

الجمهورية الجزائرية الديمقراطية الشعبية

République Algérienne démocratique et populaire

وزارة التعليم العالي والبحث العلمي  
Ministère de l'enseignement supérieur et de la recherche scientifique

جامعة سعد دحلب البليدة  
Université SAAD DAHLAB de BLIDA

كلية التكنولوجيا  
Faculté de Technologie

قسم الإلكترونيك  
Département d'Électronique



## Mémoire de Projet de Fin d'Études

pour l'obtention du diplôme de Master en Électronique option

Micro-optoélectronique

Thème

# Etude et calcule le gain optique d'une structure à puits quantique à base d'InGaN/GaN

présenté par

**Salma mustapha**

&

**Zmite mohamed**

Proposé par : Mr Aissat

# dédicas

*À mes très chers parents qui ont toujours été là pour moi,*

*A mon frère amine*

*A ma sœur*

*A ma marie*

*A tout ma famille*

*A mon binôme mohamed*

*A tous mes camarades de l'option MOP et surtout raggaz,  
karkar, ifrak, rida, abdou ; et A khadidja, , de promo M1  
MOP 2014*

*A mes amie mohamed, ali, youcef, tofik, rida, mohamed  
, amine , Abdelkadar*

*mustapha*

# dédicas

*À mes très chers parents qui ont toujours été là pour  
moi,*

*A mon frère amine*

*A ma sœur*

*Pour mon père , décédé*

*A Mon frère Bilal décédé*

*A tout ma famille*

*A mon binôme mustapha*

*A tous mes camarades de l'option MOP et surtout  
raggaz, karkar, ifrak, rida, abdou ; et A khadidja ,  
de promo M1 MOP 2014*

*A mes amie mohamed, ahmed, youcef,  
Ismail, rida, mohamed , Zoubir, tarek , amine*

*mohamed*

# *Remerciement*

---

*Nous Remercions, En Premier Lieu, ALLAH Qui A Fait Que Nous Soyons Des Musulmans Et Qui A Illuminé Notre Chemin De La Lueur Du Savoir Et De La Science et qui nous a donné la force et la patience pour terminer ce travail.*

*Nous remercions aussi non parents pour leur encouragement et leur soutenir dans les moments difficiles.*

*Nous tenons à remercier notre promoteur Monsieur Aïssat Abdelkader , pour ses précieux conseils et son aide durant toute la période du travail.*

*Nous tiens à remercier Monsieur el Bessghi Mourad, pour son aide durant toute la période du travail.*

*Nos vifs remerciements vont également aux membres du jury pour l'intérêt qu'ils ont porté à notre recherche en acceptant d'examiner notre travail et de l'enrichir par leurs propositions.*

*Nos remerciements vont aussi à tous ceux et celles qui ont participé de près ou de loin à l'élaboration de le présente mémoire sur tout m.wafa et Abdelkadare.*

# Table des matières

## Introduction général

### Chapitre 1

#### I) Les matériaux semi-conducteurs III-V

1.1 Introduction.....	3
1.2 Définition de semi-conducteurs III-V.....	5
1.2.1 Les composés binaires.....	6
1.2.2 Les composés ternaires et quaternaires.....	7
1.3 L'intérêt des nitrures d'éléments III en optoélectronique.....	8
1.4 Caractéristiques structurelles.....	9
1.4.1 Les systèmes cristallins.....	9
1.4.2 Les alliages.....	9
1.4.3 Les hétérostructures.....	9
a-Hétérostructures de type I.....	10
b-Hétérostructure de type II.....	10
1.4.4 Le Gap.....	11
a - semi conducteur a gap direct.....	11
b - semi conducteur a gap indirect.....	11
C- Bandes interdites des principaux composés semi-conducteurs.....	12
1.5 La masse effective.....	13
1.5.1 Masse effective des électrons.....	13
1.5.2 Masse effective des trous.....	14

1.6 Notion de contrainte.....	15
1.6.1 Effet de la contrainte.....	15
1.6.2 Épaisseur critique.....	17
1.7 Détermination des paramètres.....	18
1.7.1 Loi de Vegard.....	18
1.8 Notion sur les puits quantiques.....	18
1.8.1 Les puits quantiques.....	18
1.8.2 Spectre d'énergie.....	20
puits a profondeur finie.....	22
puits a profondeur infinité.....	26
1.9 CONCLUSION.....	28
<b>II) études de la structure a puits quantique a base de InGaN/GaN</b>	
1.2.1 Description du nitrure d'Indium-Gallium.....	29
1.2.1.1 Caractéristiques structurelles.....	29
a. Structure cristalline.....	29
b. Polarisation interne et piézoélectricité.....	31
c) Polarisation interne et piézoélectricité.....	31
Polarisation interne.....	31
Polarisation piézoélectrique.....	32
1.2.1.2 Propriétés électriques.....	33
Diagramme d'énergie.....	33
Niveau de Fermi.....	34
Densité d'état.....	34

Gap d'énergie interdite dans les nitrures.....	36
Evolution du gap d'énergie dans l' $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ .....	37
Evolution du gap d'énergie interdite en fonction de la température.....	38
Mobilité des porteurs dans les nitrures.....	41
Longueur de diffusion.....	41
1.2.2 Croissance et propriété d' $\text{InGaN}$ .....	43
1.2.2.1 La croissance d' $\text{InGaN}$ .....	43
1.2.2.2 L'ENERGIE DE LA BANDE INTERDITE D' $\text{InGaN}$ .....	44
1.2.2.3 LES PUIT QUANTIQUES $\text{InGaN}/\text{GaN}$ .....	45
1.2.2.4 Déformation et contrainte dans les puits quantique.....	46
1.2.3 Conclusion.....	47
<b>Chapitre 2 : résultat et simulation</b>	
2.1 Introduction.....	48
2.2 Paramètre de maille.....	48
2.3 Les masses effectives.....	49
2.4 L'épaisseur critique.....	50
2.5 Spin-Off des trous de l' $\text{InGaN}$ contraint en fonction de $x$ .....	51
2.6 Energie de bande interdite.....	52
2.7 Energie de bande interdite des trous lourds (hh) et légers (lh).....	53
2.8 Les déformations bi-axial et uni-axial.....	54
2.9 Décalage de la bande de conduction et de valence.....	55
2.10 Calcul de l'énergie de quantification.....	55
2.11 Evolution de l'énergie de transition en fonction de la largeur du puits.....	59
2.12 Calcul de la longueur d'onde.....	63

2.13 Conclusion.....	68
----------------------	----

### **Chapitre 3 : calcul du gain optique**

3.1 Introduction.....	69
3.2 Généralités sur les lasers à semi-conducteurs.....	69
3.3 Pseudo niveau de Fermi.....	70
3.4 Coefficients de gain optique.....	73
3.5 Gain modal.....	75
3.6 Longueur d'onde d'émission en fonction de la largeur du puits.....	75
3.7 Variation de la longueur d'onde en fonction de la température.....	77
3.8 Variation du gain en fonction de la température.....	77
3.9 La couche active.....	77
3.10 Résultat et simulation.....	78
3.12 Conclusion.....	81
Conclusion général.....	82
Bibliographie.....	83







## Liste des tableaux

### Chapitre 1

#### I) Les matériaux semi-conducteurs III-V

Tableau 1.1 Tableau périodique partiel [1].....	5
Tableau 1.2 Paramètres des principaux composés binaires III-V [3].....	6

#### II) études de la structure a puits quantique a base de InGaN/GaN

Tableau 1.2.1 Paramètres structuraux a,c et u pour le GaN et l'InN [23,24].....	30
Tableau 1.2.2 Les valeurs de la polarisation spontanée du GaN et InN [15].....	32
Tableau 1.2.3 Constantes piézoélectriques pour le GaN et l'InN[17].....	33
Tableau 1.2.4 Paramètres de Varshni et gap d'énergie à 0 K et 300 k du GaN et de l'InN.[29][30].....	40
Tableau1. 2.5 Résumé des propriétés électriques du GaN et de l'InN à 300 K.[17].....	43

# Liste des figures

## Chapitre 1 :

### I) généralité sur les semi-conducteur

Figure 1.1 Schéma théorique représentant les bandes d'énergie dans un métal, un semi-conducteur et un isolant.....	3
Figure 1.2 Bande interdite de divers composés semi-conducteurs en fonction de leur paramètre de maille [7].....	8
Figure 1.3.a hétérostructure de type I .....	10
Figure 1.3.b hétérostructure de type II .....	10
Figure 1. 4 Structure de bande schématique d'un semi-conducteur à gap direct (a) et à gap indirect (b).....	11
Figure 1.5 Evolution du paramètre de maille cristalline et d'énergie de bande des alliages composés III-V et II-VI[10].....	12
Figure 1.6 Structures non contraintes (avant dépôt)[10].....	16
Figure 1.7 Structures contraintes [10].....	16
Figure 1. 8 Représentation schématique de la structure de bande d'un matériau SC (a) non contraint, (b) contrainte compressive, (c) contrainte en tension.....	17
Figure 1.9 Structure schématique d'un puits quantique [12].....	19
Figure 1.10 Structure des bandes dans un puits quantique.....	21
Figure 1. 11 Niveau d'énergie et fonction d'ondes dans le puits quantique de profondeur finie.....	25
Figure 1. 12 Structure de sous-bandes d'énergie niveaux discrets du puits suivant une dimension (direction de croissance) et courbes de dispersion dans le plan de la structure.....	27

## II) études de la structure a puits quantique à base de InGaN/GaN

Figure 1.2.1 Structure wurtzite, exemple du GaN.....	30
Figure 1.2.2 Structure cubique zinc-blende, exemple du GaN [22].....	30
Figure 1.2.3 schéma de la structure de bande.....	31
Figure 1.2.4 Diagramme des énergies pour un matériau. $q$ est la charge élémentaire, $V$ le potentiel électrostatique pouvant régner dans le matériaux, $\chi$ l'affinité électronique, $\Phi$ le travail de sortie et $\phi$ le potentiel d'ionisation [18].....	33
Figure 1.2.5 Schéma du diagramme de bande dans l'espace réciproque à 0 K. La bande de valence est remplie par les électrons et aucun électron ne se trouve dans la bande de conduction [18].....	35
Figure 1.2.6 Diagramme de la bande du GaN. Le maximum de la bande de valence est pris comme le 0 des énergies. Le gap d'énergie interdite correspond à la partie grisée [20].....	36
Figure 1.2.7 Diagramme de bande de l'InN. Le maximum de la bande de valence est pris comme le zéro des énergies. Le gap d'énergie interdite correspond à la partie grisée [20].....	37
Figure 1.2.8 Evolution du gap d'énergie de GaN en fonction de la température. Les courbes A, B et C font référence aux excitons du même nom [27].....	39
Figure 1.2.9 Evolution du gap d'énergie pour InN en fonction de la température. Les données expérimentales de photoluminescence sont également montrées [28].....	39
Figure 1.2.10 : Influence de la température sur la variation de l'énergie de la bande interdite en fonction de la fraction molaire de l'Indium.[39].....	40
Figure 1.2.11 Mobilité des porteurs libres dans In <sub>1-x</sub> Ga <sub>x</sub> N en fonction de la température [31].....	41
Figure 1.2.12 Longueur de diffusion des trous dans GaN en fonction de la concentration d'électrons [32].....	42
Figure 1.2.13 puits quantique InGaN/GaN.....	45
Figure 1.2.14 structures d'hétéro épitaxies accordées en maille, contrainte et relaxée [38].....	56

## Chapitre 2 : résultat et simulation

Figure 2.1 variation de paramètre de maille en fonction de la concentration de X.....	48
Figure 2.2 variation de la masse effective en fonction de la concentration ( $x$ ).....	59

Figure 2.3 épaisseur critique en fonction de la concentration $x$ d'indium.....	50
Figure 2.4 Spin-Off des trous lourds (hh) et légers (lh) du InGaN contrain en fonction de $x$ .....	51
Figure 2.5 Energie de bande interdite pour $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ contrainte sur GaN et non contrainte en fonction de la concentration $x$ de l'indium.....	52
Figure 2.6 Energie de bande interdite des trous lourds (hh) et légers (lh) du InGaN contraint en fonction de $x$ .....	53
Figure 2.7 Les déformations bi-axial et uni-axial.....	54
Figure 2.8 décalage de la bande de conduction et de valence.....	55
Figure 2.9 Energie de quantification des cinq premiers niveaux des électrons en fonction de la Largeur de puits pour $x=0.2$ .....	56
Figure 2.10 Energie de quantification des trous lourds des cinq premiers niveaux pour $x=0.2$ .....	57
Figure 2.11 Energie de quantification des trous légers des cinq premiers niveaux pour $x=0.2$ .....	56
Figure 2.12 Energie de quantification de premier niveau en fonction de la largeur de puits pour $x=0.2$ .....	58
Figure 2.13 Energie de quantification de premier niveau en fonction de la largeur de puits pour $x=0.45$ .....	59
Figure 2.14 Energie de transition « électrons - trous lourds » et « électrons – trous -légers » de premier niveau pour $x=0.20$ .....	60
Figure 2.15 Energie de transition « électrons - trous lourds » et « électrons – trous -légers » de premier niveau pour $x=0.45$ .....	60
Figure 2.16 Energie de transition « électrons - trous lourds » et de Cinq premiers niveaux pour $x=0.2$ .....	61
Figure 2.17 Energie de transition « électrons - trous légers » de Cinq premiers niveau pour $x=0.2$ .....	62
Figure 2.18 Energie de transition « électrons -trous lourds » en fonction de la largeur de puits pour défèrent valeur de concentration de $x$ .....	63

Figure 2.19 Variation de la longueur d'onde des trous lourds(hh) et trous légers(lh) en fonction de la largeur de puits pour $x=0.2$ .....	64
Figure 2.20 Variation de la longueur d'onde en fonction de la concentration pour $x=0.2$ .....	65
Figure 2.21 Variation de la longueur d'onde pour différents valeurs de concentration $x$ .....	66
Figure 2.22 Les valeurs de concentration $x$ pour une longueur d'onde $0.45 \mu\text{m}$ .....	67
Figure 2.23 Les valeurs de concentration $x$ pour une longueur d'onde $0.5 \mu\text{m}$ .....	67

### Chapitre 3 : calcul du gain optique

Figure 3.1 Diagramme schématisé d'un milieu actif placé dans un résonateur optique constitué de deux miroirs.....	70
Figure 3-2 : Gap effectif d'une structure à puits quantique.....	72
Figure 3.3 : Gap effectif d'une structure à puits quantique.....	76
Figure 3.4 structure PIN d'un seul puits quantique.....	78
Figure 3.5 Variation du gain optique en fonction de la longueur d'onde pour différentes injections des porteurs pour une largeur de $50 \text{ \AA}$ .....	78
Figure 3.6 variation du gain optique en fonction de la longueur d'onde pour différentes injections des porteurs $N \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ pour une largeur du puits quantique de $70 \text{ \AA}$ .....	79
Figure 3.7 Variation du gain optique en fonction de la longueur d'onde pour différentes largeurs du puits quantique avec $T=300\text{K}$ .....	80
Figure 3.8 Variation du gain optique en fonction de la longueur d'onde pour différentes températures.....	81

## Listes des acronymes et abréviations

$h$  : Constante de Planck

$\lambda$ : Longueur d'onde

$\epsilon$  : Constante de déformation.

$\epsilon_{//}$  : Constante de déformation dans le plan de croissance.

$\epsilon_{\perp}$  : Constante de déformation dans la direction de croissance.

$a_e$  : Paramètre de maille de la couche épitaxie.

$a_s$  : Paramètre de maille de substrat.

$C_{ij}$  : Constante d'élasticité.

$L_p$ : Largeur de puits.

$L_c$ : Epaisseur critique.

$V$  : Potentiel du puits quantique.

$\hbar$  : Constante de Planck réduite.

$\Psi$  : Fonction d'onde.

$\Delta_0$  : Energie de couplage spin orbite.

$b$  :Le potentiel de déformation de cisaillement.

$a_c$  :Le potentiel de déformation hydrostatique de la bande de conduction.

$a_v$  : Le potentiel de déformation hydrostatique de la bande de valence.

$\Delta E_c$  : Bande offset de la bande de conduction.

$\Delta E_v$  : Bande offset de la bande de valence.



$\Delta\Omega/\Omega$  : Le changement relatif du volume.

$M_e$  : masse effective des électrons.

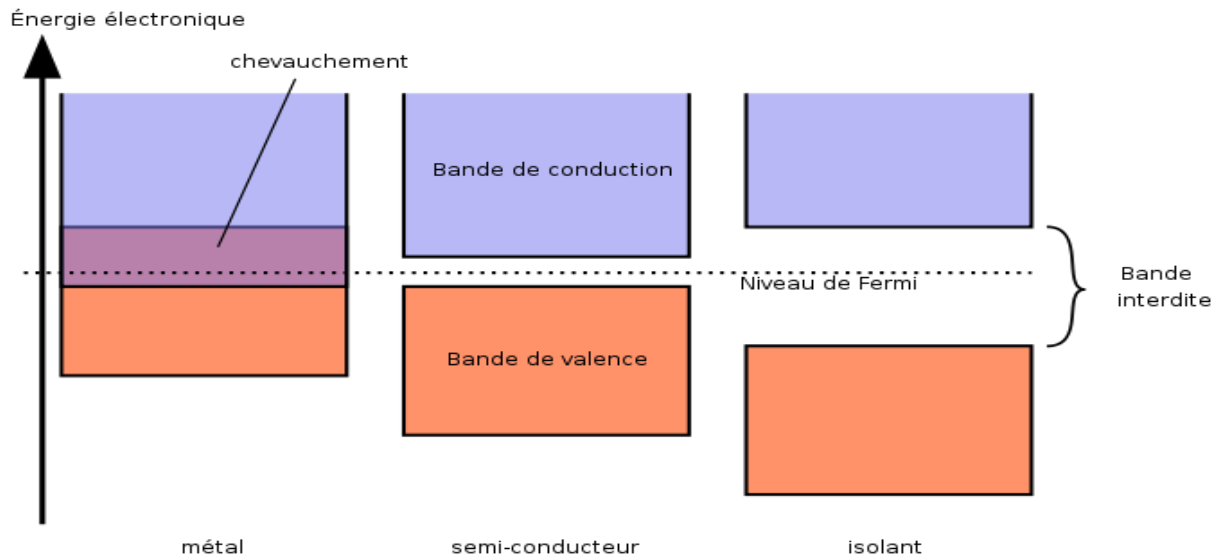
$M_{hh}$  : masse effective des trous lourds.

$M_{lh}$  : masse effective des trous légers.

## I) généralité sur les semi-conducteurs

### 1.1 Introduction

On différencie trois types de matériaux : les isolants, les conducteurs et les semi-conducteurs. Ceux-ci sont intermédiaires entre les métaux et les isolants : à  $T=0K$  un semi-conducteur se comporte comme un isolant. Néanmoins, il conduit l'électricité dès que la température augmente. La résistivité des semi-conducteurs varie entre  $10^{-3} \Omega \cdot \text{cm}$  et  $10^{-9} \Omega \cdot \text{cm}$ , alors que celle des métaux est de l'ordre de  $10^{-6} \Omega \cdot \text{cm}$  et celle des isolants peut atteindre  $10^{22} \Omega \cdot \text{cm}$ . Dans un semi-conducteur il existe deux types de conduction : la conduction par électron et la conduction par trou. Lorsque dans un cristal certaines liaisons entre atomes se cassent, les électrons sont libres de se déplacer, l'emplacement de liaison cassée est appelé trou. Sous l'effet du champ électrique les électrons se déplacent dans le sens inverse du champ et les trous se déplacent dans le sens de champ



**Figure 1.1** Schéma théorique représentant les bandes d'énergie dans un métal, un semi-conducteur et un isolant [1]

Il y a une très grande variété de semi-conducteurs

Les SC peuvent être monocristallins, poly cristallins ou amorphes (il suffit de la présence de courtes chaînes d'atomes pour obtenir le caractère SC)

Pour les semi-conducteurs, le taux de remplissage de la dernière bande occupée est soit très faible soit très important. La hauteur de la bande interdite est faible ( $\gg 1$  eV).

La conduction est faible et varie beaucoup avec la température. Pour le silicium et le germanium, on mesure à 300 K :

$r_{Si} = 2400 \text{ W.m}$  ;  $r_{Ge} = 0,5 \text{ W.m}$

Dans l'ensemble des matériaux, les semi-conducteurs constituent une classe bien définie, avec des propriétés physiques particulières qui sont sources d'intérêt au plan de la connaissance fondamentale et à celui des applications. Ces deux facteurs indissociables font l'importance de ces matériaux, malgré le nombre limité d'élément et de composés semi-conducteurs.

Principalement remarquables par leurs propriétés électroniques, les semi-conducteurs interviennent dans presque tous les équipements électroniques et optiques. La plus grande partie des composants (transistors, diodes, et ce qu'on appelle puce en générale) sont réalisés en silicium qui joue un rôle prépondérant, sa technologie et sa connaissance théorique ont atteint des niveaux inégalés.

En électronique rapide et en optoélectronique, les propriétés du silicium sont insuffisantes (mobilités des porteurs relativement petites et transitions électroniques indirectes au seuil d'absorption optique). Dans de telles applications, les composés semi-conducteurs III-V sont préférables. Les propriétés de ces matériaux sont très intéressantes pour les performances de ces dispositifs.

Parmi ces semi-conducteurs, on trouve principalement le nitrure de gallium-indium (InGaN) qui est au centre de ce travail. Ce matériau est un semi-conducteur faisant partie de la catégorie des nitrures-III, c'est-à-dire, composé d'azote et d'éléments de la colonne III du tableau de Mendeleïev, à savoir le bore, l'aluminium, le gallium, l'indium et le thallium, voir tableau 1.1. Le nitrure de gallium-indium est un alliage entre le nitrure de gallium (GaN) et le nitrure d'indium (InN). C'est pourquoi, nous allons principalement définir les semi-conducteurs III-V puis décrire les propriétés de ces deux alliages binaires (GaN) et (InN), pour ensuite décrire les propriétés de l'InGaN qui en découlent.

## 1.2 Définition de semi-conducteurs III-V

Les matériaux semi-conducteurs III-V sont des corps composés formés à partir d'un élément de la colonne III et d'un élément de la colonne V du tableau de la classification périodique de Mendeleïev (tableau 1.1). Ainsi de nombreux composés binaires, ternaires et quaternaires peuvent être réalisés.

	III	IV	V	VI
	5 B Bore	6 C Carbone	7 N Azote	8 O Oxygène
	13 Al Aluminium	14 Si Silicium	15 P Phosphore	16 S Soufre
30 Zn Zinc	31 Ga Gallium	32 Ge Germanium	33 As Arsenic	34 Se Sélénium
48 Cd Cadmium	49 In Indium	50 Sn Étain	51 Sb Antimoine	52 Te Tellure
80 Hg Mercure	81 Tl Thallium	82 Pb Plomb	83 Bi Bismuth	84 Po Polonium

**Tableau 1.1** Tableau périodique partiel [1].

### 1.2.1 Les composés binaires

Parmi tous les composés binaires possibles, tous n'ont pas le même intérêt potentiel. L'étude de leurs propriétés, et en particulier de la structure de bandes montre que les éléments les plus légers donnent des composés dont laquelle la bande interdite est large et indirecte, et dans laquelle la masse effective des électrons est élevée. Les composés contenant du bore, de l'aluminium ou de l'azote entrent dans cette catégorie ; ils ont en général peu d'intérêt pour l'électronique rapide [1], qui demande des semi-conducteurs à forte mobilité de porteurs ou pour l'optoélectronique ou une structure de bande directe est nécessaire pour que les transitions optiques soient efficaces [1]. A l'autre extrémité, les éléments lourds comme le thallium ou le bismuth donnent des composés à base de Gallium (GaAs, GaSb) ou d'indium (InP, InAs, InSb) dont les propriétés sont les plus intéressantes.

Le tableau (1.2) résume quelques paramètres pour différents matériaux de la famille III-V.

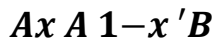
Composé III-V	$E_g(\text{ev})$	$m^*/m_0$	$\mu(\text{cm}^2/\text{VS})$	$a(\text{A}^\circ)$
BN	7.5			3.6150
AlP	2.45			5.4510
AlAs	2.16			5.6605
AlSb	1.58	0.12	200	6.1355
BP	2.0			4.5380
GaN	3.36	0.19	380	a= 3.189 b= 5.185
GaP	2.26	0.82	110	5.4512
GaAs	1.42	0.067	8500	5.6533
GaSb	0.72	0.042	5000	6.0959
InP	1.35	0.077	4600	5.8686
InAs	0.36	0.023	33000	6.0584
InSb	0.17	0.0145	80000	6.4794

**Tableau 1.2** Paramètres des principaux composés binaires III-V [1].

## 1.2.2 Les composés ternaires et quaternaires

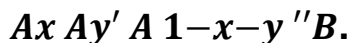
L'intérêt pratique des semi-conducteurs III-V est encore considérablement renforcé par la possibilité de réaliser des alliages par substitution partielle de l'un des éléments par un autre élément de la même colonne. On sait par exemple obtenir des alliages ternaires, ou quaternaires qui sont identifiés de la façon suivante :

❖ **Ternaires** : S'il y a substitution de 2 atomes sur l'un des sous réseaux, soit :



Exemple :  $GaInP$ , lorsque la composition exacte compte peu, on écrit  $x In_{1-x} P$

❖ **Quaternaires 1+3** : S'il y a substitution de 3 atomes sur des sous réseaux soit :



Exemple :  $Ga_x In_y Al_{1-x-y} As.$

❖ **Quaternaires 2+2** : S'il y a substitution de 2 atomes sur chacun des deux sous réseaux, soit :



Exemple :  $Ga_x In_{1-x} Py As_{1-y}.$

La plupart des solutions solides ainsi réalisées sont complètes, la loi de Vegard (relation linéaire entre le paramètre de réseau et la composition) est approximativement suivie, et on observe une évolution progressive et régulière des propriétés (dont la bande interdite et les paramètres cristallins) en fonction du taux de substitution (composition).

### 1.3 L'intérêt des nitrures d'éléments III en optoélectronique

Les nitrures d'éléments III (GaN, AlN, InN et leurs alliages) sont des semi-conducteurs aux propriétés remarquables. La plus importante est sans conteste le faible gap d'énergie interdite de l'InN 0.7 eV [2]. Ce dernier étend la couverture spectrale des nitrures qui couvrent maintenant de l'ultraviolet lointain avec l'AlN (6.2 eV, soit 200 nm) [3], à l'infrarouge moyen avec l'InN (0.7 eV, soit 1770 nm), en passant par l'ultraviolet proche avec le GaN (3.39 eV, soit 365 nm) [4] et le visible avec les alliages InGaN ou AlInN.

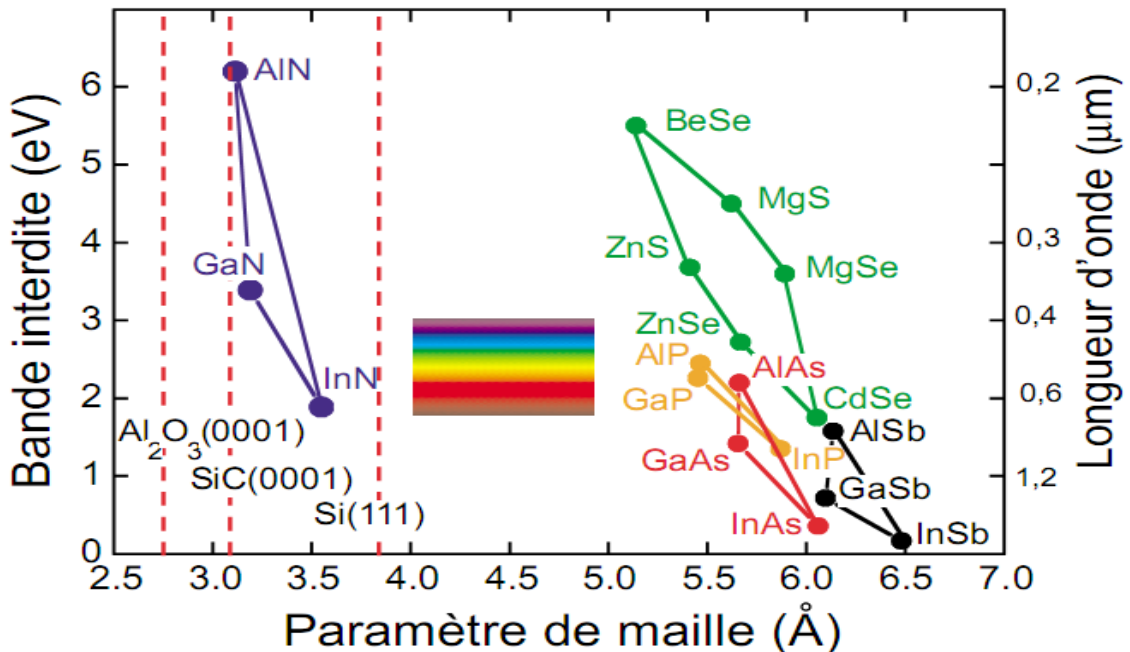


Figure 1.2 Bande interdite de divers composés semi-conducteurs en fonction de leur paramètre de maille [5].

## 1.4 Caractéristiques structurelles

### 1.4.1 Les systèmes cristallins

La plupart des matériaux III-V se cristallisent dans la structure sphalérite dite "Zinc Blende". Cette structure, qui s'apparente à celle du diamant, est constituée de deux sous-réseaux cubiques à faces centrées, l'un étant constitué des atomes de l'élément III, l'autre des atomes de l'élément V [2, 4, 5, 6,7]. Ces deux sous-réseaux sont décalés l'un par rapport à l'autre le long de la diagonale du cube, d'une quantité  $(a/4, a/4, a/4)$ ,  $a$  étant le paramètre cristallin, c'est-à-dire la longueur de l'arête du cube élémentaire.

### 1.4.2 Les alliages

Il est donc possible de former un solide semi-conducteur dit ternaire ou quaternaire en mélangeant plusieurs éléments des colonnes III et V.

Cependant, la structure de cet alliage n'est pas celle d'un cristal parfait, en raison de la distribution aléatoire des atomes sur chaque site de la structure zinc-blende qui interdit en particulier la propriété d'invariance par translation.

Afin de décrire les états électroniques de l'alliage, l'approximation du cristal virtuel est souvent utilisée ; dans un tel modèle, le potentiel périodique est remplacé par une moyenne. Si on considère par exemple un solide  $AB_{1-x}C_x$  ; l'atome A prend place dans les sites du premier sous réseau cubique faces centrées (CFC) de la structure zinc-blende, et les atomes B et C occupent aléatoirement, les sites du deuxième sous réseau CFC [6].

### 1.4.3 Les hétérostructures

Une hétérostructure est constituée d'un matériau semi-conducteur A pris en « sandwich » entre deux barrières d'un matériau semi-conducteur B [7].

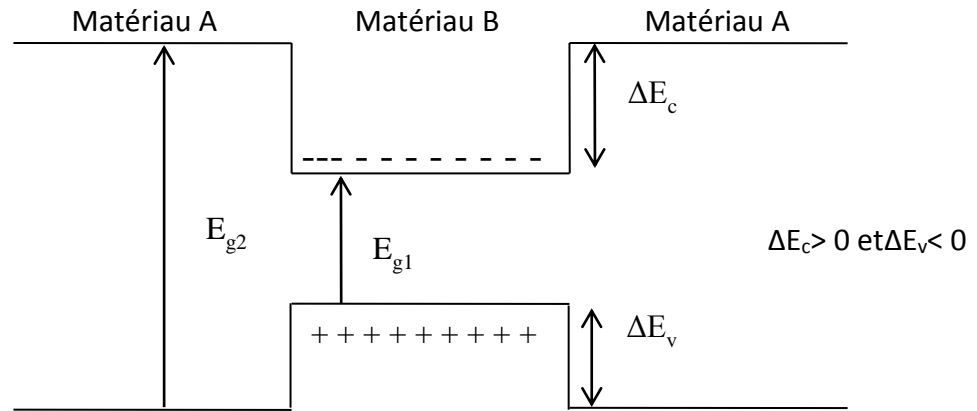


***a-Hétérostructures de type I :***

$$\Delta E_g = E_{g2} - E_{g1} = \Delta E_c + \Delta E_v$$

$$\Delta E_c > 0 \text{ et } \Delta E_v < 0$$

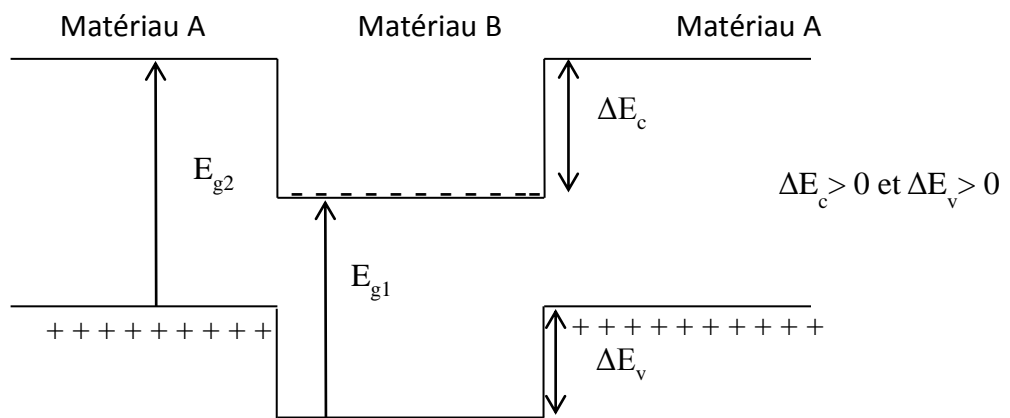
Les électrons et les trous seront confinés dans le même matériau B. La probabilité de recombinaison sera donc élevée.



**Figure 1.3.a** hétérostructure de type I

***b-Hétérostructure de type II***

Les extrema des bandes de conduction et de valence sont spatialement séparés, les électrons et les trous seront donc confinés séparément et leurs recombinaisons seront moins probables



**Figure 1.3.b** hétérostructure de type II

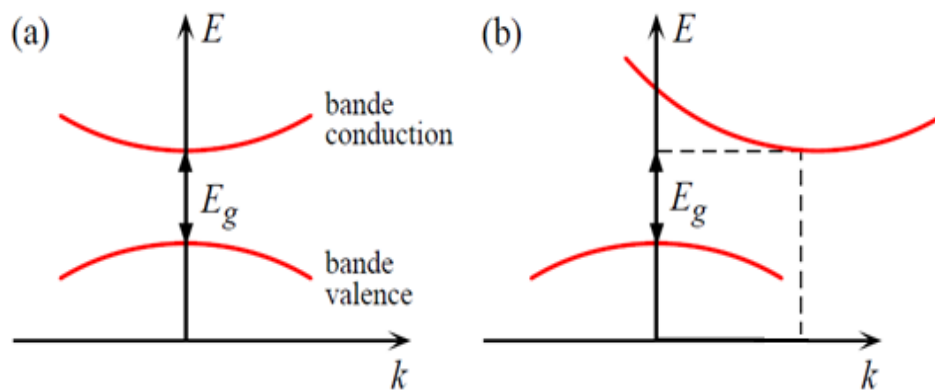
## 1.4.4 Le Gap

### a - semi-conducteur a gap direct

Le gap direct, c'est lorsqu'au maximum de la bande de valence et au minimum de la bande de conduction il correspond le même vecteur d'onde  $k$ . L'intérêt d'un gap direct est que les matériaux qui ont cette caractéristique sont plus utilisés dans des dispositifs optiques, les transitions sont directes.

### b - semi-conducteur a gap indirect

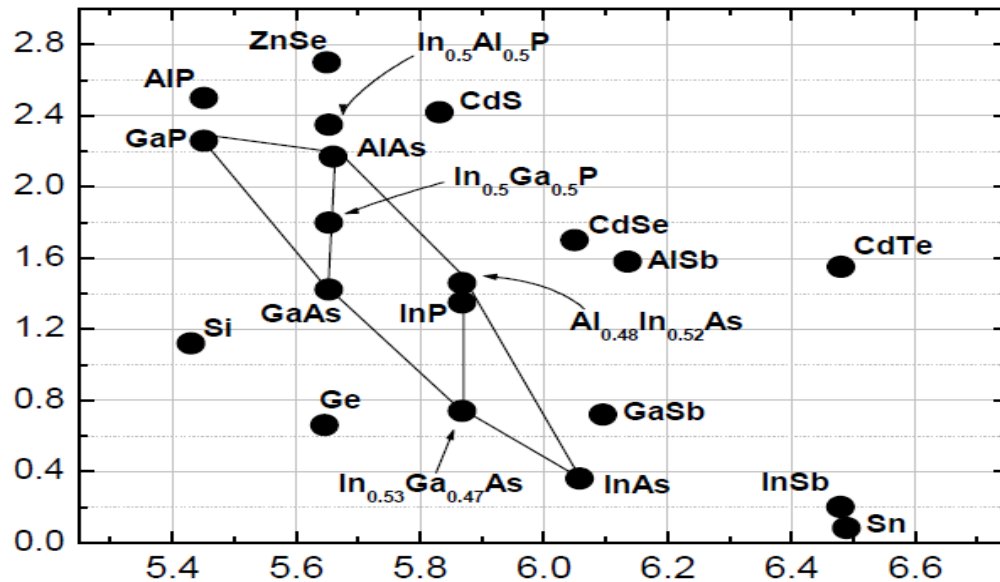
les bandes de conduction et de valence sont décalées l'une par rapport à l'autre, donc différents alors on parle de gap indirect. Du coup les matériaux ayant un gap indirect ne sont pas bien adaptés pour les dispositifs optiques (exemple silicium).



**Figure 1. 4** Structure de bande schématique d'un semi-conducteur à gap direct (a) et à gap indirect (b).

## C- Bandes interdites des principaux composés semi-conducteurs

La figure (1.5) représente le diagramme des variations de l'énergie de bande interdite en fonction du paramètre cristallin  $a$  [8]



**Figure 1.5** Evolution du paramètre de maille cristalline et d'énergie de bande des alliages composés III-V et II-VI [8].

Les points du graphe de la figure (1.5) montrent la position des composés binaires stœchiométriques, et les lignes représentent l'évolution du gap  $E_g$  et du paramètre cristallin  $a$ , en fonction de la composition des alliages ternaires.

Ce diagramme est donc très important par ce qu'il permet de connaître la composition de tout alliage ternaire susceptible d'être déposée en couche mince par épitaxie sur un substrat binaire comme GaAs ou InP.

Les matériaux III-V offrent donc une grande variété de compositions permettant de modifier leurs propriétés électroniques [8].

## 1.5 La masse effective

### 1.5.1 Masse effective des électrons

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

$$m_e^* = \frac{\hbar^2}{d^2E/dk^2} \quad (1.1)$$

### Semi-conducteur a gap direct

Dans le cas d'un semi-conducteur à gap direct, la bande de conduction est une vallée, centrée en  $k_0=0$  et isotrope au voisinage de  $k_0$ . Si on appelle  $E_c$  l'énergie minimum, l'expression  $E(k)$  s'écrit :

$$E(k) = E_c + \frac{1}{2} \frac{d^2E(k)}{dk^2} k^2 \quad (1.2)$$

Ou, compte tenu de la définition de la masse effective (équation (1.1))

$$E(k) = E_c + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e^*} \quad (1.3)$$

Ainsi l'électron au voisinage du minimum de la bande de conduction se comporte comme un électron libre de masse  $m_e^*$ . Dans la mesure où la courbure de la bande de conduction varie peu au voisinage du minimum, la masse effective est constante et par suite l'énergie  $E(K)$  varie quadratiquement en fonction du vecteur d'onde  $K$ .

Cette loi de variation constitue ce que l'on appelle l'approximation des bandes paraboliques.

Lorsque l'énergie cinétique des électrons devient très importante, l'électron s'éloigne d' $E_c$  dans l'espace des énergies, sa masse varie et l'approximation parabolique n'est plus justifiée.

## Semi-conducteur a gap indirect

Dans le cas d'un semi-conducteur à gap indirect, la bande de conduction est multi vallée et anisotrope avec plusieurs minima équivalents situés en différents points de la zone de Brillouin. Les surfaces d'énergies constantes au voisinage des minima  $K_0$  sont des ellipsoïdes. Les expressions des masses effectives sont données par :

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

Avec :

$m_l^*$  : masse effective de l'électron de la vallée considérée, dans son mouvement suivant l'axe de révolution de l'ellipsoïde, appelée aussi masse effective longitudinale.

$m_t^*$  : masse effective de l'électron dans son mouvement dans le plan perpendiculaire à l'axe de révolution, appelée aussi masse effective transversal [9].

### 1.5.2 Masse effective des trous

La masse effective des trous est définie comme celle des électrons, mais 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.

$$m_{hh} = \frac{m_{hh}^*}{\gamma_1 + 2\gamma_2} \quad m_{lh} = \frac{m_{lh}^*}{\gamma_1 - 2\gamma_2} \quad (1.5)$$

$$m_{hh}^* = \frac{m_0}{\gamma_1 - \gamma} \quad m_{lh}^* = \frac{m_0}{\gamma_1 + \gamma}$$

$$\gamma = \sqrt{2(\gamma_2^2 + \gamma_3^2)}$$

$\gamma_1, \gamma_2$  et  $\gamma_3$  paramètre de Luttinger.

Les expressions (1.5) permettent de définir des masses effectives isotropes. Ils ont été calculés pour la plupart des semi-conducteurs

## 1.6 Notion de contrainte

### 1.6.1 Effet de la contrainte

La condition nécessaire à une bonne hétéro-épitaxie est évidemment que les deux matériaux aient d'une part la même structure cristalline et, d'autre part, des paramètres de mailles voisins. Lorsque les paramètres de mailles sont différents les matériaux constituant la couche de plus grande épaisseur impose sa maille à l'autre, au moins au voisinage de l'interface. Ceci entraîne l'existence dans le matériau de faible épaisseur d'une contrainte bi axiale dans le plan des couches.

La couche épitaxie est déformée en compression ( $a_s < a_e$ ) et en tension ( $a_s > a_e$ ) par des déformations bi-axiales ( $\epsilon_{xx}$  et  $\epsilon_{yy}$ ) est uni-axial ( $\epsilon_{zz}$ ) [8]

Bi-axiale dans le plan croissance :

$$\epsilon_{//} = \epsilon_{xx} = \epsilon_{yy} = a_s - a_e / a_e \quad (1.6.a)$$

uni-axial dans la direction de croissance :

$$\epsilon_{\perp} = \epsilon_{zz} = -2C_{12}/C_{11}\epsilon_{xx} \quad (1.6.b)$$

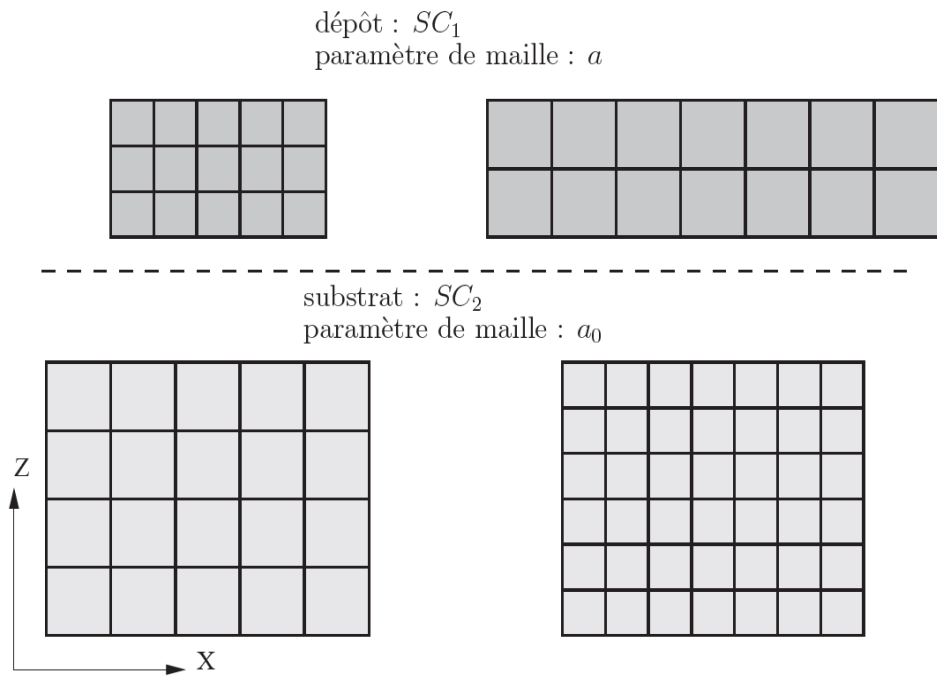
Ou :

$\epsilon$  : la déformation de maille.

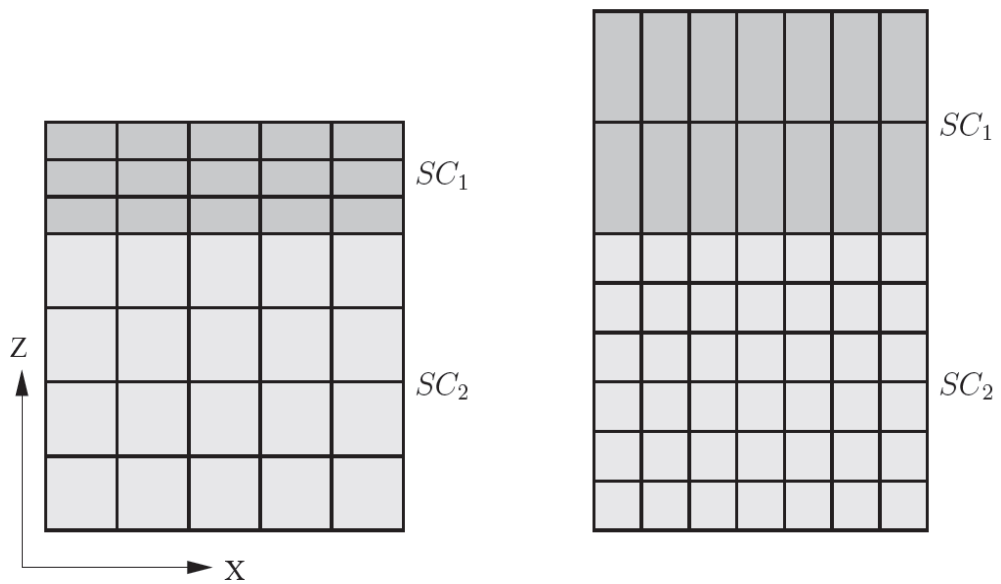
$a_s$ : paramètre de maille de substrat.

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

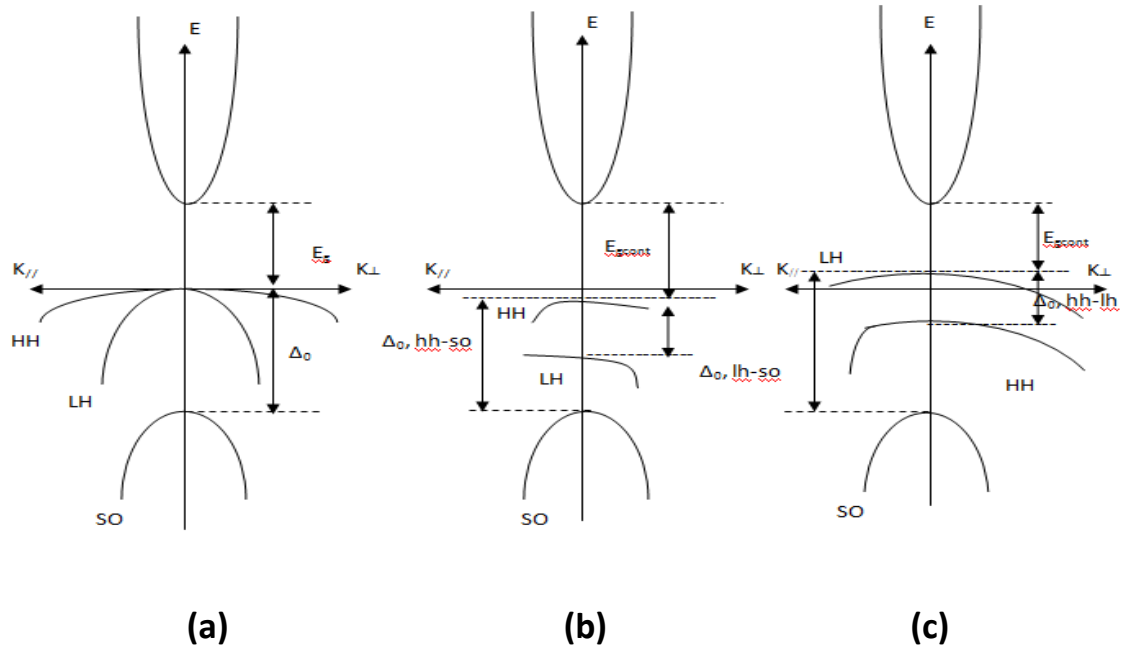
$C_{11}$  et  $C_{12}$  : Constanta d'élasticité.



**Figure 1.6** Structures non contraintes (avant dépôt)[8].



**Figure 1.7** Structures contraintes [8].



**Figure 1. 8** Représentation schématique de la structure de bande d'un matériau SC (a) non contraint, (b) contrainte compressive, (c) contrainte en tension

### 1.6.2 Épaisseur critique

L'épaisseur critique  $L_c$  d'une couche contrainte est l'épaisseur en dessous de laquelle la couche est dans un état thermodynamiquement stable. Au des de l'épaisseur  $L_c$ , la couche subit un relâchement de la contrainte, on dit qu'elle se relaxe. Il y a donc une apparition de dislocations, à partir de l'interface avec le substrat.

L'épaisseur critique est calculée en utilisant par exemple le modèle proposé par Mathews et Blackeslee [10] élaboré en s'appuyant sur l'équilibre mécanique des forces agissant sur les dislocations et qui est donnée par l'expression suivante :

$$L_c = \frac{a}{\beta \cdot \sqrt{2} \cdot \pi \cdot \varepsilon} \times \frac{1-0.25 \cdot \gamma}{1+\gamma} \times \ln \left( \frac{L_c \cdot \sqrt{2}}{a} + 1 \right) \quad (1.7)$$

Avec:

$$\varepsilon = \frac{a - a_0}{a}$$



Où :  $a$  : paramètre de maille de la couche relaxée

$a_0$  : paramètre de maille du substrat.

$\beta$  : est un 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.

$\epsilon$  : constante de déformation

$\gamma$  : coefficient de poisson donné par :  $\gamma = \frac{c_{12}}{c_{11} + c_{12}}$

$c_{11}$  et  $c_{12}$  : Constante d'élasticité.

## 1.7 Détermination des paramètres

### 1.7.1 Loi de Vegard

Pour calculer les paramètres d'une structure ternaire ou quaternaire il faut passer, en général, par la loi de Vegard (loi d'interpolation linéaire).

Les matériaux ternaires sont formés à partir de deux matériaux binaires AC et BC ayant un élément commun. Si  $x$  est la concentration en A, alors  $(1 - x)$  est la concentration en B. Les paramètres de matériau ternaire T varient selon une loi linéaire, fonction du paramètre A et de celui de B :

$$T(x) = xT_{AC} + (1-x)T_{BC} \quad (1.8)$$

Par exemple, pour un alliage ternaire de type  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ , le paramètre de maille  $a_{\text{InGa}}$  s'écrira :

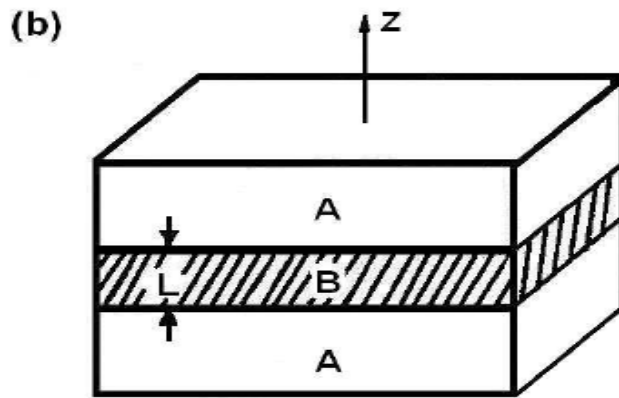
$$a_{\text{InGa}} = x \cdot a_{\text{InN}} + (1-x)a_{\text{GaN}} \quad (1.9)$$

Où  $a_{\text{GaN}}$  et  $a_{\text{InN}}$  sont respectivement les paramètres de maille des deux binaires GaN et InN.

## 1.8 Notion sur les puits quantiques

### 1.8.1 Les puits quantiques

Un puits quantique est obtenu en faisant croître une couche d'un matériau semi-conducteur A entre deux couches d'un autre matériau 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 (électrons, trous) dans le puits quantique [10].



**Figure 1.9** Structure schématique d'un puits quantique [10].

### Condition d'obstination de puits quantique

Pour obtenir l'effet quantique il faut aboutir à plusieurs conditions telles que [10] :

- L'épaisseur de la couche active dans laquelle apparait le phénomène doit être comparable à la longueur d'onde de De Broglie qui s'écrit :

$$\lambda_F = \frac{2 \cdot \pi \cdot \hbar}{\sqrt{2 \cdot m_e \cdot E_F}}$$

Où :  $E_F$  : est le niveau de fermi.

$m$ : masse effective de electron

- Si  $E_n$  et  $E_{n+1}$  sont les états d'énergie du spectre discret nés de la quantification, il faut que :

$$E_{n+1} - E_n > \frac{\hbar}{\tau} \tag{1.10}$$

Ou  $\tau$  est la constante de temps prenant en compte toutes les diffusions.

- Par ailleurs il faut que l'écart soit plus grand que la distribution de fermi due à la température, d'où la condition :

$$E_{n+1} - E_n > KT \quad (1.11)$$

Avec : K : la constante de Boltzmann, T : la température absolue.

### 1.8.2 Spectre d'énergie

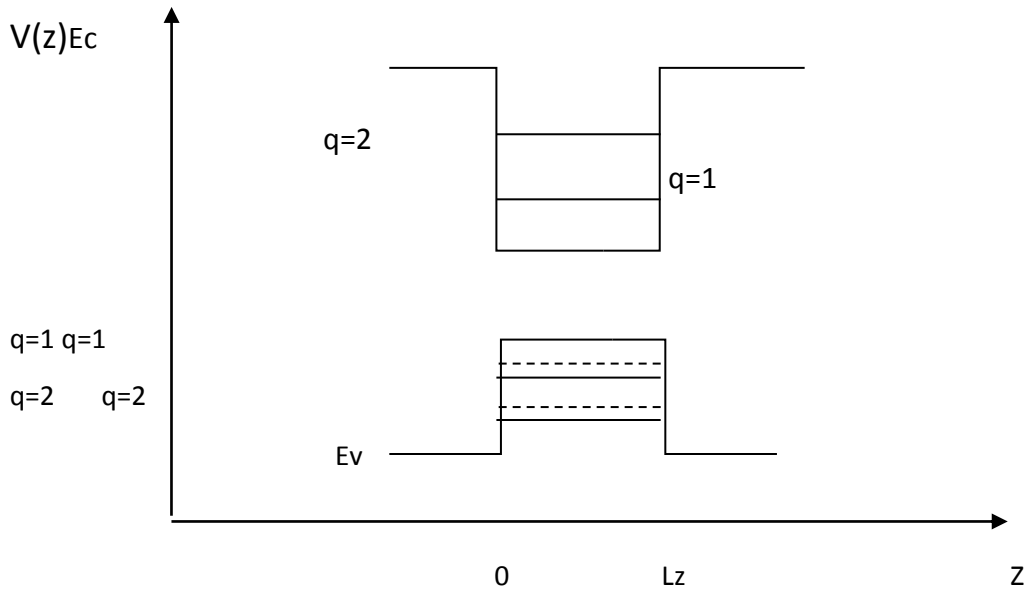
Si l'épaisseur  $L_1$  du semi-conducteur SC1 est faible, typiquement  $L_1 < 200 \text{ \AA}$ , les états électroniques ne correspondent plus au bas de la bande de conduction, mais sont quantifiés en structure de sous-bandes d'énergie analogue à celle que nous avons étudiée dans le cas de la couche d'inversion d'une structure. Le mouvement des électrons est quasi-libre dans le plan de la structure et quantifié dans la direction perpendiculaire. On peut séparer le mouvement dans le plan de la structure du mouvement dans la direction perpendiculaire et écrire la fonction d'onde des électrons sous la forme suivante :

$$\Psi(\mathbf{r}) = \xi(z)e^{i(K_x x + K_y y)}\varphi(\mathbf{r}) \quad (1.12)$$

Où  $\varphi(\mathbf{r})$  est la fonction de Bloch et  $\xi(z)$  une fonction enveloppe qui décrit la quantification du mouvement suivant  $z$ . Dans l'approximation de la masse effective le mouvement suivant  $z$  est régi par l'équation de Schrödinger suivante :

$$\frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{d^2\xi}{dz^2} + (E - V(z))\xi(z) = 0 \quad (1.13)$$

L'énergie potentielle  $V(z)$  est celle du puits carré à une dimension, défini, en prenant l'origine des énergies au bas de la bande de conduction du semi-conducteur SC1



**Figure 1.10** Structure des bandes dans un puits quantique

$$V(z) = \Delta E \quad \text{pour } z < 0 \text{ et } z > L_1$$

$$V(z) = 0 \quad \text{pour } 0 < z < L$$

Les valeurs de l'énergie  $E$  décrivent la quantification des états électroniques dans la direction perpendiculaire à la structure.

Dans le plan de structure le mouvement des électrons n'est pas affecté. Il en résulte une structure de sous-bandes avec une quantification discrète suivant  $K_z$  et une variation pseudo-

continue suivant  $K_{//} = \sqrt{k_x^2 + k_y^2}$  l'énergie totale d'un électron s'écrit :

$$E(\mathbf{k}) = E_c + E_n + \frac{\hbar^2 k_{//}^2}{2m_e} \quad (1.14)$$

Les énergies  $E_n$  des minimas des différentes sous-bandes sont évidemment fonction de la profondeur  $V_0$  et de la largeur du puits de potentiel [11].

- **puits a profondeur finie**

Lorsque l'énergie de confinement des électrons n'est plus négligeable devant la hauteur de la barrière de potentiel, soit par ce que  $\Delta E_c$  n'est pas très important, soit par ce que  $L_1$  est très petit, les résultats précédents sont modifiés par la prise en considération de la profondeur finie du puits de potentiel.

En posant  $\Delta E_c = V_0$  pour les électrons, le potentiel s'écrit :

$$V(z) = V \quad \text{pour} \quad z < 0 \text{ et } z > L_1$$

$$V(z) = 0 \quad \text{pour} \quad 0 < z < L_1$$

Le mouvement des électrons d'énergie  $E < V_0$  n'est plus borné en  $Z = 0$  et en  $z = L_1$ , c'est-à-dire que l'électron a une probabilité non nulle de se trouver à l'extérieur du puits.

Le potentiel carré délimite trois régions :

**Région I<sub>1</sub>  $z < 0$**

Le potentiel est égal à  $V_0$ , l'équation de Schrödinger (1-13) s'écrit :

$$\frac{d^2\xi(z)}{dz^2} + \frac{2m_e}{\hbar^2} (E - V_0)\xi(z) = 0 \quad (1.15)$$

Où  $m_2$  représente la masse effective des électrons dans le semi-conducteur  $SC_2$  (barrière). Dans la mesure où on étudie les états liés du puits de potentiel, l'énergie des électrons est inférieure à  $V_0$ , de sorte que  $(V_0 - E)$  est positif et l'équation s'écrit :

$$\frac{d^2\xi(z)}{dz^2} - k_2^2\xi(z) = 0 \quad (1.16)$$

Avec :

$$K_2 = \frac{\sqrt{2m(v_0 - E)}}{\hbar}$$

Compte tenu de la condition  $\xi_{I1}(z \longrightarrow \infty) = 0$ , correspondant à l'annulation de la fonction d'onde à l'infini, la solution de l'équation (1-16) s'écrit sous la forme :

$$\xi_{I1} = A e^{k_2 z} \quad (1.17)$$

**Région I  $0 < z < L_1$  :**

Le potentiel est nul, l'équation (1-13) s'écrit :

$$\frac{d^2 \xi(z)}{dz^2} + \frac{2m_1}{\hbar^2} E \xi(z) = 0 \quad (1.18)$$

Où  $m_1$  représente la masse effective des électrons dans la SC<sub>1</sub>. En posant :

$$k_1 = \frac{\sqrt{2m_1 E}}{\hbar}$$

L'équation (1-18) s'écrit :

$$\frac{d^2 \xi(z)}{dz^2} + K^{12} \xi(z) = 0 \quad (1.19)$$

La solution de cette équation est de la forme :

$$\xi_I(z) = B \sin(k_1 z + \varphi) \quad (1.20)$$

**Région I<sub>2</sub>  $z > L_1$  :**

Le potentiel est à nouveau  $V_0$ , compte tenu de la condition  $\xi_{I2}(z \rightarrow -\infty) = 0$ , la fonction d'onde s'écrit :

$$\xi_{I2} = C e^{-k_2 z} \quad (1.21)$$

Les constantes d'intégration A, B, C et  $\varphi$  sont déterminées par les conditions aux limites. Ces conditions sont les continuités de la fonction d'onde  $\xi$  et du courant de probabilité  $(1/m)(d\xi/dz)$  aux interfaces. A partir des expressions (1-20 et 1-21) on obtient les relations :

En  $z=0$ , les conditions  $\xi_{I_1}(0) = \xi_I(0)$  et  $\frac{1}{m_2} \xi'_{I_1}(0) = \frac{1}{m_1} \xi'_I(0)$  entraînent

$$A = B \sin \varphi \quad (1.22.a)$$

$$A = \frac{k_2}{m_2} = B \frac{k_1}{m_1} \cos \varphi \quad (1.22.b)$$

En  $z=L_1$ , les conditions  $\xi_{I_1}(L_1) = \xi_{I_2}(L_1)$  et  $\frac{1}{m_1} \xi'_{I_1}(L_1) = \frac{1}{m_2} \xi'_{I_2}(L_1)$  entraînent

$$B \sin(k_1 L_1 + \varphi) = C e^{-k_2 L_1} \quad (1.22.c)$$

$$B \frac{k_1}{m_1} \sin(k_1 L_1 + \varphi) = -C \frac{k_2}{m_2} e^{-k_2 L_1} \quad (1.22.d)$$

En divisant membre à membre, d'une part les équations (1-22 a et b) et d'autre part les équations (1-22 c et d), on obtient respectivement

$$\operatorname{tg} \varphi = \frac{k_1 m_2}{k_2 m_1} \quad (1.23.a)$$

$$\operatorname{tg}(k_1 L_1 + \varphi) = -\frac{k_1 m_2}{k^2 m^1} \quad (1.23.b)$$

Compte tenu de la relation  $\sin^2 \alpha = 1/(1 + 1/\operatorname{tg}^2 \alpha)$  l'expression (1-23-a) donne :

$$\sin \varphi = \frac{k_1/m_1}{\sqrt{k_1^2/m_1^2 + k_2^2/m_2^2}} \quad (1.24)$$

D'autre part la relation  $\varphi = -\operatorname{tg}(K_1 L_1 + \varphi)$  entraîne  $\varphi = -(K_1 L_1 + \varphi) + n\pi$ .

Avec  $n$  : un nombre entier.

Et cette relation s'écrit sous la forme :

$$k^1 L^1 = n\pi - 2 \varphi \quad (1.25)$$

Soit, en explicitant  $\varphi$  (équation 1-24)

$$k_1 L_1 = 2n\pi - 2 \text{Arc sin} \frac{k_1/m_1}{\sqrt{k_1^2/m_1^2 + k_2^2/m_2^2}} \quad (1.26)$$

En explicitant  $k_1$  et  $k_2$  à partir de leurs définitions, on obtient la relation de valeur propre qu'on va utiliser dans notre simulation :

$$\frac{\sqrt{2m_1 E_n}}{\hbar} L_1 = n\pi - 2 \text{Arc sin} \sqrt{\frac{E_n}{V_0 \left(\frac{m_1}{m_2}\right) + E_n \left(1 - \frac{m_1}{m_2}\right)}} \quad (1.27)$$

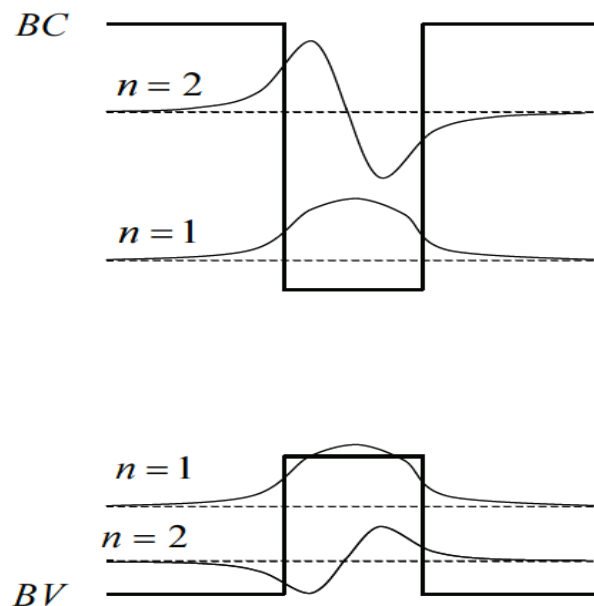
Avec :  $m_1$  et  $m_2$  : masses effectives dans le matériau du puits et de la barrière respectivement.

$n$  : le niveau de quantification (entier)

$V_0$  : Décalage de bandes

$E_n$  : Valeurs propres de l'énergie (quantification)

Les niveaux d'énergie et les allures des fonctions d'onde sont représentés sur la figure (1-14)



**Figure 1. 11** Niveau d'énergie et fonction d'ondes dans le puits quantique de profondeur finie.



- **puits a profondeur infini**

Si  $\Delta E_c$  est très important on peut supposer en première approximation que les électrons sont confinés dans l'espace  $0 < z < L_1$  par des murs de potentiel de hauteur infinie. Le potentiel s'écrit alors :

$$V(z) = \infty \text{ pour } z < 0 \text{ et } z > L_1$$

$$V(z) = 0 \text{ pour } 0 < z < L_1$$

Les conditions aux limites, définissant les constantes d'intégration de l'équation (1-13)

S'écrivent :

$$\xi(z=0) = 0 \quad \xi(z=L) = 0$$

Dans le puits de potentiel  $V(z)=0$  donc, l'équation (1-13) s'écrit :

$$\frac{d^2(\xi)}{dz^2} + k^2 \xi(z) = 0 \tag{1.28}$$

Avec  $;$   $K = \frac{\sqrt{2m_e E}}{\hbar}$  ou  $m_e$  représente la masse effective des électrons dans le semi-conducteur  $SC_1$ .

Les solutions de cette équation sont des sinusoides de la forme :

$$\xi(z) = A \sin(kz + \varphi) \tag{1.29}$$

Les conditions aux limites permettent d'écrire :

$$\xi(z=0) = \varphi = 0 \text{ Donc}$$

$$\xi(z=L_1) = k = \frac{n\pi}{L_1} \text{ Donc}$$

Compte tenu de la définition de  $K$ , l'énergie est donné par  $E = \frac{\hbar^2 K^2}{2m_e}$  soit

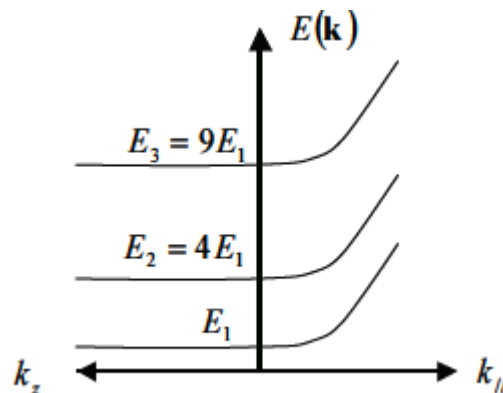
$$E_n = n^2 \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m_e L_1^2} \quad (1.30)$$

L'énergie totale des électrons dans le puits de potentiel s'écrit donc, compte tenu de (1-14) et (1-30) :

$$E(K) = E_c + n^2 \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m_e L_1^2} + \frac{\hbar^2 K_{//}^2}{2m_e} \quad (1.31)$$

Avec :  $K_{//}$  : Les énergies des minima des différentes sous-bandes de conduction varient comme  $n^2$ , avec  $n$  entier.

Les courbes de dispersion sont représentées sur la figure (1-13) :



**Figure 1. 12** Structure de sous-bandes d'énergie niveaux discrets du puits suivant une dimension (direction de croissance) et courbes de dispersion dans le plan de la structure

## 1.9 CONCLUSION

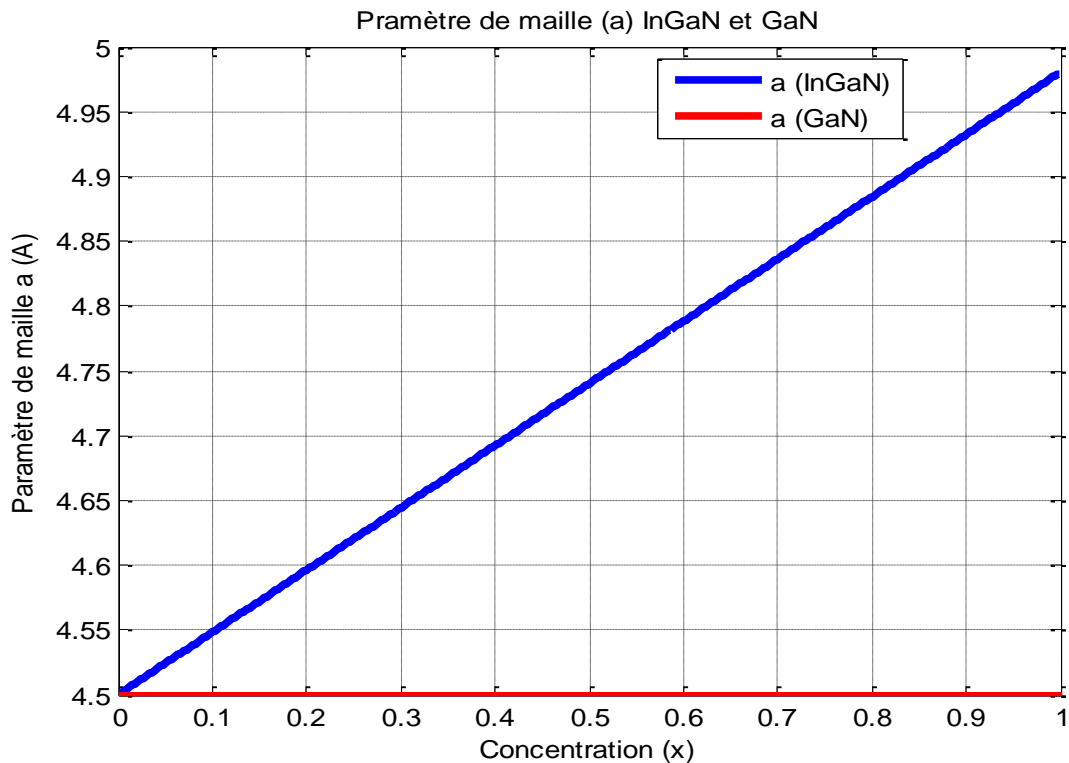
Dans ce premier chapitre, avec partie 1 nous avons présenté les principales notions relatives aux matériaux semi-conducteur et en particulier les SC III-V. Nous avons d'abord présenté quelques notions de leur cristallographie et ensuite des notions sur leurs structures de bande d'énergie. Nous avons également présenté les propriétés des hétérostructures et la notion de contrainte qui a un impact décisif sur la qualité des composants optoélectroniques. Ensuite nous avons abordé les principales notions théoriques fondamentales nécessaires à la compréhension des structures à puits quantiques

## 2.1 Introduction

Dans ce chapitre, vous travail la partie de simulation les lé résulte de donner de calculer les niveaux d'énergie de quantification et les énergies de transition de la structure

$\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ . Et représente la longueur d'onde Pour déterminé les concentrations et des largeurs de puits permettant un fonctionnement aux longueurs d'onde de 450nm et 500nm.

## 2.2 Paramètre de maille



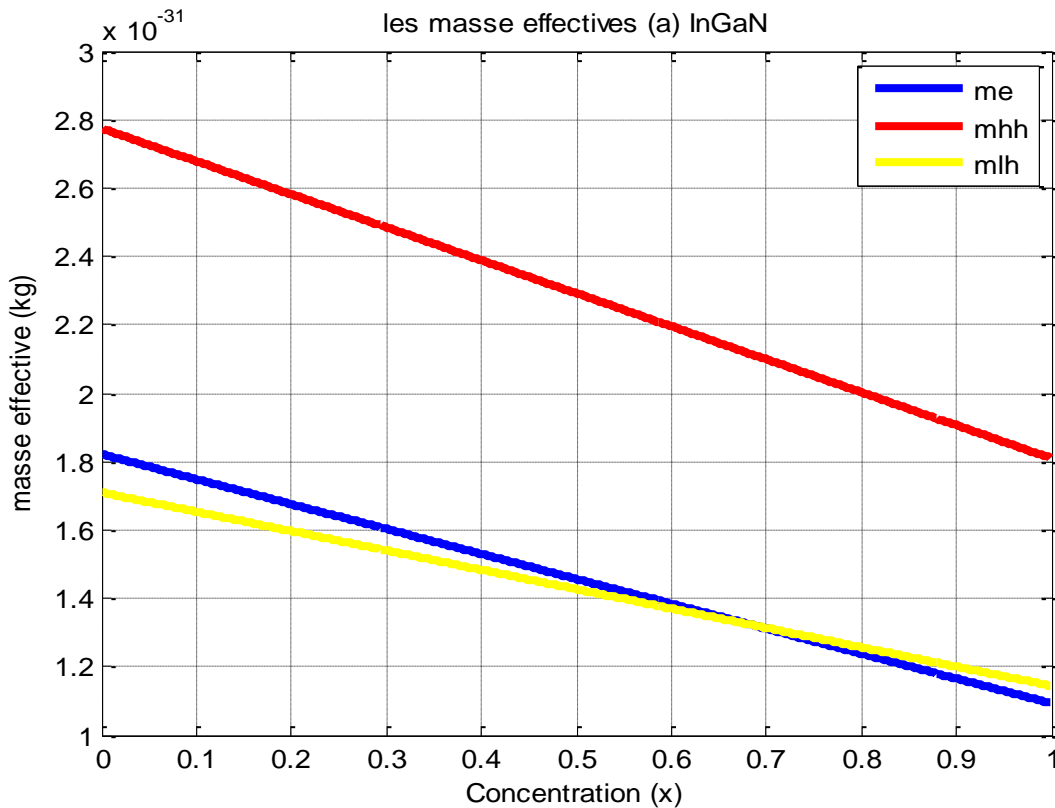
**Figure 2.1** variation de paramètre de maille en fonction de la concentration de X

La figure 2.1 représente l'évolution de paramètre de maille (a) de  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  en fonction de la concentration x de l'indium. Ce dernier a été calculé en utilisant la lois de Vegard, à partir de ceux de l'InN ( $a=4.98 \text{ \AA}$ ), et de GaN ( $a=4.50 \text{ \AA}$ ). D'après les résultats obtenus on constate que le paramètre de maille de InGaN augmente suivant la concentration en indium, jusqu'à atteindre celui de InN à  $X=1$ .

Sachant que le paramètre de GaN rester constante

Pour la lois :  $a_{\text{InGaN}}(i) = a_{\text{InN}} \cdot x + a_{\text{GaN}} \cdot (1-x)$

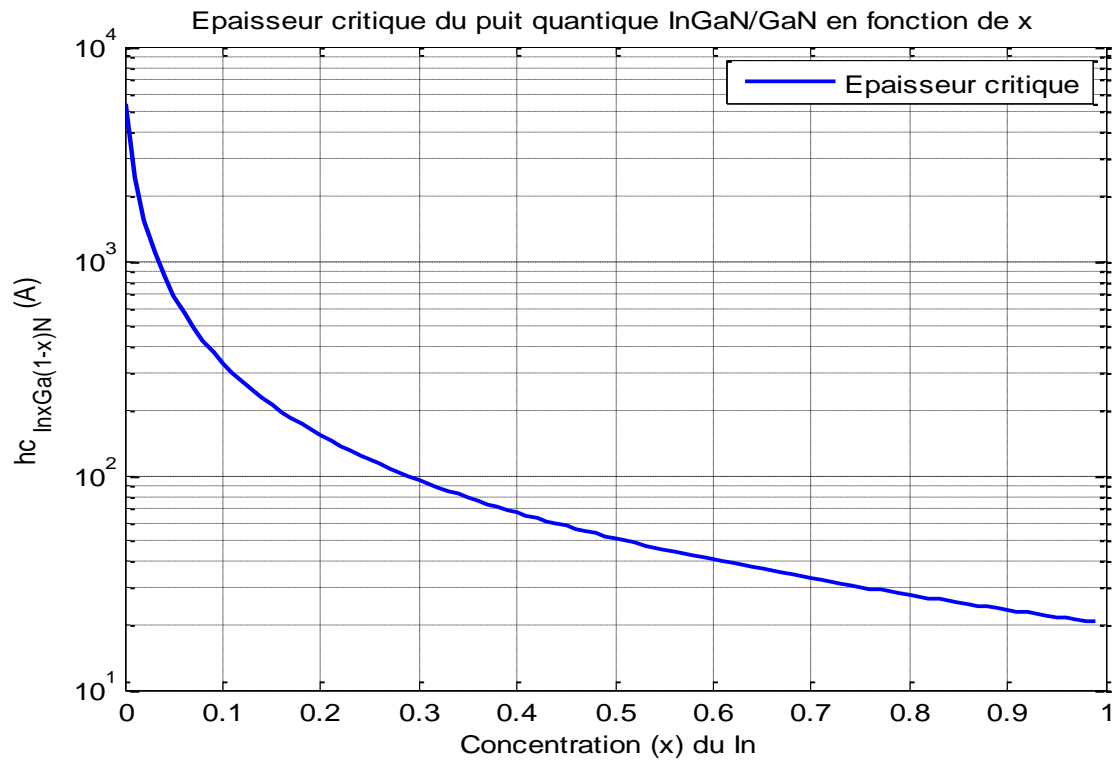
## 2.3 les masses effectives



**Figure 2.2** variation de la masse effective en fonction de la concentration ( x )

La figure 2.2 représente la variation des masses effectives des porteurs, c'est-à-dire les électrons ( $m_e^*$ ), les trous lourds ( $m_{hh}^*$ ), et les trous légers ( $m_{lh}^*$ ), en fonction de la concentration en indium  $x$ . On constate que la de masses effective des électrons diminue lorsque la concentration augmente, tandis que les masses des trous lourds et des trous légers restent pratiquement diminuées.

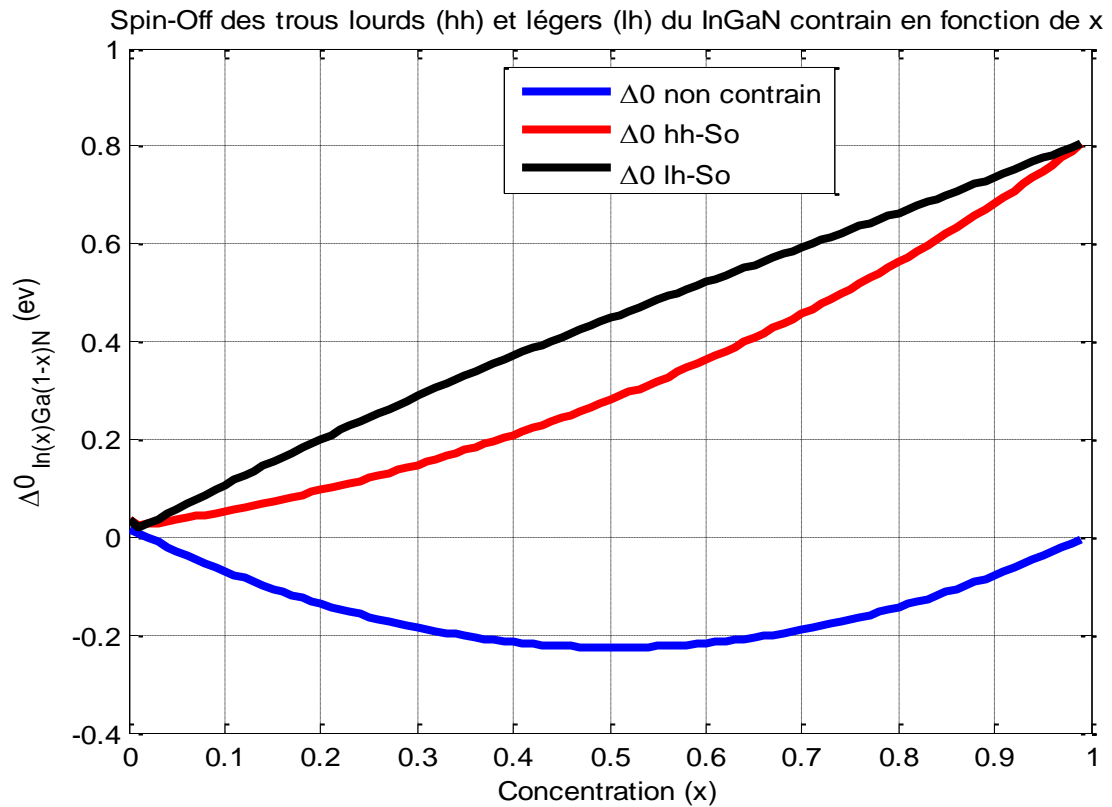
## 2.4 L'épaisseur critique



**Figure 2.3** épaisseur critique en fonction de la concentration  $x$  d'indium.

La figure 2.3 représente la variation de l'épaisseur critique en fonction de la concentration  $x$ , on remarque que l'épaisseur critique diminue avec l'augmentation de la concentration de l'indium

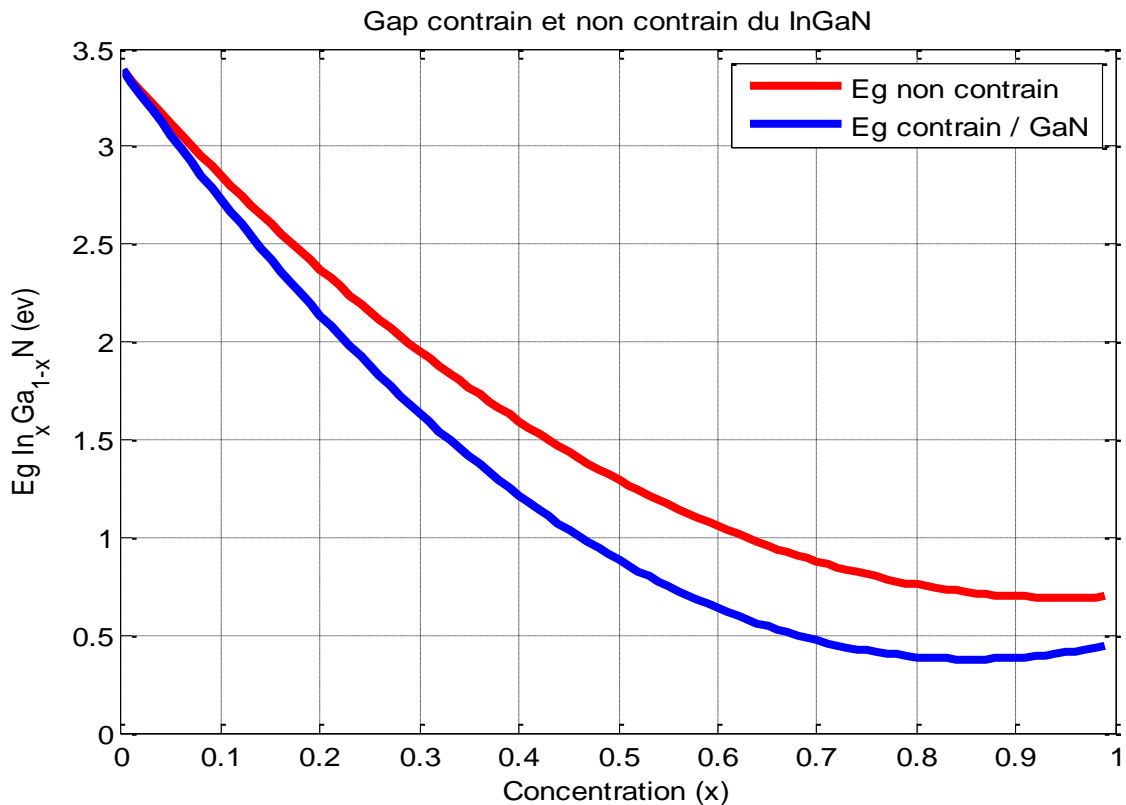
## 2.5 Spin-Off des trous du InGaN contrain en fonction de x



**Figure 2.4** Spin-Off des trous lourds (hh) et légers (lh) et InGaN contrain en fonction de x

Le figure 2.4 représente l'énergie spin-off des trous lourds (hh) et trous légers (lh) en fonction de concentration (x) du structure InGaN on remarque pour augmente la concentration x a augmente.

## 2.6 Energie de bande interdite



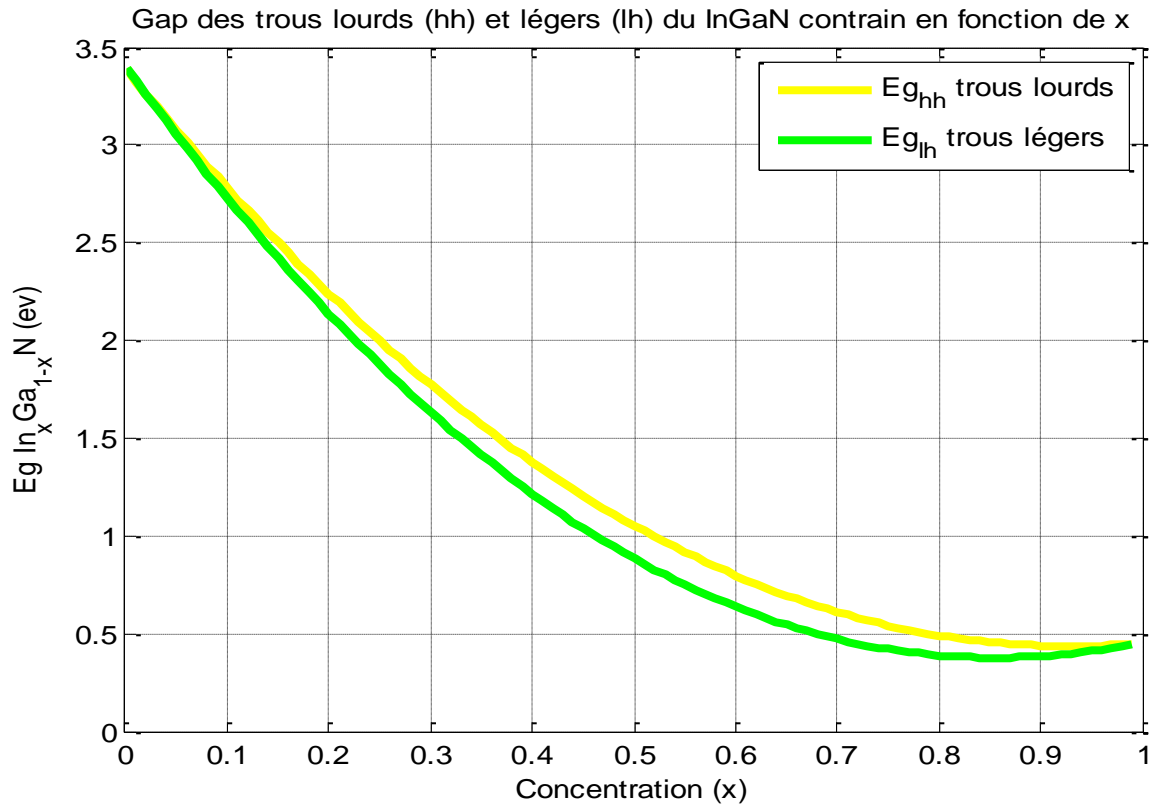
**Figure 2.5** Energie de bande interdite pour  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  contrainte sur GaN et non contrainte en fonction de la concentration  $x$  de l'indium

Dans la figure 2.5 est présentée la variation du gap de  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ , dans deux cas, sans contrainte et avec non contrainte, suivant la concentration en indium  $x$ . d'après les résultats obtenus, on constate que le gap diminue lorsque  $x$  augmente, et ceci dans le deux cas

En ce qui concerne l'effet de la contrainte, on remarque le gap du InGaN contraint est inferieur a celui du InGaN non contraint, ceci est du a la compression introduite par la contrainte.



## 2.7 Energie de bande interdite des trous lourds (hh) et légers (lh) et légers (lh)

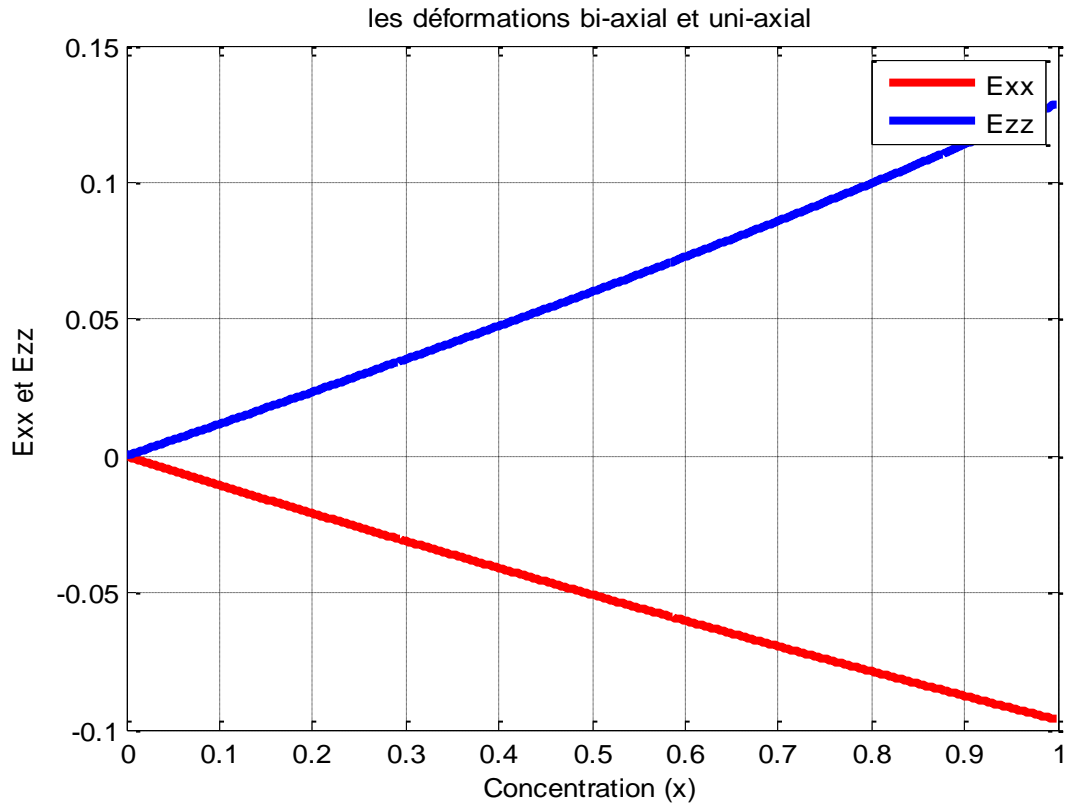


**Figure 2.6** Energie de bande interdite des trous lourds (hh) et légers (lh) du InGaN contraint en fonction de x.

Dans la figure 2.6 est présentée la variation du gap des trous lourds (hh) et légers (lh) de  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ , suivant la concentration en indium x .d'après les résultats obtenus, on constate que le gap des trous lourds et légers diminue lorsque x augmente, et ceci dans le deux cas

## 2.8 Les déformations bi-axial et uni-axial

Les déformations bi-axial et uni-axial sont calculé par les expressions 1.6a et 1.6 b.

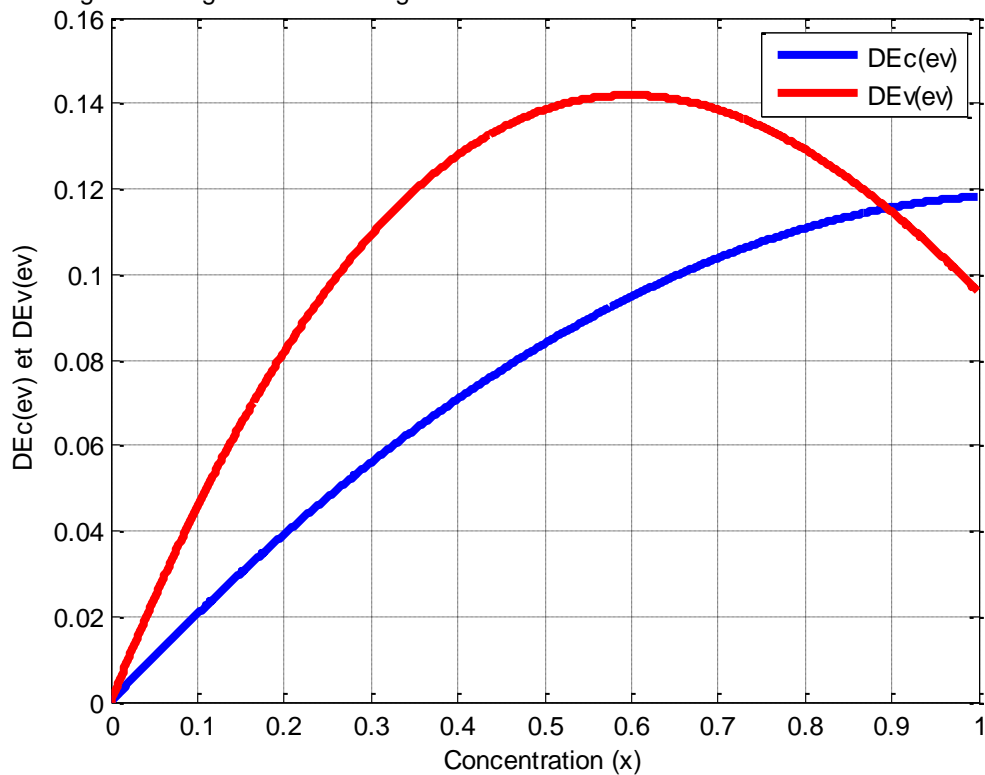


**Figure 2.7** Les déformations bi-axial et uni-axial

Sur la figure 2.7 sont représentées les déformations bi-axial et uni-axial. D'après les résultats, on constate que notre structure est compressive car la déformation bi-axial  $E_{xx}$  est de sens négatif, Paramètre de maille de la couche épitaxie est supérieur a cèle de substrat.

## 2.9 Décalage de la bande de conduction et de valence

décalage en énergie du centre de gravité de la bande de conduction et de la bande de valence



**Figure 2.8** décalage de la bande de conduction et de valence

Dans la figure 2.8 nous avons représenté le décalage de la bande de conduction et de valence, On constate que les décalages des bandes de conduction et de valence augmentent suivant l'augmentation de la concentration x d'indium. On remarque que le décalage de la bande de valence est supérieur à celui de la bande de conduction

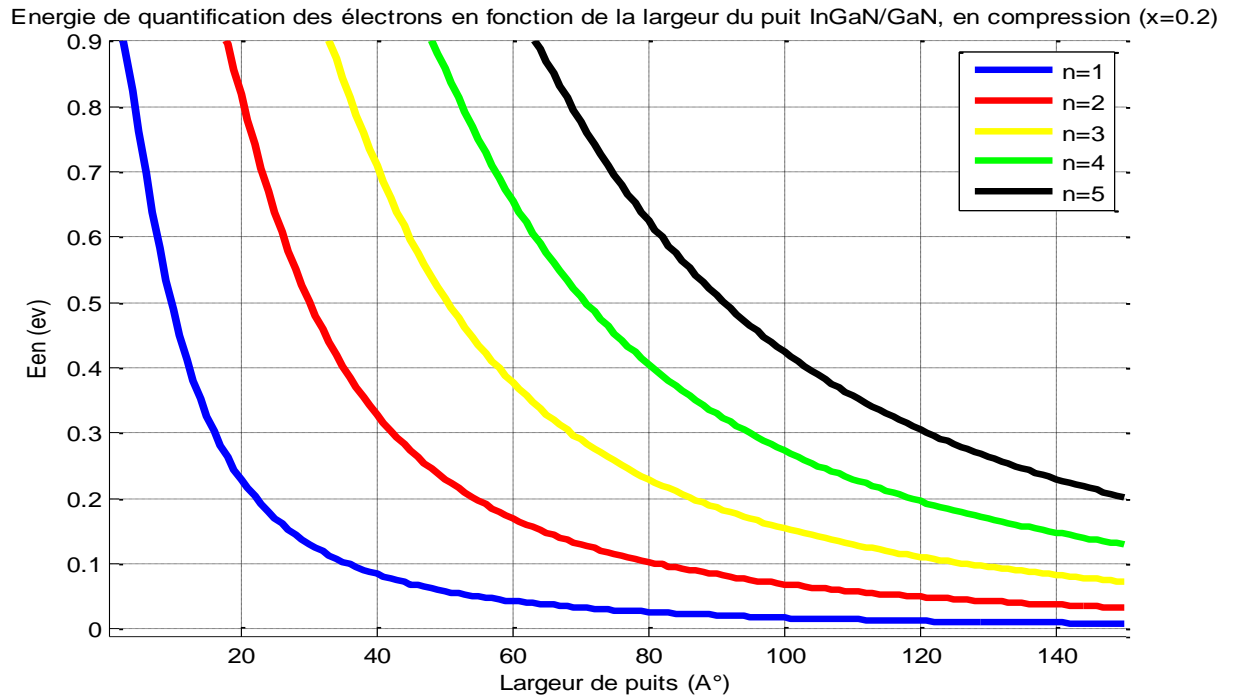
## 2.10 Calcul de l'énergie de quantification

Pour calculer l'énergie de quantification en utilisant l'expression (1.27).

Pour les besoins de la programmation, on pose:

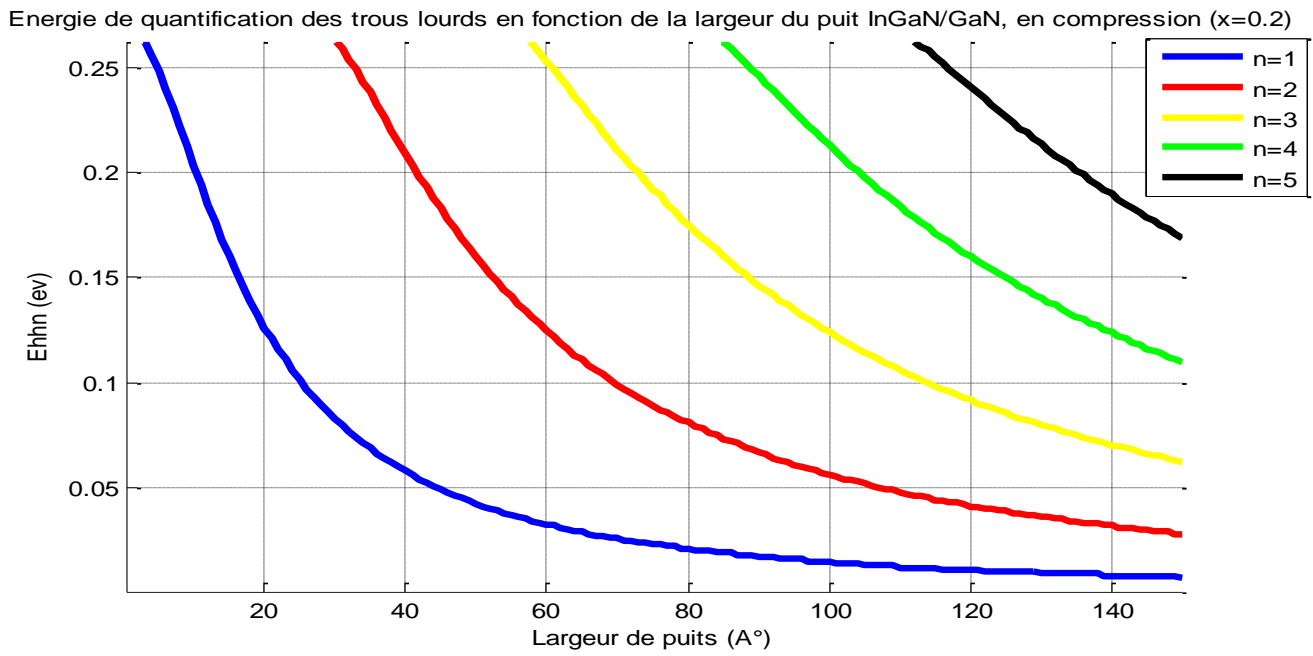
$$A = \frac{\sqrt{2m_1 E_n}}{h} L_1; \quad B = 2 \text{Arc sin} \sqrt{\frac{E_n}{V_0 \left(\frac{m_1}{m_2}\right) + E_n \left(1 - \frac{m_1}{m_2}\right)}} \quad \text{et } C = n\pi$$

Avec :  $m_1$  et  $m_2$  masses effectives dans le matériau du puits et de la barrière respectivement.

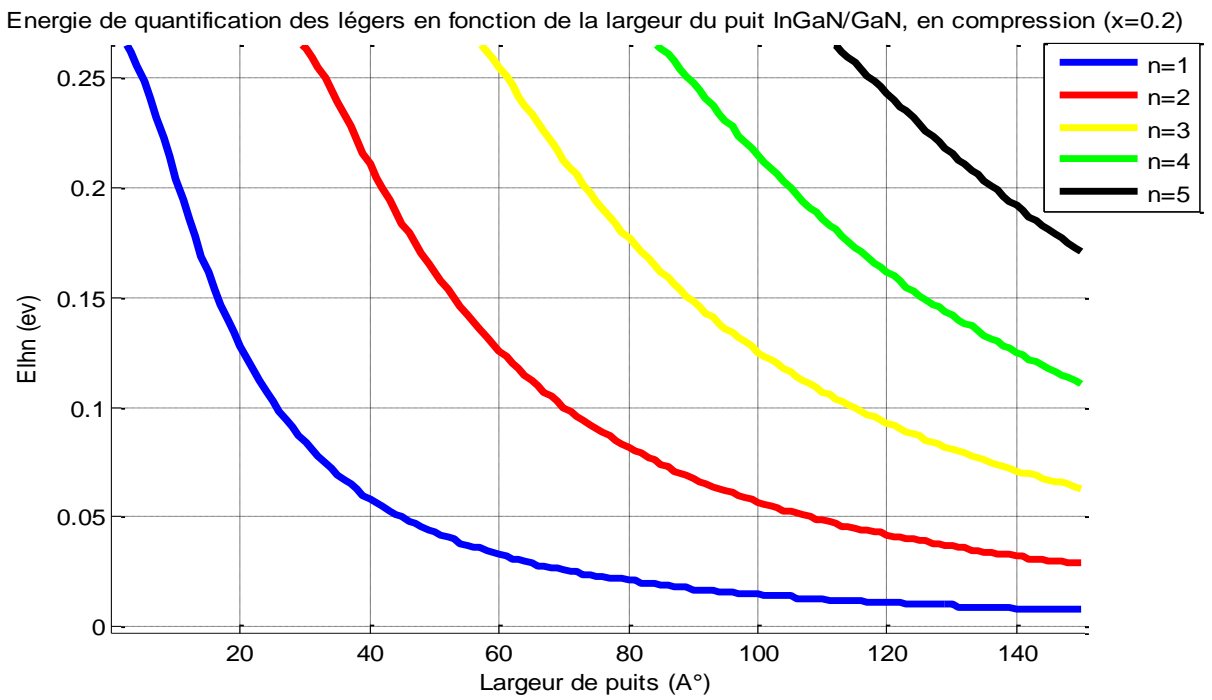


**Figure 2.9** Energie de quantification des cinq premiers niveaux des électrons en fonction de Largeur de puits pour  $x=0.2$

La figure 3.9 présente la variation des énergies de quantification des électrons pour les cinq premiers niveaux, en fonction de la largeur de puits, pour une concentration  $x=0.2$ . On remarque que les énergies de quantifications suivent une évolution décroissante et se rapprochent vers zéro autour de 150  $\text{\AA}$ . On remarque aussi que le cinquième niveau apparaît seulement au-delà d'environ 60  $\text{\AA}$ .



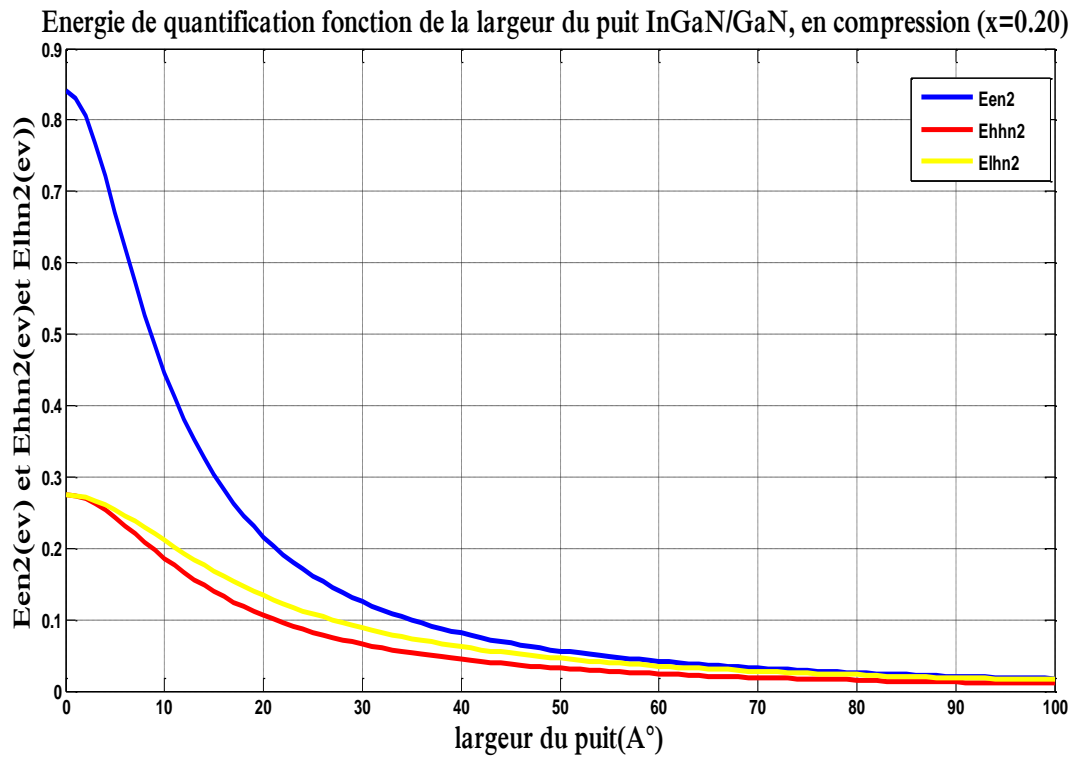
**Figure 2.10** Energie de quantification des trous lourds des cinq premiers niveaux pour  $x=0.2$



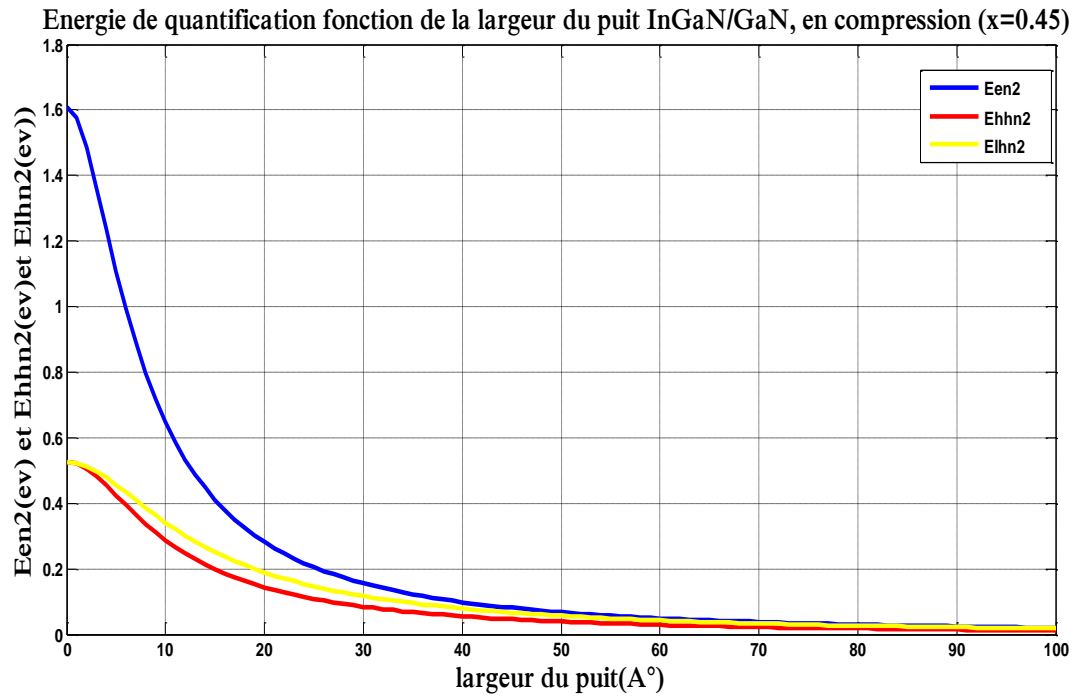
**Figure 2.11** Energie de quantification des trous légers des cinq premiers niveaux pour  $x=0.2$

Les figure 2.10 et 2.11 représenté la variation de Energie de quantification des trous lourds et des trous légers de cinq premiers niveaux pour  $x=0.2$ , on constate que l'énergie de quantification des trous lourds est supérieure de celle des trous légers.

On différénte la valeur de  $x$  pour ( $x=0.2$  et  $x=0.45$ )



**Figure 2.12** Energie de quantification de premier niveau en fonction de la largeur de puits pour  $x=0.2$



**Figure 2.13** Energie de quantification de premier niveau en fonction de la largeur de puits pour x=0.45

On a présenté dans les figures 2.12 et 2.13 Energie de quantification de premier niveau en fonction de la largeur de puits Pour x=0.2 et x=0.45 respectivement, de les électrons, les trous lourds et les trous légers

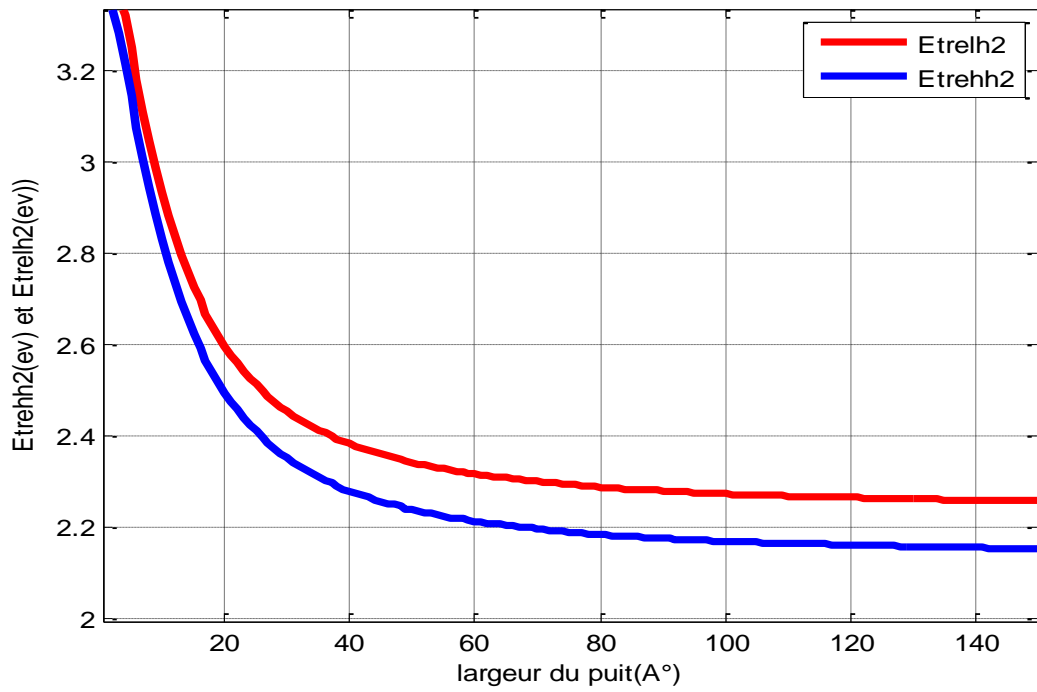
### 2.11 Evolution de l'énergie de transition en fonction de la largeur du puits

Les énergies de transition  $E_{tr}(e-hh)$  « électrons - trous lourds » et  $E_{tr}(e-lh)$  « électrons - trous légers »

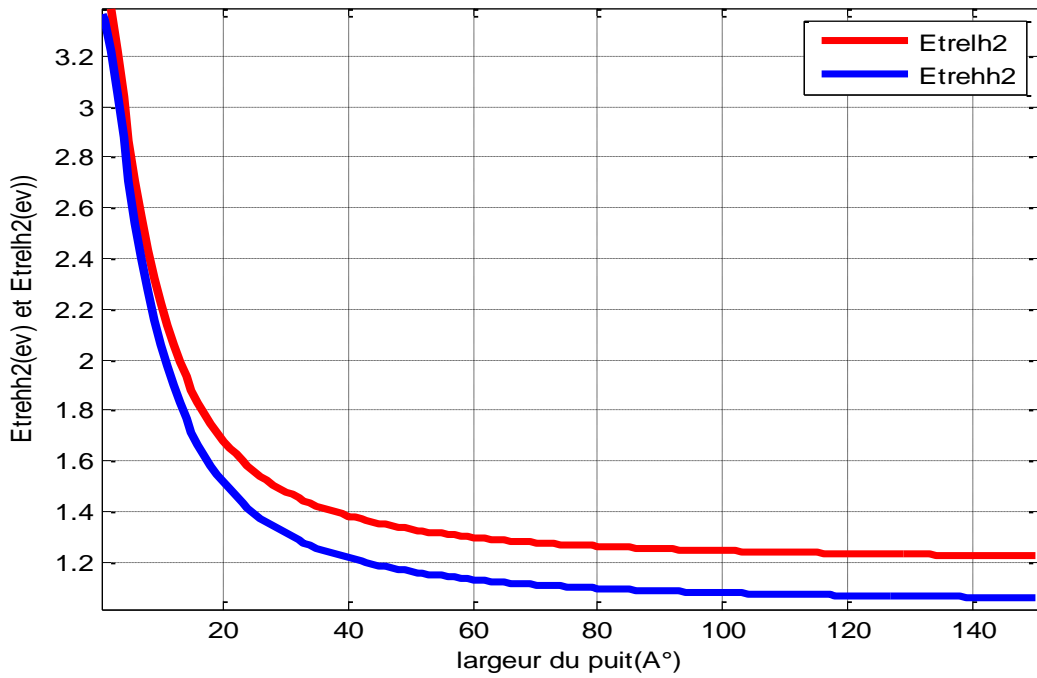
Sont données par :

$$E_{tr}(e-hh) = E_{en} + E_{hhn} + E_{gc} \quad (2.1)$$

$$E_{tr}(e-lh) = E_{en} + E_{lhn} + E_{gc} \quad (2.2)$$



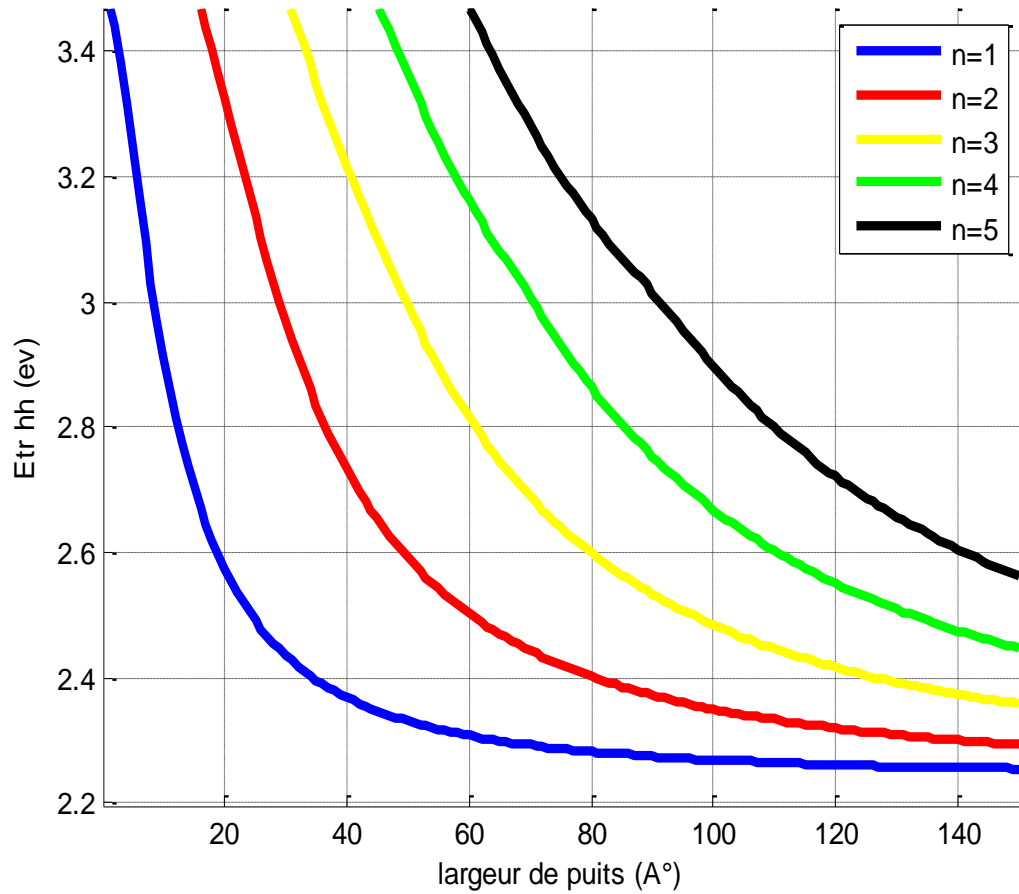
**Figure 2.14** Energie de transition « électrons - trous lourds » et « électrons – trous -légers » de premier niveau pour x=0.20



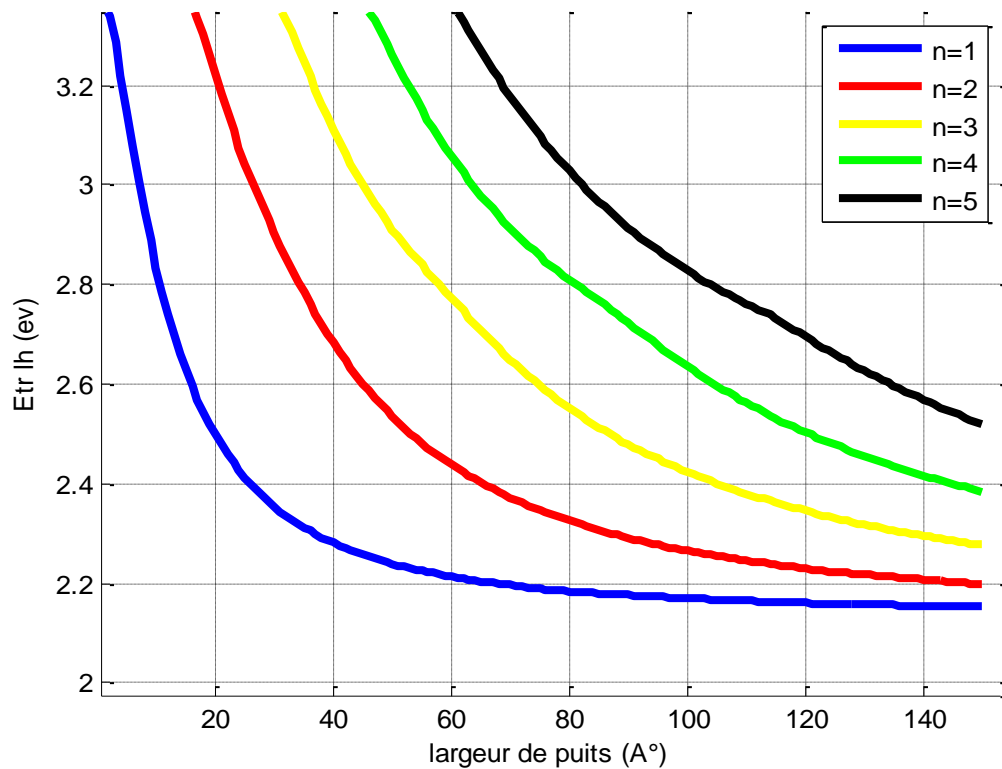
**Figure 2.15** Energie de transition « électrons - trous lourds » et « électrons – trous -légers » de premier niveau pour x=0.45.



La figure 2.14 et 2.15 représenté la variation de l'énergie de transition « électrons - trous lourds »  $E_{tr}(e-hh)$  et « électrons - trous légers »  $E_{tr}(e-lh)$  de premier niveau en fonction de la largeur de puits, en remarque que l'énergie de transition est diminuée avec l'augmentation de la largeur de puits, ceci est dû a la diminution de l'énergie de quantification qui implique automatiquement l'augmentation de la longueur d'onde.



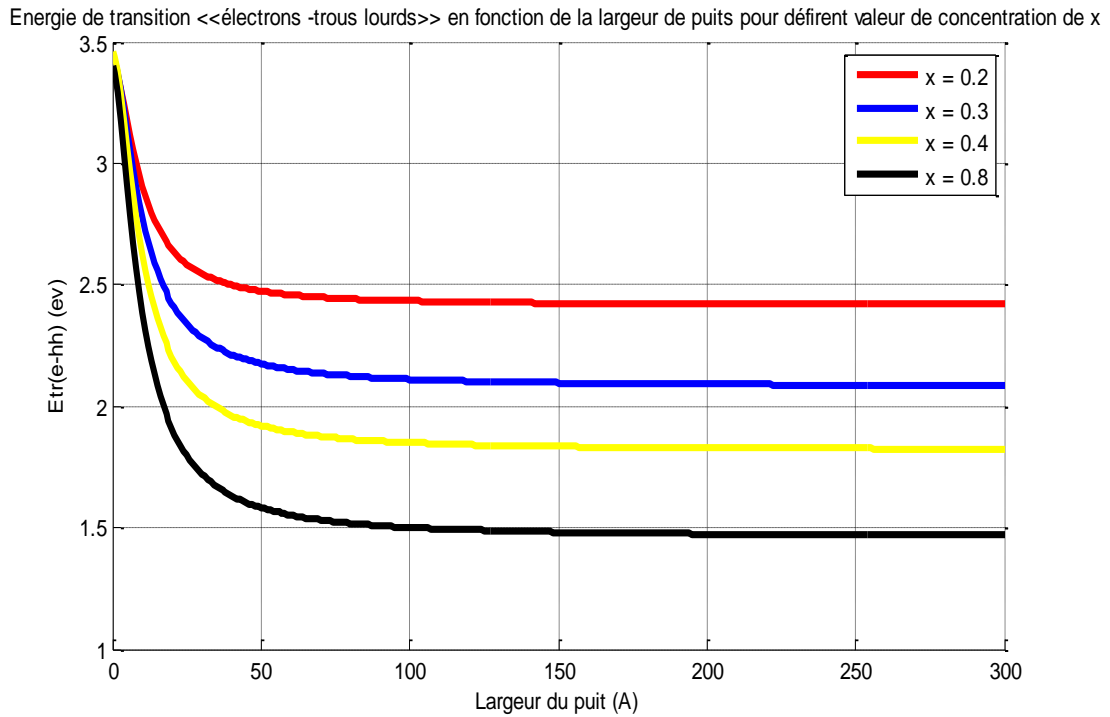
**Figure 2.16** Energie de transition « électrons - trous lourds » et de Cinq premiers niveaux pour  $x=0.2$



**Figure 2.17** Energie de transition « électrons - trous légers » de Cinq premiers niveau pour  $x=0.2$

Les figures 2.16 et 2.17 représentent les énergies de transition « électrons- trous lourds » et « électrons trous légers » pour  $x=0,2$ . pour les cinq premiers niveaux

Change le valeur de x :



**Figure 2.18** Energie de transition « électrons -trous lourds » en fonction de la largeur de puits pour différent valeur de concentration de x

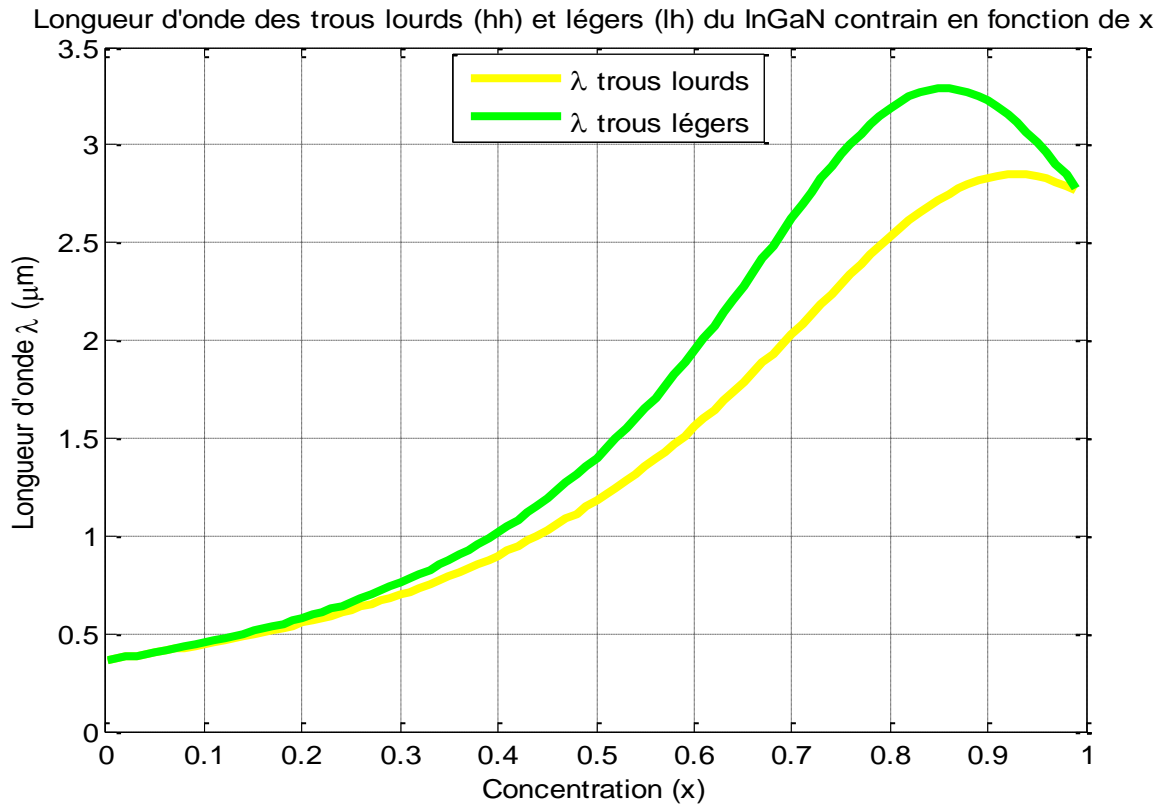
La figure 2.18 représente la variation de l'énergie de transition « électrons -trous lourds » en fonction de la largeur de puits pour  $x=0.2$ ,  $x=0.3$ ,  $x=0.4$ ,  $x=0.8$ . On remarque que l'augmentation de la concentration implique une diminution de l'énergie de transition.

## 2.12 Calcul de la longueur d'onde

Le Calcul de la longueur d'onde est donné par les expressions suivantes

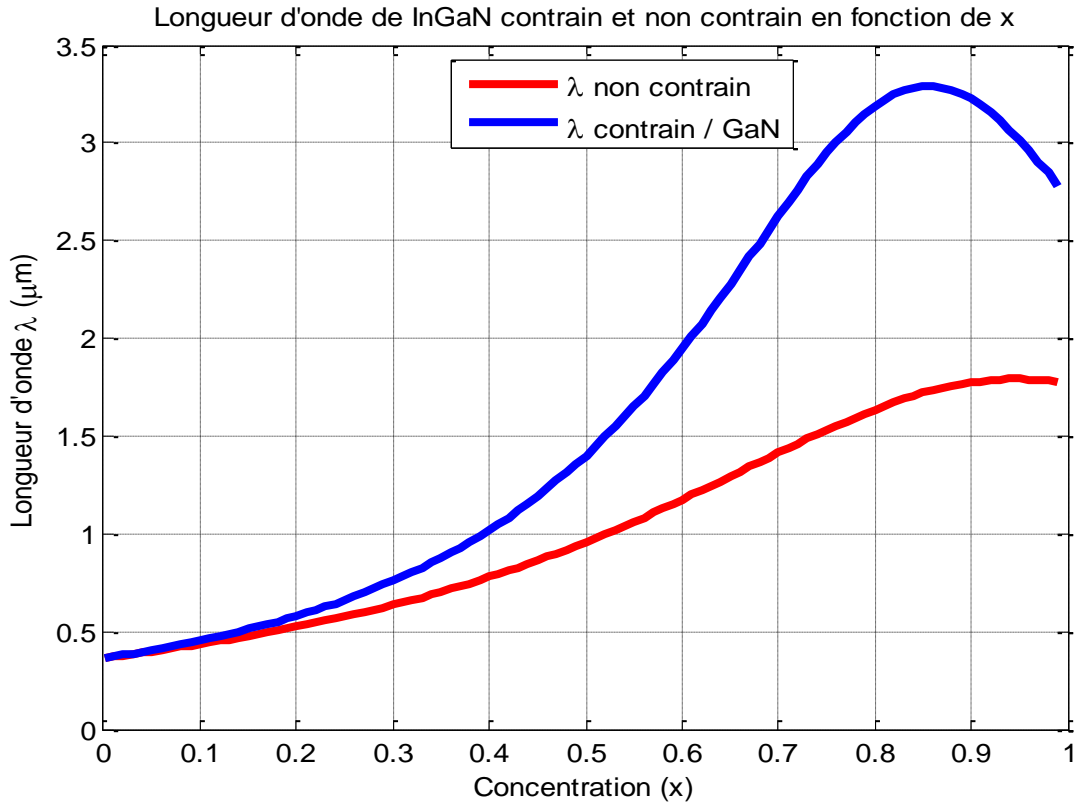
$$\lambda_{e_{nh}} (\text{um}) = 1.24 / E_{tr}(e-hh) (\text{ev}) \quad (2.3)$$

$$\lambda_{e_{ih}} (\text{iim}) = 1.24 / E_{tr}(e-h) (\text{ev}) \quad (2.4)$$



**Figure 2.19** Variation de la longueur d'onde des trous lourds (hh) et trous légers (lh) en fonction de la largeur de puits pour  $x=0.2$ .

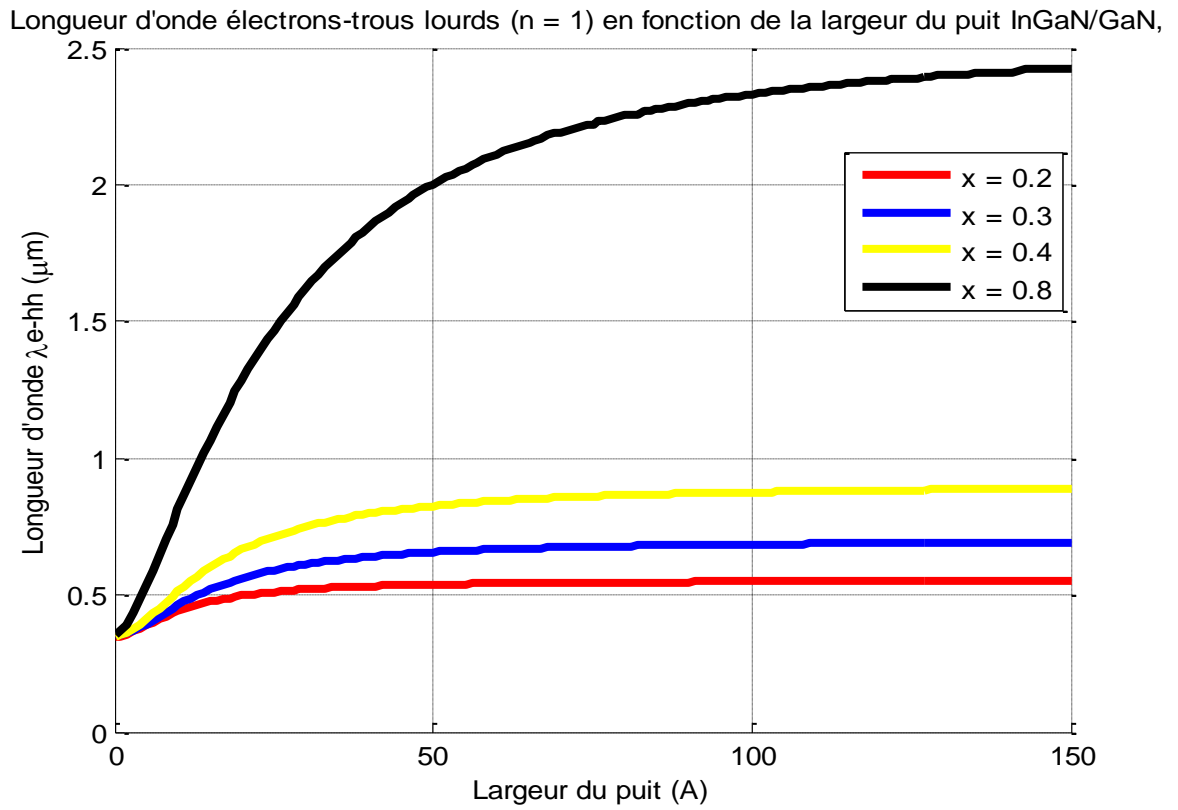
La figure 2.19 représente la variation de la longueur d'onde en fonction de la largeur de puits.  $\lambda_{ehh}$  représente la longueur d'onde « électrons -trous lourds » et  $\lambda_{elh}$  représente la longueur d'onde « électrons -trous légers ». On constate qu'afin d'avoir une longueur d'onde  $\lambda_{ehh}$  de 2.55  $\mu\text{m}$ , la largeur de puits quantique doit être prise égale à 1 A



**Figure 2.20** Variation de la longueur d'onde en fonction de la concentration pour  $x=0.2$

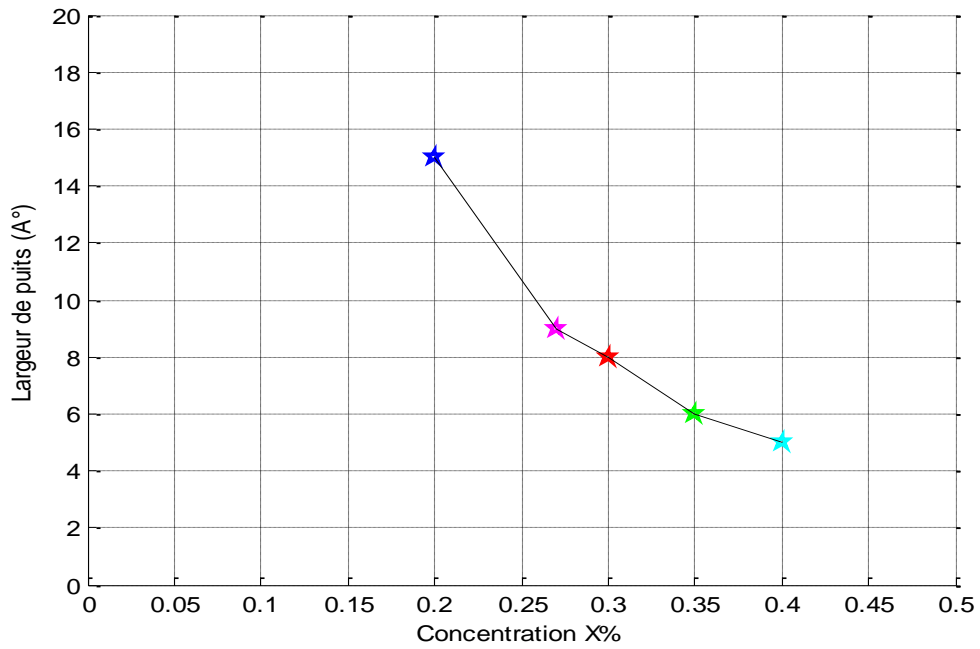
La figure 2.20 représente la variation de la longueur d'onde en fonction de la largeur de puits.  $\lambda$  représente la longueur d'onde «contrain/GaN» et  $\lambda$  représente la longueur d'onde «non contrain». On constate qu'afin d'avoir une longueur d'onde  $\lambda$  de 2 u.m, la largeur de puits quantique doit être prise égale à 1 Å

Pour change la valeur de x :

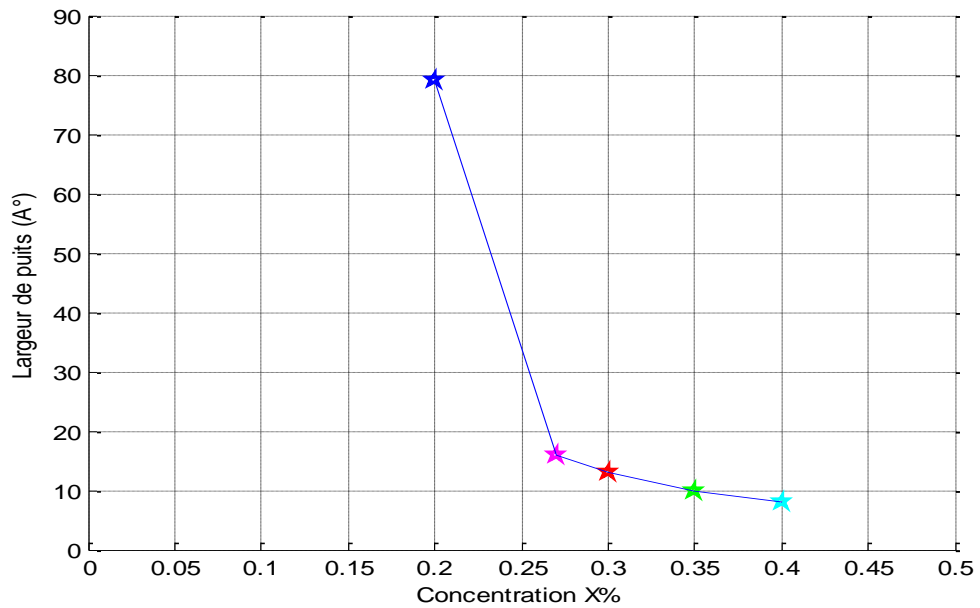


**Figure 2.21** Variation de la longueur d'onde pour différent valeur de concentration x

On conclut que l'augmentation de la concentration de x implique une augmentation de la longueur d'onde.



**Figure 2.22** Les valeurs de concentration x pour une longueur d'onde 0.45 μm.



**Figure 2.23** Les valeurs de concentration x pour une longueur d'onde 0.5 μm.

Les figures 2.22 et 2.23 représentent les largeurs de puits en fonction de la concentration x permettant d'avoir des longueurs d'onde égales à 450 nm et 500 nm respectivement.

## 2.13 Conclusion

Dans ce chapitre nous avons abordé la partie simulation, nous avons présenté les résultats obtenus, on a commencé par simuler le gap non contraint et le gap sous contrainte, ainsi que le décalage de la bande de conduction et de valence. En suite, on a utilisé l'équation de Schrödinger, pour calculer les énergies de quantifications et de transitions de notre structure à base de GaN/InGaN/GaN. On a également déterminé les concentrations et des largeurs de puits permettant un fonctionnement aux longueurs d'onde de 450 nm et 500 nm.



## II) études de la structure à puits quantique à base d'InGaN/GaN

### 1.2.1 Description du nitrure d'Indium-Gallium

L'InGaN apparaît à l'heure actuelle comme le matériau le plus prometteur pour les applications photovoltaïques. Il est activement étudié parce qu'il représente une nouvelle catégorie de matériaux possédant des propriétés uniques :

Un large gap d'énergie interdite direct, lui permettant une large couverture spectrale, de fortes liaisons interatomiques ou encore une forte conductivité thermique. Son gap est modulable avec le taux de substitution de l'Indium dans l'alliage. Avant d'étudier le composé ternaire l'InGaN, il convient d'étudier les propriétés essentielles de ses composés binaires qui sont le nitrure d'indium (InN) et Le nitrure de gallium GaN.

#### 1.2.1.1 Caractéristiques structurales

##### a) Structure cristalline

Les nitrures GaN et InN se présentent essentiellement sous deux formes cristallines : la structure hexagonale « wurtzite » et la structure cubique « zinc -blende ».

Dans les conditions ambiantes, la structure la plus stable thermodynamiquement est la structure hexagonale « wurtzite » (figure 2.1). Cette structure est définie par trois paramètres, la largeur d'un côté hexagonale **a**, la hauteur de la maille élémentaire **c**, et le paramètre interne **u** décrivant la séparation des sous-réseaux des anions ( $N^{3-}$ ) et des cations ( $Ga^{3+}$ ) selon l'axe **c** [4]. Ce dernier est défini comme étant la longueur de la liaison cation-anion divisée par **c**. Il est égal à 0,375 pour un cristal wurtzite idéal.

La deuxième structure dite « zinc-blende » (figure 2.2) est constitué de deux sous réseaux cubiques à faces centrées, l'un est constitué d'un élément III et l'autre d'un élément V, les deux sous réseaux étant décalés du quart de la diagonale principale soit  $\frac{a}{4}$ , « a » étant la longueur du cube, Le tableau 2.1 présente les paramètres de maille des nitrures GaN et l'InN pour les deux structures.

Cette structure ne peut quant-à elle être obtenue que dans des conditions de croissance bien particulières, elle est thermodynamiquement instable. Dans les nitrures les liaisons sont de type covalent présentant de propriétés partiellement ioniques, telle que l'une des quatre liaisons reçoit deux électrons de l'élément V.

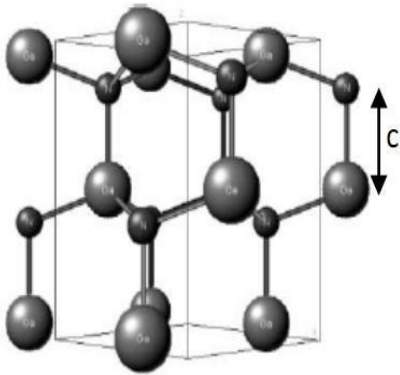


Figure 1.2.1 Structure wurtzite, exemple du GaN .

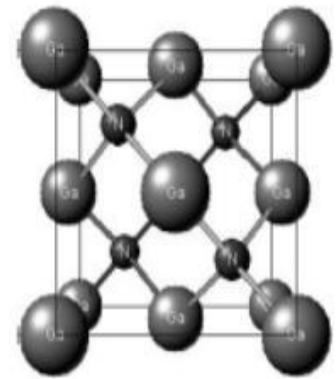


Figure 1.2.2 Structure cubique zinc-blende, Exemple du GaN [3].

Forme	Cubique	Wurtzite		
		$a$ ( $\text{Å}^\circ$ )	$c$ ( $\text{Å}^\circ$ )	$u$ ( $\text{Å}^\circ$ )
GaN	4.47	3.189	5.185	0.377
InN	4.96	3.54	5.70	0.378

Tableau 1.2.1 Paramètres structuraux  $a, c$  et  $u$  pour le GaN et l'InN [3].

## b) Propriétés de bandes

Les semi-conducteurs InN, GaN, ont un gap direct c'est adire le minimum de la bande de conduction et le maximum de la bande de valence se trouve au même point  $k$  au centre de la zone de Brillouin ( $k = 0$ ).

Dans la phase hexagonale et au voisinage du point  $\Gamma$ , on a une bande de conduction unique mais la bande de valence est divisée en trois bandes nomines HH, LH et SO (bandes des trous lourds, trous légers et spin orbital) accusé des interactions spin orbite et du champ cristallin qui levé la dégénérescence.

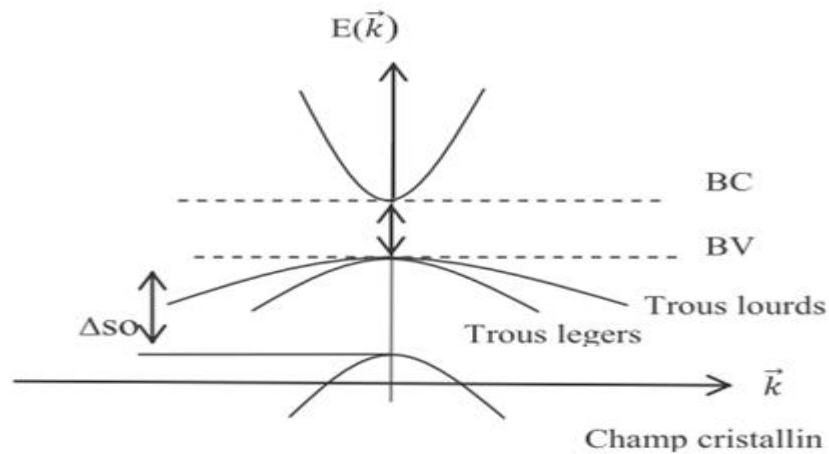


Figure 1.2.3 schéma de la structure de bande

## c) Polarisation interne et piézoélectricité

### • Polarisation interne

La structure wurtzite peut être représentée par deux sous-réseaux interpénétrés, celui des anions ( $N_{3-}$ ) et celui des cations ( $Ga_{3+}$ ), décalés selon l'axe  $c$ . Ce décalage peut être décrit par le paramètre  $u$ . Cette structure est dite non-Centro symétrique, c'est-à-dire que les barycentres de

ces deux sous-réseaux ne se superposent (coïncident) pas, créant ainsi une polarisation interne et un caractère piézoélectrique.

La polarisation interne va séparer spatialement les électrons et les trous, et créer ainsi une accumulation de charge aux extrémités de la couche perpendiculairement à l'axe **c**. Cette accumulation de charges peut changer les propriétés électriques et la réactivité du matériau.

Matériaux	GaN	InN
$c/a$	1.6259	1.6116
( /m <sup>2</sup> )	- 0.029	- 0.032

**Tableau 1.2.2** Les valeurs de la polarisation spontanée du GaN et InN [12].

### • Polarisation piézoélectrique

Outre la polarisation interne, les nitrures-III possèdent également un caractère piézoélectrique. Cet effet est défini comme la création d'un champ électrique suite à une déformation mécanique, et réciproquement comme la création de déformations mécaniques lorsqu'on applique un champ électrique à un matériau. Il est dû au manque de symétrie dans la structure cristalline, à la nature fortement ionique des liaisons chimiques et aux déformations présentes dans le cristal (dus au désaccord de maille entre le matériau et le substrat, par exemple) [13].

La polarisation piézoélectrique peut s'exprimer sous la forme :

$$P_{piezo} = e_{33} \epsilon_3 + e_{31} \epsilon_1 + e_{32} \epsilon_2 \quad (1.32)$$

Avec :

- $e_{33}$  et  $e_{31}$  les coefficients piézoélectriques du matériau (C/m<sup>2</sup>).
- $\epsilon_1$  La déformation dans le plan (supposée isotopique), définie par  $\epsilon_1 = \epsilon_2 = (a - a_0) / a_0$  [sans dimension s.d].
- $\epsilon_3$  la déformation selon l'axe c, définie par  $\epsilon_3 = (-c_0) / c_0$  [s.d].
- $a_0$  Et  $c_0$  les paramètres de maille à l'équilibre [Å]

Matériaux	GaN	InN
$e_{31}$ [ $C/m^2$ ]	-0.49 / -0.32	-0.57
$e_{33}$ [ $C/m^2$ ]	0.73	0.97
$P_{sp}$ [ $C/m^2$ ]	-0,029/ -0,034	-0,032 / -0,042

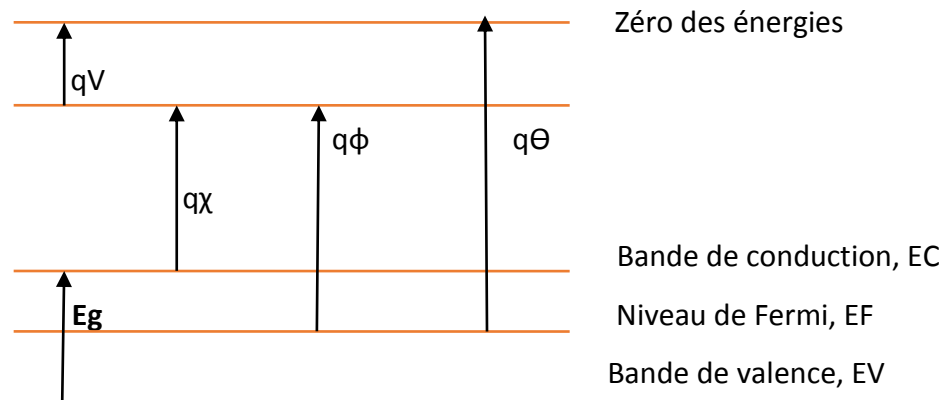
**Tableau 1.2.3** Constantes piézoélectriques pour le GaN et l'InN[1]

### 1.2.1.2 Propriétés électriques

Les propriétés électriques d'un matériau proviennent de son gap d'énergie interdite  $E_g$ , et de sa densité de porteurs. Avant de détailler ces valeurs pour l'InGaN, nous allons rappeler rapidement quelques notions essentielles de physique. Le gap d'énergie interdite est défini comme étant la différence d'énergie entre le haut de la bande de valence et le bas de la bande de conduction.

#### ❖ Diagramme d'énergie

Le diagramme d'énergie d'un matériau est présenté dans la figure 2.4.



**Figure 1.2.4** Diagramme des énergies pour un matériau.  $q$  est la charge élémentaire,  $V$  le potentiel électrostatique pouvant régner dans le matériaux,  $\chi$  l'affinité électronique,  $\Theta$  le travail de sortie et  $\phi$  le potentiel d'ionisation [1].

Le bas de la bande de conduction varie spatialement avec le potentiel électrostatique macroscopique,  $V$  régnant à l'intérieur du matériau. L'affinité électronique,  $\chi$  peut être définie comme la quantité d'énergie dégagée suite à la capture d'un électron par un atome en phase gazeuse. Plus l'affinité électronique est grande plus la capture d'un électron par l'atome dégage de l'énergie et plus cette capture est stable. Le travail de sortie,  $\Phi$  correspond au travail à fournir pour extraire une particule du système sans l'emmener à l'infini, mais en la laissant à proximité immédiate du système où elle reste soumise au même potentiel électrostatique  $V$ . Enfin, le potentiel d'ionisation,  $\varphi$  est l'énergie nécessaire pour extraire une particule du système et la mettre à l'infini.

### ❖ Niveau de Fermi

Le niveau de Fermi  $E_F$ , correspond au plus haut niveau énergétique occupé par un électron à  $0\text{ K}$ . La probabilité d'occupation d'un niveau énergétique  $E$ , par un électron obéit à la statistique de Fermi-Dirac, défini par l'équation (1.33). La probabilité d'occupation de l'énergie  $E$  par un trou est

$$f(1-(E))$$

$$f(E) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E - E_F}{kT}\right)} \quad (1.33)$$

- $E_F$  le niveau de Fermi [eV].
- $k$  la constante de Boltzmann  $8.617 \times 10^{-5}$  [eV.K<sup>-1</sup>].
- $T$  la température [K] .

Il est également possible de représenter le diagramme de bande d'un semi-conducteur dans l'espace réciproque qui est l'espace des vecteurs d'onde,  $k$ , comme le montre la figure 2.5.

### ❖ Densité d'état

Les bandes de valence et de conduction sont composées de niveaux énergétiques continus, on parle aussi d'états. Le nombre de ces niveaux n'est cependant pas constant à cause des différents niveaux électroniques des atomes. On parle alors de densité d'état. Ces dernières dépendent des caractéristiques du matériau et de la température.

Pour le GaN, la densité d'état aux bords des bandes de conduction et de valence,  $N_c$  et  $N_v$  respectivement, est donnée par :

$$N_c = 2 \left( \frac{2\pi m_e K_B T}{h^2} \right)^{3/2} \approx 4,82 \cdot 10^{15} \cdot \left( \frac{m_e}{m_0} \right)^{3/2} \cdot T^{3/2} \approx 4,3 \cdot 10^{14} \cdot T^{3/2} \quad (1.34)$$

$$N_v = 2 \left( \frac{2\pi m_h K_B T}{h^2} \right)^{3/2} \approx 8,9 \cdot 10^{15} \cdot T^{3/2} \quad (1.35)$$

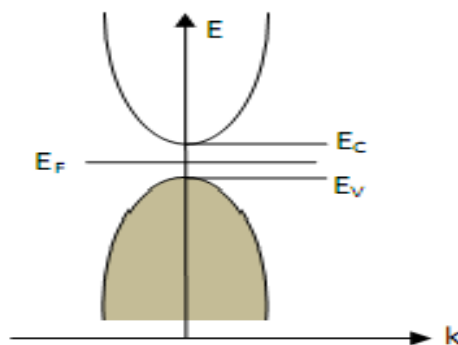
• La densité d'état des bandes de conduction et de valence pour l'InN est décrite par :

$$N_c = 4,82 \cdot 10^{15} \cdot \left( \frac{m_e}{m_0} \right)^{3/2} \cdot T^{3/2} \approx 1,76 \cdot 10^{14} \cdot T^{3/2} \quad (1.36)$$

$$N_v = 10^{16} \cdot T^{3/2} \quad (1.37)$$

Avec :

- $m_e$  la masse effective des électrons dans la bande de conduction ( $m_e=0,2m_0$  pour le GaN et  $0$ , pour l'InN) [kg].
- $m_h$  la masse effective des trous dans la bande de valence ( $m_h=0,8m_0$  pour le GaN et  $0$ , pour l'InN) [kg].
- $m_0$  la masse d'un électron [ $9.109 \times 10^{-31}$  kg] ou [ $.5101$  kg].
- $h$  la constante de Planck [ $4.136 \times 10^{-15}$  eV.s].

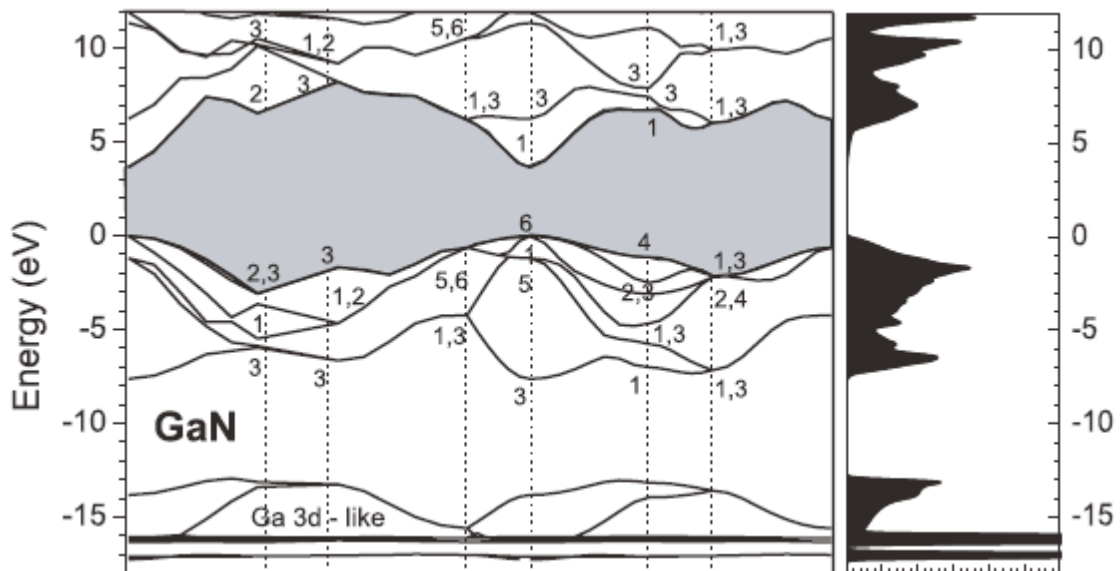


**Figure 1.2.5** Schéma du diagramme de bande dans l'espace réciproque à 0 K. La bande de valence est remplie par les électrons et aucun électron ne se trouve dans la bande de conduction [1].

## ❖ Gap d'énergie interdite dans les nitrures

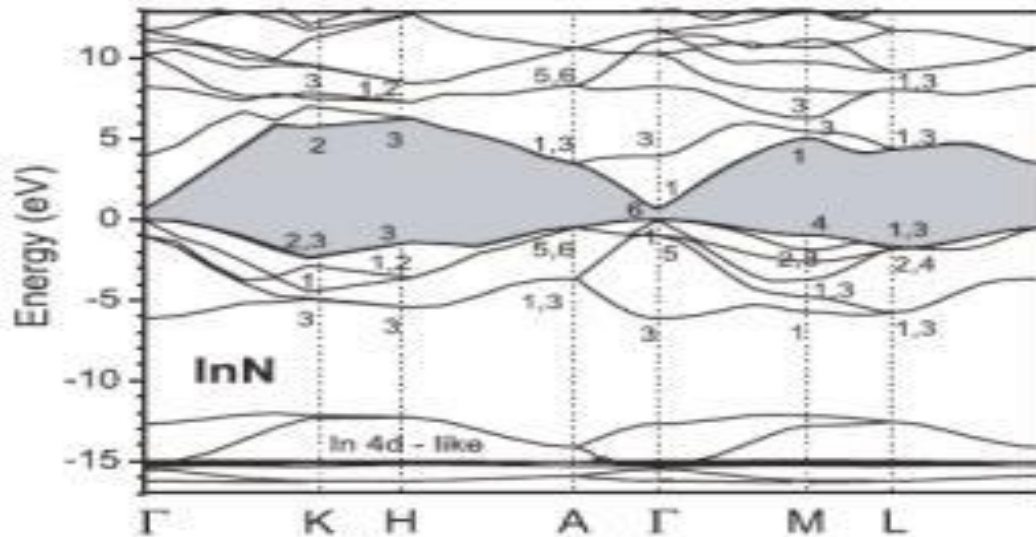
La caractéristique principale pour laquelle les nitrures sont tant étudiés est leur gap d'énergie interdite direct, y compris à travers leurs alliages. Ceci permet d'avoir de meilleurs rendements de conversion ou d'émission de lumière, pour le photovoltaïque ou pour les LEDs, par exemple. De plus, leurs alliages permettent de couvrir quasiment tout le spectre solaire, de l'infrarouge (IR) à l'ultraviolet (UV).

Le gap d'énergie interdite est de 3.39 eV (366 nm) pour le GaN et de 0.7 eV (1771 nm) pour l'InN à température ambiante 300K [5]. Le diagramme de bande du GaN est montré dans la figure 2.6 et celui de l'InN est représenté dans la figure 2.7. Le GaN et l'InN sont des matériaux à gap direct, le minimum de leur bande de conduction est donc aligné au maximum de leur bande de valence dans l'espace des vecteurs d'onde.



**Figure 1.2.6** Diagramme de la bande du GaN. Le maximum de la bande de valence est pris comme le 0 des énergies. Le gap d'énergie interdite correspond à la partie grisée [3].





**Figure 1.2.7** Diagramme de bande de l'InN. Le maximum de la bande de valence est pris comme le zéro des énergies. Le gap d'énergie interdite correspond à la partie grisée [3].

### ❖ Evolution du gap d'énergie dans l'In<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>N

A partir des gaps d'énergie interdite des composés binaires GaN et InN, il est possible de déterminer le gap d'énergie de l'InGaN en utilisant la loi de Vegard avec un paramètre de courbure, comme le montre la figure 2.8. La loi de Vegard est une loi empirique indiquant que les valeurs des propriétés d'un alliage (gap d'énergie, paramètre de maille, constantes élastiques, etc...) peuvent être déterminées par une interpolation linéaire des valeurs des propriétés de ses composants [3]. Cependant, les valeurs mesurées peuvent dévier de l'interpolation linéaire à cause de la taille relative des constituants, du volume relatif par électron de valence, les effets de la zone de Brillouin, et des différences électrochimiques entre les éléments [3]. On doit alors introduire un paramètre de courbure dans l'expression afin de suivre les données expérimentales. La loi de Vegard avec paramètre de courbure est définie par:

$$E_g^{InGaN} = (1 - x)E_g^{GaN} + xE_g^{InN} - bx(1 - x) \quad (1.38)$$

Avec :

- $x$  la concentration d'Indium dans l' $In_xGa_{1-x}N$  [s.d] .
- $b$  le paramètre de courbure [eV] .
- $E_g^{InGaN}$  le gap d'énergie de l'InGaN [eV] .
- $E_g^{GaN}$  le gap d'énergie du GaN [eV] .
- $E_g^{InN}$  le gap d'énergie de l'InN [eV] .

La courbe en trait plein de la figure 2.8 correspond à l'ajustement des points expérimentaux en utilisant l'expression (1.38) avec  $E_g^{GaN}=3.42\text{eV}$ ,  $E_g^{InN}=0.77\text{eV}$ , et comme paramètre de courbure  $b=1.43\text{eV}$  [3]. La courbe en pointillés représente l'ajustement des points du côté riche en Ga en utilisant l'ancien gap de l'InN, soit 1.9eV. On voit alors la grande déviation de cette courbe avec les mesures expérimentales à partir d'environ 30% d'indium. Cette valeur de 1.43eV pour le paramètre de courbure a également été rapportée par Wu et al. Est en accord avec la plupart des prédictions théoriques [14,15].

Cependant, des effets extérieurs tels que la déformation, le dopage, ou la fluctuation de la composition peuvent faire varier ce paramètre.

Pour le coté riche en Ga, La courbe en trait plein correspond à l'ajustement des points en utilisant un paramètre de courbure de  $b=1,43\text{ eV}$ . La courbe en pointillés est l'ajustement des points du coté riche en Ga en prenant en compte 1,9 eV pour le gap de l'InN [2].

### ❖ Evolution du gap d'énergie interdite en fonction de la température

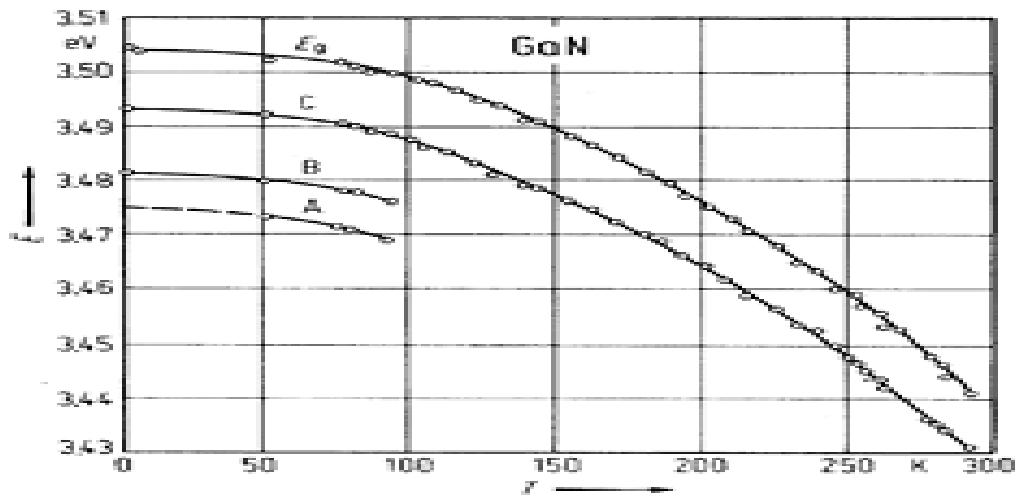
L'évolution du gap d'énergie interdite en fonction de la température peut généralement être décrite par l'expression de Varshni :

$$E_g(T) = E_g(0) - \frac{\alpha T^2}{T+\beta} \quad (1.39)$$

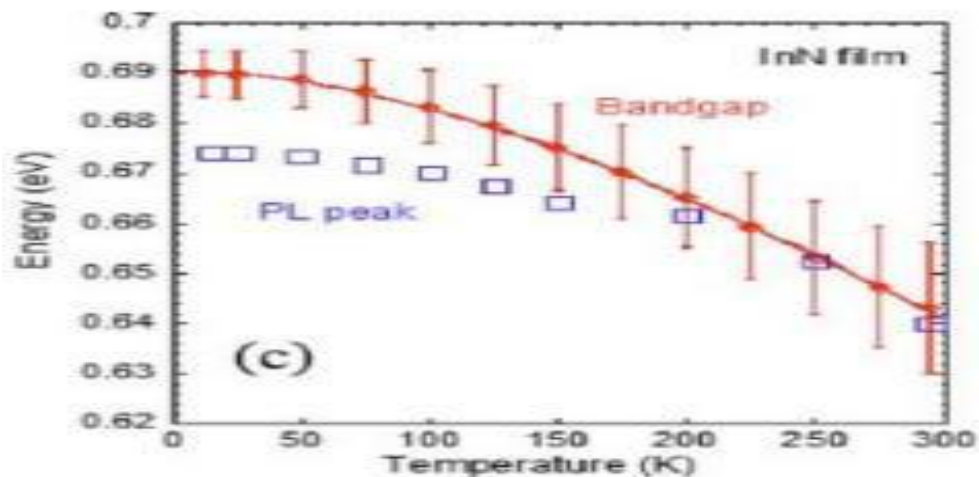
Avec

- $(0)$  le gap d'énergie du matériau à  $0K$  [ $eV$ ].
- $\alpha$  une constante empirique [ $eV.K^{-1}$ ].
- $\beta$  une constante associée à la température de Debye [ $K$ ].

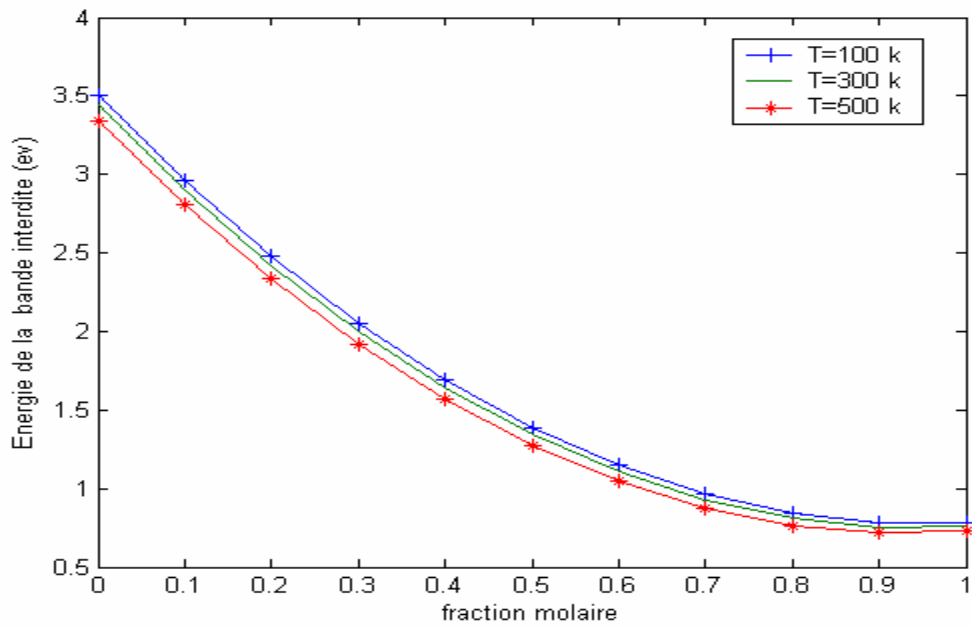
Ces paramètres pour le GaN et l'InN sont rassemblés dans le tableau 2.4. L'évolution des gaps d'énergie de GaN et de l'InN en fonction de la température est représentée dans la figure 2.9 et la figure 2.10, respectivement.



**Figure 1.2.8** Evolution du gap d'énergie de GaN en fonction de la température. Les courbes A, B et C font référence aux excitons du même nom [3].



**Figure 1. 2.9** Evolution du gap d'énergie pour InN en fonction de la température. Les données expérimentales de photoluminescence sont également montrées [3].



**Figure 1.2.10** : Influence de la température sur la variation de l'énergie de la bande interdite en fonction de la fraction molaire de l'Indium.[16]

	GaN			InN	
	Monemar	Bougrov et al.	Vurgaftman Et Meyer	Wu et al.	Vurgaftman et Meyer
$\alpha$ [ <i>meV.K</i> <sup>-1</sup> ]	0.508	0.77	0.909	0.41	0.245
$\beta$ [ <i>K</i> ]	996	600	830	454	624
$E_g$ (0K) [ <i>eV</i> ]	3.50	3.47	3.510	0.69	0.78
$E_g$ (300K) [ <i>eV</i> ]	3.44	3.39	3.44	0.64	0.75

**Tableau 1.2.4** Paramètres de Varshni et gap d'énergie à 0 K et 300 k du GaN et de l'InN.[3]

❖ **Mobilité des porteurs dans les nitrures**

La mobilité des porteurs libres dans l'  $In_xGa_{1-x}N$  est présentée dans la figure 2.11 avec  $x$  la concentration de Ga [2]. On observe que la mobilité diminue avec la concentration de Ga. Ceci est dû à la fois à l'augmentation de la masse effective des électrons avec l'augmentation de la concentration de Ga dans l'  $In_xGa_{1-x}N$  ( $me_{GaN}=0,2m_0$  et  $me_{InN}=0,11 m_0$ ), mais aussi à l'augmentation du phénomène de diffusion des porteurs à cause de l'alliage et des défauts qui augmentent avec la concentration de Ga dans l'  $In_xGa_{1-x}N$ . On observe également que la mobilité est quasiment indépendante de la température.

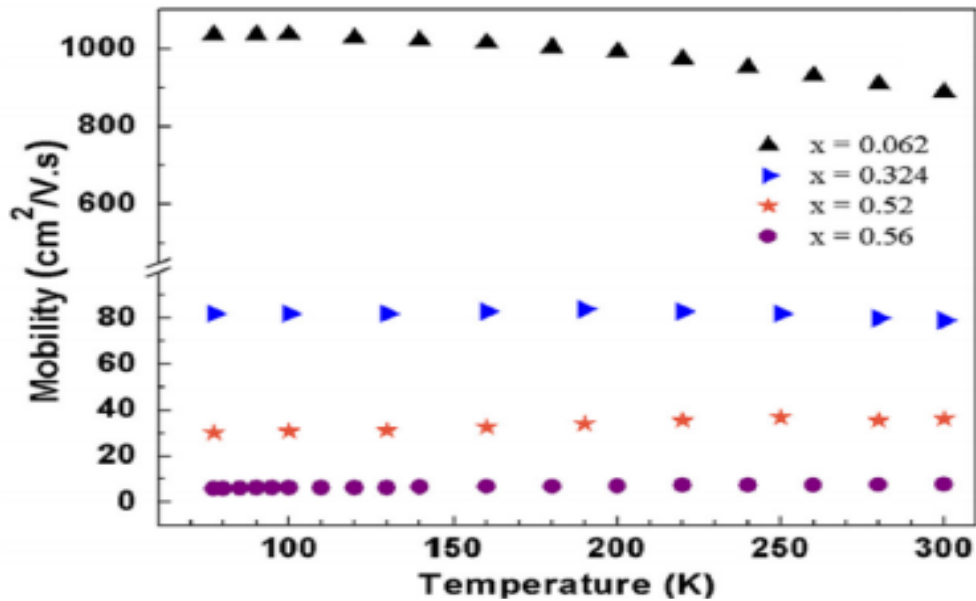


Figure1. 2.11 Mobilité des porteurs libres dans  $In_xGa_{1-x}N$  en fonction de la température [1].

### ❖ Longueur de diffusion

La longueur de diffusion  $L$  est la distance moyenne sur laquelle les porteurs peuvent se déplacer par diffusion. Elle est définie par :

$$L = \sqrt{D\tau} \tag{1.40}$$

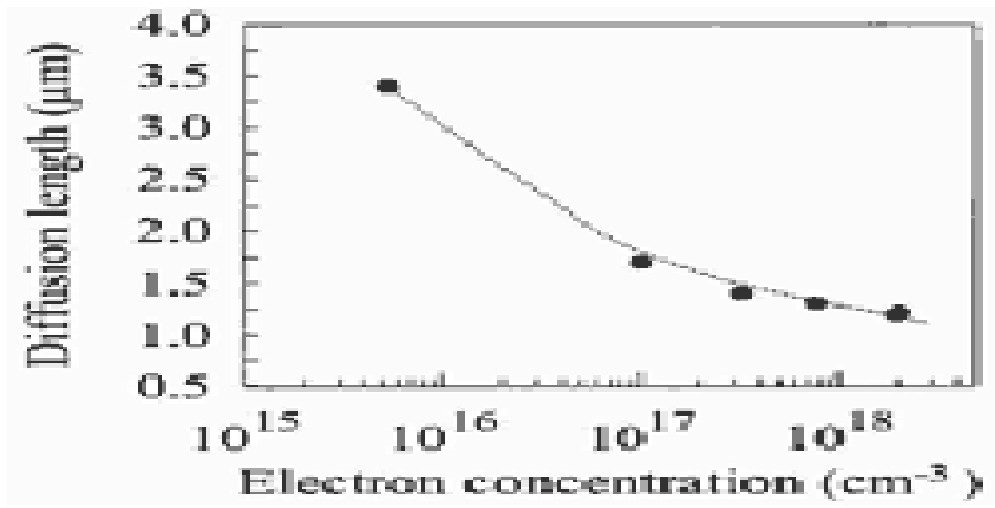
Avec

➤  $\tau$  le temps de vie des porteurs .

- $D$  le coefficient de diffusion des porteurs  $\text{cm}^2.\text{s}^{-1}$ , défini par :  $D = \frac{KT}{q} \mu$  (1.41)
- $\mu$  la mobilité des porteurs  $\text{cm}^2.V^{-1}.\text{s}^{-1}$ .

La longueur de diffusion est un paramètre à connaître lors de la conception d'un composant électronique, comme une cellule solaire. En effet, si les électrodes collectant le courant produit par la cellule sont éloignées d'une distance supérieure à la longueur de diffusion, alors les charges se recombineront avant d'être collectées.

La figure 2.12 présente l'évolution de la longueur de diffusion des trous dans le GaN en fonction de la concentration d'électrons. On observe que la longueur de diffusion des trous chute de manière quasiment exponentielle avec l'augmentation de la concentration des électrons à cause de l'augmentation de la probabilité de recombinaison.



**Figure 1.2.12** Longueur de diffusion des trous dans GaN en fonction de la concentration d'électrons [1].

Les propriétés électriques du GaN et de l'InN sont rassemblées dans le tableau 2.5.

	GaN	InN
--	-----	-----

Gap d'énergie interdite (ev)	3.39	0.7
Affinité électronique (ev)	4.1	5.8
Masse effective des électrons, (me)	0.20m0	0.11m0
Masse effective des trous,( mh)	0.80m0	0.65m0
Densité d'états effective de la bande de conduction, (NC cm-3)	2.3×10 <sup>18</sup> 4.3×10 <sup>14</sup> .T32	9×10 <sup>17</sup> 1.76×10 <sup>14</sup> .T32
Densité d'états effective de la bande de valence,( NV )	4.6×10 <sup>19</sup> 8.9×10 <sup>15</sup> .T32	5.3×10 <sup>19</sup> 1016.T32
Mobilité des électrons (cm <sup>2</sup> .V-1.s-1)	1400	3200
Mobilité des trous cm <sup>2</sup> .V-1.s-1	<20	17-36
Paramètres de Varshi : $\alpha$ (mevk)	0.909	0.41
$\beta$ (k)	830	454

**Tableau 1.2.5** Résumé des propriétés électriques du GaN et de l'InN à 300 K.[1]

## 1.2.2 Croissance et propriété d'InGaN

### 1. 2.2.1 La croissance d'InGaN

La croissance de couche épitaxiales d'InGaN de bonne qualité reste encore un challenge à l'heure actuelle. En effet, il est nécessaire de trouver un compromis entre une température de croissance élevée qui favorise la décomposition de l'ammoniac et la bonne cristallinité des couches et une température de croissance plus faible afin d'éviter la désorption de l'InN et donc une faible incorporation d'indium dans la couche. De plus, le désaccord de paramètre de maille entre les deux binaires GaN et InN est important, de l'ordre de 10,7% selon l'axe a et 15% selon l'axe c. Ces désaccords paramétriques importants provoquent une distorsion de la maille cristalline et donc une contrainte interne importante qui induit une tendance à la séparation de phase. Par ailleurs, cette séparation de phase est attribuée à la dissociation de l'InN à haute température et à la faible miscibilité de l'InN dans le GaN. Le désaccord paramétrique (la déformation)  $\Delta a/a$  entre GaN et InN est donnée par la relation [16] :

$$\Delta a/a = (a_{InN} - a_{GaN})/a_{GaN} \quad (1.54)$$

avec  $a_{InN}$  le paramètre de maille l'InN et  $a_{GaN}$  le paramètre de maille de GaN .

le paramètre de maille  $a$  de l'alliage  $In_xGa_{1-x}N$  est donne par la loi de Vegard[17] :

$$a_{InGaN} = x a_{InN} + (1-x) a_{GaN} \quad (1.55)$$

### 1.2.2.2 L'ENERGIE DE LA BANDE INTERDITE D'InGaN

Pour étudier certains propriétés ( $\gamma$ ) comme le paramètre de maille, la polarisation et les constants piézoélectrique peuvent être déduites par interpolation linéaire suivant la loi de Vegard :

$$\gamma_{(In_xGa_{1-x}N)} = (1-x) \cdot \gamma_{(GaN)} + x \cdot \gamma_{(InN)} \quad (1.56)$$

Contrairement aux autres paramètres d'InGaN, la loi de Vegard ne peut pas être utilisée pour Calculer l'énergie de la bande interdite .dans la phase hexagonale, un gap en fonction de la composition en indium est attendu dans les alliages  $In_xGa_{1-x}N$ .

L'évolution de l'énergie de bande interdite avec la composition peut être approximée par la relation quadratique de J.C.PHILIPS :

$$E_{g_{InGaN}} = (1-x)E_{g_{GaN}} + xE_{g_{InN}} - bx(1-x) \quad (1.57)$$

Avec :

$x$  : Fraction molaire

$b$  : Coefficient de non linéarité (bowling paramètre), ou paramètre de courbure

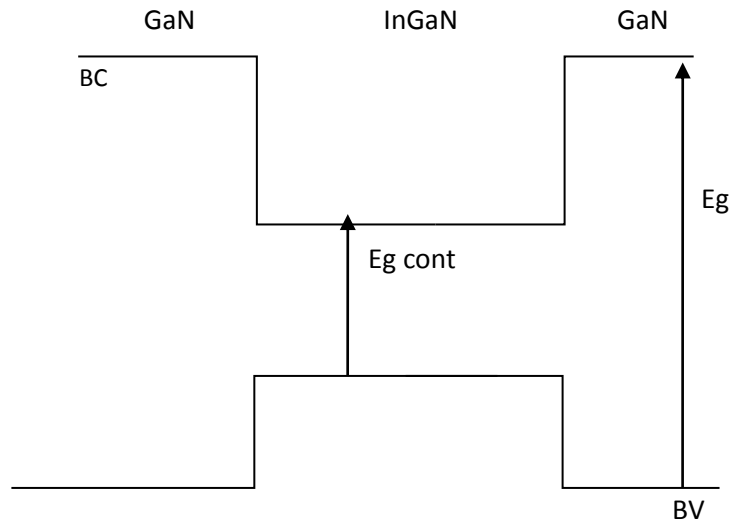
$b=3$  eV pour InGaN

### 1.2.2.3 LES PUIT QUANTIQUES InGaN/GaN



Les puits quantiques InGaN/GaN occupent une place centrale dans la recherche sur l'éclairage à source solide .nous allons tout d'abord rappeler brièvement les point clés du fonctionnement d'une LED à puits quantique nitrure :

Les puits quantiques sont insérés à la jonction entre le GaN de type n et le GaN de type p comme le montre la figure 2.19 .dans un cas idéal, les électrons venant de type n diffusent vers la bande de conduction des puits quantiques.de même, les trous venant de type p diffusent vers la bande de valence des puits quantiques.les porteurs se localisent alors dans les puits .comme les densités de porteurs n et p sont grandes dans les puits, la recombinaison radiative devient plus rapide que la recombinaison non-radiative, de sorte que l'efficacité du dispositifs est augmentée.de plus, la force d'oscillation est grande dans un puits quantiques, ce qui conduit aussi à l'augmentation du rendement de la LED en comparaison à celui d'une homojonction.

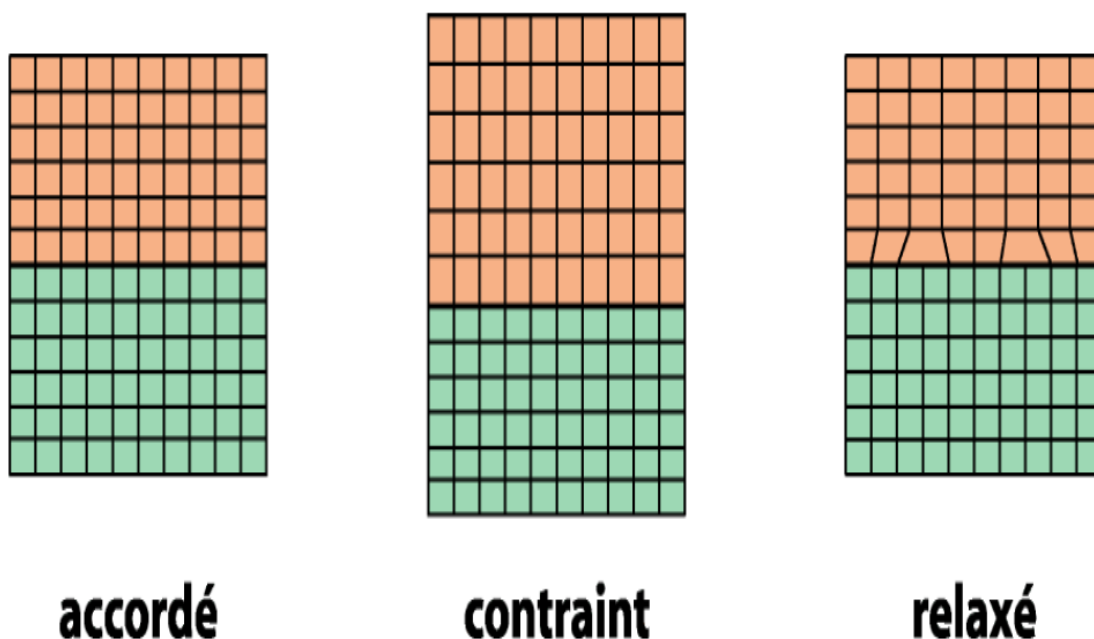


**Figure 1.2.13** puits quantique InGaN/GaN.

#### **1.2.2.4 Déformation et contrainte dans les puits quantique**

Pour l'homoépitaxie, les paramètres de mailles sont naturellement accordés et il n'y a pas de contraintes à l'interface .dans le cas de l'hétéroépitaxie, les paramètres de maille sont désaccordés et en fonction de ce désaccord, on peut distinguer trois régimes différents :

1. si le désaccord de maille est nul, l'hétéro structure est assez semblable à celles que l'on obtient en homoépitaxie. Toutefois, les propriétés physico-chimiques (coefficient de dilatation thermique, composition chimique,...) des deux matériaux présents peuvent être différents et influencer les propriétés structurales.
2. quand le film et le substrat présentent un désaccord de maille non nul, les deux mailles peuvent s'adapter pour accorde leurs paramètres cristallographiques dans le plan de croissance : c'est ce que l'on appelle une croissance pseudo morphique.
3. lorsque l'épaisseur de la couche contrainte augmente, l'énergie de contrainte augmente. la relaxation de la contrainte va avoir lieu soit par création de dislocations à l'interface (relaxation plastique), soit par formation d'ilots tridimensionnels (relaxation élastique).



**Figure 1.2.14** structures d'hétéro épitaxies accordées en maille, contrainte et relaxée [16].

### 1.2.3 Conclusion

Nous avons donc vu dans ce chapitre les caractéristiques et les propriétés de l'InGaN tant sur le plan structural, qu'électronique, Nous connaissons ses avantages (large gap direct selon toutes les compositions pouvant couvrir quasiment tout le spectre solaire)



### 3.1 Introduction

Nous exposons dans ce chapitre les paramètres nécessaires à la modélisation et à l'optimisation du gain optique, du facteur de confinement et du gain modal pour quelques systèmes lasers à puits quantiques à base de nitrures et de matériaux III-V.

Aujourd'hui, l'un des objectifs majeurs de la recherche fondamentale sur les nitrures d'éléments III-V est d'identifier les paramètres clefs qui gouvernent l'émission de lumière dans les nanostructures utilisées comme couche active dans les puits quantiques.

Dans un puits quantique, les électrons et les trous se collectent dans la zone active et des recombinaisons ont lieu, on obtient des niveaux électroniques discrets, ce qui conduit à des courbes de gain, dont la largeur spectrale est plus faible que dans le matériau massif.

### 3.2 Généralités sur les lasers à semi-conducteurs

Les confinements électrique et optique restent les deux voies d'approfondissement poursuivies pour continuer à faire progresser les structures laser. De la qualité de ces deux confinements dépendent en particulier le gain qui est le facteur le plus important pour qualifier une diode laser.

La maîtrise de l'épitaxie de couches minces a permis la réalisation de diode lasers à puits quantique. La quantification du mouvement des porteurs dans la direction de croissance induit une augmentation du gain, un rétrécissement de la bande du gain et une réduction du courant de seuil.

L'émission stimulée est responsable de l'amplification de la lumière dans le laser. Elle se produit dans le milieu actif quand il y'a inversion de population dans celui-ci. Un photon se propageant dans le milieu actif a plus de chance de provoquer la désexcitation d'un atome excité que de se faire absorber par un atome au niveau inférieur.

La figure 3.1 représente la milieu actif qui est placé dans un résonateur optique, constitué de deux miroirs, le premier est totalement réfléchissant alors que le second est semi-transparent pour permettre à la lumière de sortir de la cavité. Les photons étant réfléchis par les miroirs peuvent alors traverser plusieurs fois le milieu actif et provoquer l'émission stimulée d'un plus grands

nombre de photons. Lorsque ce processus d'amplification se produit dans le laser, on dit qu'il y'a oscillations.

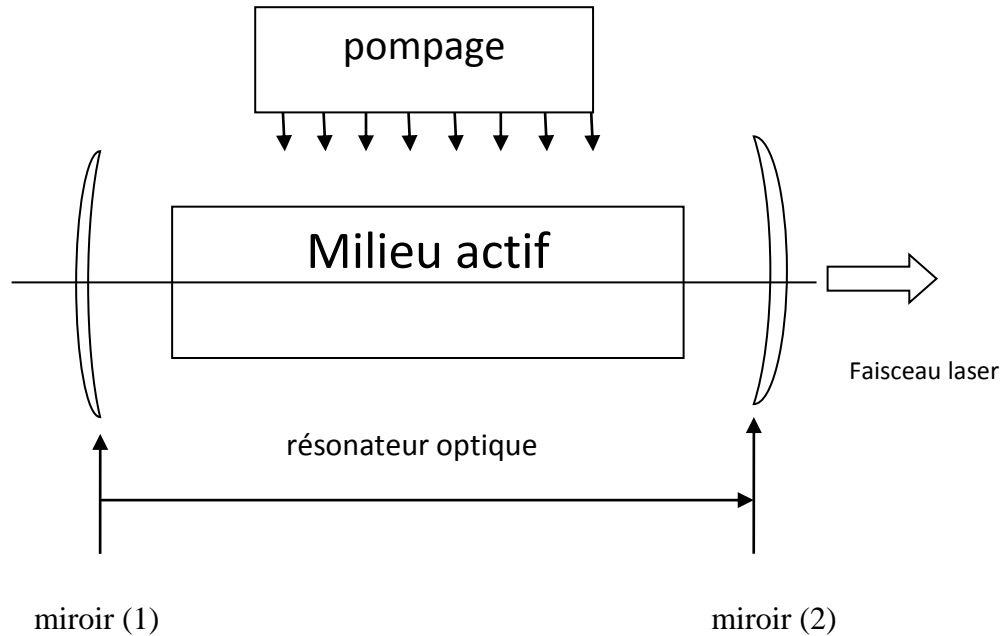


Figure 3.1 Diagramme schématique d'un milieu actif placé dans un résonateur optique constitué de deux miroirs.

### 3.3 Pseudo niveau de Fermi

Les semi-conducteurs de type III-V et II-VI sont caractérisés par coordination tétraédrique, chaque atome de volume établit des liaisons purement covalentes ou partiellement ioniques avec ses quatre premiers voisins, chaque liaison étant saturée par deux électrons.

La symétrie de translation du cristal regroupe ces états en bande d'énergie, les Combinaisons liantes sont saturées et donnent naissance à la bande de valence entièrement occupée, les combinaisons antiliantes sont totalement vides, elles donnent naissance à la bande de conduction.

Le niveau de Fermi est un paramètre d'équilibre thermodynamique, les densités des électrons et des trous sont caractérisées par le niveau de Fermi à l'équilibre Thermodynamique, lorsque l'excitation extérieure modifie les densités des porteurs, le niveau de Fermi n'est plus défini. Les porteurs injectés dans le semi-conducteur ont des énergies souvent différentes des énergies des extrema des bandes permises ( $E_v, E_c$ ) voir la figure 3.2.

Ces porteurs par leurs interactions avec le réseau cristallin perdent de l'énergie et se thermalisent dans les extrema ( $E_v, E_c$ ), la durée de cette thermalisation est conditionnée par le temps de relaxation qui est de l'ordre de  $10^{-13}$  s à  $10^{-12}$  s, la durée de vie des porteurs dans une bande est de l'ordre de  $10^{-9}$  s à  $10^{-7}$  s il en résulte que les électrons se thermalisent respectivement dans la bande de conduction et dans la bande de valence avant de se recombiner. Il s'établit alors dans le semi-conducteur excité un régime de pseudo-équilibre dans chacune des bandes.

La population des électrons et trous sont chacune en équilibre thermodynamique, mais indépendamment l'une de l'autre. Ce régime est défini par des pseudo-niveaux de Fermi.

$E_{fc}$  caractérise les densités et les distributions des électrons dans la bande de conduction, et  $E_{fv}$  caractérise les densités et les distributions des trous dans la bande de valence.

La distribution des porteurs dans une bande permise est régie par la statistique de Fermi-Dirac

$$f_c = \frac{1}{1 + e^{\frac{\xi_{cn} - E_{fc}}{KT}}} \quad (3.1)$$

$$f_v = \frac{1}{1 + e^{\frac{\xi_{vn} - E_{fv}}{KT}}} \quad (3.2)$$

Où

$\xi_{cn}$  : L'énergie totale des électrons dans les sous bandes n

$\xi_{vn}$  : L'énergie totale des trous dans les sous bandes n

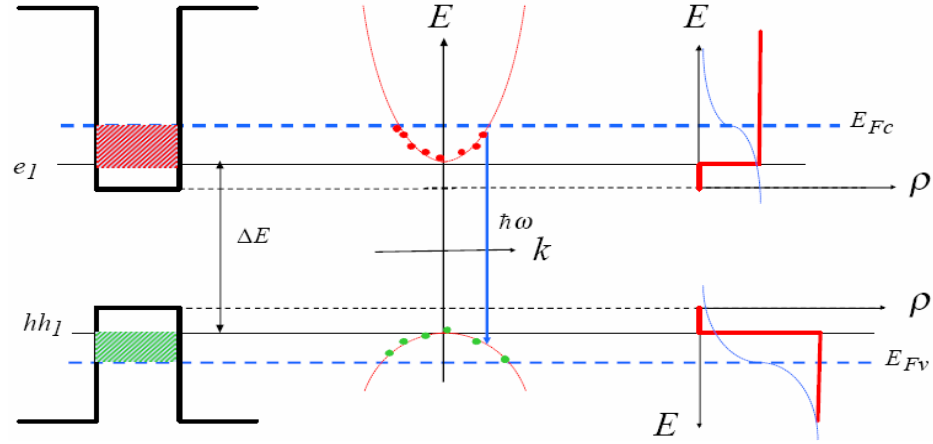


Figure 3-2 : Gap effectif d'une structure à puits quantique.

Les quasi-niveaux de Fermi sont reliés aux densités des électrons et trous injectés dans le puits par [40]

$$N = \left( \frac{m_e^* KT}{\pi h^2 L_z} \right) \Sigma \ln \left[ 1 + e^{\frac{E_{fc} - E_{cn}}{KT}} \right] \quad (3.3)$$

$$P = \left( \frac{m_v^* KT}{\pi h^2 L_z} \right) \Sigma \ln \left[ 1 + e^{\frac{-E_{fv} - E_{vn} - E_g}{KT}} \right] \quad (3.4)$$

Pour n=1 :

$$f_c = \frac{1}{1 + e^{\frac{(E_{cv} - E_g - E_{c1} - E_{v1})}{\frac{KTm_e^*}{m_r}}}} e^{\frac{E_{fc} - E_{c1}}{KT}} \quad (3.5)$$

$$f_v = \frac{1}{1 + e^{\frac{-(E_{cv} - E_g - E_{c1} - E_{v1})}{\frac{KTm_v^*}{m_r}}}} e^{\frac{E_{v1} - E_g - E_{fv}}{KT}} \quad (3.6)$$

Ou :

$$m_r = \frac{m_e^* m_v^*}{m_e^* + m_v^*}$$

$E_{v1}$  : correspond au premier niveau quantifié de la sous bande des trous Lourds  $E_{hh1}$

$m_r$  : La masse effective réduite.

$m_e^*$  : La masse effective des électrons.

$m_v^*$  : La masse effective des trous.

### 3.4 Coefficients de gain optique

Nous prenons le modèle optique du gain d'Asada et al [40], dans lequel nous supposons que toutes les sous-bandes sont paraboliques et que les transitions optiques obéissent aux règles de sélection (k.p) [41].

Le gain parabolique pour un puits quantique simple est exprimé comme :

$$g(\omega) = \omega \sqrt{\frac{\mu}{\varepsilon}} \sum_{n=0}^{N-1} \left( \frac{m_r}{\pi \hbar^2 l_z} \right) \int_{E_g + E_{cn} + E_{vn}}^{\infty} \langle R_{cv}^2 \rangle \cdot (f_c - f_v) \cdot F_{\tau}(E_{cv}) \cdot dE_{cv} \quad (3.7)$$

Avec :

$\omega$  : La fréquence angulaire de la lumière.

$\mu$  : La perméabilité du matériau

$\varepsilon$  : La constante diélectrique du matériau.

$m_r$  : La masse effective réduite.

$E_{cv}$  : L'énergie de transition entre les électrons et les trous lourds.

$\langle R_{cv}^2 \rangle$  : L'élément matrice du moment dipolaire constitué par un électron de la sous-bande  $n$  dans la bande de conduction et un trou de la sous-bande  $n$  dans la bande de valence donné par :



$$\langle R_{cv}^2 \rangle = \frac{\hbar}{\hbar\omega} \left( \frac{m_0}{m_e^*} - 1 \right) \frac{(E_g + \Delta_1 + \Delta_2)(E_g + 2\Delta_2) - 2(\Delta_3)^2}{E_g + 2\Delta_2} \quad (3.8)$$

$$R_{cv} = \frac{1}{j} \int \psi_2^*(r) \cdot \nabla_A \cdot \psi_1(r) d^3r \quad (3.9)$$

Asada et ses collaborateurs ont employé une fonction de Lorentzienne basée sur le formalisme de matrice de densité, comme suit :

$$F_r(E_{cv}) = \frac{\frac{\hbar}{\tau_{in}}}{(E_{cv} - \hbar\omega)^2 + \left(\frac{\hbar}{\tau_{in}}\right)^2} \quad (3.10)$$

Où :

$F_r(E_{cv})$  : Une fonction exprimant l'élargissement de transition.

$\tau_{in}$  : Le temps de relaxation intrabande.

Nous supposons que le temps de relaxation intrabande est le même pour toutes les sous-bandes, le gain optique ainsi est donné par l'expression suivante :

$$G(\omega) = \sqrt{\frac{\mu}{\varepsilon}} \cdot \omega \cdot \frac{m_e^* \cdot m_v^*}{(m_e^* + m_v^*) \cdot \pi \cdot \hbar^2 \cdot L_z} \cdot \sum_{i=0}^{w_n-1} \int_{E_{lh} + E_{hh} + E_g}^{\infty} (R_{cv}) \cdot \frac{(f_c + f_v) \cdot \hbar / \tau_{in}}{(E_{cv} - \hbar\omega)^2 + \frac{\hbar^2}{\tau_{in}^2}} dE_{cv} \quad (3.11)$$

Pour être tout à fait rigoureux, plutôt que de considérer l'interaction du mode optique avec la dimension physique du puits quantique, il vaut mieux considérer l'interaction du mode optique avec la fonction d'onde des porteurs. Son extension est généralement comparable avec la largeur du puits sauf dans le cas de puits fins. Enfin, pour les boîtes quantiques, le facteur de confinement obtenu sur la hauteur des boîtes est à pondérer par leur taux de couverture.

Le calcul du facteur de confinement  $\Gamma$  n'est pas très facile et nécessite une approche numérique, une expression analytique simple permet d'obtenir  $\Gamma$  avec une bonne approximation [42] :

$$\Gamma = \frac{D^2}{2 + D^2} \quad (3.12)$$

D : Largeur normalisée de la zone active

$$D = \frac{2\pi}{\lambda} (n_a^2 - n_b^2)^{\frac{1}{2}} L_z \quad (3.13)$$

$n_a$  : Indice de réfraction de la zone active.

$n_b$  : Indice de réfraction de barrière.

$L_z$  : largeur de puits.

$\lambda$  : La longueur d'onde du rayonnement dans le vide.

### 3.5 Gain modal

Dans une hétérostructure, l'expression du coefficient de gain se développe en fonction du nombre N de puits insérés dans le guide optique. Si les puits, sont découplés (leurs fonctions d'onde ne se recouvrent pas), chaque puits quantique nourrit l'amplification du mode optique en fonction de son interaction

avec lui, quantifiée par le facteur de confinement  $\Gamma_i$  et de son gain propre  $g_i$ . Le gain est alors appelé le gain modal et sera ici noté  $g_{mode}$ .

$$g_{mode} = \sum_i^N \Gamma_i g_i \quad (3.14)$$

### 3.6 Longueur d'onde d'émission en fonction de la largeur du puits

La séparation spatiale des électrons et des trous par champ électrique réduit leur interaction coulombienne et par suite l'énergie de liaison de l'exciton. Il en résulte que le déplacement du bord d'absorption de la structure est essentiellement conditionné par les variations des énergies de confinement, et nous pouvons écrire :

$$\Delta \hbar \omega \approx \Delta E_{e1} + \Delta E_{h1} \quad (3.15)$$

Si l'inversion de population des sous bandes fondamentales des électrons et des trous

permet de créer un gain supérieur aux pertes, la raie d'émission du laser est donnée par :

$$\hbar\omega = E_g + E_{e1} + E_{h1} \quad (3.16)$$

Avec

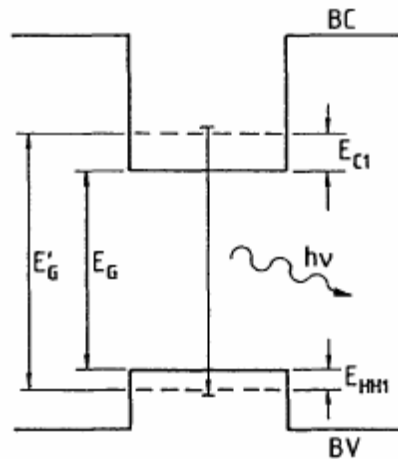
$E_g$  : Le gap du matériau constituant le puits.

$E_{e1}, E_{h1}$  : Énergies de confinement des électrons et des trous respectivement.

$$E_{e1} = \frac{\hbar^2 \cdot \pi^2}{2m_e^* \cdot L_z^2} (ev) \quad (3.17)$$

$$E_{h1} = \frac{\hbar^2 \cdot \pi^2}{2m_v^* \cdot L_z^2} (ev) \quad (3.18)$$

La structure des bandes dans le puits est représentée sur la figure 3.3 ou nous voyons que le gap effectif du matériau dans le puits  $E'_G$  a augmenté par rapport à celui du matériau massif  $E_G$ .



**Figure 3.3** : Gap effectif d'une structure à puits quantique.

La longueur d'onde émise dépend de la largeur de bande interdite du semi-conducteur.

Or, dans le cas d'un alliage, celle-ci varie de façon continue en fonction de la composition. Nous pouvons donc choisir la longueur d'onde du laser lors de sa fabrication.

$$\lambda = \frac{1.24}{E_g(A_x B_{1-x} C) + \frac{\hbar^2 \cdot \pi^2}{2L_z^2} \left( \frac{1}{m_e^*} + \frac{1}{m_v^*} \right)} \quad (\mu m) \quad (3.19)$$

Avec :

$m_e^*$ ,  $m_v^*$  : Respectivement, les masses effectives des électrons et des trous.

### 3.7 Variation de la longueur d'onde en fonction de la température

Il est important de déterminer la gamme de température de fonctionnement de la structure laser et de voir la réponse des lasers à puits quantique sous l'effet de la température.

La largeur de la bande interdite  $E_g$  varie légèrement avec la température. Cette variation obéit à

$$\text{l'équation } E_g(T) = E_g(0K) - \frac{\alpha T^2}{T + \beta}$$

### 3.8 Variation du gain en fonction de la température

La largeur de la bande interdite  $E_g$  varie avec la température L'énergie de transition ( $\hbar\omega$ ) est en fonction de la largeur de la bande interdite  $E_g$

Le gain varie avec le changement de l'énergie de transition, donc le gain optique varie avec la température

### 3.9 La couche active

La réalisation de la couche active est faite par épitaxie par jet moléculaire(MBE), on fait croître couche par couche le semi-conducteur InGaN (puits) sur le semi-conducteur GaN (barrière). La couche active est constituée d'une structure à multi puits quantiques  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ , ce sont plusieurs couches très fines, placées entre deux couches, d'un semi-conducteur de type n et d'un semi-conducteur de type p.

Le diagramme de bande d'une structure PIN à un seul puits quantique est représenté sur la figure (3.4).

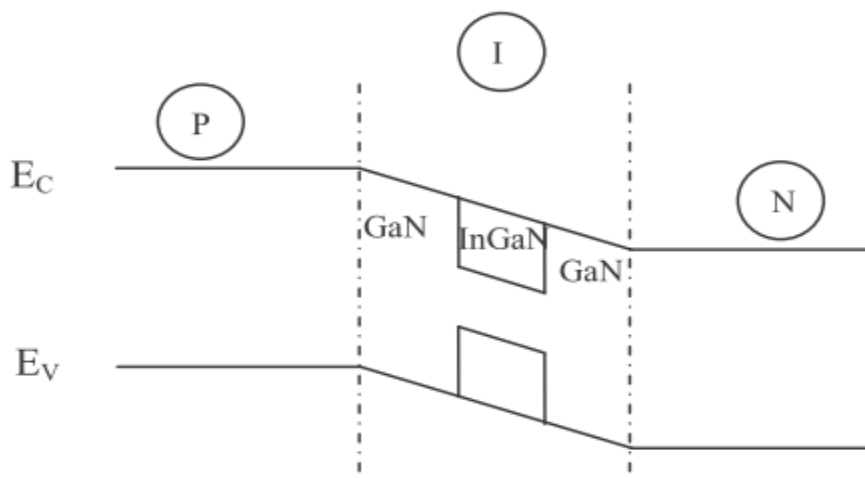


Figure 3.4 structure PIN d'un seul puits quantique

### 3.10 Résultat et simulation

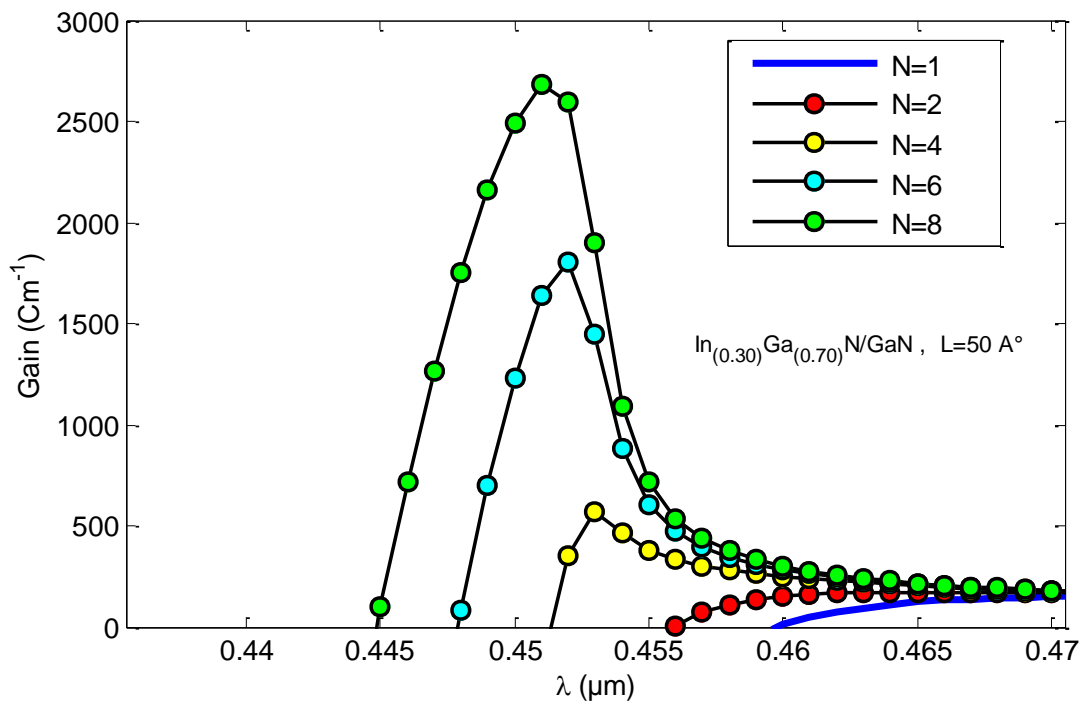
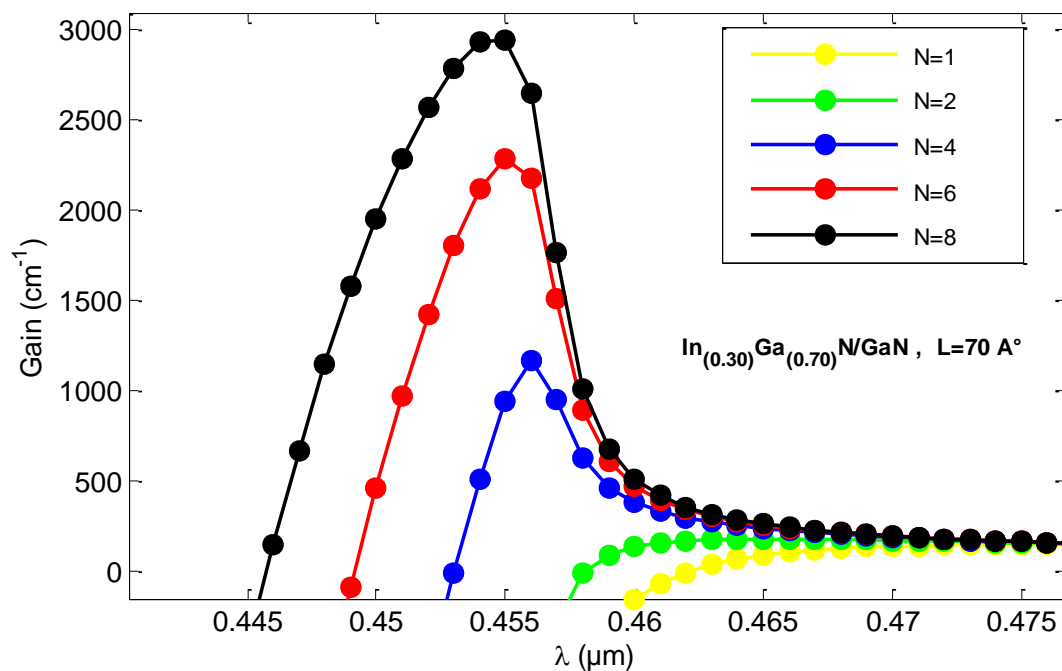


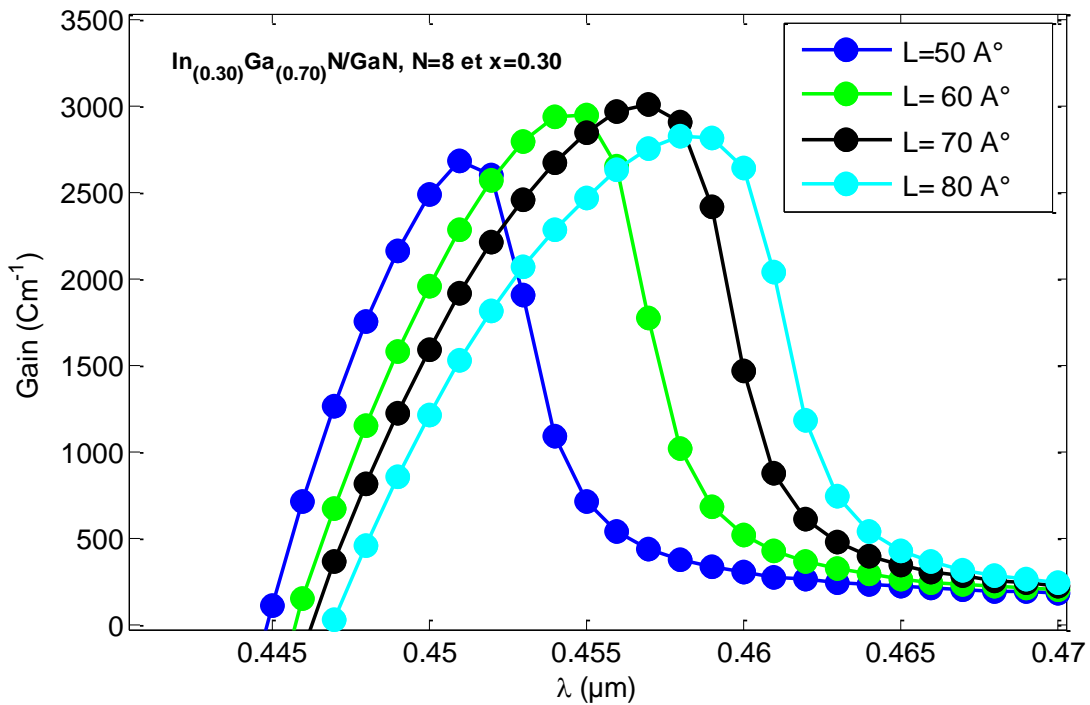
Figure 3.5 Variation du gain optique en fonction de la longueur d'onde pour différentes injections des porteurs pour une largeur de  $50\text{\AA}$ .

La figure 3.5 représente la variation du gain optique de la structure  $\text{In}_{0.30}\text{Ga}_{0.70}\text{N}/\text{GaN}$  en fonction de la longueur d'onde pour différentes injections des porteurs. On note que lorsque l'injection des porteurs croît le gain optique croît considérablement. L'augmentation de l'injection des porteurs induit une augmentation de la largeur spectrale  $\Delta\lambda$ . Pour une injection  $8 \cdot 10^{18} \text{cm}^{-3}$ , le gain optique maximal atteint la valeur  $2700 \text{cm}^{-1}$  et émettant autour de  $450 \text{nm}$ .



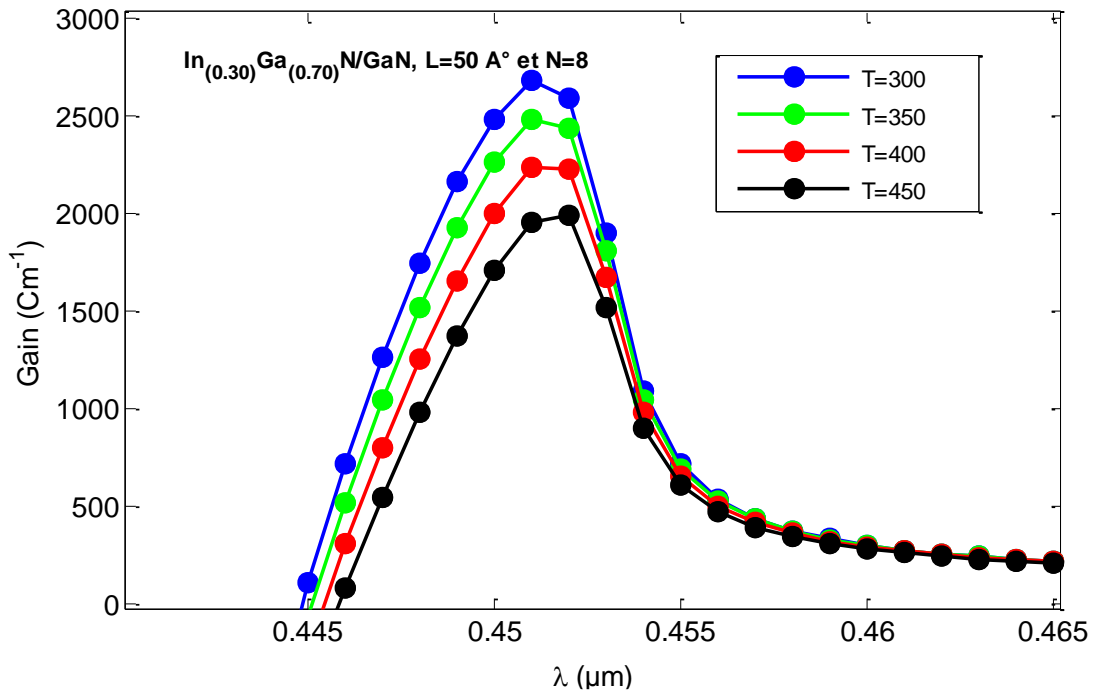
**Figure 3.6** variation du gain optique en fonction de la longueur d'onde pour différentes injections des porteurs  $N \times 10^{18} \text{cm}^{-3}$  pour une largeur du puits quantique de  $70 \text{ \AA}$ .

La figure 3.6 illustre l'évolution du gain optique de la structure  $\text{In}_{0.30}\text{Ga}_{0.70}\text{N}/\text{GaN}$  en fonction de la longueur d'onde pour différentes injections des porteurs avec une largeur du puits quantique de  $70 \text{ \AA}$ . On constate que la largeur du puits augmente la largeur spectrale aussi il décale le spectre du gain vers les grandes longueurs d'onde.



**Figure 3.7** Variation du gain optique en fonction de la longueur d’onde pour différentes largeurs du puits quantique avec  $T=300\text{K}$ .

La figure 3.7 illustre l’évolution du gain optique de la structure  $\text{In}_{0.30}\text{Ga}_{0.70}\text{N}/\text{GaN}$  en fonction de la longueur d’onde pour différentes largeurs du puits quantique. On remarque que l’augmentation de largeur de puits induit une augmentation du gain optique ensuite le gain commence à décroître. Dans notre structure le gain est maximal lorsque la largeur atteint  $70\text{\AA}$ .



**Figure 3.8** Variation du gain optique en fonction de la longueur d'onde pour différentes températures.

La figure 3.8 montre l'évolution du gain optique de la structure  $\text{In}_{0.30}\text{Ga}_{0.70}\text{N}/\text{GaN}$  en fonction de la longueur d'onde pour différentes températures avec une épaisseur de la couche active de 5nm et une injection des porteurs de  $8.10^{18}\text{cm}^3$ . La température est un paramètre très important dans le domaine de matériau des composants optoélectronique. La température diminue le gain optique maximal. Lorsque la température augmente de 300 à 450K le gain optique maximal diminue de 2682 à 1990 $\text{cm}^{-1}$  c'est-à-dire ont une diminution de  $\Delta G_{\text{max}} = 692\text{cm}^{-1}$ .

### 3.12 Conclusion

Dans notre travail on peut dire pour déterminer une structure fiable c'est-à-dire pour réaliser un composant laser fiable et émettant dans la gamme du visible il faut trouver un compromis entre la largeur du puits, la concentration de l'alliage, l'injection et la température.

Des résultats intéressants sont obtenus et qui sont en bon accord avec les travaux de recherche actuels dans le domaine Ce dernier qui reste toujours vaste et où l'exploitation de toutes les



Caractéristiques des lasers à puits quantiques n'est encore pas achevée.

Nous observons d'après les graphes des figures précédentes que la longueur d'onde dépend de la largeur du puits, de la composition du matériau utilisé comme couche active et de la température

La modélisation que nous avons entamée a révélé ce qui suit :

- L'existence d'une corrélation étroite entre longueur d'onde émise, largeur de puits, composition du matériau utilisé comme couche active et la température.
- La température influe énormément sur le gain et sur le point de transparence.
- Le facteur de confinement augmente avec l'augmentation de la largeur du puits,

## Bibliographie

- [01] Yacine MAROUF : « Modélisation des cellules solaires en InGaN en utilisant Atlas Silvaco » thèse de magister université de Beskra 2013.
- [02] Wu, J., et al. Small band gap bowing in  $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{N}$  alloys. Applied Physics Letters. 2002, Vol. 80,4741
- [03] VANESSA GORGE « Caractérisations de matériaux et tests de composants des cellules solaires à base des nitrures des éléments III-V ». thèse de doctorat université de paris 2012
- [4] VANESSA GORGE « Caractérisations de matériaux et tests de composants des cellules solaires à base des nitrures des éléments III-V ». thèse de doctorat université de paris 2012
- [5] ] N.Grandjean, J.Massies. Les nitrures d'éléments III: des semiconducteurs singuliers? CRHEA, [www.CNRS.fr/publications/imagesdephysique/couv-pdf/IdP01.../07.pdf](http://www.CNRS.fr/publications/imagesdephysique/couv-pdf/IdP01.../07.pdf). (s.d.).
- [6] B. Ilham : «Contribution à la modélisation d'une structure nanométrique : application aux transistors HEMTS et pseudomorphiques », mémoire Magister, Université de Mentouri Constantine, le 27 JUIN 2009.
- [7] B. Terek : « Propriétés optique de puits quantique  $\text{GaInAsN}/\text{GaAs}$  », Thèse doctorat, Université de Blaise Pascal, le 12 mai 2006.
- [8] k Amina .n Meriem : « Eude et simulation de l'effet tunnel dans une structure a double puits quantique » thèse de master université de Blida 2013.
- [9] B .Hadda : « Modélisation et étude d'un puits quantique contraint à base de  $\text{GaInAs}/\text{GaAs}$  et calcul du courant de seuil », mémoire Magister, Université de Blida, juillet 2011.
- [10] L. Ali : « Etude des propriétés optiques de puits quantiques contraints ultra-minces d' $\text{InAs}/\text{InP}$ », Thèse doctorat, Université de Montréal, Juin 2006.
- [11] henrey mathieu. « Physique des Semiconducteurs et des Composants Electronique », 6<sup>eme</sup> édition, pp (616-622) , Paris, 2009.
- [12] Hahn: " New developments for high power LEDs", In Forum LED, Lyon France, 2009.
- [13] Liu, L. and Edgar, J.H.: « Substrates for gallium nitride epitaxy. *Materials Science and Engineering* »R. 2002, Vol. 37, 61.
- [14] Wu, J. When group-III nitrides go infrared: New properties and perspectives. Journal of Applied Physics. 2009, Vol. 106, 011101. (s.d.).
- [15] Wu, J., et al. Universal bandgap bowing in group-III nitride alloys. Solid State Commutations. 2003, Vol. 127, 411. (s.d.).

[16] b faiza : « étude d'une LED a base de InGaN pour l'émission de la lumière Blanche » thèse de magister université mouloud mammari tizi ouzou 2012