

République Algérienne Démocratique et Populaire  
الجمهورية الجزائرية الديمقراطية الشعبية  
Ministère de l'Enseignement Supérieur et la Recherche Scientifique

وزارة التعليم العالي والبحث العلمي  
Université Saad Dahlab Blida 1

جامعة سعد دحلب البلدية 1



Faculté des Sciences

كلية العلوم  
Département de Physique

قسم الفيزياء

Mémoire de Fin d'Etude

Pour l'Obtention du Diplôme de Master en Physique

Option : Nano Physique

Thème :

**Optimisation des Nanostructures pour les  
Diodes Lasers VCSEL**

Présenté par :

**ZEROUALA Ferial**

Soutenue le 21 / 09 / 2022 devant les jurys composés de :

Dr Laslouni Warda

MCB USDB 1

Présidente

Dr Belkada Rachid

CRTSE

Examineur

Pr Aissat Abdelkader

Professeur USDB1

Encadreur

Blida 2021/2022

## ملخص

الهدف من هذه الأطروحة هو دراسة عمل الليزر شبه النواقل VCSEL على شكل هيكل ثلاثي GaAsSb/GaAs من أجل تحديد طول موجات الانبعاث. درسنا بالضبط الخصائص الهيكلية (اعداد الشبكة، عدم تطابق الشبكة وسمك الحرجة) والخصائص الإلكترونية (طاقة فجوة الحزمة، طاقة الكمية والطاقة الانتقالية) لهذه السبيكة. لقد أنشأنا أيضًا تأثير الإجهاد والانفجار ودرجة الحرارة على هيكلنا. في الختام، لقد حددنا طول موجات الانبعاث لهيكلنا. الكلمات المفتاحية: شبه ناقل؛ ليزر؛ VCSEL؛ بنر كمومي؛ طول موجة الانبعاث.

## Résumé

L'objectif de ce mémoire est d'étudier le fonctionnement des Lasers à semi-conducteurs VCSEL à base d'une structure ternaire GaAsSb/GaAs afin de déterminer les longueurs d'ondes d'émissions. Nous avons en particulier étudié les propriétés structurales (paramètre de maille, désaccord de maille et l'épaisseur critique) et les propriétés électroniques (l'énergie de la bande interdite, l'énergie de quantification et l'énergie de transition) de cet alliage. Nous avons aussi établi l'effet de la contrainte, l'éclatement ainsi que la température sur notre structure. En conclusion nous avons déterminé les longueurs d'ondes d'émissions de notre structure.

**Mots clés :** Semi-conducteur, Laser, VCSEL, Puits quantique, Longueur d'onde d'émission.

## Abstract

The objective of this memory is to study the operation of VCSEL semiconductor lasers based on a GaAsSb/GaAs ternary structure in order to determine the emission wavelengths. In particular, we studied the structural properties (lattice parameter, lattice mismatch and critical layer) and electronic properties (band gap energy, quantization energy and transition energy) of this alloy. We also established the effect of strain, bursting and temperature on our structure. In conclusion, we have determined the emission wavelengths of our structure.

**Keywords:** Semi-conductor, Laser, VCSEL, Quantum well, Emission wavelength.

# Remerciements

L'aboutissement à la fin de cette phase d'étude n'est que le fruit des efforts consentis par plusieurs personnes et leur concours dans divers échelons d'étude scientifique en temps et en connaissance.

De ce fait ; je tiens tout d'abord à remercier Dieu le tout puissant de nous avoir donné le courage, la santé et la patience pour la réalisation de ce mémoire d'une part.

D'autre part, toutes mes remerciements et ma gratitude sont adressés à mon promoteur en l'occurrence de la personne du Professeur AISSAT ABDELKADER pour sa disponibilité, sa patience et ces judicieux conseils qui ont contribué à alimenter mes réflexions.

Je remercie également tous les membres des jury, Dr LASLOUNI Warda et Dr BELKADA Rachid qui nous avons fait l'honneur d'examiner et d'évaluer notre travail.

Je désire aussi remercier le Dr HASSEIN-BEY Abdelkader et le Dr MOUZALI Aziz ainsi que tout le personnel du département physique qui n'ont ménagé aucun effort quant à mettre notre disposition tous les moyens pour nos études universitaires.

Je remercie l'ensemble du personnel de laboratoire LATSI pour leurs aides et leurs contributions dans l'acquisition du savoir scientifique.

Toutes mes pensées et ma reconnaissance sont adressées à mes chers parents, mon frère Akram, ma famille, mes ami(es) qui n'ont pas cessé de me soutenir dans toutes les conditions durant la période de mes études.

# Table des matières

I.	Introduction.....	11
I.1	Laser à semi-conducteur .....	11
I.2	Laser à semiconducteur VCSEL .....	12
I.3	Avantages des lasers VCSEL.....	12
I.4	Semi-conducteurs III-V .....	13
I.5	Propriétés des semi-conducteurs III-V .....	13
I.5.1	Energie de bande interdite .....	13
I.5.2	Mobilité des porteurs .....	14
I.5.3	Vitesse de saturation .....	14
I.6	Structure cristalline.....	14
I.6.1	Structure wurtzite : .....	14
I.6.2	Structure zinc-blende : .....	14
I.7	Hétérostructure.....	15
I.7.1	Epitaxie .....	15
I.7.2	Puits quantique .....	16
I.8	L'étude des propriétés structurales .....	17
I.8.1	Paramètre de maille .....	17
I.8.2	Epaisseur critique .....	18
I.8.3	Contrainte .....	18
I.9	L'étude des propriétés électroniques .....	20
I.9.1	Effet de la contrainte sur les bandes d'énergie .....	20
I.9.2	L'anticroissement des bandes d'énergies .....	22
I.9.3	Energie de quantification.....	23
I.9.4	Energie de transition.....	26
I.9.5	Longueur d'onde .....	26
I.10	Conclusion .....	27
II.	Introduction.....	28
II.1	Paramètre de maille .....	28
II.2	Désaccord de maille.....	28
II.3	Epaisseur critique .....	29
II.4	Décalage d'énergie .....	30
II.5	Taux de confinement .....	31
II.6	L'effet de l'antimoine sur la bande de valence .....	31
II.7	L'énergie de la bande interdite.....	32
II.7.1	L'énergie de la bande interdite sans contrainte à $T = 0K$ et $T = 300K$ .....	32

II.7.2	L'énergie de la bande interdite en fonction de la temperature .....	33
II.7.3	L'énergie de la bande interdite avec contrainte et sans contrainte .....	33
II.7.4	L'énergie de la bande interdite avec contrainte.....	34
II.7.5	L'énergie de la bande interdite avec contrainte et avec éclatement .....	35
II.8	Masses effectives.....	35
II.9	L'indice de réfraction .....	36
II.10	L'énergie de quantification .....	36
II.10.1	L'énergie de quantification sans contrainte sans éclatement.....	37
II.10.2	L'énergie de quantification avec contrainte sans éclatement .....	37
II.10.3	L'énergie de quantification avec contrainte avec éclatement .....	38
II.11	L'énergie de transition .....	38
II.11.1	L'énergie de transition sans contrainte sans éclatement .....	39
II.11.2	L'énergie de transition avec contrainte sans éclatement .....	39
II.11.3	L'énergie de transition avec contrainte avec éclatement.....	40
II.12	La longueur d'onde.....	40
II.12.1	L'effet de la température et la concentration sur une longueur d'onde d'émission dans le cas non contraint et sans éclatement. ....	40
II.12.2	L'effet de la concentration d'antimoine sur la longueur d'onde dans le cas contraint sans éclatement.....	41
II.12.3	L'effet de la concentration d'antimoine sur la longueur d'onde dans le cas contraint avec éclatement.....	42
II.13	Conclusion .....	42

## Liste des figures et Tableaux

<b>Figure 1</b> Laser à semi-conducteur .....	12
<b>Figure 2</b> La bande interdite (a) Transition directe (b) Transition indirecte.....	13
<b>Figure 3</b> Structure zinc blende (a) Maille élémentaire (b) Vue de dessus.....	15
<b>Figure 4</b> Géométrie de la structure du puits quantique. ....	16
<b>Figure 5</b> Structure d'un puits quantique de type I .....	16
<b>Figure 6</b> Structure d'un puits quantique de type II .....	17
<b>Figure 7</b> Structure d'un puits quantique type III.....	17
<b>Figure 8</b> Le désaccord de maille (a) L'accord de maille (b) Contrainte compressive (c) Contrainte extensive ...	19
<b>Figure 9</b> Structure de bande d'un semi-conducteur à gap direct dans les trois cas (a) Non contraint (b) contraint en compression (c) contraint en tension. ....	20
<b>Figure 10</b> Effet de la concentration d'antimoine sur la bande de valence .....	23
<b>Figure 11</b> Puits quantique conventionnel .....	23
<b>Figure 12</b> Variation de paramètre de maille en fonction de la concentration d'antimoine Sb. ....	28
<b>Figure 13</b> Variation de la déformation en fonction de la concentration d'antimoine Sb. ....	29
<b>Figure 14</b> Variation de l'épaisseur critique en fonction de la concentration d'antimoine Sb.....	30
<b>Figure 15</b> L'impact de la concentration d'antimoine sur le décalage d'énergie. ....	30
<b>Figure 16</b> Taux de confinement en fonction de la concentration d'antimoine.....	31
<b>Figure 17</b> L'effet de la concentration d'antimoine Sb sur l'énergie de la bande de valence des trous lourds, légers et spin orbite. ....	32
<b>Figure 18</b> L'évolution de l'énergie de la bande interdite non contrainte en fonction de la concentration d'antimoine Sb pour $T=300K$ et $T=0K$ .....	32
<b>Figure 19</b> Variation de l'énergie de la bande interdite sans contrainte sans éclatement en fonction de la température et la concentration de l'antimoine Sb .....	33
<b>Figure 20</b> Variation de l'énergie de la bande interdite contraint et non contraint à $T=300K$ .....	34
<b>Figure 21</b> L'énergie de la bande interdite des trous lourds, trous légers et spin orbite avec contrainte à $T=300K$ . ....	34
<b>Figure 22</b> L'influence de la concentration d'antimoine Sb sur l'énergie de la bande interdite (non contraint sans éclatement, avec contrainte sans éclatement et contraint avec éclatement) à $T=300K$ .....	35
<b>Figure 23</b> Effet de la concentration d'antimoine Sb sur la masse effective des électrons, trous lourds, trous légers et spin orbite.....	36
<b>Figure 24</b> La variation de l'indice de réfraction en fonction de la température et la concentration d'antimoine Sb .....	36
<b>Figure 25</b> Variation de l'énergie de quantification, sans contrainte et sans éclatement, en fonction de l'épaisseur du puits et la concentration de l'antimoine Sb. (a) Porteurs électrons. (b) Porteurs trous lourds. ....	37
<b>Figure 26</b> Variation de l'énergie de quantification, avec contrainte et sans éclatement, à une concentration de l'antimoine de 30 %, en fonction de l'épaisseur du puits. (a) Porteurs électrons. (b) Porteurs trous lourds.....	38
<b>Figure 27</b> Variation de l'énergie de quantification, avec contrainte avec éclatement, à une concentration de l'antimoine de 30 %, en fonction de l'épaisseur du puits. (a) Porteurs électrons. (b) Porteurs trous lourds.....	38
<b>Figure 28</b> L'évolution de l'énergie de transition du premier niveau, sans contrainte et sans éclatement, à un largeur du puits de $50\text{Å}$ . ....	39

<b>Figure 29</b> L'impact de l'épaisseur du puits sur l'énergie de transition avec contrainte et sans éclatement à une concentration de 30 % .....	39
<b>Figure 30</b> Variation de l'énergie de transition avec contrainte et avec éclatement à une concentration de 30 %, en fonction de l'épaisseur du puits.....	40
<b>Figure 31</b> L'effet de la température et la concentration de l'antimoine sur la longueur d'onde d'émission à une épaisseur de 50Å non contraint et sans éclatement. ....	41
<b>Figure 32</b> Variation de la longueur d'onde à une concentration de 30 %, dans le cas contraint sans éclatement, en fonction de l'épaisseur du puits.....	41
<b>Figure 33</b> Variation de la longueur d'onde à une concentration de 30 % dans le cas contraint avec éclatement, en fonction de l'épaisseur du puits.....	42

## LISTES DES ACRONYMES ET ABBREVIATIONS

Laser :Light Amplification by Stimulated Emission of Radiation.

EEL : Edge Emitting Laser.

VCSEL : Vertical Cavity Surface Emitting Laser.

Ga: Gallium.

As: Arsenic.

Sb: Antimoine.

x: Concentration de l'antimoine.

LPE: Liquid Phase Epitaxy.

VPE: Vapor Phase Epitaxy.

MBE: Molecular Beam Epitaxy.

$L_c$ : Epaisseur critique.

$L_w$ : Epaisseur du puits.

$\varepsilon$ : Désaccord de maille.

$a_e$ : Le paramètre de maille de la couche épitaxie.

$a_s$ : Le paramètre de maille du substrat.

$\gamma$ : Coefficient de poisson.

$C_{i,j}$ : Coefficients d'élasticités.

$\Delta a$ : Désaccord paramétrique.

$E_g$ : Énergie de gap.

$\Delta_{so}$ : Bande spin orbit (split-off).

$lh$ : Trou léger (Light hole).

$hh$ : Trou lourd (Heavy hole).

$E_c$ :Energie de la bande conduction.



$E_v$  : Energie de la bande valence.

$k$ : Vecteur d'onde.

$c$ : Vitesse de la lumière dans le vide.

$h$  : Constante de Planck.

$\epsilon_0$ : La permittivité dans le vide.

$m_0$ : La masse effective de l'électron.

$\Delta E_{V,moy}^{hy}$ : Énergie de centre de gravité de la bande de valence en  $k=0$  qui varie à la contrainte.

$\Delta E_{c,moy}^{hy}$ : Énergie de centre de gravité de la bande de v conduction en  $k=0$  qui varie à la contrainte

$a_v$  : Potentiels hydrostatiques de déformation pour la bande de valence.

$a_c$  : Potentiels hydrostatiques de déformation pour la bande de conduction.

$\Delta E_{hh}^{cm}$ : Énergie induite par la contrainte de cisaillement avec la bande de trous lourds.

$\Delta E_{lh}^{cm}$  : Énergie induite par la contrainte de cisaillement avec la bande de trous légers.

$\Delta E_{so}^{cm}$ : Énergie induite par la contrainte de cisaillement avec la bande trous spin-splittée.

$E_{sb}$  : L'énergie du niveau de l'atome d'antimoine.

$E_{VB}$  : l'énergie de la bande de conduction de la barrière.

$E_e$  : L'énergie de quantification des électrons.

$E_{hh}$ : L'énergie de quantification des trous lourds.

$E_{lh}$ : L'énergie de quantification des trous légers.

$\Delta E_{hh}$ : Décalage d'énergie de la bande de trous lourds.

$\Delta E_{lh}$ : Décalage d'énergie de la bande de trous légers.

$\lambda$  : Longueur d'onde.

$m_e^*$  : Masse effective des électrons.

$m_{hh}^*$  : Masse effective des trous lourds.

$E_n$  : L'énergie de quantification.

$E_{tr}$  : L'énergie de transition.

## Introduction générale

Depuis la découverte des semi-conducteurs, la technologie de l'information ne cesse de progresser. En effet, grâce à leurs propriétés physiques remarquables, ils provoquent actuellement un intérêt croissant pour diffèrent industrie des télécommunications.

En particulier, la nature directe du gap de certains semi-conducteurs a permis l'essor de nombreux dispositifs optoélectroniques pour des applications dans le domaine des télécommunications par fibres optiques. En ce sens, l'avènement des lasers à semiconducteurs VCSEL a offert de nouvelles alternatives pour atteindre les meilleures transmissions à travers les fibres optiques. Les défis pour l'industrie télécommunications est d'obtenir des matériaux qui permettraient les meilleures transmissions pour des faibles atténuations dans les fibres optiques. Un tel objectif n'est possible qu'à l'aide des matériaux lasers émettant dans la gamme de longueurs d'ondes : 850, 1300 et 1550 nm. Les lasers à semi-conducteurs VCSEL seraient les matériaux de choix pour de telles applications. Actuellement, les matériaux les plus prometteurs dans ce domaine sont les semi-conducteurs III-V car en variant leur composition, il est possible de couvrir une large gamme de longueurs d'ondes [1].

Ce mémoire est devisé en deux chapitre. Le premier chapitre introduit le cadre théorique dans lequel a été effectué ce travail : une présentation des laser à semi-conducteur VCSEL, une étude sur les paramètres structuraux des semi-conducteurs III-V et leurs propriétés physiques et électroniques.

Le deuxième chapitre porte sur l'étude d'un puits quantique à base de GaAsSb / GaAs. Ce chapitre est divisé en deux parties. La première concerne l'étude des propriétés structurales et électroniques de l'alliage ternaire et la seconde est dédiée à l'étude de l'effet de la contrainte et l'éclatement du composé GaAsSb sur un substrat GaAs.

Le présent document se termine par une conclusion faisant le point sur les résultats obtenus, et sur les perspectives qu'ils ouvrent.

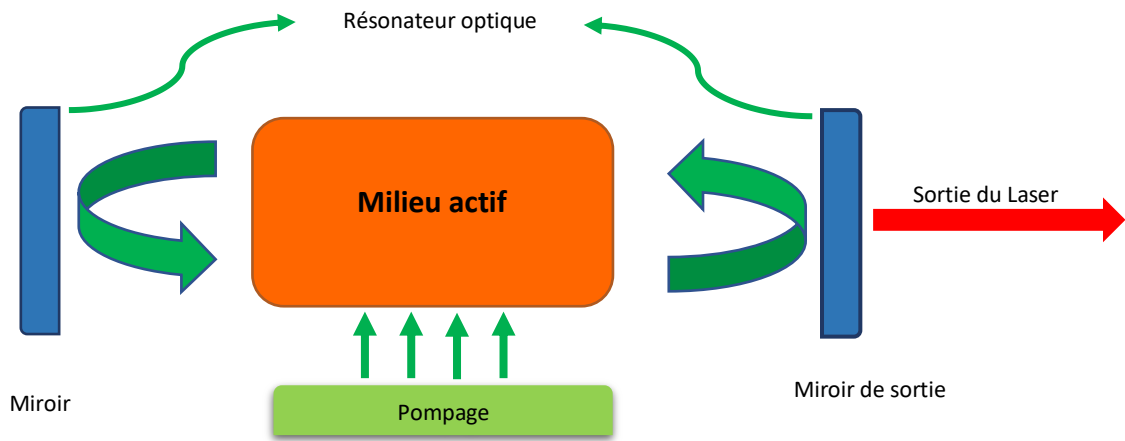
## I. Introduction

Au cours de ces dernières années, les lasers à semiconducteur ont connu un développement très important et un investissement dans de nombreux domaines. La vaste gamme de longueur d'onde émise par ces composants a donné naissance à une multitude d'applications. Aujourd'hui, les diodes lasers émettant dans le visible et le proche infra-rouge sont des composants arrivés à maturité et exploités dans de nombreux domaines, tels que les télécommunications par fibre optiques, l'impression laser, les systèmes de lecture optique (lecture de code barre, CD, DVD). Ce succès commercial s'explique essentiellement par les faibles coûts de production, la réalisation de dispositifs très compacts et les progrès des techniques de fabrication.

La recherche autour de ces composants vise maintenant à améliorer leurs performances ou à étendre la gamme spectrale de leur émission. La réduction des longueurs d'onde vers le bleu, voir l'ultraviolet, vise à accroître les capacités de stockage des supports optiques. A l'opposé, l'extension vers les longueurs d'onde du moyen infra-rouge a pour objectif la création de nouvelles applications telles que les télécommunications optiques ou encore la détection de gaz polluants.

### I.1 Laser à semi-conducteur

Tout laser est constitué de trois éléments : un milieu amplificateur, une cavité résonante et une source de pompage. Les lasers à semi-conducteur constituent une famille de lasers basée sur un milieu à gain à semi-conducteur. Dans ce type de laser, la structure électronique en bande de valence et en bande de conduction est mise à profit pour obtenir des recombinaisons radiatives efficaces du gain optique. Cette technologie permet d'avoir une grande flexibilité en longueur d'onde d'émission en jouant sur la composition des alliages qui constituent le milieu à gain. Cependant, les plages spectrales accessibles dépendent du choix des matériaux et de la technologie utilisée. En exploitant les transitions des matériaux III-V usuels (GaAs, InP, GaSb), on peut couvrir presque complètement la gamme 0.8-3 $\mu$ m avec un fonctionnement laser en continu et à température ambiante.



**Figure 1** Laser à semi-conducteur

Il existe deux grandes familles de lasers à semiconducteur : les lasers qui émettent par la tranche EEL pour lesquels la cavité est dans le plan des couches épitaxiées, et les lasers qui émettent par la surface avec une cavité verticale VCSEL. Pour notre étude, nous considèrerons uniquement les semiconducteurs de type III-V qui émettent par la surface avec une cavité verticale VCSEL.

## **I.2 Laser à semiconducteur VCSEL**

Les lasers VCSEL sont des lasers à semiconducteur. Ils ont été proposés pour la première fois en 1977 par K.Iga pour répondre aux limitations des lasers à émissions par la tranche. Le premier VCSEL est apparu en 1979 dans le contexte d'une importance croissante des lasers à semi-conducteur accompagnant les progrès en optoélectronique tels que la communication par fibre optique et les mémoires pour disque optique [2]. La structure diffère à celle des lasers à émission par la tranche. Dans un VCSEL le faisceau laser est émis perpendiculairement à la surface des couches constituant la structure alors que dans un laser à émission par la tranche, l'émission a lieu dans le plan des couches de la structure.

## **I.3 Avantages des lasers VCSEL**

Par rapport aux lasers à émission par la tranche, les VCSEL se différencient par deux caractéristiques essentielles pour ses applications. La faible divergence d'émission et un excellent recouvrement entre les modes de la fibre et ceux du VCSEL conduisent à une grande efficacité de couplage avec les fibres optiques, autorisant un couplage passif [3].

## I.4 Semi-conducteurs III-V

Les semi-conducteurs III-V rassemblent les alliages composés d'un ou plusieurs éléments de la colonne III du tableau périodique associé avec un ou plusieurs éléments de la colonne V. Les composés III-V les plus répandus dans l'industrie des semi-conducteurs sont le GaAs, le GaSb et l'InP.

## I.5 Propriétés des semi-conducteurs III-V

Les semi-conducteurs III-V sont principalement employés dans l'électronique (traitement de signaux électriques) et la photonique (signaux optiques) pour la transmission d'information. L'intérêt de ces semi-conducteurs III-V par rapport aux autres comme le Si qui est le matériau phare de la microélectronique, se justifie par trois propriétés remarquables que nous allons développer : un gap direct, une mobilité des électrons élevée et une vitesse de saturation.

### I.5.1 Energie de bande interdite

Les semi-conducteurs sont divisés en deux familles : les matériaux à « gap direct » ou « gap indirect ». Si le maximum de la bande de valence et le minimum de la bande de conduction sont alignés sur le même vecteur d'onde  $k$ , alors la bande interdite est dite directe (figure 2.a). C'est le cas de nombreux semi-conducteur III-V. Au contraire, s'ils possèdent des vecteurs d'onde différents alors la bande interdite est indirecte (figure 2.b). Un photon dont l'énergie est proche de celle de la bande interdite, peut produire facilement une paire électron-trou dans un semi-conducteur direct, car il n'a pas besoin d'énergie pour modifier son vecteur d'onde. Donc la création d'une paire électron-trou est plus lente dans le cas d'un semi-conducteur indirect. C'est pourquoi les matériaux III-V présentant un gap direct sont utilisés pour les dispositifs optiques [4].

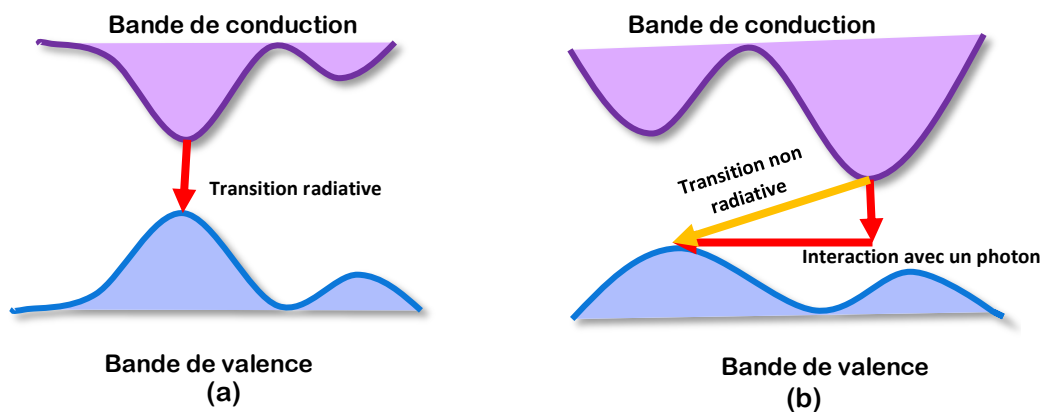


Figure 2 La bande interdite (a) Transition directe (b) Transition indirecte

## **I.5.2 Mobilité des porteurs**

Les semi-conducteurs III-V présentent une grande mobilité des électrons par rapport aux autres matériaux, grâce à leur faible masse effective. La masse effective est donnée par la relation de dispersion suivante :

$$\frac{d^2E}{dk^2} = \frac{\hbar^2}{m_0^*} \quad (1)$$

## **I.5.3 Vitesse de saturation**

A très fort champ électrique, la vitesse des porteurs atteint une vitesse maximum appelée « vitesse de saturation ». Au-delà d'un certain champ électrique, la vitesse des porteurs n'augmente plus à cause d'une très forte interaction avec le cristal. La vitesse des électrons à fort champ électrique est plus importante dans les semi-conducteurs III-V.

## **I.6 Structure cristalline**

La matière condensée peut prendre deux états solides différents selon les conditions dans lesquelles elle s'est formée : un état dit amorphe, dans lequel la disposition des atomes est aléatoire, ou un état cristallisé caractérisé par un arrangement périodique des atomes. La plupart des matériaux III-V, le cas de GaAs, GaSb et GaN et leurs alliages, se présentent principalement sous deux phases cristallines : la structure wurtzite (hexagonale) et la structure zinc-blende (cubique).

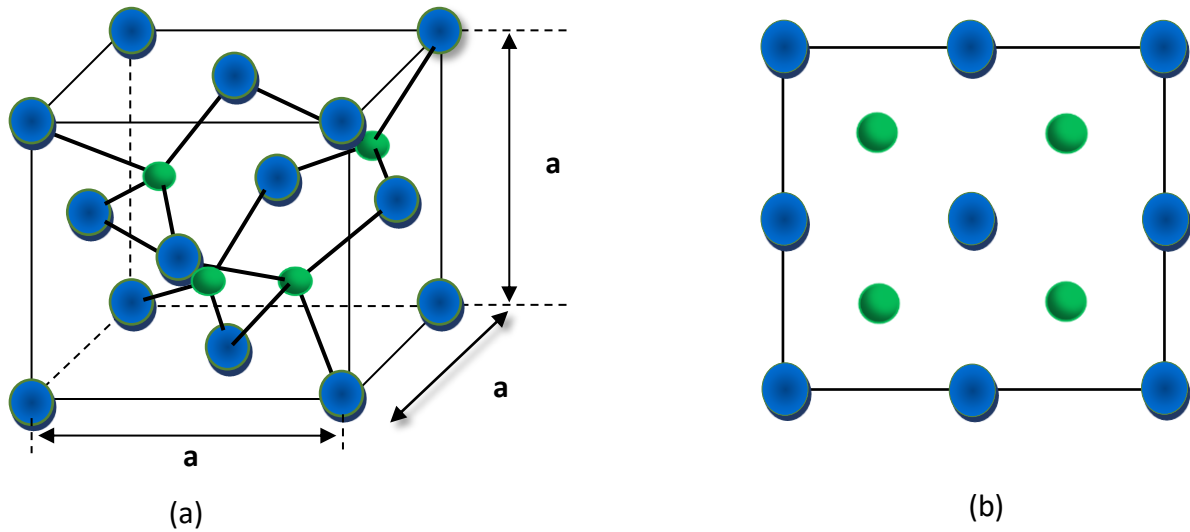
### **I.6.1 Structure wurtzite :**

La structure wurtzite, nommée d'après le minéral wurtzite, est la structure cristalline de nombreux composés binaires. Elle est à la base de réseau hexagonal.

### **I.6.2 Structure zinc-blende :**

La structure blende (en anglais zinc blende (ou zinc-blende) structure) est une structure cristalline dérivée de la structure cubique à faces centrées (CFC), composée de deux réseaux cubiques à faces centrées de zinc et de sulfure décalés d'un quart de la grande diagonale du cube. La structure est similaire à la structure diamant et à la structure

fluorine. La structure blende est la structure cristalline de la majorité des semi-conducteurs III-V, fondamentalement importants à l'industrie de l'opto-électronique.



**Figure 3** Structure zinc blende (a) Maille élémentaire (b) Vue de dessus

## I.7 Hétérostructure

Le développement des hétérostructures de matériaux semiconducteurs a donné des illustrations claires de certains concepts de la mécanique quantique comme le confinement ou la quantification des niveaux des énergies. Les progrès accomplis dans les techniques de croissance ont permis de réaliser différentes formes de nanostructures semiconductrices (puits, fils et boîtes quantiques) de manière à confiner les porteurs dans une, deux ou trois directions de l'espace.

### I.7.1 Epitaxie

L'épitaxie est une technique de dépôt qui permet de croître un matériau cristallin en couches minces sur un substrat cristallin, dont l'orientation et la structure cristalline déterminent celles de la couche, possédant un certain nombre d'éléments de symétrie communs dans leurs réseaux cristallins. On distingue l'homo-épitaxie, qui consiste à faire croître un cristal sur un cristal de nature chimique identique, et l'hétéro-épitaxie, dans laquelle les deux cristaux sont de nature chimique différente [5].

Les différentes méthodes d'épitaxie :

- L'épitaxie en phase liquide LPE
- L'épitaxie en phase vapeur, VPE
- L'épitaxie par jet moléculaire, EJM ou MBE

## I.7.2 Puits quantique

Un puits quantique est 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. La discontinuité entre les bandes d'énergie dans les deux matériaux crée une barrière de potentiel qui confine les porteurs (électron et trou) dans le puits quantique.

Selon la nature de la discontinuité de bandes interdites à l'interface puits-barrière, on distingue trois types de puits quantiques.

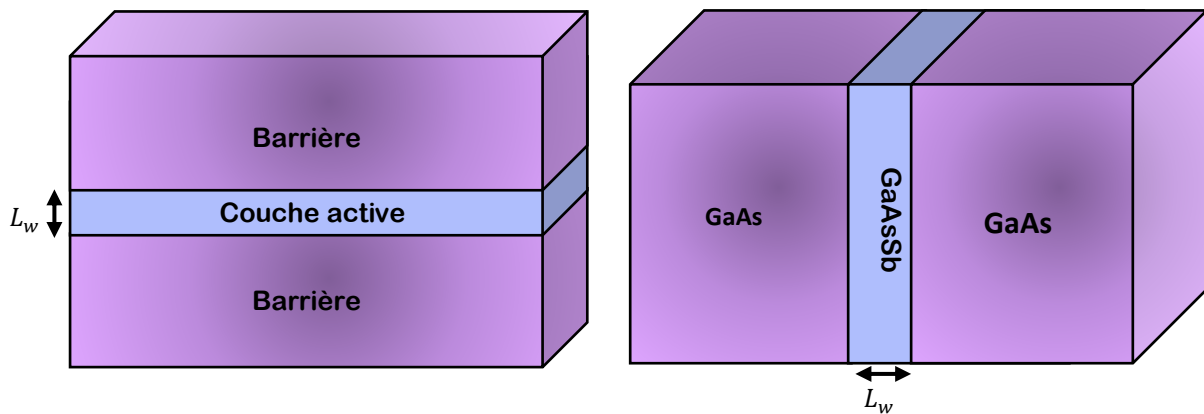


Figure 4 Géométrie de la structure du puits quantique.

### I.7.2.1 Puits quantiques de type I

Des puits quantiques de type-I où les électrons et les trous sont confinés dans le même matériau constituant le puits. L'énergie du photon dépend des énergies de confinement des porteurs et du gap du matériau puits.

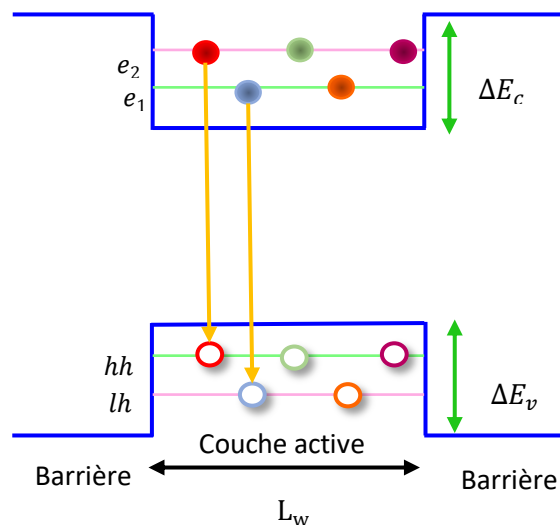


Figure 5 Structure d'un puits quantique de type I



### I.7.2.2 Puits quantiques de type II

Des puits quantiques de type-II où les porteurs sont confinés dans deux matériaux adjacents. Dans ce cas, l'énergie du photon est fonction des énergies de confinement des porteurs mais aussi des gaps des deux matériaux formant l'hétérostructure.

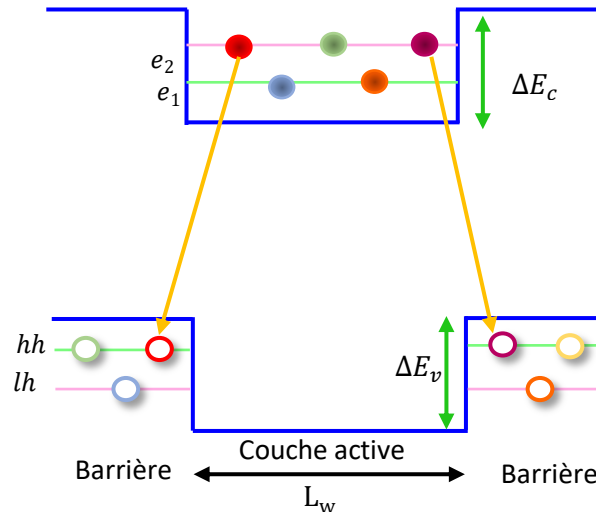


Figure 6 Structure d'un puits quantique de type II

### I.7.2.3 Puits quantiques de type III

La configuration dite de type-III qui est un cas particulier du type-II dans lequel le bas de la bande de conduction se trouve en dessous du haut de la bande de valence.

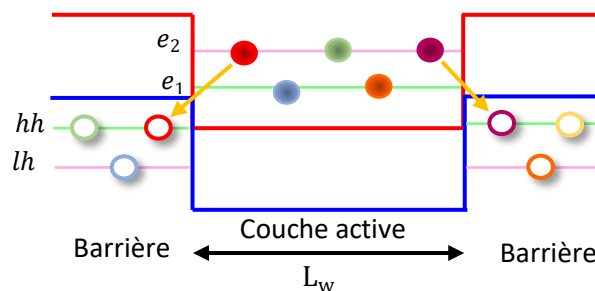


Figure 7 Structure d'un puits quantique type III

## I.8 L'étude des propriétés structurales

### I.8.1 Paramètre de maille

On appelle paramètre de la maille, noté ( $a$ ), la longueur de l'arête du cube. Il permet de déterminer la compacité de la structure, qui correspond au volume occupé en propre par les atomes dans la maille sur le volume total de la maille.

## I.8.2 Epaisseur critique

Il est bien connu que lors d'une croissance épitaxiale, quand le désaccord de maille entre le substrat et la couche épitaxiale est faible, les premières couches déposées s'accommodent élastiquement au paramètre du substrat et le résultat est la formation d'une couche contrainte [6]. Cependant, quand l'épaisseur de la couche déposée augmente, l'énergie élastique due à la contrainte devient tellement grande qu'il va exister une épaisseur critique, au-delà de laquelle l'équilibre élastique est rompu et il devient énergiquement favorable aux dislocations d'apparaître dans la couche. K. Koksal et B. Gonul présente un modèle qui permet le calcul de l'épaisseur critique en fonction des concentrations de l'alliage :

$$L_c = \frac{a_s}{k \cdot \sqrt{2} \cdot \pi \cdot \epsilon_{xx}} \times \frac{1 - (0.25 \cdot \gamma)}{(1 + \gamma)} \times \ln \left( \frac{L_c \cdot \sqrt{2}}{a_s} + 1 \right) \quad (2.1)$$

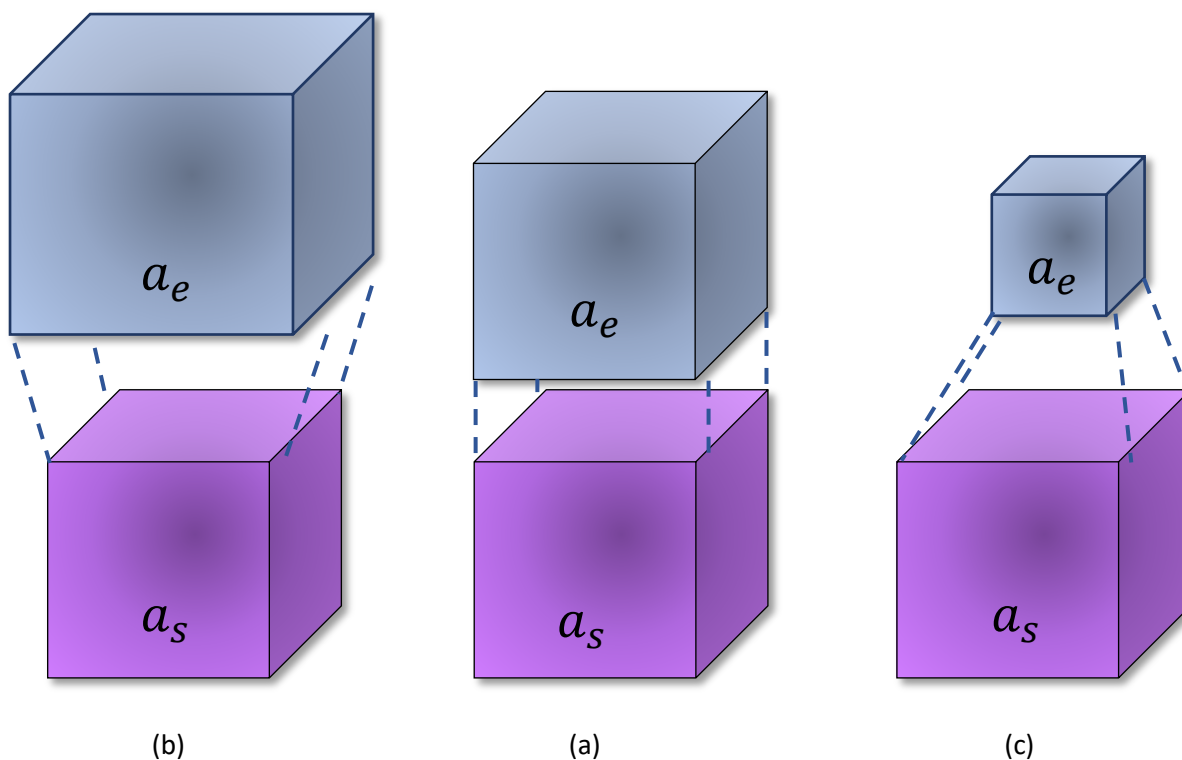
$k$  : Coefficient égal à 1 dans le cas d'un super-réseau ; à 2 pour un puits quantique ; 4 dans le cas d'une couche unique.

$$\gamma = \frac{C_{12}}{C_{11} + C_{12}} \quad (2.2)$$

## I.8.3 Contrainte

La condition nécessaire à une bonne hétéro-épitaxie est que les deux matériaux aient, d'une part, la même structure cristalline et, d'autre part, des paramètres de maille voisins (figure 8.a). Lorsque les paramètres de maille sont différents, la maille de la couche épitaxie se réajuste par rapport à celle du substrat pour avoir un accord de maille, ceci entraîne l'existence d'une contrainte biaxiale dans le matériau [7]. La contrainte est soit :

- Un allongement (couche en tension) : Si le paramètre de la couche épitaxie est plus petit que celui du substrat :  $a_e < a_s$  (figure 8.c).
- Un rétrécissement (couche en compression) : Si le paramètre de la couche épitaxie est plus grand que celui du substrat :  $a_e > a_s$  (figure 8.b).



**Figure 8** Le désaccord de maille (a) L'accord de maille (b) Contrainte compressive (c) Contrainte extensive

Soit  $\vec{X} = \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}$  la position d'un atome dans le semi-conducteur A avant épitaxie.

Sa nouvelle position est  $\vec{X}' = \bar{\bar{\epsilon}} \vec{X}$ , avec le tenseur de déformation

$$\bar{\bar{\epsilon}} = \begin{pmatrix} \epsilon_{xx} & 0 & 0 \\ 0 & \epsilon_{yy} & 0 \\ 0 & 0 & \epsilon_{zz} \end{pmatrix} \quad (2.3)$$

$$\epsilon_{xx} = \epsilon_{yy} = \frac{a_s - a_e}{a_e} \quad (2.4)$$

En utilisant la Loi de Hooke :

$$\sigma_{ij} = \sum_{n,m} C_{ij,nm} \epsilon_{m,n} \quad (2.5)$$

Dans le cas d'un matériau qui ne subisse aucune contrainte (la pression atmosphérique est négligée)

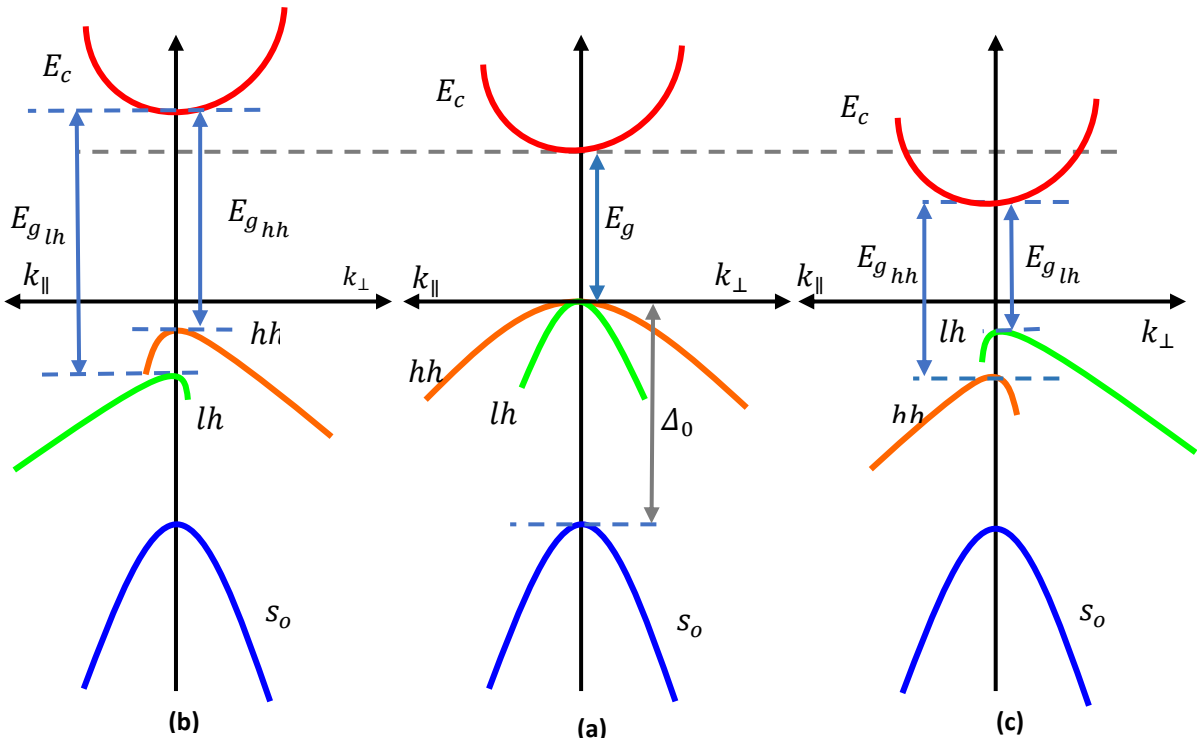
$$\varepsilon_{zz} = -2 \frac{C_{12}}{C_{11}} \varepsilon_{xx} \quad (2.6)$$

## I.9 L'étude des propriétés électroniques

### I.9.1 Effet de la contrainte sur les bandes d'énergie

Lorsque la couche d'épitaxie et celle du substrat sont en accord, les bandes des trous lourds et trous légers sont isotropes et dégénérées au centre de la zone de Brillouin  $\Gamma=0$ , la bande des spin-splittée étant située à une énergie  $\Delta_0$  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  $k = 0$  [8].

$$E_{v_{moy}} = \frac{E_{hh} + E_{lh} + \Delta_0}{3} \quad (2.7)$$



**Figure 9** Structure de bande d'un semi-conducteur à gap direct dans les trois cas (a) Non contraint (b) contraint en compression (c) contraint en tension.

En présence du désaccord de maille, on aura deux formes de déformation au niveau des bandes d'énergies :

- La déformation hydrostatique liée à la déformation selon l'axe de croissance  $oz$ , provoque un décalage du centre de gravité de la bande de valence ainsi que le centre de gravité de la bande de conduction.
- La déformation de cisaillement liée à la déformation selon les axes  $ox$  et  $oy$ , provoque la dégénérescence des états énergétiques des trous lourds et trous légers. Pour une couche soumise à une contrainte biaxiale de compression, la composante hydrostatique change le centre de gravité de la structure de bande ; la contrainte de cisaillement rend les bandes de valence strictement anisotropes ; la bande de plus haute énergie devient lourde selon  $\vec{k}_\perp$  et légère selon  $\vec{k}_\parallel$  (bande de trous lourds). La bande d'énergie inférieure devient légère selon  $\vec{k}_\perp$  et lourde selon  $\vec{k}_\parallel$  (bande de trous légers) [9] [10].

Déformation hydrostatique :

$$\Delta E_{c,moy}^{hy} = a_c(2\varepsilon_\parallel + \varepsilon_\perp) \quad (2.8)$$

$$\Delta E_{v,moy}^{hy} = a_v(2\varepsilon_\parallel + \varepsilon_\perp) \quad (2.9)$$

$a_v$  et  $a_c$  sont respectivement les potentiels hydrostatiques de déformation pour la bande de valence et de conduction.

Déformation de cisaillement :

$$\Delta E_{hh}^{cm} = -0.5\delta E^{cm} \quad (2.10)$$

$$\Delta E_{lh}^{cm} = -0.5\Delta_0 + 0.25\delta E^{cm} + 0.5\sqrt{\Delta_0^2 + \Delta_0\delta E^{cm} + 2.25(\delta E^{cm})^2} \quad (2.11)$$

$$\Delta E_{so}^{cm} = -0.5\Delta_0 + 0.25\delta E^{cm} - 0.5\sqrt{\Delta_0^2 + \Delta_0\delta E^{cm} + 2.25(\delta E^{cm})^2} \quad (2.12)$$

$$\delta E^{cm} = 2b(\varepsilon_\parallel + \varepsilon_\perp) \quad (2.13)$$

Où  $b$  est le potentiel de déformation tétragonale.

On peut définir l'énergie du haut de la bande de valence  $E_v$  ainsi que l'énergie du bas de la bande conduction  $E_c$  comme suit :

$$E_c = E_{v_{\text{moy}}} + 0.33\Delta_0 + E_g + \Delta E_c^{\text{hy}} \quad (2.14)$$

- Dans le cas d'une couche épitaxiale soumise à une contrainte en compression

$$E_v = E_{v_{\text{moy}}} + 0.33\Delta_0 + \Delta E_{v_{\text{moy}}}^{\text{cm}} + \Delta E_{\text{hh}}^{\text{cm}} \quad (2.15)$$

- Dans le cas où la couche épitaxiale est soumise à une contrainte en tension :

$$E_v = E_{v_{\text{moy}}} + 0.33\Delta_0 + \Delta E_{v_{\text{moy}}}^{\text{cm}} + \Delta E_{\text{lh}}^{\text{cm}} \quad (2.16)$$

L'expression de la bande interdite s'écrit :

$$E_{g_{\text{hh}}} = E_g + \Delta E_c^{\text{hy}} - \Delta E_{v_{\text{moy}}}^{\text{cm}} - \Delta E_{\text{hh}}^{\text{cm}} \quad (2.17)$$

$$E_{g_{\text{lh}}} = E_g + \Delta E_c^{\text{hy}} - \Delta E_{v_{\text{moy}}}^{\text{cm}} - \Delta E_{\text{lh}}^{\text{cm}} \quad (2.18)$$

$$E_{g_{\text{so}}} = E_g + \Delta E_c^{\text{hy}} - \Delta E_{v_{\text{moy}}}^{\text{cm}} - \Delta E_{\text{so}}^{\text{cm}} \quad (2.19)$$

## I.9.2 L'anticroisement des bandes d'énergies

Le modèle d'anticroisement de bande (BAC) est utilisé pour décrire de manière quantitative la diminution de l'énergie de bande interdite avec l'incorporation de l'antimoine avec le matériau [11]. Il a été montré que l'interaction des états localisés des atomes de Sb avec les états de GaAs induit l'éclatement de la bande de valence en deux sous bandes (figure 10).

Le calcul des énergies des sous bandes est déterminé par la loi suivante [12]:

$$E_{\pm} = 0.5 \left[ E_{\text{Sb}} + E_{\text{VB}} \pm \sqrt{(E_{\text{Sb}} - E_{\text{VB}})^2 + 4C_{\text{Sb}}^2 x} \right] \quad (2.20)$$

$$E_{\text{VB}} = E_{\text{VB,GaAs}} + \Delta E_{\text{VBX}} \quad (2.21)$$

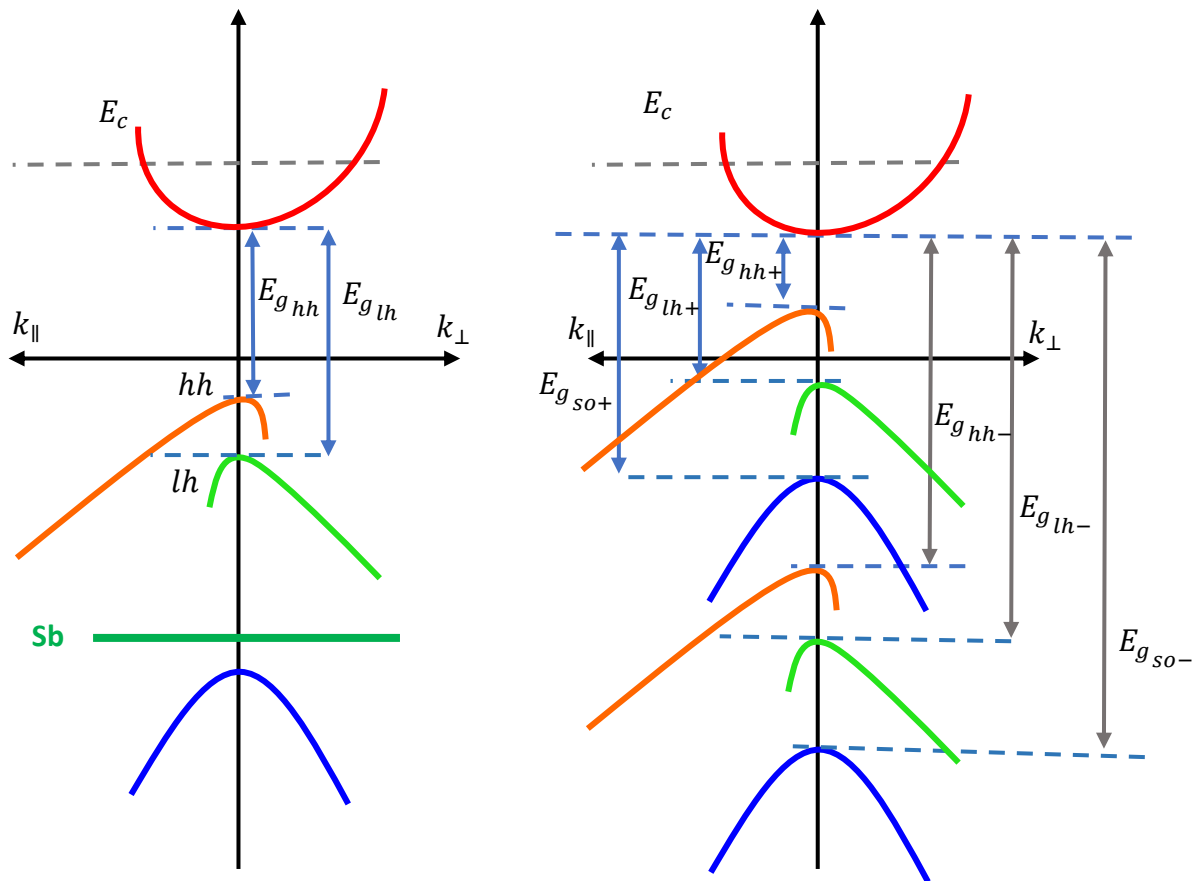


Figure 10 Effet de la concentration d'antimoine sur la bande de valence

### I.9.3 Energie de quantification

On cherche les énergies possibles d'une particule dans un puits de potentiel de type 1 et de profondeur  $V_0$ , de largeur  $L$  symétrique. On ne s'intéresse qu'aux états liés, c'est-à-dire ceux d'énergie telle que  $0 < E_n < V_0$ . On suppose que l'énergie n'est pas suffisante pour que la particule sorte du puits

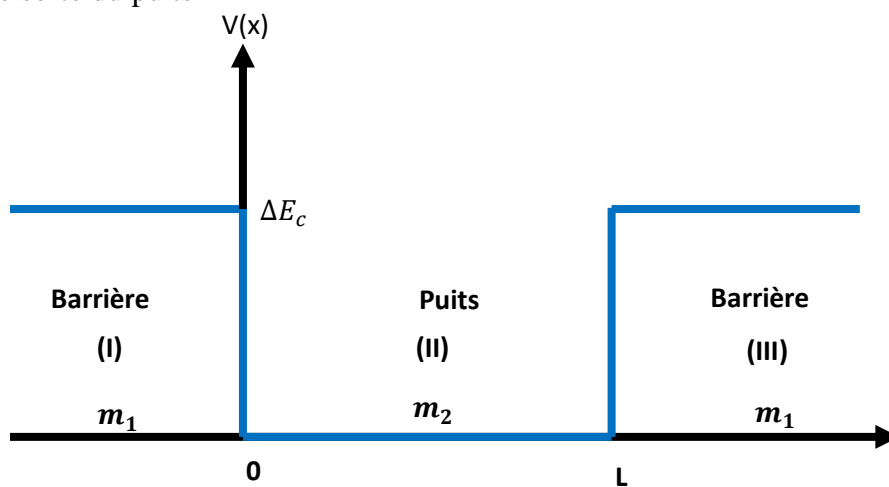


Figure 11 Puits quantique conventionnel

$$V(x) = \begin{cases} V_0 = Q_c \Delta E_c & x < 0 \text{ et } x > L \\ 0 & 0 < x < L \end{cases} \quad (2.22)$$

$$0 < x < L \quad (2.23)$$

Equation de Schrödinger :

$$\text{Région (I):} \quad \frac{d^2 \varphi_I(x)}{dx^2} - \frac{2m_1^*}{\hbar^2} (V_0 - E_n) \varphi_I(x) = 0 \quad (2.24)$$

$$\text{Région (II):} \quad \frac{d^2 \varphi_{II}(x)}{dx^2} + \frac{2m_2^*}{\hbar^2} E_n \varphi_{II}(x) = 0 \quad (2.25)$$

$$\text{Région (III):} \quad \frac{d^2 \varphi_{III}(x)}{dx^2} - \frac{2m_1^*}{\hbar^2} (V_0 - E_n) \varphi_{III}(x) = 0 \quad (2.26)$$

On suppose

$$\beta_1^2 = \frac{2m_1^*}{\hbar^2} (V_0 - E_n) \quad (2.27)$$

$$\beta_2^2 = \frac{2m_2^*}{\hbar^2} E_n \quad (2.28)$$

$$\text{Région (I):} \quad \frac{d^2 \varphi_I(x)}{dx^2} - \beta_1^2 \varphi_I(x) = 0 \quad (2.29)$$

$$\text{Région (II):} \quad \frac{d^2 \varphi_{II}(x)}{dx^2} + \beta_2^2 \varphi_{II}(x) = 0 \quad (2.30)$$

$$\text{Région (III):} \quad \frac{d^2 \varphi_{III}(x)}{dx^2} - \beta_1^2 \varphi_{III}(x) = 0 \quad (2.31)$$

- Les solutions :

Région I :

$$\text{Solution générale :} \quad \varphi_I(x) = A e^{\beta_1 x} + B e^{-\beta_1 x} \quad (2.32)$$

Sachant que la condition aux limites  $\varphi_I(x \rightarrow -\infty) = 0$  entraîne  $A = 0$ , la fonction d'onde devient :

$$\varphi_I(x) = A e^{\beta_1 x} \quad (2.33)$$

Région III :

$$\text{Solution générale :} \quad \varphi_{III}(x) = C e^{\beta_1 x} + D e^{-\beta_1 x}$$

Compte tenu de la condition  $\varphi_{III}(z \rightarrow +\infty) = 0$  entraîne  $C = 0$ , la fonction d'onde devient :



$$\varphi_{III}(x) = De^{-\beta_1 x} \quad (2.34)$$

La fonction d'onde pour la région II :

$$\varphi_{II}(x) = B \sin(\beta_2 x + \Phi) \quad (2.35)$$

- Détermination des constantes d'intégrations :

Pour déterminer les constantes, on utilise la continuité des fonctions d'ondes à l'interface puits-barrière :

Pour  $x = 0$

$$\varphi_I(0) = \varphi_{II}(0) \quad \rightarrow \quad A = B \sin \varphi \quad (2.36)$$

$$\frac{1}{m_1^*} \varphi'_I(0) = \frac{1}{m_2^*} \varphi'_{II}(0) \quad \rightarrow \quad A \frac{\beta_1}{m_1^*} = B \frac{\beta_2}{m_2^*} \cos \varphi \quad (2.37)$$

Pour  $x = L$

$$\varphi_{II}(L) = \varphi_{III}(L) \quad \rightarrow \quad B \sin(\beta_2 L + \Phi) = De^{-\beta_1 L} \quad (2.38)$$

$$\frac{1}{m_2^*} \varphi_{II}(L) = \frac{1}{m_1^*} \varphi_{III}(0) \quad \rightarrow \quad B \frac{\beta_2}{m_2^*} \cos(\beta_2 L + \Phi) = -D \frac{\beta_1}{m_1^*} e^{-\beta_1 L} \quad (2.39)$$

En divisant les équations (2.36) sur (2.37) et (2.38) sur (2.39) on obtient :

$$\tan \varphi = \frac{\beta_2 m_1^*}{\beta_1 m_2^*} \quad (2.40)$$

$$\tan(\beta_2 L + \Phi) = -\frac{\beta_2 m_1^*}{\beta_1 m_2^*} \quad (2.41)$$

On a :

$$\sin^2 \alpha = \frac{1}{\left(1 + \frac{1}{\tan^2 \alpha}\right)} \quad (2.42)$$

$$\sin \varphi = \frac{\frac{\beta_2}{m_2}}{\sqrt{\frac{\beta_2^2}{m_2^2} + \frac{\beta_1^2}{m_1^2}}} \quad (2.43)$$

$$\tan \varphi = -\tan(\beta_2 L + \varphi) \quad (2.44)$$

$$\varphi = -(\beta_2 L + \varphi) + n\pi \quad (2.45)$$

$$\beta_2 L = n\pi - 2\varphi$$

$$\beta_2 L = n\pi - 2 \sin^{-1} \left( \frac{\beta_2}{\sqrt{\frac{\beta_2^2}{m_2^2} + \frac{\beta_1^2}{m_1^2}}} \right) \quad (2.46)$$

L'énergie de quantification des électrons :

$$\frac{\sqrt{2m_e^* E_e}}{\hbar} L = n\pi - 2 \arcsin \sqrt{\frac{E_e}{\frac{V_0 m_e^*}{m_s^*} + E_e \left(1 - \frac{m_e^*}{m_s^*}\right)}} \quad (2.47)$$

L'énergie de quantification des trous lourds :

$$\frac{\sqrt{2m_e^* E_{hh}}}{\hbar} L = n\pi - 2 \arcsin \sqrt{\frac{E_{hh}}{\frac{V_0 m_e^*}{m_s^*} + E_{hh} \left(1 - \frac{m_e^*}{m_s^*}\right)}} \quad (2.48)$$

Ces deux équations (2.47) et (2.48) nous permettent de calculer les énergies des quantifications des électrons et des trous lourds.

### I.9.4 Energie de transition

L'énergie de transition est l'énergie nécessaire pour le passage de l'électron de la bande de conduction vers la bande de valence. Cette énergie est donnée par l'équation suivante.

$$E_{tr} = E_g + E_e + E_{hh} \quad (2.49)$$

### I.9.5 Longueur d'onde

La Longueur d'onde est une grandeur physique caractéristique d'une onde monochromatique dans un milieu homogène, définie comme la distance séparent deux cycles consécutifs d'une onde [13]. Elle est donnée par la relation suivante :

$$\lambda = \frac{hc}{E_{tr}} \quad (2.50)$$

## **I.10 Conclusion**

Dans ce premier chapitre nous avons pu dresser l'état de l'art des diodes laser VCSEL en traitant différents points essentiels. Tout d'abord, nous avons commencé par une description des lasers à semi-conducteur VCSEL et leurs avantages notables en comparaison avec leurs homologues les EEL. Ensuite nous avons abordé l'étude de la structure et les propriétés physiques et électroniques des semi-conducteurs III-V. La dernière partie de ce chapitre a été consacrée à l'étude des puits quantiques et l'énergie de quantification.

## II. Introduction

Dans ce deuxième chapitre, nous allons présenter et interpréter les résultats de la simulation de la structure ternaire à puits quantique  $\text{GaAs}_{(1-x)}\text{Sb}_x / \text{GaAs}$ . Pour effectuer cette simulation, nous allons travailler à l'aide de logiciel MATLAB. Nous nous intéressons dans un premier temps à l'étude des différents paramètres structuraux comme le paramètre de maille, désaccord de maille et l'épaisseur critique. Ensuite nous nous intéressons à l'effet de la contrainte et l'éclatement sur l'énergie de gap, la quantification, l'énergie de transition et la longueur d'onde.

### II.1 Paramètre de maille

La figure 12 représente l'effet de la concentration d'antimoine sur le paramètre de maille de l'épitaxie  $\text{GaAs}_{(1-x)}\text{Sb}_x$ . L'accumulation de la concentration d'antimoine augmente le paramètre de maille. Lorsque la concentration de l'antimoine divers de 0% à 100 % le paramètre de maille croît de 5.653 Å à 6.096 Å, donc une évolution de  $\Delta a = 0.44$  Å.

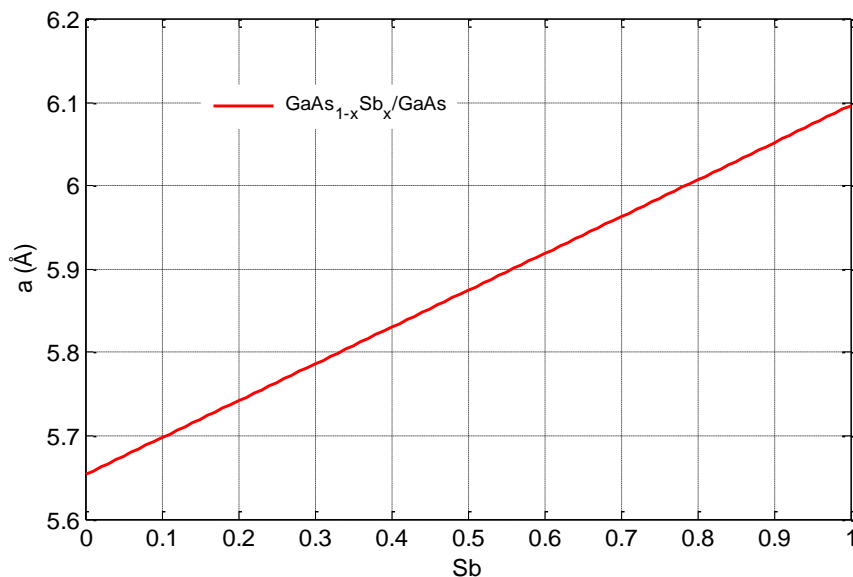


Figure 12 Variation de paramètre de maille en fonction de la concentration d'antimoine Sb.

### II.2 Désaccord de maille

La figure 13 décrit la variation de la contrainte parallèle et verticale en fonction de la concentration d'antimoine à 300K. L'augmentation de la concentration de l'antimoine croît la contrainte sur l'interface entre la couche de l'épitaxie et celle du substrat. Pour avoir une

déformation minimale, afin d'augmenter la performance de la structure, on limite la concentration de l'antimoine à 30%, au-delà de cette valeur la déformation dépasse 2.29%. On constate aussi que le paramètre de la couche active est supérieur à celui du substrat, donc la contrainte est compressive.

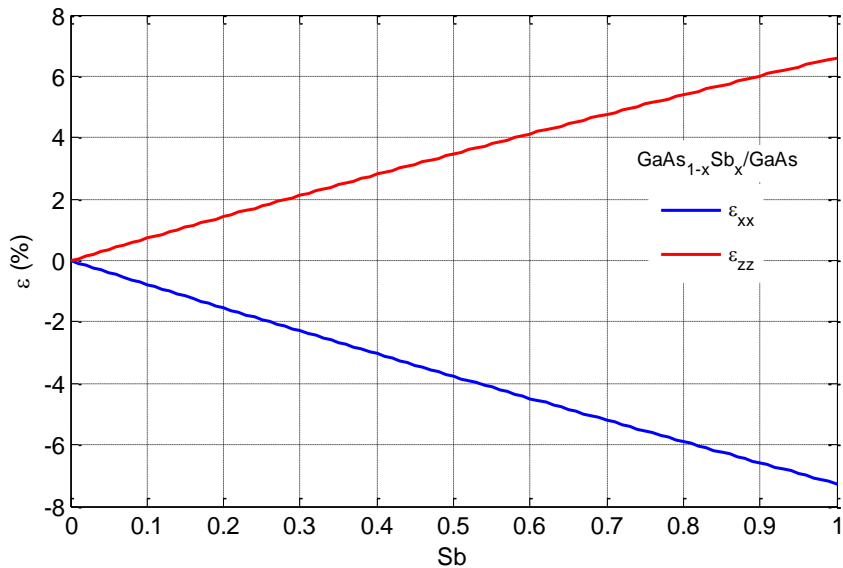
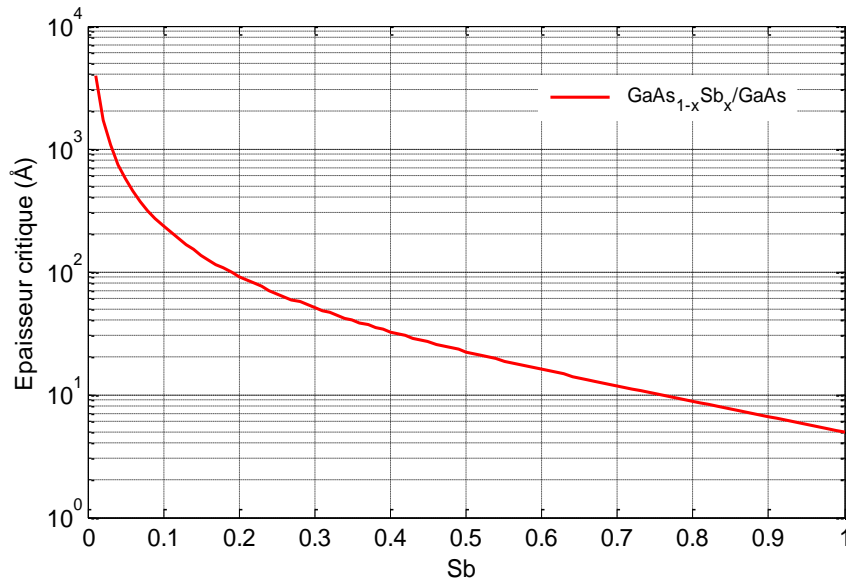


Figure 13 Variation de la déformation en fonction de la concentration d'antimoine Sb.

### II.3 Epaisseur critique

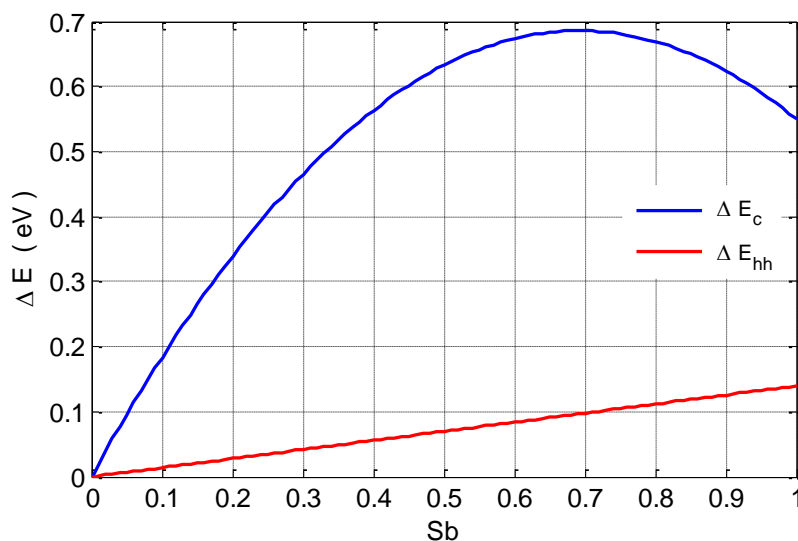
La figure 14 indique la variation de l'épaisseur critique de la structure GaAsSb / GaAs en fonction de la concentration de l'antimoine. L'augmentation de la concentration de l'antimoine provoque une diminution importante dans l'épaisseur critique, atteignant la valeur de 50.8 Å pour une concentration de 30% et une contrainte de 2.29%. Pour minimiser la dislocation de la structure et avoir un puits fiable, il faut que la concentration de l'antimoine ne dépasse pas 30 % et que la condition  $L_w < L_c$  soit réaliser.



**Figure 14** Variation de l'épaisseur critique en fonction de la concentration d'antimoine Sb

## II.4 Décalage d'énergie

La figure 15 montre l'impact de la concentration d'antimoine sur le décalage des bandes d'énergies de la structure GaAsSb / GaAs. On constate que l'influence de la concentration d'antimoine est plus considérable sur le décalage de la bande de conduction que sur le décalage de la bande de valence. Cette étude nous permet d'optimiser le confinement et le taux de confinement d'énergie dans un puits. Ainsi on pourra déterminer le type du puits quantique : puisque  $\Delta E_c$  et  $\Delta E_v$  sont positives, alors on a un puit de de type I.



**Figure 15** L'impact de la concentration d'antimoine sur le décalage d'énergie.

## II.5 Taux de confinement

La figure 16 représente l'influence de la concentration d'antimoine Sb sur le taux de confinement des porteurs dans la bande de valence et la bande de conduction. Le taux de confinement dans la bande de conduction et la bande de valence sont inversement proportionnelles.

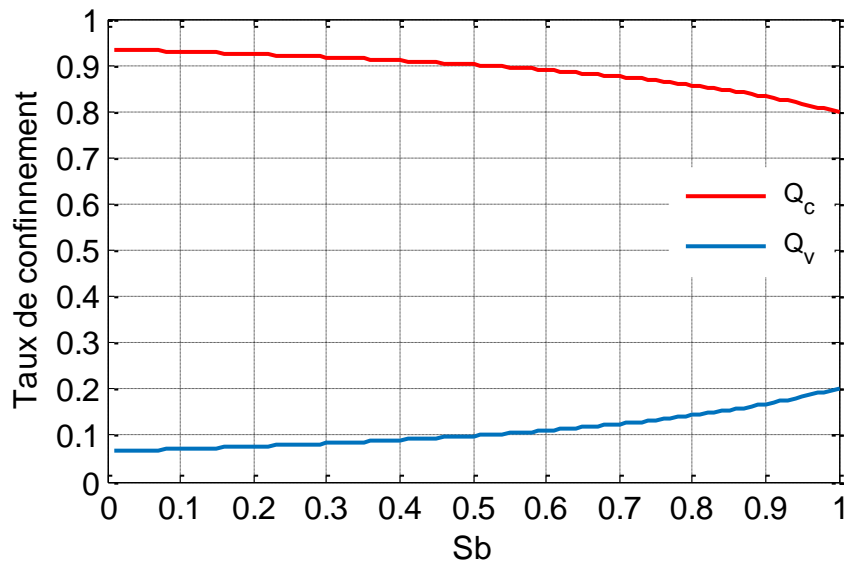
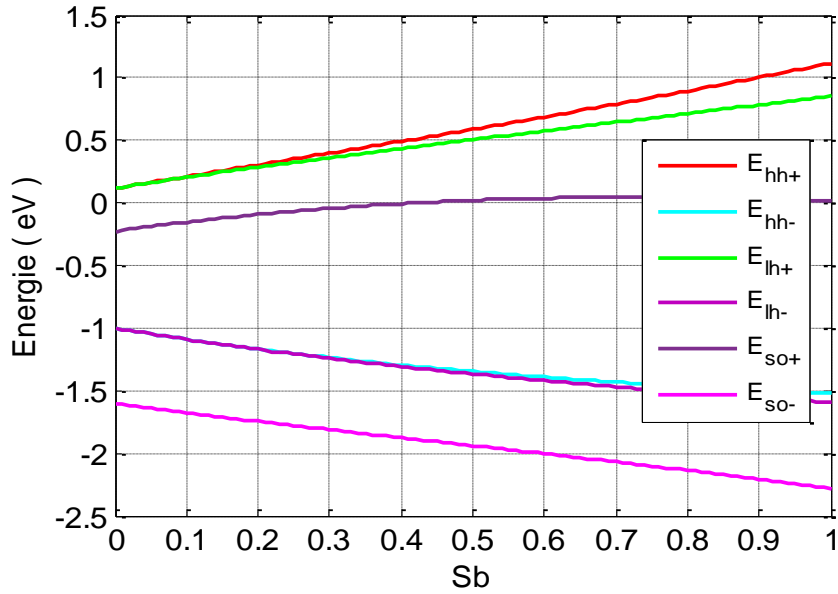


Figure 16 Taux de confinement en fonction de la concentration d'antimoine.

## II.6 L'effet de l'antimoine sur la bande de valence

La figure 17 présente la variation de l'énergie de la bande interdite dans le cas contraint avec éclatement. On remarque que l'énergie de la bande d'interdite sous l'effet de l'éclatement est faible par rapport à celle de sans éclatement. Alors on pourra optimiser l'énergie de la bande interdite pour ses applications en optoélectronique. Pour le cas d'éclatement on peut avoir des longueurs d'onde plus importantes.

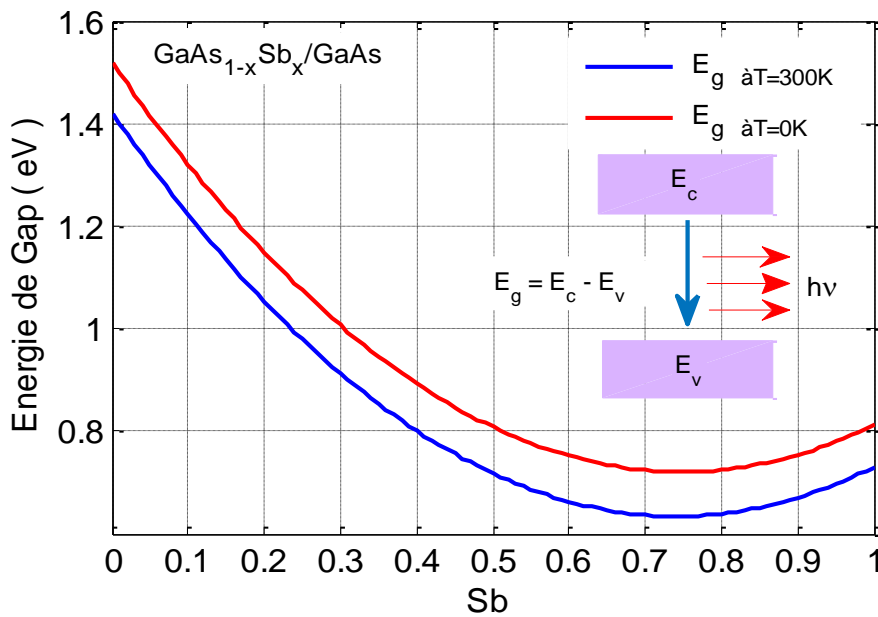


**Figure 17** L'effet de la concentration d'antimoine Sb sur l'énergie de la bande de valence des trous lourds, légers et spin orbite.

## II.7 L'énergie de la bande interdite

### II.7.1 L'énergie de la bande interdite sans contrainte à $T = 0K$ et $T = 300K$

La figure 18 illustre la variation de l'énergie de la bande interdite sans contrainte et sans éclatement en fonction de la concentration d'antimoine à  $T = 0K$  et à  $T = 300K$ . On remarque que l'énergie de la bande interdite à  $T = 0K$  est plus favorable qu'à  $T = 300K$ .

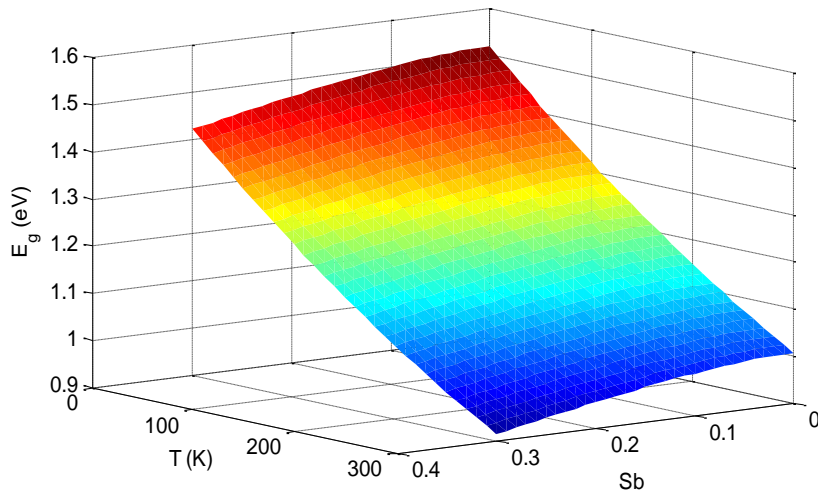


**Figure 18** L'évolution de l'énergie de la bande interdite non contrainte en fonction de la concentration d'antimoine Sb pour  $T = 300K$  et  $T = 0K$



## II.7.2 L'énergie de la bande interdite en fonction de la temperature

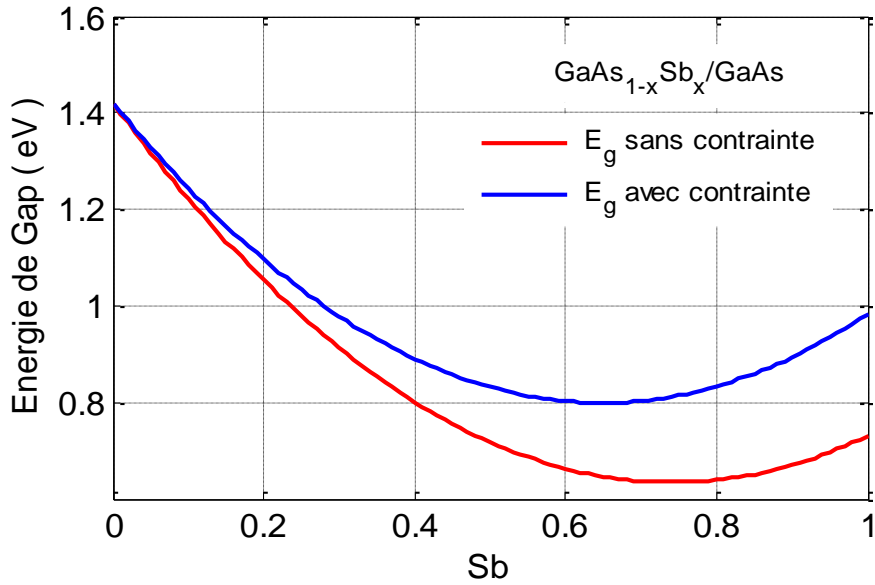
La figure 19 décrit l'évolution de l'énergie de la bande interdite de la structure GaAsSb / GaAs sans contrainte et sans éclatement en fonction de la concentration de l'antimoine et la température. On retient que l'énergie de la bande interdite est maximale à  $T = 0\text{K}$  et à  $x = 0\%$ , à une valeur de 1.159 eV. L'énergie de la bande interdite diminue fortement avec l'augmentation de la température et progressivement avec l'accroissement de la concentration de l'antimoine.



**Figure 19** Variation de l'énergie de la bande interdite sans contrainte sans éclatement en fonction de la température et la concentration de l'antimoine Sb

## II.7.3 L'énergie de la bande interdite avec contrainte et sans contrainte

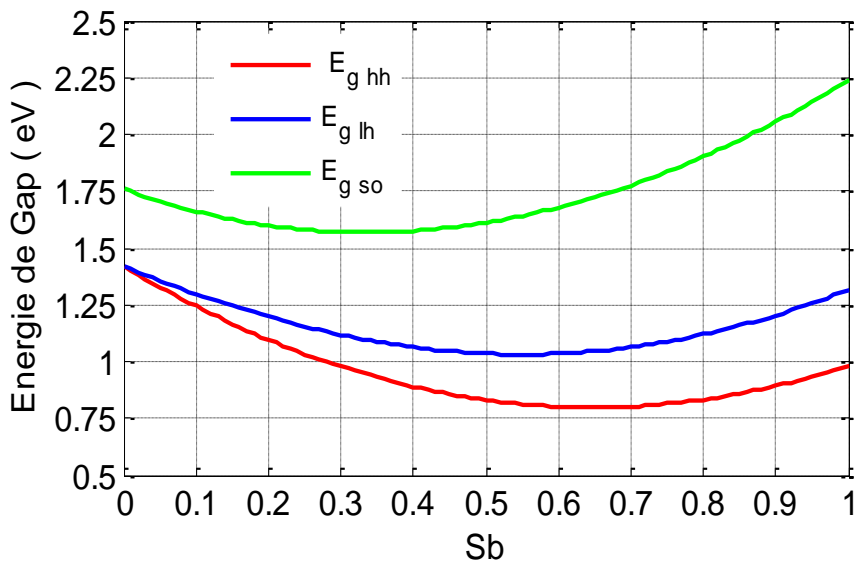
La figure 20 représente l'énergie de la bande interdite de la structure GaAsSb / GaAs avec et sans contrainte. On aperçoit que l'énergie de la bande interdite sans contrainte est inférieure à celle avec contrainte.



**Figure 20** Variation de l'énergie de la bande interdite contraint et non contraint à T=300K.

### II.7.4 L'énergie de la bande interdite avec contrainte

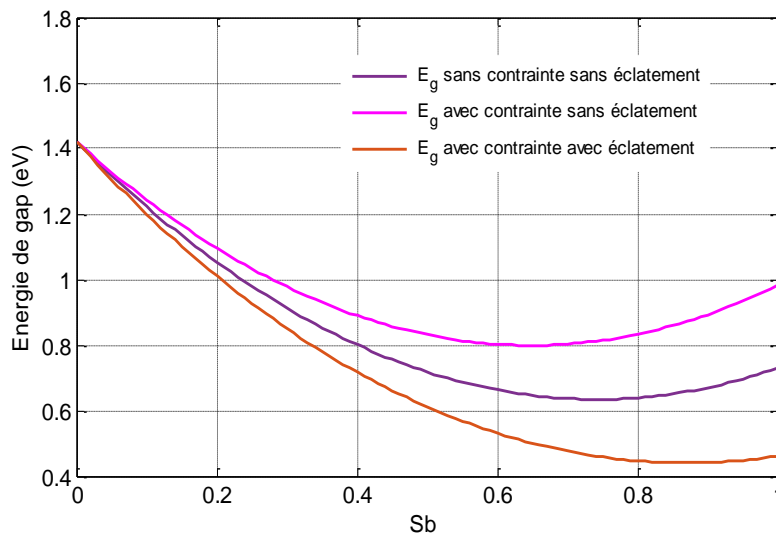
La figure 21 exprime l'évolution de l'énergie de la bande interdite pour les porteurs trous lourds, trous légers et spin orbite, avec contrainte, à T = 300K en fonction de la concentration de l'antimoine. On constate que l'énergie de la bande d'énergie des trous lourds est inférieure à celle des trous légers ce qui explique la contrainte compressive.



**Figure 21** L'énergie de la bande interdite des trous lourds, trous légers et spin orbite avec contrainte à T=300K.

## II.7.5 L'énergie de la bande interdite avec contrainte et avec éclatement

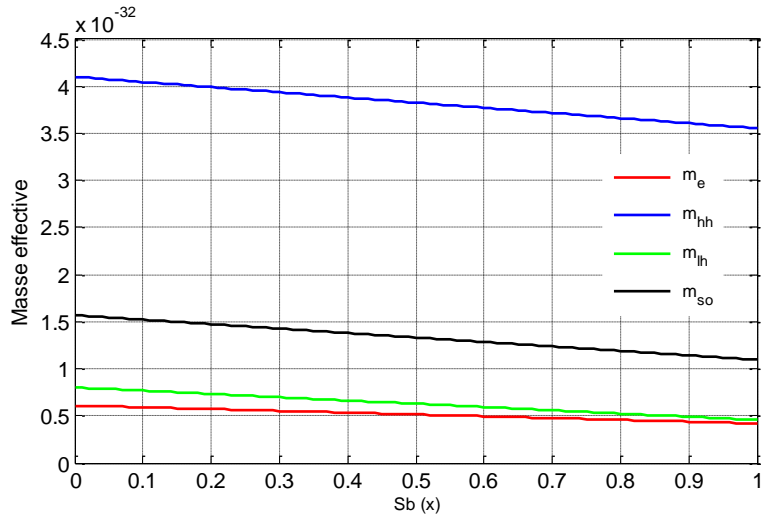
La figure 22 montre l'influence de la concentration d'antimoine sur l'énergie de la bande interdite sans contrainte sans éclatement, avec contrainte sans éclatement et avec contrainte avec éclatement à  $T=300K$ . On observe que l'énergie de la bande interdite sous l'effet de l'éclatement est faible par rapport à celle de sans éclatement. Alors pour le cas d'éclatement on peut avoir des longueurs d'ondes plus importantes donc on pourra optimiser l'énergie de la bande interdite pour des applications en optoélectronique.



**Figure 22** L'influence de la concentration d'antimoine Sb sur l'énergie de la bande interdite (non contraint sans éclatement, avec contrainte sans éclatement et contraint avec éclatement) à  $T=300K$ .

## II.8 Masses effectives

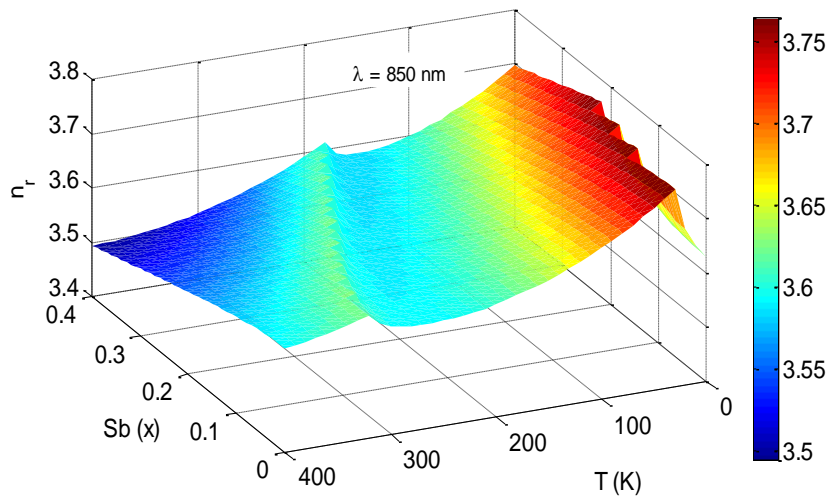
La figure 23 représente la variation des masses effectives des électrons, trous lourds, trous légers et spins orbite en fonction de la concentration de l'antimoine. La masse effective des trous lourds est plus importante par rapport aux autres masses effectives.



**Figure 23** Effet de la concentration d'antimoine Sb sur la masse effective des électrons, trous lourds, trous légers et spin orbite

## II.9 L'indice de réfraction

La figure 24 illustre la variation de l'indice de réfraction de la structure GaAsSb / GaAs en fonction de la concentration de l'antimoine et la température à une longueur d'onde fixe  $\lambda = 850 \text{ nm}$ . L'indice de réfraction varie de la valeur de 3.5 jusqu'à 3.75



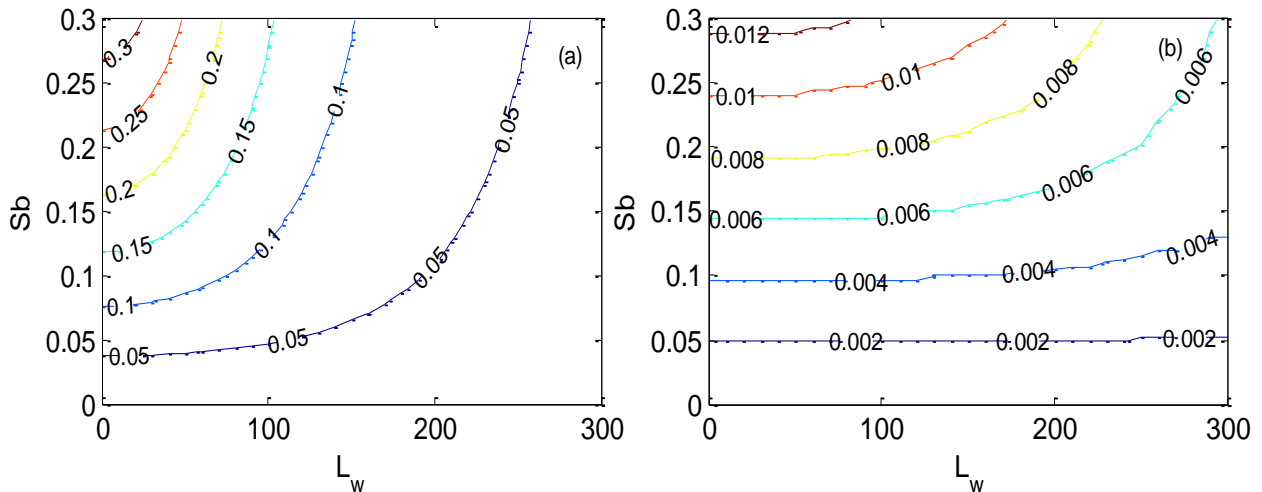
**Figure 24** La variation de l'indice de réfraction en fonction de la température et la concentration d'antimoine Sb

## II.10 L'énergie de quantification

En utilisant la méthode de dichotomie, nous avons résolu l'équation de Schrodinger afin d'obtenir les énergies de quantification des porteurs électrons et trous lourds.

## II.10.1 L'énergie de quantification sans contrainte sans éclatement

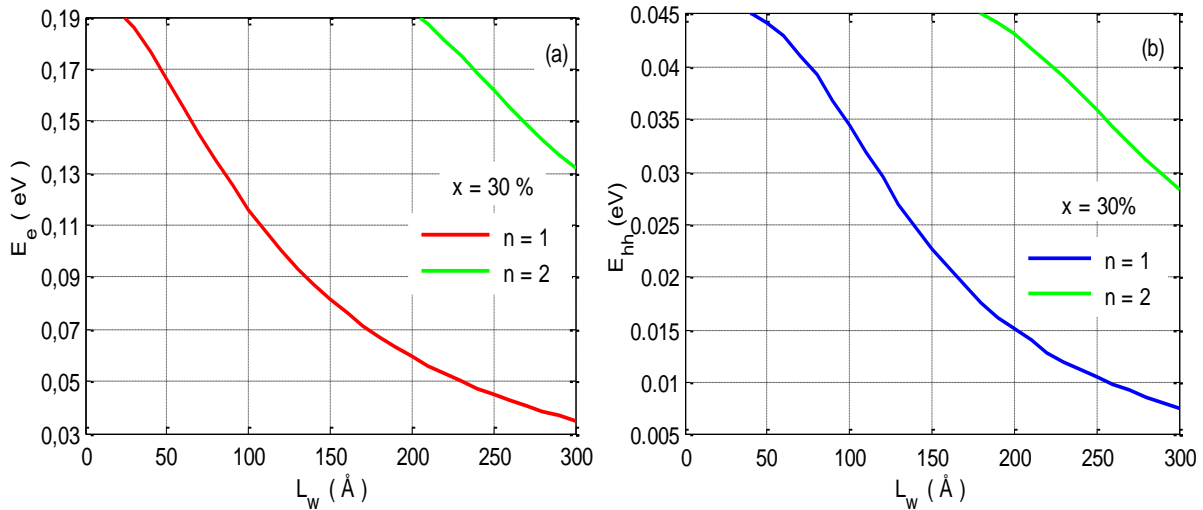
Les figures (25.a) (25.b) représentent la variation de l'énergie de quantification du premier niveau des porteurs des électrons et des trous lourds de la structure GaAsSb / GaAs sans contrainte et sans éclatement en fonction de l'épaisseur du puits et la concentration de l'antimoine. On remarque que l'énergie de quantification croît avec l'augmentation de la concentration de l'antimoine et décroît avec l'accroissement de l'épaisseur du puits.



**Figure 25** Variation de l'énergie de quantification, sans contrainte et sans éclatement, en fonction de l'épaisseur du puits et la concentration de l'antimoine Sb. **(a)** Porteurs électrons. **(b)** Porteurs trous lourds.

## II.10.2 L'énergie de quantification avec contrainte sans éclatement

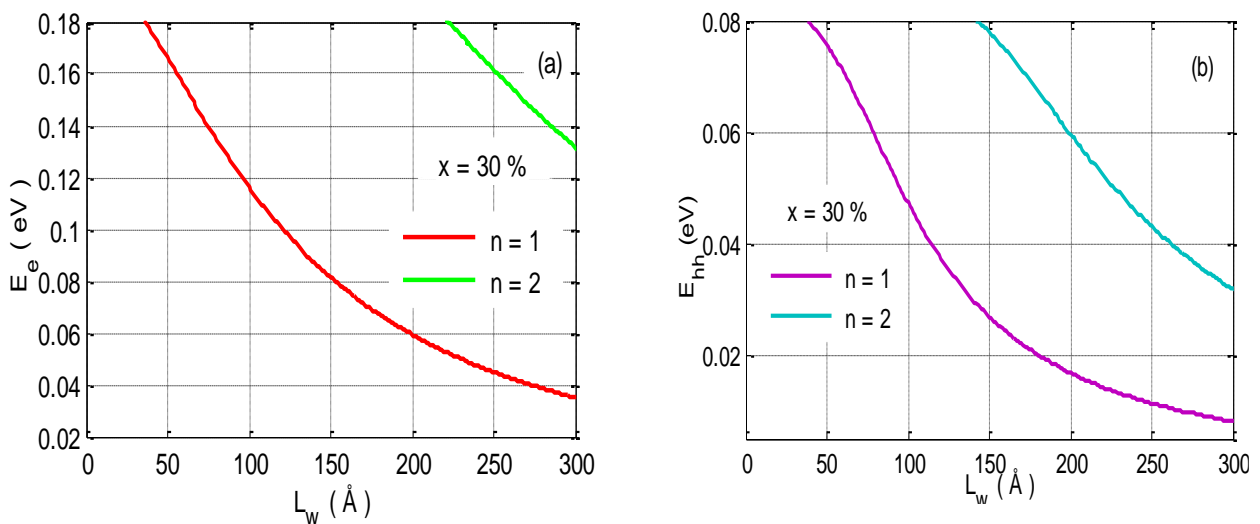
Les figures (26.a) (26.b) illustrent l'évolution de l'énergie de quantification des porteurs électrons et trous lourds de la structure GaAsSb / GaAs à puits quantique sans éclatement à une concentration d'antimoine de 30% et à  $T = 300\text{K}$ , en fonction de la largeur du puits. On remarque que l'augmentation de la largeur du puits influe négativement sur l'énergie de quantification des porteurs électrons et trous lourds. Cette étude nous a permis d'optimiser la largeur du puit et l'énergie de quantification.



**Figure 26** Variation de l'énergie de quantification, avec contrainte et sans éclatement, à une concentration de l'antimoine de 30 %, en fonction de l'épaisseur du puits. **(a)** Porteurs électrons. **(b)** Porteurs trous lourds.

### II.10.3 L'énergie de quantification avec contrainte avec éclatement

Les figures (27.a) (27.b) montrent la variation d'énergie de quantification des porteurs électrons et trous lourds de la structure GaAsSb / GaAs à puits quantique sans éclatement à une concentration d'antimoine de 30 % et à  $T = 300K$ , en fonction de la largeur du puits. On observe que l'augmentation de la largeur du puit diminue fortement l'énergie de la quantification.



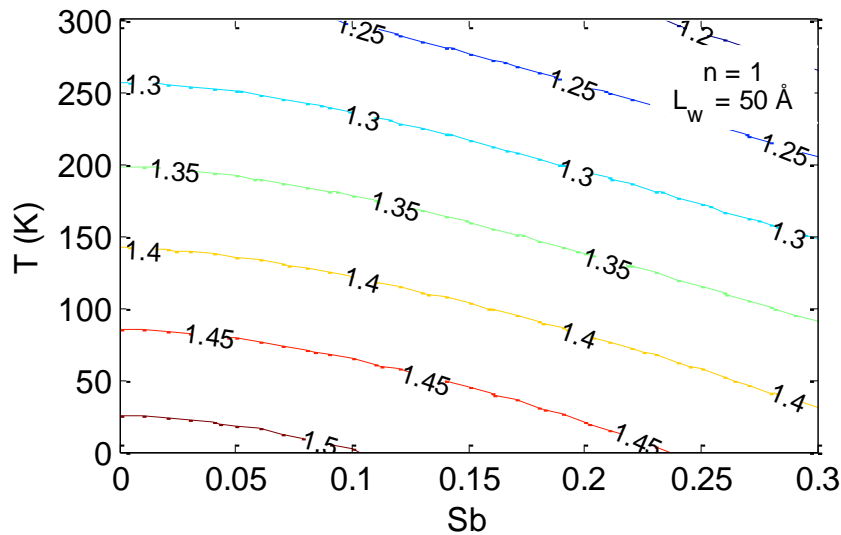
**Figure 27** Variation de l'énergie de quantification, avec contrainte avec éclatement, à une concentration de l'antimoine de 30 %, en fonction de l'épaisseur du puits. **(a)** Porteurs électrons. **(b)** Porteurs trous lourds.

### II.11 L'énergie de transition

Après avoir simulé les énergies de quantifications, on doit étudier les énergies de transitions possibles entre les porteurs électrons trous lourds afin d'optimiser les longueurs d'ondes.

### II.11.1 L'énergie de transition sans contrainte sans éclatement

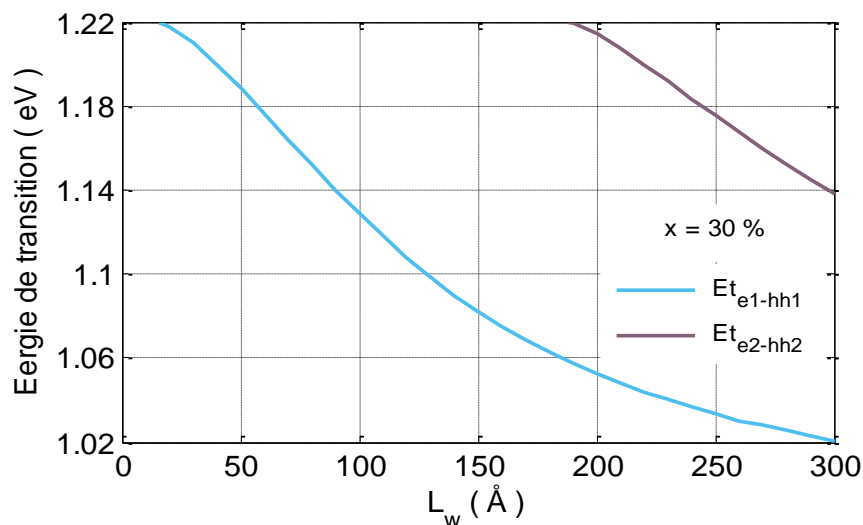
La figure (28) illustre la variation de l'énergie de transition du premier niveau sans contrainte et sans éclatement à une largeur du puits de 50 Å, en fonction de la température et la concentration de l'antimoine. On remarque de l'énergie de transition décroît avec l'augmentation de la température et la concentration de l'antimoine.



**Figure 28** L'évolution de l'énergie de transition du premier niveau, sans contrainte et sans éclatement, à une largeur du puits de 50Å.

### II.11.2 L'énergie de transition avec contrainte sans éclatement

La figure (29) exprime l'impact de l'épaisseur du puits quantique à base de GaAsSb / GaAs sur l'énergie de transition pour deux niveaux, à une concentration de 30 % et sans éclatement. L'augmentation de l'épaisseur provoque une diminution considérable dans l'énergie de transition.



**Figure 29** L'impact de l'épaisseur du puits sur l'énergie de transition avec contrainte et sans éclatement à une concentration de 30 %

### II.11.3 L'énergie de transition avec contrainte avec éclatement

La figure (30) montre la variation de l'énergie de transition pour deux niveaux, à  $T = 300\text{K}$  et une concentration de 30% avec l'éclatement en fonction de l'épaisseur du puits. On remarque une diminution importante de l'énergie de transition des deux niveaux.

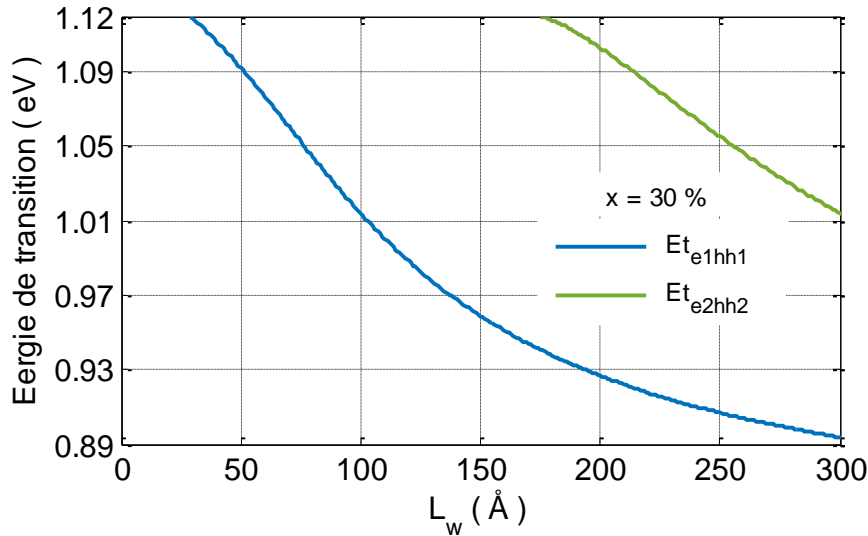


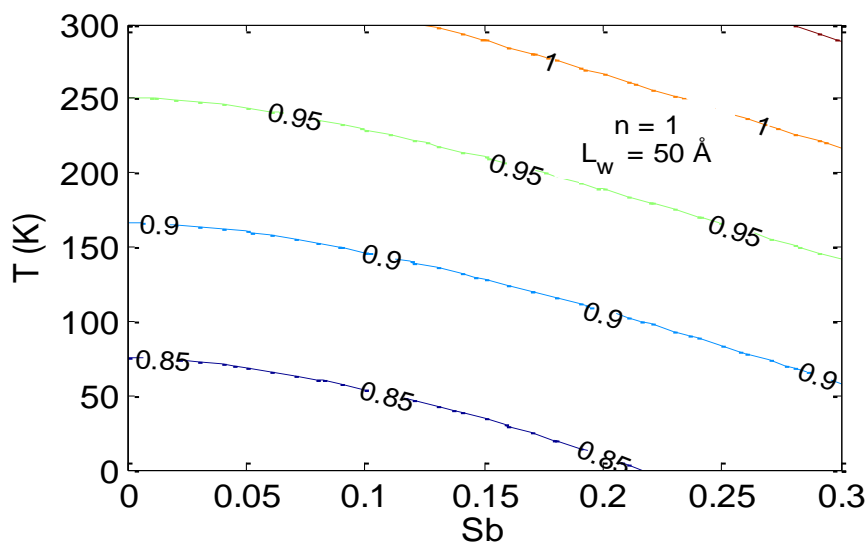
Figure 30 Variation de l'énergie de transition avec contrainte et avec éclatement à une concentration de 30 %, en fonction de l'épaisseur du puits.

## II.12 La longueur d'onde

### II.12.1 L'effet de la température et la concentration sur une longueur d'onde d'émission dans le cas non contraint et sans éclatement.

La figure (31) montre l'effet de la température et la concentration de l'antimoine à une épaisseur de  $50 \text{ \AA}$  sur la longueur d'onde d'émission d'un le puits quantique de la structure GaAsSb / GaAs sans contrainte et sans éclatement. Lorsque la concentration de l'antimoine et la température croissent, on observe une augmentation dans la longueur d'onde.

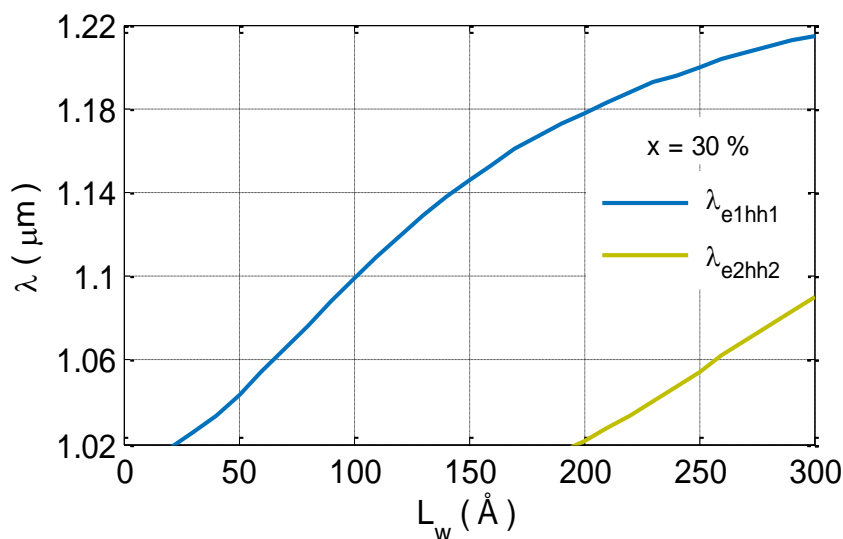




**Figure 31** L'effet de la température et la concentration de l'antimoine sur la longueur d'onde d'émission à une épaisseur de 50Å non contraint et sans éclatement.

## II.12.2 L'effet de la concentration d'antimoine sur la longueur d'onde dans le cas contraint sans éclatement

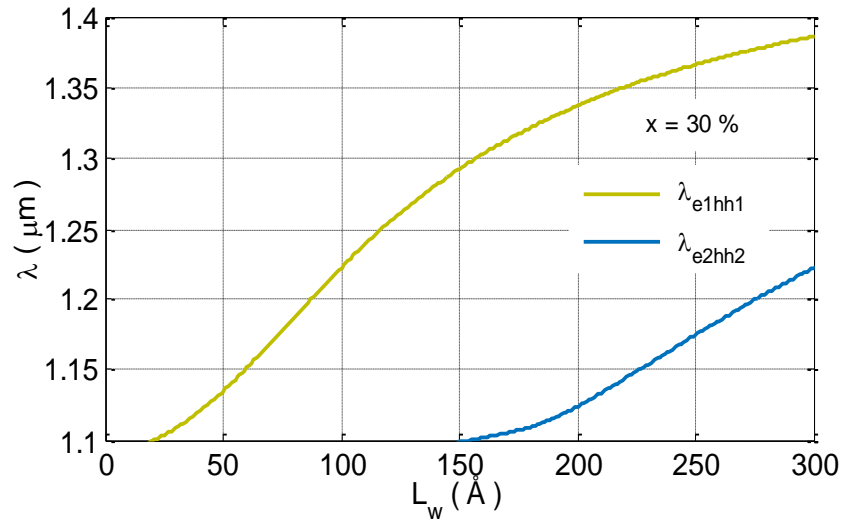
La figure (32) représente la variation de la longueur d'onde d'émission de la structure GaAsSb/GaAs à une concentration de 30 % et à  $T = 300\text{K}$  avec contrainte et sans éclatement en fonction de l'épaisseur du puits quantique. L'augmentation de la longueur du puits provoque une croissance importante dans la longueur d'onde.



**Figure 32** Variation de la longueur d'onde à une concentration de 30 %, dans le cas contraint sans éclatement, en fonction de l'épaisseur du puits

### II.12.3 L'effet de la concentration d'antimoine sur la longueur d'onde dans le cas contraint avec éclatement

La figure (33) illustre le développement de la longueur d'onde à une concentration de 30 % d'antimoine, à  $T = 300\text{K}$  avec l'éclatement en fonction de l'épaisseur du puits de la structure GaAsSb / GaAs. On remarque que l'augmentation de l'épaisseur du puits croît l'énergie de quantification.



**Figure 33** Variation de la longueur d'onde à une concentration de 30 % dans le cas contraint avec éclatement, en fonction de l'épaisseur du puits

### II.13 Conclusion

Dans notre travail, nous avons étudié les différents paramètres de la structure ternaire GaAsSb/GaAs afin d'optimiser les longueurs d'ondes d'émission. Nous avons commencé par les paramètres structuraux, on a déduit que la concentration de notre structure ne doit pas dépasser les 30% parce qu'au-delà de cette valeur la contrainte augmente et elle peut emmener à une dislocation au niveau de la structure. Ensuite l'étude de la bande interdite, on a conclu qu'on a une déformation compressive, que l'effet de l'éclatement sur la bande de valence de la couche active nous a permis d'avoir une diminution de l'énergie de la bande interdite donc une augmentation de l'énergie de quantification ce qui implique une large gamme de longueurs d'ondes. Notre simulation nous a permis d'obtenir des longueurs d'ondes dans le spectre infrarouge proche.

## **Conclusion générale**

L'objectif de ce travail est d'étudier les différents paramètres d'un puits quantique à base d'une structure ternaire GaAsSb sur le substrat GaAs afin d'optimiser la largeur de la gamme des longueurs d'ondes émises.

Notre travail a commencé par une recherche bibliographique où nous avons présenté les lasers à semi-conducteurs VCSEL, leurs avantages et leurs fonctionnements en basant sur le milieu active qui est constitué des semi-conducteurs III-V formants des puits quantiques. Nous avons ainsi déterminé les propriétés structurales, physiques et électroniques de ces puits quantiques. En deuxième lieu, nous avons présenté nos résultats des simulations des paramètres d'un puits quantique à base de notre structure GaAsSb / GaAs. En commençant par les paramètres structuraux, l'épaisseur critique de la couche active et l'indice de réfraction de notre matériau. Ensuite nous avons étudié l'effet de la température, la contrainte et l'éclatement sur l'énergie de la bande interdite, les énergies des quantifications et les énergies de transitions. Nous avons conclu notre travail par la simulation des longueurs d'ondes d'émissions.

Le travail qu'on a réalisé pourrait être complété et poursuivi sous différents aspects. En calculant le gain optique, le courant seuil ainsi que la puissance de la sortie.

## Annexe

Les paramètres physiques	GaAs	GaSb	GaN	InP
Paramètre de maille : a (Å)	5.65325	6.0959	4.50	5.8697
Coefficient d'élasticité : C11 (GPa)	1221	884.2	293	1011
Coefficient d'élasticité : C12 (GPa)	566	402.6	159	561
Energie de Gap à T = 0K : $E_{g0}$ (eV)	1.519	0.812	3.299	1.4236
Energie de Gap à T = 300K : $E_g$ (eV)	1.42	0.73	3,43	1.27
L'énergie moyenne de la bande de valence : $E_{v \text{ moy}}$ (eV)	-6.92	-6.25	-6.5	-7.04
L'énergie de spin orbite : $\Delta_0$ (eV)	0.341	0.76	0.017	0.108
Potentiel hydrostatique de déformation de la bande de valence : $a_v$ (eV)	-1.16	-0.8	-5.2	-0.6
Potentiel hydrostatique de déformation de la bande de conduction : $a_c$ (eV)	-7.17	-7.5	-2.2	-6
Potentiel de déformation tétragonale : b (eV)	-2	-2	-2.2	-2
Masse effective des électrons : $m_e$	0.067	0.046	0.15	0.0795
Masse effective des trous lourds : $m_{lh}$	0.45	0.39	1.3	0.56
Masse effective des trous légers : $m_{lh}$	0.088	0.05	0.19	0.12
Coefficient de Vershni : $\alpha$ (meV/K)	0.54	0.417	0.593	0.363
Coefficient de Vershni : $\beta$ (K)	204	140	600	162

## Bibliographie

- [1] S. Sakai, Y.Ueta et Y.Terauchi, «Band Gap Energy and Band Lineup of III-V Alloy Semiconductors Incorporating Nitrogen and Boron,» The Japan Society of Applied Physics, vol. 32, n°110R, p. 4413, 1993.
- [2] C.Kitahara, H.Soda, K.Iga et Y.Suematsu, «GaInAsP/InP surface emitting injection lasers,» Journal of Applied Physics, vol. 18, pp. 2329-30, 1979.
- [3] K. Tai , G. Hasnain et JD Wynn, «90% coupling of top surface emitting GaAs/AlGaAs quantum well laser output into 8  $\mu\text{m}$  diameter core silica fibre,» Electronics Letters, vol. 26, n° 119, pp. 1628-1629, 1990.
- [4] J.-Y. DUBOZ, «Matériaux semi-conducteurs à grand gap III-V à base de GaN,» 1999.
- [5] M.A Herman, W.Richter et H.Sitter, Epitaxy. Physical principles and technical implementation, Springer, 2004.
- [6] R.People et J.C Bean, «Determination of the critical layer thickness of  $\text{Si}(1-x)\text{Ge}(x)/\text{Si}$  heterostructures by direct observation of misfit dislocations,» Appl. Phys. Lett., vol. 52, p. 380, 1988.
- [7] S. Chuang, Physics of optoelectronic devices, New-York: Pure and Applied optics, 1995.
- [8] Yan Zhang, Yongqiang Ning, Lisen Zhang, Jinsheng Zhang, Jianwei Zhang, Jian Zhang, Yugang Zeng et Lijun Wang, «Design and comparison of GaAs, GaAsP and InGaAlAs quantum-well active regions for 808-nm VCSELs,» Optics Express, vol. 19, n° %113, 2011.
- [9] I. Vurgaftman et JR Meyer, «Band parameters for III–V compound semiconductors and their alloys,» American Institute of Physics, vol. 89, p. 5815, 2001.
- [10] T.Y. Wang et G.B Stringfellow, «Strain effects on  $\text{Ga}(x)\text{In}(1-x)\text{As}/\text{InP}$  single quantum wells grown by organometallic vaporphase epitaxy with  $0 < x < 1$ ,» Journal of Applied Physics, vol. 67, pp. 344 - 352, 1990.
- [11] A. Aissat, F. Kerkar, S. Nacer, M. El Bey et K. Ferjani, «Gain optique d'un laser a puits quantique contraint à base de  $\text{Ga}(x)\text{In}(1-x)\text{N}(y)\text{As}(1-y)/\text{GaAs}$ ,» chez Sciences of Electronic, Technologies of Information and Telecommunications, Tunisia, 2007.
- [12] Kuang-l Lin, Kuo-Lung Lin, Bo-Wei Wang, Hao-Hsiung Lin et Jenn-Shyong Hwang, «Double-band anticrossing in  $\text{GaAsSbN}$  induced by nitrogen and antimony incorporation,» Applied Physics Express, vol. 6, n°1121202, 2013.
- [13] C. é. i. Dic. Phys., «Mathématiques. Fonctions : concepts mathématiques liés aux ondes,» Suisse, IEC 60050 Vocabulaire électrotechnique international, 2009, p. 103.

