

الجمهورية الجزائرية الديمقراطية الشعبية
République Algérienne démocratique et populaire

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

جامعة سعد دحلب البليدة
Université SAAD DAHLAB de BLIDA

كلية لتكنولوجيا
Faculté de Technologie

قسم الإلكترونيك
Département d'Électronique



Mémoire de Master

Mention Électronique
Spécialité Micro-électronique

présenté par

SEBAA NORA

&

OUZANI AMINA

**Etude et simulation de la structurer InGaAsBi/GaAs a
puits quantique pour l'émission 1.3 μ m**

Proposé par : Mr. Aissat Abdelkader

Année Universitaire 2017-2018

Remerciements

Notre premier remerciement va à Allah qui a créés l'image la plus complété et de nous avoir donné l'éprit et le cerveau que nous lui sommes arrivés là où nous sommes

On tient à remercier notre promoteur monsieur A. Aissat Professeur à l'université de Blida, pour son entière disposition, et ses judicieux conseils, sa patience et sa gentillesse, et sa contribution générale a l'élaboration de ce travail.

On souhaite remercier nos professeurs qui tout au long des années d'études nous ont transmis leur savoir sans réserve.

Nos remerciements égalementle président et des membres de jury d'avoir accepté et d'examiner notre travail

Nos remerciements vont aussi à tous ceux et celles qui ont participé de près ou de loin à l'élaboration de la présente mémoire.

Enfin, on tient à remercier tous nos amis et collègues pour leur soutien moral tout au long de cette préparation.

ملخص:

يهتم موضوع المذكرة إلى دراسة ومحاكاة لبنية أساسها InGaAsBi/GaAs لانبعث أشعة مداها $1,3 \mu m$. هذا الخليط InGaAsBi/GaAs الرباعي هو من أشباه النواقل III- V متكون من عدة آبار كمونية متقلصة، فهو يمثل خصائص جد مهمة و خاصة طاقة فجوته التي تتناقص بطريقة حادة و هذا بفعل إدخال الإنديوم و البزموت على الركيزة GaAs. في النهاية حددنا تركيز In و Bi التي تمكن من انبعث الأشعة مداها $1.3 \mu m$.

كلماتالمفتاح:

آبار كمونية متقلصة، طول موجات الاتصال، بنية InGaAsBi ، الشبكة المعلمة.

Résumé :

Le sujet de note mémoire l'étude et la simulation de la structure sous-jacente de InGaAsBi / GaAs pour un long d'émission $1,3 \mu m$.

Cette structure quaternaire InGaAsBi est un semi-conducteur III-V. il représente des caractéristiques très importantes notamment l'énergie de son gap, qui diminue fortement en introduisant de l'indium et du bismuth sur le substrat GaAs.

En fin de compte, nous avons déterminé la concentration de (In) et (Bi) qui permet long d'émission $1.3 \mu m$.

Mots clés :

Puits quantique, longueur d'onde d'émission, structure InGaAsBi, paramètre de maille.

Abstract :

The subject of the memo is the study and simulation of the underlying structure of InGaAsBi / GaAs for a $1, 3 \mu m$ emission lanyard.

This InGaAsBi quaternary structure is semiconductor III-V. It represents very important characteristics, in particular the energy of its gap, which strongly decreases by introducing indium and bismuth onto the GaAs substrate

In the end, we determined the concentration of (In) and (Bi) that allows $1,3 \mu m$ emission longevity

Keywords:

Quantum well, emission wavelength, InGaAsBi structure, mesh parameter.

Listes des acronymes et abréviations

X : concentration d'indium

Y : concentration de bismuth

E : Energie de photon.

h : Constante de Planck.

C : Vitesse de la lumière dans le vide.

λ : Longueur d'onde.

Bi: Bismuth.

In: Indium.

As: Arsenic.

Ga: Gallium.

BC: Bande de conduction.

B_v: Bande de valence.

E_g: Energie de gap.

ϵ : Déformation hydrostatique.

a_s: Paramètre de maille du substrat.

a_e: Paramètre de maille de la couche épitaxie.

a_v: Potentiel de déformation dans la bande de valence.

a_c: Potentiel de déformation dans la bande de conduction.

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

ΔE_{lh} : Décalage d'énergie de la bande de trou lourd

ΔE_{lh} : Décalage d'énergie de la bande de trou léger

E_g^{cont} : Energie de gap contraint.

E_g^{ncont} : Energie de gap non contraint.

$\epsilon_{||}$ (ϵ_{yy} et ϵ_{zz}) : Déformations bi axiales.

ϵ_{\perp} (ϵ_{xx}) : Déformations uniaxiale.

ν : Coefficient de Poisson donné.

c_{ij}: Les coefficients élastiques (cm⁻²).

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

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

Δ_0 : Energie de décalage des bandes des trous spin-splittée.

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

Δ_{SO} : L'énergie de spin orbite.

$\delta E_{hh}, \delta E_{lh}$: Les décalages du haut et de bas de la bande de valence contrainte par rapport à celui de non contraint.

m : La masse de la particule.

φ : La fonction d'onde.

$V(\mathbf{x})$: Fonction décrivant le potentiel pour chaque valeur de x .

E_{n_i} : Niveaux d'énergie dans la bande de conduction.

E_{h_j} : Niveaux d'énergie dans la bande de valence.

Table des matières

Chapitre 1 : Etat de l'art sur les matériaux III.V et théorie de puits quantiques

1.1	Introduction..	03
1.2	Définition de semi-conducteur III-V.....	04
1.3	Les composés binaires, ternaires et quaternaires des semi-conducteur III-V	04
1.3.1	Les composés binaires.....	04
1.3.2	Les composés ternaires.....	05
1.3.3	Les composés quaternaires.....	05
1.4	Structure cristalline.....	06
1.5	Structure de bande.....	08
1.6	Gap direct et gap indirect.....	09
1.7	Transition inter bandes.....	10
1.7.1	Absorption.....	10
1.7.2	Émission.....	10
a	émission spontanée.....	10
b	émission stimulée.....	11
1.8	Les caractéristiques optiques des matériaux.....	11
1.8.1	Le coefficient d'absorption.....	11
1.8.2	L'indice de réfraction	12
1.9	Coefficient élastiques.....	12
1.10	Coefficients de dilatation thermique.....	13
1.11	Masse effective des électrons et des trous.....	13
1.12	Hétéro structures à puits quantiques	15
1.12.1	Introduction.....	15
1.12.2	Définition de puits quantiques.....	15
1.12.3	Les types de puits quantiques.....	16
a	Hétéro structures type I	16
b	Hétéro structures type II.....	17

c	Hétéro structures type III.....	17
d	Quelque exemple de puits quantiques.....	18
1.12.4	Les états énergétiques dans un puit quantique.....	18
a	puits de profondeur infinie.....	19
b	puits quantiques de profondeur finie.....	21
1.12.5	Paramètre de maille.....	24
1.12.6	Effet de la contrainte	24
1.12.7	Epaisseur critique h_c	26
1.12.8	Effet de la contrainte sur le gap.....	28
1.13	Conclusion	32

Chapitre 2 : Résultats et discussion

2.1	Introduction.....	33
2.2	Paramètre de maille	34
2.3	Désaccord de maille.....	35
2.4	L'épaisseur critique	35
2.5	L'énergie de gap non contrainte.....	36
2.6	L'énergie de gap avec contrainte.....	37
2.7	Quantification des porteurs électrons dans le puit quantique	38
2.8	Quantification trous lourds dans le puit quantique.....	41
2.9	Energie de transition	43
2.10	Longueurs d'ondes d'émission	45
2.11	conclusion.....	47
	Conclusion générales.....	48
	Bibliographie.....	49

Liste des figures

Figure 1.1: Deux orientations possibles du cristal III-V.	06
Figure 1.2 : Première zone de Brillouin d'un réseau cubique à faces centrées....	07
Figure 1. 3: Diagramme de bande d'énergie des matériaux semi-conducteur....	08
Figure 1. 4 : a) gap direct b) gap indirect.....	09
Figure 1. 5 : Phénomène Absorption	10
Figure 1. 6 : phénomène émission spontanée	11
Figure 1. 7 : phénomène émission stimulée	11
Figure 1. 8 : schéma qui représente la réfraction.....	12
Figure 1. 9 : illustration d'un puits quantique.....	15
Figure 1. 10 : Hétéro structures type I.	16
Figure 1. 11: Hétéro structures type II.....	17
Figure 1. 12 : Hétéro structures type III.....	17
Figure 1.13: (a), (b)(c) et (b) différents type de puits quantique.....	18
Figure 1.14 : Puits de potentiel infiniment profond.....	19
Figure 1.15 : Illustration des types de contraintes.....	26
Figure 1.16 : Illustration d'une couche contrainte.....	27
Figure 1.17 : Structure de bande d'un semi-conducteur à gap direct.....	28
Figure 2.1: la variation du paramètre de maille en fonction de la concentration du (In) et (Bi)	33
Figure 2.2: la variation du paramètre de maille en fonction de la concentration du (In) et (Bi).....	34
Figure 2.3 : la variation de désaccord de maille (e_{xx} et e_{zz}) en fonction des concentrations de l'In et du B.....	35
Figure 2.4 : la variation de désaccord de maille (e_{xx} et e_{zz}) en fonction des concentrations de l'In et du Bi.....	35
Figure 2. 5: Variation de l'épaisseur critique en fonction de la concentration de (In) et (Bi).....	35

Figure 2.6 : Variation L'énergie de gap non contrainte en fonction de la concentration de (In) et (Bi).....	36
Figure 2.7 : Variation L'énergie de gap non contrainte en fonction de la concentration de (In) et (Bi).....	36
Figure 2.8 : Variation L'énergie de gap contrainte en fonction de la concentration de (In) et (Bi).....	37
Figure 2.9 : Variation L'énergie de gap contrainte en fonction de la concentration de (In) et (Bi).....	37
Figure 2. 10 : Variation de l'énergie de quantification des électrons en fonction de la largeur du puits quantique pour plusieurs concentrations de (Bi) et (In)....	39
Figure 2. 11 : Variation de l'énergie de quantification trous lourds en fonction de la largeur du puits quantique pour plusieurs concentrations de (Bi) et (In).....	41
Figure 2. 12 : Variation de l'énergie de transition en fonction de la largeur du puits quantique pour plusieurs concentrations de (Bi) et (In).....	43
Figure 2. 13 : Variation des Longueurs d'ondes d'émission en fonction de la largeur du puits quantique pour plusieurs concentrations de (Bi) et (In).....	44
Liste des tableaux :	
Tableau 1.1 : la classification périodique de Mendeleïev.....	04
Tableau 1.2 : La liste pour des certains semi-conducteurs compose.....	05
Tableau1.3 : L'énergie de gap et paramètres de Varshni pour des certains éléments.....	09
Tableau 1.4 : Constantes élastiques C11 et C12 pour certains éléments.....	13
Tableau 1.5 : la masse effective pour certains éléments	14

Introduction générale

Depuis que les semi-conducteurs sont exploités pour réaliser des composants optoélectroniques, notamment des émetteurs (diodes électroluminescentes, lasers...), les besoins en matériaux couvrant des gammes de longueur d'onde de plus en plus diverses n'ont fait qu'augmenter. Cela a dynamisé la recherche de nouveaux systèmes de matériaux pour couvrir les gammes de longueur d'onde recherchées. [1]

D'autre part, ces semi-conducteurs devant être élaborés sous forme de couches monocristallines présentant un minimum de défauts, de gros efforts ont été faits pour optimiser les techniques d'élaboration. Enfin, une dernière contrainte, de nature économique, a imposé de réaliser les composants sur les substrats des filières technologiques les plus matures (Silicium, GaAs, InP...) pour permettre des développements industriels rapides. [1]

Cependant de nouvelles méthodes d'élaboration de matériaux ont été mises au point à partir de 1975. Ces méthodes, telles l'épitaxie par jet moléculaire, par exemple, ont permis de faire croître les cristaux relatifs à l'électronique à la monocouche atomique près. On a pu réaliser des puits quantiques c'est-à-dire des couches semi conductrices d'une dizaine de nanomètres d'épaisseur insérés entre les matériaux différents, le tout avec une précision atomique. Le confinement des électrons dans la direction perpendiculaire aux couches étant telle que de nouvelles propriétés quantiques sont apparues donnant naissance aux nouveaux types de lasers qui ont envahi le domaine des télécommunications modernes. [2]

L'étude présentée dans ce mémoire est organisée en deux chapitres, les différents paramètres électroniques et optiques des puits quantiques à base d'InGaAsBi/GaAs, ainsi que les équations pour faire des analyses numériques.

- Dans le premier chapitre nous décrivons différentes propriétés des matériaux III-V et la théorie du puits quantique
- Le deuxième chapitre présente les simulations en utilisant le logiciel Matlab sur propriétés de la structure InGaAsBi

Enfin, nous avons déterminé les concentrations de (In) et (Bi) et l'épaisseur du puits quantique permettant une émission de $1.3 \mu\text{m}$ et nous terminerons par une conclusion.

Chapitre 1 : ETAT DE L'ART SUR LEMATERIAUX

III-V ET THEORIE DE PUIITS QUANTIQUE

1.1 Introduction

Dans le domaine du développement technologique moderne et la recherche de matériaux électroniques et de développements scientifiques et la nécessité des matériaux électroniques purs et bien caractérisés par différents types d'atomes et de structures cristallines, sont apparus les semi-conducteurs qui jouent un rôle dans le développement des technologies avancées. Conduit à une amélioration significative de la compréhension des semi-conducteurs

Les semi-conducteurs sont disponibles dans de nombreuses formulations chimiques avec une large gamme de structures cristallines, nous pouvons obtenir un transport de base similaire à plusieurs composés organiques.

Les semi-conducteurs ont été utilisés dans la conception de nouvelles structures, de systèmes électroniques et optiques et de nombreuses autres applications

Semi-conducteur III-V fonctionne dans de nombreux magazines, tels que l'électronique avancée et l'électronique optique, grâce à ses caractéristiques. [3]

Les semi-conducteurs sont caractérisés par leur bande interdite, qui sépare les trous dans bande de valence et Les électrons dans la bande de conduction, le maximum de la bande de valence et le minimum de la bande de conduction est vecteur d'onde. Le gap est dit direct Lorsque le minimum de la bande de conduction possède le même

vecteur d'onde que le maximum de la bande de valence, et dans le cas contraire il est dit indirect. [4]

1.2 Définition des semi-conducteurs III-V

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

II	III	IV	V	VI
	<i>B</i>	<i>C</i>	<i>N</i>	
	<i>Al</i>	<i>Si</i>	<i>P</i>	
<i>Zn</i>	<i>Ga</i>	<i>Ge</i>	<i>As</i>	<i>S</i>
<i>Cd</i>	<i>In</i>	<i>Sn</i>	<i>Sb</i>	<i>Te</i>

Tableau 1.1.: la classification périodique de Mendeleïev

1.3 Les composés binaires, ternaires et quaternaires des semi-conducteurs III-V

En peux combinant différents éléments III ou V, il est possible de former des composés alliés binaire, ternaires, quaternaires, pour permet d'ajuster certaines propriétés comme la largeur de la bande interdite (pour les applications optoélectronique), la mobilité des porteurs (pour les applications électroniques) ou encore la constance de réseau. [5]

1.3.1 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. [6]

1.3.2 Les composés ternaires

On sait par exemple obtenir des alliages ternaires qui sont identifiés de la façon 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 [7].

1.3.3 Les composés quaternaires

Il existe deux cas :

- S'il y a substitution de 3 atomes sur des sous réseaux soit $A_xA'_yA'_{(1-x-y)}B$.
- S'il y a substitution de 2 atomes sur chacun des deux sous réseaux, soit $A_xA'_{(1-x)}A'_yB'_{(1-y)}$.

	colonne	Semi-conducteur
III-V	binaire	GaAs, GaP, GaSb, InSb, InP, InAs.
	ternaire	$Al_xGa_{1-x}As$, $GaAs_yPt_{1-y}$
	quaternaire	$Al_xGa_{1-x}As_yPt_{1-y}$, $In_xGa_{1-x}As_t-yBi_y$

Tableau 1.2 : La liste pour des certains semi-conducteurs compose

Dans notre mémoire on choisit la structure quaternaire InGaAsBi pour détecter de nombreuses valeurs du gap, la famille III-V fournit la couverture la plus appropriée pour la plus large gamme de longueurs d'onde, produisant ainsi une caractéristique distinctive et très importante en optique. Nous renforçons les bénéfices scientifiques de la famille III-V en fabriquant quelques alliages ternaires et quaternaires en substituant l'un des éléments par un autre élément de la même colonne. Pour

réduire la largeur de la bande interdite, la concentration d'indium devrait être réduite en fusionnant le bismuth et l'indium dans le GaAs. La compensation de la contrainte entre l'indium de petite taille et le Bismuth de grande taille réduit également les énergies de formation de l'alliage. L'effet cumulatif de la réduction de puissance quadruple dans la bande interdite par l'indium et le bismuth permet une grande flexibilité de cette énergie et de la contrainte, elle permet également à la sonde d'atteindre un courant faible et sombre. [8,9]

1.4 Structure cristalline

Les semi-conducteurs et les métaux possèdent une structure cristalline particulière, c'est-à-dire que les atomes sont groupés en réseaux régulièrement disposés dans l'espace. Ils sont obtenus, soit par tirage de monocristaux massifs, soit par croissance épitaxiale de couches minces et cristallisent dans la structure zinc blende ou wurtzite. Dans notre étude, c'est la structure zinc blende dans ces réseaux la distance α (Å) inter atomique étant faible, de l'ordre de quelques Å. [10]

La plupart des matériaux III-V prend sa structure sphalérite dite "Zinc Blende" présentée sur la figure I-1. Cette structure qui s'apparente à celle du diamant, est constituée de deux sous-réseaux cubique face centrée, l'un d'éléments III et l'autre d'éléments V, mais d'un domaine à l'autre cette structure cristalline tourne de 90° ce qui conduit à une rupture de symétrie du réseau du cristal et à une dégradation de la qualité électrique et optique du matériau. [11]

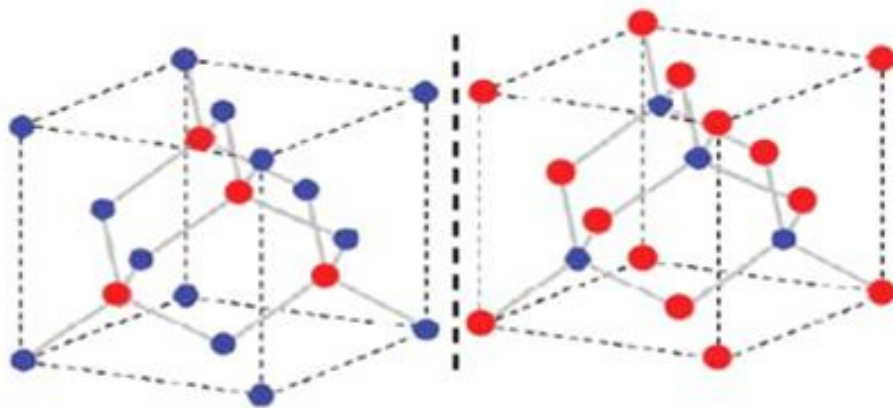


Figure 1.1 : Deux orientations possibles du cristal III-V. En bleu les atomes III et en rouge les atomes V. [12]

Les atomes du réseau sont à liaisons tétraédriques se décomposant en deux sous réseaux cubiques faces centrée décalés l'un par rapport l'autre par un quart de la diagonale principale d'une valeur de $a/4 (1, 1, 1)$, a étant le paramètre de maille c'est-à-dire la longueur de l'arête du cubes. [6]

A partir du réseau cristallin, on définit le réseau réciproque, qui est le système de Coordonnées (énergie- vecteur d'onde) dans lequel on représente les variations des fréquences de vibration du réseau cristallin ou de l'énergie des états électroniques en fonction du vecteur d'onde k r caractérisant la propagation de l'onde considérée (de nature vibrationnelle ou électronique) [13]

Le réseau réciproque associé à la structure de type zinc-blende est cubique centré. Sa maille élémentaire, qui correspond à la première zone de Brillouin des réseaux cfc à la forme d'un octaèdre tronqué par les six faces d'un cube [3]

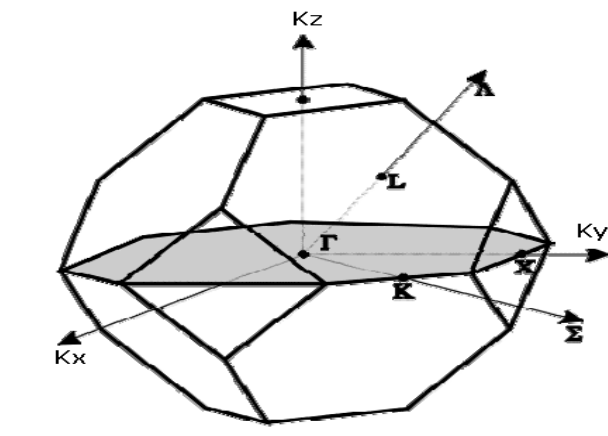


Figure1.2 : Première zone de Brillouin d'un réseau cubique à faces centrées [3]

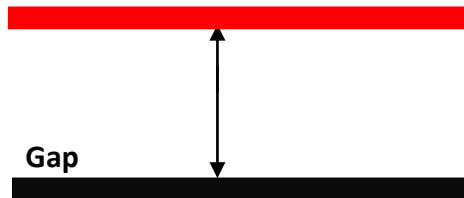
Avec :

- points X de coordonnées $(2p/a, 0, 0)$ sur les axes $\langle 100 \rangle$,
- points L de coordonnées $(p/a, p/a, p/a)$ sur les axes $\langle 111 \rangle$,
- points K de coordonnées $(0, 3p/2a, 3p/2a)$ sur les axes $\langle 011 \rangle$

1.5 Structure de bande

Les bandes d'énergies offertes aux électrons s'effectuent dans l'espace réciproque ou espace des vecteurs d'onde possibles pour les électrons en fonction de leur vecteur d'onde. On les représente donc dans l'espace réciproque et pour simplifier, dans les directions de plus hautes symétries de la première zone de Brillouin. Elles se décomposent en bandes de valence et bande de conduction, ce sont la bande valence la plus basse, la bande de conduction la plus haute, et la bande interdite qui les sépare qui déterminent principalement les propriétés de transport du semi-conducteur. [14]

Bande de conduction



Bande de valence

Figure 1.3 : Diagramme de bande d'énergie des matériaux semi-conducteur

La variation du gap en fonction de la température, on utilise la loi de Varshni :

$$E_g(T) = E_g(0) - \frac{\alpha T^2}{\beta + T} \quad (1.2)$$

α et β : paramètres semi empiriques de Varshni.

La variation du gap de composé en fonction de Composition x et Y peut être représentée par la loi classique de Vegard :

- Cas d un composé ternaire $A_xB_{1-x}C$:

$$E_g(x) = (1-X) * E_g(BC) + x * E_g(AC) - x * (1-X) * C \quad (1.3)$$

- Cas d un composé quaternaire $A_{1-x}B_xC_yD_{1-y}$:

$$E_g(x, y) = (1-X) * (1-y) E_g(AD) + (1-x) * y * E_g(AC) + x * (1-Y) * E_g(BD) + x * y * E_g(BC)$$

$$-x * (1-X) * (1-y) * C_{Ac-Bc} - y * (1-X) * (1-y) * C_{Ac-AD} - x * y * (1-X) * C_{AD-BD} \quad (1.4)$$

$$-x*(1-y)*y*CBc-BD$$

X, y : la concentration B et C

C: paramètre de bowing

	GaAs	InAs	InBi	GaBi
α (mev/K)	0.54	0.27	0.32	0.595
β (K)	204	93	170	140
E_g (ev)	1.42	0.414	0.2	1.45

Tableau 1.3 : L'énergie de gap et paramètres de Varshni pour des certains éléments

1.6 Gap direct et Gap indirect :

Dans la structure de semi-conducteur il existe 2 bandes d'énergies, une bande de valence et bande de conduction sont caractérisés par énergie E_g et un vecteur d'onde, on dite le semi-conducteur est à gap direct si le maximum de la bande de valence et la minimum de la bande de conduction à la même valeur de vecteur d'onde, si la valeur est différents on dite semi-conducteur est à gap indirect

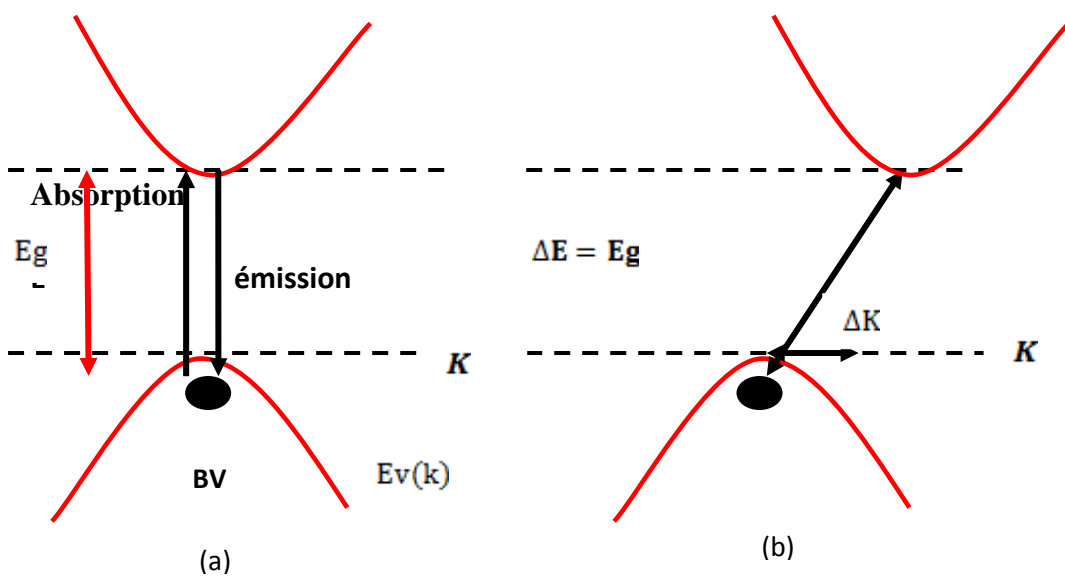


Figure 1.4 : a) gap direct b) gap indirect

1.7 Transition inter bandes

L'interaction d'un électron avec un photon se fait, comme toute interaction, avec conservation de l'énergie et du vecteur d'onde. Le vecteur d'onde du photon étant très inférieur à celui des électrons, les transitions optiques directes entre la bande de valence et la bande de conduction apparaissent verticales dans le diagramme de bande des électrons [15]

1.7.1 Absorption

Le phénomène d'absorption résulte de l'interaction entre les photons d'énergie $h\nu$ voisine d' E_g avec le semi-conducteur pour générer les paires électron-trou à travers les transitions électroniques. (16)



Figure 1.5 : Phénomène Absorption

1.7.2. Emission

il y a deux cas :

a. Emission spontanée (16)

Est un processus qui a lieu lorsqu'un électron trouvé dans la bande de conduction BC à cause d'une excitation (absorption de lumière ou injection des porteurs), au bout de certain temps va redescendre dans la bande de valence BV et se recombine avec un trou. Lors de la descente, l'électron libère une énergie E_g , sous forme d'un photon.

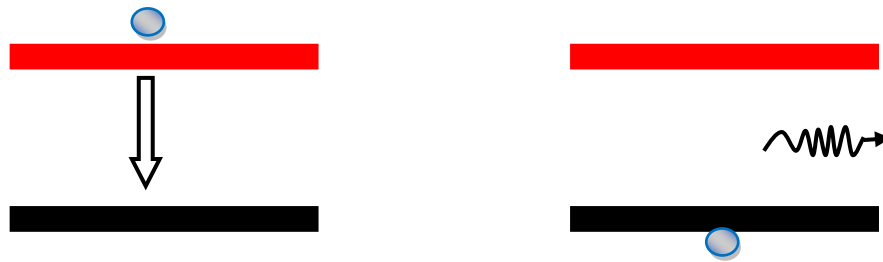


Figure 1.6 : phénomène émission spontanée

b. Emission stimulée [16]

Lorsque la bande de conduction BC est surpeuplée en électrons et un photon est incident sur le cristal. Ce dernier peut provoquer la désexcitation d'un électron situé dans BC et entraîner l'émission d'un autre photon de même phase et même énergie.



Figure 1.7 : phénomène émission stimulée

1.8 Les caractéristiques optiques des matériaux

1.8.1 Le coefficient d'absorption

Traduit la probabilité d'absorption d'un photon par unité de longueur. Il change selon le matériau.

$$\alpha = \frac{m_r^2}{n\omega} \sqrt{\hbar\omega - E_g} \quad (1.6)$$

Avec :

m_r : la masse réduite

ω : probabilité de transition par unité de temps .

1.8.2 L'indice de réfraction

Est grandeur caractérise la modification de la propagation des ondes lumineuses par leur interaction avec le milieu matériel dans lequel elles se propagent elle est dépendue du type de matériau utilisé c'est l'une des notions importantes de l'optique

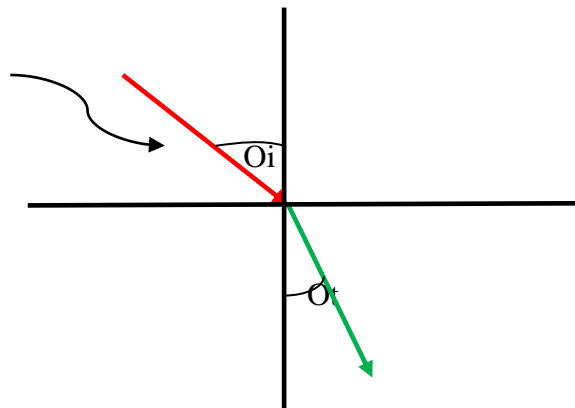


Figure 1.8 : schéma qui représente la réfraction

$$n = \frac{c}{v} \quad (1.7)$$

c : la vitesse de la lumière du vide.

v : La vitesse de propagation.

1.9 Coefficients élastiques

L'élasticité des semi-conducteurs c'est la réponse du matériau aux sollicitations appliquées, ces sollicitations peuvent provoquées des déformations globales du réseau cristallin .la déformation est proportionnelle à la contrainte. Les forces sont décrites par des tenseurs ou tenseurs des contraintes.

Pour les matériaux qui eux ont structure cristalline symétrie cubique, le tenseur des constants élastiques de la forme : [2]

$$C_{(eff)} = \begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{11} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{12} & C_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} \end{pmatrix}$$

	GaAs	InAs	InBi	GaBi
C11(Gpa)	1221	832.9	684.7	1192
C12(Gpa)	566	452.6	373.7	599

Tableau 1.4 : Constantes élastiques C_{11} et C_{12} pour certains éléments

1.10 Coefficients de dilatation thermique

Tout matériau soumis à un changement de température se déforme : c'est le phénomène de la dilatation thermique. Il convient d'en tenir compte lorsque l'on étudie les propriétés des semi-conducteurs à des températures différentes mais également lors de la croissance du matériau car celle-ci se fait à haute température. Ainsi une couche hétéro épitaxie complètement relaxée à la température de croissance peut être contrainte à la température ambiante. Les coefficients de dilatation thermique permettent d'évaluer la déformation de la maille cristalline en fonction de la variation de température la masse effective. [2]

1.11 Masses effectives des électrons et des trous

La masse effective est une notion pour l'étude du transport des électrons Cette masse effective peut-être positive ou négative, supérieure ou inférieure à la masse réelle de l'électron. L'électron peut être comme une particule libre, et sa masse m_0 est remplacée par une masse effective m_n^* : [2]

$$m_n^* = \hbar^2 \left(\frac{d^2 E_n}{dK^2} \right)^{-1} (1.8)$$

Et dans le cas des bandes anisotropies les masses effectives des trous lourds et des trous légers dans la direction [18] sont données par :

Pour les trous lourds :

$$m_{hh}^{100} = \frac{m_0}{y_1 - y_2} \quad (1.9)$$

Pour les trous légers :

$$m_{lh}^{100} = \frac{m_0}{y_1 - 2y_2} \quad (1.10)$$

Dans le cas d'un semi-conducteur à gap direct la masse effective est isotrope. Dans le cas d'un semi-conducteur à gap indirect les masses effectives des électrons et des trous sont respectivement La masse effective contient l'effet global du potentiel cristallin sur l'électron montre que la masse effective est inversement proportionnelle à la dérivée seconde de dispersion $E(k)$, c'est-à-dire à la courbure des bandes d'énergie dans l'espace des k .

	GaAs	InAs	InBi	GaBi
Masse effective des électrons : $m_e(m_0)$	0.0632	0.0213	0.0135	0.0390
Masse effective des trous lourds : $m_{hh}(m_0)$	0.5	0.517	0.2631	0.2500
Masse effective des trous légers : $m_{lh}(m_0)$	0.088	0.024	0.0152	0.0438

Tableau 1.5 : la masse effective pour certains éléments

1.12 Hétéro structures à Puits quantique

1.12.1 Introduction

Le développement actuel a aidé de réaliser des structures à puits quantiques qui découlent des hétéro structures utilisées en optoélectroniques. Les recombinaisons radiatives dans un dispositif optoélectronique a semi-conducteur de la région active.

Un hétéro structure formée d'un matériau diffère d'au moins une des deux barrières qui l'entourent.

Il est nécessaire de placer la région active entre deux matériaux de bande interdite très élevée et faible indice de réfraction, avec une discontinuité des énergies de gap qui crée un piège de potentiel pour les porteurs de charges, Dans cette région les confine tandis que la différence d'indice y confine les photons.

1.12.2 Définition Puits quantique

Un puits quantique est obtenu en faisant croître une couche d'un matériau semi-conducteur entre deux couches d'un autre matériau semi-conducteur, par exemple un matériau de petit gap entouré de chaque côté par un matériau de plus grand gap. Dans ce cas, les électrons voient un puits de potentiel carré avec une barrière de hauteur finie. On distingue trois types de puits quantiques.

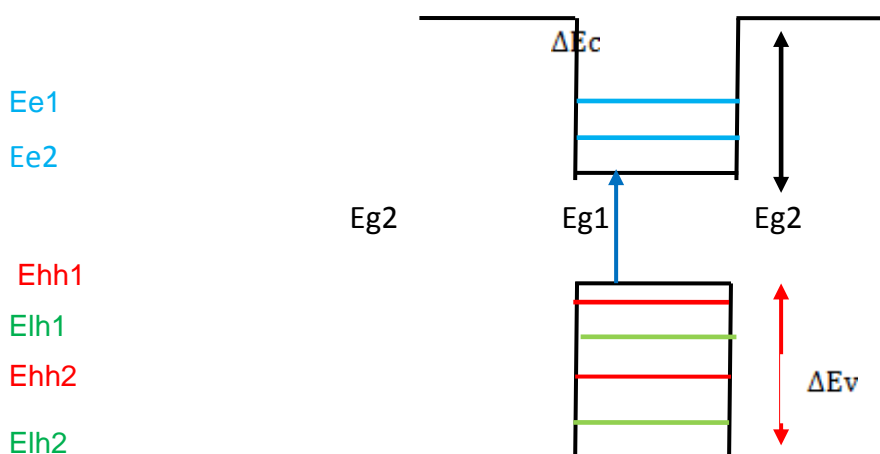


Figure 1.9 : illustration d'un puits quantique

Avec :

E_{en} : le nième niveau d'énergie des électrons

E_{hhn} : le nième niveau d'énergie des trous lourds

E_{lhn} : le nième niveau d'énergie des trous légers

1.12.3 Les types de puits quantique

La détermination des niveaux d'énergie dans les structures à puits quantiques suppose la connaissance préalable de la discontinuité entre les bandes des deux matériaux constituant la structure. Ainsi, l'alignement des bandes reste un paramètre ajustable lorsque les transitions entre les différents niveaux d'énergie sont connues. La différence dans les types définis par la position relative des bandes des semi-conducteurs SC1 et SC2.

a. Hétéro structures type I

Les extrema des bandes de valence et de conduction sont situés dans la même région de l'espace. Si des porteurs sont injectés dans la structure, ces porteurs sont confinés dans le puits de potentiel que constituent ces extrema des bandes, les électrons et les trous sont piégés dans le même matériau, leurs recombinaisons sont importantes.

L'énergie du photon dépend des énergies de confinement des porteurs et du gap du matériau du puits [17]

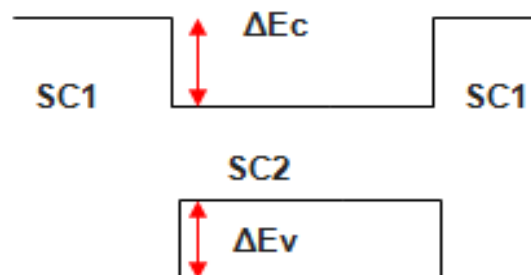


Figure 1.10 : Hétéro structures type I

b. Hétéro structures type II

Les extrema des bandes de valence et de conduction sont spatialement séparés, L'alignement de bande appelé type II confine les électrons dans le puits et les trous dans la barrière de potentiel. Dans ce cas, l'énergie du photon est fonction des énergies de confinements des porteurs mais aussi des gaps des deux matériaux formant l'hétéro structurent [17]

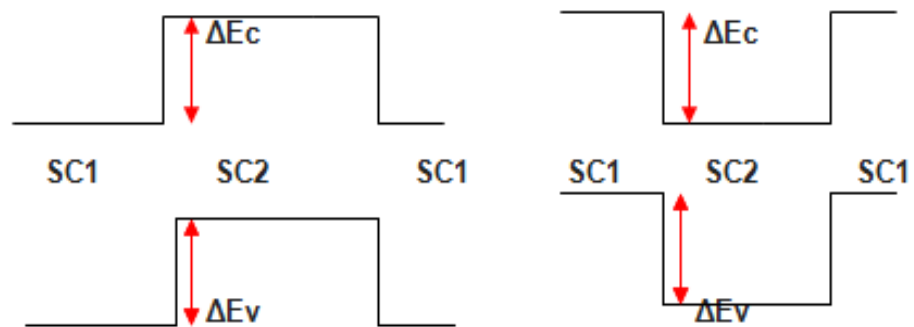


Figure 1.11 : Hétéro structures type II

c. Hétéro structures type III

Elle peut engendrer un caractère semi métallique, c'est un cas particulier du type I. Elle offre une grande souplesse dans le choix des longueurs 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 épaisseurs des couches [17]

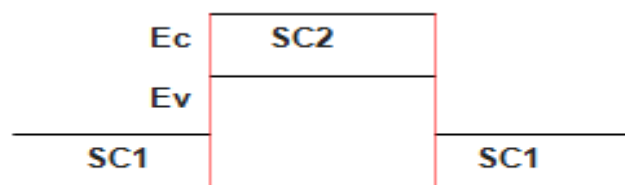
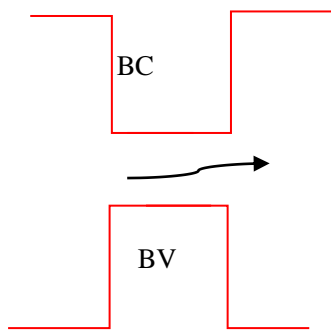
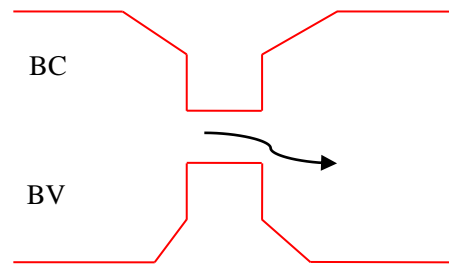


Figure 1.12 : Hétéro structures type III

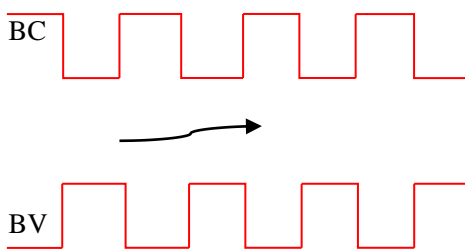
d. Quelques exemple de puits quantique



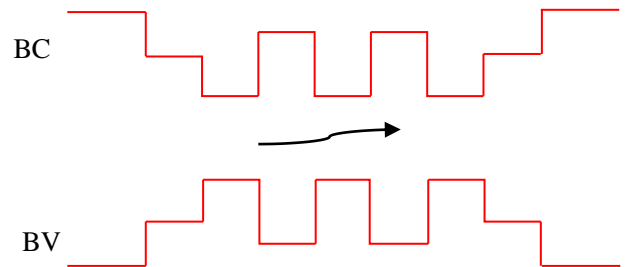
(a) Simple puits quantique
Graduelle puis abrupte de la barrière



(b) Simple puits quantique a variation mixte



(c) Multi puits quantique



(d) Multi puits quantique modifie

Les figures 1.13 : (a),(b)(c) et (b) ils données différents types de puits quantiques à variations complexes des potentiels de barrières et de puits, ces hétérostructures sont très importantes dans les composants électroniques et optoélectroniques [18]

1.12.4 Les états énergétiques dans un puits quantique

Dans les puits quantique l'étude de la fonction d'onde et l'énergie est celle de l'équation de Schrödinger, qui a montré en 1926 par équation au dérivés partielles du second ordre Il donne par :

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2\varphi(x)}{dx^2} + V(x)\varphi(x) = E\varphi(x) \quad (1.11)$$

Avec :

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

h : Constante de Planck

m^* : La masse de la particule.

φ : La fonction d'onde.

$V(x)$: Fonction décrivant le potentiel pour chaque valeur de x .

E : L'énergie de quantification.

a) Puits de profondeur infinie

En première les électrons son confinées dans le puits, le potentiel s'écrit alors :

Pour $Z < 0$ et $Z > L$:

$$V(Z) = \infty$$

Pour $0 < Z < L$:

$$V(Z) = 0$$

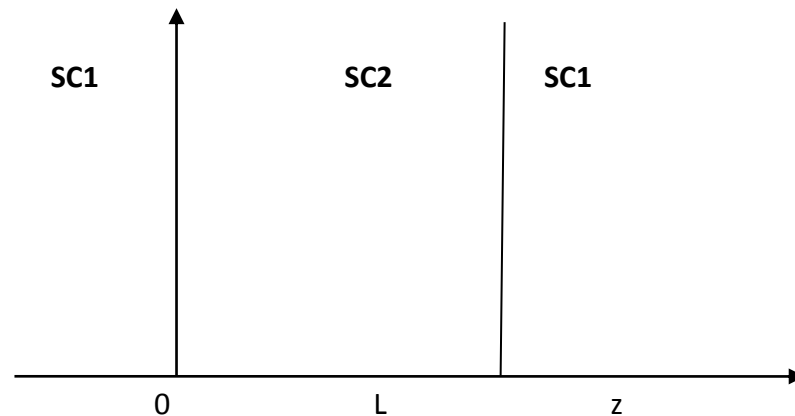


Figure 1.14 : Puits de potentiel infiniment profond

La particule ne peut pas se trouver dans la région où V est infini, car elle aurait alors une énergie infinie, et pour que l'équation de Schrödinger soit vérifiée à l'extérieur du puits (où $V = \infty$), le produit $V(z) \cdot \varphi(z)$ doit être nul et cela n'est possible que pour $\varphi(z) = 0$.

Pour ($0 < z < L$) :

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2 \varphi(z)}{dz^2} = E \varphi(z) \quad (1.12)$$

Les solutions de cette équation différentielle sont de la forme :

$$\varphi(z) = \sin kz \quad (1.13)$$

$$\varphi(z) = \cos kz \quad (1.14)$$

Avec : $k = \frac{\sqrt{2m^*E}}{\hbar}$

La solution générale :

$$\varphi(z) = A \sin kz + B \cos kz \quad (1.15)$$

Et pour déterminer A et B, on introduit les conditions aux limites (0 et L)

- Première barrière :
Au point 0 coté V infini

$$\varphi(0) = 0 \quad (1.16)$$

Au point 0 coté V nul

$$\varphi(0) = A \sin 0 + B \cos 0 = B \quad (1.17)$$

Donc par les équations (1.16) et (1.17) on obtient

$$B = 0$$

- Deuxième barrière :

Au point L coté V infini

$$\varphi(L) = 0 \quad (1.18)$$

Au point L coté V nul

$$\varphi(L) = A \sin kL + B \cos kL \quad (1.19)$$

Et comme $B=0$ on obtient :

$$\varphi(L) = A \sin kL \quad (1.20)$$

Donc on aura :

$$A \sin kL = 0$$

Si on suppose $A = 0$, la fonction d'onde sera nul sur tout l'espace z , ce qui n'est pas juste avec la présence d'une particule, donc la solution est $\sin kL = 0$

$$\sin kL = 0 \Rightarrow k = k_n = \frac{n\pi}{L} \quad n = 1, 2, \dots, \infty$$

Et comme $k = \sqrt{2mE}/\hbar$ on aura :

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \frac{\hbar^2 n^2 \pi^2}{2mL^2} ; n = 1, 2, \dots, \infty \quad (1.21)$$

b) puits quantique de profondeur finie

Le potentiel carré délimite les trois régions suivantes :

$$\begin{cases} \text{Région 1 pour } z < 0, & V(z) = V_0 \\ \text{Région 2 pour } 0 < z < L_1, & V(z) = 0 \\ \text{Région 3 pour } z > L_1, & V(z) = V_0 \end{cases} \quad (1.22)$$

Les équations de Schrödinger relatives aux trois régions et les solutions correspondantes $\Psi_1(z), \Psi_2(z), \Psi_3(z)$ sont :

$$\begin{cases} (d^2\Psi_1/dz^2) - K_2^2\Psi_1 = 0 \\ (d^2\Psi_2/dz^2) - K_1^2\Psi_2 = 0 \\ (d^2\Psi_3/dz^2) - K_2^2\Psi_3 = 0 \end{cases} \quad (1.23)$$

Avec :

$$\begin{cases} K_1 = \frac{\sqrt{2m_1^*E}}{\hbar} \\ K_2 = \frac{\sqrt{2m_2^*(V_0-E)}}{\hbar} \end{cases}$$

Où :

m_1^* : Est la masse effective de semi-conducteur SC₁ dans la région 2.

m_2^* : Est la masse effective de semi-conducteur SC₂ dans les deux régions 1 et 3.

Les solutions des équations de Schrödinger dans les trois régions sont :

$$\begin{aligned} \Psi_1 &= A_1 e^{K_2 z} + B_1 e^{-K_2 z} \\ \Psi_2 &= A_2 e^{jK_1 z} + B_2 e^{-jK_1 z} \\ \Psi_3 &= A_3 e^{K_2(z-L_1)} + B_3 e^{-K_2(z-L_1)} \end{aligned} \quad (1.24)$$

La condition aux limites $\begin{cases} \Psi_1(z \rightarrow -\infty) = 0 \Rightarrow B_1 = 0 \\ \Psi_3(z \rightarrow +\infty) = 0 \Rightarrow A_3 = 0 \end{cases}$

$$\begin{cases} \Psi_1 = A_1 e^{K_2 z} \\ \Psi_2 = A_2 e^{jK_1 z} + B_2 e^{-jK_1 z} \\ \Psi_3 = B_3 e^{(-K_2(z-L_1))} \end{cases} \quad (1.25)$$

Les constantes d'intégration A_1, A_2, B_2, B_3 sont déterminées par les conditions aux limites. Ces conditions sont les continuités de la fonction d'onde Ψ et du courant de Probabilités $(1/m) \cdot d\Psi(z)/dz$ aux interfaces $z=0$ et $z=L_1$.

En $z=0$

- $\Psi_1(0) = \Psi_2(0)$ (1.27)
- $(1/m_1^*) \cdot d\Psi_1(0)/dz = (1/m_2^*) \cdot d\Psi_2(0)/dz$

On obtient

$$\begin{cases} A_1 - A_2 - B_2 = 0 \\ (K_2/m_1^*) \cdot A_1 - j(K_1/m_2^*) \cdot A_2 + j(K_1/m_2^*) \cdot B_2 = 0 \end{cases} \quad (1.26)$$

En $z=L_1$

- $\Psi_2(L_1) = \Psi_3(L_1)$
- $(1/m_2^*) \cdot d\Psi_2(L_1)/dz = (1/m_1^*) \cdot d\Psi_3(L_1)/dz$

(1.27)

On obtient

$$\begin{cases} A_2 e^{jK_1 L_1} + B_2 e^{-K_1 L_1} - B_3 = 0 \\ j(K_1/m_2^*) \cdot A_2 e^{jK_1 L_1} - j(K_1/m_2^*) \cdot B_2 e^{-jK_1 L_1} + (K_2/m_1^*) \cdot B_3 = 0 \end{cases} \quad (1.28)$$

D'où le système d'équations

$$\begin{cases} A_1 - A_2 - B_2 = 0 \\ (K_2/m_1^*) \cdot A_1 - j(K_1/m_2^*) \cdot A_2 + j(K_1/m_2^*) \cdot B_2 = 0 \\ A_2 e^{jK_1 L_1} + B_2 e^{-K_1 L_1} - B_3 = 0 \\ j(K_1/m_2^*) \cdot A_2 e^{jK_1 L_1} - j(K_1/m_2^*) \cdot B_2 e^{-jK_1 L_1} + (K_2/m_1^*) \cdot B_3 = 0 \end{cases} \quad (1.29)$$

Ce système admet des solutions non nulles, si son déterminant est nul

$$\begin{vmatrix} 1 & -1 & 0 & -1 \\ K_2/m_1^* & -j(K_1/m_2^*) & 0 & j(K_1/m_2^*) \\ 0 & e^{jK_1 L_1} & -1 & e^{-K_1 L_1} \\ 0 & j(K_1/m_2^*) e^{jK_1 L_1} & K_2/m_1^* & -j(K_1/m_2^*) e^{-jK_1 L_1} \end{vmatrix} = 0 \quad (1.30)$$

D'où l'équation :

$$\sqrt{2m_2 E_n / \hbar^2} \cdot L_1 = n \cdot \pi + 2 \text{Arctan}[\sqrt{m_2(V_0 - E_n) / m_1 E_n}] \quad (1.31)$$

Les valeurs propres E_n correspondantes à chaque entier n sont déterminées à partir de l'équation (1.35), ainsi appelée équation aux valeurs propres

1.12.5 Paramètre de maille

Le paramètre de maille se définit comme étant la distance séparant deux mailles consécutives. Lors de la réalisation d'alliages avec des semi-conducteurs différents, le paramètre de maille de l'alliage peut être considéré comme évoluant linéairement en fonction de la composition des différents binaire [18].

Dans une structure quaternaire $In_x(1-x)As_{(1-y)}Bi_y$, la paramètre de maille donnée par la lois de Végard :

$$a_{InGa(1-x)As(1-y)Bi_y} = x(1-y) \cdot a_{InAs} + x \cdot y \cdot a_{InBi} + (1-x) \cdot (1-y) \cdot a_{GaAs} + (1-x) \cdot y \cdot a_{GaBi} \quad (1.32)$$

Avec :

x et y : la concentration du **In** et **Bi**

	α InAs	α InBi	α GaAs	α GaBi
$\alpha(A^\circ)$	6.0583	6.686	5.65325	6.324

Tableau1.3 : les paramètres de maille.

1.12.6 Effet de la contrainte

Il faut réaliser plusieurs conditions pour obtenir l'effet quantique :

1_ Pour les états d'énergie du spectre discret nés de la quantification, il faut que :

$$E_{n+1} - E_n > \frac{\hbar}{\tau} \quad (1.33)$$

Avec : τ est la constante de temps prenant en compte toutes les diffusions.

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

2_ L'épaisseur de la couche active qui est apparait dans le phénomène doit être comparable

à la longueur d'onde de " De Broglie " :

$$\lambda = \frac{2 \cdot \pi \cdot \hbar}{\sqrt{2 \cdot m_e \cdot E_f}} \quad (1.34)$$

Avec : m_e : est la masse effective de l'électron.

E_F : est l'énergie de Fermi.

3_ l'écart soit plus grand que la distribution de fermi due à la Température, d'où la condition :

$$E_{n+1} - E_n > KT \quad (1.35)$$

Avec : K : la constante de Boltzmann

T : la température absolue

à cause du la différents de paramètre de maille de la couche et le substrat, la couche peut être déformée au de la d'une certaine épaisseur

Les tenseurs de déformations ϵ_{ij} , de contraintes σ_{ij} et élastique C_{ij} sont reliés par la loi de Hooke $\sigma_{ij} = C_{ij} \epsilon_{ij}$ [19]

Les différentes contraintes induites par le désaccord de maille sont :

- Le désaccord de maille entre la couche et le substrat est :

$$\epsilon = \frac{a - a_0}{a} \quad (1.36)$$

Avec : a_s est le paramètre de maille du substrat et a_e est celui de la couche épitaxie.

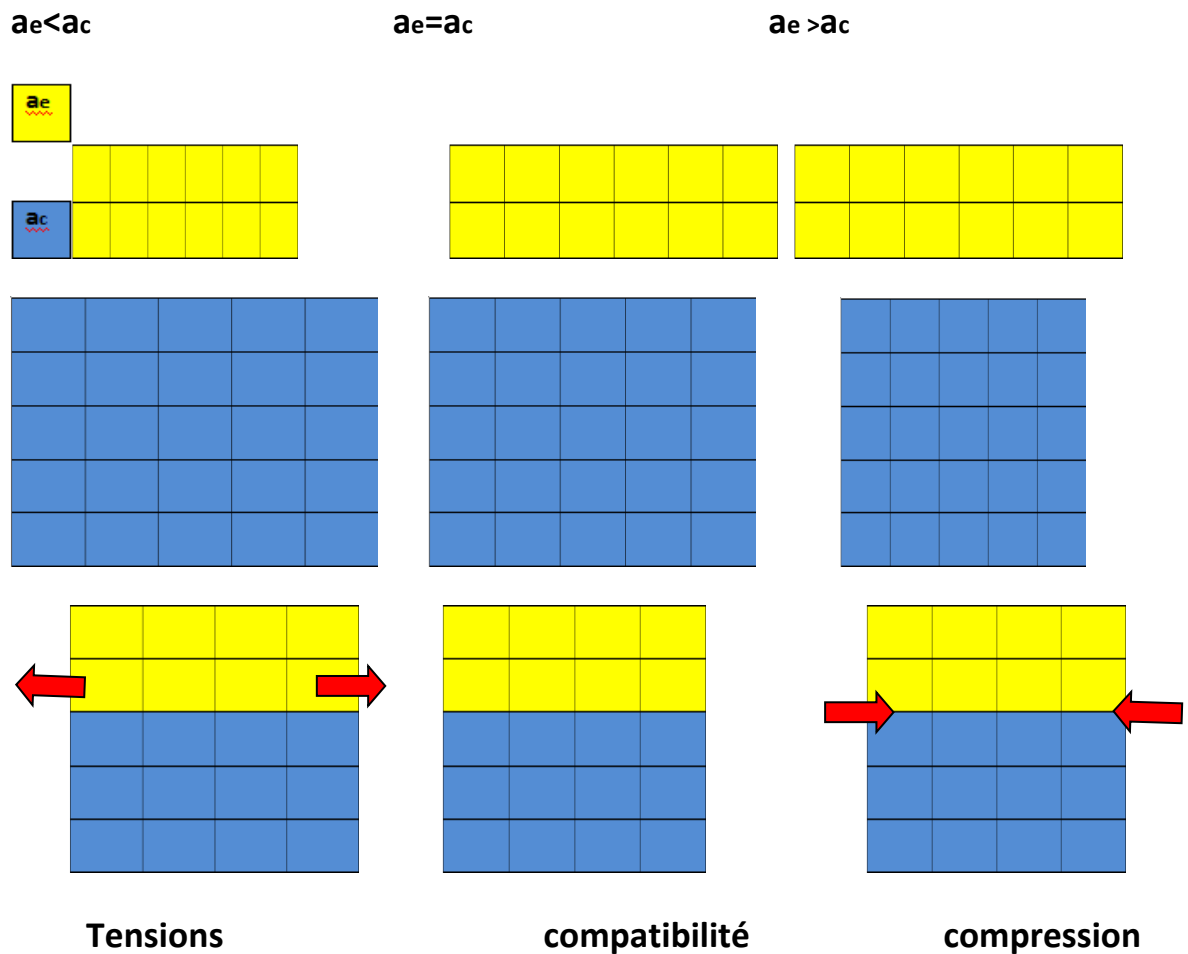


Figure 1.15 : Illustration des types de contraintes.

1.12.7 Epaisseur critique h_c

L'épaisseur critique h_c d'une couche mince (puits quantique) est l'épaisseur en dessous de laquelle la couche est stable. Au-dessus de h_c , la couche subit un relâchement de la contrainte, ce qui entraîne une relaxation. Cette épaisseur critique dépend des propriétés mécaniques des matériaux (coefficients élastiques C_{ij}) [2]

Epaisseur critique calculée par People et Bean [20,21]

$$h_c(x) = \left(\frac{\alpha}{32 \pi \varepsilon \sqrt{2}} \right) \left(\frac{1-T_0}{1+T_0} \right) \left[\text{Ln} \left(\frac{hc\sqrt{2}}{\alpha} \right) \right] \quad (1.36)$$

Avec

α : paramètre de maille du puits quantique coefficient

La déformation dans le plan de croissance :

$$\varepsilon = \left(\frac{\alpha_0}{\alpha} - 1 \right) \quad (1.37)$$

T_0 est le coefficient de Poisson : ε

$$T_0 = \frac{C_{12}(x,y)}{C_{11}(x,y) + C_{12}(x,y)} \quad (1.38)$$

Epaisseur critique calculée par Matthews et Blakeslee

$$hc(x,y) = \left(\frac{\alpha}{\pi\varepsilon\sqrt{2}} \right) \left(\frac{1-0.25T_0}{1+T_0} \right) \left[\text{Ln} \left(\frac{hc\sqrt{2}}{\alpha(x,y)} \right) + 1 \right] \quad (1.39)$$

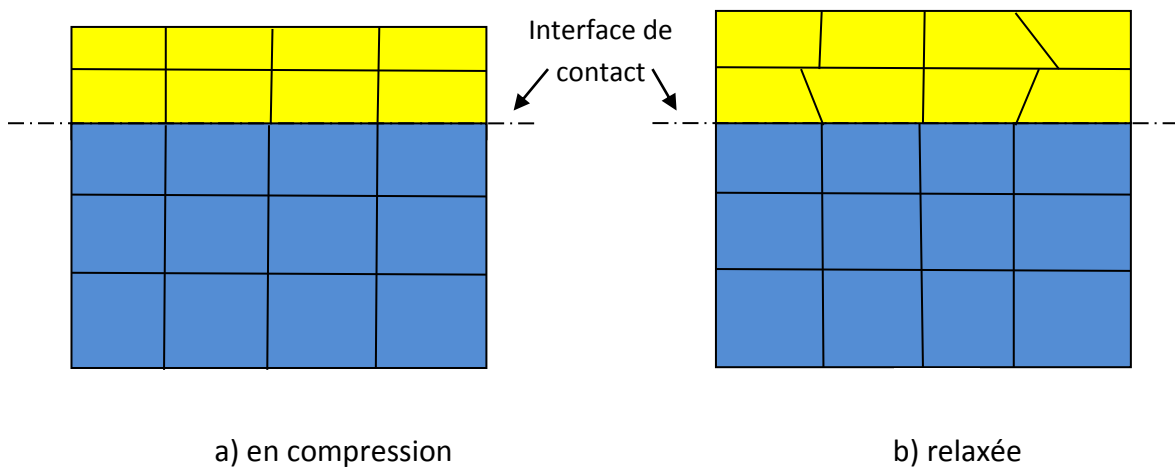


Figure 1.16 : (a.b). Illustration d'une couche contrainte

1.12.8 Effet de la contrainte sur le gap

La déformation physique du cristal sous l'effet des perturbations extérieures comme la pression conduit à une distorsion des emplacements atomiques, ce qui affecte à son tour leurs propriétés électroniques notamment le gap d'énergie [22]

Pour l'étude de l'effet de la contrainte sur la structure de bande nous avons utilisé le modèle de Van et Walle et utilisé le formalisme de Krijin [23]. Les deux composantes parallèle et perpendiculaire du tenseur de la déformation peuvent être définies de la manière suivante

La contrainte résiduelle dans le plan et hors plan par

$$\varepsilon_{\text{dans le plan}} = \frac{\alpha_{||} - \alpha_0}{\alpha_0} \quad (1.40)$$

$\alpha_{||}$ et α_0 sont les valeurs du paramètre de maille dans le plan et hors du plan de la couche non relaxée

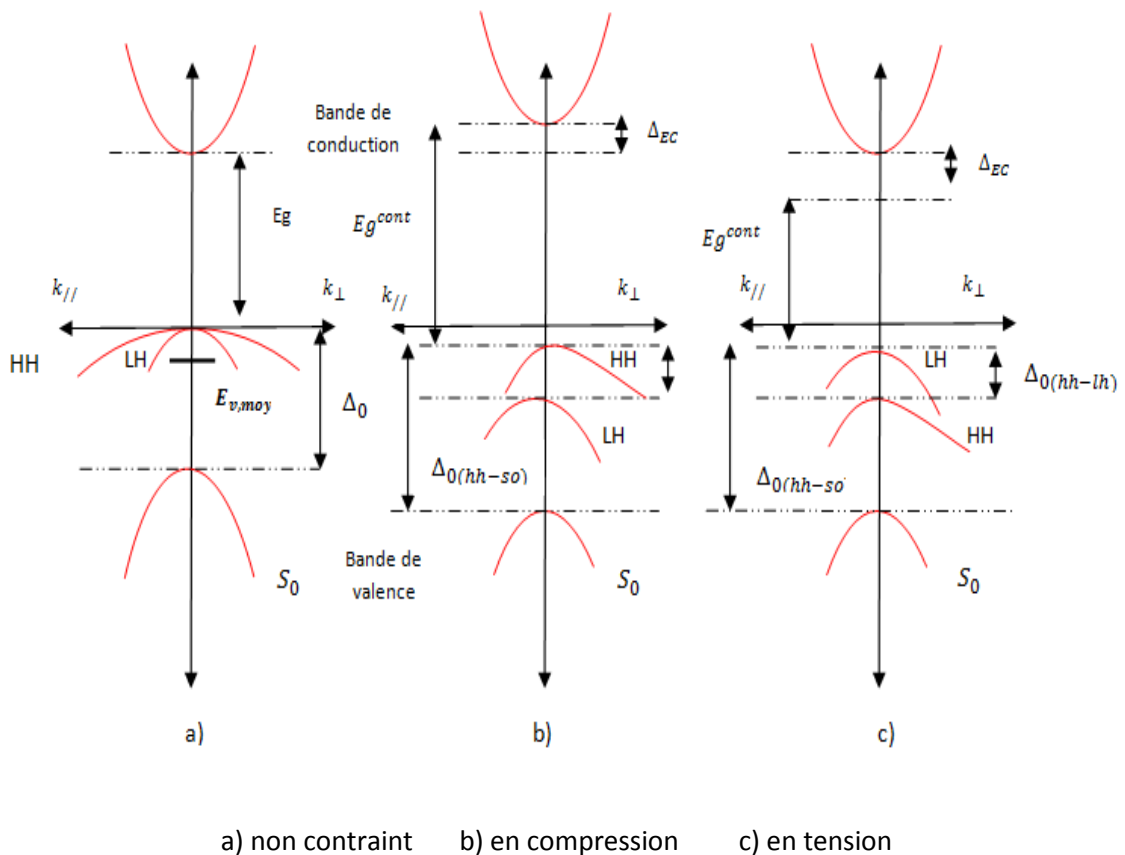


Figure 1.17 : Structure de bande d'un semi-conducteur à gap direct.

Les 3 figure (a),(b)et (c) présente la structure de bandes d'un semi-conducteur à Gap direct dans les trois cas possibles, non contraint, contraint en compression et finalement contraint en tension

Pour une structure totalement contrainte :

$$\varepsilon_{\parallel} = a_{sub}$$

$$\varepsilon_{\perp} = -2 \times \frac{C_{12}}{C_{11}} \quad (1.41)$$

Dans le cas de l'absence de contrainte, au centre de la zone de Brillouin les bandes trous légers lourds ils sont isotropes et dégénérées, et la bande de trous spin-splittée est située à une énergie Δ_0 en dessous de ces deux bandes. Le centre de gravité de la bande de valence d'énergie moyenne $E_{v, moy}$ se trouve par conséquent à $\Delta_0/3$ au-dessous du haut de la bande de valence en $k=0$.

$$E_{v, moy} = \frac{E_{hh} + E_{lh} + \Delta_0}{3} \quad (1.42)$$

Avec :

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

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

Δ_0 : Energie de décalage des bandes des trous spin orbite.

L'effet de la contrainte sur les bandes de valence et de conduction peut être décomposé en deux parties :

La composante hydrostatique, liée à la déformation selon l'axe de croissance, provoque un décalage du centre de gravité de la bande de valence ainsi que le centre de gravité de la bande de conduction. La contrainte de cisaillement, qui lève la dégénérescence des états énergie qu'es des trous lourds et des trous légers en $k = 0$, en $K=0$ Les décalages énergétiques des centres de gravité de la bande de valence et de la bande de conduction induits par la contrainte hydrostatique, varient

proportionnellement à la contrainte [19] le modèle de Pikus et Bir prédit deux nouvelles énergies de bande interdite associées aux trous légers et lourds:

$$\Delta E_{vmoy}^{hyd} = \alpha_v(2\varepsilon_{\parallel} + \varepsilon_{\perp}) \quad (1.43)$$

$$\Delta E_c^{hyd} = \alpha_c(2\varepsilon_{\parallel} + \varepsilon_{\perp}) \quad (1.44)$$

Avec : a_c : le potentiel hydrostatiques de déformation pour la bande de conduction

a_v : le potentiel hydrostatique de déformation pour la bande de valence
respectivement

Les décalages énergétiques induits par la contrainte de cisaillement dans chacune des bandes constituant la bande de valence sont les suivants, dans le cas d'une croissance sur substrat [19] :

$$\Delta E_{hh}^{cisa} = -\frac{1}{2} \times \delta E^{cisa} \quad (1.45)$$

$$\Delta E_{ih}^{cisa} = -\frac{1}{2} \Delta_0 + \frac{1}{4} \times \delta E^{cisa} + \frac{1}{2} \sqrt{\Delta_0 \delta E^{cisa} + \frac{9}{4} (\delta E^{cisa})^2 + \Delta_0^2} \quad (1.46)$$

$$\Delta E_{ih}^{cisa} = -\frac{1}{2} \Delta_0 + \frac{1}{4} \times \delta E^{cisa} - \frac{1}{2} \sqrt{\Delta_0 \delta E^{cisa} + \frac{9}{4} (\delta E^{cisa})^2 + \Delta_0^2} \quad (1.47)$$

Avec b : est le potentiel de déformation tétragonale

$$\text{Et : } \delta E^{cisa,100} = 2.b. (\varepsilon_{\parallel} + \varepsilon_{\perp}) \quad (1.48)$$

On peut définir l'énergie du haut de la bande de valence et l'énergie du bas de la bande de conduction.

E_v : l'énergie du haut de la bande de valence est :

$$E_v = E_{v,moy} + \frac{\Delta_0}{3} + \Delta E_{v,moy}^{hyd} + \max(\Delta E_{hh}^{cisa}, \Delta E_{ih}^{cisa}) \quad (1.49)$$

E_c : l'énergie du bas de la bande de conduction est :

$$E_c = E_{v,moy} + \frac{\Delta_0}{3} + E_g + \Delta E_c^{hyd} \quad (1.50)$$

On peut déterminer l'équation de l'énergie de bande interdite contraint E_{gcont} :

$$E_g^{cont} = E_c + E_v = E_g + \Delta E_c^{hyd} - \Delta E_{v,moy}^{hyd} - \max(\Delta E_{hh}^{cisa}, \Delta E_{ih}^{cisa}) \quad (1.51)$$

Pour une couche soumise à une contrainte en compression la bande des trous lourds est au-dessus de la bande des trous légers :

$$\max(\Delta E_{hh}^{cisa}, \Delta E_{ih}^{cisa}) = \Delta E_{hh}^{cisa} \quad (1.52)$$

Dans le cas d'une couche soumise à une contrainte en tension la bande des trous lourds est au-dessous de la bande des trous légers:

$$\max(\Delta E_{hh}^{cisa}, \Delta E_{ih}^{cisa}) = \Delta E_{ih}^{cisa} \quad (1.53)$$

Dance devient pour une couche en compression :

$$E_g^{cont,com} = E_g + \Delta E_c^{hyd} - \Delta E_{v,moy}^{hyd} - \Delta E_{hh}^{cisa} \quad (1.54)$$

Et pour une couche en tension :

$$E_g^{cont,com} = E_g + \Delta E_c^{hyd} - \Delta E_{v,moy}^{hyd} - \Delta E_{ih}^{cisa} \quad (1.55)$$

1.13 Conclusion

Dans ce chapitre nous avons illustré les notions générales sur les matériaux III-V, les propriétés structurales, les propriétés optiques et mécaniques. Ensuite nous avons présenté les puits quantiques, leurs types, l'effet de la contrainte

Donc les matériaux III-V, sont la base d'optoélectronique et jouent un grand rôle dans le développement de ce domaine, dans le deuxième chapitre nous allons discuter nos résultats

Chapitre 2 : RESULTATS ET DISCUSSIONS

2.1 Introduction

Dans ce chapitre, nous allons représenter la simulation la structure quaternaire d'unpuits quantique à base de InGaAsBi/GaAs. En utilisant un logiciel de simulation Matlab pour présenter et interpréter les résultats obtenus.

Des simulations on va aborder les différents paramètres comme paramètres et désaccorde de maille, le gap et d'étudier l'effet de la contrainte crée entre le substrat et la couche active, l'épaisseur critique, la longueur d'onde d'émission de cette structure

2.2 Paramètre de maille

La figure (2.1) et (2.2) est représenté la variation du paramètre de maille en fonction des concentrations de l'Indium (In) et de bismuth (Bi)

Le paramètre de maille croît lorsque les concentrations de du Bi s'accroissent, et décroît lorsque les concentrations de du (In) s'accroissent, la valeur de paramètre de maille $a = 0.565$ nm pour les points de concentration du $\text{In}=0$ et $\text{Bi}=0$ (en théorie pour $\text{In}=0$ et $\text{Bi}=0$ on a $\alpha_{\text{InGaAsBi}} = \alpha_{\text{GaAs}} = 0.5653$ nm)

Pour calculer le paramètre de maille on utilise la loi de Vegard (loi empiriques).

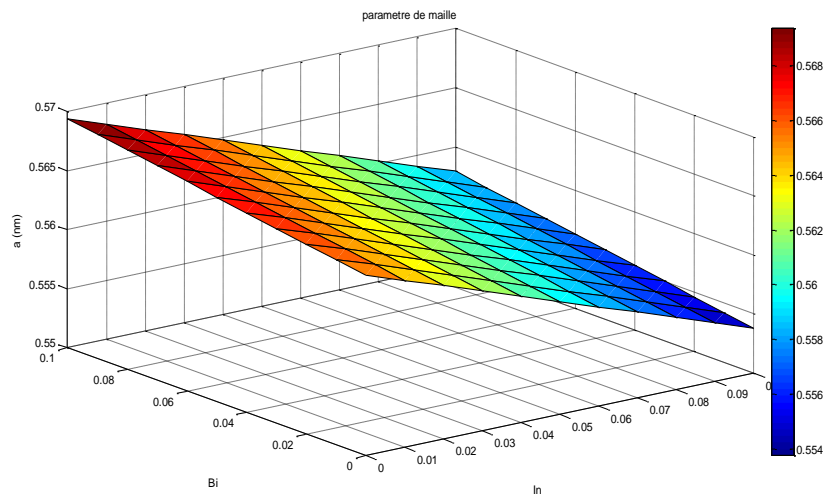


Figure 2.1: la variation du paramètre de maille en fonction de la concentration du (In) et (Bi)

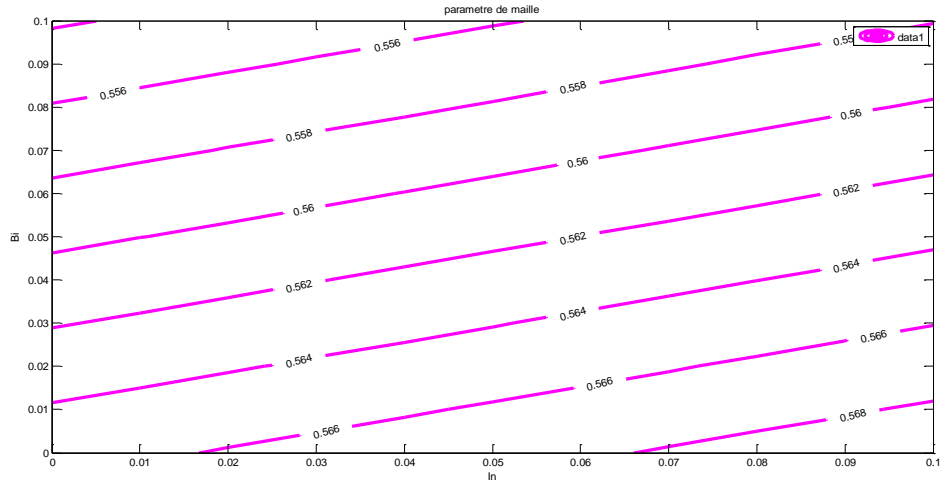


Figure 2.2 : la variation du paramètre de maille en fonction de la concentration du (In) et (Bi)

2.3. Désaccord de maille

La figure (2.3) et (2.4) est représentés la variation de désaccord de maille (e_{xx} et e_{zz}) de la structure InGaAsBi/GaAs en fonction des concentrations de l'In et du Bi.

Le désaccord de maille $e_{xx}=0$ au point (In=0, Bi=0). Quel que soit la variation de la concentration du In et du Bi La valeurs du désaccord de maille (e_{zz}): négatives que indiquent une contrainte compressive indiquent une contrainte compressive.

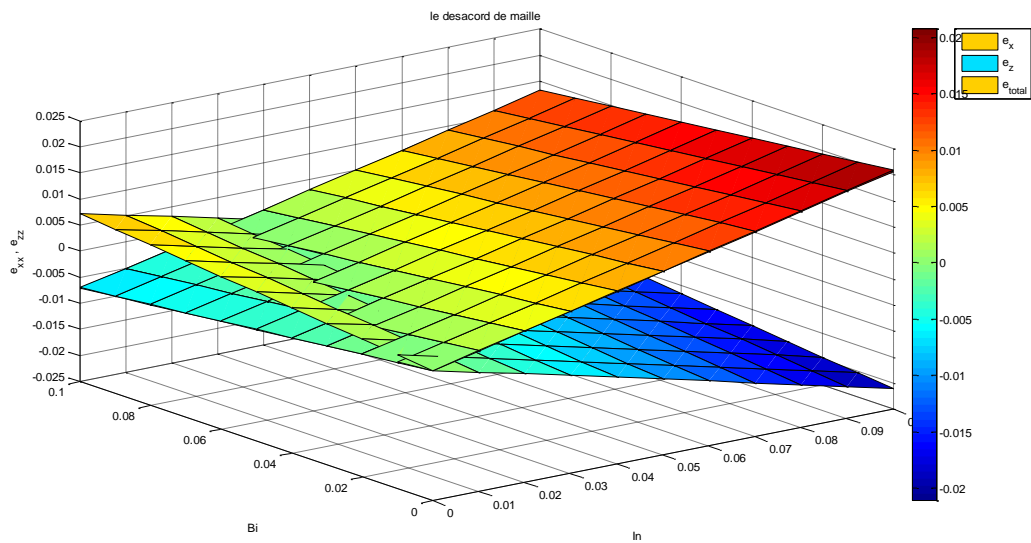


Figure 2.3 :la variation de désaccord de maille (e_{xx} et e_{zz}) en fonction des concentrations de l'In et du Bi

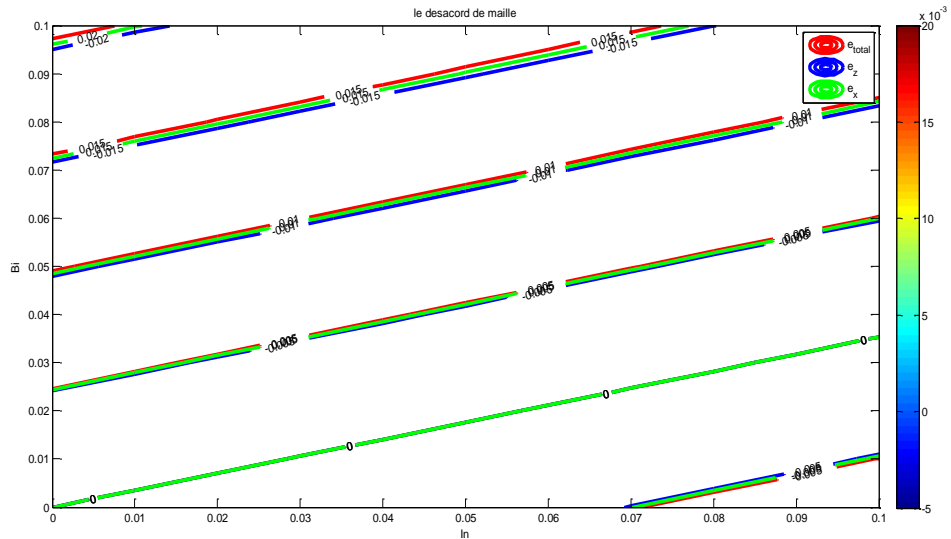


Figure 2.4 :la variation de désaccord de maille (e_{xx} et e_{zz}) en fonction des concentrations de l'In et du Bi

2.4. L'épaisseur critique

La figure (3.3) représenté la variation de l'épaisseur critique de l'alliage InGaAsBi en fonction des concentrations de(In) l'Indium et (Bi) Bismuth.

Nous constatons que l'indium a pour effet d'augmenter l'épaisseur critique jusqu'à l'accord de maille pour des concentrations bien déterminer, l'épaisseur critique va diminuer, alors que le bismuth le fait augmenter, L'épaisseur critique de notre structure tend vers l'infini si on annule les deux injections de In et du Bi, l'épaisseur critique calculée par Matthews et Blakeslee

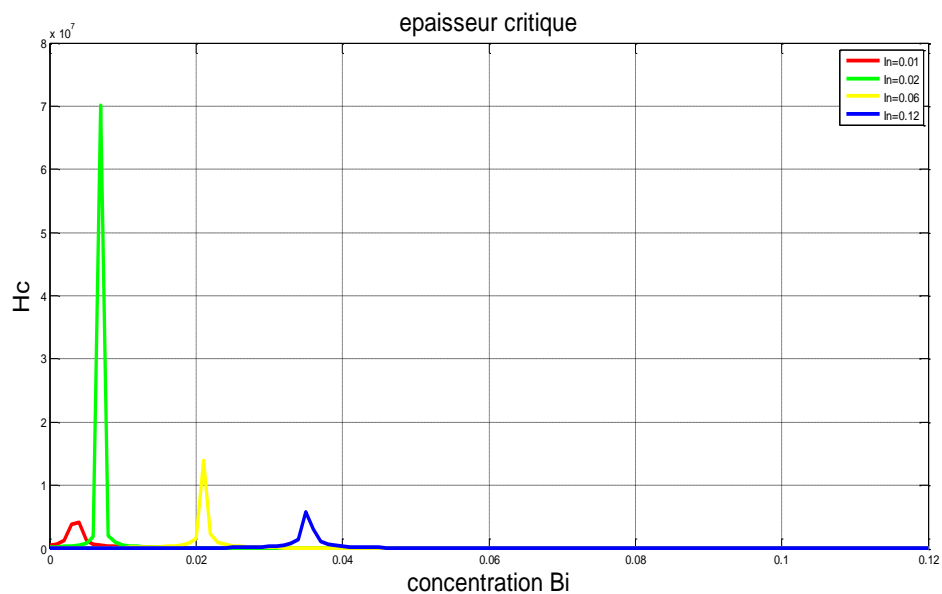


Figure 2. 5: Variation de l'épaisseur critique en fonction de la concentration de In et Bi

2.5 L'énergie de gap non contrainte

La Figure (2.6) et (2.7) reprisant la variation de l'énergie de gap de la structure InGaAsBi non contraint sur un substrat de GaAs.

L'énergie de gap non contraint décroît lorsque les concentrations de l'In et du Bi s'accroissent

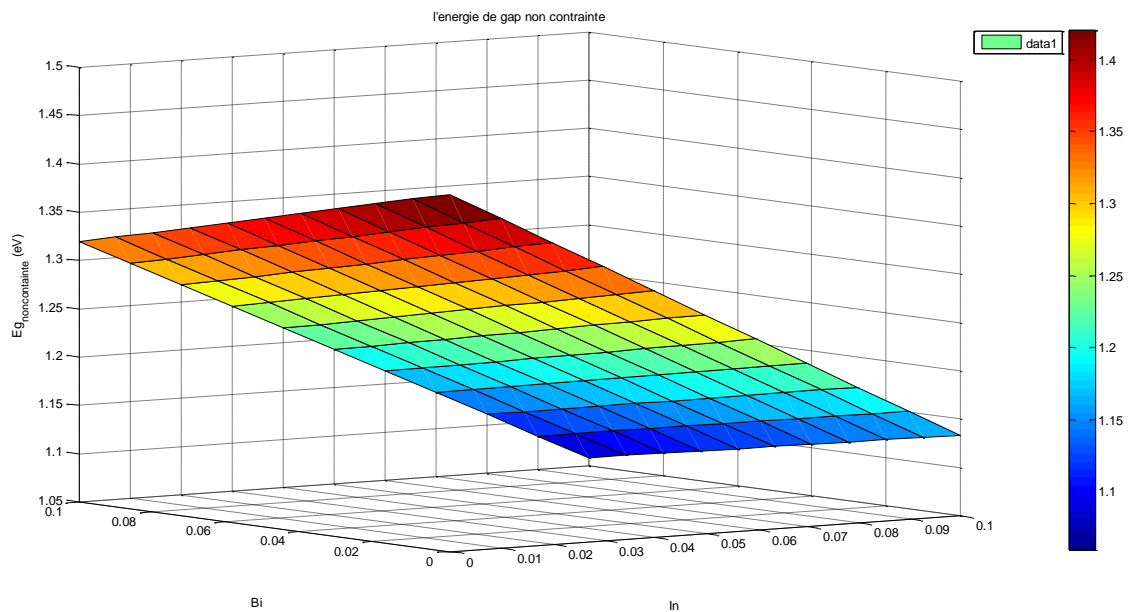


Figure 2.6 : Variation de l'énergie de gap non contrainte en fonction de la concentration de (In) et (Bi).

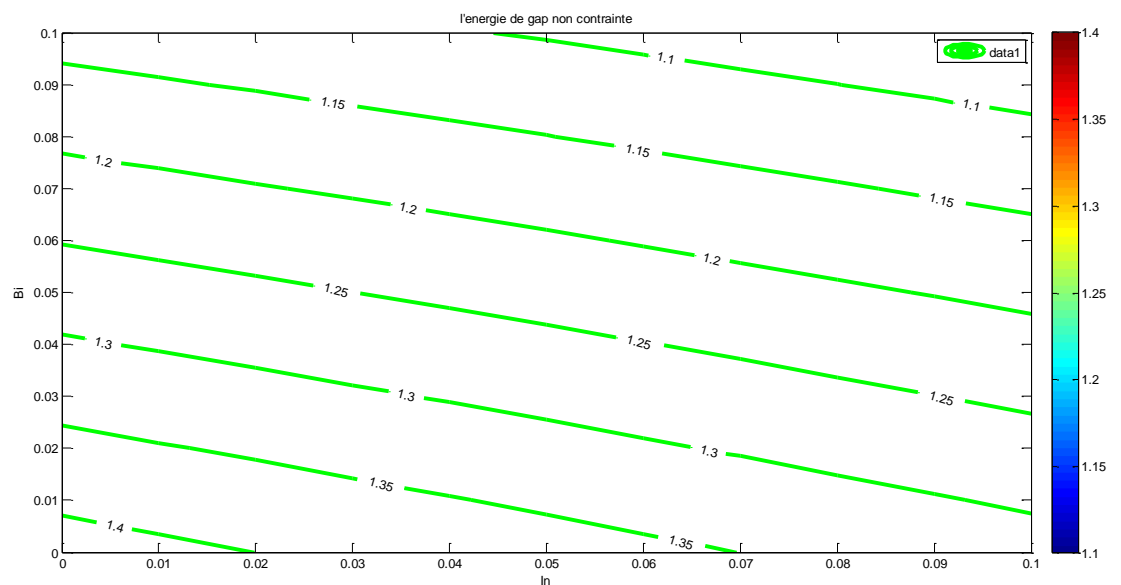


Figure 2.7 : Variation L'énergie de gap non contrainte en fonction de la concentration de (In) et (Bi)

2.6 L'énergie de gap avec contrainte

La Figure (2.8) et (2.9) reprisent la variation de l'énergie de gap de la structure InGaAsBi contraint sur un substrat de GaAs.

L'énergie de gap contraint décroît lorsque les concentrations de I(In)et (Bi)s'accroissent

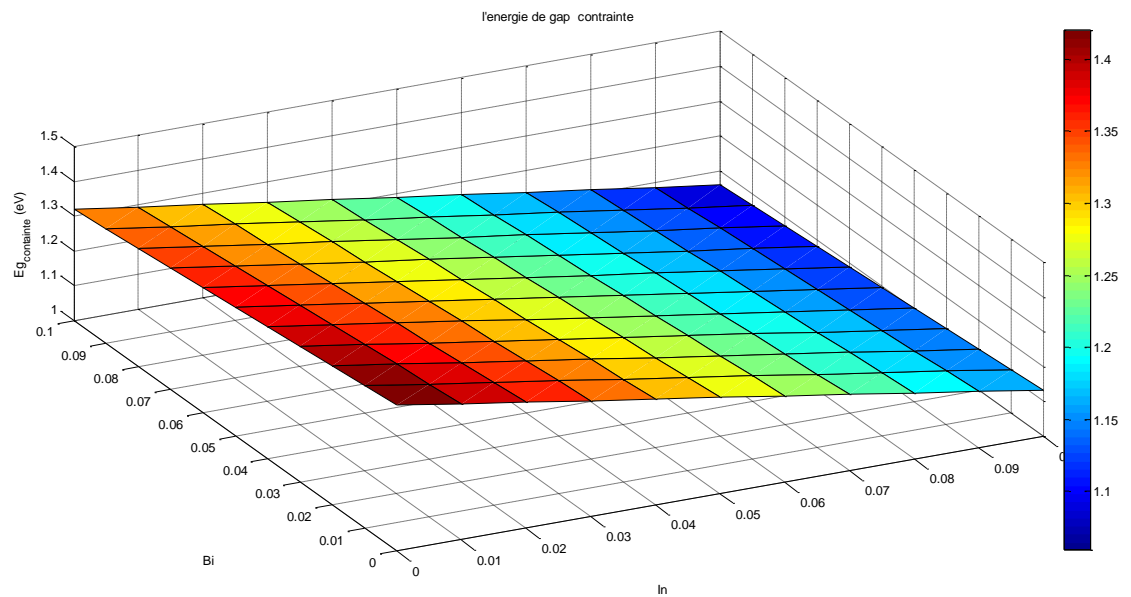


Figure 2.8 : Variation L'énergie de gap contrainte en fonction de la concentration de (In) et (Bi).

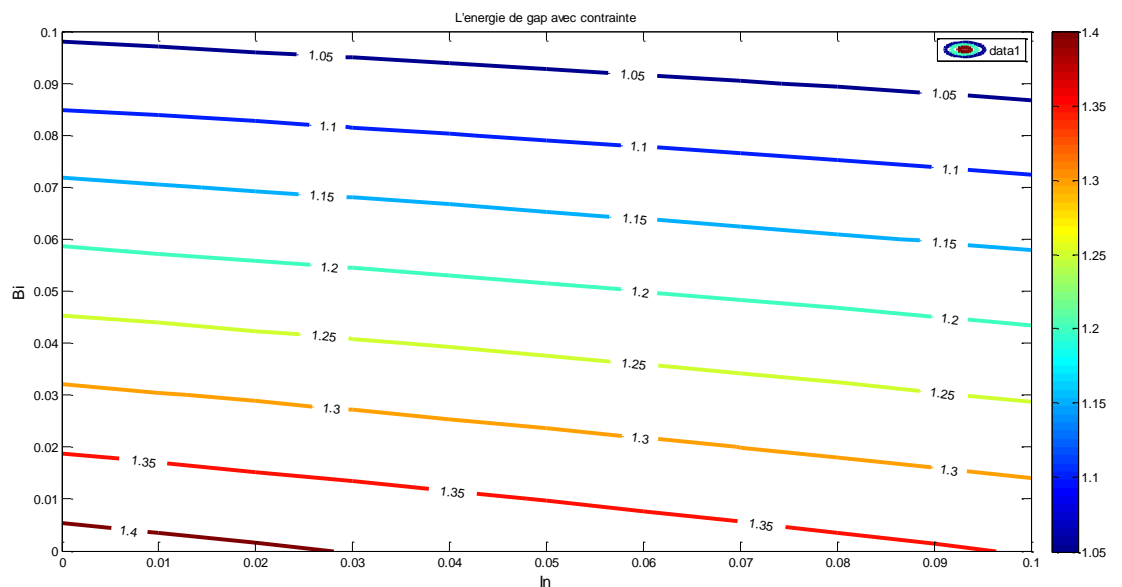
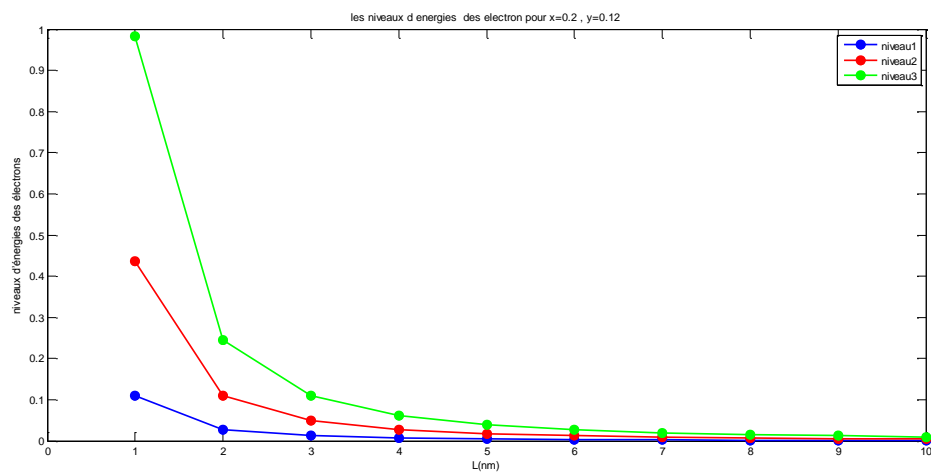


Figure 2.9 : Variation L'énergie de gap contrainte en fonction de la concentration de (In) et (Bi).

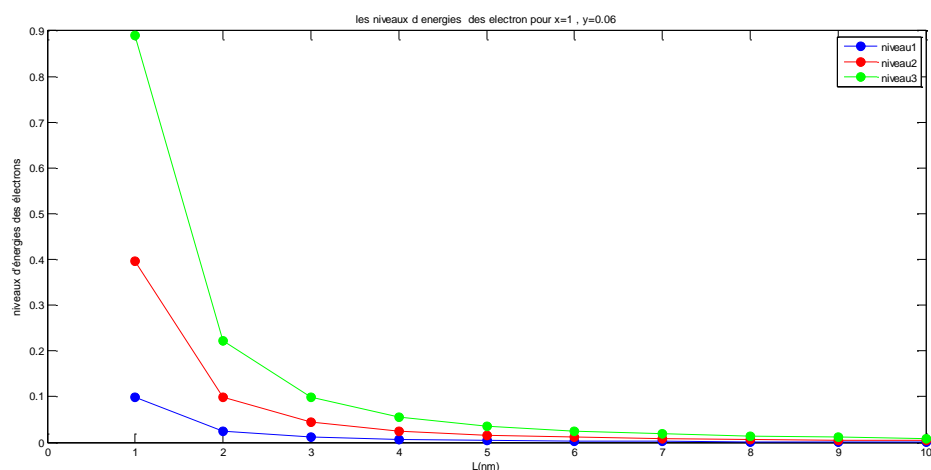
2.7 Quantification des porteurs électrons dans le puits quantique

Les figures (2.10) : (a), (b), (c) et (d) reprisant Variation de l'énergie de quantification des porteurs électrons dans le puits quantique en fonction de la largeur du puits quantique pour plusieurs concentrations de (Bi) et (In).

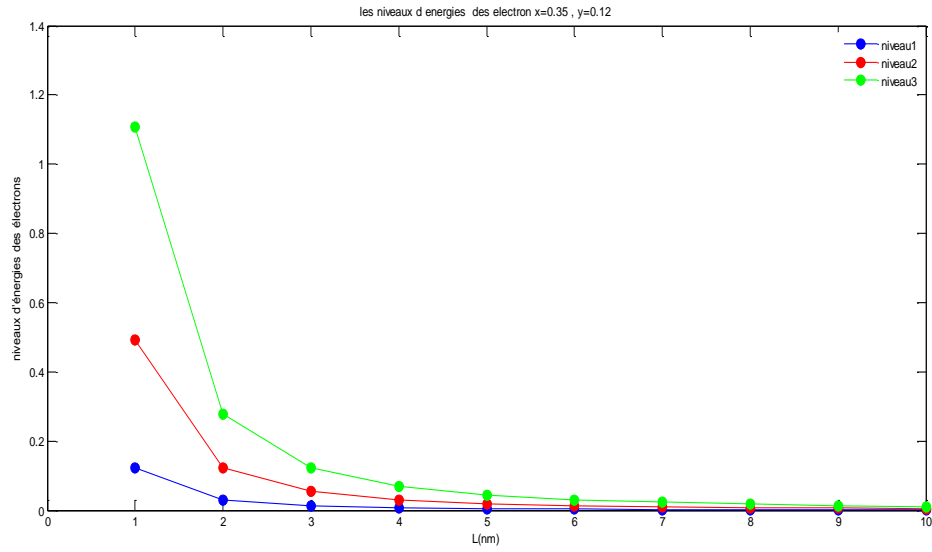
Les figures montrent qu'avec l'augmentation de largeur du puits quantique et les concentrations on remarque qu'il y a une diminution de l'énergie de la quantification. On remarque aussi une diminution de l'écart entre les niveaux.



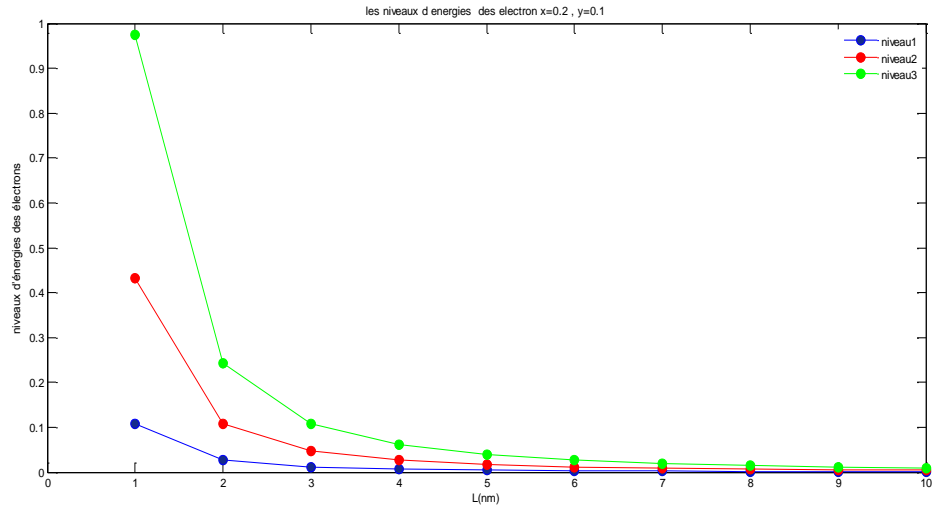
a) Pour $x=0.2$ et $y=0.12$



b) Pour $x=0.1$ et $y=0.06$



c) Pour $x=0.35$ et $y=0.12$



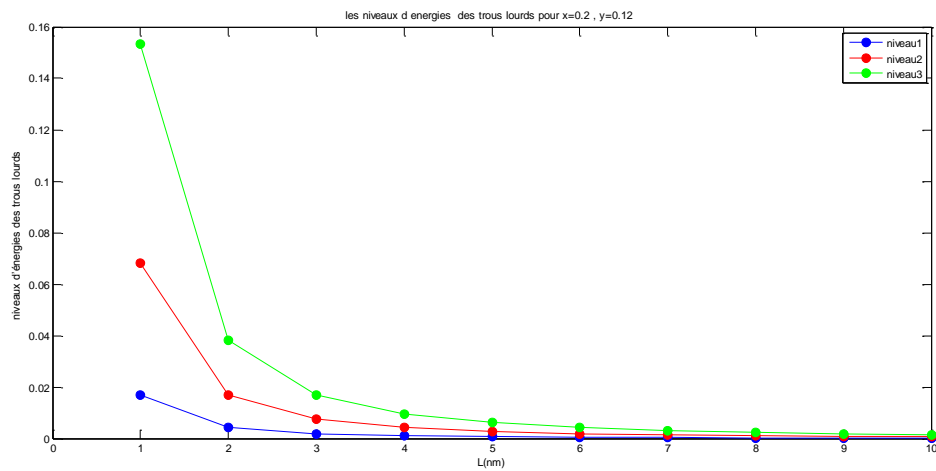
d) Pour $x=0.2$ et $y=0.1$

Figure 2. 10 : Variation de l'énergie de quantification des électrons en fonction de la largeur du puits quantique pour plusieurs concentrations de (Bi) et (In)

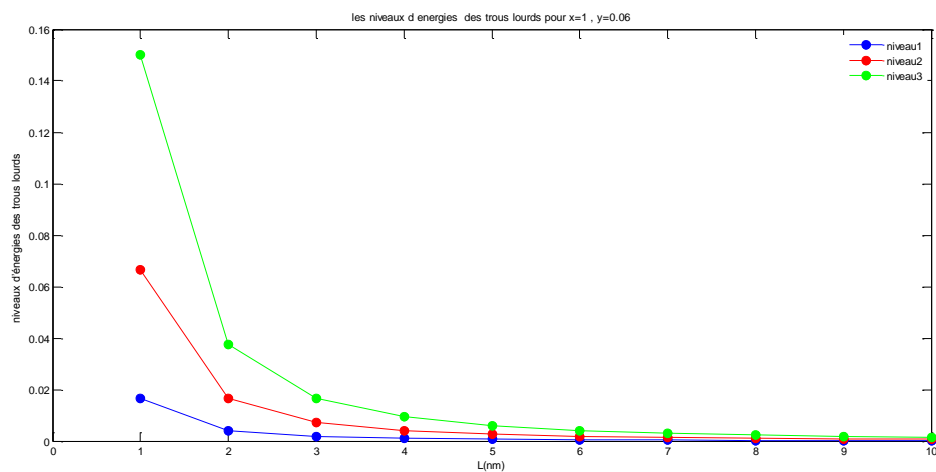
2.8 Quantification trous lourds dans le puits quantique

Les figures (2.11) :(a), (b), (c) et (d) reprisant Variation de l'énergie de quantification trous lourds en fonction de la largeur du puits quantique pour plusieurs concentrations de (Bi) et (In).

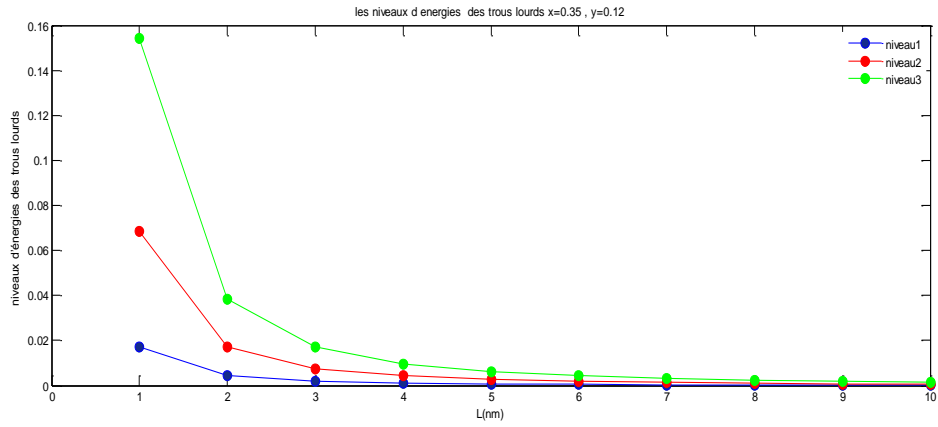
Avec l'augmentation de largeur du puits quantique on remarque qu'il y a une diminution du niveau d'énergie du puits quantique.



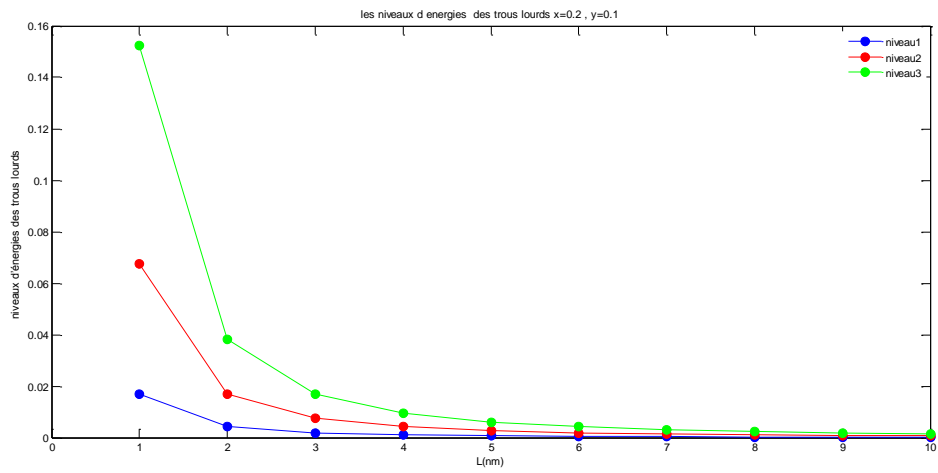
a) pour $x=0.2$ et $y=0.12$



b) pour $x=0.1$ et $y=0.06$



c) pour $x=0.35$ et $y=0.12$



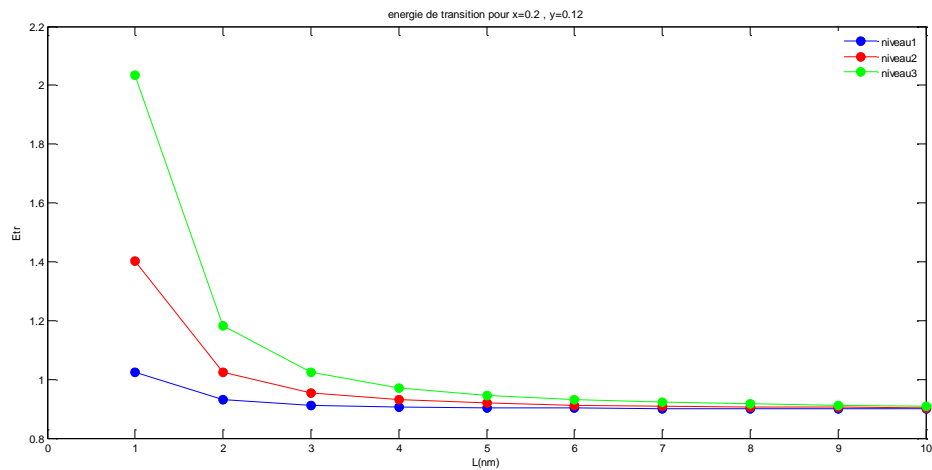
d) pour $x=0.2$ et $y=0.1$

Figure 2. 11: Variation de l'énergie de quantification trous lourds en fonction de la largeur du puits quantique pour plusieurs concentrations de (Bi) et (In)

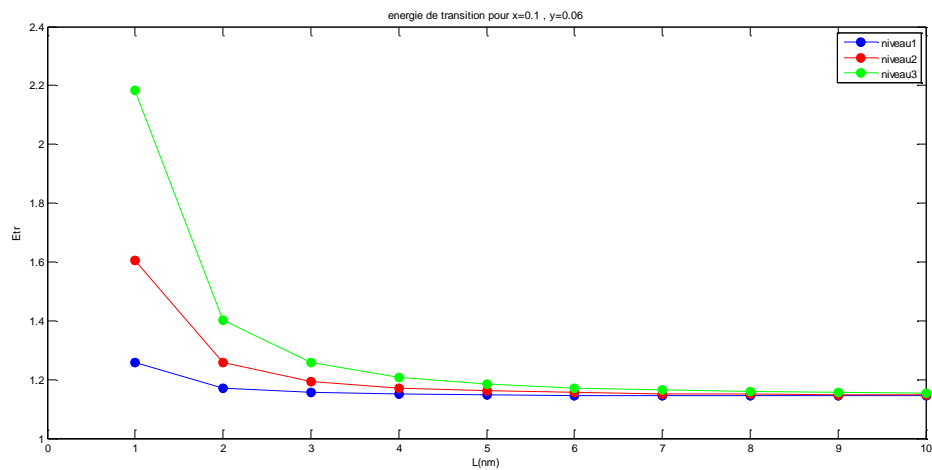
2.9 Energie de transition

Les figures (2.12) (a), (b) (c) et (d) reprisant la Variation de l'énergie de transition en fonction de la largeur du puits quantique pour plusieurs concentrations de (Bi) et (In).

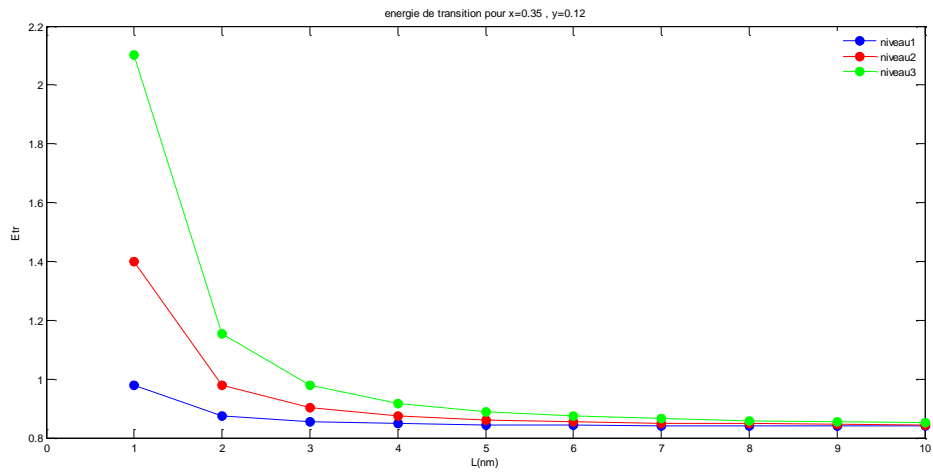
Remarque une diminution des énergies de transition



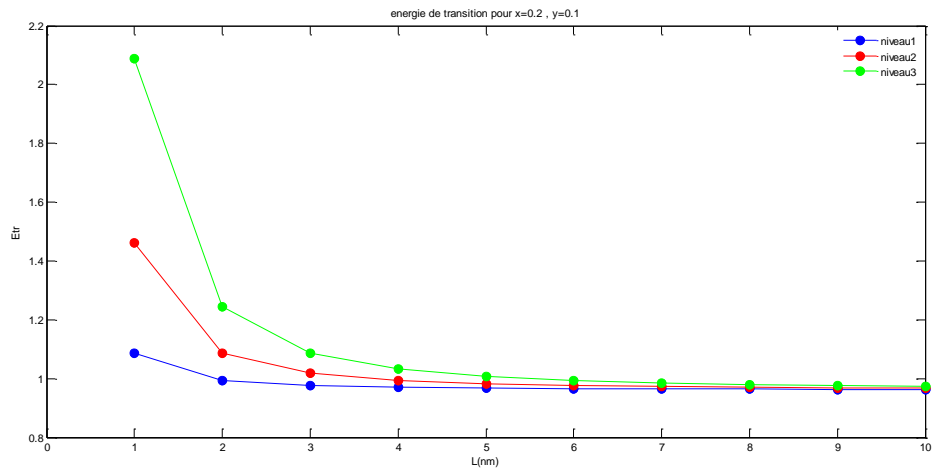
a) pour x=0.2 et y=0.12



b) pour x=0.01 et y=0.06



c) pour $x=0.35$ et $y=0.12$



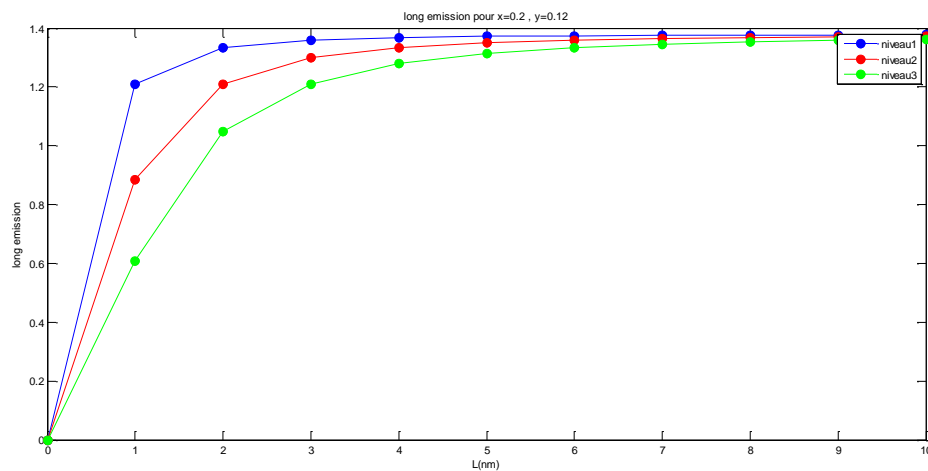
d) pour $x=0.2$ et $y=0.1$

Figure 2. 12 : Variation de l'énergie de transition en fonction de la largeur du puits quantique pour plusieurs concentrations de (Bi) et (In)

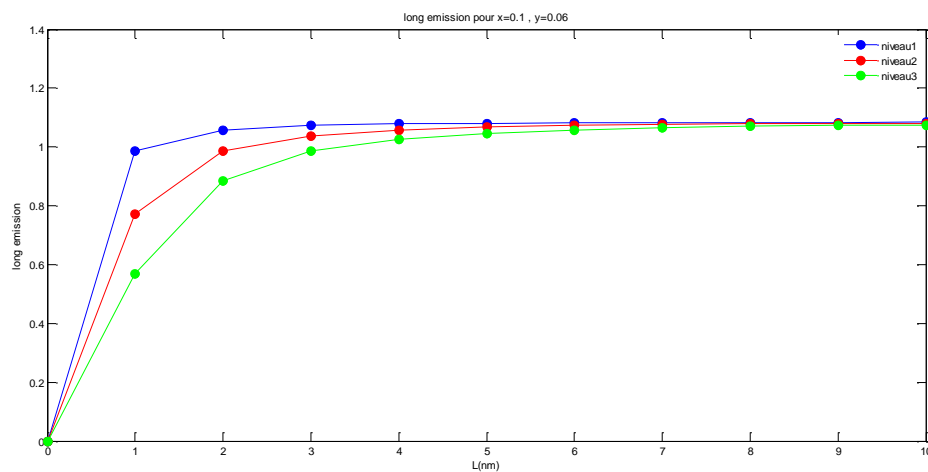
2.10. Longueurs d'ondes d'émission

Les figures (2.13) (a), (b), (c) et (d) reprisant la variation des longueurs d'onde d'émissions en fonction de la largeur du puits quantique pour plusieurs concentrations de (Bi) et (In).

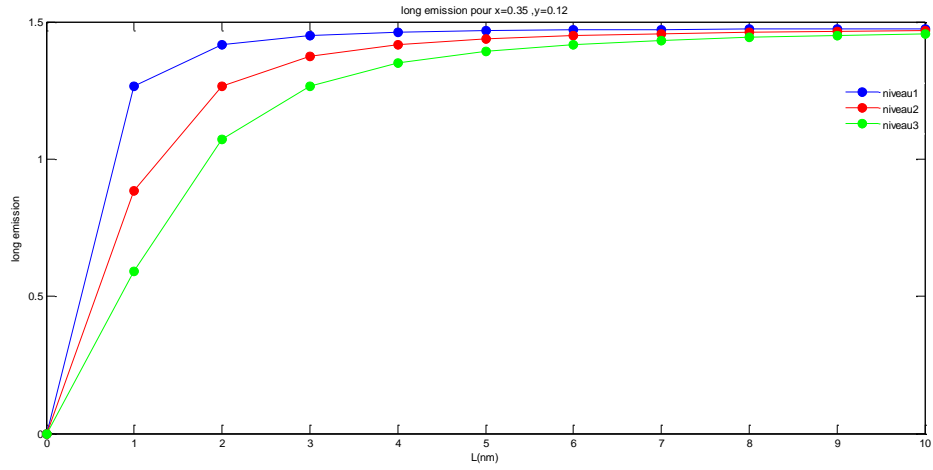
On remarque que l'augmentation de la longueur d'onde avec l'élargissement de la largeur de puits et les concentrations d'In est plus remarquable par rapport aux concentrations de bismuth ,la figure (d) avec ($x=20\%$ et $y = 10\%$) l'onde d'émissions elle proche de $1.3 \mu\text{m}$



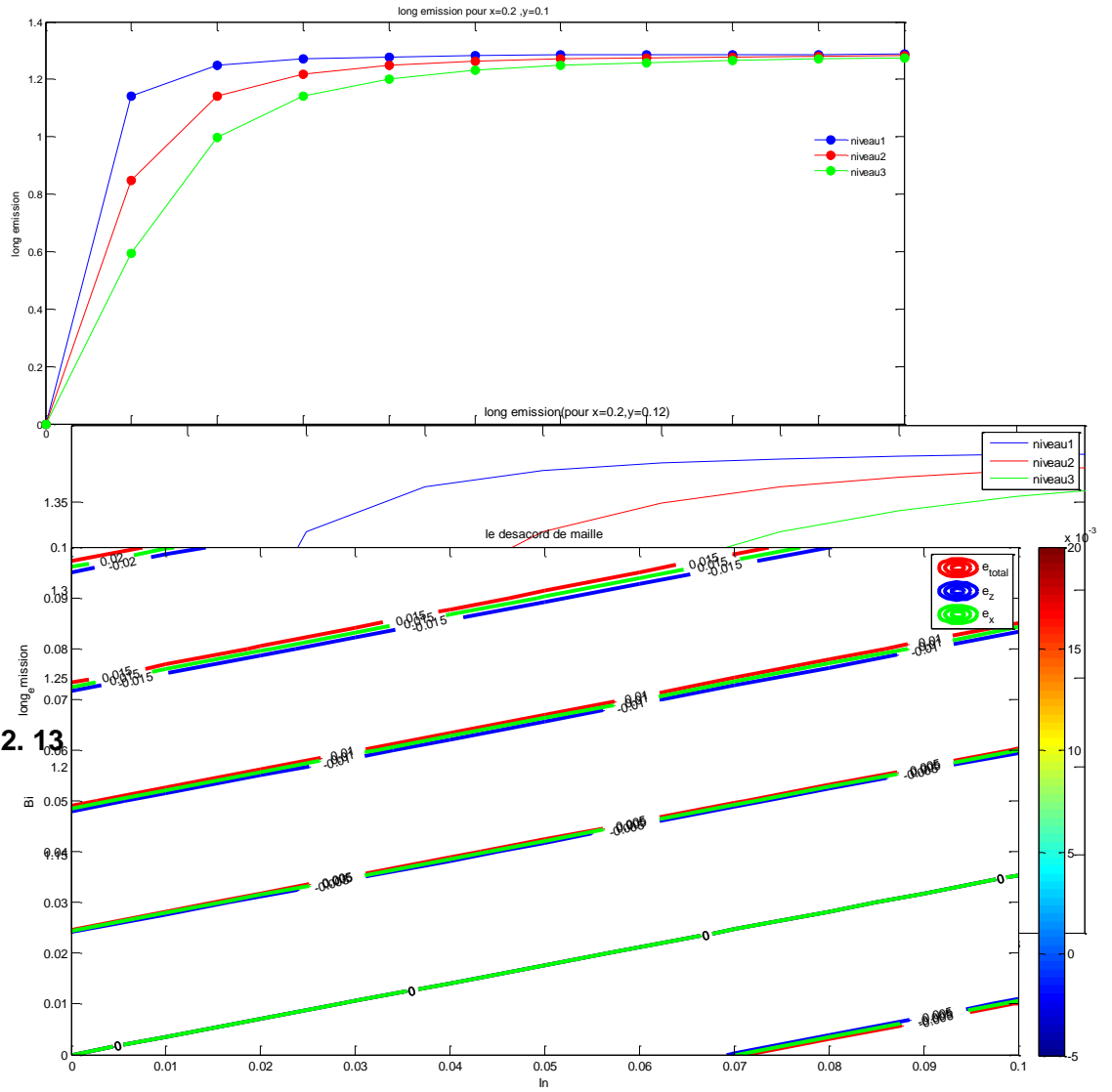
a) pour $x=0.2$ et $y=0.12$



b) pour $x=0.1$ et $y=0.06$



c) pour $x=0.35$ et $y=0.12$



1.11 Conclusion :

Dans ce chapitre, les simulations montrent que la variation des paramètres du matériau semi-conducteur InGaAsBi en fonction de la concentration de l'Indium (In) et du Bismuth (Bi), pour obtenir le plus faible désaccord paramétrique entre le substrat GaAs, et la couche active InGaAsBi, aussi nous avons étudié l'effet de cette contrainte sur les bandes d'énergies, les barrières de potentiels et les niveaux de confinements

Les conséquences l'avantage de la quaternaire présente par une longueur d'onde élevée, avec des contraintes induites par le désaccord de maille réduites

Finalement la simulation de la structure InGaAsBi / GaAs à base d'un puits quantique en fonction de la concentration d'indium et bismuth la longueur d'onde augmente avec l'élargissement du puits quantique, pour $x=20\%$ et $y=10\%$ résulte une longueur d'onde d'émission proche de $1.3\mu\text{m}$

Conclusion générale

Ce que nous pouvons déduire, c'est que les caractéristiques d'émission (longueur d'onde, largeur et intensité d'émission dépendent fondamentalement des compositions x et y , de l'épaisseur des puits et des barrières ainsi que des contraintes internes dues notamment aux désaccords paramétriques. Les différentes simulations présentées dans le deuxième chapitre montrent que la concentration de bismuth et d'indium augmentent et diminuent la contrainte entre InGaAsBi et GaAs , cette contrainte augmente la longueur d'onde d'émission par le fort anisotropie des bandes de valence.

La longueur d'onde d'émission augmente avec l'incorporation de bismuth et d'indium jusqu'à une valeur maximale de $\lambda = 1,3 \mu\text{m}$ pour $x = 20\%$ et $y = 10\%$

Cette longueur d'ondes optimale, car pour cette longueur d'ondes la fibre optique en silice présente le minimum d'atténuation.

Bibliographie

- [1] : Rémi BENEYTON "SUR L'INCORPORATION DU THALLIUM DANS UNE MATRICE III-V : PREPARATION DE GaTIAs ET InTIAs PAR EJM." DOCTEUR DE L'ECOLE CENTRALE DE LYON ,2004
- [2] :Youcef AICHE 'CALCUL DE L'ENERGIE DE TRANSITION DANSUNE HETEROSTRUCTURE A PUIITS QUANTIQUESAlGalnAs/InP EN FONCTION DES PARAMETRESSTRUCTURAUX EN VUE DE L'OBTENTION D'UNEEMISSION A 1.3 μm ' MEMOIRE DE MAGISTER, UNIVERSITE SAAD DAHLEB DE BLIDA. 2010
- [3] : Mme BAGHDADLI Nawel née : KORTI « ETUDE DES PROPRIETES OPTOELECTRONIQUES DES SEMICONDUCTEURSIII-V A BASE DE GALIUM.», MEMOIRE MAGISTER, UNIVERSITE ABOU-BAKR BELKAID – TLEMCEM 2009/2010
- [4] : Jean Yves DUBOZ « matériaux semi-conducteurs a grand gap III-V a base de GaN » article, 1999.
- [5] : CHAHIRA HAJLAOUI « étude des propriétés structurales et électroniques des nano fil semi-conducteurs III-V », docteur de l'InAs de rennes, université européenne de Bretagne, 2014
- [6] : KARA MOHAMED WAHIBA « les structures de bandes électroniques et les propriétés relatives aux semi-conducteurs quasi binaires $(\text{GaP})_{1-x}(\text{ZnSe})_x$ » ; thèse doctorat, université MOHAMAD KHIDR DE BESKRA .2012
- [7] R. Castagné et all. Circuits Intégrés en arséniure de Gallium. Physique, technologie et règles de conception. Masson et CINET ENST Paris, (1989).
- [8] Mark Csele, fundamentals of light sources and lasers ,United States of America, A Wiley- Interscience publication, 2004.

- [9] A.Aissat, B.Alshehri, S.Nacera , J.P.Vilcot « Theoretical investigation of GaAsNbi/GaAs materials for optoelectronic applications
- [10] R.Castagné, J.P.Duchemin, M.Gloanecet Ch.Rumelhard, «circuits intégrés en Arséniure de galilum ». Physique, et règles de conception, Masson, 1989.Pour Le Suivit In-Situ Des Contaminants“, Revue F.S.B 2, 2003, 92-98.
- [11] : S.F. Fang, K. ADOMI, S. Iyer, H. Morko,c, H. Zabel, C. Choi, N. Otsuka “*Gallium Arsenide and other compund semiconductors on silicon*”..(1990).
- [12] : AZZA CHETTAOUI. Croissance d’hétéro structures III-V sur des couches tampons de SrTiO3/Silicium. Ecole Centrale de Lyon, 2013. Français
- [13] : C.Kittel *Introduction à la physique de l’état solide*, Dunod (1972)
- [14] BAGHDADLI NAWEL, « étude des propriétés optoélectroniques des semi-conducteurs III-V A base de galium » ,2009/1010
- [15] Jérôme fais.introduction à la physique des semi-conducteurs. University de neuchatel .2001
- [16] Assali Abdenacer ‘ Etude des dispositifs optoélectroniques à base des hétérostructures semiconductrices’ Thèse DE DOCTORAT, Ecole Nationale Polytechnique d’Oran,2015 / 2016
- [17]. J.Arnaud 1989 « Physique des diodes lasers », Equipe de micro-électronique de Montpellier-Unité associé au CNRS 392, 1989
- [18] : zenats mohamed ‘étude des propriétés optoélectroniques de nanostructures grinsch a base d’anti moniures III sb et application ‘ thèse magister, université d’Oran ,2010
- [19] Régis André., « Effets piézoélectriques dans les puits quantiques CdTe/CdMnTe et CdTe/CdZnTe » (Thèse de doctorat de l’université joseph-Grenoble (16 déc. 1996).
- [20]. T.Y Wang and G.B.StringfT.Y. Wang and G.B., « Strain effects on GalnAs/InP

single Quantum Well grown by organ metallic vapour phase épitaxy with 0]x]1».1989.

[21]. Sandra Selmic "Design and characterization of 1.3 μm AlGaInAs /InP-Multiple Quantum Well Lasers". 2001

[23] W. Shan, J.W. Ager III, K.M. Yu, W. Walukiewicz, E.E. Haller, M.C. Martin, W.R. McKinney, W. Yang, J. Appl. Phys. 89 (1999) 8505.

[24] :Ghione, G "Semiconductor Devices for High-Speed Optoelectronics". Politecnico Ditorino, Italy, Cambridge University Press, (2009).