dans le cas où il y a un champs magnétique exterieur, l'hamiltonien est donné par **Eq.** (3.13), et la fonction d'onde est obtenue comme suit.

On define la variable ξ,

$$\xi = \left(m_j \omega_j / \hbar\right)^{1/2} (z - z_{0j}) \ , \tag{3.32}$$

et on écrit la fonction d'onde φ_j sous la forme [32] :

$$\varphi_j(z) = U_j(\xi) \mathrm{e}^{-\xi^2/2} \ , \tag{3.33}$$

où U_j est une fonction à déterminer.

On veut trouver l'équation de Schrödinger en terme de la variable ξ. L'hamiltonien devient

$$\begin{aligned} H_j &= \frac{-\hbar^2}{2m_j} \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}z^2} + \frac{1}{2} m_j \omega_j^2 (z - z_{0j})^2 + C_j \ , \\ &= \frac{-\hbar^2}{2m_j} \left(\frac{\mathrm{d}\xi}{\mathrm{d}z}\right)^2 \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\xi^2} + \frac{1}{2} \hbar \omega_j \xi^2 + C_j \ , \\ &= \hbar \omega_j \left(-\frac{1}{2} \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\xi^2} \ + \ \frac{1}{2} \xi^2 \ + \ \tilde{C}_j \right) \ , \end{aligned} \tag{3.34}$$

avec

$$\tilde{C}_j = \frac{C_j}{\hbar \omega_j} \ , \tag{3.35}$$

et on a utilisé les formules

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi} = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}z} \frac{\mathrm{d}z}{\mathrm{d}\xi} = \left(\hbar / m_j \omega_j\right)^{1/2} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}z} \ , \tag{3.36}$$

$$\Rightarrow \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\xi^2} = \frac{\hbar}{m_j \omega_j} \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}z^2} \ . \tag{3.37}$$

L'équation de Schrödinger peut être réécrite en terme des fonctions U_j et la nouvelle variable ξ. L'équation $H_j \varphi_j = E \varphi_j$ devient :

$$\hbar \omega_j \left(-\frac{1}{2} \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\xi^2} \ + \ \frac{1}{2} \xi^2 \ + \ \tilde{C}_j \right) U_j(\xi) \mathrm{e}^{-\xi^2/2} = E U_j(\xi) \mathrm{e}^{-\xi^2/2} \ , \tag{3.38}$$

avec les formules des dérivées de U_j :

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi} \left[U_j(\xi) \mathrm{e}^{-\xi^2/2} \right] = \left[U_j'(\xi) - \xi U_j(\xi) \right] \mathrm{e}^{-\xi^2/2} \ , \tag{3.39}$$

$$\Rightarrow \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\xi^2} \left[U_j(\xi) \mathrm{e}^{-\xi^2/2} \right] = \left[U_j''(\xi) - 2\xi U_j'(\xi) + \left(\xi^2 - 1\right) U_j(\xi) \right] \mathrm{e}^{-\xi^2/2} \ . \tag{3.40}$$

En remplaçant ces deux dernières équations dans **Eq.** (3.38), on obtient :

$$U_j''(\xi) - 2\xi U_j'(\xi) + \left(2\tilde{E}_j - 2\tilde{C}_j - 1\right) U_j(\xi) = 0 \ , \tag{3.41}$$

avec $\tilde{E}_j$ est défini par

$$\tilde{E}_j = \frac{E}{\hbar\omega_j} \ . \tag{3.42}$$

Posons maintenant

$$\lambda_j = 2\tilde{E}_j - 2\tilde{C}_j - 1 \ , \tag{3.43}$$

alors **Eq.** (3.41) devient :

$$U_j''(\xi) - 2\xi U_j'(\xi) + \lambda_j U_j(\xi) = 0 \ . \tag{3.44}$$

Eq. (3.44) représente l'équation d'Hermite [36]. Les solutions indépendentes de cette équation différentielle sont les fonctions hypergéométriques confluente [37] [38] ${}_1\mathrm{F}_1(-\frac{1}{4}\lambda_j, \frac{1}{2}; \xi^2)$ et $\xi\ {}_1\mathrm{F}_1(-\frac{1}{4}(\lambda_j - 2), \frac{3}{2}; \xi^2)$ tel que (voir **Annexe** D pour la démonstration) :

$${}_1\mathrm{F}_1\left(-\frac{1}{4}\lambda_j, \frac{1}{2}; \xi^2\right) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\xi^{2n}}{(2n)!} \prod_{\ell=1}^{n} (4\ell - 4 - \lambda_j) \ , \tag{3.45}$$

$$\xi\ {}_1\mathrm{F}_1\left(-\frac{1}{4}(\lambda_j - 2), \frac{3}{2}; \xi^2\right) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\xi^{2n+1}}{(2n+1)!} \prod_{\ell=1}^{n} (4\ell - 2 - \lambda_j) \ . \tag{3.46}$$

La solution U_j s'écrit

$$U_j = A_j\ {}_1\mathrm{F}_1\left(-\frac{1}{4}\lambda_j, \frac{1}{2}; \xi^2\right) + B_j \xi\ {}_1\mathrm{F}_1\left(-\frac{1}{4}(\lambda_j - 2), \frac{3}{2}; \xi^2\right) \ . \tag{3.47}$$

Finalement, en utilisant **Eq.** (3.33) on trouve la fonction d'onde

$$\varphi_j(z) = A_j \Theta(\lambda_j, m_j\omega_j/\hbar, z_{0j}; z) + B_j \Phi(\lambda_j, m_j\omega_j/\hbar, z_{0j}; z) \ , \tag{3.48}$$

où on a défini les fonctions Θ et Φ, définies pour les paramètres positifs ρ, λ et $\tilde{z}$, par les formules

$$\Theta(\lambda, \rho, \tilde{z}; z) = \ {}_1\mathrm{F}_1\left(-\frac{1}{4}\lambda, \frac{1}{2}; \rho(z - \tilde{z})^2\right) \mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\rho(z-\tilde{z})^2} \ , \tag{3.49}$$

$$\Phi(\lambda, \rho, \tilde{z}; z) = \sqrt{\rho}(z - \tilde{z})\ {}_1\mathrm{F}_1\left(-\frac{1}{4}(\lambda - 2), \frac{3}{2}; \rho(z - \tilde{z})^2\right) \mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\rho(z-\tilde{z})^2} \ . \tag{3.50}$$

3.4 Matrice de transfert

La matrice de transfert peut être calculée en suivant les mêmes étapes que celles indiquées dans **Chapitre 2**, en particulier les équations (2.18), (2.19) et

(2.22). Alors la matrice de transfert pour une hétérostructure dans un champs électromagnétique est donnée par l'expression suivantes :

$$M = \prod_{j=0}^{2N-1} M_{2j}^{-1} M_{2j+1} \ , \tag{3.51}$$

cette dernière équation est valable si et seulement si la matrice M_{2j}^{-1} existe toujours, et c'est ce qui est démontré à **Annexe** B. Mais les matrices $M_1, \ldots, M_{4N-2}$ sont écrites en terme de Θ et Φ données par **Eq.** (3.49) et **Eq.** (3.50). Néanmoins, pour M_0 et M_{4N-1}, les fonctions Θ et Φ sont définies dans **Eq.** (2.15) et **Eq.** (2.16) réspectivement.

Explicitement, on a les expressions suivantes :

$$M_0 = \begin{pmatrix} \Theta(k_0; z_1) & \Phi(k_0; z_1) \\ \frac{\Theta'(k_0;z_1)}{m_0} & \frac{\Phi'(k_0;z_1)}{m_0} \end{pmatrix} \ , \tag{3.52}$$

$$M_{4N-1} = \begin{pmatrix} \Theta(k_{2N}; z_{2N}) & \Phi(k_{2N}; z_{2N}) \\ \frac{\Theta'(k_{2N};z_{2N})}{m_{2N}} & \frac{\Phi'(k_{2N};z_{2N})}{m_{2N}} \end{pmatrix} \ , \tag{3.53}$$

$$M_{2j} = \begin{pmatrix} \Theta(\lambda_j, m_j\omega_j/\hbar, z_{0j}; z_{j+1}) & \Phi(\lambda_j, m_j\omega_j/\hbar, z_{0j}; z_{j+1}) \\ \frac{\Theta'(\lambda_j, m_j\omega_j/\hbar, z_{0j}; z_{j+1})}{m_j} & \frac{\Phi'(\lambda_j, m_j\omega_j/\hbar, z_{0j}; z_{j+1})}{m_j} \end{pmatrix} \ , \tag{3.54}$$

$$M_{2j+1} = \begin{pmatrix} \Theta(\lambda_{j+1}, m_{j+1}\omega_{j+1}/\hbar, z_{0,j+1}; z_{j+1}) & \Phi(\lambda_{j+1}, m_{j+1}\omega_{j+1}/\hbar, z_{0,j+1}; z_{j+1}) \\ \frac{\Theta'(\lambda_{j+1}, m_{j+1}\omega_{j+1}/\hbar, z_{0,j+1}; z_{j+1})}{m_{j+1}} & \frac{\Phi'(\lambda_{j+1}, m_{j+1}\omega_{j+1}/\hbar, z_{0,j+1}; z_{j+1})}{m_{j+1}} \end{pmatrix} \ , \tag{3.55}$$

avec l'indice $j = 1, \ldots, 2N-1$ pour **Eq.** (3.54) et $j = 0, \ldots, 2N-2$ pour **Eq.** (3.55).

Les formules de Θ' et Φ' sont démontrée à la **Section** A.2, voir **Eq.** (A.14) et **Eq.** (A.15) qui sont représentées les formules de Θ' et Φ' respectivement.

Pour être complet, nous devons mentionner que pour le cas du champ électrique uniquement, i.e., $B = 0$, les matrices $M_1, \ldots, M_{4N-2}$ s'écrivent comme suit :

$$M_{2j} = \begin{pmatrix} \Theta(\lambda_j, z_{0j}; z_{j+1}) & \Phi(\lambda_j, z_{0j}; z_{j+1}) \\ \frac{\Theta'(\lambda_j, z_{0j}; z_{j+1})}{m_j} & \frac{\Phi'(\lambda_j, z_{0j}; z_{j+1})}{m_j} \end{pmatrix} \ , \tag{3.56}$$

$$M_{2j+1} = \begin{pmatrix} \Theta(\lambda_{j+1}, z_{0,j+1}; z_{j+1}) & \Phi(\lambda_{j+1}, z_{0,j+1}; z_{j+1}) \\ \frac{\Theta'(\lambda_{j+1}, z_{0,j+1}; z_{j+1})}{m_{j+1}} & \frac{\Phi'(\lambda_{j+1}, z_{0,j+1}; z_{j+1})}{m_{j+1}} \end{pmatrix} \ . \tag{3.57}$$

3.5 Coefficient de transmission

Nous rappelons que l'expression du coefficient de transmission est donné par **Eq.** (2.34) :

$$T \equiv T(E) = \frac{k_{2N} m_0}{k_0 m_{2N}} \left| M_{11} \right|^{-2} \ , \tag{3.58}$$

avec M_{11} est l'élement de la matrice M définie dans **Eq.** (3.51).

Chapitre 4

L'effet des champs éléctromagnétique sur les niveaux d'énergie des hétérostructures

Dans le but de trouver les états énergétiques d'un électron dans une hétérostructure, on va utiliser la méthode de la matrice de transfert, qui a été présentée dans **Section** 2.6 et [39]. Cette méthode vise à écrire une relation entre les amplitudes des fonctions d'ondes de la dernière région du l'hétérostructure en fonction de ceux de la première. Ce qui nous permet d'écrire l'expression de coefficient de transmission T en fonction de l'énergie de l'électron E.

Enfin, nous écrivons deux programmes en utilisant les langages *Python*® et *Wolfram*® (voir **Annexe** E) qui nous permettent d'obtenir une courbe qui montre la variation du coefficient de transmission en fonction de l'énergie électronique. Nous trouvons généralement plusieurs valeurs maximales dans cette courbe, qui représentent les niveaux d'énergie de l'électron, voir **Section** 2.6.

4.1 Hétérostructure à double barrières quantiques

On prend une hétérostructure composée de couches de semi-conducteurs de deux types $\mathbf{Al}_x\mathbf{Ga}_{1-x}\mathbf{As}$ et **GaAs** (x dénote la concentration d'aluminium, dans la suite on prend $x = 0.3$). Dans cette configuration, **GaAs** représente les puits et $\mathbf{Al}_{0.3}\mathbf{Ga}_{0.7}\mathbf{As}$ représente la barrière. L'épaisseur de chaque puits $p = 8$nm et de chaque barrière $s = 2.8$nm (voir **Figure.** 4.1-a). Cette structure a été proposée dans la référence [32], nous utiliserons cette structure dans le but de la comparaison avec nos résultats.

Les masses effectives correspondantes à chaque région sont $m_w = 0.067m_0$ et $m_b = 0.0919m_0$ où m_b est la masse effective de la barrière et m_w est la masse du

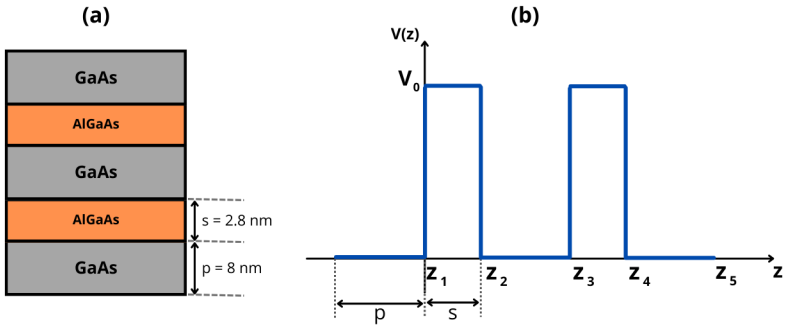


FIGURE 4.1 – Hétérostructure à double barrières quantiques : (a) la structure de double barrières quantiques. (b) Le profil de l'énergie potentielle de cette structure, $V_0 = 0.225\text{eV}$.

puits. Ces deux dernières masses sont déterminé en fonction de la concentration d'aluminium x par l'approximation standard suivante [40] :

$$m_j = (0.067 + 0.083x)\ m_e \qquad , \ 0 \leq x \leq 1 \ , \tag{4.1}$$

où m_e est la masse de l'électron libre.

Le profil de l'énergie potentielle de cette structure est représenté par **Figure.** 4.1-b, la hauteur du potentiel est constante $V_0 = 0.225\text{eV}$. On doit mentionner que la valeur du potentiel V_0 a été calculée par la formule [40] :

$$V_0 = \begin{cases} 0.75x \text{ eV} & \text{si } 0 \leq x \leq 0.45 \\ 0.75x + 0.69(x - 0.45)^2 \text{ eV} & \text{si } 0.45 \leq x \leq 1 \ . \end{cases} \tag{4.2}$$

4.1.1 Hétérostructure à double barrières quantiques en présence d'un champ électrique extérieur

On applique une différence de potentiel $V_a = 0.20$ V entre les points z_1 et z_4, voir **Figure.** 4.1. Alors un champ électrique extérieur est créé dans cette structure.

En calculant le coefficient de transmission pour des énergies variables, on obtient les résultats présentés dans **Figure.** 4.2. De plus, les niveaux d'énergie pour cette configuration sont extraits des pics de la courbe $T(E)$, voir **Tableau.** 4.1.

Pour voir l'effet de la variation d'intensité du champ électrique sur les niveaux d'énergie électronique, on considère différentes valeurs de potentiel électrique : $V_a^{(1)} = 0.08\text{V}$, $V_a^{(2)} = 0.12\text{V}$ et $V_a^{(3)} = 0.18\text{V}$. Les résultats sont donnés dans **Figure.** 4.3 et **Tableau.** 4.2. On peut observer que l'augmentation de l'intensité du champ électrique réduit le nombre de niveaux d'énergie électronique.

On étudie maintenant l'effet de la variation de l'épaisseur des couches barrières s sur les niveaux d'énergie électronique. Pour les valeurs de s suivantes :

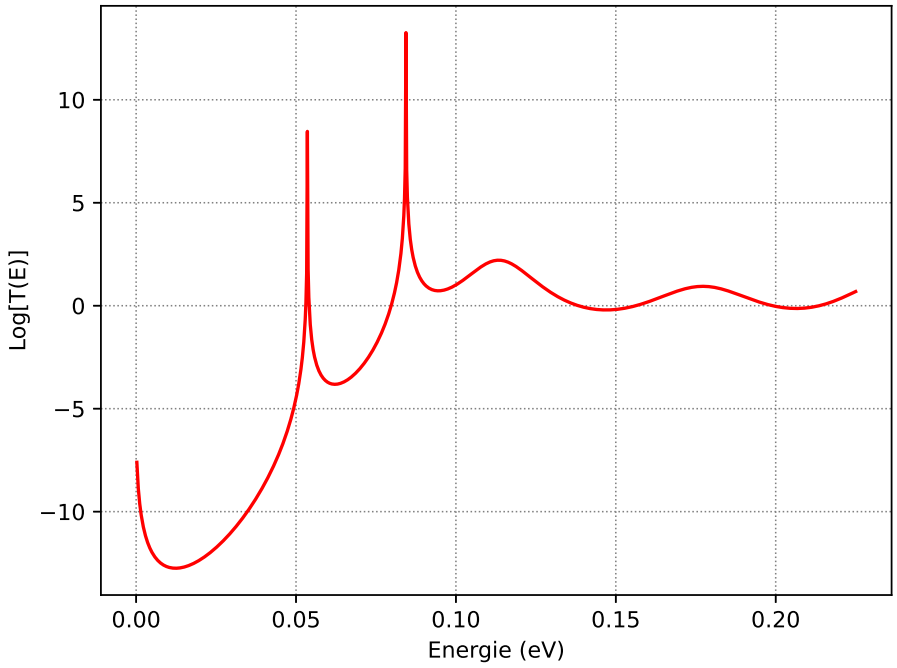


FIGURE 4.2 – La variation du coefficient de transmission en fonction de l'énergie en présence d'un champ électrique extérieur pour un double barrière. Les paramètres utilisés sont $V_a = 0.20$ V, $p = 8$nm, $s = 2.8$nm, $m_w = 0.067m_0$ et $m_b = 0.0919m_0$.

V_a (V)	Niveaux d'énergie (meV)
0.20	$E_1 = 53.2$
	$E_2 = 84.1$

TABLE 4.1 – Les niveaux d'énergie de la configuration $V_a = 0.20$V, $p = 8$nm, $s = 2.8$nm, $m_w = 0.067m_0$ et $m_b = 0.0919m_0$.

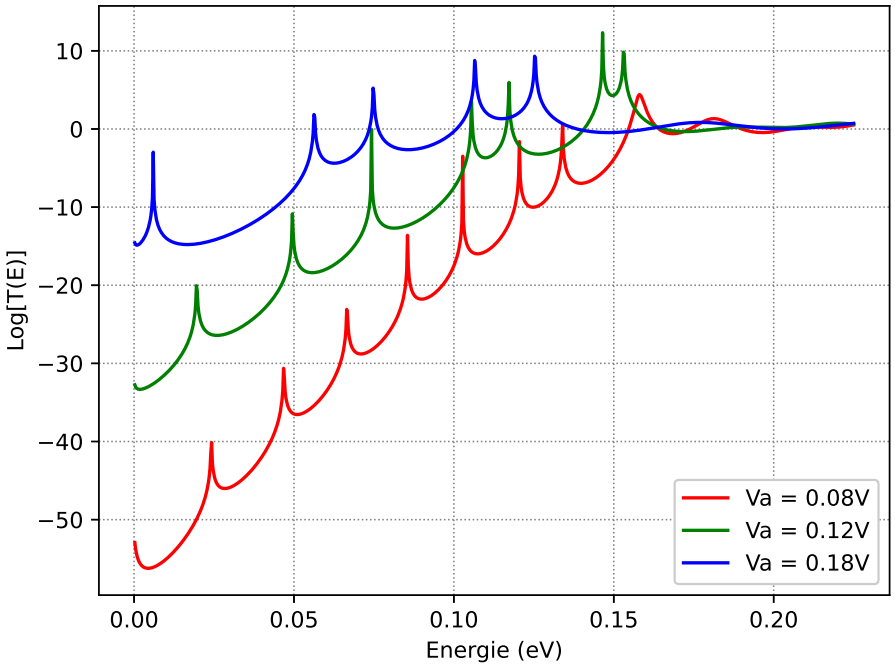


FIGURE 4.3 – L'effet de différents champs électriques ($V_a^{(1)} = 0.08$V, $V_a^{(2)} = 0.12$V, $V_a^{(3)} = 0.18$V) sur les niveaux d'énergie pour une double barrière avec $p = 8$nm, $s = 2.8$nm, $m_w = 0.067m_0$ et $m_b = 0.0919m_0$.

V_a (V)	Niveaux d'énergie (meV)
$V_a^{(1)} = 0.08$	$E_1 = 23.9$, $E_2 = 46.5$, $E_3 = 66.2$ $E_4 = 85.4$, $E_5 = 102.5$, $E_6 = 120.4$ $E_7 = 133.9$, $E_8 = 158.1$
$V_a^{(2)} = 0.12$	$E_1 = 19.2$, $E_2 = 49.3$, $E_3 = 74$ $E_4 = 105.4$, $E_5 = 117.1$, $E_6 = 146.1$ $E_7 = 152.9$
$V_a^{(3)} = 0.18$	$E_1 = 5.7$, $E_2 = 56.1$, $E_3 = 74.5$ $E_4 = 106.2$, $E_5 = 125.1$

TABLE 4.2 – Les niveaux d'énergie pour la configuration $p = 8$nm, $s = 2.8$nm, $m_w = 0.067m_0$ et $m_b = 0.0919m_0$, et pour les tensions $V_a^{(1)} = 0.08$V, $V_a^{(2)} = 0.12$V et $V_a^{(3)} = 0.18$V.

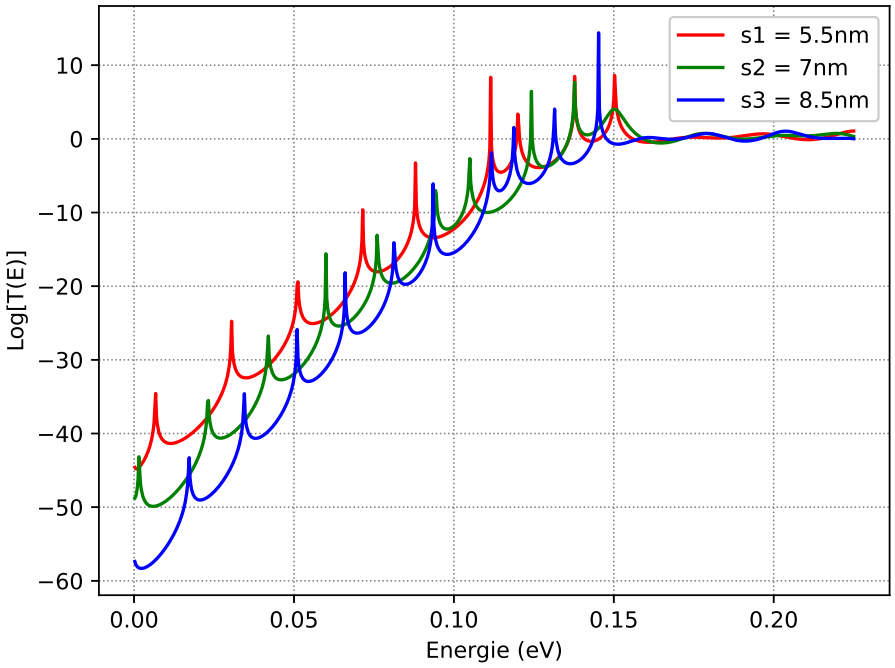


FIGURE 4.4 – La variation du coefficient de transmission en fonction de l'énergie en présence d'un champ électrique extérieur pour différentes valeurs d'épaisseurs d'une double barrière : $V_a = 0.20\text{V}$, $p = 8\text{nm}$, $s = 2.8\text{nm}$, $m_w = 0.067m_0$ et $m_b = 0.0919m_0$.

$s_1 = 5.5\text{nm}$, $s_2 = 7\text{nm}$, et $s_3 = 8.5\text{nm}$, on obtient les résultats de **Figure.** 4.4 et **Tableau.** 4.3. Nous observons qu'une augmentation de la valeur de l'épaisseur s augmente le nombre de niveaux d'énergie électronique.

De plus, on étudie l'effet de la variation de l'épaisseur des couches puits p sur les niveaux d'énergie d'électron. Pour les valeurs de p suivantes : $p_1 = 2\text{nm}$, $p_2 = 5\text{nm}$, et $p_3 = 8\text{nm}$, les résultats sont montrés dans **Figure.** 4.5 et **Tableau.** 4.4. Ces résultats montrent que l'augmentation de la valeur de l'épaisseur p augmente le nombre de niveaux d'énergie électronique.

4.1.2 Hétérostructure à double barrières quantiques en présence d'un champ électromagnétique extérieur

On prendre la même hétérostructure de la **Figure.** 4.1 et on applique un champ électromagnétique extérieur sur elle, tels que $B = 5\text{T}$ et $V_a = 0.09(\text{V})$. A l'aide du programmes *Python*® et *Wolfram*®, nous traçons ensuite la courbe de la variation du coefficient de transmission en fonction de l'énergie électronique montrée dans la **Figure.** 4.6, dans le but d'extraire les valeurs des niveaux

L'épaisseur s	Niveaux d'énergie (meV)
$s_1 = 5.5$nm	$E_1 = 6.5$, $E_2 = 30.4$, $E_3 = 50.9$ $E_4 = 71.4$, $E_5 = 87.7$, $E_6 = 111.4$ $E_7 = 119.9$, $E_8 = 137.6$, $E_9 = 150$
$s_2 = 7$nm	$E_1 = 1.3$, $E_2 = 22.9$, $E_3 = 41.8$ $E_4 = 59.7$, $E_5 = 75.8$, $E_6 = 94$ $E_7 = 104.6$, $E_8 = 124.1$, $E_9 = 137.6$
$s_3 = 8.5$nm	$E_1 = 16.9$, $E_2 = 34$, $E_3 = 50.6$ $E_4 = 65.7$, $E_5 = 81$, $E_6 = 93.2$ $E_7 = 111.4$, $E_8 = 118.4$, $E_9 = 131.3$ $E_{10} = 144.8$

TABLE 4.3 – Les niveaux d'énergie du système associé à la **Figure.** 4.4.

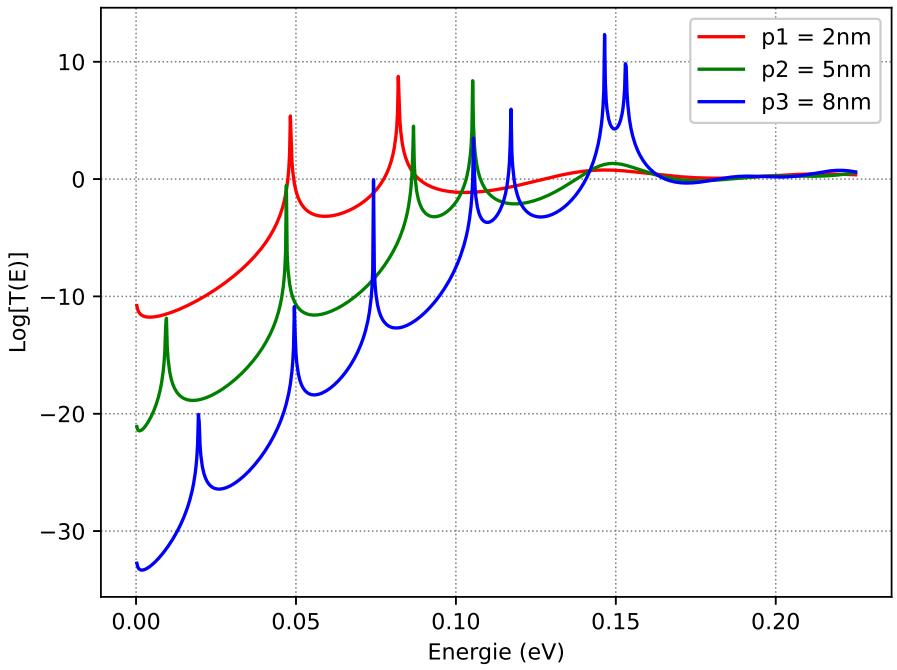


FIGURE 4.5 – L'effet de la variation de l'épaisseur des puits sur les niveaux d'énergie d'une structure à double barrières. Les paramètres sont $V_a = 0.12$V, $p_1 = 2$nm, $p_2 = 5$nm, $p_3 = 8$nm, $s = 2.8$nm, $m_w = 0.067m_0$ et $m_b = 0.0919m_0$.

L'épaisseur p	Niveaux d'énergie (meV)
$p_1 = 2$nm	$E_1 = 48$ $E_2 = 81.8$
$p_2 = 5$nm	$E_1 = 9.1$, $E_2 = 46.7$ $E_3 = 86.4$, $E_4 = 105.1$
$p_3 = 8$nm	$E_1 = 19.2$, $E_2 = 49.1$, $E_3 = 74$ $E_4 = 105.1$, $E_5 = 117.1$, $E_6 = 146.4$ $E_7 = 152.9$

TABLE 4.4 – Les niveaux d'énergie de la configuration de la **Figure.** 4.5.

d'énergie électronique indiqués dans le tableau accompagnant cette figure.

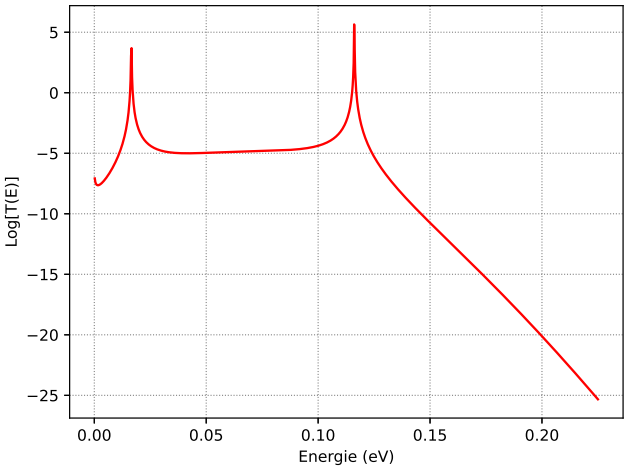
Pour le but d'étudier le résultat de la variation d'intensité des champs électromagnétique sur les valeurs des niveaux d'énergie, on trace la courbe de la variation du coefficient de transmission en fonction de l'énergie pour différentes valeurs de l'intensité de champ magnétique B et pour différentes valeurs du différence de potentiel V_a, comme le montrent la **Figure.** 4.7 et **Figure.** 4.8 respectivement.

En observant la **Figure.** 4.7, nous pouvons dire que la valeur de haute intensité du champ magnétique réduit les valeurs du coefficient de transmission et augmente le nombre de niveaux d'énergie.

À partir de la **Figure.** 4.8, nous voyons que la valeur plus élevée de l'intensité du champ électrique augmente les valeurs du coefficient de transmission et réduit le nombre des niveaux d'énergie.

Notre étude d'effet de la variation des épaisseurs des couches barrières s et des couches puits p sur les valeurs des niveaux d'énergie sont représentée respectivement dans la **Figure.** 4.9 et la **Figure.** 4.10 qui montrent les variations du coefficient de transmission en fonction de la variation d'énergie électronique avec les valeurs des niveaux d'énergie extrait.

En observant la **Figure.** 4.9 et la **Figure.** 4.10, il est clair que les valeurs plus élevées des épaisseurs s et p réduisent les valeurs du coefficient de transmission et les valeurs des niveaux d'énergie.

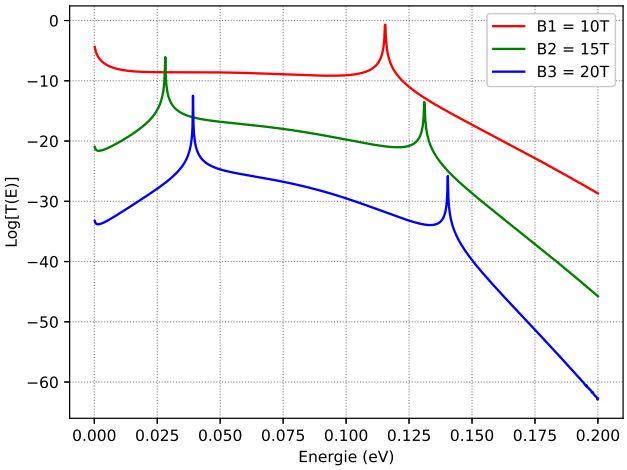


(a)

V_a (V)	B (T)	Niveaux d'énergie (meV)
0.09	5	$E_1 = 16.2$ $E_2 = 115.5$

(b)

FIGURE 4.6 – Structure à double barrières : (a) La variation du coefficient de transmission en fonction de l'énergie en présence d'un champ électromagnétique extérieur où $V_a = 0.09$V, $B = 5$T, $p = 8$nm, $s = 2.8$nm, $m_w = 0.067m_0$ et $m_b = 0.0919m_0$. (b) Les niveaux d'énergie sont extraits de la courbe.

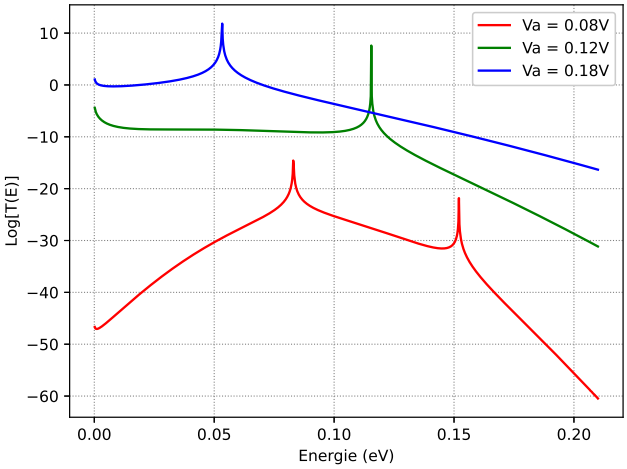


(a)

V_a (V)	B (T)	Niveaux d'énergie (meV)
0.12	$B_1 = 10$	$E_1 = 115.4$
	$B_2 = 15$	$E_1 = 28$ $E_2 = 130.8$
	$B_3 = 20$	$E_1 = 39$ $E_2 = 140.2$

(b)

FIGURE 4.7 – Structure à double barrières : (a) La variation du coefficient de transmission en fonction de l'énergie en présence d'un champ électromagnétique extérieur où $B_1 = 10$T, $B_2 = 15$T, $B_3 = 20$T, $V_a = 0.12$V, $p = 8$nm, $s = 2.8$nm, $m_w = 0.067m_0$ et $m_b = 0.0919m_0$. (b) Les niveaux d'énergie sont extraits des courbes.

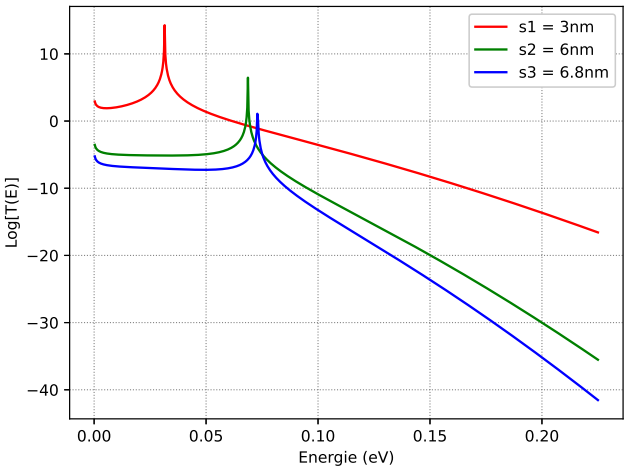


(a)

B (T)	V_a (V)	Niveaux d'énergie (meV)
10	$V_a^{(1)} = 0.08$	$E_1 = 82.9$ $E_2 = 152$
	$V_a^{(2)} = 0.12$	$E_1 = 115.3$
	$V_a^{(3)} = 0.18$	$E_1 = 53.2$

(b)

FIGURE 4.8 – Structure à double barrières : (a) La variation du coefficient de transmission en fonction de l'énergie en présence d'un champ électromagnétique extérieur où $B = 10$T, $V_a^{(1)} = 0.08$V, $V_a^{(2)} = 0.12$V, $V_a^{(3)} = 0.18$V, $p = 8$nm, $s = 2.8$nm, $m_w = 0.067m_0$ et $m_b = 0.0919m_0$. (b) Les niveaux d'énergie sont extraits des courbes.

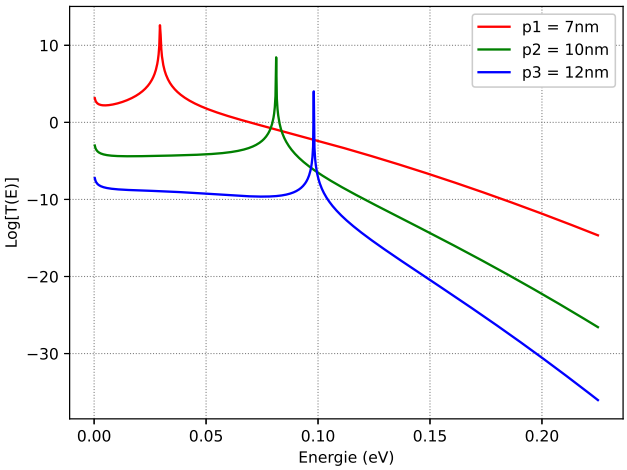


(a)

B (T)	V_a (V)	L'épaisseur s	Niveaux d'énergie (meV)
10	0.2	$s_1 = 3$nm	$E_1 = 31.5$
		$s_2 = 6$nm	$E_1 = 68.5$
		$s_3 = 6.8$nm	$E_1 = 72.9$

(b)

FIGURE 4.9 – Structure à double barrières : (a) La variation du coefficient de transmission en fonction de l'énergie en présence d'un champ électromagnétique extérieur où $B = 10$T, $V_a = 0.2$V, $p = 8$nm, $s_1 = 3$nm, $s_2 = 6$nm, $s_3 = 6.8$nm, $m_w = 0.067m_0$ et $m_b = 0.0919m_0$. (b) Les niveaux d'énergie sont extraits des courbes.



(a)

B (T)	V_a (V)	L'épaisseur p	Niveaux d'énergie (meV)
10	0.18	$p_1 = 7$nm	$E_1 = 29.3$
		$p_2 = 10$nm	$E_1 = 81$
		$p_3 = 12$nm	$E_1 = 97.8$

(b)

FIGURE 4.10 – Structure à double barrières : (a) La variation du coefficient de transmission en fonction de l'énergie en présence d'un champ électromagnétique extérieur où $B = 10$T, $V_a = 0.18$V, $p_1 = 7$nm, $p_2 = 10$nm, $p_3 = 12$nm, $s = 2.8$nm, $m_w = 0.067m_0$ et $m_b = 0.0919m_0$. (b) Les niveaux d'énergie sont extraits des courbes.

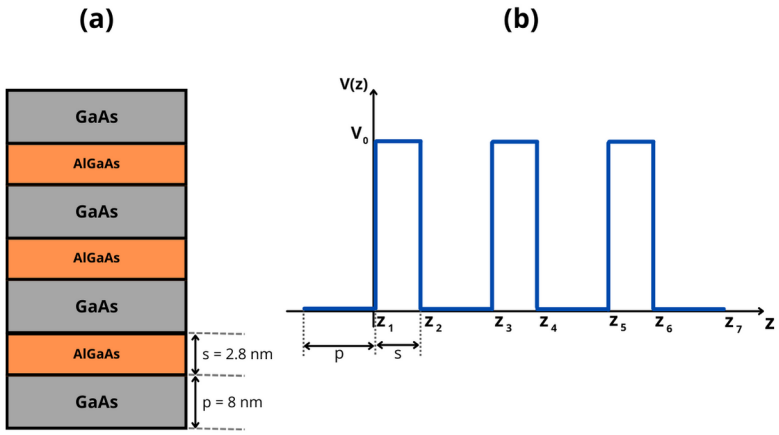


FIGURE 4.11 – Hétérostructure à double barrières quantiques : (a) la structure de double barrières quantiques. (b) Le profil de l'énergie potentiel de cette structure, $V_0 = 0.225$eV.

4.2 Hétérostructure à triple barrières quantiques

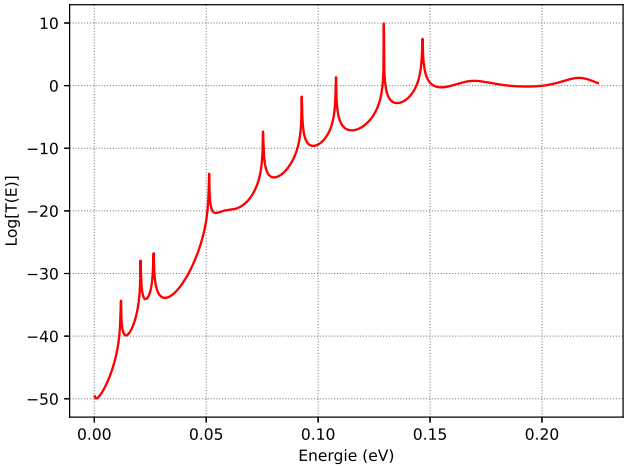
On considère une hétérostructure ($\mathbf{Al_{0.3}Ga_{0.7}As/GaAs}$) de sept couches de semi-conducteurs avec les épaisseurs $p = 8$nm et $s = 2.8$nm, la hauteur du potentiel constante $V_0 = 0.225$eV, et les masses effectives correspondantes à chaque région sont $m_w = 0.067m_0$ et $m_b = 0.0919m_0$ (voir **Figure.** 4.11). Cette structure a été proposée dans [32].

4.2.1 Hétérostructure à triple barrières quantiques en présence d'un champ électrique extérieur

Dans cette partie, on va refaire les mêmes études du **Section** 4.1.1 sur une hétérostructure à triple barrière quantiques (voir **Figure.** 4.11 - a), en appliquant un champ électrique extérieur dans les régions entre les points z_1 et z_6 représentés à la **Figure.** 4.11 - b tel que : $V_a = 0.2$V. La variation du coefficient de transmission en fonction de l'énergie et les niveaux d'énergie électronique de ce système sont montrés dans la **Figure.** 4.12.

Les résultats des variations d'intensité de champ électrique sur les niveaux d'énergie de ce système sont montrés dans la **Figure.** 4.13.

L'observation de la **Figure.** 4.13 montre que la valeur de l'intensité élevée du champ électrique augmente les valeurs du coefficient de transmission et réduit

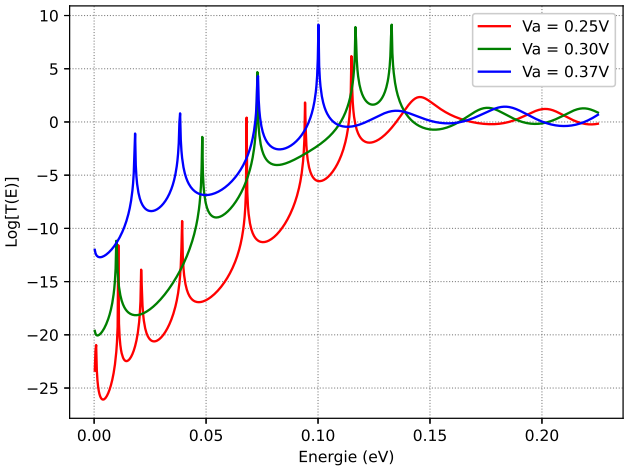


(a)

V_a (V)	Niveaux d'énergie (meV)
0.2	$E_1 = 11.9$, $E_2 = 20.6$, $E_3 = 26.2$ $E_4 = 51.1$, $E_5 = 75.1$, $E_6 = 92.5$ $E_7 = 107.8$, $E_8 = 129$, $E_9 = 146.4$

(b)

FIGURE 4.12 – Structure à triple barrières : (a) La variation du coefficient de transmission en fonction de l'énergie en présence d'un champ électrique extérieur où $V_a = 0.2$V, $p = 8$nm, $s = 2.8$nm, $m_w = 0.067m_0$ et $m_b = 0.0919m_0$. (b) Les niveaux d'énergie sont extraits de la courbe.



(a)

V_a (V)	Niveaux d'énergie (meV)
$V_a^{(1)} = 0.25$	$E_1 = 0.7$, $E_2 = 10.6$, $E_3 = 20.9$ $E_4 = 39$, $E_5 = 67.9$, $E_6 = 94.1$ $E_7 = 114.6$
$V_a^{(2)} = 0.30$	$E_1 = 9.7$, $E_2 = 48$, $E_3 = 72.6$ $E_4 = 116.5$, $E_5 = 132.7$
$V_a^{(3)} = 0.37$	$E_1 = 18.1$, $E_2 = 38$ $E_3 = 72.9$, $E_4 = 100$

(b)

FIGURE 4.13 – Structure à triple barrières : (a) La variation du coefficient de transmission en fonction de l'énergie en présence d'un champ électrique extérieur où $V_a^{(1)} = 0.25$V, $V_a^{(2)} = 0.30$V, $V_a^{(3)} = 0.37$V, $p = 8$nm, $s = 2.8$nm, $m_w = 0.067m_0$ et $m_b = 0.0919m_0$. (b) Les niveaux d'énergie sont extraits des courbes.

le nombre de niveaux d'énergie présents.

Les effets des variations des épaisseurs des barrières s et des épaisseurs des puits p sur les valeurs des niveaux d'énergie électronique sont montrés dans la **Figure.** 4.14 et la **Figure.** 4.15 respectivement.

En observant **Figure.** 4.14 et **Figure.** 4.15, nous notons que l'augmentation de la valeur des épaisseurs s et p réduit les valeurs du coefficient de transmission et augmente le nombre de niveaux de puissance.

4.2.2 Hétérostructure à triple barrières quantiques en présence d'un champ électromagnétique extérieur

Nous appliquons un champ électromagnétique extérieur sur l'hétérostructure représentée à la **Figure.** 4.11, on obtient les variations du coefficient de transmission en fonction de l'énergie électronique en plus des niveaux d'énergie montrés dans la **Figure.** 4.16. Ensuite, nous allons répéter les mêmes études de la **Section** 4.1.2 sur notre système physique actuel, comme le montrent les points suivants :

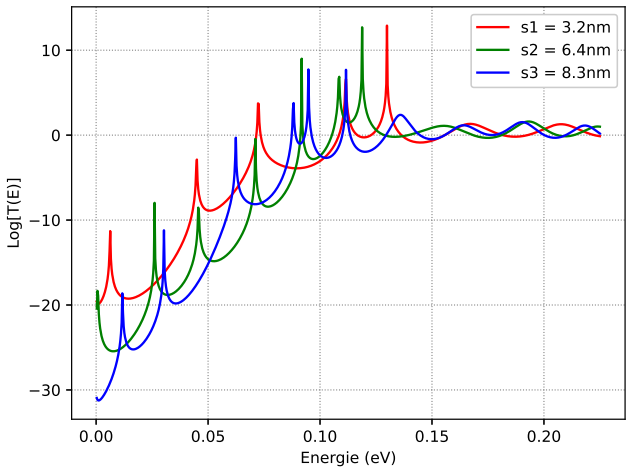
- Les résultats de la variation d'intensité de champ magnétique B sur les niveaux d'énergie sont représentés dans la **Figure.** 4.17.
- Les résultats de la variation d'intensité de champ électrique F sur les niveaux d'énergie sont représentés dans la **Figure.** 4.18.
- L'effet de variation des épaisseurs des barrières s sur les valeurs des niveaux d'énergie sont représentés dans la **Figure.** 4.19.
- L'effet de variation des épaisseurs des puits p sur les valeurs des niveaux d'énergie sont représentés dans la **Figure.** 4.20.

La **Figure.** 4.17 montre qu'une valeur d'intensité de champ magnétique plus élevée entraîne une diminution des valeurs du coefficient de transmission et des valeurs des niveaux d'énergie.

La **Figure.** 4.18 montre qu'une valeur de tension plus élevée d'un champ électrique conduit à des valeurs de coefficient de transmission plus élevées et à des valeurs plus faibles des niveaux d'énergie et de leur nombre.

En observant la **Figure.** 4.19 et la **Figure.** 4.20, il est clair que la valeur plus élevée des épaisseurs s et p entraîne une diminution des valeurs du coefficient de transmission et une diminution des valeurs des niveaux d'énergie et de leur nombre.

Il convient de mentionner que le programme écrit en *Wolfram*® donne de faux résultats numériques s'il s'adresse à un système physique avec des valeurs faibles pour l'intensité des champs électromagnétiques. La raison de l'existence de ce problème peut être due aux faibles ressources de l'ordinateur utilisé.

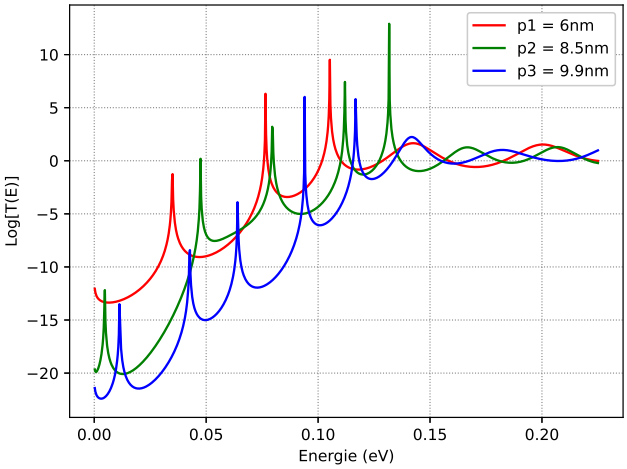


(a)

L'épaisseur s	Niveaux d'énergie (meV)
$s_1 = 3.2$nm	$E_1 = 5.9$, $E_2 = 44.9$, $E_3 = 72.3$ $E_4 = 111.2$, $E_5 = 129.6$
$s_2 = 6.4$nm	$E_1 = 25.9$, $E_2 = 45.5$, $E_3 = 70.7$ $E_4 = 91.6$, $E_5 = 108.1$, $E_6 = 118.7$
$s_3 = 8.3$nm	$E_1 = 11.6$, $E_2 = 29.9$, $E_3 = 62$ $E_4 = 87.8$, $E_5 = 94.4$, $E_6 = 111.2$

(b)

FIGURE 4.14 – Structure à triple barrières : (a) La variation du coefficient de transmission en fonction de l'énergie en présence d'un champ électrique extérieur où $V_a = 0.30$V, $p = 8$nm, $s_1 = 3.2$nm, $s_2 = 6.4$nm, $s_3 = 8.3$nm, $m_w = 0.067m_0$ et $m_b = 0.0919m_0$. (b) Les niveaux d'énergie sont extraits des courbes.

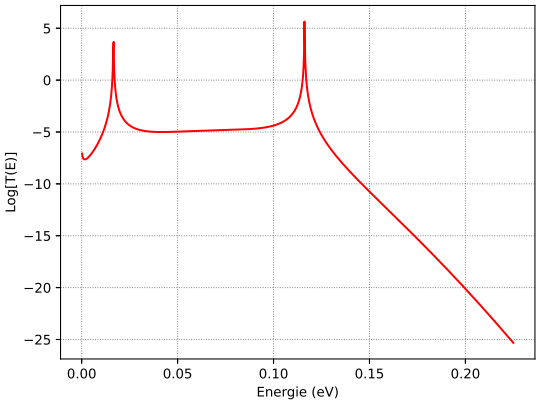


(a)

L'épaisseur p	Niveaux d'énergie (meV)
$p_1 = 6$nm	$E_1 = 34.8$ $E_2 = 76.3$ $E_3 = 105.1$
$p_2 = 8.5$nm	$E_1 = 4.7$, $E_2 = 47.3$ $E_3 = 79.4$, $E_4 = 111.9$ $E_5 = 131.6$
$p_3 = 9.9$nm	$E_1 = 10.9$, $E_2 = 42.3$ $E_3 = 63.9$, $E_4 = 93.7$ $E_5 = 116.5$

(b)

FIGURE 4.15 – Structure à triple barrières : (a) La variation du coefficient de transmission en fonction de l'énergie en présence d'un champ électrique extérieur où $V_a = 0.30$V, $p_1 = 6$nm, $p_2 = 8.5$nm, $p_3 = 9.9$nm, $s = 2.8$nm, $m_w = 0.067m_0$ et $m_b = 0.0919m_0$. (b) Les niveaux d'énergie sont extraits des courbes.

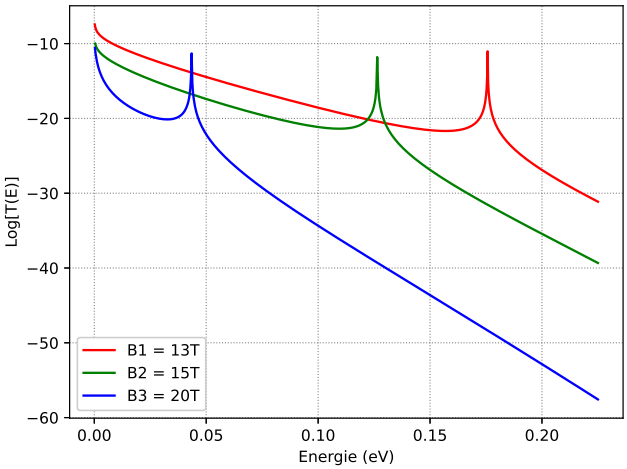


(a)

V_a (V)	B (T)	Niveaux d'énergie (meV)
0.25	10	$E_1 = 27.5$
		$E_2 = 97.3$

(b)

FIGURE 4.16 – Structure à triple barrières : (a) La variation du coefficient de transmission en fonction de l'énergie en présence d'un champ électromagnétique extérieur où $V_a = 0.25$V, $B = 10$T, $p = 8$nm, $s = 2.8$nm, $m_w = 0.067m_0$ et $m_b = 0.0919m_0$. (b) Les niveaux d'énergie sont extraits de la courbe.

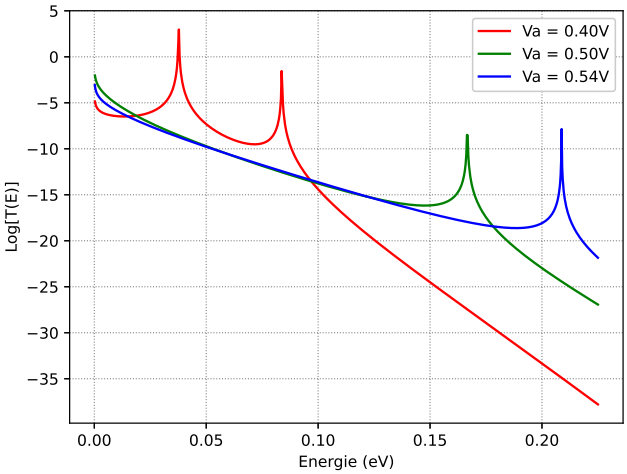


(a)

V_a (V)	B (T)	Niveaux d'énergie (meV)
0.60	$B_1 = 13$	$E_1 = 175.7$
	$B_2 = 15$	$E_1 = 125.8$
	$B_3 = 20$	$E_1 = 43.1$

(b)

FIGURE 4.17 – Structure à triple barrières : (a) La variation du coefficient de transmission en fonction de l'énergie en présence d'un champ électromagnétique extérieur où $B_1 = 13$T, $B_2 = 15$T, $B_3 = 20$T, $V_a = 0.60$V, $p = 8$nm, $s = 2.8$nm, $m_w = 0.067m_0$ et $m_b = 0.0919m_0$. (b) Les niveaux d'énergie sont extraits des courbes.

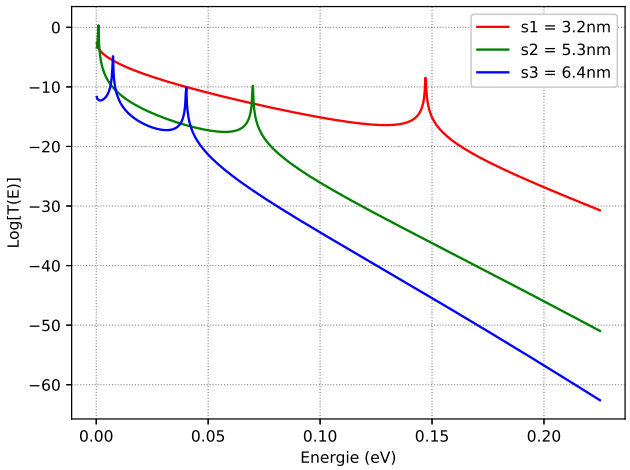


(a)

B (T)	V_a (V)	Niveaux d'énergie (meV)
10	$V_a^{(1)} = 0.40$	$E_1 = 37.7$ $E_2 = 83.5$
	$V_a^{(2)} = 0.50$	$E_1 = 166.3$
	$V_a^{(3)} = 0.54$	$E_1 = 208.6$

(b)

FIGURE 4.18 – Structure à triple barrières : (a) La variation du coefficient de transmission en fonction de l'énergie en présence d'un champ électromagnétique extérieur où $B = 10$T, $V_a^{(1)} = 0.40$V, $V_a^{(2)} = 0.50$V, $V_a^{(3)} = 0.54$V, $p = 8$nm, $s = 2.8$nm, $m_w = 0.067m_0$ et $m_b = 0.0919m_0$. (b) Les niveaux d'énergie sont extraits des courbes.

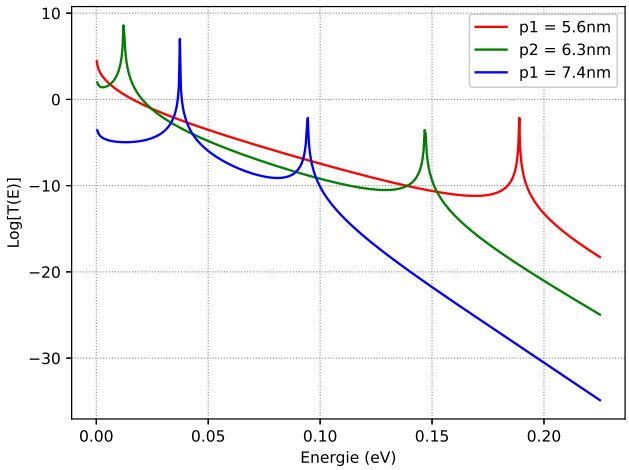


(a)

B (T)	V_a (V)	L'épaisseur s	Niveaux d'énergie (meV)
10	0.50	$s_1 = 3.2$nm	$E_1 = 146.9$
		$s_2 = 5.3$nm	$E_1 = 0.8$ $E_2 = 69.8$
		$s_3 = 6.4$nm	$E_1 = 7.3$ $E_2 = 40$

(b)

FIGURE 4.19 – Structure à triple barrières : (a) La variation du coefficient de transmission en fonction de l'énergie en présence d'un champ électromagnétique extérieur où $B = 10$T, $V_a = 0.50$V, $p = 8$nm, $s_1 = 3.2$nm, $s_2 = 5.3$nm, $s_3 = 6.4$nm, $m_w = 0.067m_0$ et $m_b = 0.0919m_0$. (b) Les niveaux d'énergie sont extraits des courbes.



(a)

B (T)	V_a (V)	L'épaisseur s	Niveaux d'énergie (meV)
10	0.38	$p_1 = 5.6$nm	$E_1 = 188.7$
		$p_2 = 6.3$nm	$E_1 = 11.7$ $E_2 = 146.2$
		$p_3 = 7.4$nm	$E_1 = 36.9$ $E_2 = 93.9$

(b)

FIGURE 4.20 – Structure à triple barrières : (a) La variation du coefficient de transmission en fonction de l'énergie en présence d'un champ électromagnétique extérieur où $B = 10$T, $V_a = 0.38$V, $p_1 = 5.6$nm, $p_2 = 6.3$nm, $p_3 = 7.4$nm, $s = 2.8$nm, $m_w = 0.067m_0$ et $m_b = 0.0919m_0$. (b) Les niveaux d'énergie sont extraits des courbes.

Conclusion

En bref, notre étude des hétérostructures quantiques tournait autour de deux axes fondamentaux. Nous avons commencé par une étude analytique dans laquelle nous avons écrit une solution à l'équation de Schrödinger en termes des fonctions d'Airy dans le cas d'hétérostructure sous l'influence d'un champ électrique et l'avons écrite en termes des fonctions hypergéométriques confluentes dans le cas d'hétérostructure en présence d'un champ électromagnétique, afin que nous puissions trouver l'expression de la matrice de transfert basée sur les conditions de continuité de BenDaniel-Duke, et ce dans le but d'écrire l'expression du coefficient de transmission en fonction d'énergie électronique.

Le deuxième axe de notre étude s'est concentré sur l'effet des champs électromagnétiques sur les niveaux d'énergie des hétérostructures. Nous avons calculé les niveaux d'énergie électronique à l'aide des programmes décrits à **Annexe** E pour les systèmes physiques suivants :

- Hétérostructure à double barrières quantiques en présence d'un champ électrique à certains moments et en présence d'un champ électromagnétique à d'autres moments
- Hétérostructure à triple barrières quantiques en présence d'un champ électrique à certains moments et en présence d'un champ électromagnétique à d'autres moments

Nous avons également extrait les valeurs des niveaux d'énergie des systèmes physiques sus-mentionnés avec le changement de paramètres : l'intensité du champ électrique et magnétique, les épaisseurs du puits s et de la barrière p, ce qui nous a amenés à tirer les conclusions suivantes :

- L'augmentation de l'intensité du champ électrique appliquée à l'hétérostructure augmente les valeurs du coefficient de transmission et les valeurs des niveaux d'énergie et réduit le nombre de niveaux d'énergie électronique susceptibles d'être trouvés dans le système physique.
- L'intensité du champ magnétique appliqué à la hétérostructure est inversement proportionnelle aux valeurs du coefficient de transmission et aux valeurs des niveaux d'énergie et augmente le nombre de niveaux d'énergie susceptibles d'être trouvés.
- Les valeurs des épaisseurs de s et p dans l'hétérostructure sont inversement proportionnelles aux valeurs du coefficient de transmission et aux valeurs des niveaux d'énergie et augmentent le nombre de niveaux d'énergie susceptibles d'être trouvés.

Les études que nous avons menées dans ce travail nous ont conduit à découvrir une erreur dans les calculs de la référence [1], l'erreur réside dans les courbes des variations du coefficient de transmission en fonction des variations d'énergie électronique où l'on constate qu'il existe des valeurs négatives d'énergie électronique et des valeurs supérieures à la valeur du potentiel de la structure où il est impossible que le phénomène tunnel se produise, selon la référence [41].

Annexe A

Les dérivées des fonctions d'ondes ($\nabla\psi_j$)

On sait que l'opérateur $\vec{\nabla}$ s'écrit de la forme :

$$\vec{\nabla} = \frac{\partial}{\partial x}\vec{i} + \frac{\partial}{\partial y}\vec{j} + \frac{\partial}{\partial z}\vec{k}\ , \tag{A.1}$$

on va appliquer l'opérateur $\vec{\nabla}$ sur les expressions de la fonction d'onde comme suit.

A.1 Dérivée de la fonction d'onde pour le cas d'une hétérostructure libre

l'expression de la fonction d'onde s'ecrit :

$$\psi_j\left(x,y,z\right) = \mathrm{e}^{ik_{j,x}x}\mathrm{e}^{ik_{j,y}y}\left(A_j\mathrm{e}^{ik_{j,z}z} + B_j\mathrm{e}^{-ik_{j,z}z}\right)\ , \tag{A.2}$$

l'application de $\vec{\nabla}$ sur l'expression de la fonction d'onde donne :

$$\begin{aligned}\vec{\nabla}\psi_j(x,y,z) = {} & ik_{j,x}\psi_j\ \vec{i}\ +\ ik_{j,y}\psi_j\ \vec{j} \\ & + \left(A_j ik_{j,z}\mathrm{e}^{ik_{j,z}z} - B_j ik_{j,z}\mathrm{e}^{-ik_{j,z}z}\right)\mathrm{e}^{ik_{j,x}x}\mathrm{e}^{ik_{j,y}y}\vec{k}\ ,\end{aligned} \tag{A.3}$$

on prendre le terme ψ_j comme facteur commun, et on obtient :

$$\vec{\nabla}\psi_j(x,y,z) = \left(ik_{j,x}\vec{i} + ik_{j,y}\vec{j}\right)\psi_j + ik_{j,z}\left(A_j\mathrm{e}^{ik_{j,z}z} - B_j\mathrm{e}^{-ik_{j,z}z}\right)\mathrm{e}^{ik_{j,x}x}\mathrm{e}^{ik_{j,y}y}\vec{k}\ , \tag{A.4}$$

en remplaçant **Eq.** (A.2) dans **Eq.** (A.4), on obtient :

$$\begin{aligned}\vec{\nabla}\psi_j(x,y,z) = {} & \Big[\left(ik_{j,x}\vec{i} + ik_{j,y}\vec{j}\right)\left(A_j\mathrm{e}^{ik_{j,z}z} + B_j\mathrm{e}^{-ik_{j,z}z}\right) \\ & + ik_{j,z}\left(A_j\mathrm{e}^{ik_{j,z}z} - B_j\mathrm{e}^{-ik_{j,z}z}\right)\vec{k}\Big]\mathrm{e}^{ik_{j,x}x}\mathrm{e}^{ik_{j,y}y}\ ,\end{aligned} \tag{A.5}$$

donc, on peut écrire l'expression de $\vec{\nabla}\psi_j$ comme suit :

$$\vec{\nabla}\psi_j(x,y,z) = \Big[ik_{j,x}\left(A_j\mathrm{e}^{ik_{j,z}z} + B_j\mathrm{e}^{-ik_{j,z}z}\right)\vec{e}_x + ik_{j,y}\Big(A_j\mathrm{e}^{ik_{j,z}z} + B_j\mathrm{e}^{-ik_{j,z}z}\Big)\vec{e}_y + ik_{j,z}\left(A_j\mathrm{e}^{ik_{j,z}z} - B_j\mathrm{e}^{-ik_{j,z}z}\right)\vec{e}_z\Big]\mathrm{e}^{ik_{j,x}x}\mathrm{e}^{ik_{j,y}y} \ . \quad \text{(A.6)}$$

A.2 Dérivée de la fonction d'onde pour le cas d'une hétérostructure en présence des champs électromagnétiques

Pour simplifier les calculs, l'expression de la fonction d'onde de **Eq.** (3.48) peut-être écrite comme suit :

$$\psi_j(x,y,\xi_j(z)) = e^{ik_{j,x}.x}e^{ik_{j,y}.y}\Big(A_j h_{1,\lambda_j}(\xi_j(z)) + B_j h_{2,\lambda_j}(\xi_j(z))\Big)e^{-\xi_j^2/2} \ , \quad \text{(A.7)}$$

avec : $h_{1,\lambda_j}(\xi_j(z)) =_1 \mathrm{F}_1\left(-\frac{1}{4}\lambda_j, \frac{1}{2}; \xi^2\right)$ et $h_{2,\lambda_j}(\xi_j(z)) = \xi\ {}_1\mathrm{F}_1\left(-\frac{1}{4}(\lambda_j-2), \frac{3}{2}; \xi^2\right)$.

On applique l'opérateur $\vec{\nabla}$ sur l'expression de la fonction d'onde $\psi_j(x,y,\xi_j(z))$, en suivant les mêmes étapes de **Section** A.1, on obtient :

$$\vec{\nabla}\psi_j(x,y,\xi_j(z)) = ik_{j,x}\psi_j\ \vec{i}\ +\ ik_{j,y}\psi_j\ \vec{j}\ +\ \Big[-\xi_j e^{-\xi_j^2/2}\Big(A_j h_{1,\lambda_j}(\xi_j(z)) + B_j h_{2,\lambda_j}(\xi_j(z))\Big) + \Big(A_j h'_{1,\lambda_j}(\xi_j(z)) + B_j h'_{2,\lambda_j}(\xi_j(z))\Big)e^{-\xi_j^2/2}\Big] \left(\frac{m_j\omega_j}{\hbar}\right)^{1/2} e^{i(k_{j,x}.x + k_{j,y}.y)}\ \vec{k} \ , \quad \text{(A.8)}$$

avec :

$$h'_{1,\lambda_j}(\xi_j(z)) = \ {}_1\mathrm{F}'_1\left(-\frac{1}{4}\lambda_j, \frac{1}{2}; \xi^2\right) = \sum_{n=1}^{\infty}\frac{\xi^{2n-1}}{(2n-1)!}\ \prod_{\ell=1}^{n}(4\ell - 4 - \lambda_j) \ , \quad \text{(A.9)}$$

$$h'_{2,\lambda_j}(\xi_j(z)) = \xi\ {}_1\mathrm{F}'_1\left(-\frac{1}{4}(\lambda_j-2), \frac{3}{2}; \xi^2\right) = \sum_{n=1}^{\infty}\frac{\xi^{2n}}{(2n)!}\ \prod_{\ell=1}^{n}(4\ell - 2 - \lambda_j) \ . \quad \text{(A.10)}$$

en remplaçant **Eq.** (A.7) dans **Eq.** (A.8), l'éxpression de $\vec{\nabla}\psi_j(x,y,\xi_j(z))$ devient :

$$= \Big[\Big[ik_{j,x}\ \vec{i} + ik_{j,y}\ \vec{j} - \left(\frac{m_j\omega_j}{\hbar}\right)^{1/2}\xi_j(z)\ \vec{k}\Big]\Big(A_j h_{1,\lambda_j}(\xi_j(z)) + B_j h_{2,\lambda_j}(\xi_j(z))\Big) + \Big[\Big(A_j h'_{1,\lambda_j}(\xi_j(z)) + B_j h'_{2,\lambda_j}(\xi_j(z))\Big)\left(\frac{m_j\omega_j}{\hbar}\right)^{1/2}\ \vec{k}\Big]\Big]e^{-\xi_j^2/2}e^{i(k_{j,x}.x + k_{j,y}.y)} \ , \quad \text{(A.11)}$$

donc, l'expression final de $\vec{\nabla}\psi_j(x,y,\xi_j(z))$ s'écrit :

$$\vec{\nabla}\psi_j = e^{-\xi_j^2(z)/2}e^{i(k_{j,x}.x+k_{j,y}.y)}\Big[ik_{j,x}\Big(A_jh_{1,\lambda_j}(\xi_j(z))+B_jh_{2,\lambda_j}(\xi_j(z))\Big)\vec{i} + ik_{j,y}\Big(A_jh_{1,\lambda_j}(\xi_j(z))+B_jh_{2,\lambda_j}(\xi_j(z))\Big)\vec{j}+\Big(\frac{m_j\omega_j}{\hbar}\Big)^{1/2}\Big[\Big(h'_{1,\lambda_j}(\xi_j(z)) - \xi_j(z)h_{1,\lambda_j}(\xi_j(z))\Big)A_j+\Big(h'_{2,\lambda_j}(\xi_j(z))-\xi_j(z)h_{2,\lambda_j}(\xi_j(z))\Big)B_j\Big]\vec{k}\Big]\ , \quad \text{(A.12)}$$

si on suppose que $k_{j,x}=k_{j,y}=0$, l'expression de $\vec{\nabla}\psi_j(x,y,\xi_j(z))$ devient :

$$\vec{\nabla}\psi_j = \Big(\frac{m_j\omega_j}{\hbar}\Big)^{1/2}e^{-\xi_j^2(z)/2}\Big[\Big(h'_{1,\lambda_j}(\xi_j(z))-\xi_j(z)h_{1,\lambda_j}(\xi_j(z))\Big)A_j + \Big(h'_{2,\lambda_j}(\xi_j(z))-\xi_j(z)h_{2,\lambda_j}(\xi_j(z))\Big)B_j\Big]\vec{k}\ , \quad \text{(A.13)}$$

alors, on peut conclure les formules de $\Theta'(\lambda_j, m_j\omega_j/\hbar, z_{0j}; z_{j+1})$
et $\Phi'(\lambda_j, m_j\omega_j/\hbar, z_{0j}; z_{j+1})$:

$$\Theta'(\lambda_j, m_j\omega_j/\hbar, z_{0j}; z_{j+1}) = \Big(\frac{m_j\omega_j}{\hbar}\Big)^{1/2}e^{-\xi_j^2(z)/2}\Big(h'_{1,\lambda_j}(\xi_j(z))-\xi_j(z)h_{1,\lambda_j}(\xi_j(z))\Big)\ , \quad \text{(A.14)}$$

$$\Phi'(\lambda_j, m_j\omega_j/\hbar, z_{0j}; z_{j+1}) = \Big(\frac{m_j\omega_j}{\hbar}\Big)^{1/2}e^{-\xi_j^2(z)/2}\Big(h'_{2,\lambda_j}(\xi_j(z))-\xi_j(z)h_{2,\lambda_j}(\xi_j(z))\Big)\ . \quad \text{(A.15)}$$

Annexe B

Démonstration d'existence de la matrice inverse de M_{2j}

B.1 Le cas d'une hétérostructure libre

D'aprés **Eq.** (2.18), la matrice M_{2j} s'ecrit :

$$M_{2j} = \begin{pmatrix} \Theta(k_{j,z}; z_{j+1}) & \Phi(k_{j,z}; z_{j+1}) \\ \frac{\Theta'(k_{j,z}; z_{j+1})}{m_j} & \frac{\Phi'(k_{j,z}; z_{j+1})}{m_j} \end{pmatrix} , \tag{B.1}$$

le déterminant de M_{2j} peut-être écrit de la forme :

$$\det(M_{2j}) = \Theta(k_{j,z}; z_{j+1}) \frac{\Phi'(k_{j,z}; z_{j+1})}{m_j} - \frac{\Theta'(k_{j,z}; z_{j+1})}{m_j} \Phi(k_{j,z}; z_{j+1}) , \tag{B.2}$$

$$= e^{ik_{j,z}.z_{j+1}} \left(\frac{-ik_{j,z}}{m_j} \right) e^{-ik_{j,z}.z_{j+1}} - \left(\frac{ik_{j,z}}{m_j} \right) e^{ik_{j,z}.z_{j+1}} e^{-ik_{j,z}.z_{j+1}} , \tag{B.3}$$

après certaines simplifications de calcul on obtient :

$$\det(M_{2j}) = \frac{-i2k_{j,z}}{m_j} , \tag{B.4}$$

on a : $\det(M_{2j}) \neq 0$ car :

$$k_{j,z} = \sqrt{\frac{2m_j}{\hbar^2}(E - V_j)} \neq 0 , \tag{B.5}$$

puisqu'il est impossible de trouver un cas où $E = V_j$, alors la matrice M_{2j}^{-1} existe toujours, qui s'écrit de la forme :

$$M_{2j}^{-1} = \frac{1}{\det(M_{2j})} \begin{pmatrix} \frac{\Phi'(k_{j,z}; z_{j+1})}{m_j} & -\Phi(k_{j,z}; z_{j+1}) \\ -\frac{\Theta'(k_{j,z}; z_{j+1})}{m_j} & \Theta(k_{j,z}; z_{j+1}) \end{pmatrix} . \tag{B.6}$$

B.2 Le cas d'une hétérostructure en présence des champs électromagnétiques

D'aprés **Eq.** (3.54), la mateice M_{2j} s'ecrit :

$$M_{2j} = \begin{pmatrix} \Theta(\lambda_j, m_j\omega_j/\hbar, z_{0j}; z_{j+1}) & \Phi(\lambda_j, m_j\omega_j/\hbar, z_{0j}; z_{j+1}) \\ \frac{\Theta'(\lambda_j, m_j\omega_j/\hbar, z_{0j}; z_{j+1})}{m_j} & \frac{\Phi'(\lambda_j, m_j\omega_j/\hbar, z_{0j}; z_{j+1})}{m_j} \end{pmatrix} , \tag{B.7}$$

le déterminant de la matrice M_{2j} prend la forme :

$$\begin{aligned} \det(M_{2j}) = \Theta(\lambda_j, m_j\omega_j/\hbar, z_{0j}; z_{j+1}) \frac{\Phi'(\lambda_j, m_j\omega_j/\hbar, z_{0j}; z_{j+1})}{m_j} \\ - \frac{\Theta'(\lambda_j, m_j\omega_j/\hbar, z_{0j}; z_{j+1})}{m_j} \Phi(\lambda_j, m_j\omega_j/\hbar, z_{0j}; z_{j+1}) , \end{aligned} \tag{B.8}$$

on remplace les expressions de **Eq.** (A.14) et **Eq.** (A.15) dans la dernière équation, et on obtient :

$$\begin{aligned} \det(M_{2j}) = h_{1,\lambda_j}(\xi_j(z)) e^{-\xi_j^2(z)/2} \frac{1}{m_j} \Big(\frac{m_j\omega_j}{\hbar}\Big)^{1/2} \\ e^{-\xi_j^2(z)/2} \Big(h'_{2,\lambda_j}(\xi_j(z)) - \xi_j(z) h_{2,\lambda_j}(\xi_j(z)) \Big) - \frac{1}{m_j} \Big(\frac{m_j\omega_j}{\hbar}\Big)^{1/2} \\ e^{-\xi_j^2(z)/2} \Big(h'_{1,\lambda_j}(\xi_j(z)) - \xi_j(z) h_{1,\lambda_j}(\xi_j(z)) \Big) h_{2,\lambda_j}(\xi_j(z)) e^{-\xi_j^2(z)/2} , \end{aligned} \tag{B.9}$$

la simplification de la dernière équation donne :

$$\begin{aligned} \det(M_{2j}) = \frac{1}{m_j} \Big(\frac{m_j\omega_j}{\hbar}\Big)^{1/2} e^{-\xi_j^2(z)/2} \Big[h_{1,\lambda_j}(\xi_j(z)) \Big(h'_{2,\lambda_j}(\xi_j(z)) \\ - \xi_j(z) h_{2,\lambda_j}(\xi_j(z)) \Big) - h_{2,\lambda_j}(\xi_j(z)) \Big(h'_{1,\lambda_j}(\xi_j(z)) - \xi_j(z) h_{1,\lambda_j}(\xi_j(z)) \Big) \Big] , \end{aligned} \tag{B.10}$$

puisque $\det(M_{2j}) \neq 0$, alors la matrice M_{2j}^{-1} existe toujours, et nous écrivons :

$$M_{2j}^{-1} = \frac{1}{\det(M_{2j})} \begin{pmatrix} \frac{\Phi'(\lambda_j, m_j\omega_j/\hbar, z_{0j}; z_{j+1})}{m_j} & -\Phi(\lambda_j, m_j\omega_j/\hbar, z_{0j}; z_{j+1}) \\ -\frac{\Theta'(\lambda_j, m_j\omega_j/\hbar, z_{0j}; z_{j+1})}{m_j} & \Theta(\lambda_j, m_j\omega_j/\hbar, z_{0j}; z_{j+1}) \end{pmatrix} . \tag{B.11}$$

Annexe C

Les fonctions d'Airy

En sciences physiques en général, la fonction Airy de première espèce $\mathrm{Ai}(z)$ est une fonction spéciale nommée d'après l'astronome britannique George Biddell Airy, qui la découvre dans ses premières études d'optique [35]. La fonction $\mathrm{Ai}(z)$ et la fonction du deuxième espèce $\mathrm{Bi}(z)$ sont des solutions linéairement indépendantes de l'équation différentielle :

$$\frac{\mathrm{d}^2 y(z)}{\mathrm{d}z^2} - zy(z) = 0 \ , \tag{C.1}$$

Les fonctions d'Airy $\mathrm{Ai}(z)$ et $\mathrm{Bi}(z)$, et leurs dérivés $\mathrm{Ai}'(z)$ et $\mathrm{Bi}'(z)$ peuvent être définies comme suit [37] :

$$\mathrm{Ai}(z) = \frac{1}{3^{\frac{2}{3}}\Gamma\left(\frac{2}{3}\right)}\ {}_0\mathrm{F}_1\left(;\frac{2}{3};\frac{z^3}{9}\right) - \frac{z}{3^{\frac{1}{3}}\Gamma\left(\frac{1}{3}\right)}\ {}_0\mathrm{F}_1\left(;\frac{4}{3};\frac{z^3}{9}\right) \ , \tag{C.2}$$

$$\mathrm{Ai}'(z) = \frac{z^2}{2\ 3^{\frac{2}{3}}\Gamma\left(\frac{2}{3}\right)}\ {}_0\mathrm{F}_1\left(;\frac{5}{3};\frac{z^3}{9}\right) - \frac{1}{3^{\frac{1}{3}}\Gamma\left(\frac{1}{3}\right)}\ {}_0\mathrm{F}_1\left(;\frac{1}{3};\frac{z^3}{9}\right) \ , \tag{C.3}$$

$$\mathrm{Bi}(z) = \frac{1}{3^{\frac{1}{6}}\Gamma\left(\frac{2}{3}\right)}\ {}_0\mathrm{F}_1\left(;\frac{2}{3};\frac{z^3}{9}\right) + \frac{3^{\frac{1}{6}}z}{\Gamma\left(\frac{1}{3}\right)}\ {}_0\mathrm{F}_1\left(;\frac{4}{3};\frac{z^3}{9}\right) \ , \tag{C.4}$$

$$\mathrm{Bi}'(z) = \frac{z^2}{2\ 3^{\frac{1}{6}}\Gamma\left(\frac{2}{3}\right)}\ {}_0\mathrm{F}_1\left(;\frac{5}{3};\frac{z^3}{9}\right) + \frac{3^{\frac{1}{6}}}{\Gamma\left(\frac{1}{3}\right)}\ {}_0\mathrm{F}_1\left(;\frac{1}{3};\frac{z^3}{9}\right) \ , \tag{C.5}$$

où ${}_0\mathrm{F}_1\left(;a;z\right)$ et $\Gamma(x)$ sont respectivement la fonction limite hypergéométrique confluente et la fonction Gamma, telles que :

$${}_0\mathrm{F}_1\left(;a;z\right) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^n}{(a)_n n!} \ , \tag{C.6}$$

$$\Gamma(x) = \int_0^{\infty} t^{x-1}\mathrm{e}^{-t}dt \ . \tag{C.7}$$

Annexe D

Les fonctions hypergéométriques

Cette annexe représente une démonstration mathématique des expressions des fonctions hypergéométriques confluentes ${}_1\mathrm{F}_1(-\frac{1}{4}\lambda_j, \frac{1}{2}; \xi^2)$ et $\xi\ {}_1\mathrm{F}_1(-\frac{1}{4}(\lambda_j - 2), \frac{3}{2}; \xi^2)$. On prendre **Eq.** (3.44) suivante :

$$U_j''(\xi) - 2\xi\ U_j'(\xi) + \lambda_j\ U_j(\xi) = 0\ , \tag{D.1}$$

on suppose que $U_j(\xi_j)$ s'écrit de la forme :

$$U_j(\xi_j) = \sum_{n=0}^{\infty} C_n\ \xi^n\ , \tag{D.2}$$

et on cherche l'expression des coefficients C_n.
Les fonctions dérivées de $U_j(\xi_j)$ s'ecrit :

$$U_j'(\xi_j) = \sum_{n=1}^{\infty} nC_n\ \xi^{n-1}\ , \tag{D.3}$$

$$\Rightarrow\ \xi_j U_j'(\xi_j) = \sum_{n=1}^{\infty} nC_n\ \xi^n\ , \tag{D.4}$$

$$U_j''(\xi_j) = \sum_{n=2}^{\infty} n(n-1)\ C_n\ \xi^{n-2}\ , \tag{D.5}$$

on pose : $n - 2 = m\ \Rightarrow\ n = m + 2$, **Eq.** (D.5) devient :

$$U_j''(\xi_j) = \sum_{m=0}^{\infty} (m+2)(m+1)\ C_{m+2}\ \xi^m\ , \tag{D.6}$$

en remplaçant m par n, on obtient :

$$U_j''(\xi_j) = \sum_{n=0}^{\infty}(n+2)(n+1)\ C_{n+2}\ \xi^n\ , \tag{D.7}$$

$$= 2C_2 + \sum_{n=1}^{\infty}(n+2)(n+1)\ C_{n+2}\ \xi^n\ , \tag{D.8}$$

on peut ecrire **Eq.** (D.2) comme suit :

$$U_j(\xi_j) = C_0 + \sum_{n=1}^{\infty} C_n\ \xi^n\ , \tag{D.9}$$

en remplaçant **Eq.** (D.4), **Eq.** (D.8) et **Eq.** (D.9) dans **Eq.** (D.1), on obtient :

$$\left[2C_2 + \sum_{n=1}^{\infty}(n+2)(n+1)\ C_{n+2}\ \xi^n\right] - \sum_{n=1}^{\infty} 2nC_n\ \xi^n + \lambda_j C_0 + \sum_{n=1}^{\infty}\lambda_j C_n\ \xi^n = 0 \tag{D.10}$$

la dernière équation donne :

$$2C_2 + \lambda_j C_0 = 0\ , \tag{D.11}$$

$$(n+2)(n+1)\ C_{n+2} + (\lambda_j - 2n)\, C_n = 0\ , \tag{D.12}$$

Eq. (D.12) implique :

$$C_{n+2} = \frac{2n-\lambda_j}{(n+2)(n+1)} C_n\ , \tag{D.13}$$

calculons C_3 , C_5 , C_7 ... pour $n = 1$, $n = 3$, $n = 5$ ... respectivement, on obtient :

$$n = 1 \qquad C_3 = \frac{2-\lambda_j}{2\times 3} C_1\ , \tag{D.14}$$

$$n = 3 \qquad C_5 = \frac{(2-\lambda_j)(6-\lambda_j)}{2\times 3\times 4\times 5} C_1\ , \tag{D.15}$$

$$n = 5 \qquad C_7 = \frac{(2-\lambda_j)(6-\lambda_j)(10-\lambda_j)}{2\times 3\times 4\times 5\times 6\times 7} C_1\ , \tag{D.16}$$

$$\vdots \qquad\qquad \vdots$$

$$C_{2n+1} = \frac{(2-\lambda_j)\ldots(4n-2-\lambda_j)}{(2n+1)!} C_1\ , \tag{D.17}$$

maintenant on calcule C_4 , C_6 , C_8 ... pour $n = 2$, $n = 4$, $n = 6$ ... respectivement, on obtient :

$$n = 2 \qquad C_4 = \frac{4-\lambda_j}{3\times 4} C_2\ , \tag{D.18}$$

Eq. (D.11) implique :

$$C_2 = \frac{-\lambda_j C_0}{2} \ , \tag{D.19}$$

en remplacant la dernière equation dans l'expression de C_4, on obtient :

$$C_4 = \frac{-\lambda_j(4-\lambda_j)}{2\times 3\times 4} C_0 \ , \tag{D.20}$$

$$n=4 \qquad C_6 = \frac{-\lambda_j(4-\lambda_j)(8-\lambda_j)}{2\times 3\times 4\times 5\times 6} C_0 \ , \tag{D.21}$$

$$n=6 \qquad C_8 = \frac{-\lambda_j(4-\lambda_j)(8-\lambda_j)(12-\lambda_j)}{2\times 3\times 4\times 5\times 6\times 7\times 8} C_0 \ , \tag{D.22}$$

$$\vdots \qquad\qquad \vdots$$

$$C_{2n} = \frac{(-\lambda_j)(4-\lambda_j)\dots(4n-4-\lambda_j)}{(2n)!} C_0 \ , \tag{D.23}$$

Eq. (D.17) et **Eq.** (D.23) représentent respectivement les termes impaire et paire de la sommation de **Eq.** (D.2), c'est-a-dire :

$$C_n = C_{2n} + C_{2n+1} \ , \tag{D.24}$$

$$= \frac{(-\lambda_j)(4-\lambda_j)\dots(4n-4-\lambda_j)}{(2n)!} C_0 + \frac{(2-\lambda_j)\dots(4n-2-\lambda_j)}{(2n+1)!} C_1 \ , \tag{D.25}$$

on peut écrire la dernière equation sous la forme suivante :

$$C_n = \frac{\prod_{\ell=1}^{n}(4\ell-4-\lambda_j)}{(2n)!} C_0 + \frac{\prod_{\ell=1}^{n}(4\ell-2-\lambda_j)}{(2n+1)!} C_1 \ , \tag{D.26}$$

alors, **Eq.** (D.2) devient :

$$U_j(\xi_j) = \sum_{n=0}^{\infty} \left[\frac{\prod_{\ell=1}^{n}(4\ell-4-\lambda_j)}{(2n)!} C_0 \xi^{2n} + \frac{\prod_{\ell=1}^{n}(4\ell-2-\lambda_j)}{(2n+1)!} C_1 \xi^{2n+1} \right] \ , \tag{D.27}$$

par identification entre les deux équations **Eq.** (D.27) et **Eq.** (3.47), on conclue que :

$${}_1\mathrm{F}_1\left(-\frac{1}{4}\lambda_j, \frac{1}{2}; \xi^2\right) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\xi^{2n}}{(2n)!} \prod_{\ell=1}^{n}(4\ell-4-\lambda_j) \ , \tag{D.28}$$

$$\xi\ {}_1\mathrm{F}_1\left(-\frac{1}{4}(\lambda_j-2), \frac{3}{2}; \xi^2\right) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\xi^{2n+1}}{(2n+1)!} \prod_{\ell=1}^{n}(4\ell-2-\lambda_j) \ . \tag{D.29}$$

avec ${}_1\mathrm{F}_1\left(-\frac{1}{4}\lambda_j, \frac{1}{2}; \xi^2\right)$ et $\xi\ {}_1\mathrm{F}_1\left(-\frac{1}{4}(\lambda_j-2), \frac{3}{2}; \xi^2\right)$ les fonctions hypergéométriques confluentes.

Annexe E

Codes de simulation

Dans le but de tracer les courbes de la variation du coefficient de transmission en fonction de la variation de l'énergie électronique, nous écrivons un programme en utilisant le langage *Wolfram*® (voir E.1) qui nous permet de calculer les valeurs du coefficient de transmission pour certaines valeurs d'énergie électronique et d'enregistrer les résultats dans un fichier de données, en plus d'un autre programme écrit en *Python*® (voir E.2) qui utilise le fichier des données pour tracer la courbe de la variation du coefficient de transmission en fonction de la variation de l'énergie de l'électron.

```
(*
Les niveaux d'energie electronique d'une heterstructure dans les
    champs electromagnetique

Ecrit par Oussama Houhou
Email: houhou.oussama@univ-medea.dz
*)

(*
-----------------
fonctions d'assistance
-----------------
*)

(* Fonction Theta *)
Theta[j_,B_,F_,V_,z_,m_,EE_,zz_]:=Module[{dE,k,lambda,z0j},
dE=EE-V[[j+1]]+Sum[e F[[i+1]] (z[[i+1]]-z[[i]]),{i,1,j-1}];
If[B[[j+1]]==0,
(* B=0 *)
If[F[[j+1]]==0,
(* F=0 *)
k=Sqrt[2 m[[j+1]] dE/hbar^2];
Exp[I k zz],

(* F!=0 *)
lambda=CubeRoot[-2 m[[j+1]] e F[[j+1]]/hbar^2];
z0j=z[[j]]- dE/(e F[[j+1]]);
```

```
AiryAi[lambda*(zz-z0j)]
],

(* B!=0 *)
lambda=-2 m[[j+1]] dE/(e B[[j+1]])-1;
z0j=z[[j]]- dE/(e F[[j+1]]);
rho=e B[[j+1]]/hbar;
Hypergeometric1F1[-0.25 lambda, 0.5, rho (zz-z0j)^2] Exp[-0.5 rho (
    zz-z0j)^2]
]
]

(* Fonction Thetap *)
Thetap[j_,B_,F_,V_,z_,m_,EE_,zz_]:=Module[{dE,k,lambda,z0j},
dE=EE-V[[j+1]]+Sum[e F[[i+1]] (z[[i+1]]-z[[i]]),{i,1,j-1}];
If[B[[j+1]]==0,
(* B=0 *)
If[F[[j+1]]==0,
(* F=0 *)
k=Sqrt[2 m[[j+1]] dE/hbar^2];
I k Exp[I k zz],

(* F!=0 *)
lambda=CubeRoot[-2 m[[j+1]] e F[[j+1]]/hbar^2];
z0j=z[[j]]- dE/(e F[[j+1]]);
D[AiryAi[lambda*(Z-z0j)],Z]/.Z->zz
],

(* B!=0 *)
lambda=-2 m[[j+1]] dE/(e B[[j+1]])-1;
z0j=z[[j]]- dE/(e F[[j+1]]);
rho=e B[[j+1]]/hbar;
D[Hypergeometric1F1[-0.25 lambda, 0.5, rho (Z-z0j)^2] Exp[-0.5 rho
    (Z-z0j)^2],Z]/.Z->zz
]
]

(* Fonction Phi *)
Phi[j_,B_,F_,V_,z_,m_,EE_,zz_]:=Module[{dE,k,lambda,z0j},
dE=EE-V[[j+1]]+Sum[e F[[i+1]] (z[[i+1]]-z[[i]]),{i,1,j-1}];
If[B[[j+1]]==0,
(* B=0 *)
If[F[[j+1]]==0,
(* F=0 *)
k=Sqrt[2 m[[j+1]] dE/hbar^2];
Exp[-I k zz],

(* F!=0 *)
lambda=CubeRoot[-2 m[[j+1]] e F[[j+1]]/hbar^2];
z0j=z[[j]]- dE/(e F[[j+1]]);
AiryBi[lambda*(zz-z0j)]
],

(* B!=0 *)
lambda=-2 m[[j+1]] dE/(e B[[j+1]])-1;
z0j=z[[j]]- dE/(e F[[j+1]]);
rho=e B[[j+1]]/hbar;
```

```
Sqrt[rho] (zz-z0j) Hypergeometric1F1[-0.25 (lambda-2), 1.5, rho (zz-z0j)^2] Exp[-0.5 rho (zz-z0j)^2]
]
]

(* Fonction Phip *)
Phip[j_,B_,F_,V_,z_,m_,EE_,zz_]:=Module[{dE,k,lambda,z0j},
dE=EE-V[[j+1]]+Sum[e F[[i+1]] (z[[i+1]]-z[[i]]),{i,1,j-1}];
If[B[[j+1]]==0,
(* B=0 *)
If[F[[j+1]]==0,
(* F=0 *)
k=Sqrt[2 m[[j+1]] dE/hbar^2];
-I k Exp[-I k zz],

(* F!=0 *)
lambda=CubeRoot[-2 m[[j+1]] e F[[j+1]]/hbar^2];
z0j=z[[j]]- dE/(e F[[j+1]]);
D[AiryBi[lambda*(Z-z0j)],Z]/.Z->zz
],

(* B!=0 *)
lambda=-2 m[[j+1]] dE/(e B[[j+1]])-1;
z0j=z[[j]]- dE/(e F[[j+1]]);
rho=e B[[j+1]]/hbar;
D[Sqrt[rho] (Z-z0j) Hypergeometric1F1[-0.25 (lambda-2), 1.5, rho (Z-z0j)^2] Exp[-0.5 rho (Z-z0j)^2],Z]/.Z->zz
]
]

(*
---------------------
Constantes
---------------------
*)

hbar = 6.62607*10^(-34)/(2*Pi)                          (* hbar *)
me = 9.10938356*10^(-31)                                (* la masse d'electron *)
e = 1.602176*10^(-19)                                   (* la charge d'electron *)
eV = e                                                  (* unite electron-volt *)

(*
-------------------------------------
Caracteristiques de l'heterostructure
-------------------------------------
*)

dbw = {2.8*10^(-9),8*10^(-9),2.8*10^(-9)}               (* epaisseur de barriere-puits-barriere *)
m = {0.067*me,0.0919*me,0.067*me,0.0919*me,0.067*me}    (* la masse effective des regions 0,...,2N  *)
V = {0.0,0.225*eV,0.0,0.225*eV,0.0}                     (* profil potentiel *)

```

```
(*
--------------------
Parametres systeme
--------------------
*)

(* calcul de N *)
n=(Length[V]-1)/2

(* calcul de z_1,...,z_{2N-1} *)
z=ConstantArray[0,2*n]
For[
j=1,j<2*n,j++,
z[[j+1]]=z[[j]]+dbw[[j]]
]

(* Champs electriques *)
F0=0.20/z[[2*n]]
F={0.,F0,F0,F0,F0,F0,0.}                                    (*
    F_0,...,F_{2N} *)

(* Champs magnetiques *)
B0=0.
B={0.,B0,B0,B0,B0,B0,0.}                                    (*
    B_0,...,B_{2N} *)


(*
-----------------------------------------------------------------
Calcul du coefficient de transmission en fonction de l'energie
-----------------------------------------------------------------
*)

(* intervalle d'energie et pas *)
Ei=0.00*eV                                                  (* valeur
    initiale de E *)
Ef=0.25*eV                                                  (* valeur
    finale de E *)
NE=10^3+1                                                   (* nombre
    de valeurs de E *)

(* array d'energie *)
EE=Array[Ei+#1*(Ef-Ei)/(NE-1) &,NE,0]

(* array de coefficient de transmission *)
T=ConstantArray[0.,NE]

(* calcul de matrice de transfert et coefficient de transmission
    pour chaque valeur de E *)
For[
i=1,i<=NE,i++,
(* trouver la matrice de transfert M *)
M=IdentityMatrix[{2,2}];
For[
j=0,j<2*n,j++,
M2j={{Theta[j,B,F,V,z,m,EE[[i]],z[[j+1]]],Phi[j,B,F,V,z,m,EE[[i]],z
    [[j+1]]]},{Thetap[j,B,F,V,z,m,EE[[i]],z[[j+1]]]/m[[j+1]],Phip[j
```

```
    ,B,F,V,z,m,EE[[i]],z[[j+1]]]/m[[j+1]]}};
M2jp1={{Theta[j,B,F,V,z,m,EE[[i]],z[[j+1]]],Phi[j,B,F,V,z,m,EE[[i
    ]],z[[j+1]]]},{Thetap[j,B,F,V,z,m,EE[[i]],z[[j+1]]]/m[[j+2]],
    Phip[j,B,F,V,z,m,EE[[i]],z[[j+1]]]/m[[j+2]]}};
M=M.Inverse[M2j].M2jp1;
];

(* calcul de coefficient de transmission T *)
T[[i]]=Sqrt[m[[1]]/m[[2*n+1]] (EE[[i]]-V[[2 n+1]]+Sum[e F[[i+1]] (z
    [[i+1]]-z[[i]]),{i,1,2n-1}])/(EE[[i]]-V[[1]])]/Abs[M[[1,1]]^2;
];

(* tracer les donnees et les enregistrer dans un fichier *)
Export["trans-coef.png",ListPlot[Transpose[{EE[[2;;]]/eV,Log[T
    [[2;;]]]}],PlotRange->All]]
Export["trans-coef-double-barriere-B=0-Va=0,20-dw=8nm-db=2.8nm.data
    ",Transpose[{EE[[2;;]]/eV,Log[T[[2;;]]]}],"Table"]
```

Listing E.1 – Le programme *Wolfram*® pour calculer les valeurs du coefficient de transmission pour certaines valeurs de l'énergie électronique.

```
import matplotlib.pyplot as plt
from matplotlib.pyplot import close, grid
import numpy as np
import os

E = []
T = []

colors_labels = {'r':'s1 = 3.2nm', 'g':'s2 = 6.4nm', 'b':'s3 =
  8.3nm'}    # couleur et label des courbes

data_files_directory = r"D:\Memoire\thesis\triple-barriere+F-var-
  s"       # le chemain de dossier des fichiers donnees
object = os.scandir(data_files_directory)
for (file_directory,key) in zip(object,colors_labels) :
with open(file_directory) as data_file:                  # ovrir
  le fichier de donnee
array = np.loadtxt(data_file, delimiter = "\t")     # Pour
  telecharger les donnees a partir de fichier donnee
# print(file_directory)
for i in range(0,len(array)) :                       # romplir les
   list E et T par les valeurs
E.append(array[i][0])
T.append(array[i][1])

# tracage de la courbe T = f(E) :
plt.plot(E, T, color = key, label = colors_labels[key])

E = []
T = []
data_file.close()        # pour fermer le fichier de donnee

# Nomination de l'axe x et l'axe y respectivement :
plt.xlabel("Energie (eV)")
plt.ylabel("Log[T(E)]")

```

```
32  # affichage de la grille dans la courbe :
33  plt.grid(color = 'gray', linestyle = 'dotted', linewidth = 0.7)
34
35  # pour conaitre la courbe a partire de leur couleur :
36  plt.legend()
37
38  # sauvgarder la figure :
39  plt.savefig('trans-coef-triple-barriere-B=0-Va=0,30-dw=8nm-db1
      =3.2nm-db2=6.4nm-db3=8.3nm.eps', dpi=300, bbox_inches='tight')
40
41  # affichage de la fenetre de la courbe :
42  plt.show()
```

Listing E.2 – Le programme *Python*® pour le tracé des courbes de la variation du coefficient de transmission en fonction de la variation de l'énergie électronique.

Bibliographie

[1] Fatiha, R. : L'étude des niveaux d'énergie des hétéro-structures en fonction de la structure de la bande de conduction (2016)

[2] Cardona, M., Peter, Y.Y. : Fundamentals of semiconductors. Volume 619. Springer (2005)

[3] Ukasiak, L., Jakubowski, A. : History of semiconductors. Journal of Telecommunications and Information Technology (2010) 3–9

[4] Pearson, G., Brattain, W.H. : History of semiconductor research. Proceedings of the IRE **43**(12) (1955) 1794–1806

[5] Faraday, M. : I. experimental researches in electricity.—fifteenth series. Philosophical Transactions of the Royal Society of London (129) (1839) 1–12

[6] Braun, F. : Ueber die stromleitung durch schwefelmetalle. Annalen der Physik **229**(12) (1875) 556–563

[7] Bandyopadhyay, P. : Sir jc bose's diode detector received marconi's first transatlantic wireless signal of december 1901 (the. Italian Navy coherer" scandal revisited), in IEEE (1998)

[8] Bardeen, J., Brattain, W.H. : The transistor, a semi-conductor triode. Physical Review **74**(2) (1948) 230

[9] Slusser, G., MacDowell, L. : Sources of surface contamination affecting electrical characteristics of semiconductors. Journal of Vacuum Science & Technology A : Vacuum, Surfaces, and Films **5**(4) (1987) 1649–1651

[10] Barbot, A. : Dopage par co-sublimation de semi-conducteurs organiques pour la conversion en énergie : Applications aux cellules photovoltaïques. Theses, Université de Limoges (October 2014)

[11] Godefroy, L., Tavernier, J. : I. effets magnétoélectriques et thermomagnétoélectriques dans les semi-conducteurs. Journal de Physique et le Radium **21**(4) (1960) 249–260

[12] Steiner, T.D. : Semiconductor nanostructures for optoelectronic applications. Artech House (2004)

[13] Wang, H., Zhang, L., Chen, Z., Hu, J., Li, S., Wang, Z., Liu, J., Wang, X. : Semiconductor heterojunction photocatalysts : design, construction,

and photocatalytic performances. Chemical Society Reviews **43**(15) (2014) 5234–5244

[14] Adachi, S. : Optical properties of crystalline and amorphous semiconductors : Materials and fundamental principles. Springer Science & Business Media (2012)

[15] Scifres, D., Burnham, R., Streifer, W. : Distributed-feedback single heterojunction gaas diode laser. Applied Physics Letters **25**(4) (1974) 203–206

[16] Mandalapu, L., Xiu, F., Yang, Z., Zhao, D., Liu, J. : p-type behavior from sb-doped zno heterojunction photodiodes. Applied Physics Letters **88**(11) (2006) 112108

[17] Mathew, M., Shinde, P.V., Samal, R., Rout, C.S. : A review on mechanisms and recent developments in pn heterojunctions of 2d materials for gas sensing applications. Journal of Materials Science **56**(16) (2021) 9575–9604

[18] Asbeck, P., Chang, M.C., Higgins, J., Sheng, N., Sullivan, G., Wang, K.C. : Gaalas/gaas heterojunction bipolar transistors : Issues and prospects for application. IEEE Transactions on Electron Devices **36**(10) (1989) 2032–2042

[19] Pavel, I. : Niels bohr, le père de l'atome. Bibnum. Textes fondateurs de la science (2013)

[20] Haelterman, M. : Physique des semi-conducteurs ii. Université Libre de Bruxelles (1998)

[21] Kleinman, L., Phillips, J.C. : Crystal potential and energy bands of semiconductors. III. Self-consistent calculations for silicon. Physical Review **118**(5) (1960) 1153

[22] Ashcroft, N.W., Mermin, N.D., et al. : Solid state physics (1976)

[23] Son, N., Chen, W., Kordina, O., Konstantinov, A., Monemar, B., Janzén, E., Hofman, D., Volm, D., Drechsler, M., Meyer, B. : Electron effective masses in 4h sic. Applied physics letters **66**(9) (1995) 1074–1076

[24] Harrison, P., Valavanis, A. : Quantum wells, wires and dots : theoretical and computational physics of semiconductor nanostructures. John Wiley & Sons (2016)

[25] BenDaniel, D., Duke, C. : Space-charge effects on electron tunneling. Physical review **152**(2) (1966) 683

[26] Dubos, V., Dalmont, J.P., Kergomard, J. : Mesure de matrices de transfert de systèmes acoustiques simples. Le Journal de Physique IV **4**(C5) (1994) C5–279

[27] Cohen-Tannoudji, C., Diu, B., Laloë, F. : Mécanique quantique-Tome 3. EDP sciences (2021)

[28] Guézo, S. : Microscopie à Emission d'Electrons Balistiques (BEEM) : étude des propriétés électroniques locales d'hétérostructures. PhD thesis, Université Rennes 1 (2009)

[29] Abelev, E., Sezin, N., Ein-Eli, Y. : An alternative isolation of tungsten tips for a scanning tunneling microscope. Review of scientific instruments **76**(10) (2005) 106105

[30] Rui, X., Wang, G., Zhang, J. : Transfer matrix method for multibody systems : theory and applications. John Wiley & Sons (2018)

[31] Trenado, N. : Modélisation et simulation des composants optoélectroniques à puits quantiques. PhD thesis, Université de Rouen (2002)

[32] Yong, G., Li, Y.C., Kong, X.J., Wei, C.W. : Quantum magnetotransport of electrons in double-barrier resonant-tunneling structures. Physical Review B **50**(23) (1994) 17249

[33] Guo, Y., Gu, B.L., Yu, J.Z., Zeng, Z., Kawazoe, Y. : Resonant tunneling in step-barrier structures under an applied electric field. Journal of Applied Physics **84**(2) (1998) 918–924

[34] Peng, J.p., Chen, H., Zhou, S.x. : A theoretical study of resonant tunnelling in the double-barrier structure. Journal of Physics : Condensed Matter **1**(32) (1989) 5451

[35] Airy, G.B., et al. : On the intensity of light in the neighbourhood of a caustic. Transactions of the Cambridge Philosophical Society **6** (1838) 379

[36] Nikiforov, A.F., Uvarov, V.B. : Special functions of mathematical physics. Volume 205. Springer (1988)

[37] Whittaker, E.T. : An expression of certain known functions as generalized hypergeometric functions. Bulletin of the American Mathematical Society **10**(3) (1903) 125–134

[38] Tricomi, F.G. : Fonctions hypergéométriques confluentes. (1960)

[39] Chuang, S.L. : Efficient band-structure calculations of strained quantum wells. Physical Review B **43**(12) (1991) 9649

[40] Casey, H.C., Panish, M.B. : Heterostructure lasers. Volume 1. Academic press (1978)

[41] Vatannia, S., Gildenblat, G. : Airy's functions implementation of the transfer-matrix method for resonant tunneling in variably spaced finite superlattices. IEEE Journal of Quantum Electronics **32**(6) (1996) 1093–1105

Résumé

Nous avons étudié théoriquement via l'équation de Schrödinger différentes hétérostructures de semi-conducteur. En étudiant l'effet tunnel, nous avons déduit les niveaux d'énergie d'un électron se propageant dans une hétérostructure plongée dans un champ électromagnétique. Les coefficients de transmission à travers les différentes multibarrières ont été calculés via la technique de la matrice de transfert. Nous avons utilisé l'approximation de la masse effective et les conditions de continuité de Ben Daniel-Duke pour exprimer cette matrice de transfert. Suivant la nature du champ électromagnétique extérieur les fonctions d'onde ainsi que les coefficents de transmission s'expriment soit en termes de fonctions d'Airy, soit en termes de fonctions hypergéomtriques confluentes.

Mots-clés : hétérostructure, semi-conducteurs, niveaux d'énergie, l'effet tunnel, l'approximation de la masse effective, conditions de continuité, matrice de transfert, fonctions d'Airy, fonctions d'Herrmite, champs électromagnétiques.

ملخّص

قمنا بدراسة نظرية حول البنية المتباينة المصنوعة من أشباه النواقل، حيث حسبنا مستويات الطاقة لإلكترون ينتشر في بنية متباينة مغمورة في حقل كهرومغناطيسي وفقًا لمفعول النفق مستخدمين تقريب الكتلة الفعالة و شروط الاستمرارية للوصول إلى مصفوفة النقل التي كتبناها بدلالة الأمواج المستوية و دوال إيري و دوال هرميت.

كلمات مفتاحية ـ البنية المتباينة، أشباه النواقل، مستويات الطاقة، مفعول النفق، تقريب الكتلة الفعالة، شروط الاستمرارية، مصفوفة النقل، دوال إيري، دوال هرميت، الحقول الكهرومغطسية.

Abstract

We studied theoretically via the Schrödinger equation different semiconductor heterostructures. By studying the tunnel effect, we have deduced the energy levels of an electron propagating in a heterostructure immersed in an electromagnetic field. The transmission coefficients through the different multibarriers were calculated using the transfer matrix technique. We used the effective mass approximation and the Ben Daniel-Duke continuity conditions to express this transfer matrix. Depending on the nature of the external electromagnetic field, the wave functions as well as the transmission coefficients are expressed either in terms of Airy functions or in terms of confluent hypergeometric functions.

Keywords : heterostructure, semi-conductors, energy levels, tunnel effect, effective mass approximation, continuity conditions, transfer matrix, Airy functions, Hermite functions, electromagnetic fields.