



Mémoire de Master II

Mention Électronique
Spécialité MICRO Électroniques

présenté par

OUBADJI Mustapha

&

MERZOUG YUCEF

ETUDE D'UN PUIITS QUANTIQUE A BASE D'InGa_N/ZnSnN₂/InGa_N POUR LE LASER A SEMI- CONDUCTEUR

Proposé par le professeur : MR.AISSAT Abdelkader

Année Universitaire 2018-2019

ملخص: يركز هذا العمل على دراسة ومحاكاة اختلاط متباين يتكون من مزيج من أشباه الموصلات من عائلة III-V وتلك من Zn-VI-N₂. موضوعنا المزيج InGa_N/ZnSnN₂. نريد أن نتوصل إلى نتائج مماثلة لنتائج اختلاط يتألف من أشباه الموصلات ثلاثية من عائلة III-V. يتم إجراء محاكاة للكشف عن تأثير تباين تركيز الإنديوم على معلمة الشبكة وفجوة الطاقة والتأثير الناتج عن تباين عرض البئر الكمومي بتركيزات مختلفة ؛ الذي استنتج منه الحد الأقصى لطول الموجة المنبعثة نحو 0.6650 ميكرون.

كلمات المفاتيح: ZnSnN₂، بنية متغيرة، بئر كمي.

Résumé : Ce travail se concentre sur l'étude et la simulation d'une heterojonction composé d'un mélange des semi-conducteurs de la famille III-V et celles des Zn-VI-N₂. l'InGa_N/ZnSnN₂/InGa_N est notre sujet. Nous voulons arriver à des résultats comparable à celle d'une heterojonction composé des ternaire de semi- conducteurs de la famille des III-V. Une simulation est réalisé pour détecter l'effet de la variation de la concentration de l'indium sur le paramètre de maille et le gap et l'influence due à la variation la largeur du puits quantique à des concentrations variables ; ce qui a déduit une longueur d'onde émise maximale de 0.6650 μ m.

Mots clés : ZnSnN₂ ; hétéro-structure ; puits quantiques.

Abstract: this work focuses on the study and simulation of a heterojunction composed of a mixture of semiconductors of the III-V family and those of Zn-VI-N₂: InGa_N / ZnSnN₂ / InGa_N for a quantum well. We want to arrive at results comparable to that of a heterojunction composed of ternary semiconductors of the III-V family. A simulation is performed to detect the effect of the variation of the indium concentration on the mesh parameter and the gap and the influence due to the variation of the quantum well width at varying concentrations; which deduced a maximum emitted wavelength of 0.6650 μ m.

Keywords: ZnSnN₂; hétéro-structure; quantum well.

بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ

Remerciement

Au commencement d'élaboration de cette these de fin d'étude en master II, tout parait ideal. On se sentait qu'on a toute l'énergie, et qu'on pouvait beaucoup faire. Dans un premier essai d'exposé en vue de correction, on découvrait qu'on s'est dévié du sujet, et qu'on n'arrivait pas à s'accrocher au bon démarrage, un sentiment d'être perdu. Une autre alternative de se corriger et rien ne va mieux. IL vient dans la tête que peut être, on s'est introduit dans un domaine difficile, et il vaut mieux de tout laisser tomber, et de se retirer avec silence. Il faut dire et déclarer nos forts remerciements à notre encadreur le professeur MR. AISSET Abdelkader, qui nous a fais changer d'avis, et nous a donner un nouveau souffle et d'être autant généreux avec nous par ses connaissances. Grâce à lui qu'on a pu rencontrer MR. BESTAM Rachid, l'homme gentil qui nous a accueillis dans son lieu de travail, et nous a tendu sa main et augmenter notre gain d'efficacité. Sans oublier à déclarer notre reconnaissance à tout personnel d'encadrement du département électronique de l'université Blida : MR.NACER, MR BOUNEMRI, MR ABDELMOUMEN et aussi nos collègues de classe pour leurs esprit solidaire et à toute personne a coopéré à l'élaboration de ce travail au moins par un sourire.

DEDICACES

Je dédie ce travail :

A l'esprit de mon père défunt Allah yarhmou.

Ma chère mère qui me soutien pour toujours par ses DOAA.

Ma femme que dieu la protège.

Mon frère Mahfoud et ma sœur Fadela ; son mari MOHAMED et ses enfants : Meriouma, Younes, Djilali et Abdelkader.

Mes enfants bien aimés : ALAA, MOHAMED ABDELKADER, SAFA, MARWA et le petit DOUDOU (ABDELOUADOUD).

OUBADJI MUSTAPHA

DEDICACES

Je dédie ce travail:

**A l'esprit de la très chère de mon Cœur, ma mère défunte
Allah yarhmha.**

Mon cher père que dieu le protégé.

Ma grand-mère que dieu lui donne longue vie et santé.

Mes frères et sœurs.

**Mes profs du département électronique U. Blida :
MR.NACER;MR BOUNEMRI et tout l'ensemble qui ont
contribué à ma formation.**

MERZOUG Youcef

Listes des acronymes et abréviations

Si : silicium

In : Indium.

Ga : Galium.

Zn : Zinc.

Sn : étain.

N : Azote

x : Concentration d'indium.

L_w : Largeur du puits quantique.

Δ_a : Désaccord paramétrique.

E_g : Énergie de gap.

Δ_{so} : Bande spin orbite « split-off ».

Lh: Trou léger (Light hole).

Hh: Trou lourd (Heavy holes).

E_C : Énergie de la bande conduction.

E_v : Énergie de la bande valence.

BC: Bande de conduction.

BV : Bande de valence.

K: Vecteur d'onde.

a : Paramètre de maille.

c : Vitesse de la lumière dans le vide.

ϵ_0 : La permittivité du vide.

m_0 : La masse effective de l'électron.

b : Coefficient de courbure (Bowing).

cfc : Cubique à face centrée.

E_i : Niveaux d'énergies.

$h\nu$: Énergie de photon.

n_1 : Le niveau fondamental.

n_2 : Le premier état excité.

E_{en} : L'énergie des électrons.

E_{nhh} : L'énème niveau d'énergie des trous lourds (l'énergie quantifiée).

E_{nlh} : L'énème niveau d'énergie des trous légers (l'énergie quantifiée).

ΔE_{sh} : Décalage énergétique induit par la contrainte de cisaillement.

ΔE_{hh} : Décalage d'énergie de la bande de trous lourds.

ΔE_{lh} : Décalage d'énergie de la bande de trous légers.

λ : Longueur d'onde.

λ_B : La longueur d'onde De Broglie.

m_e^* : Masse effective des électrons.

KT : L'énergie thermique.

E_n : L'énergie de quantification.

$\rho(E)$: Densité d'états.

a_{ep} : paramètre de maille de la couche épitaxie ($ZnSnN_2$).

a_{sub} : Le paramètre de maille du substrat ($InGaN$).

ϵ : La déformation ou le désaccord de maille.

C_{ij} : Les coefficients d'élasticité.

$\epsilon_{||}$ (ϵ_{xx} ou ϵ_{yy}): Déformation biaxiale.

$\epsilon_{\perp}(\epsilon_{zz})$: Déformation uni-axiale.

$E_{v,moy}$: L'énergie moyenne de la bande de valence.

m_e : la masse de l'électron.

E_{HH} : Energie de la bande de trous lourds.

E_{LH} : Energie de la bande de trous légers.

Δ_{hh-lh} : Dégénérescence des états énergétiques entre trous lourds et trous légers en $k = 0$.

ΔE_c^{hyd} : Les décalages énergétiques des centres de gravité de la bande de valence et de la bande de conduction induits par la contrainte hydrostatique.

$\Delta E_{v,moy}^{hyd}$: Les décalages énergétiques des centres de gravité de la bande de valence en K
=0 induits par la contrainte hydrostatique.

ΔE_{hh}^{cisa} : Variation de l'énergie induite par la contrainte de cisaillement avec la bande de trous lourds.

ν : Coefficient de poisson.

$V(x)$: l'énergie potentiel.

H : l'opérateur hamiltonien.

Δ : le laplacien.

$\hbar$: constante de planck.

E_{hh}^{cisa} : Énergie induite par la contrainte de cisaillement avec la bande de trous lourds.

E_{lh}^{cisa} : Énergie induite par la contrainte de cisaillement avec la bande de trous légers.

E_v : L'énergie du haut de la bande de valence.

E_c : L'énergie du bas de la bande de conduction.

E_g^{cont} : Énergie de Gap sous contrainte.

H_c : L'épaisseur critique.

B : Coefficient qui prend les valeurs suivantes selon le type de la structure.

m_e : Masse de l'électron.

E_T : L'énergie de transition.

λ_e : La longueur d'onde d'émission.

E_{ei} : Énergies de quantifications des électrons.

E_{hi} : Énergies de quantifications des trous.

E_n : Niveaux d'énergie dans la bande de conduction.

E_m : Niveaux d'énergie dans la bande de valence.

K : Constant de Boltzmann.

Table de matière :

Introduction	
générale.....	1
Chapitre I.....	4
I.1 Introduction.....	4
I.2 Présentation succincte du InGaN.....	5
I.2.1 Propriété fondamentale du InGaN :.....	5
I.2.1.1 Les propriétés structurales :.....	5
I.2.1.1.1 la structure cristallographique :.....	5
I.2.1.1.2 La polarisation.....	6
I.2.1.2 Les propriétés électriques.....	6
I.2.1.2.1 L'expression du gap de l' $\text{In}_x\text{Ga}_{(1-x)}\text{N}$	6
I.3 Matériau ZnSnN_2 :	7
I.3.1 Potentialités et Propriétés physiques du ZnSnN_2 :.....	7
I.3.2 Propriété fondamentales.....	9
I.3.3 comparaison entre les structures cristallines de composés GaN et Zn-IV-N_2	9
I.3.4 structures cristallines ZnSnN_2 :.....	10
I.3.5 Energie de gap.....	11
I.4 Les hétéro-structures :	12
I.4.1 Puits quantique : définition.....	12
I.4.2 Structure du puits quantique.....	13
I.4.2.1 Effets du confinement.....	13
I.4.2.2 Masse effective	13
I.4.2.2.1 Masse effective des électrons :.....	13
I.4.2.2.2 Masse effective des trous	14
I.4.2.3 La contrainte	14
I.4.2.3.1 Effet de la contrainte sur le Gap d'énergie	16
a) Une composante hydrostatique	16
b) Une composante de cisaillement.....	16
I.4.2.4 Epaisseur critique.....	17
I.4.3 Les états énergétiques dans un puits quantique.....	18

I.4.3.1 Puits quantique de profondeur finie.....	20
I.4.3 hetero-structure InGaN/ZnSnN ₂	22
1.4.3.1 croissances de l'hetero-structure InGaN/ZnSnN ₂	22
Chapitre II Résultat et discussion de la structure InGaN/ZnSnN ₂ /InGaN.....	24
II.1 Introduction.....	24
II.1.1 Le paramètre de maille :.....	24
II.1.2 La contrainte.....	25
II.1.3 L'épaisseur critique.....	26
II.1.4 L'énergie de la bande interdite.....	27
II.1.5 Energie de confinement des e ⁻ et trous lourds.....	27
II.1.6 L'énergie de transition.....	30
II.1.7 Longueurs d'ondes d'émission.....	32
Conclusion generale.....	35
Bibliographie.....	37

Liste des tableaux et figures

Tableau II 1 : longueurs d'onde acquises à différentes largeurs de zone active.....	32
FIGURE I.1 Structures cristallines du GaN	6
Figure I.2 l'abondance relative des éléments de la croûte continentale supérieure de la terre selon les données de l'US GEOLOGY SURVEY.....	8
Figure I. 3 Les structures cristallines des composés de la GaN et Zn-IV-N ₂	10
Figure I.4 : Structure du réseau pour ZnSnN ₂	11
Figure I.5: Comparaison des valeurs expérimentales et théoriques de la bande interdite pour les semi-conducteurs de nitrure III-V et II-IV.	12
Figure I.6 Alignement des bandes de conduction et valence dans une hétéro structure de type I et de type II	13
Figure I.7 Effet d'une contrainte en tension, nulle et en compression sur les bandes énergétiques où représente la différence de paramètre de maille	15
Figure I.8 Représentation du changement de volume d'un matériau contraint	17
Figure I.9 Présentation d'un puits quantique.....	19
FigureII.1 Variation de paramètre de maille en fonction de la concentration X.....	25
Figure II.2 variation de la déformation en fonction de la concentration X.....	26
Figure II.3 Variation de l'épaisseur critique en fonction de la concentration X.....	26
Figure II.4 évolution de l'énergie de la bande interdite en fonction de la concentration x.....	27
Figure II.5 variations de l'énergie de confinement des électrons en fonction de l'épaisseur de puits quantique pour x=10%.....	28

Figure II.6 variations de l'énergie de confinement des électrons en fonction de l'épaisseur de puits quantique pour $x=20\%$	28
Figure II.7 variations de l'énergie de confinement des électrons en fonction de l'épaisseur de puits quantique pour $x=30\%$	29
Figure II.8 variation de l'énergie de confinement des trous lourds en fonction de l'épaisseur de puits quantique pour $x=10\%$	29
Figure II.9 variation de l'énergie de confinement des trous lourds en fonction de l'épaisseur de puits quantique pour $x=20\%$	30
Figure II.10 variation de l'énergie de confinement des trous lourds en fonction de l'épaisseur de puits quantique pour $x=20\%$	30
Figure II.11 variation de l'énergie de transition des trous lourds en fonction de l'épaisseur de puits quantique pour $x=10\%$	31
Figure II.12 variation de l'énergie de transition des trous lourds en fonction de l'épaisseur de puits quantique pour $x=20\%$	31
Figure II.13 variation de l'énergie de transition des trous lourds en fonction de l'épaisseur de puits quantique pour $x=30\%$	32
Figure II.14 variation de la longueur d'onde en fonction de l'épaisseur de puits quantique pour $x=10\%$	33
Figure II.15 variation de la longueur d'onde en fonction de l'épaisseur de puits quantique pour $x=20\%$	33
Figure II.16 variation de la longueur d'onde en fonction de l'épaisseur de puits quantique pour $x=30\%$	34

Introduction générale

Quand MICHEAL FARADAY en 1833, s'apercevait qu'un élément de la quatrième colonne du tableau de Mendeleïev nommé le Silicium, change de son comportement physique et devient conducteur avant d'être isolant, en le subissant à un effet de chaleur, le monde des scientifiques, à partir de cet événement, n'a cessé à performer cet exploit ravageant de ce nouveau matériau très spécifique jusqu'à ces jours.

Si le Si (silicium) devint la découverte la plus pertinente participant à l'évolution de la microélectronique, ceci est du à ces caractéristiques physiques : Un semi-conducteur est un élément qui présente une conductivité électrique intermédiaire entre celle des métaux et celle des isolants, un changement d'état par effet d'agitation thermique [1].

Cet événement très marquant n'était pas le dernier dans l'évolution du domaine de la physique des semi-conducteurs ; un successeur de faraday : le français Antoine Becquerel en 1839 constatait qu'une différence de potentiel se crée, en éclairant le point de contact entre un conducteur et un électrolyte, il l'appelait l'effet photovoltaïque.

C'est vrai que le dix neuvième siècle est le berceau de tout les découvertes scientifiques, mais le vingtième siècle est considéré comme l'âge des avancées technologiques et améliorations des découvertes acquises, citons qu'en 1947, John Bardeen, William Shockley et Walter Brattain découvrent l'effet transistor, et dans la même année d'autres chercheurs développaient et mettaient en œuvre ces théories sur terrain, ainsi les premiers transistors opérationnelles apparaissent, et cependant l'industrialisation entre en vigueur, et une première compagnie au monde à proposer sur le marché des diodes et des transistors qui sort au monde par Herbert Mataré en 1951.

La découverte de faraday a attendu jusqu'à l'année 1954, pour sa première application par la fabrication de transistor en silicium, quatre ans après, un premier circuit intégré est né au monde grâce à Jack Kilby ; en 1961 Kenneth Geddes Wilson dévoile la propriété pertinente des semi conducteurs comme étant un isolant à faible bande interdite.

Depuis, et en rythme de cette cadence d'évolution, et comme le prévoyait Gordon Moore par sa fameuse loi dite « loi de Moore » qui stipule que la transplantation des transistors dans une puce électronique augmentera de nombre chaque deux ans, et jusqu'à ce jour, des milliers de publications apparaissent et annoncent ce progrès incontestable [2].

Ce fameux matériau du silicium, l'élite des hautes technologies de la communication, se trouve bousculée de sa place privilégiée, par l'arrivée d'une autre famille de semi conducteur, qui se développe en aval des progrès en technologie ; celle des **composés semi-conducteurs dits « III-V »**, capables de supplanter le silicium comme « matériau de base » dans un certain nombre d'applications.

Les matériaux semi-conducteurs III-V sont des composés formés à partir d'un élément de la troisième (III) colonne et d'un élément de la cinquième (V) colonne de la classification périodique de Mendeleïev.

Les composants III-V présentent des propriétés comparables à celles du silicium et peuvent le remplacer dans certaine mesure. Grâce à la combinaison d'éléments chimiques, on peut obtenir des performances très intéressantes, tel que la mobilité des électrons, qui est beaucoup plus forte que dans le silicium.

Cette propriété permet au transistor de fonctionner à des fréquences beaucoup plus hautes. Par ailleurs, contrairement au silicium, les III-V ont des propriétés performantes pour l'émission et la réception de la lumière. On peut ainsi les utiliser comme matériau laser, ce qui est impossible avec le silicium [3].

Ajoutant aussi que l'évolution du domaine photovoltaïque a donné la possibilité améliorer les ressources en matière de matériaux composites.

En dépit de ces avantages, la famille des ces alliages III-nitride et beaucoup spécialement les alliages $\text{In}_x\text{Ga}_{(1-x)}\text{N}$ présentent eux mêmes des inconvénients majeurs, et le plus flagrant de ces inconvénient est que le Gallium et l'Indium ne

sont plus abondant sur terre, ce qui veut dire que toutes tentation d'industrie à vaste utilisation comme les photovoltaïques , ne peut être possible dans ces condition de rareté.

Un autre inconvénient s'ajoute **est** que l'indium n'est pas un ami de l'environnement, est considéré de métal lourd et aussi un métal potentiellement bio toxique, aussi pour éviter tout cela les recherches investissent d'autres générations de matériaux dont les propriété optiques et électriques se rapprochent de celle de la famille des III-nitride , qui conservent l'environnement et sont moins onéreux [4].

Des résultats expérimentaux et théoriques ont montré la pertinence d'un nouveau composé : le ZnSnN, de la famille des Zn-IV-N₂ qui pourront être des alternatives aux III-nitride, à cause de leurs abondance sur terre, leurs nature non toxique et leurs faibles cout et enfin leurs caractéristiques physiques que nous allons inspecter ci-après [5].

De cet état de fait, le choix d'un tel matériau fera le noyau de notre travail dont nous avons choisi l'étude d'un puits quantique à base d'une hétérojonction d'InGa_N/ZnSnN/InGa_N pour un laser.

Notre travail se divise en trois volets essentiels :

Le premier chapitre présente l'état de l'art sur l'étude théorique de la caractéristique physique et optique des deux composés de notre structure l'InGa_N/ZnSnN₂/InGa_N.

Un deuxième chapitre sera consacré à l'étude et à la discussion des résultats de la simulation réalisé à base de ce cet alliage.

En fin nous terminons par une conclusion générale déduite à base des résultats de la simulation réalisée au chapitre 2 et des perspectives.

Chapitre I L'état de l'art du puits quantique à base de InGaN/ZnSnN₂/InGaN

I.1 INTRODUCTION

Dans ces dernières années, les scientifiques et chercheurs dans le domaine de la physique des matériaux, n'ont pas cessé leurs recherches et investigations pour donner tout leurs efforts, à profit d'améliorer l'exploitation optimale des semi conducteurs.

Le recours à la réalisation des composés de semi conducteur à partir de deux ; trois ou jusqu'à quatre éléments du tableau périodique de MENDELEIV d'où venait l'appellation : (composés binaires, ternaire ou bien quaternaire) était une véritable révolution dans le domaine des semi conducteur, et l'évolution de la maîtrise des technologies des méthodes de croissances et d'épitaxie qu'a connu ce domaine, dernièrement (première expérience par les laboratoires Bell à la fin des années 1960) a beaucoup contribué à mieux contrôler et ajuster les résultats issus de ces combinaisons pour toute utilisation bien approprié.

Confrontés aux multiples contraintes d'industrialisation, les chercheurs n'ont pas cessé à tenter de réaliser de nouvelles combinaisons d'alliage avec des matériaux qui sont plus abondant sur terre, et ami écologique (non toxique).

A partir de cet état de fait, notre travail va se baser sur l'étude d'une nouvelle structure déjà très promettant : L'étude d'un puits quantique à base de mélange de semi-conducteur composé de ce nouveau alliage ternaire (le ZnSnN₂) pour la réalisation d'un laser de semi-conducteur. Nous allons voir dans ce premier chapitre les propriétés spécifiques de chacun de ces composants ternaires et aussi les caractéristiques physiques et optiques de notre hétéro-structure et aussi bien la plage de l'onde émise de ce puits.

I.2 Présentation succincte de l'InGaN :

I.2.1 Propriété fondamentale de l'InGaN :

Ce matériau est un semi conducteur qui fait partie des composés III-V Nitride c'est-à-dire, composés d'azote et d'un ou plusieurs éléments de la colonne III et V (bore, gallium, aluminium, indium, etc.) du tableau périodique de Mendeleïev qui fait de lui un alliage entre le GaN et le InN.

L'alliage de Nitride de Gallium et d'Indium prouve sa pertinence dans le domaine de l'optique. En jouant sur sa composition en indium, cela permet de moduler les largeurs des bandes interdites. Ce qui est un facteur important dans le meilleur choix des ondes pour émission ou bien réception [6].

Cet alliage est une combinaison entre le nitride d'indium (InN) et le nitride de gallium (GaN), l'étude de chacun de ces binaires, qui sera décrite par la suite, va nous faire comprendre les propriétés spécifiques de l'alliage ternaire InGaN.

I.2.1.1 Les propriétés structurales :

I.2.1.1.1 la structure cristallographique :

Les nitrides **III-V** se cristallisent en forme cubique dite zinc blende ou bien hexagonale dite wurtzite. D'un point de vue cristallin, ces deux structures sont donc relativement proches; la phase hexagonale de direction cristallographique [0001] diffère de la phase cubique de direction [111] uniquement par la séquence d'empilement des plans cristallins (voir Figure I.1). La structure cubique n'est pas stable, on dit qu'elle est métastable [7], ce qui n'est pas le cas pour la structure hexagonale thermodynamiquement plus stable.

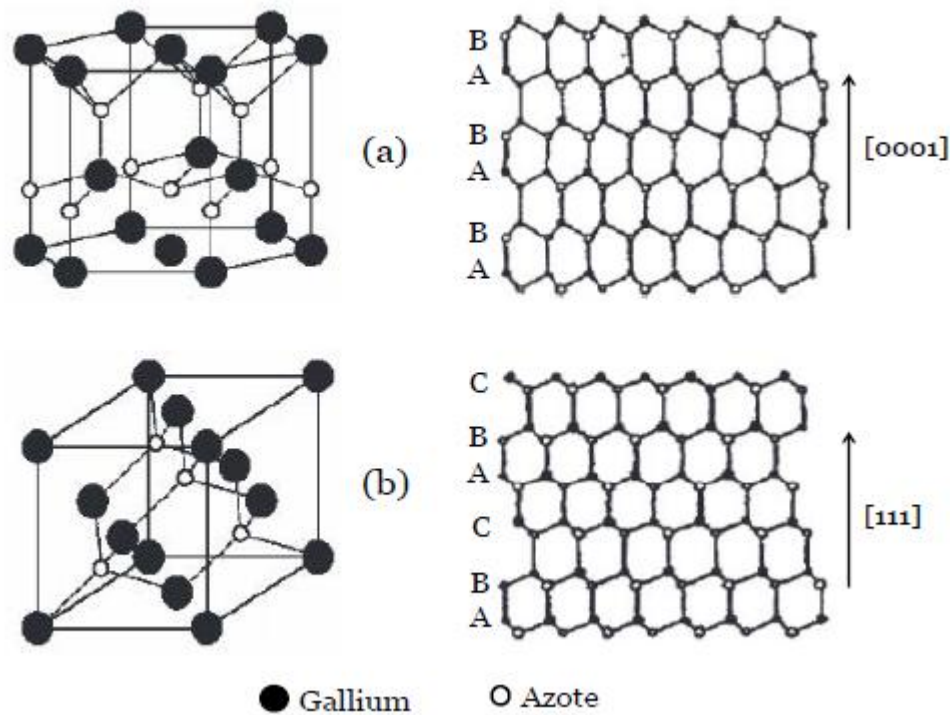


FIGURE I.1 Structures cristallines et les séquences d'empilement des plans cristallins du GaN . (a)structure wurtsite, (b) structure zinc-blende [8].

I.2.1.1.2 La polarisation

La structure de type cubique se trouve non polarisée, par contre la structure de type hexagonale possède des caractéristiques de polarité interne, ces dernières pouvant changer les propriétés électriques du matériau [9].

L'autre forme de polarité est de nature piézoélectrique, due à la déformation de la maille cristalline sous l'effet d'une contrainte (tension ou compression)

I.2.1.2 Les propriétés électriques

I.2.1.2.1 L'expression du gap de l' $\text{In}_x\text{Ga}_{(1-x)}\text{N}$

l' InGaN a une bande d'énergie interdite (gap) directe, déjà un avantage pour ce composé, [10] étant donné que cette particularité permet des transitions inter-bandes des électrons plus faciles, donc une plus grande concentration d'émission. La loi de Vegard modifiée, exprime la relation entre les valeurs des bandes interdites de l' InN et du GaN . Le InN et GaN sont tous deux des matériaux à gap direct. Leurs valeurs de gap sont connues par **0.7 eV** pour l' InN et **3.42 eV** pour le GaN [11].

Le gap d'InGaN est donc donné par une loi de Vegard avec un paramètre de courbure b [11 12] :

$$E_g^{InGaN} = x \cdot E_g^{InN} + (1 - x)E_G^{GaN} - x \cdot b (1 - x) \quad (I.1)$$

I.3 Matériau ZnSnN₂:

I.3.1 Potentialités et Propriétés physiques du ZnSnN 2 :

Actuellement l'évidence de la pertinence des nouveaux composants de la famille des II-IV-N₂ est confirmée ; plusieurs tests expérimentaux aboutissant à des résultats intéressants justifiant leur capacité d'être des alternatives aux composants du groupe III-V : comme pour les alliages du groupe III-V, on peut ajuster, les paramètres des caractéristiques d'un alliage par le contrôle des proportions de dopage de chacun de ces composants [13]. Quayle P. et al [14] ont comparé les énergies de bande interdite entre ces deux familles des nitrures: III-N et II-IV-V. Ils ont rapporté les énergies de bandes interdites par rapport à la constante de réseau du matériau. Ce nouveau groupe de semi-conducteurs Zn-IV-N₂, où IV = Si, Ge ou Sn, n'est composé que d'éléments non toxiques, terrestres, abondants et peu coûteux [15,16].

Comme le rapporte l'étude géologique américaine, les éléments en étain et en zinc sont beaucoup plus abondants que l'indium (environ 100 fois plus) [17,18]. C'est ce que l'on peut voir dans la figure ci-dessous :

I.3.2 Propriété fondamentales :

La famille des semi-conducteurs II-IV-V est liée au nitrure III-V. On les appelle éléments riches en terres; ils se sont composé par le remplacement de deux des atomes du groupe III, par un atome du groupe II et un atome du groupe IV [25].

Récemment, le ZnSnN_2 a été cultivé avec succès, sur des substrats saphir et sur GaN [26 , 27] qui ont introduit le nouveau semi-conducteur à base de nitrure de Zn matériaux pour la gamme visible.

La structure orthorhombique de ZnSnN_2 est très proche de la structure wurtsite des III-Nitrures [28].

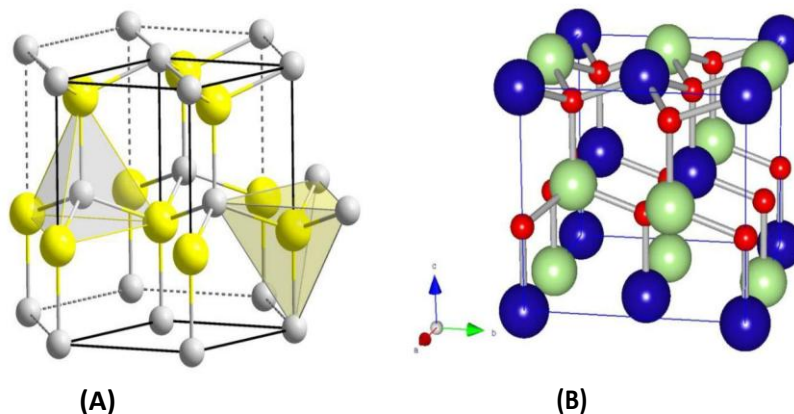
Le réseau constant de ZnSnN_2 est presque identique à InGaN [28] et la bande interdite d'énergie de ZnSnN_2 est de 1,8 eV [29,30].

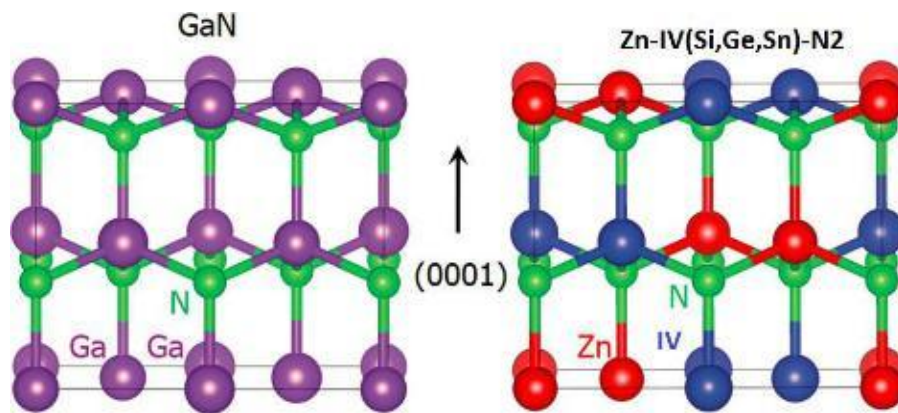
ZnSnN_2 est un matériau semi-conducteur de bande d'énergie interdite directe.

C'est un semi-conducteur très intéressant matériel dans le domaine des dispositifs optoélectroniques.

I.3.3 comparaison entre les structures cristallines de composés GaN et Zn-IV-N 2 :

La figure ci-dessous montre les structures cristallines des composés GaN et Zn-IV-N₂. Dans cette figure, il paraît bien une ressemblance entre la structure wurtsite de GaN et l'orthorhombique du ZnSnN_2 orienté selon la direction (0001).





(c)

Figure 1.3 Les structures cristallines de la GaN et Zn-IV-N 2 composés. (A) est une vue en 3-D de la structure cristalline de GaN: les petites sphères gris représentent des atomes N et les grandes sphères jaunes sont des atomes de Ga [31]. (b) Une vue 3-D de Zn-IV-N 2 structure cristalline: les petites sphères vert sont des atomes de N, les sphères bleu lumineuses appartiennent au groupe des atomes IV (Si, Sn ou Ge) et les sphères rouge foncées sont des atomes de Zn [32] (c) Le wurtzite de GaN et la orthorhombique ZnSnN 2 orienté selon la direction (0001) [33].

I.3.4 structures cristallines ZnSnN_2 :

A vrai dire ; la structure cristalline de ce composant reste toujours difficile à décrire. Plusieurs publication se distinguent différemment ; récemment neuf publications se base sur des calculs et résultats d'expérience révèlent qu'il s'agit d'une structure orthorhombique et sept autres la décrivent comme hexagonale. Aussi un autre article montre qu'il s'agit d'une monoclinique [34].

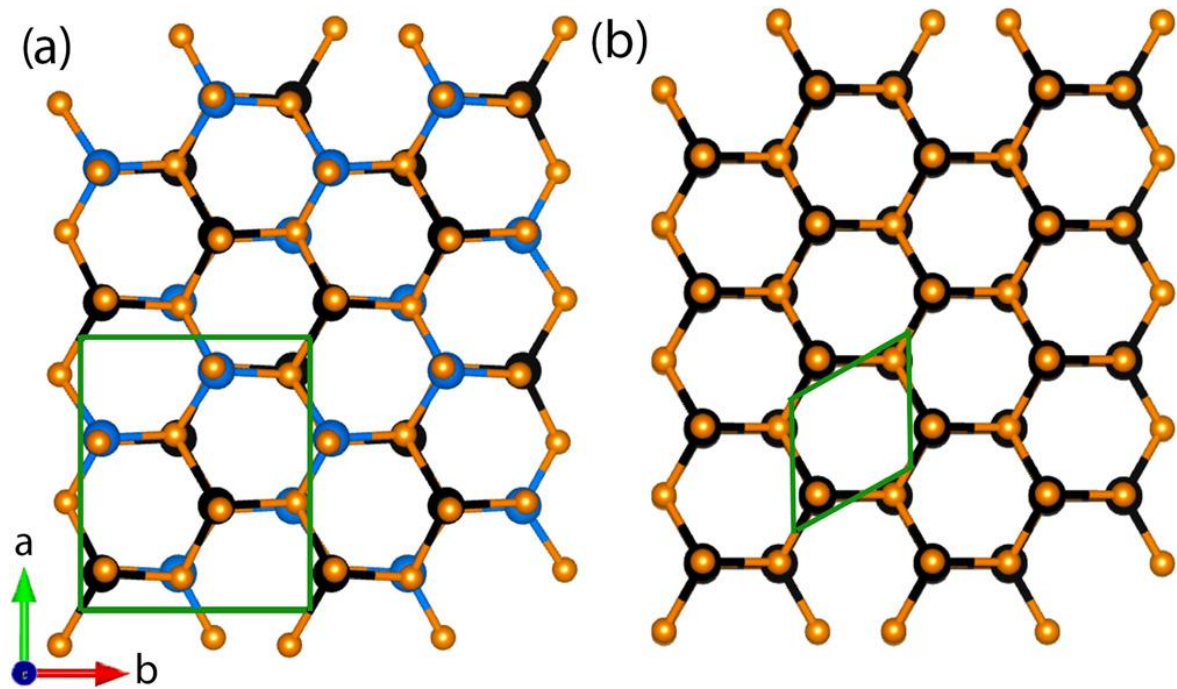


Figure 1.4 : Structure du réseau pour ZnSnN_2 : (a) sous-réseau de cation ordonné orthorhombique; Zn et Sn sont représentés par le bleu et le noir respectivement. (b) sous-réseau de cations désordonnées; Zn et Sn sont aléatoires et représentés par la même couleur noire. À la fois images les petits atomes orange sont de l'azote [35].

1.3.5 Energie de gap

Le ZnSnN_2 est un meilleur candidat pour l'ajustage de la bande interdite par désordre contrôlé du sous-réseau de cations ; le matériau ZnSnN_2 , est un semi-conducteur abondant dans la terre. La bande interdite de ZnSnN_2 a été rapporté dans de multiples études théoriques allant de **1,4 à 2 eV** [36]. Les calculs de Densité fonctionnelle de la théorie (DFT) prédisent que divers degrés de désordre sur le Zn-Sn vont réduire la bande interdite de 2,0 eV à 1,0 eV ; une gamme qui fait du ZnSnN_2 un candidat de choix pour applications photovoltaïques et technologie des diodes électroluminescentes.

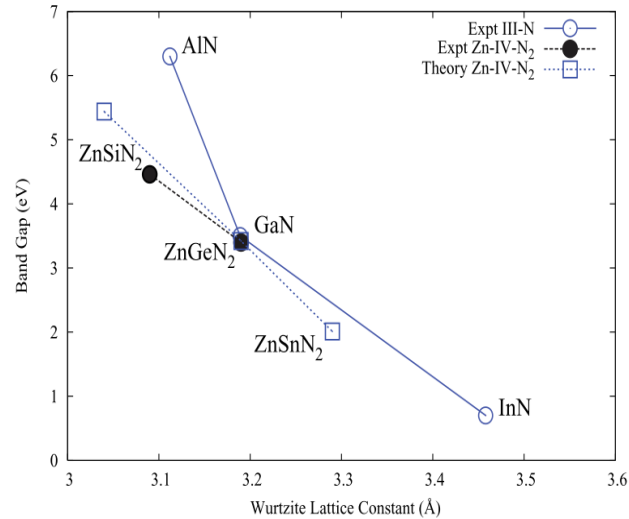


Figure I.5: Comparaison des valeurs expérimentales et théoriques de la bande interdite pour les semi-conducteurs de nitride III-V et II-IV. Figure réimprimé de [41]

I.4 Les hétéro-structures :

I.4.1 Puits quantique : définition :

Les hétéro-structures à base de semi-conducteurs se développent de jour en jour parallèlement à celle des semi-conducteurs massifs. Si bien qu'il est désormais possible de réaliser, par épitaxie sous jets moléculaires, des empilements de couches minces (d'épaisseur typiquement inférieure à 30 nm) de deux semi-conducteurs de bande interdite différente.

La définition du puits quantique implique l'existence de deux types de puits :

- **Les hétéro structures de type I :** dans lesquelles les extrema des bandes de valence et de conduction sont situés dans le même matériau. Les électrons et les trous sont alors confinés dans le même semi-conducteur.

- **Les hétéro structures de type II :** les électrons et les trous sont spatialement séparés. En ce qui concerne les puits quantiques de type I, les porteurs sont confinés dans la direction de croissance, mais leur mouvement dans le plan des couches reste libre. On parle alors de structure bidimensionnelle.

La faible épaisseur du puits entraîne une discrétisation des énergies de confinement des porteurs le long de l'axe de croissance.

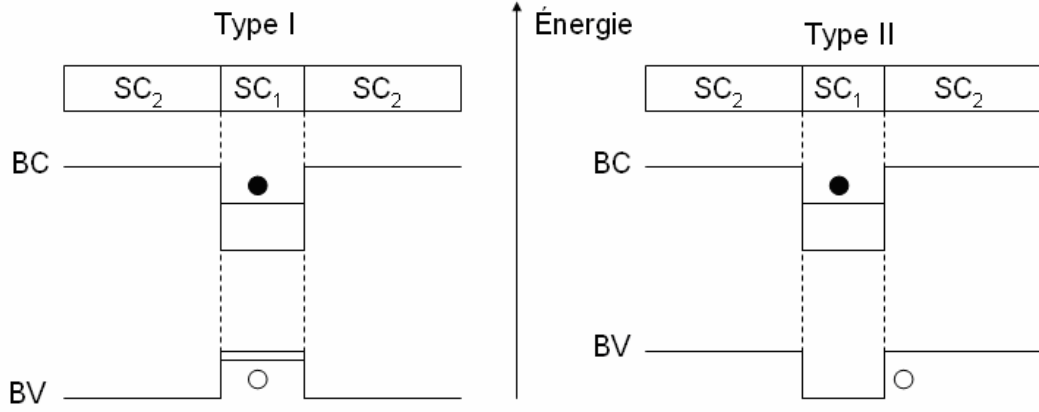


Fig. 1.6 Alignement des bandes de conduction et valence dans une hétéro structure de type I et de type II [38].

1.4.2 Structure du puits quantique

1.4.2.1 Effets du confinement

La longueur d'onde λ_β de Broglie associée à l'électron de conduction, de masse effective m_e^* et d'énergie thermique kT s'écrit [35].

$$\lambda_\beta = \frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2m_e^*kT}} \quad (1.2)$$

Si on restreint le mouvement de l'électron suivant une ou deux directions sur des distances inférieures ou égales à λ_β , les énergies des niveaux sont quantifiées suivant ces directions de confinement et peut s'écrire :

$$E_{N,K} = E_{N,0} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_{e,n}^*} \quad (1.3)$$

Où E_N est l'énergie quantifiée associée au système. Le second terme est l'énergie cinétique due au mouvement libre de l'électron dans les directions sans confinement et k est le vecteur d'onde associé. $\hbar = h/2\pi$.

1.4.2.2 Masse effective :

1.4.2.2.1 Masse effective des électrons :

Dans la bande de conduction un électron est caractérisé par une fonction d'onde qui représente la somme d'ondes de Bloch d'orbitale anti liante. En termes corpusculaires, c'est une particule dans un potentiel cristallin. On représente cette

particule quasi-libre de charge e^- et de masse m_e^* qu'on appelle masse effective de l'électron.

La masse effective des électrons est inversement proportionnelle à la dérivée seconde de la courbe de dispersion de l'énergie dans l'espace k

$$m_e^* = \frac{\hbar^2}{\frac{d^2E}{dk^2}} \quad (1.4)$$

I.4.2.2.2 Masse effective des trous :

La masse effective des trous est définie comme celle des électrons, cependant la bande de valence des semi-conducteurs cubique est composée de deux branches dégénérées en $K=0$. Les énergies des trous sont comptées positivement vers le bas. La bande de plus grande courbure, bande inférieure, correspond à des trous de masse effective inférieure (**bande des trous légers**) et la bande de plus faible courbure, bande supérieure, correspond à celle des trous lourds.

$$m_{hh} = \frac{m_{hh}^*}{y_1 + 2y_2} \quad m_{lh} = \frac{m_{lh}^*}{y_1 - 2y_2} \quad (1.5)$$

y_1 et y_2 : Paramètres de Luttinger

I.4.2.3 La contrainte :

Dans n'importe quel type d'épitaxie ; le paramètre de contrainte est très influent et modifiant même l'énergie potentielle interne générée par les forces coulombiennes entre les atomes, ce qui lui donne l'importance à prendre en considération. Donc, la position résultante de ceux-ci permettra de calculer les changements énergétiques. Deux effets distincts affecteront la position énergétique des bandes : une contrainte hydrostatique, faisant référence à la pression qu'exercerait un fluide sur une masse submergée (force perpendiculaire à la surface) et une contrainte de cisaillement (*shear*) qui fait référence à une force appliquée de manière tangente à la surface.

Dans le cas où les couches épitaxiales sont suffisamment fines, la maille du matériau épitaxie se déforme de manière élastique dans les deux directions parallèle et perpendiculaire à la surface de croissance, et selon que le paramètre de la couche épitaxie a_e est plus petit ou plus grand que celui du substrat a_s , la déformation est soit un allongement "couches en tension", soit un rétrécissement "couche en compression".

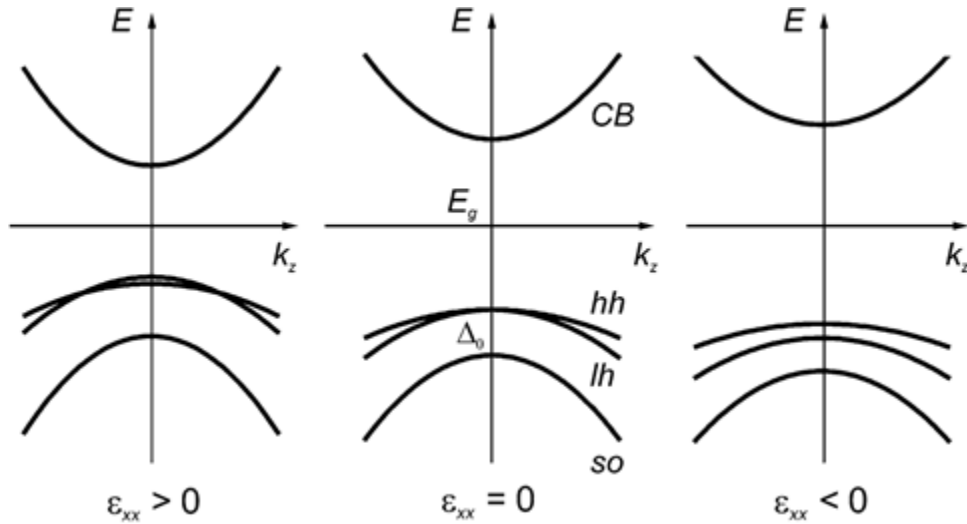


Figure I.7 Effet d'une contrainte en tension, nulle et en compression et en tension sur les bandes énergétiques [39].

Cette différence de maille provoque une déformation de la couche épitaxie, soit en extension, ou en compression. Par des déformations bi-axiales (ϵ_{xx} et ϵ_{yy}) et uni-axiale (ϵ_{zz}).

- **Bi-axiales dans le plan de croissance :**

$$\epsilon_{||} = \epsilon_{xx}(x) = \epsilon_{yy}(x) = \frac{a_s - a_e(x)}{a_e(x)} \quad (1.6)$$

- **Uni-axiales dans la direction de croissance :**

$$\epsilon_{\perp} = \epsilon_{zz}(x) = -2 \frac{c_{12}(x)}{c_{11}(x)} \epsilon_{xx}(x) \quad (1.7)$$

ϵ : la déformation ou le désaccord de maille.

a_s : le paramètre de maille du substrat (InGaN).

a_e : le paramètre de maille de la couche épitaxie.

c_{ij} : les coefficients d'élasticité.

I.4.2.3.1 Effet de la contrainte sur le Gap d'énergie :

Pour la description de l'effet de la contrainte sur la structure de bande nous avons utilisé le modèle de Van et Walle et utilisé le formalisme de Krijin . Les deux composantes parallèle et perpendiculaire du tenseur de la déformation peuvent être définies de la manière suivante :

$$\varepsilon_{\parallel} = \frac{a_{\parallel} - a}{a} \quad (1.8)$$

$$\varepsilon_L = \frac{a_L - a}{a} \quad (1.9)$$

$$\varepsilon_L = -2 \frac{C_{12}}{C_{11}} \varepsilon_{\parallel} \quad (1.10)$$

En absence de contrainte, les bandes de trous lourds et de trous légers sont isotropes, et la bande de trous spin-splittée est située à une énergie Δ_0 en dessous de ces deux bandes.

Le centre de gravité de la bande de valence d'énergie moyenne $E_{V,moy}$ se trouve par conséquent à $\Delta_0/3$ au-dessous du haut de la bande de valence en $k=0$.

$$E_{v\ moy} = \frac{E_{lh} + E_{hh} + \Delta_0}{3} \quad (1.11)$$

E_{hh} : Énergie de la bande de trous lourds.

E_{lh} : Énergie de la bande des trous légers.

Δ : Energie de décalage des bandes des trous spin orbite.

Cet effet influe sur le gap en deux manières :

a) Une composante hydrostatique :

Une composante hydrostatique, qui diminue l'énergie de bande interdite dans le cas d'une augmentation de volume ou qui l'augmente dans le cas contraire.

La composante hydrostatique, liée à la déformation selon l'axe de croissance, provoque un décalage du centre de gravité de la bande de valence ainsi que le centre de gravité de la bande de conduction.

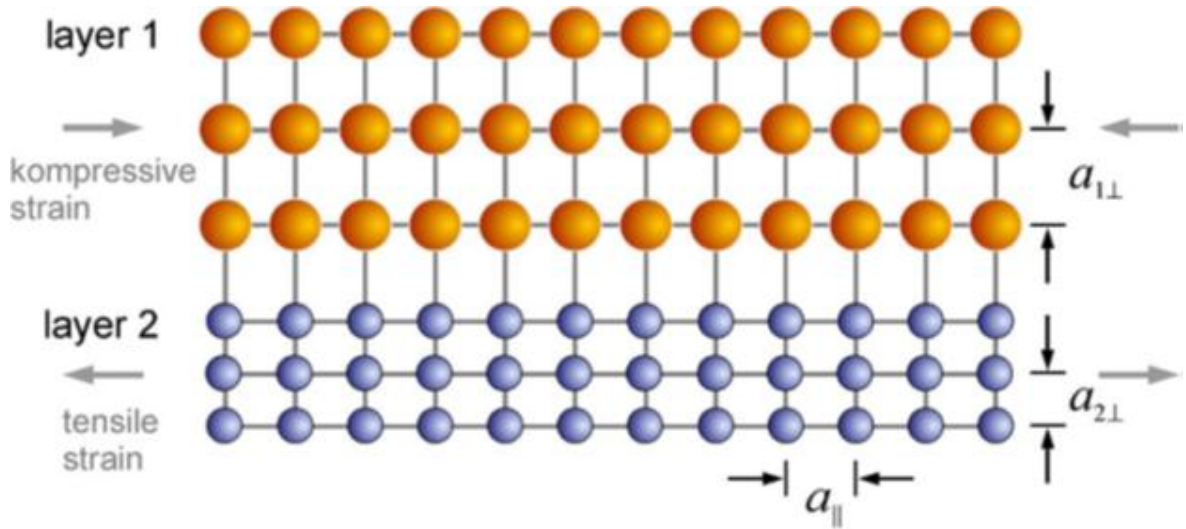


Figure.8 Représentation en deux dimensions du changement de volume d'un matériau contraint où l'axe horizontal est équivalent à celui perpendiculaire à la feuille [40].

Une composante de cisaillement : qui a pour effet de lever la dégénérescence trous lourds, trous légers du haut de la bande de valence.

Pour une couche en compression :

$$E_g^{\text{cot } com} = E_g + \Delta E_c^{\text{hyd}} - \Delta E_{v, \text{moy}}^{\text{hyd}} - \Delta E_{hh}^{\text{cisa}} \quad (1.12)$$

Pour une couche en tension :

$$E_g^{\text{cot } ten} = E_g + \Delta E_c^{\text{hyd}} - \Delta E_{v, \text{moy}}^{\text{hyd}} - \Delta E_{lh}^{\text{cisa}} \quad (1.13)$$

I.4.2.3 Epaisseur critique :

Pour un désaccord de maille donné, l'énergie emmagasinée par la couche augmente, jusqu'à une épaisseur dite "**épaisseur critique**". En dessous de cette épaisseur critique, l'alliage épitaxie est déformé élastiquement pour adapter son paramètre de maille a_e à celui du substrat a_s . Au-delà de cette épaisseur, le matériau se relaxe en générant des dislocations (zones de libération des contraintes) lui permettant de reprendre partiellement ou totalement ses paramètres de maille nominaux [38].

Pour calculer l'épaisseur critique on utilise le modèle proposé par Matthews et Blackeslee qui nous donne l'expression suivante :

$$h_c = \frac{a_e}{\beta\sqrt{2}\pi\epsilon} * \frac{1-0.25\gamma}{1+\gamma} * \ln \left(\frac{h_c}{a_e} \sqrt{2} + 1 \right) \quad (1.14)$$

$$\epsilon = (a_s - a_e) / a_s \quad (1.15)$$

Où

a_e : est le paramètre de maille de la couche relaxée.

a_s : est le paramètre de maille du substrat.

ϵ : est le désaccord paramétrique.

γ : est le coefficient de poisson donné par :

$$\gamma = C_{12} / (C_{11} + C_{12}).$$

Ou C_{ij} sont les coefficients élastiques.

β : est un coefficient qui prend les valeurs selon le type de la structure.

I.4.3 Les états énergétiques dans un puits quantique :

Un puits quantique est donc obtenu en faisant croître une couche d'un matériau semi-conducteur A entre deux couches d'un autre matériau semi-conducteur B. Ce dernier a un gap d'énergie supérieur à celui du matériau A (Figure 1.9). La discontinuité entre les bandes d'énergie dans les deux matériaux crée une barrière de potentiel qui confine les porteurs électrons et trous dans le puits quantique.

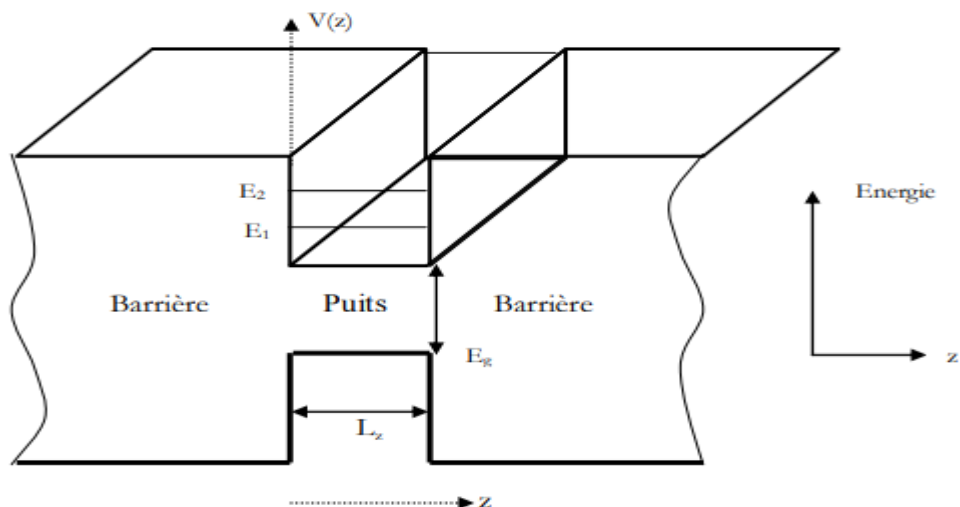


Figure I.9 Présentation d'un puits quantique.

Dans un puits quantique de type I, les porteurs de charge sont confinés dans le même matériau ; ce qui fait : une constitution des niveaux énergétiques différents ; le recours à développer l'équation de Schrödinger nous permettra à définir les valeurs propre d'énergie.

Pour un puits quantiques de potentiel unidimensionnel de largeur L_w , l'équation de Schrödinger indépendante du temps s'écrit :

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2\varphi(x)}{dx^2} + V(x) \varphi(x) = E_n \varphi(x) \quad (1.16)$$

Avec : $\hbar = h/2\pi$; h étant la constante de Planck.

m^* : la masse effective.

$\varphi(x)$: la fonction d'onde.

$V(x)$: l'énergie potentiel.

E_n : l'énergie totale de l'électron.

On peut l'écrire sous la forme :

$$\left[- \left(\frac{\hbar^2}{2m^*} \right) \Delta + v\varphi(x) \right] = E_n \varphi(x) \quad (1.17)$$

$$H^i \varphi = E^i \varphi \quad (1.18)$$

H est l'opérateur hamiltonien.

Δ : le laplacien.

1.4.3.1 Puits quantique de profondeur finie

Un puits quantique ayant une profondeur finie de largeur L_w et un potentiel à l'intérieur égale à zéro, toutes les particules quel que soit leurs énergies sont confinées.

Soit donc à $V(x) = 0$ l'équation de Schrödinger stationnaire à une dimension devient :

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2\varphi(x)}{dx^2} = E_n \varphi(x) \quad (1.19)$$

La solution générale est :

$$\varphi = A e^{ik_1 x} + B e^{-ik_1 x} \quad (1.20)$$

Où A et B sont des constantes.

En mécanique classique en absence d'énergie potentiel $V(x) = 0$ est donc :

$$E = E_T = \frac{p^2}{2m^*} \quad \text{soit alors} \quad E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \quad (1.21)$$

P : quantité de mouvement de la particule.

on trouve les trois régions (I)($x < 0$), (II)($0 < x < L_W$), (I)($x > L_W$) comme suit :

$$\frac{d^2 \varphi_I(x)}{dx^2} - \frac{2m_1^*}{\hbar^2} (V_0 - E_n) \varphi_I(x) = 0 \quad (1.22)$$

$$\frac{d^2 \varphi_{II}(x)}{dx^2} - \frac{2m_2^*}{\hbar^2} E_n \varphi_{II}(x) = 0 \quad (1.23)$$

$$\frac{d^2 \varphi_I(x)}{dx^2} - \frac{2m_1^*}{\hbar^2} (V_0 - E_n) \varphi_I(x) = 0 \quad (1.24)$$

Donc la solution de l'équation après la condition limite de chaque région s'écrit :

Region I:

$$\varphi_I(x) = A e^{k_1 x} + B e^{-k_1 x} \quad (1.25)$$

Sachant quand la condition aux limites $\varphi_I(x : \rightarrow -\infty) = 0$ entraîne $B = 0$, la fonction d'onde s'écrit :

$$\varphi_I(x) = A e^{k_1 x} \quad \text{avec} \quad k_1 = \frac{\sqrt{2m_b^* (V_0 - E_n)}}{\hbar} \quad (1.26)$$

Région II :

$$\varphi_{II}(x) = B \sin(k_2 x + \varphi) \quad \text{avec} \quad k_2 = \frac{\sqrt{2m_w^* E_n}}{\hbar} \quad (1.27)$$

$$\text{Region I:} \quad \varphi_I(x) = C' e^{k_1 x} + C e^{-k_1 x} \quad (1.30)$$

Compte tenu de la condition $\varphi(z : \rightarrow +\infty) = 0$ entraîne $C' = 0$, la fonction d'onde s'écrit :

$$\varphi_1(x) = C e^{-k_1 x} \quad (1.31)$$

En utilisant la continuité des fonctions d'ondes à l'interface puits barrière en $x = 0$, on peut déterminer les constantes.

Suite à ceci , les conditions aux limites sont alors :

$$\varphi_1(0) = \varphi_{11}(0) \rightarrow A = B \sin \varphi \quad (1.32)$$

La continuité des probabilités de courant à l'interface puits –barrière en $x = 0$.

La fonction d'onde est dérivable :

$$\frac{1}{m_b^*} \varphi_1(0) = \frac{1}{m_w^*} \varphi_{11}(0) \rightarrow A \frac{k_1}{m_b^*} = B \frac{k_2}{m_w^*} \cos \varphi \quad (1.33)$$

$$\varphi_{11}(L_w) = \varphi_1(L_w) \rightarrow B \sin (k_2 L_w + \varphi) = C e^{-k_1 L_w} \quad (1.34)$$

$$\frac{1}{m_w^*} \varphi_{11}(L_w) = \frac{1}{m_b^*} \varphi_1(0) \rightarrow B \frac{k_2}{m_w^*} \cos(k_2 L_w + \varphi) = - C \frac{k_1}{m_b^*} C e^{-k_1 L_w} \quad (1.35)$$

En divisant les équations 1.23 sur 1.24 et 1.25 sur 1.26 on obtient respectivement :

$$\tan \varphi = \frac{k_2 m_b^*}{k_1 m_w^*} \quad (1.36)$$

$$\tan(k_2 L_w + \varphi) = - \frac{k_2 m_b^*}{k_1 m_w^*} \quad (1.37)$$

Puisque :

$$\sin^2 \alpha = \frac{1}{\left(1 + \frac{1}{\tan^2 \alpha}\right)} \quad (1.38)$$

L'expression 1.33 donne :

$$\sin \varphi = \frac{\frac{k_2}{m_2}}{\sqrt{\left(\frac{k_2^2}{m_2^2} + \frac{k_1^2}{m_1^2}\right)}} \quad (1.39)$$

D'autre part la relation : $\tan \varphi = - \tan (k_2 L_w + \varphi)$ d'où on tire $\varphi = -(k_2 L_w + \varphi) + n\pi$

n est nombre entier :

$$k_2 L_w = n\pi - 2 \varphi \quad (1.40)$$

Soit donc :

$$\frac{\sqrt{2m_2^* E_n}}{\hbar} = n\pi - 2\arcsin \sqrt{\frac{E_n}{\frac{V_0 m_2^*}{m_1^*} + E_n \left(1 - \frac{m_2^*}{m_1^*}\right)}} \quad (1.41)$$

On remarque ici que si $E \ll V_0$, on a $q \gg K$; et les conditions de quantifications pour les deux cas symétrique et antisymétrique respectivement :

$$\tan \frac{KL}{2} \rightarrow \infty \quad \text{donc} \quad \cos \frac{KL}{2} \rightarrow 0 \quad \text{soit} \quad K_n = \frac{(2n+1)\pi}{L}, \quad n > 0 \quad (1.42)$$

$$\text{Cotg} \frac{KL}{2} \rightarrow \infty \quad \text{donc} \quad \sin \frac{KL}{2} \rightarrow 0 \quad \text{soit} \quad K_n = \frac{2n\pi}{L}, \quad n > 0 \quad (1.43)$$

Deux conditions peuvent être réunies tel que :

$$K_n = \frac{n\pi}{L}, \quad n > 0 \quad \text{d'où} \quad E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} n^2 = \frac{\hbar^2}{8mL^2} n^2 \quad (1.44)$$

On retrouve les mêmes niveaux d'énergies que pour les puits infini.

1.4.3 hétéro-structure InGaN/ZnSnN2

1.4.3.1 croissances de l'hétéro-structure InGaN/ZnSnN2

$\text{In}_x\text{Ga}_{(1-x)}\text{N}$ est capable d'émettre dans toute la plage spectrale visible, du bleu au rouge, en raison de l'énergie de la bande interdite de $\text{In}_x\text{Ga}_{(1-x)}\text{N}$ variant de 0,7 eV à 3,43 eV, en fonction de la teneur en indium (In).

Le réseau constant de ZnSnN2 est presque identique à InGaN et La bande interdite d'énergie de ZnSnN2 est de **1,8 eV**. ZnSnN2 est un matériau semi-conducteur avec une bande interdite directe. C'est un semi-conducteur très intéressant dans le domaine des dispositifs optoélectroniques.

Chapitre II

Résultat et discussion de la structure InGaN/ZnSnN₂/InGaN

II.1 Introduction

Dans ce chapitre nous allons présenter les résultats de simulation sur la structure ternaire a puits quantique ZnSnN₂/InGaN. Cette simulation qui va nous permettre à présenter et discuter les résultats obtenus est effectué à l'aide du logiciel MATLAB.

Des simulations ont été faites afin d'étudier l'effet de la contrainte crée entre le substrat et la couche active sur les différents paramètres comme le gap, l'épaisseur critique, l'énergie de confinement des électrons et trous lourds, l'énergie de transition et la longueur d'onde d'émission de cette structure.

II.1.1 Le paramètre de maille :

La figure II.1 décrit l'évolution du paramètre de maille en fonction de la concentration d'indium. On remarque bien qu'une croissance de la valeur de la concentration d'indium x implique une augmentation proportionnelle et considérable du paramètre de maille a_{ZnSnN_2} . A titre d'exemple, pour une valeur de $x = 0.05$ on tire $a = 3.198 \text{ \AA}$. En faisant varier la concentration de 0.05 à 0.45 cela donne un paramètre de maille atteignant la valeur de $a = 3.342 \text{ \AA}$, ceci veut dire qu'on a une augmentation de :

$$\Delta_{\text{In}_x\text{Ga}_{(1-x)}\text{N}} = a_{\text{In}(0.45)} - a_{\text{In}(0.05)} = 3.342 \text{ \AA} - 3.198 \text{ \AA} = 0.144 \text{ \AA}.$$

C'est une valeur assez faible, ce qui nous fait constater une faible influence de la concentration d'indium sur le paramètre de maille a (fig. II.1).

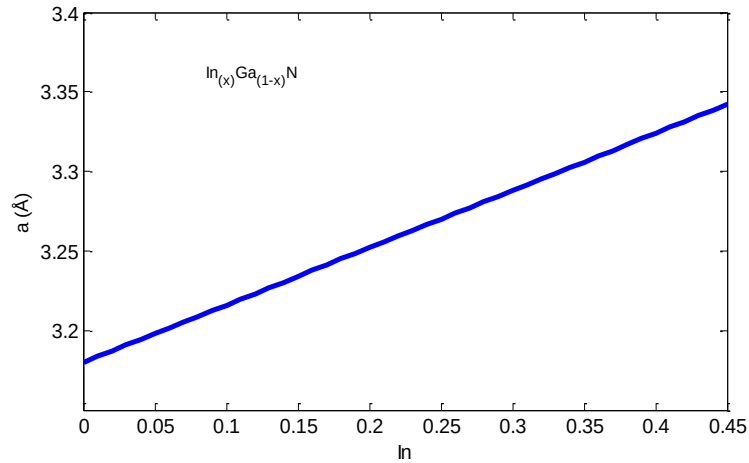


Figure II.1 Variation de paramètre de maille en fonction de la concentration x

II.1.2 La contrainte

La figure II.2 représente l'évolution de la déformation ϵ en fonction de la concentration d'indium x. on remarque qu'une augmentation sur la concentration d'indium provoque aussi une augmentation de la déformation sur l'interface entre les deux couche actives et substrat. Ce dernier croit avec l'augmentation de la concentration d'indium. Par exemple $x=10\%$ on obtient $\epsilon=1,1\%$, et si encore on augmente x jusqu'à la valeur de 45%, la déformation atteindra $\epsilon = 5,1\%$; c'est-à-dire quand on a une variation de la déformation $\Delta\epsilon = \epsilon_{(0.45)} - \epsilon_{(0.10)} = 5.1\% - 1.1\% = 4,1\%$.

Donc la variation de déformation est importante : l'augmentation de la déformation de l'instabilité de matériaux augmente rapidement fig II.2.

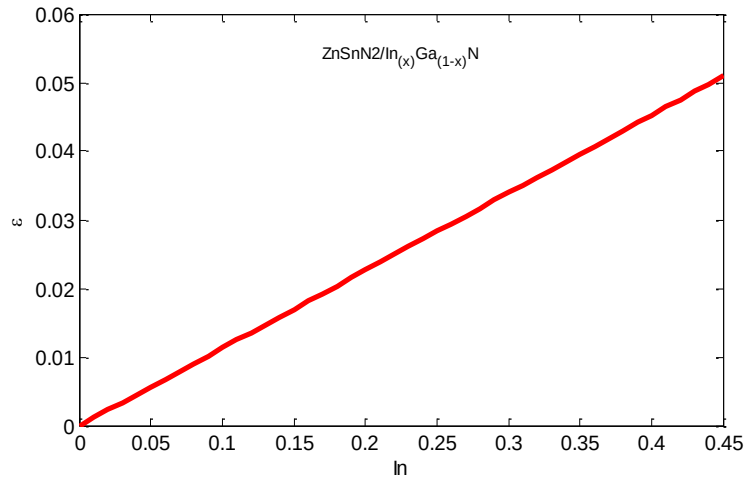


Figure II.2 variation de la déformation en fonction de la concentration x .

II.1.3 L'épaisseur critique

La figure (II.3) décrit la variation de l'épaisseur critique de la structure $\text{ZnSnN}_2/\text{InGaN}$ en fonction de la concentration de l'Indium. Pour une concentration d'indium $x=10\%$ on obtiendra une valeur de $h_c=151,2 \text{ \AA}$ aussi pour une valeur de $x=40 \%$ on tire $h_c= 23,42 \text{ \AA}$.

On déduit de ceci, qu'une variation sur la concentration vers une croissance engendrera une diminution de l'épaisseur critique.

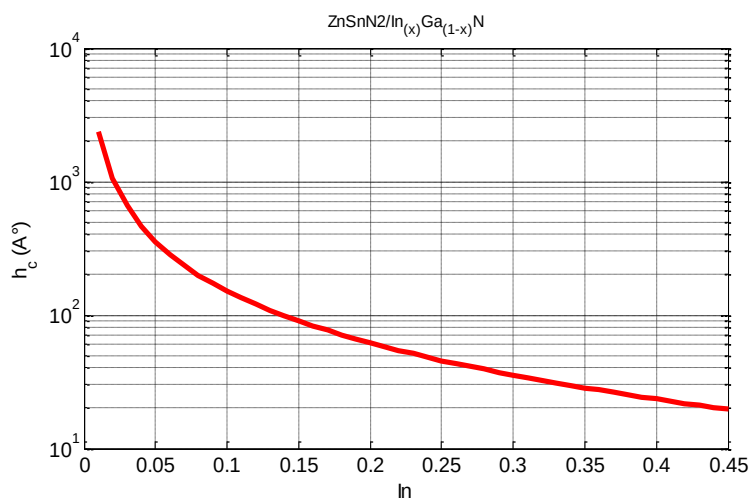


Figure II.3 Variation de l'épaisseur critique en fonction de la concentration x

II.1.4 L'énergie de la bande interdite :

La Figure II.4, illustre la variation de l'énergie de la bande interdite (gap) de la structure ZnSnN₂ contraint sur un substrat de In_(1-x)Ga_xN Avec l'incorporation de concentrations d'Indium dans l'alliage, l'énergie de la bande interdite décroît. Par exemple pour une concentration $x= 0.05$, on aura une valeur d'énergie de gap des trous lourds égale à $E_g = 1.48$ eV ; plus loin pour une valeur de $x= 0.45$ cela implique $E_g=1,47$ eV.

On constate bien une variation en diminution :

$$\Delta E_g = E_{g(0.45)} - E_{g(0.05)} = 1,47 \text{ eV} - 1.48 \text{ eV} = - 0,01 \text{ eV}$$

Remarquons que cette diminution est légère.

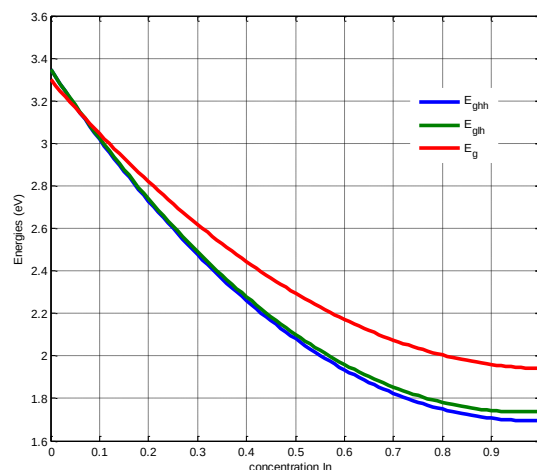


Figure II.4 évolution de l'énergie de la bande interdite en fonction de la concentration x.

II.1.5 Energie de confinement des e⁻ et trous lourds:

Les figures (II.5 ; II.6 ; II.7) représentent l'évolution de l'énergie de confinement des électrons en fonction de l'épaisseur de puits quantique pour différent de concentration d'indium x .On remarque que que l'énergie de quantifications diminue avec l'augmentation de la largeur de la zone active. Aussi on constate l'augmentation de la concentration d'indium augmente le nombre de quantification.

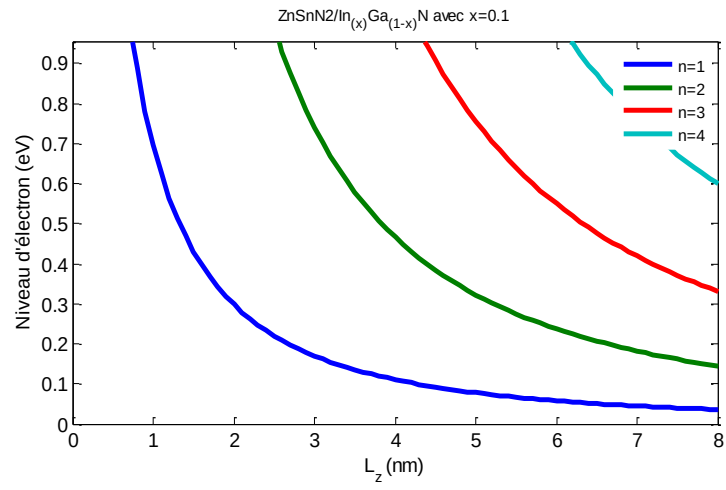


Figure II.5 variations de l'énergie de confinement des électrons en fonction de l'épaisseur de puits quantique pour $x=10\%$

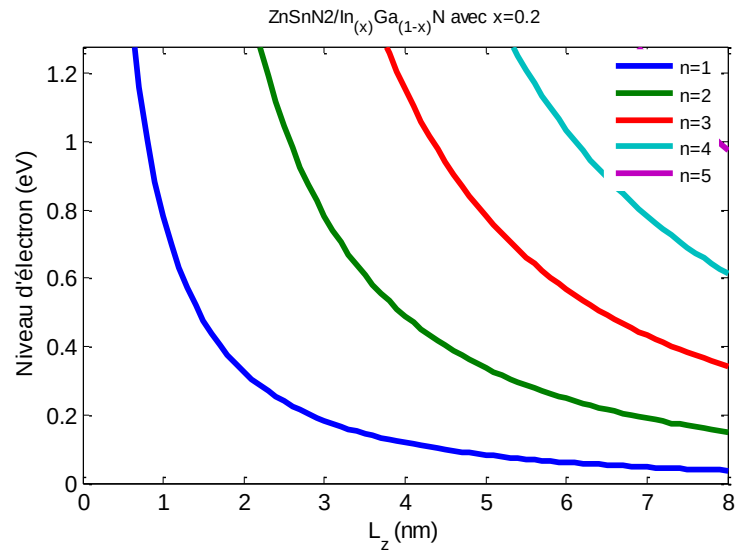


Figure II.6 variations de l'énergie de confinement des électrons en fonction de l'épaisseur de puits quantique pour $x=20\%$

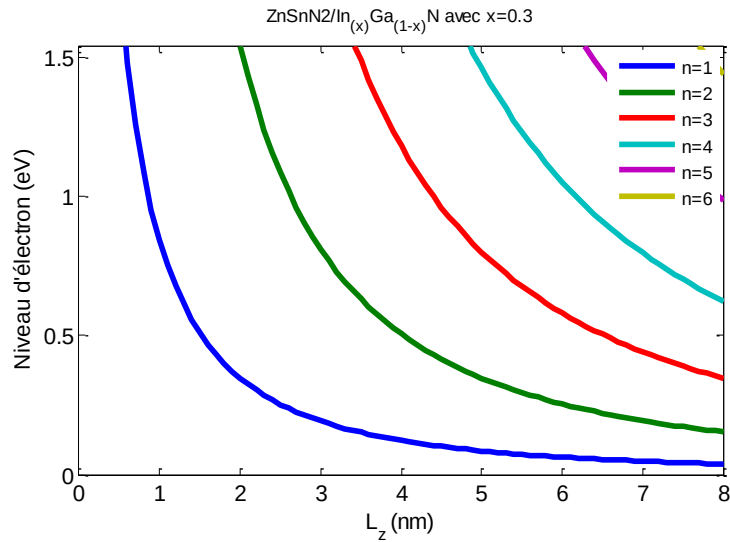


Figure II.7 variations de l'énergie de confinement des électrons en fonction de l'épaisseur de puits quantique pour x=30%

Les figures (II.8; II.9 II.10) représentent l'évolution de l'énergie de confinement des trous lourds en fonction de l'épaisseur de puits quantique pour différents de concentration d'indium x .On remarque que l'énergie de quantifications diminue avec l'augmentation de la largeur de la zone active. Aussi on constate l'augmentation de la concentration d'indium augmente le nombre de quantification.

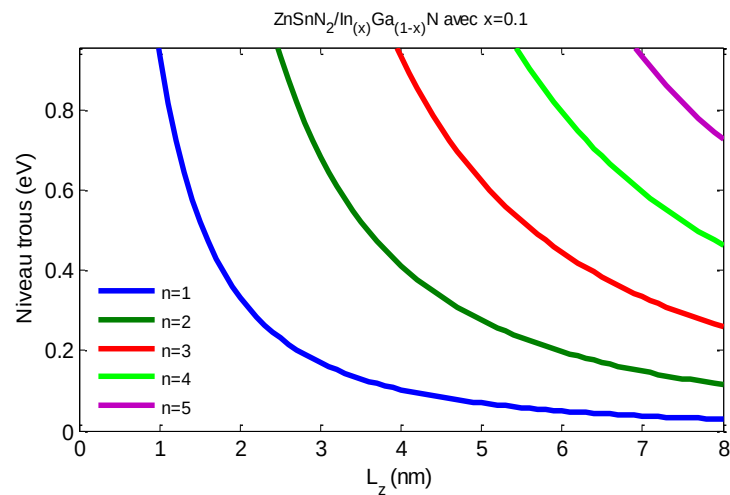


Figure II.8 variation de l'énergie de confinement des trous lourds en fonction de l'épaisseur de puits quantique pour x=10%

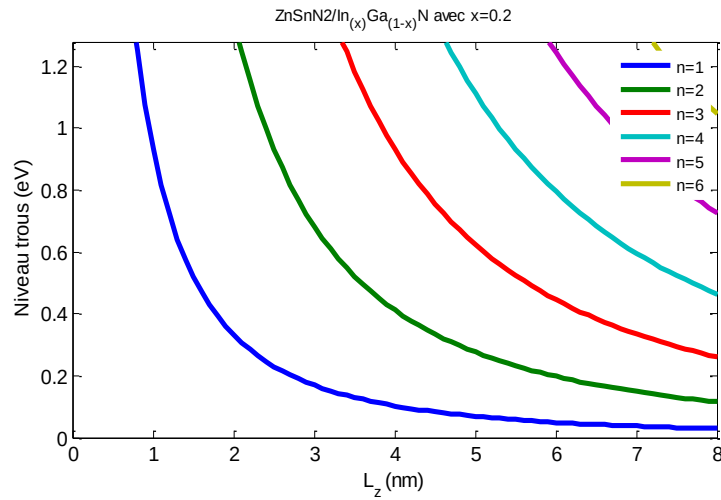


Figure II.9 variation de l'énergie de confinement des trous lourds en fonction de l'épaisseur de puits quantique pour x=20%

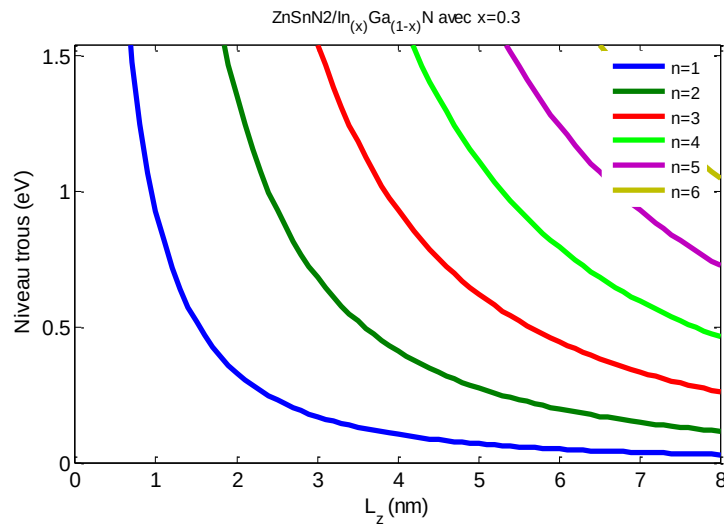


Figure II.10 variation de l'énergie de confinement des trous lourds en fonction de l'épaisseur de puits quantique pour x=20%

II.1.6 L'énergie de transition:

Les figures (II.11; II.12 ; II.13) illustrent la variation de l'énergie transitions en fonction de la largeur du puits quantique pour les trous lourds.

On observe qu'avec l'élargissement de la largeur L_w du puits, on remarque une diminution des énergies de transition accompagné d'une augmentation du nombre des

transitions possible entre les bandes de conduction et les bandes des trous lourds tout en augmentant la concentration de l'Indium.

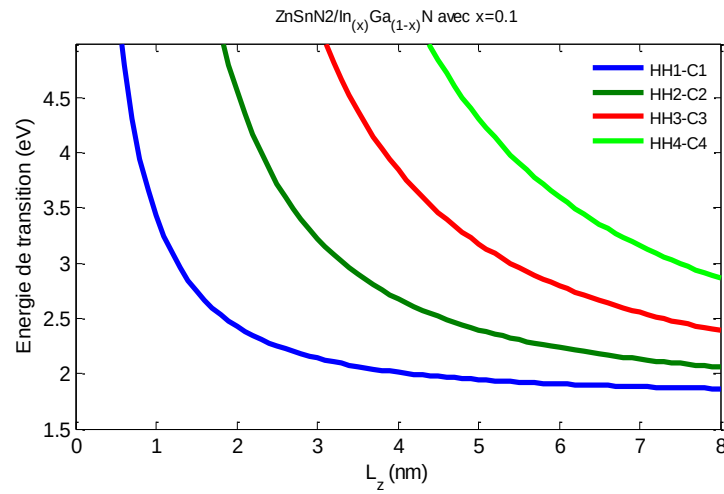


Figure II.11 variation de l'énergie de transition des trous lourds en fonction de l'épaisseur de puits quantique pour $x=10\%$

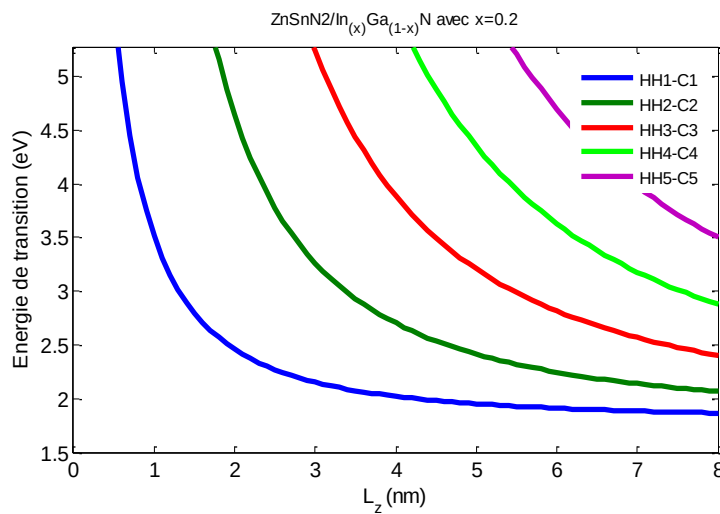


Figure II.12 variation de l'énergie de transition des trous lourds en fonction de l'épaisseur de puits quantique pour $x=20\%$

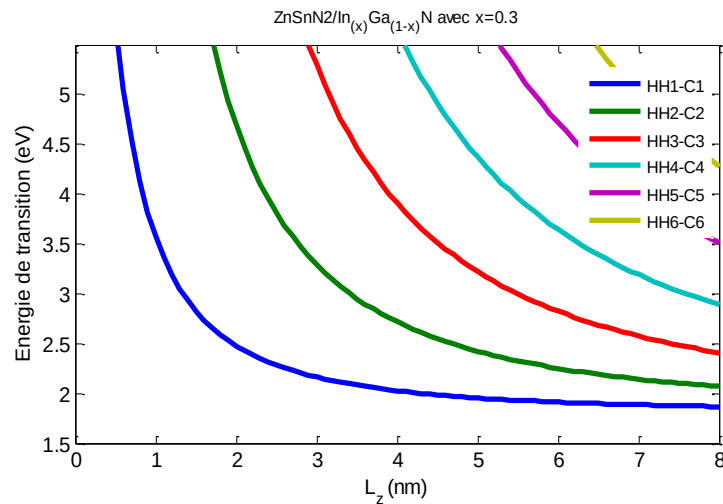


Figure II.13 variation de l'énergie de transition des trous lourds en fonction de l'épaisseur de puits quantique pour x=30%

II.1.7 Longueurs d'ondes d'émission:

Les figures (II.14; II.15 ; II.16), montrent respectivement la variation des longueurs d'onde d'émissions relatives aux transitions bande de conduction bande trous lourds. La longueur d'onde augmente avec l'élargissement de puits quantique.

Il a été présenté sur les figures (II.11; II.12 ; II.13) que l'élargissement de puits réduit l'énergie de transition et comme $\lambda e = h c / E_T$ alors ; plus l'énergie de transition E_T est petite plus la longueur d'onde d'émission λe devient plus grande. On atteint jusqu'à 0.6650 μm avec des In= 30 %. On peut jouer sur la largeur des zones actives et la concentration d'indium x pour obtenir les longueurs d onde d'émission plus optimal pour notre cas.

Ce tableau nous décrit les valeurs maximales acquises pour des largeurs de zone actives différentes :

Concentration x	0.10	0.20	0.30
$L_W = 5 \text{ nm}$	$\lambda = 0.6369 \mu m$	$\lambda = 0.6355 \mu m$	$\lambda = 0.6346 \mu m$
$L_W = 2 \text{ nm}$	$\lambda = 0.5153 \mu m$	$\lambda = 0.5045 \mu m$	$\lambda = 0.5008 \mu m$

Tableau II 1 : longueurs d'onde acquises à différentes largeurs de zone active

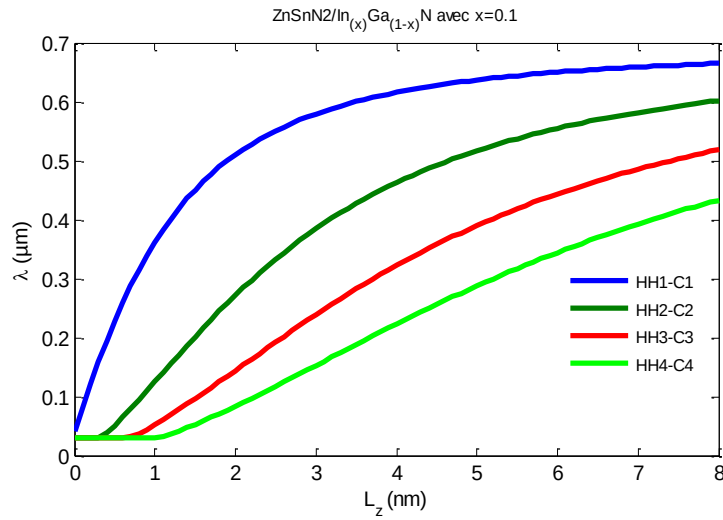


Figure II.14 variation de la longueur d'onde en fonction de l'épaisseur de puits quantique pour $x=10\%$

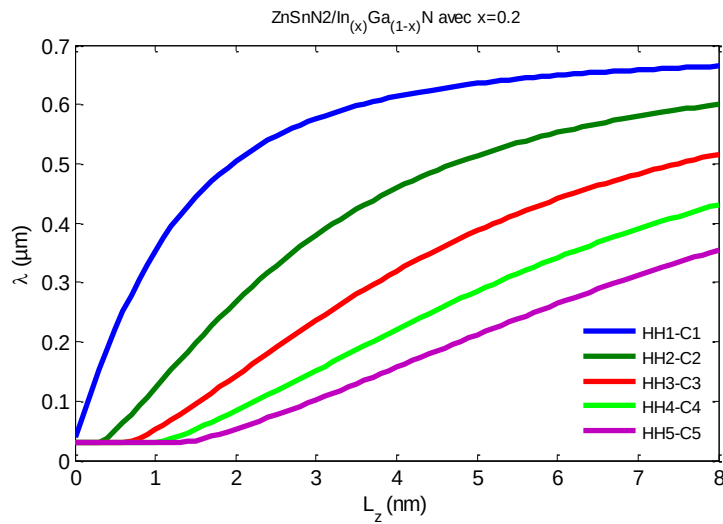


Figure II.15 variation de la longueur d'onde en fonction de l'épaisseur de puits quantique pour $x=20\%$

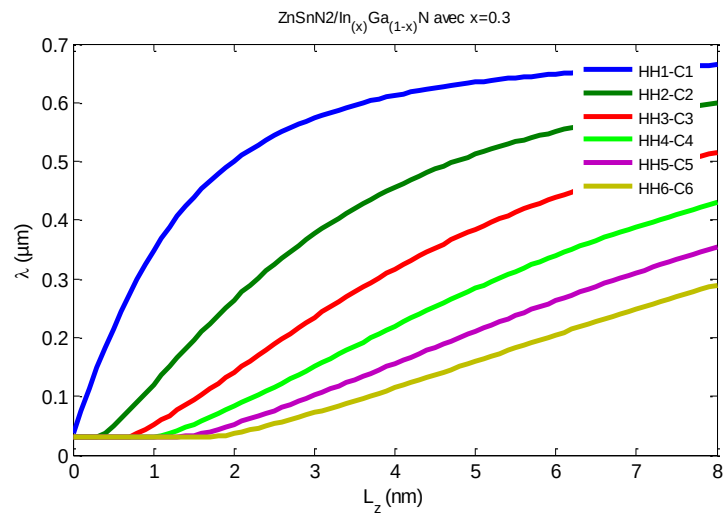


Figure II.16 variation de la longueur d'onde en fonction de l'épaisseur de puits quantique pour $x=30\%$

Conclusion générale

Dans le cadre de ce travail nous nous sommes concentrés sur la structure $\text{ZnSnN}_2/\text{InGaN}$ à puits quantique contraint, appliqué aux systèmes d'optoélectronique.

En premier lieu nous avons abordé des généralités sur semi-conducteur III-nitrures, leurs avantages et inconvénients, leurs applications, et aussi les caractéristiques physiques et électroniques du InGaN , on a mis la lumière aussi sur une nouvelle orientation des chercheurs concrétisé par la mise en œuvre des recherches et études sur un nouveau matériau de caractéristiques semblable à celles du InGaN ; s'agissant du ZnSnN_2 . D'où nous avons évoqué ses avantages beaucoup promettant ; on a pu comprendre ces caractéristiques physiques et électroniques, par la suite on a penché sur l'étude de la nouvelle hétéro-structures à composant ternaire : $\text{ZnSnN}_2/\text{InGaN}$.

La deuxième partie a été consacrée à l'étude des différents modèles mathématiques appliqués à notre structure. Nous avons utilisé MATLAB pour les simuler.

La dernière partie traite les interprétations des simulations MATLAB, pour les paramètres de notre structure, à savoir le paramètre de maille, celui de la contrainte, l'épaisseur critique, l'énergie de gap et celle du confinement des trous lourds et électrons et en dernier la longueur d'onde en fonction de la concentration de l'Indium, et ce pour différentes caractéristiques. Notre structure donne une longueur d'onde qui peut atteindre les $0.6650 \mu\text{m}$ pour des concentrations qui tend vers 30 %.

Nous recommandons de continuer les études sur la réalisation de laser à partir de cette structures ; dont l'optoélectronique bénéficiera de ses avantages remarquables.

Bibliographie

- [1] Henry Mathieu, Physique des semi-conducteurs et des composants électroniques, Masson, 1987.
- [2]. Lamis LOUAHADJ Développement de l'épitanie par jet moléculaire d'oxydes fonctionnels sur silicium ;these doctorat France 2014
- [3] Bertrand Demotes-Mainard de la conférence 'De la chimie au radar du Rafale ', France.
- [4] Korlam, Sudheer : Deposition and Characterization of Post-growth annealed ZnSnN₂ thin films. Series: UCLA Electronic Theses and Dissertations 2017.
- [5] M. Pandey, K. Kuhar, K.W. Jacobsen, II–IV–V₂ and III–III–V₂ polytypes as lightabsorbers for single junction and tandem photovoltaic devices, J. Phys. Chem. C121 (2017).
- [6] Nicolas fressengeas , Optical Materials Express Vol. 4,(2014).
- [7] S. Pereira, M. R. Correia, E. Pereira, K. P. O'Donnell, E. Alves, A. D. Sequeira, N. Franco, I. M. Watson, and C. J. Deatcher. Strain and composition distributions in wurtzite InGa_N/Ga_N layers extracted from x-ray reciprocal spacemapping. *Applied physics letters*, 80(21) :3913–3915, 2002. 19, 123
- [8] Feng Shi. Ga_N Nanowires Fabricated by Magnetron Sputtering Deposition. 2011.
- [9] O. Ambacher, J. Smart, J. R. Shealy, N. G. Weimann, K. Chu, M. Murphy, W. J. Schaff, L. F. Eastman, R. Dimitrov, L. Wittmer, and others. Two-dimensional electron gases induced by spontaneous and piezoelectric polarization charges in N- and Ga-face AlGa_N/Ga_N heterostructures. *Journal of applied physics*, 85(6) :3222–3233, 1999.20.
- [10] Junqiao Wu. When group-III nitrides go infrared : New properties and perspectives. *Journal of Applied Physics*, 106(1) :5, 2009. 25, 32
- [11] GF Brown, JW Ager III, W Walukiewicz, and J Wu. Finite element simulations of compositionally graded InGa_N solar cells. *Solar Energy Materials and Solar Cells*, 94(3) :478–483, 2010. 00089. 25, 26, 49, 50, 79
- [12] G. Franssen, I. Gorczyca, T. Suski, A. Kamińska, J. Pereiro, E. Munoz, E. Iliopoulos, A. Georgakilas, S. B. Che, Y. Ishitani, and others. Bowing of the band gap

pressure coefficient in InGaN alloys. *Journal of Applied Physics*, 103(3) :033514, 2008.
26, 52

[13] G. F. Yang *et al.*, « InGaN/GaN multiple quantum wells on selectively grown GaN microfacets and the applications for phosphor-free white light-emitting diodes », *Rev. Phys.*, vol. 1, p. 101- 119, nov. 2016.

[14] P. C. Quayle, K. He, J. Shan, et K. Kash, « Synthesis, lattice structure, and band gap of ZnSnN₂ », *MRS Commun.*, vol. 3, no 03, p. 135–138, 2013.

[15] http://en.wikipedia.org/wiki/Gallium_nitride.

[16] A. Boochun, W. R. Lambrecht, « première étude principes de l'élasticité, la piézoélectricité, et modes de vibration dans LiGaO₂ par rapport à ZnO et GaN », *Phys. Rev. B.*, 81, 235214, 2010.

[17] SY Chen, P. Narang, H. A. Atwater, L. W. Wang, « stabilité de phase et de Physique des défauts d'un Ternaires ZnSnN₂ Semiconductor: Principes Insights », *Adv. Mater.*, 26, 311-315, 2014.

[18] A. Punya, W. R. Lambrecht, et M. van Schilfgaarde: structure de bande de quasiparticules les composés Zn-IV-N₂. *Phys. Rev. B* 84, 165204 (2011).

[19] Determination of the basic optical parameters of ZnSnN₂ Fuling Deng,^{1,2} Hongtao Cao,² Lingyan Liang,^{2,*} Jun Li,² Junhua Gao,² Hongliang Zhang,² Ruifeng Qin,² and Caichi Liu^{1,3} ; *OPTICS LETTERS* / Vol. 40, No. 7 / April 1, 2015.

[20] Korlam, Sudheer , Deposition and Characterization of Post-growth annealed ZnSnN₂ thin films, UCLA Electronic Theses and Dissertations 2017.

[21] T. R. Paudel et W. R. L. Lambrecht, « First-principles study of phonons and related ground-state properties and spectra in Zn-IV-N₂ compounds », *Phys. Rev. B*, vol. 78, no 11, p. 115204, sept. 2008.

[22] F. Bernardini, V. Fiorentini, et D. Vanderbilt, *Spontaneous polarization and piezoelectric constants of III-V nitrides*, *Phys. Rev. B* **56**, R10024-7 (1997).

[23] N. Feldberg *et al.*, « ZnSnN₂: A new earth-abundant element semiconductor for solar cells », in *2012 38th IEEE Photovoltaic Specialists Conference (PVSC)*, 2012.

[24] A. Punya, T. R. Paudel et W. R. Lambrecht, *Physica Status Solidi C*, 2011, 8, 2492-2499.

[25] T. D. Veal *et al.*, « Band Gap Dependence on Cation Disorder in ZnSnN₂ Solar Absorber », *Adv. Energy Mater.*, vol. 5, no 24, p. n/a-n/a, déc. 2015.

[26] Atchara Punya, T. R. Paudel, W. R. L. Lambrecht, Electronic and lattice dynamical properties of II-IV-N₂ semiconductors, *Phys. Status Solidi C* 8 (2011).

- [27] Aaron D. Martinez, Angela N. Fioretti, Eric S. Toberer, Adele C. Tamboli, Synthesis, structure, and optoelectronic properties of II–IV–V₂ materials, *J. Mater. Chem. A* 5(2017).
- [28] N. Angela, Andriy Fioretti, Helio Zakutayev, Celeste Moutinho, John D. Melamed, Andrew G. Perkins, Mowafak Norman, Eric S. Al-Jassim, Toberer, C. Tamboli Adele, Combinatorial insights into doping control and transport properties of zinc tin nitride, *J. Mater. Chem. C* 3 (2015).
- [29] Lise Lahourcade, Naomi C. Coronel, Kris T. Delaney, Sujeet K. Shukla, Nicola A. Spaldin, A. Atwater Harry, Structural and optoelectronic characterization of RF sputtered ZnSnN₂, *Adv. Mater.* 25 (2013).
- [30] Atchara Punya, Walter R.L. Lambrecht, Band offsets between ZnGeN₂, GaN, ZnO, and ZnSnN₂ and their potential impact for solar cells, *Phys. Rev. B* 88 (2013) 075302.
- [31] Paul C. Quayle, Keliang He, Jie Shan, Kathleen Kash, Synthesis, lattice structure, and band gap of ZnSnN₂, *MRS Commun.* 3 (2013) 135–138.
- [32] http://en.wikipedia.org/wiki/Gallium_nitride.
- [33] A. Boochun, W. R. Lambrecht, « première étude principes de l'élasticité, la piézoélectricité, et modes de vibration dans LiGaO₂ par rapport à ZnO et GaN », *Phys. Rev. B.*, 81, 235214, 2010.
- [34] SY Chen, P. Narang, H. A. Atwater, L. W. Wang, « stabilité de phase et de Physique des défauts d'un Ternaires ZnSnN₂ Semiconductor: Principes Insights », *Adv. Mater.*, 26, 311-315, 2014.
- [35] Fahad ALNJIMAN ZnSnN₂ thin films for photovoltaic applications these doctorat 2018 France.
- [36] Feldberg, N., et al., Growth, disorder, and physical properties of ZnSnN₂. *Applied Physics Letters*, 2013. 103(4): p. 042109.
- [37] Georges Rakotonanahary. Spectroscopie des transitions excitoniques dans des puits quantiques GaN/AlGaIn. Autre [cond-mat.other]. Université Blaise Pascal - Clermont-Ferrand II, 2011. Français.
- [38] Raïssa RAY-DJONDANG 'Spectroscopie optique de boîtes quantiques d'InAs sur substrats d'InP et de GaAs Nanopixel semiconducteur pour l'étude de l'influence d'un champ électrique', No d'ordre 2010-ISAL-0XXX Année 2010.
- [39] Udo W. Pohl : *Epitaxy of Semiconductors*. Graduate Texts in Physics. Springer, Berlin, 2013.
- [40] Youssef El Gmili. Étude et caractérisations par cathodoluminescence de couches minces d'InGaIn pour le photovoltaïque. Université de Lorraine, 2013. Français.
- [41] Red light emitting diodes based on the type-II InGaIn-ZnSnN₂/GaN quantum wells
Article in *Materials Science in Semiconductor Processing* · August 2018