

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 Master

Filière Électronique  
Spécialité micro-électroniques

Présenté Par

**TIRES Karima**

---

# Simulation et optimisation des puits quantiques pour les diodes laser VCSELs

---

Proposé par : **Pr. AISSAT Abdelkader**

Année Universitaire : 2021-2022

## *Remerciements*

*J'exprime toute ma reconnaissance au grand DIEU, Maître des temps et des circonstances, de m'avoir donné la force et la volonté durant toutes ces années d'études afin que je puisse arriver à ce stade.*

*Mes remerciements particuliers à mon promoteur, Mr Aïssat Abdelkader. Merci pour votre patience. Le soutien et les conseils qu'elle m'a prodigués tout au long de ce travail, m'ont permis de réaliser ce mémoire dans des conditions favorables à l'approfondissement de la pensée. Travailler avec il est une expérience passionnat.*

*Je remercie tous mes enseignants que j'ai connu tout le long de mon parcours scolaire.*

## *Dédicaces*

*A mon cher mari qui m'a soutenu et sacrifié pour terminer mes études et pour tout l'amour et le soutien que j'ai reçus de lui.*

*A mes chers parents, pour tous leurs sacrifices, leur amour, leur tendresse, leur soutien et leurs prières tout au long de mes études.*

*A mon cher frère Mohamed pour son soutien et ses remerciements.*

*A mes chers sœurs Fatiha hanan fatima et Amel pour leur soutien moral et leurs encouragements permanents.*

*A mon collègue feryal qui m'a donné tous ses encouragements et son soutien.*

*A mon adorable fils ghaith, ma boule d'amour qui est devenue en si peu de temps mon grand espoir dans ma vie que dieu le protège.*

*Merci d'être toujours là pour moi*

## ملخص:

في هذا العمل، نحن مهتمون بدراسة ومحاكاة هيكل استخدام قاعدة البئر الكمي (InGaSb/InP). تتمتع هذه البنية بخصائص مهمة جدا. درسنا أولا معلمة الشبكة بالإضافة الى المعلمات المهمة الأخرى مثل المضاد. ثم درسنا طاقات الالكترونات والثقوب الثقيلة والثقوب الضوئية بالإضافة الى طاقات التحولات. ثم محاكاة موجة وتحسينها.

## Résumé :

Dans ce travail, nous nous sommes intéressés à l'étude et la simulation d'une structure à base d'une puits quantique InGaSb/InP, cette structure présente des caractéristiques très importantes. Nous avons d'abord étudié le paramètre de maille et d'autres paramètres importants tels que la contrainte. Ensuite nous avons étudié les énergies des quantifications des électrons, des trous lourds et des trous légers ainsi que les énergies des transitions. La longueur d'onde a été simulé et optimiser.

## Abstract :

In This work, we are interested in the study and the simulation of a structure based on an InGaSb/InP quantum well, this structure has very important characteristics, We first studied the mesh parameter as well as other important parameters such as the strain. then we studied the energies of the quantification of electrons, heavy holes and light holes as well as the energies of the transitions. The wave kompone has been simulated and optimized.

## Listes des acronymes et abréviations

*In*: Indium.

*Ga*: Gallium.

*Sb*: Antimoine

*x* : Concentration de l'antimoine

$\Delta a$  : Désaccord paramétrique.

*E<sub>g</sub>* : Énergie de gap.

$\Delta_{so}$ :Bande spin orbite « split-off ».

*lh* : Trou léger (Light hole).

*hh*: Trou lourd (Heavy holes).

*E<sub>v</sub>*:Energie de la bande conduction.

*E<sub>c</sub>* : Energie de la bande valence.

BC: Bande de conduction.

BV : Bande de valence.

K: Vecteur d'onde.

*a* : Paramètre de maille.

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

$\epsilon_0$ : La permittivité dans le vide.

*m<sub>0</sub>*: La masse effective de l'électron.

*b* : Coefficient de courbure (Bowling).

*E<sub>e</sub>*: L'énergie des électrons.

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

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

$\lambda$  : Longueur d'onde.

*m<sub>e</sub><sup>\*</sup>* : Masse effective des électrons .

*E<sub>n</sub>* : L'énergie de quantification.

$\rho(E)$  : Densité d'états.

*a<sub>e</sub>* :Le paramètre de maille de la couche épitaxie(InGaAs).

*a<sub>s</sub>* : Le paramètre de maille du substrat (GaAs).

$\varepsilon$  : La déformation ou le désaccord de maille.

$C_{ij}$  : Les coefficients d'élasticité.

$\varepsilon_{||}$  ( $\varepsilon_{yy}$  ou  $\varepsilon_{zz}$ ): Déformation biaxiale.

$\varepsilon_{\perp}$  ( $\varepsilon_{xx}$ ) : Déformation uni-axiale.

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

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

$E_c^{hyd}$ : Énergie de centre de gravité de la bande de v conduction en  $k=0$  qui varient à la contrainte

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

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

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

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

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

$E_V$ : L'énergie du haut de la bande de valence.

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

$L_C$  : L'épaisseur critique.

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

# Table des matières

INTRODUCTION GENERALE .....	1
-----------------------------	---

## Chapitre I : Notions Fondamentales

I.1. INTRODUCTION .....	3
I.2. Les semi-conducteurs III-V .....	3
I.1.3. Structure cristalline .....	4
I.1.3.1 Structure cristalline de matériaux InGaSb/ InP : .....	4
I.1.4. Les bandes interdites directes et indirectes des matériaux III-V .....	5
I.2. Rappels sur la physique des lasers : .....	6
1.2.1. Historique de laser : .....	6
1.2.2. Définition d'un laser .....	6
I.2.3. Conditions d'observation d'un effet laser : .....	7
I.2.4. Principe de fonctionnement d'un laser : .....	7
I.3. Puits quantique .....	8
I.3.1. Définition d'un puits quantique : .....	8
I.3.2 Diode laser à puits quantiques : .....	8
I.3.3. Les types de puits quantique .....	9
I.3.3.1. Puits quantiques de type I : .....	9
I.3.3.2. Puits quantiques de type II : .....	10
I.3.3.3. Puits quantiques de type III : .....	10
I.3.4. L'étude des paramètres électroniques .....	10
I.3.4.1. Le paramètre de maille .....	10
I.3.4.2. Epaisseur critique .....	11
I.3.4.3. La contrainte .....	12
I.3.4.4. Effet de la contrainte sur les bandes d'énergie .....	13
I.3.6. L'anticroisement des bandes d'énergies : .....	15
I.3.7. Les états énergétiques dans un puits quantique .....	15
I.4. Conclusion .....	19

## Chapitre II : Résultat Et Discussion

II.1. Introduction .....	20
II.2. Paramètre de maille et déformation .....	20

II.3. Bande interdite .....	21
II.4. Décalage d'énergie .....	22
II.6. Energie de Transition.....	27
II.7. Longueur d'onde d'émission .....	28
II.8. Conclusion .....	33
Conclusion générale .....	34
BIBLIOGRAPHIE .....	19

## Liste des figures

Figure I. 1: Structure de Gallium Antimonide.....	4
Figure I. 2: Structure de phosphore d'indium .....	5
Figure I. 3: bandes interdites directes et indirectes .....	5
Figure I. 4 : laser à semi-conducteur .....	7
Figure I. 5: Géométrie de la structure du puits quantique. ....	9
Figure I. 6: Structure d'un puits quantique de type I de InGaSb/InP. ....	9
Figure I. 7: Structure d'un puits quantique de type II de InGaSb/InP. ....	10
Figure I. 8: Maille cristalline (a, b, c, $\alpha$ , $\beta$ , $\gamma$ ) .....	11
Figure I. 9: Schéma montrant une couche contrainte en compression et Une couche contrainte relaxée.....	12
Figure I. 10: (a,b,c). Structure de bande d'un semi-conducteur à gap direct dans les trois cas (a) Non contraint (b) contraint en compression (c) contraint en tension. ....	13
Figure I. 11: l'éclatement des bandes d'énergies .....	15
Figure II. 1: variation de paramètre de maille en fonction de la concentration d'antimoine. ...	20
Figure II. 2: variation de la déformation en fonction de la concentration d'antimoine. ....	21
Figure II. 3: variation de l'énergie de la bande interdite sans contrainte et sans éclatement à T=300K.....	21
Figure II. 4: variation de l'énergie de la bande interdite avec éclatement à T=300K. ....	22
Figure II. 5: variation du décalage d'énergie de la bande de conduction et la bande de valence en fonction de la concentration d'antimoine. ....	23
Figure II. 6.a : variation de l'énergie de quantification des électrons en fonction de la largeur de la zone active pour x=2% à T=300K. ....	23
Figure II. 7.b : variation de l'énergie de quantification des électrons en fonction de la largeur de la zone active pour x=8% à T=300K. ....	24
Figure II. 8.c : variation de l'énergie de quantification des électrons en fonction de la largeur de la zone active pour x=15% à T=300K. ....	24
Figure II. 9.a : variation de l'énergie de quantification des trous lourds en fonction de la largeur de la zone active pour x=2% à T=300K. ....	25
Figure II. 10.b : variation de l'énergie de quantification des trous lourds en fonction de la largeur de la zone active pour x=8% à T=300K. ....	26

Figure II. 11.c : variation de l'énergie de quantification des trous lourds en fonction de la largeur de la zone active pour $x=15\%$ à $T=300K$ .	26
Figure II. 12.a : variation de l'énergie de transition en fonction de la largeur de la zone active pour $x=2\%$ à $T=300K$ .	27
Figure II. 13.b : variation de l'énergie de transition en fonction de la largeur de la zone active pour $x=8\%$ à $T=300K$ .	28
Figure II. 14.c: variation de l'énergie de transition en fonction de la largeur de la zone active pour $x=15\%$ à $T=300K$ .	28
Figure II. 15.a : variation de la longueur d'onde d'émission en fonction de la largeur de la zone active pour $x=2\%$ à $T=300K$ .	29
Figure II. 16.b : variation de la longueur d'onde d'émission en fonction de la largeur de la zone active pour $x=8\%$ à $T=300K$ .	29
Figure II. 17.c : variation de la longueur d'onde d'émission électrons/ trous lourds en fonction de la largeur de la zone active pour $x=15\%$ à $T=300K$ .	30
Figure II. 18.a : variation de la longueur d'onde d'émission électrons/ trous légers en fonction de la largeur de la zone active pour $x=2\%$ à $T=300K$ .	31
Figure II. 19.b : variation de la longueur d'onde d'émission électrons/ trous légers en fonction de la largeur de la zone active pour $x=8\%$ à $T=300K$ .	31
Figure II. 20.c : variation de la longueur d'onde d'émission électrons/ trous légers en fonction de la largeur de la zone active pour $x=15\%$ à $T=300K$ .	32
Figure II. 21: Effet de la largeur de la zone active et de la concentration d'alliage Sb ( $x$ ) sur l'énergie de transition à $T=300K$ et $n=1$ .	32
Figure II. 22: Effet de la largeur de la zone active et de la concentration d'alliage Sb ( $x$ ) sur la longueur d'onde d'émission à $T=300K$ et $n=1$ .	33

## Liste des tableaux

Tableau I. 1: Extrait de la classification périodique des éléments. Ce sont les matériaux à transition directe.	3
---	---



**INTRODUCTION GENERALE**

## INTRODUCTION GENERALE

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'éléments et de composés semi-conducteurs. [1] Principalement remarquables par leurs propriétés électroniques, les semi-conducteurs interviennent dans presque tous les équipements électriques et optiques, La plus grande partie des composants (transistors, diodes, et condensateurs, ..... ) sont réalisés en silicium qui joue un rôle prépondérant, sa technologie et sa connaissance théorique ont atteint des niveaux inégalés [1]. 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 composants fabriqués à partir des semi-conducteurs III-V qui ont des propriétés physiques remarquables, jouent un rôle majeur dans les applications dans le domaine de l'optoélectronique et microélectronique comme la diode Laser. Comme tout LASER (Light Amplification by Stimulated Emission of Radiations), une diode laser est un dispositif capable d'émettre et d'amplifier la lumière placée dans une cavité optique résonnante contenant un milieu amplificateur. Les Diodes lasers ont fait leur apparition en 1962. Le milieu amplificateur est un matériau semi-conducteur d'où le nom laser à semi-conducteur. Il s'agissait à cette époque-là d' (homostructures) utilisant une jonction p-n limitées presque exclusivement aux composés III-V à base d'arsenic de gallium GaSb[2] [3] , Cette structure élémentaire de laser à semi-conducteur, est réalisée par la superposition de deux couches du même semi-conducteur dopées différemment, de façon à ce que la couche dopée n possède plus d'électrons libres et que la couche dopée p plus de trous libres (autrement dit moins d'électrons). Les lasers à semi-conducteur ont connu un essor très important et ont investi de nombreux domaines. La vaste gamme de longueur d'onde émise par ces composants a donné naissance à une multitude d'applications. Aujourd'hui, les diodes lasers émettant dans le visible et le proche infra-rouge sont des composants arrivés à maturité et sont exploités dans de nombreux domaines, tels que les télécommunications par fibre optiques, l'impression laser, les systèmes de lecture optique (lecture de code barre, CD, DVD). Ce succès commercial s'explique essentiellement par les faibles coûts de production, la réalisation de dispositifs très compacts, et les progrès des techniques de fabrication [4].

- Dans le premier chapitre je vais présenter des notions fondamentales sur les matériaux semi-conducteurs et précisément les semi-conducteurs III-V, puis je passe à l'étude du nouveau matériau InGaSb/InP.
- Le deuxième chapitre est consacré à la représentation des résultats obtenus sur la structure proposée.



**Chapitre I : Notions Fondamentales**

## I.1. INTRODUCTION

Les semi-conducteurs III-V et leurs alliages, offrent au moins en théorie des perspectives d'applications et de développement de dispositifs optiques, car ils permettraient a priori de couvrir une grande gamme de longueurs d'onde. Ces matériaux ont un potentiel immense en optoélectronique, ils constituent des matériaux de choix pour les études de dispositifs optoélectroniques tels que les portes logiques, les diodes lasers, les modulateurs et les photos détectrices. La connaissance préalable des propriétés et les mécanismes de ces semi-conducteurs, et la recherche des matériaux les plus performants est essentielle. [5] Dans ce chapitre nous présentons des généralités sur les semi-conducteurs et des notions fondamentales sur d'étude de la diode laser (InGaSb/InP).

## I.2. Les semi-conducteurs III-V

Les matériaux semi-conducteurs III-V sont des corps composés formés à partir d'un élément de la troisième (III) colonne et d'un élément de la cinquième (V) colonne de la classification périodique de Mendeleïev. Le tableau (I-1) regroupe un extrait de cette classification (les chiffres en haut et bas représentent respectivement le nombre atomique et la masse atomique). Ainsi de nombreux composés binaires peuvent être réalisés [1].

<b>III</b>	<b>IV</b>	<b>V</b>
<b>5</b> <b>B</b> <b>10.81</b>	<b>6</b> <b>C</b> <b>12.01</b>	<b>7</b> <b>N</b> <b>14.01</b>
<b>13</b> <b>Al</b> <b>26.98</b>	<b>14</b> <b>Si</b> <b>28.09</b>	<b>15</b> <b>P</b> <b>30.97</b>
<b>31</b> <b>Ga</b> <b>69.74</b>	<b>32</b> <b>Ge</b> <b>72.59</b>	<b>33</b> <b>As</b> <b>74.92</b>
<b>49</b> <b>In</b> <b>114.82</b>	<b>50</b> <b>Sn</b> <b>18.69</b>	<b>51</b> <b>Sb</b> <b>121.75</b>

Tableau I. 1: Extrait de la classification périodique des éléments. Ce sont les matériaux à transition directe.

### I.1.3. Structure cristalline

Un cristal est un solide polyédrique, à structure régulière et périodique, formée d'un ensemble ordonné d'un grand nombre d'atomes, de molécules ou d'ions. Un cristal est constitué d'un assemblage périodique de particules. Il peut être décrit par translation suivant les trois directions de référence d'une entité de base qu'on appelle la maille. La description du cristal nécessite la connaissance du réseau et celle du motif. C'est Auguste Bravais qui établit dans la première moitié du XIXème siècle un classement des différents types de cristaux [6].

#### I.1.3.1 Structure cristalline de matériaux InGaSb/ InP :

L'antimoniure de gallium est un composé chimique de formule brute GaSb. Il s'agit d'un semi-conducteur III-V diamagnétique 6 dont le paramètre de maille vaut  $609,593 \text{ pm}^2$  et la largeur de bande interdite environ  $0,726 \text{ eV}$ , ce qui en fait un matériau privilégié pour la réalisation de photo détecteurs infrarouges, de diodes électroluminescentes infrarouges, voire de cellules thermo photovoltaïques. [7]

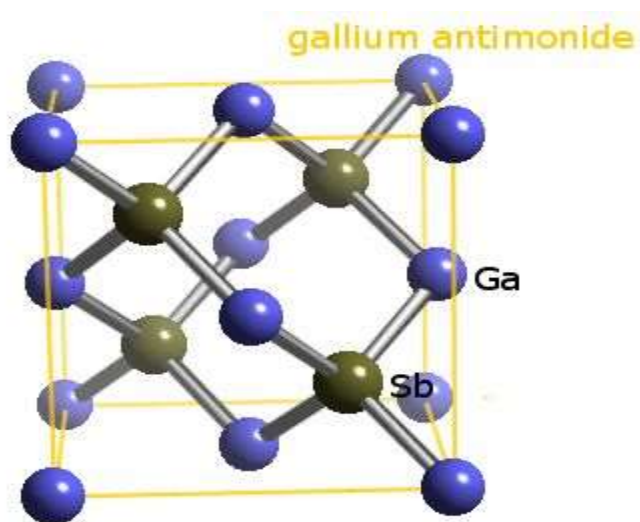


Figure I. 1: Structure de Gallium Antimonide

Le phosphore d'indium (InP) est un semi-conducteur binaire composé d'indium et de phosphore. Il a une structure cristalline cubique à faces centrées ("zincblende"), identique à celle du GaAs et de la plupart des semi-conducteurs III-V. [8]

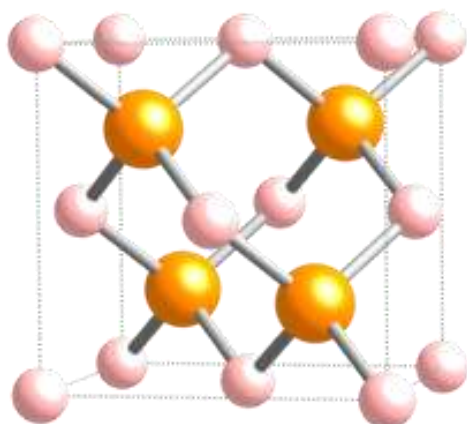


Figure I. 2: Structure de phosphure d'indium

#### I.1.4. Les bandes interdites directes et indirectes des matériaux III-V

D'une façon très schématisée, on a illustré, dans la figure I.6, la structure de bande de deux semi-conducteurs. A gauche, le minimum de la bande de conduction est juste au-dessus du maximum de la bande de valence. Les recombinaisons radiatives vont se produire entre ces deux niveaux sans qu'il y ait de changement appréciable de la quantité de mouvement. C'est un matériau à gap direct. Dans une transition directe, comme on peut le voir, un électron passe d'un état excité à un état désexcité de telle sorte que toute la différence d'énergie entre ces deux niveaux devient l'énergie du photon. A droite, on a illustré un matériau à gap indirect, le minimum de la bande de conduction est situé à droite (ou à gauche) du maximum de la bande de valence. Les matériaux à transition indirecte ne sont pas des émetteurs efficaces parce que la transition doit se faire avec l'aide d'un phonon pour conserver la quantité de mouvement lors de la transition.

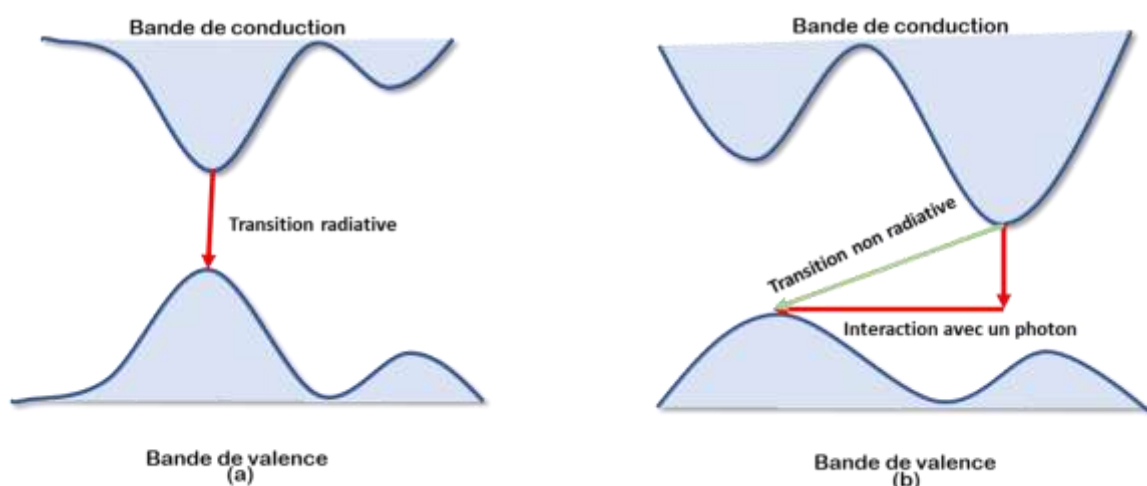


Figure I. 3: bandes interdites directes et indirectes

L'avantage principal de se servir de composés ternaires ou quaternaires est que la bande interdite de ces composés est ajustable, par conséquent, la longueur d'onde de la lumière émise est ajustable aussi, en autant que l'énergie du photon sera toujours légèrement supérieure à celle de la bande interdite. En plus de la bande interdite, la maille de réseau joue un rôle essentiel pour déterminer les propriétés des composés produits. Si la maille du réseau des deux éléments du composé binaire est trop différente, l'alliage ternaire résultant pourra contenir des contraintes mécaniques importantes. [9]

## **I.2. Rappels sur la physique des lasers :**

### **1.2.1. Historique de laser :**

Historiquement l'aventure de laser commence en 1917 quand Einstein découvre l'existence du processus d'émission stimulée, c'est-à-dire l'émission d'un photon commandé par un autre photon. En 1951 Weber et Townes aux états unis, et 1954 Basov et Prokhorov en union soviétique, proposent d'utiliser l'émission stimulée pour amplifier les hyperfréquences. En 1954 le premier MASER (Microwave Amplification by Stimulated Emission of Radiation) en utilisant les propriétés d'inversion de la molécule d'ammoniac. En 1958 Shalovet Townes démontrent la possibilité d'étendre le maser aux longueurs d'onde visibles. En juillet 1960 Maiman, à la Hughes Aircraft Company, réalise le premier laser (Light Amplification by Stimulated Emission of Radiation) en utilisant les niveaux de l'ion dans  $Al_2O_3$ , c'est le laser à rubis. Dès lors de nombreuses recherches se développent et les différents types de laser, solides, à gaz, à colorants, sont réalisés. [9]

### **1.2.2. Définition d'un laser**

Le terme "laser" est un acronyme qui signifie amplification de lumière par émission stimulée. Tout laser est constitué de trois éléments principaux (figure ). [10]

- Un milieu amplificateur.
- Une cavité résonante.
- Une source de pompage.

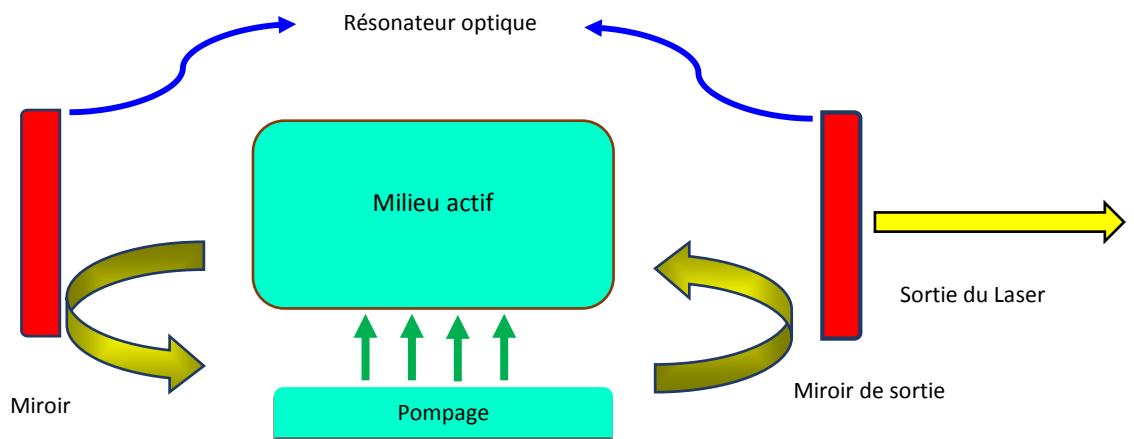


Figure I. 4 : laser à semi-conducteur

### I.2.3. Conditions d'observation d'un effet laser :

Pour obtenir un effet laser, il nous faut :

- a) Disposer d'un matériau à bande interdite directe donnant lieu à une efficace recombinaison radiative des porteurs en excès.
- b) Réaliser une zone active, où auront lieu les recombinaisons radiatives, et qui joue le rôle de la cavité laser.

### I.2.4. Principe de fonctionnement d'un laser :

Un laser est une cavité optique dans laquelle se trouve un milieu à gain optique. La cavité peut être, par exemple, formée de deux semi-miroirs parallèles se faisant face pour que les photons puissent faire des allers-retours en traversant le milieu à gain. Ce gain optique peut être réalisé par émission stimulée tout en assurant une inversion de population. Le principe de fonctionnement du laser est le suivant, soit un premier photon spontané émis dans le milieu à gain. Si ce photon est émis dans l'axe de la cavité (perpendiculaire aux miroirs) il sera réfléchi par un miroir et reviendra dans le milieu à gain où il sera amplifié  $N$  fois par exemple. Le groupe de  $N$  photons résultant sera à son tour amplifié lors de son passage suivant dans le milieu à gain après réflexion sur un des miroirs. Il en résulte  $N^2$  photons dans la cavité. En se répétant, ce processus conduit à une croissance exponentielle du nombre de photons, et bien sûr cette croissance est limitée par un phénomène de saturation du gain. Si l'intensité optique est trop forte, un équilibre s'établit entre émission stimulée et absorption (annulation d'inversion de population). [11]

Il y a des photons qui quittent à chaque aller-retour au travers le semi-miroir, ce sont ces photons qui constituent le faisceau laser. Et puisque tous les photons sont identiques au premier photon spontané, alors ils sont tous en phase, donc le rayonnement laser est cohérent. Le principe du laser est la création d'une onde cohérente par multiplication des photons dans la cavité à partir d'un photon spontané.

### **I.3. Puits quantique**

L'amélioration des performances des dispositifs optoélectroniques a été la conséquence de l'apparition des puits quantiques sous contraintes qui ont contribué à la conception de nouveaux dispositifs optoélectroniques plus performants en étudiant les effets de la contrainte sur les propriétés physiques, électroniques et optiques de ces semi-conducteurs

#### **I.3.1. Définition d'un puits quantique :**

Une structure à puits quantique de type I est obtenue en faisant croître une couche fine de quelques nm d'un matériau semi-conducteur de faible gap entourée de deux couches d'un autre matériau semi-conducteur de grand gap. La discontinuité entre les bandes d'énergies dans les deux matériaux crée une barrière de potentiel qui confine les porteurs (électron-trous) dans le puits quantique. On réalise ainsi un puits de potentiel artificiel de taille quantique dans lequel les porteurs libres du semi-conducteur (électrons et trous) vont se retrouver confinés sur des niveaux d'énergie discrets. [13] Lorsque l'épaisseur de la couche active devient comparable à la longueur d'onde de De Broglie  $\lambda_F$  donnée par : [12]

$$\lambda_F = \frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2.m_e^*.E_F}} \quad (1.1)$$

$E_F$  : Niveau de Fermi.

#### **I.3.2 Diode laser à puits quantiques :**

La diode laser à puits quantiques met à profit les effets spécifiques du confinement quantique à la fois, sur les fonctions d'onde électroniques, sur la distribution énergétique, et sur la nature bidimensionnelle de la densité d'états. Le premier effet est d'ordre géométrique, il engendre un confinement des porteurs dans un faible volume ce qui, pour une injection donnée, permet d'augmenter la densité de porteurs et par suite d'accéder plus facilement à l'inversion de population. Les deux autres effets sont typiquement quantiques, ils se combinent pour améliorer les performances du laser notamment en ce qui concerne le courant de seuil, l'ajustement de la

longueur d'onde d'émission, la sensibilité du courant de seuil à la température... Figure. (I.5 )

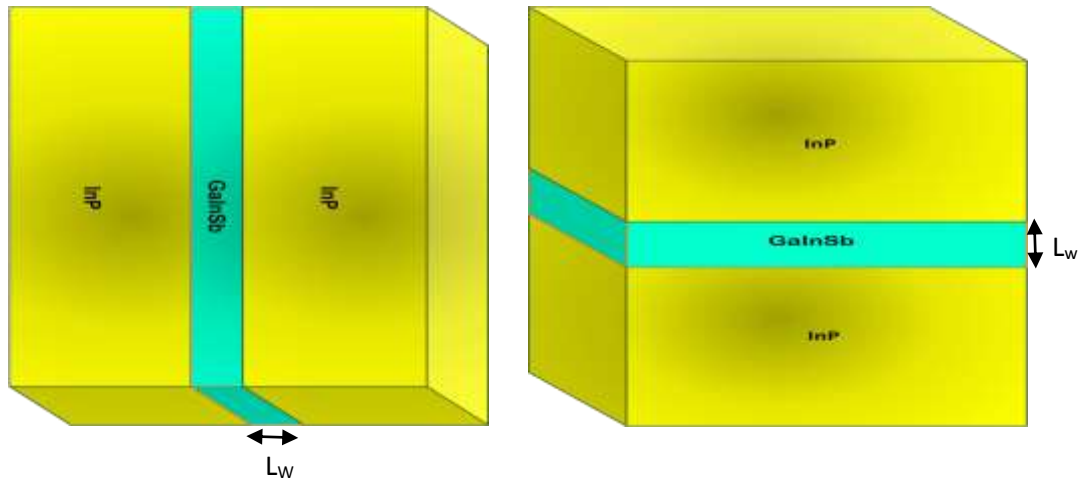


Figure I. 5: Géométrie de la structure du puits quantique.

### I.3.3. Les types de puits quantique

#### I.3.3.1. Puits quantiques de type I :

Dans les puits quantiques de type-I, les électrons et les trous sont confinés dans le même matériau constituant le puits. L'énergie du photon dépend des énergies de confinement des porteurs et du gap du matériau au puits. La structure INGaSb/INP est de type I.

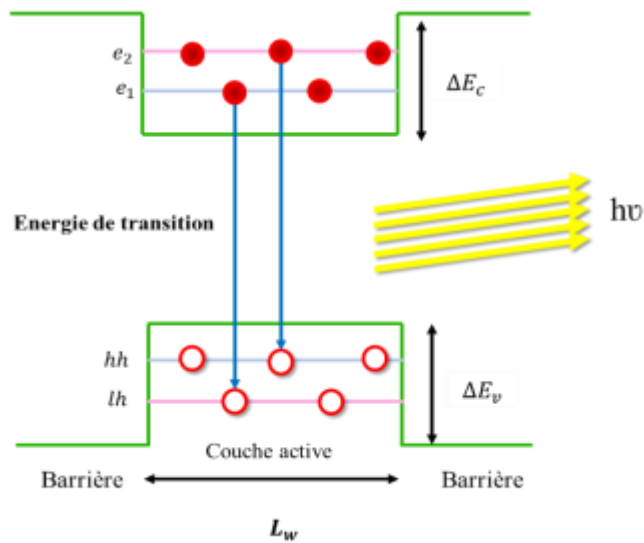


Figure I. 6: Structure d'un puits quantique de type I de InGaSb/InP.

### I.3.3.2. Puits quantiques de type II :

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

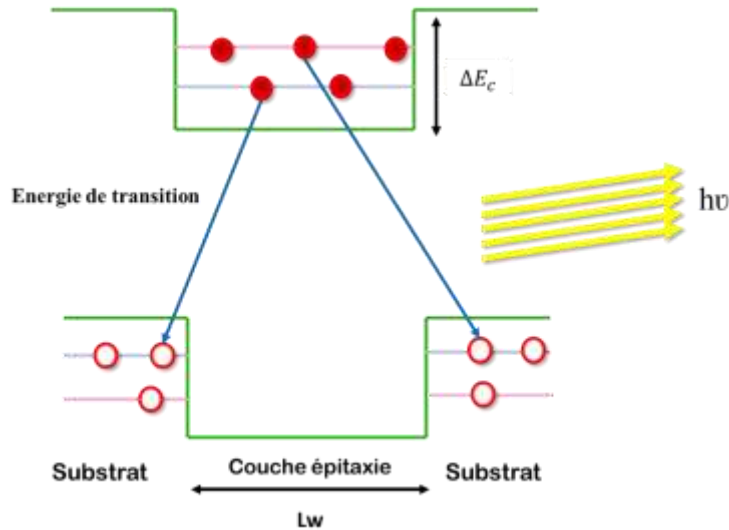


Figure I. 7: Structure d'un puits quantique de type II de InGaSb/InP.

### I.3.3.3. Puits quantiques de type III :

La configuration dite de type-III est un cas particulier du type-II dans lequel le bas de la bande de conduction se trouve en dessous du haut de la bande de valence. Cette situation appelé aussi configuration semi-métallique, offre une grande souplesse dans le choix de la longueur d'onde d'émission puisque l'énergie du photon émis n'est alors fonction que des énergies de confinement des électrons et des trous, donc des épaisseurs des couches, voir la figure.

## I.3.4. L'étude des paramètres électroniques

La loi de Végard est une loi empirique indiquant que les valeurs des propriétés d'un alliage (énergie de la bande interdite, paramètre de maille, constantes élastiques, etc.) peuvent être déterminés par une interpolation linéaire des valeurs des propriétés de ses composants.

### I.3.4.1. Le paramètre de maille

Du point de vue géométrique, à deux dimension, la maille est le plus petit parallélogramme qui suffit à décrire le plan, cette maille est définie par les vecteurs  $a$  et  $b$  et l'angle compris entre ces deux vecteurs. A trois dimensions, Une maille cristalline quelconque (triclinique :  $a \neq b \neq c$

et  $\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$ ) est définie par six paramètres cristallographiques, à savoir les paramètres linéaires (trois vecteurs  $a$ ,  $b$  et  $c$ ) et les paramètres angulaires (trois angles  $\alpha$ ,  $\beta$  et  $\gamma$ ). La position occupée par un atome dans la maille s'appelle un nœud. [12]

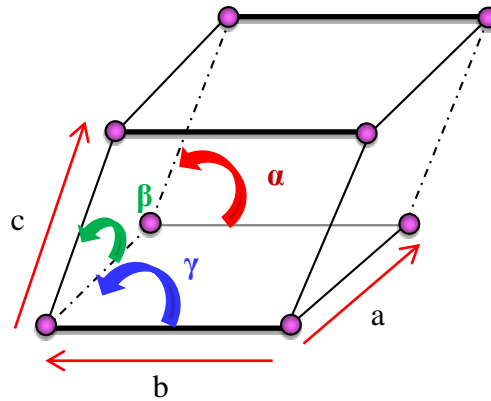


Figure I. 8: Maille cristalline ( $a$ ,  $b$ ,  $c$ ,  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$ )

### I.3.4.2. Epaisseur critique

L'épaisseur au-delà de laquelle la couche active commence à relaxer est appelée épaisseur critique. Cette épaisseur critique dépend des propriétés mécaniques des matériaux (coefficients élastiques  $C_{ij}$ ), ainsi que du degré de désaccord paramétrique entre le substrat et la couche épitaxiée.

Si l'épaisseur de la couche épitaxiée est supérieure à l'épaisseur critique [13], les mailles ne subissent plus les contraintes mécaniques imposées par le substrat et le paramètre de maille atteint celui du matériau massif. Le réseau est totalement relaxé.

Dans notre calcul, nous avons utilisé le modèle le plus classique, celui de *Matthew-Blakeslee*, qui traite le cas d'un matériau faiblement désaccord par rapport au substrat (désaccord de maille  $< 2\%$ ). La valeur de l'épaisseur critique  $h_c$  qui en résulte dans le cas d'un matériau de la structure zinc blende épitaxié sur la surface donnée par l'équation suivante :

$$L_c = \frac{a_s}{k\sqrt{2}\pi\epsilon_{xx}} \times \frac{1-(0.25\gamma)}{(1+\gamma)} \times \ln \left( \frac{L_c\sqrt{2}}{a_s} + 1 \right) \quad (1.2)$$

$\gamma$ : Le coefficient de Poisson qui est donné :

$$\gamma = \frac{C_{12}}{C_{11}+C_{12}} \quad (1.3)$$

### I.3.4.3. La contrainte

L'épitaxie des matériaux semi-conducteurs désaccordés est aujourd'hui bien maîtrisée. En effet, l'utilisation des hétéro-structures contraintes permet de varier l'énergie de la bande interdite du matériau par le changement des positions en énergie des bandes de valence et de conduction. Lorsque les paramètres de maille des deux matériaux sont différents, le matériau formant la couche la plus épaisse dans l'hétérojonction impose sa maille à la deuxième couche ; ceci entraîne l'existence d'une contrainte biaxiale dans le matériau de faible épaisseur. La figure I.8 illustre la structure de deux semi-conducteurs SC1 et SC2 ayant des paramètres de mailles différents. Dans le cas où la maille de substrat  $a_s$  est supérieure à celle de la couche épitaxiale  $a_e$ , la contrainte est en tension et dans le cas contraire, elle est en compression. Après le dépôt, la couche épitaxiale se déforme pour rattraper le désaccord de maille, soit  $\vec{X} = (x, y, z)$ , la position

d'un atome dans le semi-conducteur A avant épitaxie ; sa nouvelle position est  $\vec{X}' = \vec{\epsilon} \vec{X}$  où  $\vec{\epsilon} = \begin{pmatrix} \epsilon_{xx} & 0 & 0 \\ 0 & \epsilon_{yy} & 0 \\ 0 & 0 & \epsilon_{zz} \end{pmatrix}$  tenseur de déformation de cristal dans le cas d'une déformation biaxiale.

$$\epsilon = \epsilon_{xx} = \epsilon_{yy} = \frac{a_s - a_e}{a_e} \quad (1.4)$$

Dans le cas où le matériau ne subissant aucune contrainte autre que la pression atmosphérique qui peut être négligeable suivant l'axe  $z$  ( $\sigma_{zz} = 0$ ),  $\epsilon_{zz}$  est donnée par :

$$\epsilon_{zz} = -2 \frac{C_{12}}{C_{11}} \epsilon_{xx} \quad (1.5)$$

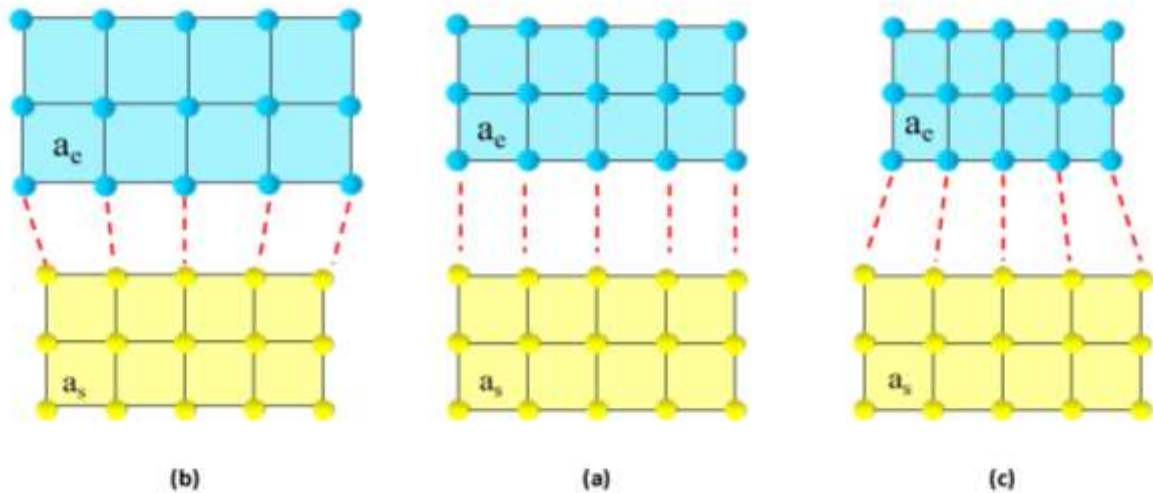


Figure I. 9: Schéma montrant une couche contrainte en compression et Une couche contrainte relaxée

### I.3.4.4. Effet de la contrainte sur les bandes d'énergie

En accord de maille ( $a_e=a_s$ ), les bandes de trous lourds et trous légers sont isotropes et dégénérées au centre de la zone de Brillouin  $\Gamma=0$ , la bande des spin-splittée étant située à une énergie  $\Delta_0$  en dessous de ces deux bandes (figure 1.10 (a,b,c)). Le centre de gravité de la bande de valence d'énergie moyenne  $E_{v_{moy}}$  se trouve par conséquent à  $\Delta_0/3$  au dessous du haut de la bande de valence en  $k = 0$  . [14]

$$E_{v_{moy}} = \frac{E_{hh}+E_{lh}+\Delta_0}{3} \quad (1.6)$$

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

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

$\Delta_0$  : L'énergie de décalage des bandes des trous spin-splittée

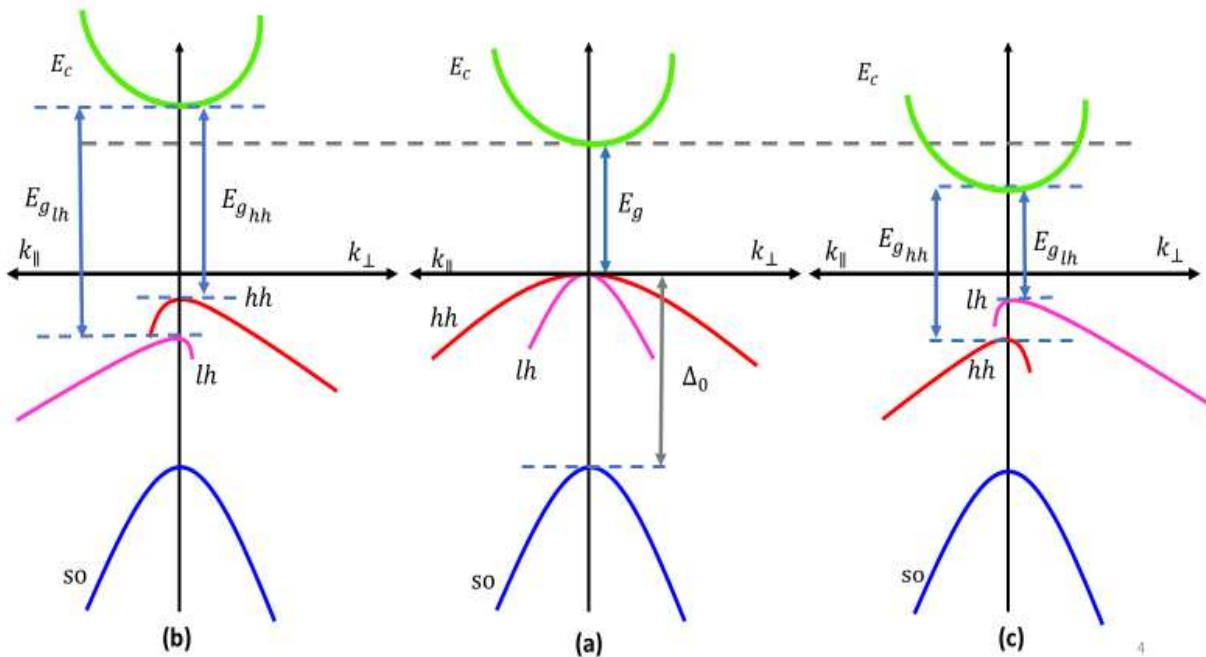


Figure I. 10: (a,b,c). Structure de bande d'un semi-conducteur à gap direct dans les trois cas  
 (a) Non contraint (b) contraint en compression (c) contraint en tension.

- La composante hydrostatique liée à la déformation selon l'axe de croissance  $oz$ , provoque un décalage du centre de gravité de la bande de valence ainsi que le centre de gravité de la bande de conduction.
- La composante de cisaillement liée à la déformation selon les axes  $ox$  et  $oy$ , provoque la dégénérescence des états énergétiques des trous lourds et trous légers.

Pour une couche soumise à une contrainte biaxiale de compression , la composante hydrostatique change le centre de gravité de la structure de bande; la contrainte de cisaillement rend les bandes de valence strictement anisotropes; la bande de plus haute énergie devient lourde selon  $\vec{k}_\perp$  et légère selon  $\vec{k}_\parallel$  (bande de trous lourds). La bande d'énergie inférieure devient légère selon  $k_\perp$  et lourde selon  $k_\parallel$  (bande de trous légers).

Les décalages énergétiques des centres de gravité des bandes de conduction et de valence en  $k = 0$  issues par la contrainte hydrostatique changent partiellement à la contrainte [15] :

$$\Delta E_c^{hyd} = a_c(2\varepsilon_\parallel + \varepsilon_\perp) \quad (1.7)$$

$$\Delta E_{v,moy}^{hyd} = a_v(2\varepsilon_\parallel + \varepsilon_\perp) \quad (1.8)$$

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

- Déformation de cisaillement :

$$\Delta E_{hh}^{cisa} = -\frac{\delta E^{cisa}}{2} \quad (1.9)$$

$$\Delta E_{lh}^{cisa} = -\frac{\Delta_0}{2} + \frac{\delta E^{cisa}}{4} + \frac{1}{2}\sqrt{\Delta_0^2 + \Delta_0\delta E^{cisa} + \frac{9}{4}(\delta E^{cisa})^2} \quad (1.10)$$

$$\delta E^{cisa,100} = 2b(\varepsilon_\parallel + \varepsilon_\perp) \quad (1.11)$$

Où  $b$  est le potentiel de déformation tétragonale.

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

$$E_c = E_{v,moy} + \frac{\Delta_0}{3} + E_g + \Delta E_c^{hyd} \quad (1.12)$$

Dans le cas d'une contrainte compressive :

$$E_v = E_{v,moy} + \frac{\Delta_0}{3} + \Delta E_{v,moy}^{cisa} + \Delta E_{hh}^{cisa} \quad (1.13)$$

Dans le cas d'une contrainte extensive :

$$E_v = E_{v,moy} + \frac{\Delta_0}{3} + \Delta E_{v,moy}^{cisa} + \Delta E_{lh}^{cisa} \quad (1.14)$$

L'expression du gap s'écrit :

$$E_g^c = E_c - E_v \quad (1.15)$$

$$E_{g_{hh}} = E_g + \Delta E_c^{hyd} - \Delta E_{v,moy}^{cisa} - \Delta E_{hh}^{cisa} \quad (1.16)$$

$$E_{g_{lh}} = E_g + \Delta E_c^{hyd} - \Delta E_{v,moy}^{cisa} - \Delta E_{lh}^{cisa} \quad (1.17)$$

### I.3.6. L'anticroisement des bandes d'énergies :

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

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

$$E_{\pm} = \frac{1}{2} \left[ E_{SB} + E_{VB} \pm \sqrt{(E_{SB} - E_{VB})^2 + 4C_{sb}^2 x} \right] \quad (1.18)$$

$$E_{vb} = E_{vb,Gasb} + \Delta E_{vb}x \quad (1.19)$$

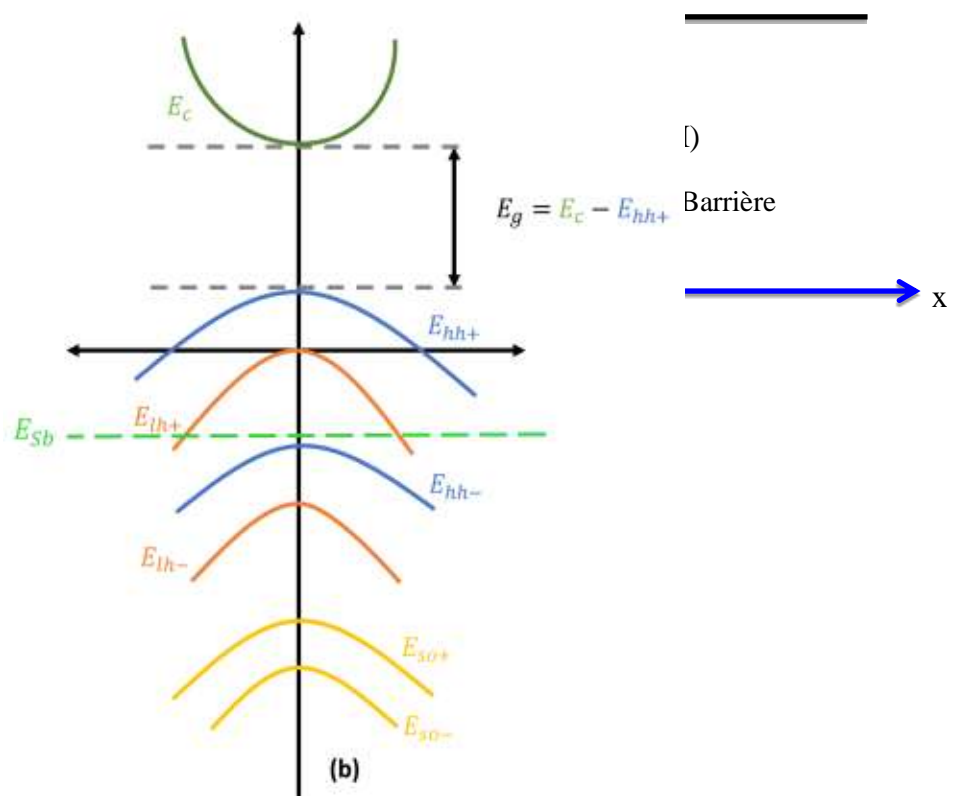


Figure I. 11: l'éclatement des bandes d'énergies

### I.3.7. Les états énergétiques dans un puits quantique

Dans un puits quantique de type I, les porteurs de charge sont confinés dans le même matériau constituant le puits à des niveaux énergétiques différents et pour définir ces valeurs propres d'énergie, nous utilisons et développons l'équation de Schrödinger. La résolution numérique

de l'équation de Schrödinger reste un problème très important intervenant dans de nombreux calculs de physique. Les phénomènes sont décrits par la fonction d'onde qui contient toutes les informations sur les particules d'un système ainsi que l'étude du comportement d'une particule confinés dans un puits de potentiel unidimensionnel et d'une largeur  $L_w$ . Ce travail suit l'équation de Schrödinger indépendante du temps à une dimension s'écrit : [16]

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2\varphi(x)}{dx^2} + V(x)\varphi(x) = E\varphi(x) \quad (1.20)$$

avec :  $\hbar = \frac{h}{2\pi}$

$h$  : La constante de Planck.

$m^*$  : La masse effective.

$\varphi$  : La fonction d'onde.

$V(x)$  : L'énergie potentielle.

$E_n$  : L'énergie totale de l'électron.

On peut l'écrire sous la forme :

$$\left[ -\left(\frac{\hbar^2}{8\pi m^*}\right) \Delta + V \right] \varphi(x) = E_n \varphi(x) \quad (1.21)$$

$$H^i \varphi = E^i \varphi \quad (1.22)$$

Où  $H$  : L'opérateur Hamiltonien.

$\Delta$  : Le Laplacien.

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & x < 0, \quad x > L_w \\ 0 & 0 < x < L_w \end{cases} \quad (1.23)$$

$$(1.24)$$

Avec  $V_0 = Q_c \Delta E_c$  (1.25)

Pour une particule dans un puits de profondeur finie de largeur  $L_w$ . Où le potentiel est nul à l'intérieur du puits, quel que soit l'énergie de cette particule, elle reste confinée dans le puits.

Dans le cas où  $V(x)=0$  L'équation de Schrödinger stationnaire à une dimension devient :

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2\varphi(x)}{dx^2} = E_n \varphi(x) \quad (1.26)$$

La solution générale est :

$$\varphi = Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_2x} \quad (1.27)$$

Où : A et B sont des constantes.

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

$$E = E_T = \frac{p^2}{2m^*} \quad (1.25) \quad \text{alors} \quad E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \quad (1.28)$$

Selon la relation de De Broglie, l'impulsion P de la particule s'écrit :

$$P = \hbar k \quad (1.29)$$

On trouve les 3 régions (I) ( $x < 0$ ), (II) ( $0 < x < L_w$ ), (I) ( $x > L_w$ ) comme suit :

$$\frac{d^2\varphi_I(x)}{dx^2} - \frac{2m^*}{\hbar^2} (V_0 - E_n) \varphi(x) = 0 \quad (1.30)$$

$$\frac{d^2\varphi_{II}(x)}{dx^2} - \frac{2m^*}{\hbar^2} E_n \varphi(x) = 0 \quad (1.31)$$

$$\frac{d^2\varphi_I(x)}{dx^2} - \frac{2m^*}{\hbar^2} (V_0 - E_n) \varphi(x) = 0 \quad (1.32)$$

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

Région I :

$$\varphi_I(x) = Ae^{k_1x} + Be^{-k_1x} \quad (1.33)$$

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

$$\text{s'écrit :} \quad \varphi_I(x) = Ae^{k_1x} \quad \text{avec :} \quad k_1 = \sqrt{2m_b^*(V_0 - E_n)}/\hbar \quad (1.34)$$

$$\text{Région II :} \quad \varphi_{II}(x) = B \sin(k_2x + \Phi) \quad \text{avec :} \quad k_1 = \sqrt{2m_w^*E_n}/\hbar \quad (1.35)$$

$$\text{Région I :} \quad \varphi_I(x) = C'e^{k_1x} + Ce^{-k_1x} \quad (1.36)$$

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

$$\varphi_I(x) = Ce^{-k_1x} \quad (1.38)$$

Pour la détermination des constantes, pour cela on utilise la continuité des fonctions d'ondes à l'interface puits-barrière en  $x = 0$ .

Dans ce cas les conditions aux limites sont données par :

$$\varphi_I(0) = \varphi_{II}(0) \rightarrow A = B \sin \varphi \quad (1.39)$$

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

La fonction d'onde est dérivable :

$$\frac{1}{m_b^*} \varphi_I(0) = \frac{1}{m_w^*} \varphi_{II}(0) \rightarrow A \frac{k_1}{m_b^*} = B \frac{k_2}{m_w^*} \cos \varphi \quad (1.40)$$

$$\varphi_{II}(L_w) = \varphi_I(L_w) \rightarrow B \sin(k_2 L_w + \varphi) = C e^{-k_1 L_w} \quad (1.41)$$

$$\frac{1}{m_w^*} \varphi_{II}(L_w) = \frac{1}{m_1^*} \varphi_I(0) \rightarrow B \frac{k_2}{m_w^*} \cos(k_2 L_w + \varphi) = -C \frac{k_1}{m_b^*} C e^{-k_1 L_w} \quad (1.42)$$

En divisant les équations (1.39) sur (1.40) et (1.41) sur (1.42) on obtient respectivement :

$$\tan \varphi = \frac{k_2 m_b^*}{k_1 m_w^*} \quad (1.43)$$

$$\tan(k_2 L_w + \varphi) = -\frac{k_2 m_b^*}{k_1 m_w^*} \quad (1.45)$$

Compte tenu de la relation :

$$\sin^2 \alpha = \frac{1}{\left(1 + \frac{1}{\tan^2 \alpha}\right)} \quad (1.46)$$

L'expression (2.20) donne :

$$\sin \varphi = \frac{\frac{k_2}{m_2}}{\sqrt{\frac{k_2^2}{m_2^2} + \frac{k_1^2}{m_1^2}}} \quad (1.47)$$

D'autre part la relation :  $\tan \varphi = -\tan(k_2 L_w + \varphi)$  cela entraine  $\varphi = -(k_2 L_w + \varphi) + n\pi$

Où  $n$  est un nombre entier  $k_2 L_w = n\pi - 2\varphi$

Soit, en précisant  $\varphi$ ,  $k_1$  et  $k_2$  en (1.47) :

$$\frac{\sqrt{2m_2^* E_n}}{\hbar} = n\pi - 2 \arcsin \sqrt{\frac{E_n}{\frac{V_0 m_2^*}{m_1^*} + E_n \left(1 - \frac{m_2^*}{m_1^*}\right)}} \quad (1.48)$$

Si  $E \ll V_0$  on voit immédiatement que  $q \gg K$ , et les conditions de quantifications deviennent pour les deux cas symétrique et antisymétrique respectivement :

$$\tan \frac{KL}{2} \rightarrow \infty \quad \text{donc} \cos \frac{KL}{2} \rightarrow 0 \quad \text{soit} \quad K_n = \frac{(2n+1)\pi}{L}, \quad n > 0 \quad (1.49)$$

$$\text{Cotg} \frac{KL}{2} \rightarrow \infty \quad \text{donc} \quad \sin \frac{KL}{2} \rightarrow 0 \quad \text{soit} \quad K_n = \frac{2n\pi}{L}, \quad n > 0 \quad (1.50)$$

Ces deux conditions se réunissent en une seule, à savoir :

$$K_n = \frac{n\pi}{L}, \quad n > 0 \quad \text{d'où} \quad E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} n^2 = \frac{\hbar^2}{8mL^2} n^2 \quad (1.51)$$

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

## **I.4. Conclusion**

Dans ce chapitre, on s'est intéressé aux matériaux semi-conducteurs III-V on a abordé quelques paramètres qui caractérisent ces matériaux tels que la structure cristalline, les bandes interdites directes et indirectes, et aussi quelques notions sur le laser, son mode de fonctionnement et ses composantes, ensuite on a été consacré à l'étude des structures à puits quantiques à base des matériaux semi-conducteurs III-V. On a présenté les différentes caractéristiques de ce type de structures. On a vu l'effet de la contrainte sur les puits quantiques à savoir le paramètre de maille, l'épaisseur critique, l'effet de la contrainte sur les bandes d'énergie et l'énergie de quantification. On consacrer le chapitre suivant à l'étude et l'interprétation des résultats de la simulation de matériaux INGaSb/INP.

A decorative border resembling a scroll, with a vertical strip on the left and a horizontal strip at the top, both ending in small circular curls.

## **Chapitre II : Résultat Et Discussion**

## II.1. Introduction

Dans ce chapitre nous avons simulé les paramètres de la structure à puits quantique à base de matériau GaInSb sur substrat InP comme paramètre de maille, la déformation, l'énergie de la bande interdite sans contrainte, énergie de la bande interdite contraint avec éclatement et sans éclatement. Par la suite nous avons simulé et optimisé l'énergie de quantification des porteurs électrons et trous (trous lourds et trous légers), l'énergie de transition et la longueur d'onde d'émission.

## II.2. Paramètre de maille et déformation

La figure II.1 montre l'impact de la concentration d'antimoine sur le paramètre de maille de la couche active. L'accroissement de la concentration d'antimoine augmente le paramètre de maille. Lorsque la concentration d'indium varie de 0% à 20% le paramètre de maille de la structure change de 6.05 à 6.14Å. C'est -à-dire qu'on une augmentation de  $\Delta a=0.09\text{\AA}$ . La figure 2 représente la variation de la contrainte parallèle en fonction de la concentration d'antimoine à  $T=300\text{K}$ . Cette étude nous permet d'optimiser la stabilité de la structure proposée. Alors, lorsque la concentration d'antimoine varie de 0% à 20% la déformation d'interface croît de 3% à 4.3%. Alors on doit choisir la concentration d'antimoine dans l'intervalle 0.5% à 6%.

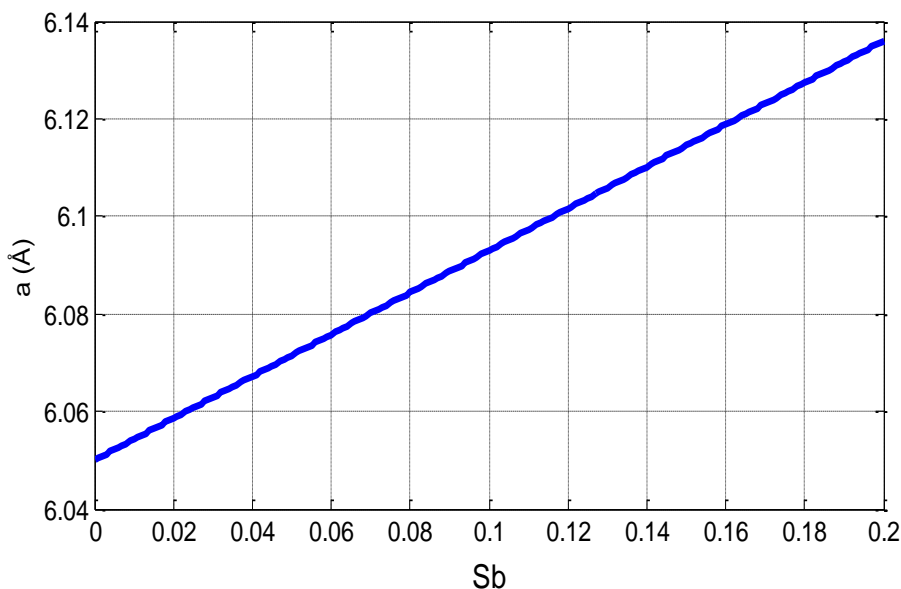


Figure II. 1: variation de paramètre de maille en fonction de la concentration d'antimoine.

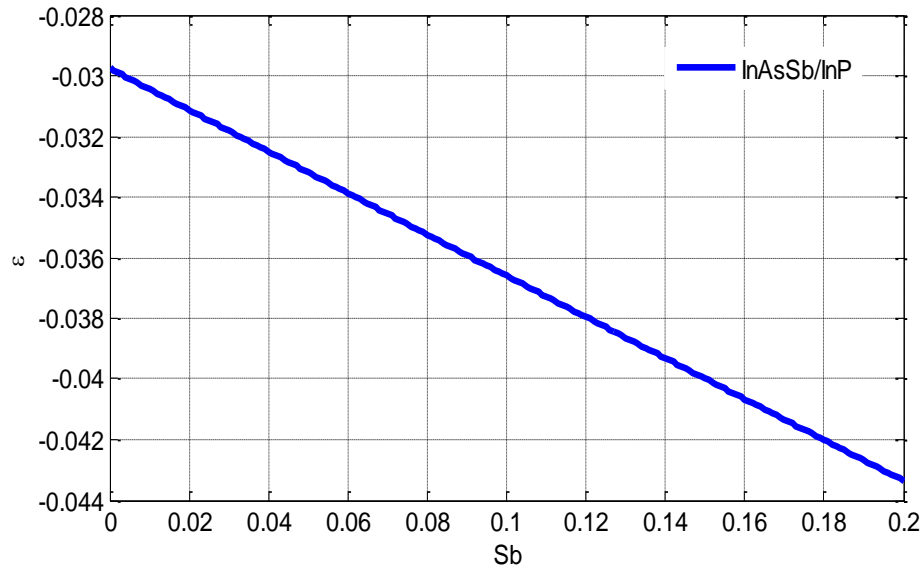


Figure II. 2: variation de la déformation en fonction de la concentration d'antimoine.

### II.3. Bande interdite

La figure II.3 montre la variation de l'énergie de la bande interdite sans contrainte et sans éclatement en fonction de la concentration d'antimoine à  $T=300\text{K}$ . Lorsque la concentration varie de 0% à 20% l'énergie de la bande interdite décroît de  $0.42\text{eV}$  à  $0.27\text{eV}$ .

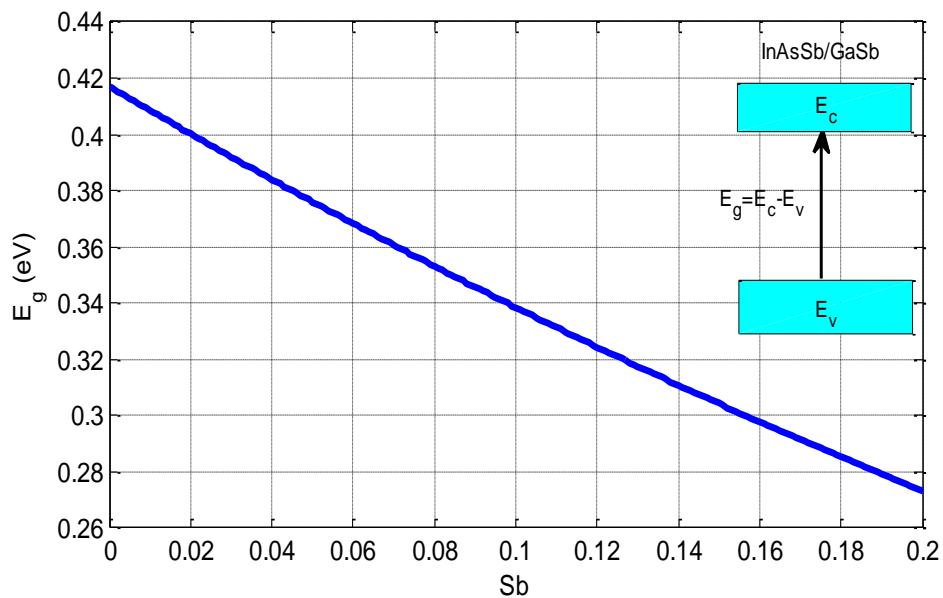


Figure II. 3: variation de l'énergie de la bande interdite sans contrainte et sans éclatement à  $T=300\text{K}$ .

On pourra déterminer la concentration d'antimoine afin d'optimiser l'énergie de la bande interdite de la structure présentée. Dans la figure II.4 nous avons tracé la variation de l'énergie de la bande interdite dans les cas contraint sans éclatement et contraint avec éclatement. On

observe que l'énergie de la bande interdite sous l'effet de l'éclatement est faible par rapport à celle de sans éclatement. Alors on pourra optimiser l'énergie de la bande interdite pour des applications en optoélectronique. Pour le cas d'éclatement on peut avoir des longueurs d'onde plus importante.

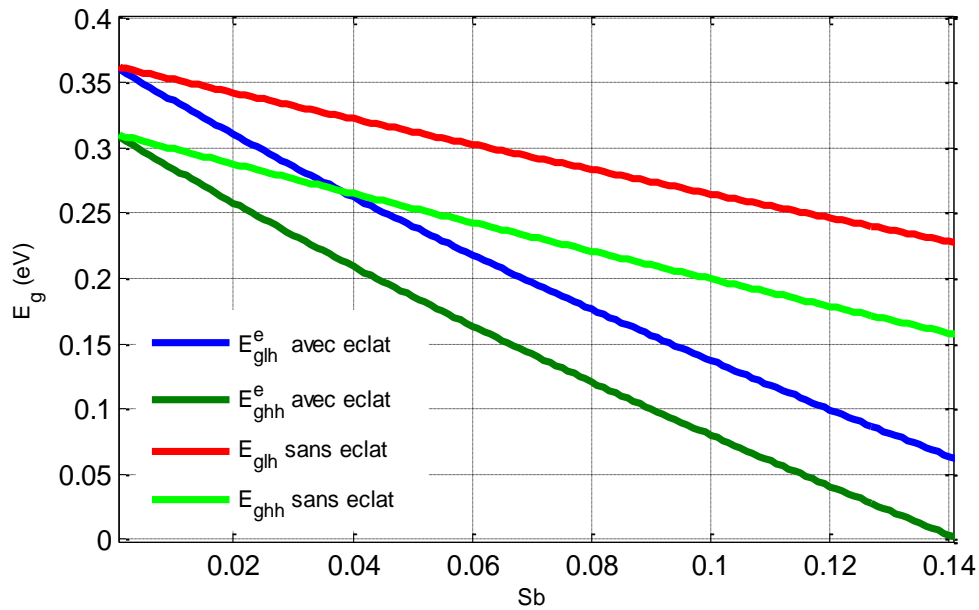


Figure II. 4: variation de l'énergie de la bande interdite avec éclatement à T=300K.

## II.4. Décalage d'énergie

La figure II.5 représente l'effet de la concentration d'antimoine sur le décalage des énergies de notre structure de la bande de conduction de la bande de valence. Cette nous permet d'optimiser le confinement et le taux de confinement d'énergie dans le puits quantique. On note que l'effet de la concentration d'antimoine sur le décalage de la bande de conduction est plus important par rapport l'effet sur l'énergie de la bande de valence. Aussi, on pourra déterminer le type de puits quantique. Si on fixe la concentration d'antimoine à 10% le de décalage de l'énergie de la bande de conduction vaut 1.26eV et le décalage de l'énergie de la bande valence est égale à 0.31eV. Pour la détermination de l'énergie de quantification des porteurs électrons et trous dans le puits quantique nous avons résolue l'équation de Schrödinger en utilisant la méthode de dichotomie.

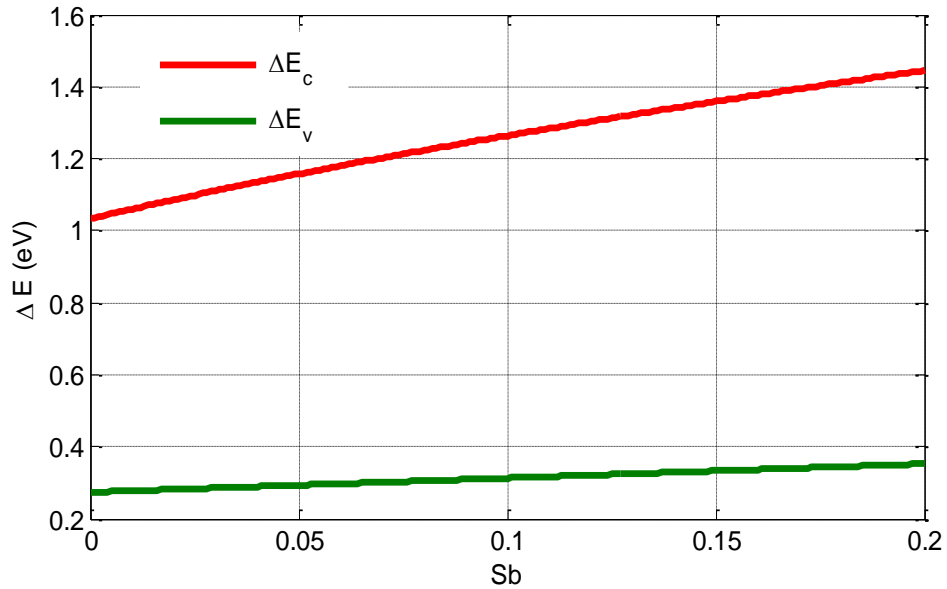


Figure II. 5: variation du décalage d'énergie de la bande de conduction et la bande de valence en fonction de la concentration d'antimoine.

## II.5. Energie de quantification

Les figure II.6.7.8 (a,b,c) montrent l'évolution de l'énergie de quantification de la structure à puits quantique à base de InGaSb/InP en fonction de la largeur de la zone active. On observe que lorsque la largeur de la zone active croît l'énergie de quantification décroît rapidement.

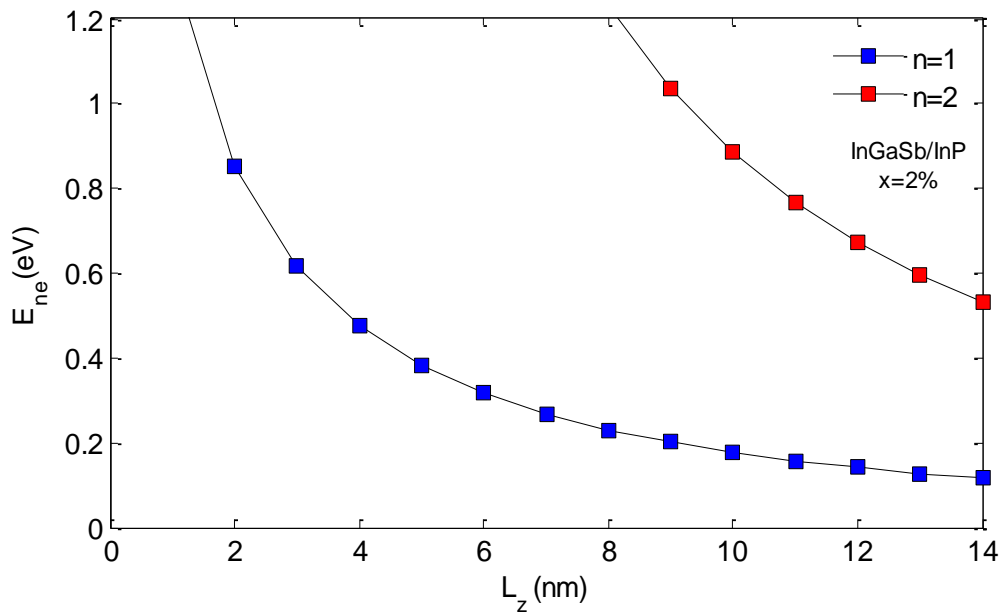


Figure II. 6.a : variation de l'énergie de quantification des électrons en fonction de la largeur de la zone active pour  $x=2\%$  à  $T=300K$ .

Alors l'augmentation de la largeur de la zone active influe négativement sur l'énergie de quantification des porteurs électrons et trous. Cette étude nous permet d'optimiser la largeur de la zone active et de l'énergie de quantification. La figure II.6.a représenté la variation de l'énergie de quantification en fonction  $L_z$  à  $T=300K$  et une concentration d'antimoine de 2%. Dans la figure II.7.b on a déterminé l'énergie de quantification des porteurs électrons à  $T=300k$  et  $x =8\%$ . La figure II.8.c représente toujours la variation de l'énergie de quantification des porteurs électrons mais à un alliage de 15%.

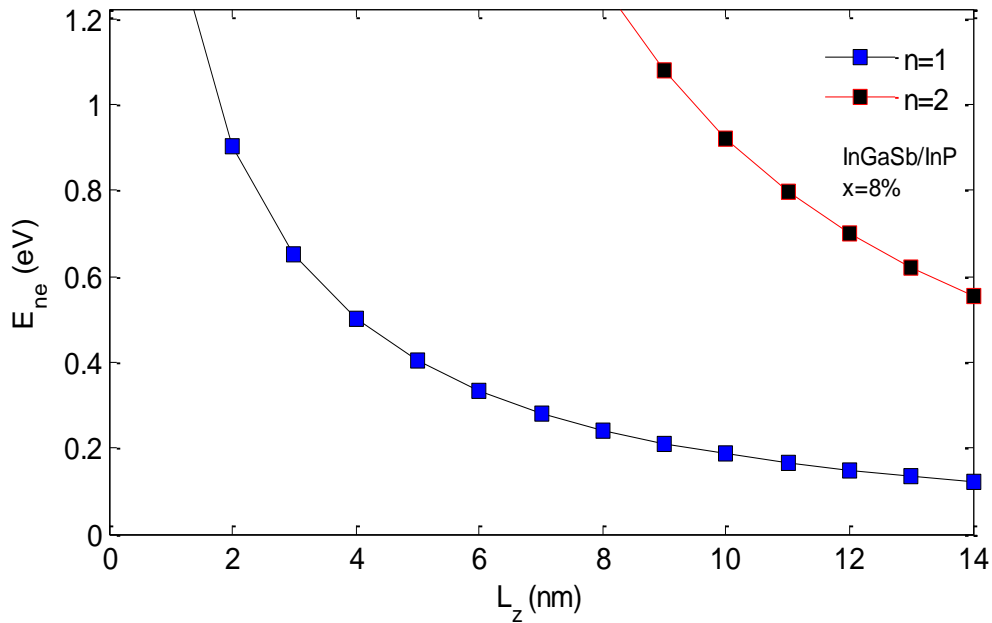


Figure II. 7.b : variation de l'énergie de quantification des électrons en fonction de la largeur de la zone active pour  $x=8\%$  à  $T=300K$ .

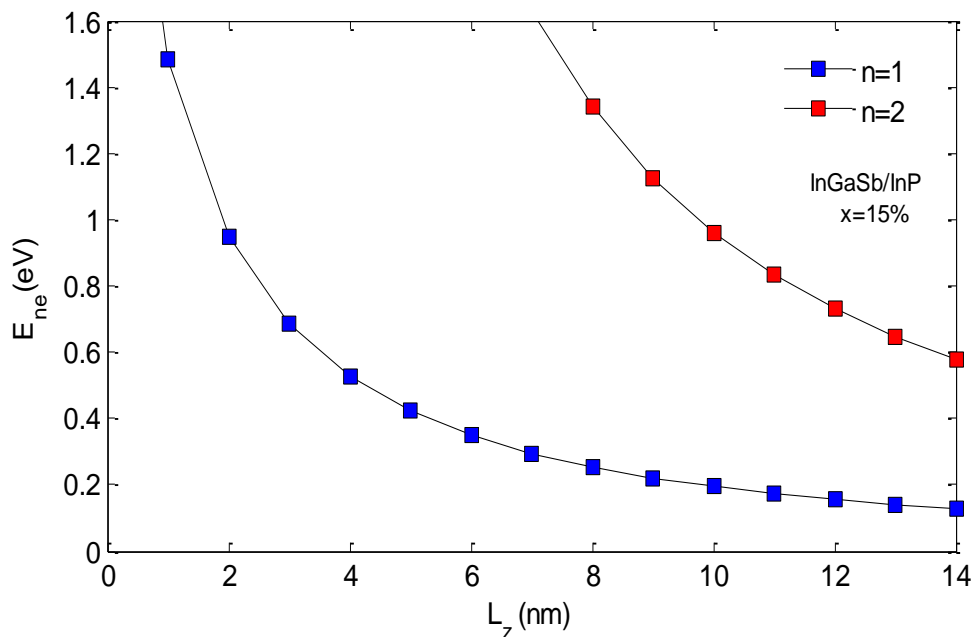


Figure II. 8.c : variation de l'énergie de quantification des électrons en fonction de la largeur de la zone active pour  $x=15\%$  à  $T=300K$ .

Les figures II.9.10.11 (a,b,c) représentent l'effet de la largeur du puits quantique ( largeur de la zone active) sur l'énergie de quantification des trous lourds pour plusieurs et à une température ambiante. A partir de cette simulation nous pourrions déterminer l'énergie de transition et la longueur d'émission du puits quantique. L'énergie de transition dans le puits quantique est dépendue de l'énergie de la bande interdite et les énergies de quantifications des porteurs électrons et trous. Alors pour avoir une longueur d'onde d'émission de la structure dans la gamme du spectre de la lumière on doit trouver un compromis entre la concentration d'alliage, la largeur du puits quantique et la température. Dans ce travail on se limitera à deux niveaux d'énergies de quantifications. Lorsque la largeur de la zone active dépasse 300Å nous remarquons que la quantification disparaître c'est-à-dire qu'on pas de confinement des porteurs électrons et trous.

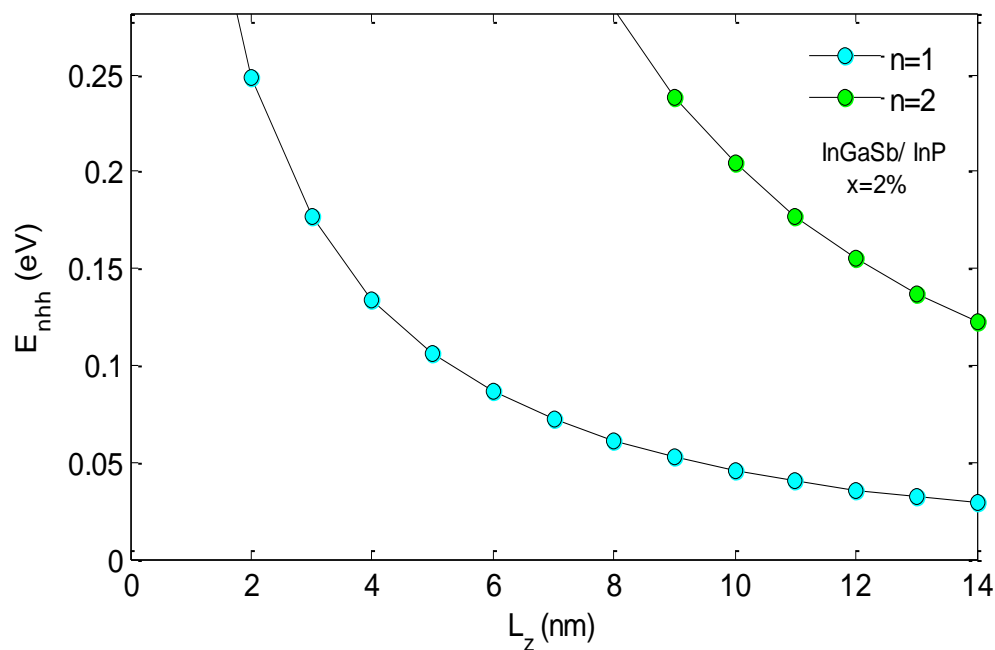


Figure II. 9.a : variation de l'énergie de quantification des trous lourds en fonction de la largeur de la zone active pour  $x=2\%$  à  $T=300K$ .

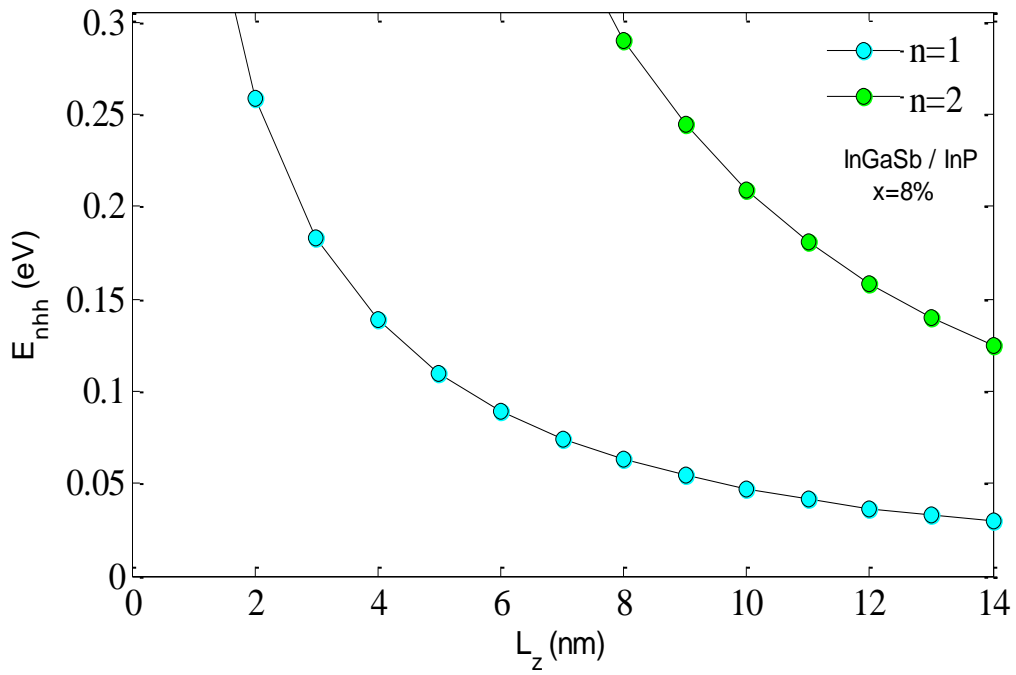


Figure II. 10.b : variation de l'énergie de quantification des trous lourds en fonction de la largeur de la zone active pour  $x=8\%$  à  $T=300K$ .

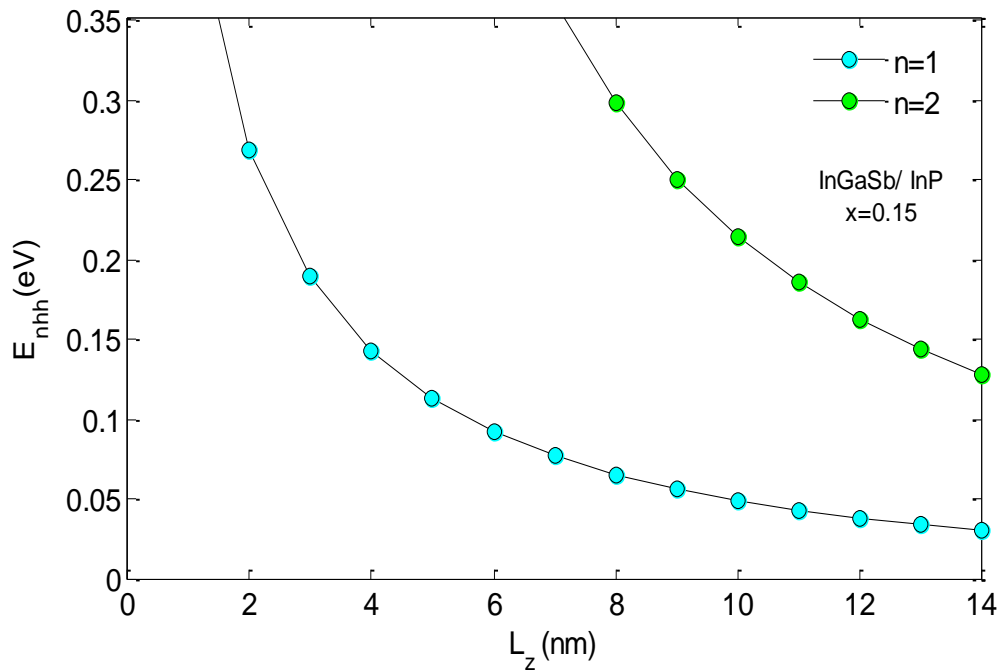


Figure II. 11.c : variation de l'énergie de quantification des trous lourds en fonction de la largeur de la zone active pour  $x=15\%$  à  $T=300K$ .

## II.6. Energie de Transition

Les figures II.12.13.14 (a,b,c) présentent la variation de l'énergie de transition en fonction de la largeur de la zone active pour différentes concentration de l'antimoine Sb à T=300K. La figure II.12.a montré l'effet de la largeur de la zone active du puits quantique à base de InGaSb /InP sur l'énergie de transition dans le cas x=2%. L'augmentation de la largeur de la zone active provoque une diminution considérable. On remarque que à partir de  $L_z=14\text{nm}$  les deux niveaux d'énergie se superposent. La figure 13.b montre la variation de l'énergie de transition en fonction de la largeur de la zone active  $L_z$  à T=300K et à une composition d'alliage de 8%. On remarque une diminution de l'énergie de transition des deux niveaux. Par exemple à  $L_z=10\text{nm}$  l'énergie de transition de premier niveau à x=8% est égale 0.35eV mais pour la même largeur de la zone active à x=2% l'énergie de transition de premier niveau vaut 0.48eV c'est-à-dire on a une chute d'énergie de transition de 0.13eV. La figure 14.c illustre l'effet de la largeur de la zone active sur l'énergie de transition à T=300K à une composition d'alliage de 15%. Alors dans ces conditions l'énergie diminue considérablement. Par exemple pour  $L_z=10\text{nm}$  l'énergie de transition du premier niveau est égale 0.23eV. On a une réduction d'énergie de transition par rapport à la structure d'alliage x=2% de 0.25eV.

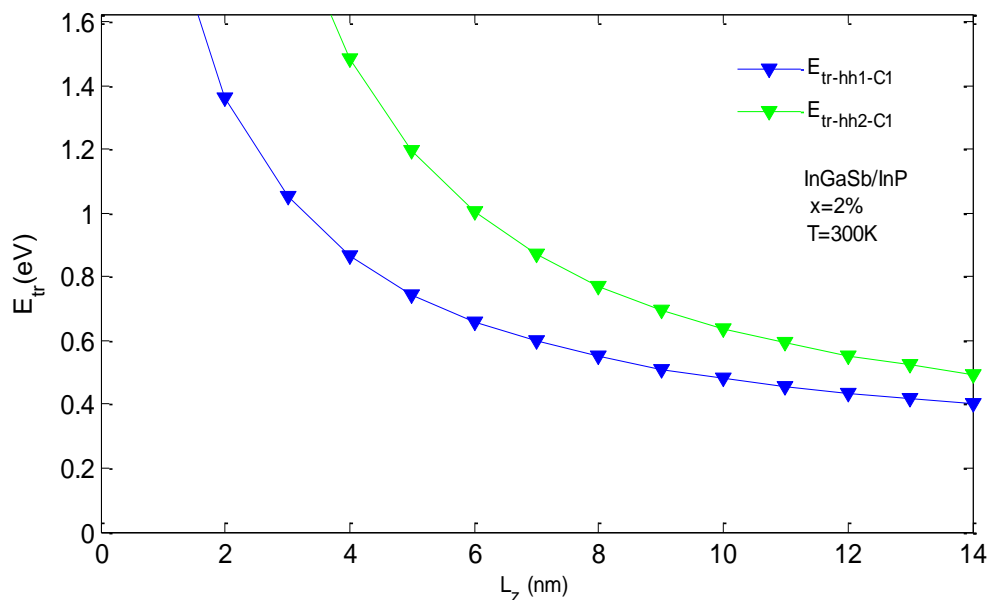


Figure II. 12.a : variation de l'énergie de transition en fonction de la largeur de la zone active pour x=2% à T=300K.

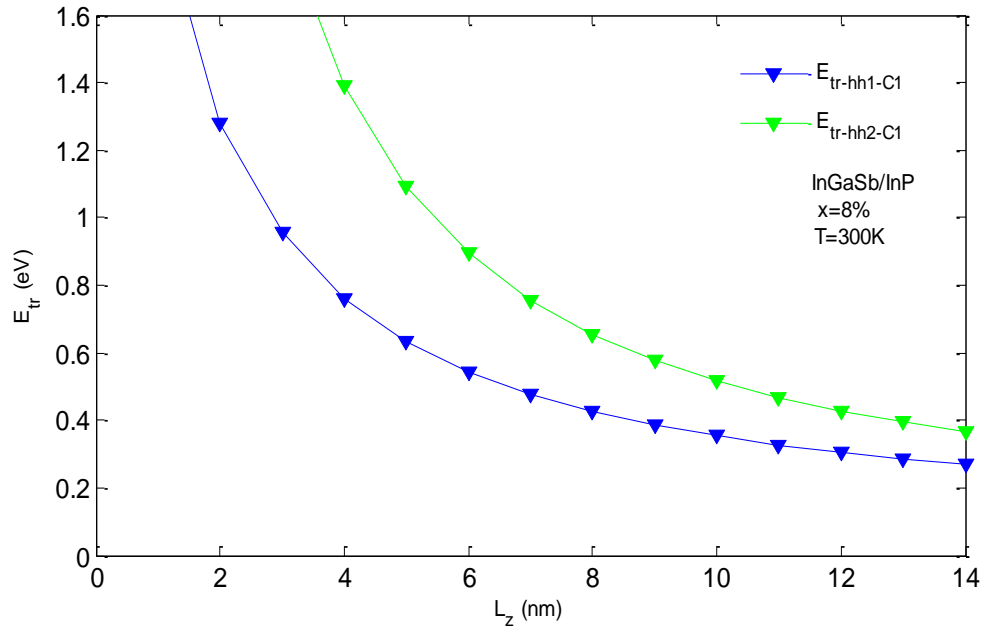


Figure II. 13.b : variation de l'énergie de transition en fonction de la largeur de la zone active pour  $x=8\%$  à  $T=300K$ .

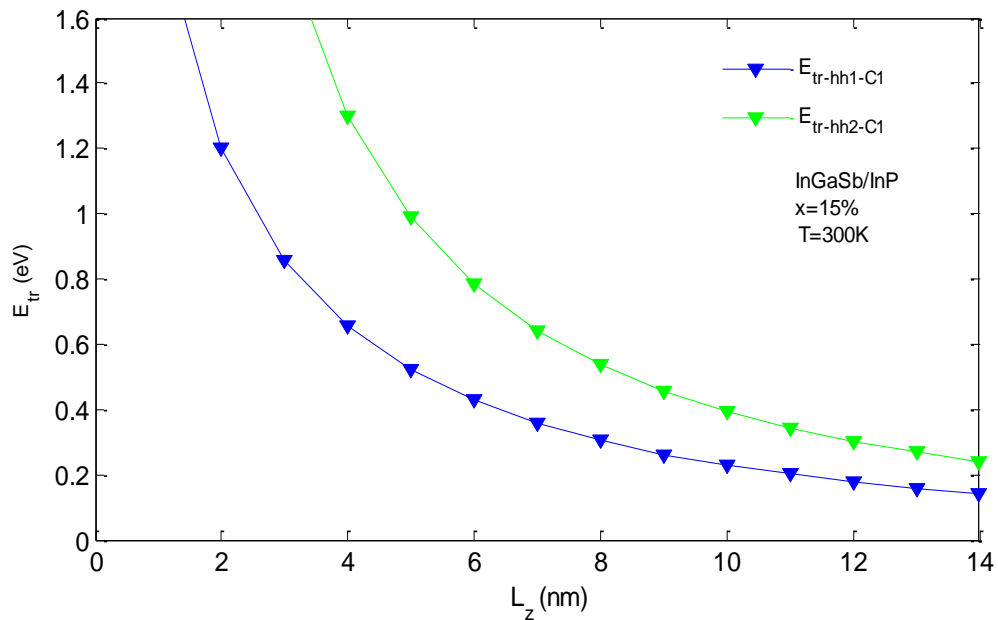


Figure II. 14.c: variation de l'énergie de transition en fonction de la largeur de la zone active pour  $x=15\%$  à  $T=300K$ .

## II.7. Longueur d'onde d'émission

Les figures 15.16.17 (abc) illustrent la variation de la longueur d'onde d'émission de la structure proposé en fonction de la largeur de la zone active pour différente concentration d'antimoine à  $T=300K$  pour les transitions entre les électrons et les trous lourds. La figure 15.a montré

l'évolution de la longueur d'onde de deux niveaux pour  $x=2\%$ . On constate que la longueur d'onde varie de  $0.5\mu\text{m}$  à  $3\mu\text{m}$  c'est-à-dire, on a une partie d'émission dans le visible et une autre partie d'émission dans le proche et moyen infrarouge. La figure 16.b montre la variation de la longueur d'onde d'émission en fonction de  $L_z$  pour  $x=8\%$ , à  $T=300\text{K}$ . On observe que la longueur d'onde atteint  $4\mu\text{m}$  à  $L_z=12\text{nm}$ .

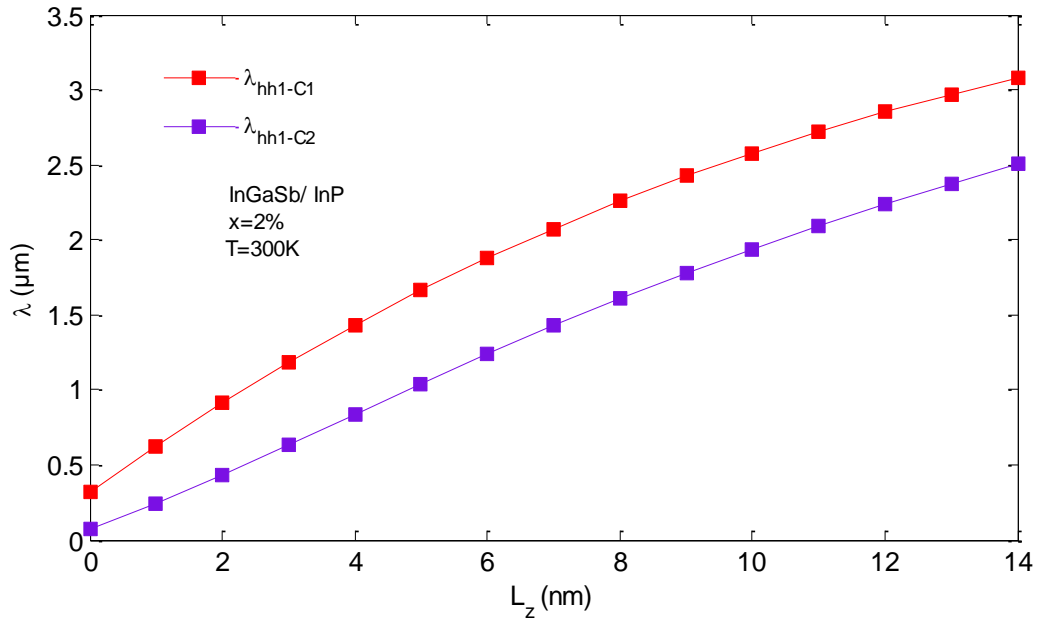


Figure II. 15.a : variation de la longueur d'onde d'émission en fonction de la largeur de la zone active pour  $x=2\%$  à  $T=300\text{K}$ .

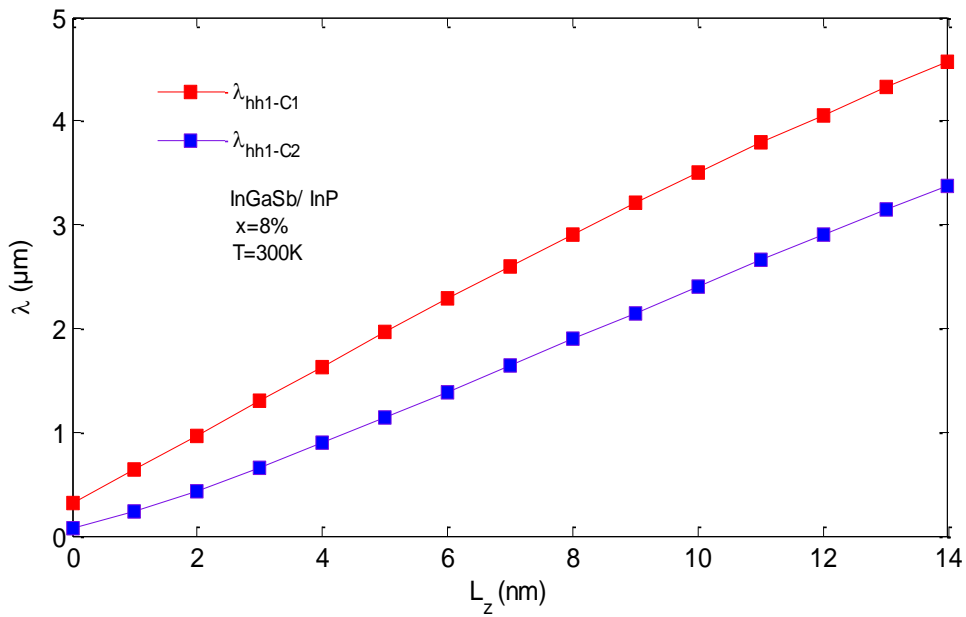


Figure II. 16.b : variation de la longueur d'onde d'émission en fonction de la largeur de la zone active pour  $x=8\%$  à  $T=300\text{K}$ .

Dans la figure 17.c on a tracé la longueur d'onde d'émission en fonction de  $L_z$  pour  $x=15\%$ , à  $T=300K$ . On remarque que la longueur d'onde dépasse  $8\mu m$  pour  $L_z=13nm$ . Lorsque la concentration d'antimoine augmente la longueur d'onde croît rapidement. Cette étude nous permet d'optimiser la largeur de puits quantique et de la concentration d'antimoine pour fixer la longueur d'onde d'émission de la structure proposé.

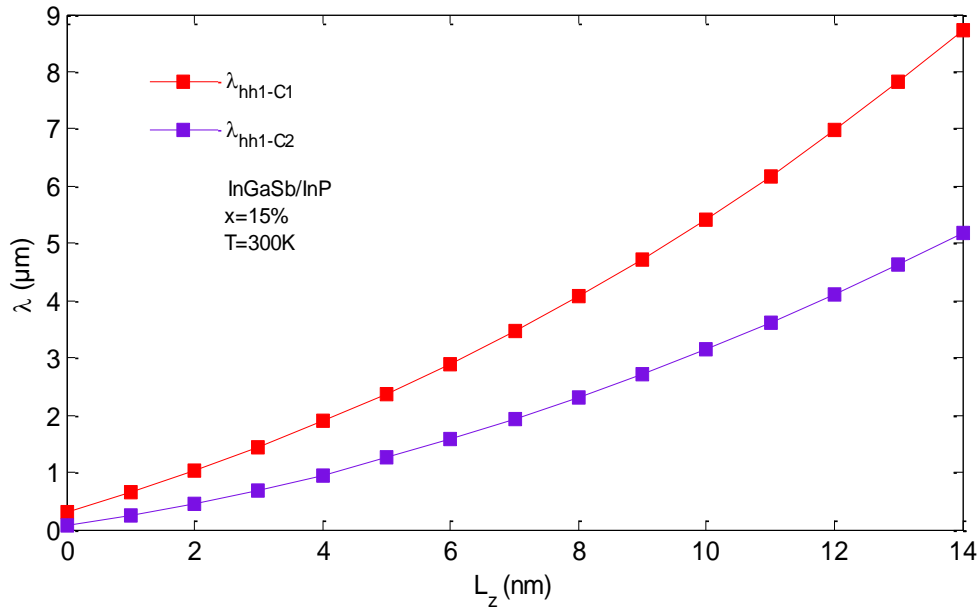


Figure II. 17.c : variation de la longueur d'onde d'émission électrons/ trous lourds en fonction de la largeur de la zone active pour  $x=15\%$  à  $T=300K$ .

Les figures 18.19.20. (a,b,c) montrent la variation de la longueur d'onde d'émission en fonction de  $L_z$  pour différents concentration d'antimoine à  $T=300K$  pour des transitions entre les électrons et les trous légers. On constate que la longueur d'onde varie de  $0.5$  à  $6\mu m$ . La figure 18.a montre la variation de l'énergie de transition du premier niveau de quantification en fonction de la largeur de puits quantique pour  $x=2, 8$  et  $15\%$ . Lorsque  $L_z$  croît l'énergie de transition décroît rapidement. Aussi l'augmentation de la concentration d'antimoine diminue l'énergie de transition de la structure. Dans la figure19.b l'effet de  $L_z$  et de la concentration d'antimoine Sb sont simulés. Cette simulation nous permet d'optimiser la concentration et largeur du puits quantique pour avoir une énergie de transition et une longueur d'onde d'émission dans l'infrarouge. Par exemple pour  $x=15\%$  et  $L_z=10nm$  la longueur d'onde est égale à  $5\mu m$ .

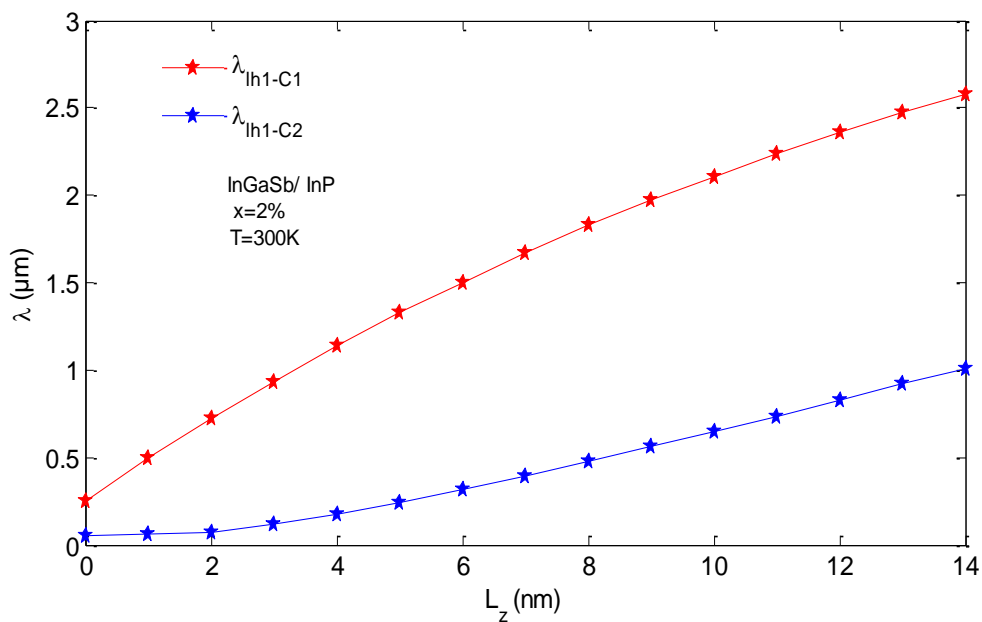


Figure II. 18.a : variation de la longueur d'onde d'émission électrons/ trous légers en fonction de la largeur de la zone active pour  $x=2\%$  à  $T=300\text{K}$ .

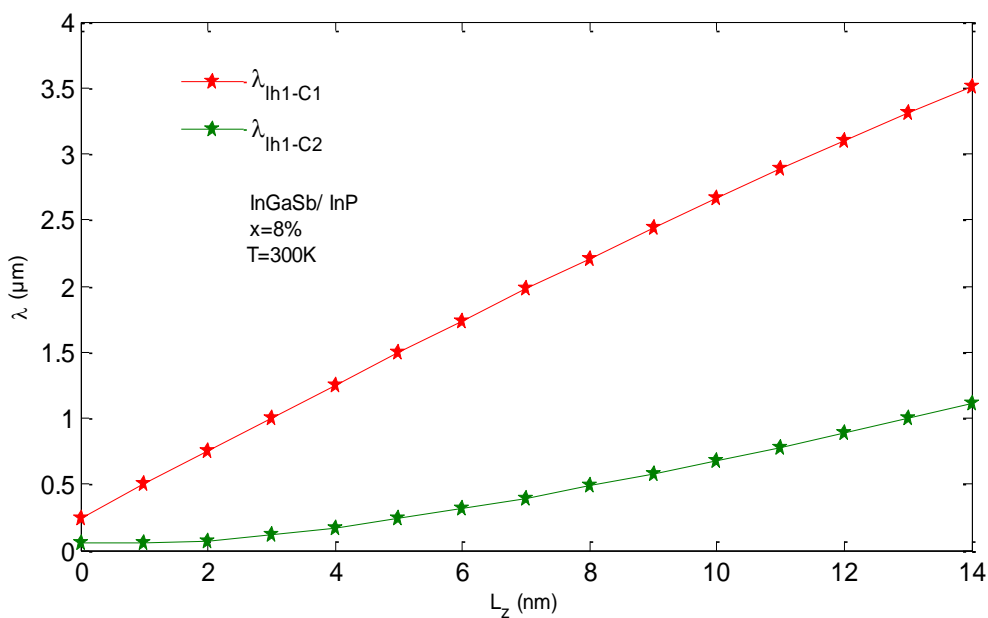


Figure II. 19.b : variation de la longueur d'onde d'émission électrons/ trous légers en fonction de la largeur de la zone active pour  $x=8\%$  à  $T=300\text{K}$ .

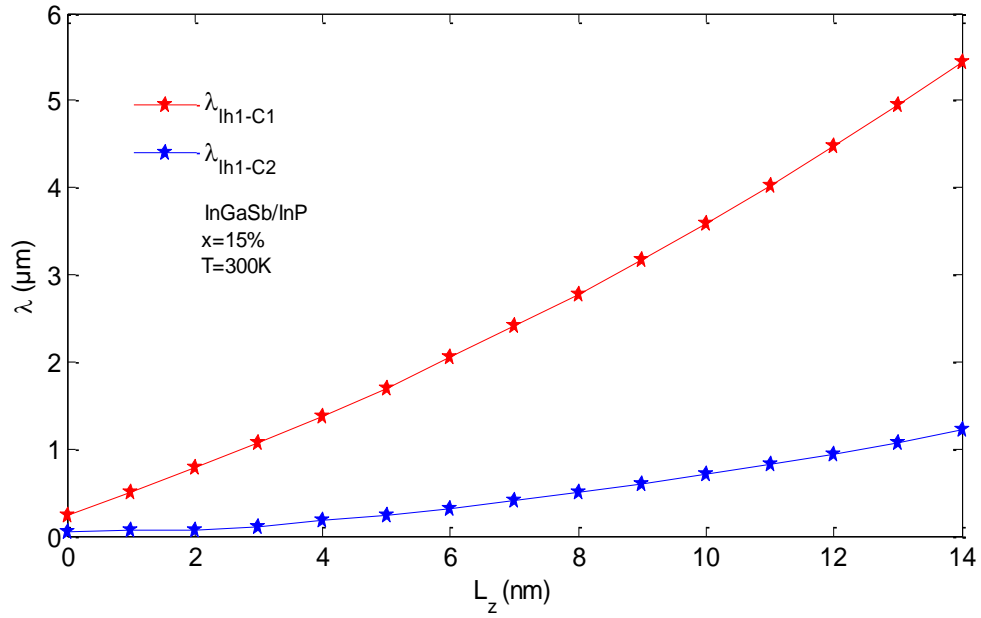


Figure II. 20.c : variation de la longueur d'émission électrons/ trous légers en fonction de la largeur de la zone active pour  $x=15\%$  à  $T=300\text{K}$ .

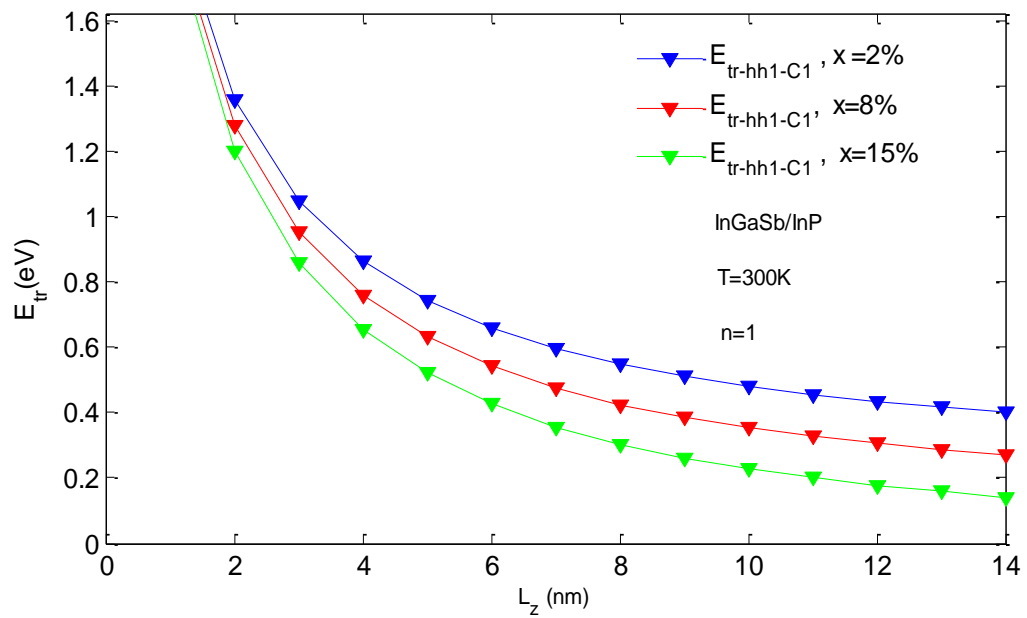


Figure II. 21: Effet de la largeur de la zone active et de la concentration d'alliage Sb ( $x$ ) sur l'énergie de transition à  $T=300\text{K}$  et  $n=1$

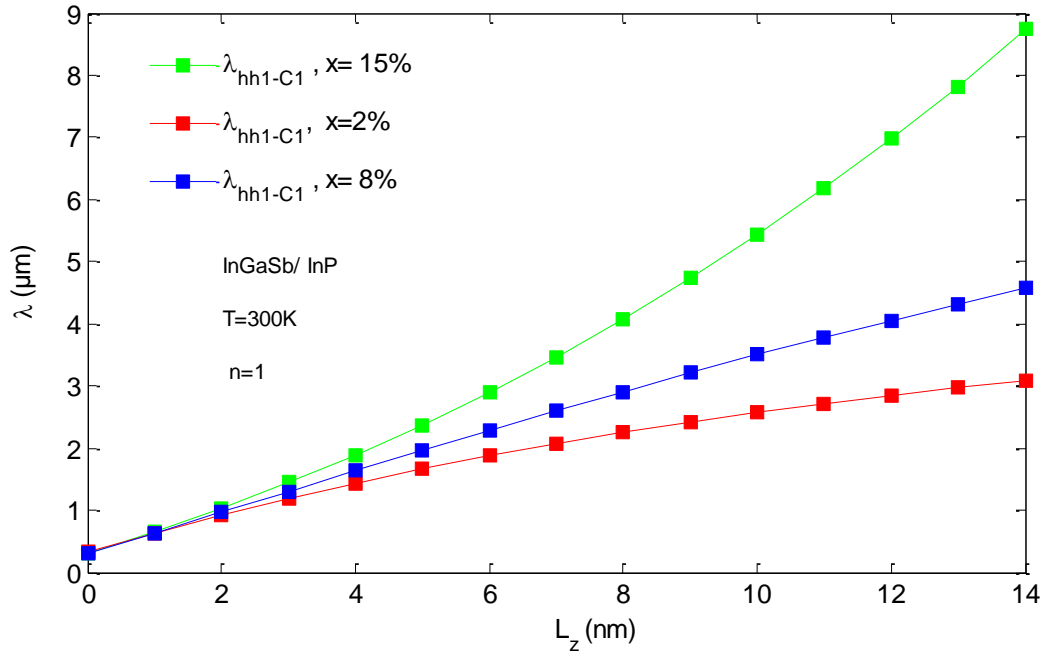


Figure II. 22: Effet de la largeur de la zone active et de la concentration d'alliage Sb (x) sur la longueur d'onde d'émission à  $T=300\text{K}$  et  $n=1$ .

## II.8. Conclusion

En conclusion, nous avons simulé la structure à puits quantique. L'effet de la concentration d'antimonié sur les énergies de quantifications, de transitions entre deux niveaux d'énergie et la longueur d'onde d'émission a été étudié. Aussi, l'influence de la largeur du puits quantique sur les énergies de transition et la longueur d'onde a été pris en considération. Enfin nous avons optimisé la longueur d'onde d'émission de la structure proposé. Nous pouvons avoir des longueurs d'ondes dans la gamme de visible et l'infrarouge.

## Conclusion générale

Dans le domaine des matériaux qui est la base de tous les dispositifs fabriqués, on est tout le temps en train d'explorer d'autres matériaux. L'emploi des semi-conducteurs s'est avéré très fructueux et divers dispositifs ont prouvé leurs importances dans notre vie quotidienne. L'exploit d'autres matériaux ouvre un grand éventail de recherches de matériaux magique, petits et rapides.

L'objectif de ce travail est d'étudier et de simuler les paramètres de la structure à puits quantique à base de matériaux InGaSb sur substrat InP.

Nous avons commencé le premier chapitre par une étude théorique, tout d'abord une présentation des matériaux semi-conducteurs, ensuite nous avons étudié les puits quantiques pour les diodes laser et leurs paramètres électroniques et l'énergies de quantifications.

Dans le deuxième chapitre, nous avons présenté les résultats de simulation à base de notre structure InGaSb/InP. Au premier lieu, nous avons commencé par les paramètres de maille et l'étude de la contrainte compressive, l'épaisseur critique. En deuxième lieu, nous avons étudié la contrainte et l'éclatement sur l'énergie de la bande interdite. En dernier lieu, nous avons simulé les énergies de quantification, de transition ainsi la longueur d'onde.

## BIBLIOGRAPHIE

- [1] MEMOIRE <<Magister en physique par Dehimi Said Etude de lasers à base des composés Semi-conducteurs (InP, GaAs, GaP).
- [2] G. E. Fenner, J. D. Kingsley, T. J. Soltys, and R. O. Carlson R. N. Hall, Coherent light emission from GaAs junctions, 1962.
- [3] MEMOIRE N. Holonyak and S. F. Bevacqua, Coherent (visible) light emission from Ga(As $_{1-x}$ P $_x$ ) junctions, 1962.
- [4] MEMOIRE Christophe Levallois. \_Etude et r\_ealisation de lasers \_a cavit\_e verticale mono et multi-longueurs d'onde \_emettant \_a 1,55 \_m. Physique Atomique [physics.atom-ph]. INSA de Rennes, 2006.  
Fran\_cais.<tel-00489096> ,<https://tel.archives-ouvertes.fr/tel00489096>.
- [5] MEMOIRE M Dr\_ Etude de Laser à base d'heterostructure de Semi-Conducteurs III-V.
- [6] THESE DOCTORAT Nicolas Trenado, Modélisation et simulation des composants optoélectroniques à puits quantiques, thèse doctorat, Université de ROUEN, 2002
- [7] (en) Ioffe Physico-Technical Institute – New Semiconductor Materials. Characteristics and Properties [archive] « *GaSb – Gallium Antimonide.* »
- [8] (en) Ioffe Physico-Technical Institute – New Semiconductor Materials. Characteristics and Properties [archive] « *GaSb – Gallium Antimonide.*
- [9] Lide, David R. (1998), Handbook of Chemistry and Physics (87 éd.), Boca Raton, Floride : CRC Press, pp. 4-61, ISBN 0-8493-0594-2
1. ^ Sheng Chao, Tien ; Lee, Chung Len ; Lei, Tan Fu (1993), "L'indice de réfraction de l'InP et de son oxyde mesuré par ellipsométrie incidente à angles multiples", Journal of Materials Science Letters , **12** (10) : 721, doi : 10.1007/BF00626698.
  2. ^ "Paramètres de base d'InP" .
- [11] -G. BROUSSAUD. Optoélectronique, (Masson et Cie 1974
- [12] H. Y. Fan, Temperature Dependence of the Energy Gap in Semiconductors, Phys. Rev., vol. 82, p. 900, 1951.
- [13] Joël Bleuse et Vincent Bouchiat, Nanofils semi-conducteurs et Nanotubes de carbone : une approche commune, 2004.

- [14] C. Chauvin, *J. Math : Les ondelettes comme fonctions de base dans le calcul de structures électroniques*, I. N. Pol. De Grenobl, 2005.
- [15] Band parameters for III–V compound semiconductors and their alloys'', American Institute of Physics, *J. Appl. Phys.* 89, 5815 (2001).
- [16] Yan Zhang, YongqiangNing, Lisen Zhang, Jinsheng Zhang, Jianwei Zhang, Zhenfu Wang, Jian Zhang, YugangZeng, and Lijun Wang, Design and comparison of GaAs, GaAsP and InGaAlAs quantum-well active regions for 808-nm VCSELs, Vol. 19, No. 13, *Optics Express* (2011).