

الجمهورية الجزائرية الديمقراطية الشعبية

République Algérienne démocratique et populaire

وزارة التعليم العالي و البحث 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

Mention Électronique

Spécialité Micro-optoélectronique

présenté par

BENCHEIKH Chahinez

&

NEZELFAR Fatima

**Etude et simulation de la structurer InGaAsBi/GaAs a puits
quantique pour l'émission proche et moyen infrarouge**

Proposé par : Mr. Aissat Abdelkader

Année Universitaire 2015-2016

Remerciements

Notre premier remerciement va à Allah le tout-puissant de nous avoir donné le Courage, la volonté et la patience de mener à terme ce présent travail.

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 s'adressent également à tous les membres du jury pour l'honneur qu'ils nous font en acceptant de juger notre travail.

Nos très chers parents qui n'ont pas cessé de nous encourager et nous soutenir dans les moments difficiles et qui ont prié Dieux pour nous, et qui ont su m'entourer de toute leur affection et amour.

Et puis un remerciement très chaleureux a monsieur Betsam rachid pour nous avoir aidés dans 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:

في هذا العمل، صببنا اهتمامنا على دراسة و محاكاة لبنية أساسها InGaAsBi/GaAs للانبعث الأشعة تحت الحمراء والقريبة من الحمراء.

هذا الخليط الرباعي الذي هو من أشباه النواقل III.V , يمتل خصائص جد مهمة و خاصة طاقة فجوته التي تتناقص بطريقة حادة و هذا بفعل إدخال الإنديوم و البزموت على الركيزة GaAs .

لقد قمنا أيضا بدراسة العوامل المختلفة التي تميز الليزر التي استخدمناها في حساب طول الموجة المنبعثة من بئر كمومي.

كلمات المفاتيح: ليزر ؛ بئر كمومي؛ طول موجة الانبعث.

Résumé :

Dans ce travail, nous nous sommes intéressé à l'étude et la simulation d'une structure à base de InGaAsBi/GaAs pour l'émission proche et moyen infrarouge. Cet alliage quaternaire qui est un semi-conducteur III-V présente des caractéristiques importantes notamment son énergie de gap qui diminue d'une manière drastique du à l'incorporation d'indium dans le GaAs. Nous avons également étudié les différents paramètres caractérisant les lasers qui nous ont servi à calculer leur longueur d'onde d'émission d'un laser à puits quantique.

Mots clés : laser ; puits quantique ; longueur d'onde d'émission.

Abstract :

In this work, we were interested in the study and simulation of a basic structure of InGaAsBi / GaAs for the near and means infrared emission. This quaternary alloy which is a semiconductor III-V provides important features particular energy gap which decrease drastically the Indium incorporation in GaAs. We also studied the different parameters characterizing lasers which we used to calculate their emission wavelength of a laser quantum well.

Keywords: laser; quantum well; emission wavelength.

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.

Bv: Bande de valence.

Eg: Energie de gap.

ϵ : Déformation hydrostatique.

a_s : Paramètre de maille du substrat.

a_e : Paramètre de maille de la couche épitaxiale.

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.

b: Potentiel de déformation tétragonale

VBAC: Modèle d'anticroisement de bandes de valence.

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

ΔE_{hh} : 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 biaxiales.

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

γ : 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.

δE_{hh} , δE_{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

Introduction général.....	01
Chapitre 1 : Etat de l'art	03
1.1 Introduction.....	03
1.2 Les semi-conducteurs.....	03
1.2.1 Définition des semi-conducteurs III-V.....	04
1.2.2 Les bandes d'énergies.....	04
1.2.3 Structure cristalline.....	05
1.2.4 Les composés binaires, ternaires et quaternaires des s /c III-V.....	06
a Les composés binaires.....	06
b Les composés ternaires et quaternaires.....	06
1.2.5 Bandes interdites des principaux composés III-V.....	07
1.2.6 Gap direct et gap indirect.....	08
1.2.7 Les hétérostructures.....	08
1.3 Physique du laser.....	10
1.3.1 Définition.....	10
1.3.2 Emissions spontanée et stimulée.....	10
1.3.3 Principe d'inversion de population.....	11
1.4 L'effet laser.....	11
1.4.1 Le pompage optique.....	12
1.4.2 Le pompage par injection électrique.....	12

1.4.3 Le pompage électronique.....	12
1.5 Caractéristique de la lumière laser.....	12
1.5.1 Unidirectionnel.....	12
1.5.2 Intense.....	13
1.5.3 Monochromatique.....	13
1.5.4 Cohérent.....	13
1.6 Choix du matériau $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_{1-y}\text{Bi}_y$	14
1.7 Etude des paramètres électronique.....	14
1.7.1 Paramètre de maille.....	14
1.7.2 La contrainte.....	15
1.7.3 Epaisseur critique.....	16
1.8 Effet de la contrainte sur le gap.....	17
1.8.1 Les décalages énergétiques des bandes.....	20
1.9 Effet de bismuth sur la bande de valence.....	21
1.10 Puits quantiques	22
a Puits quantique de type-I.....	23
b Puits quantique de type-II.....	23
c Puits quantiques de type-III.....	23
1.11 Les états énergétiques dans un puits quantique.....	24
1.11.1 Puits de profondeur infinie.....	24
1.11.2 Puits quantique de profondeur finie.....	27

1.12 Energie de transition.....	29
1.13 Conclusion	30
Chapitre 2 : Résultat et discussion.....	31
2.1 Introduction.....	31
2.2 Résultat de la simulation des paramètres électronique.....	31
2.2.1 Paramètre de maille et désaccord paramétrique.....	31
2.2.2 Calcule de l'épaisseur critique	33
2.2.3 Effet de la contrainte sur la bande de conduction et la bande de valence	34
<i>a</i> Bande de conduction	34
<i>b</i> Bande de valence	35
2.3 Effet de la contrainte sur le gap.....	36
2.4 Barrière de potentiel.....	37
2.5 Taux de confinement des électrons.....	38
2.6 La quantification.....	39
2.6.1 Quantification des électrons dans le puits.....	39
2.6.2 Quantification des trous lourds dans le puits pour plusieurs valeurs de x avec y fixe.....	39
2.6.3 Quantification des trous lourds dans le puits pour plusieurs niveaux avec x et y fixe.....	40
2.7 Calcule de l'énergie de transition.....	41
2.8 La détermination de la longueur d'onde d'émission.....	42

2.9 L'effet de variation des concentrations d'In et Bi.....	44
2.9.1 Energie de transition.....	44
2.9.2 La Longueur d'onde d'émission	47
a Transition vers le premier niveau de la BC	47
b Transition vers le deuxième niveau de la BC	52
2.10 Longueur d'onde d'émission avec un niveau d'énergie fixe	55
2.11 Energie de transition avec plusieurs concentrations de Bi	57
2.12 Conclusion	58
Conclusion générale	59
Annexe	61
Bibliographie	64

Liste des figures

Figure 1.1. Diagramme de bande d'énergie des matériaux semi-conducteur.....	05
Figure 1.2. Vue de dessus de la structure Zinc blende.....	05
Figure 1.3. Maille élémentaire de la Structure Zinc blende.....	05
Figure 1.4. Evolutions de l'énergie de bande interdite et du paramètre cristallin des alliages de composés III-V [10].....	07
Figure 1.5(a et b). Le gap direct et le gap indirect où $K \vec{}$ est le vecteur d'onde Associé à un électron.....	08
Figure 1. 6(a et b). Configuration des bandes de conduction et de valence dans une hétérostructure.....	09
Figure 1.7. Illustration des trois mécanismes d'interaction du photon avec un système à deux niveaux.....	11
Figure 1. 8(a et b). Illustration des deux types de contraintes.....	16
Figure 1. 9(a et b). Illustration d'une couche contrainte.....	17
Figure 1. 10. Structure de bande d'un semi-conducteur à gap direct.....	18
Figure 1. 11. Puits quantique.	23
Figure 1. 12. Puits de potentiel rectangulaire infiniment profond.....	25
Figure 1.13. Energie de transition dans un puits quantique.....	29
Figure 2.1. Variation du paramètre de maille du en fonction de la concentration de bismuth l'indium.....	32
Figure 2.2. Variation du désaccord paramétrique en fonction de la concentration.....	32
Figure 2.3. Variation du désaccord paramétrique en fonction de la concentration In et Bi forma isotrope.....	33

Figure 2. 4. Variation de l'épaisseur critique en fonction des fractions d'indium et Bismuth.....	33
Figure 2.5. Variation de l'énergie de la bande de conduction en fonction des concentrations de bismuth et d'indium.....	34
Figure 2.6(a et b). Variation de l'énergie des sous bandes E_{v^+} et E_{v^-} en fonction de concentration d'indium et du Bismuth de la structure InGaAsBi.....	35
Figure 2.7. E_{gh} , E_{gl} En fonction de la concentration d'indium et de bismuth	36
Figure 2. 8. La barrière de potentiel en fonction de la concentration, d'indium et de bismuth	37
Figure 2.9. Barrière de potentiel en fonction de la concentration d'indium et de bismuth.....	37
Figure 2.10. Taux de confinement dans le puits.....	38
Figure 2.11. La variation de niveau de trous lourd en fonction du largeur de puits pour plusieurs concentration de x et y=0.12.....	39
Figure 2.12. Quantification des trous lourds dans le puits pour plusieurs valeurs d'In et y=0.12.	40
Figure 2. 13. Quantification des trous lourds pour x=0.35 et y=0.12.....	40
Figure 2.14. L'énergie de transition des trous lourds vers le premier niveau de la bande de conduction en fonction de la largeur de puits avec x=0.35 et y=0.12.....	41
Figure 2.15. L'énergie de transition des trous lourds vers le deuxième niveau d'électron de la bande de conduction en fonction de la largeur de puits avec x=0.35 et y=0.12.....	42
Figure 2.16. La longueur d'onde pour le premier niveau de la BC en fonction d'élargissement de puits pour x=0.35 et y=0.12.....	43
Figure 2.17. La longueur d'onde pour le deuxième niveau de la BC en fonction d'élargissement de puits avec x=0.35 et y=0.12.....	43
Figure 2.18(a,b,c et d). La variation de l'énergie de transition des trous lourds vers le premier niveau de BC pour x=10% et plusieurs compositions de y.....	44
Figure 2.19(a,b,c et d) La variation de l'énergie de transition trous lourds vers le premier niveau pour x=30% et plusieurs compositions de Y en fonction de la largeur de puits.....	45

Figure 2.20. L'énergie de transition des trous lourds en fonction de la largeur de puits pour $y=0,04$ et $x=0.2$	46
Figure 2.21 L'énergie de transition des trous lourds en fonction de la largeur de puits pour $y=10\%$ et $x=20\%$	47
Figure 2.22(a,b et c). Variation de la longueur d'onde d'émission pour plusieurs concentrations I_n et $y=2\%$	48
Figure 2.23(a,b et c). Variation de la longueur d'onde d'émission pour plusieurs concentrations I_n avec et $y=10\%$	49
Figure 2. 24(a et b). La longueur d'onde pour le premier niveau de transition avec $x=10\%$	50
Figure 2.25(a et b). La longueur d'onde d'émission pour le premier niveau de transition.....	51
Figure 2. 26(a,b et c). La longueur d'onde d'émission au deuxième niveau de transition avec $y=2\%$	52
Figure 2. 27(a,b et c). La longueur d'onde d'émission au deuxième niveau de la BC avec $y=10\%$	53
Figure 2. 28(a et b). La longueur d'onde d'émission au deuxième niveau de transition avec $x=10\%$	54
Figure 2. 29(a et b). La longueur d'onde d'émission pour le deuxième niveau de transition avec $x=30\%$	54
Figure 2. 30(a,b et c). La variation de longueur d'onde d'émission avec n fixe $y=2\%$	55
Figure 2. 31(a,b et c). La variation de longueur d'onde d'émission avec n fixe $x= 10\%$	56
Figure 2. 32(a,b et c). La variation d'énergie de transition avec plusieurs y et x fixe.....	57

Liste des tableaux

Tableau 1.1. Un extrait du tableau périodique qui présente le Placement des différents

Matériaux semi-conducteurs.....04

Introduction générale

Dans l'ensemble des matériaux, les semi-conducteurs constituent une classe bien définie, avec des propriétés physique et optique particulières qui sont sources d'intérêt au plan de la connaissance fondamentale et d'applications. Ces deux facteurs indissociables font l'importance de ces matériaux, malgré le nombre limité d'éléments et de composés semi-conducteurs [01].

Principalement remarquables par leurs propriétés électronique et optique, les semi-conducteurs interviennent dans presque tous les équipements électriques, électroniques, et optiques [01].

La plus grande partie des composants (transistors, diodes,...) sont réalisés en silicium qui joue un rôle prépondérant, sa technologie et sa connaissance théorique a atteint des niveaux inégalés [01].

En électronique rapide (de commutation) 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. On citera pour exemple quelques composés binaires et ternaires, GaAs, InP, GaAlAs, InGaAs,..... Les propriétés de ces matériaux sont très intéressantes pour les performances de ces dispositifs.

Les diodes laser sont apparues peu de temps après le premier laser, en 1962. Elles ont ouvert de nouvelles voies technologiques dans de nombreux domaines dont la plus importante est sans doute l'introduction de ces sources laser dans les télécommunications par fibres optiques [01].

Le principe du laser à semi-conducteurs est bien connu. La structure la plus utilisée est celle du laser à double hétérostructure. Grâce au confinement optique induit par la différence d'indice entre les matériaux, on confine l'onde optique d'un laser dans un espace plus faible que l'extension naturelle de l'onde dans un milieu homogène.

Pour une émission dans l'infrarouge, les lasers à semi-conducteurs peuvent être composés de différents matériaux principalement à base de composés III-V (GaAs, InP, GaSb) ou de composés IV-VI (PbSe, PbTe...).

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

- ✓ le premier chapitre, est consacré à la description des différents modèles mathématique qui permettent la détermination de l'effet de la concentration d'indium et bismuth sur les paramètres physique et les paramètres électrique de l'alliage $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_{1-y}\text{Bi}_y$ contraint sur le substrat de GaAs, comme paramètre de maille, la contrainte, épaisseur critique.....Et l'étude de principe de fonctionnement d'un laser à puits quantique et les différents types des lasers à semi-conducteurs.
- ✓ Le second chapitre résume les résultats obtenus, ces résultats sont accompagnés par des discussions et des interprétations obtenues par simulation, afin de déterminer la concentration d'indium et de bismuth qui permettent d'avoir une meilleure longueur d'onde d'émission de cette structure à puits quantique InGaAsBi/GaAs.
- ✓ Finalement notre travail est achevé par une conclusion générale.

Chapitre 1 Généralités

1.1 Introduction

Dans ce premier chapitre nous allons aborder les principales caractéristiques des Semi-conducteurs et plus particulièrement les semi-conducteurs III-V qui ont connus une grande révolution en électronique et en optoélectronique, ce qui a abouti à l'apparition des structures à couches semi-conductrices très fines et de très bonne qualité, d'où l'avènement des nouveaux produits (diodes, transistors, diodes laser à semi-conducteur) ainsi que les nanostructures (puits quantiques, boîtes quantiques, ...)

Ce chapitre présente aussi le matériau quaternaire $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_{1-y}\text{Bi}_y$ qui est au centre de ce travail, ce matériau est un semi-conducteur faisant partie de la catégorie des III-V, c'est-à-dire, composé d'éléments de la colonne III, et d'éléments de la colonne V du tableau de Mendeleïev. L'introduction de bismuth entraîne de profondes modifications de la structure de bande de ces matériaux, notamment une forte réduction de l'énergie de la bande interdite.

Nous allons donc étudier l'influence de l'incorporation de bismuth et d'indium sur les différentes caractéristiques de la structure $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_{1-y}\text{Bi}_y/\text{GaAs}$ (paramètre de maille, contrainte, énergie de gap,...).

1.2 Les semi-conducteurs

Les matériaux semi-conducteurs sont en général des corps dont la résistivité est des conducteurs et celle des isolants, disant de 10^{-3} à 10^{-4} $\Omega\text{-cm}$ (ou plus) [02]. Dans les semi-conducteurs, le gap est assez faible, ce qui permet à des porteurs de passer dans la bande de conduction simplement grâce à leur énergie d'agitation thermique, ainsi le semi-conducteur en tant que mauvais conducteur ou mauvais isolant a lui une conductivité qui augmente avec la température [03].

Un des matériaux semi-conducteurs le plus couramment utilisé est le Silicium, qui appartient au groupe IV; il contribue grâce à son faible coût, sa grande disponibilité et

de sa bonne conductivité thermique, à la réalisation des circuits intégrés et la technologie la plus mature [04].

1.2.1 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. Le tableau 1.1 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.

II	III	IV	V	VI
	$10.811 \text{ } ^5\text{B}$	$12.011 \text{ } ^6\text{C}$	$14.007 \text{ } ^7\text{N}$	
	$26.982 \text{ } ^{13}\text{Al}$	$28.086 \text{ } ^{16}\text{Si}$	$30.974 \text{ } ^{15}\text{P}$	
$65.39 \text{ } ^{30}\text{Zn}$	$69.723 \text{ } ^{31}\text{Ga}$	$72.64 \text{ } ^{32}\text{Ge}$	$74.922 \text{ } ^{33}\text{As}$	$78.96 \text{ } ^{16}\text{S}$
$10.811 \text{ } ^{30}\text{Cd}$	$114.82 \text{ } ^5\text{In}$	$118.71 \text{ } ^{50}\text{Sn}$	$121.76 \text{ } ^{51}\text{Sb}$	$127.60 \text{ } ^{52}\text{Te}$

Tableau 1.1. Un extrait du tableau périodique qui présente le Placement des différents Matériaux semi-conducteurs.

1.2.2 Les bandes d'énergies

Les électrons situés sur la couche la plus éloignée du noyau (couche de valence), qui participent aux liaisons covalentes peuvent, sous l'effet de l'agitation thermique, devenir porteur de charge. Le diagramme énergétique est constitué de deux bandes (conduction et valence) séparés par une bande interdite ou gap. Pour franchir cette bande l'électron doit acquérir de l'énergie (thermique, photon, ...) [05]. La figure 1.1 représente le diagramme de bandes d'énergies pour les matériaux semi-conducteurs

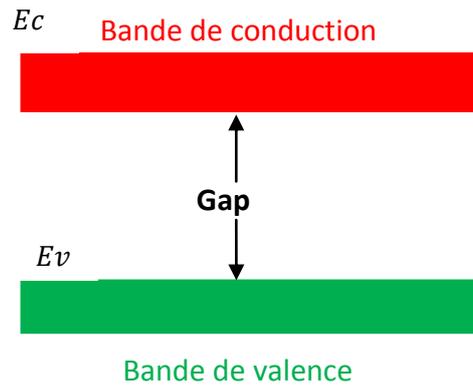


Figure 1.1. Diagramme de bande d'énergie des matériaux semi-conducteur

Lorsque le gap (bande interdite) est très grand, l'énergie thermique, à la température ambiante, n'est pas suffisante pour exciter un nombre conséquent d'électrons depuis la bande de valence vers la bande de conduction, le matériau est alors isolant ($E_g > 200kT$). Par contre lorsque le gap diminue ($E_g < 100kT$), un certain nombre d'électrons sont excités dans la bande de conduction par agitation thermique et le matériau présente une conductivité qui, sans être comparable à celle d'un métal, peut devenir appréciable. Le matériau est dit semi-conducteur [06].

1.2.3 Structure cristalline

Les semi-conducteurs III-V sont composés à partir des éléments des colonnes III et V du tableau périodique de Mendeleïev. Ils sont obtenus, soit par tirage de monocristaux massifs, soit par croissance épitaxiale de couches minces et cristallisent dans la structure zinc blende ou würtzite. Dans notre étude, c'est la structure zinc blende représentée sur les (figures 1.2 et 1.3) qui nous intéresse [06].

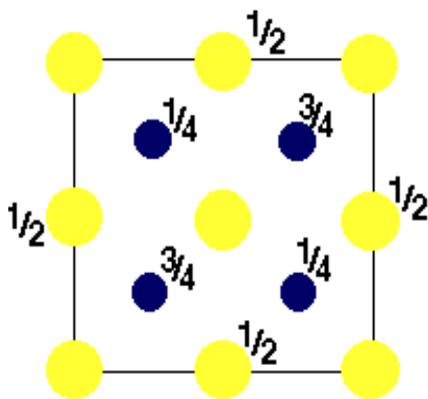


Figure 1.2. Vue de dessus de la Structure Zinc blende

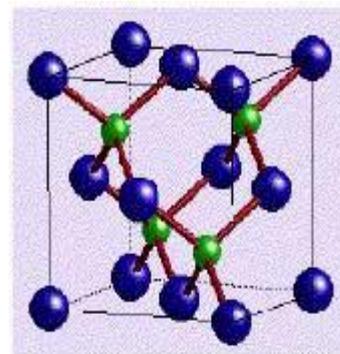


Figure 1.3. Maille élémentaire de La structure Zinc blende.

Elle est caractérisée par deux sous-réseaux à faces centrées décalés l'un par rapport à l'autre d'un quart d'une diagonale principale du cube élémentaire.

De ce fait dans les matériaux III-V, les liaisons ne sont pas simplement covalentes comme dans le Silicium. Elles reposent sur le transfert d'électrons des atomes du groupe V sur ceux du groupe III. Cette répartition est à l'origine du caractère partiellement covalent des liaisons (semi-conducteur polaires). Cette composante ionique de la liaison est importante, elle se manifeste par la présence de moments dipolaires électriques qui interagissent avec le rayonnement électromagnétique de grande longueur d'onde, au même titre qu'il y a interaction entre les cristaux ioniques et la lumière infrarouge [07].

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

a 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. [08], qui demande des semi-conducteurs à forte mobilité porteurs ou pour l'optoélectronique ou une structure de bande directe est nécessaire pour que les transitions optiques soient efficaces [09].

b Les composés ternaires et quaternaires

On sait par exemple obtenir des alliages ternaires, ou quaternaires qui sont identifiés de la façon suivante [10] :

- **Ternaires** : S'il y a substitution de 2 atomes sur l'un des sous réseaux, soit, $A_x A'_{(1-x)} B$ Exemple : $Ga_x In_{(1-x)} P$. lorsque la composition exacte compte peu, on écrit tout court GaInP.

- **Quaternaires 1+3** : S'il y a substitution de 3 atomes sur des sous réseaux soit $A_x A'_y A'_{(1-x-y)} B$. Exemple : $Ga_x In_{(y)} Al_{(1-x-y)} As$.

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



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

1.2.5 Bandes interdites des principaux composés III-V

Les variations de l'énergie de bande interdite en fonction du paramètre cristallin « a » qui varie lui-même avec la composition représentée dans le diagramme de la Figure 1.4. Les points du graphe figurent la position des composés binaires stœchiométriques, et les lignes représentent l'évolution du gap E_g et du paramètre cristallin « a », en fonction de la composition des alliages ternaires. Certaines lignes présentent un point anguleux qui dénote une transition entre un gap direct et un gap indirect. Ce diagramme est donc très important parce qu'il permet de connaître la composition de tout alliage ternaire susceptible d'être déposé en couche mince, par épitaxie, sur un substrat binaire comme GaAs ou InP.

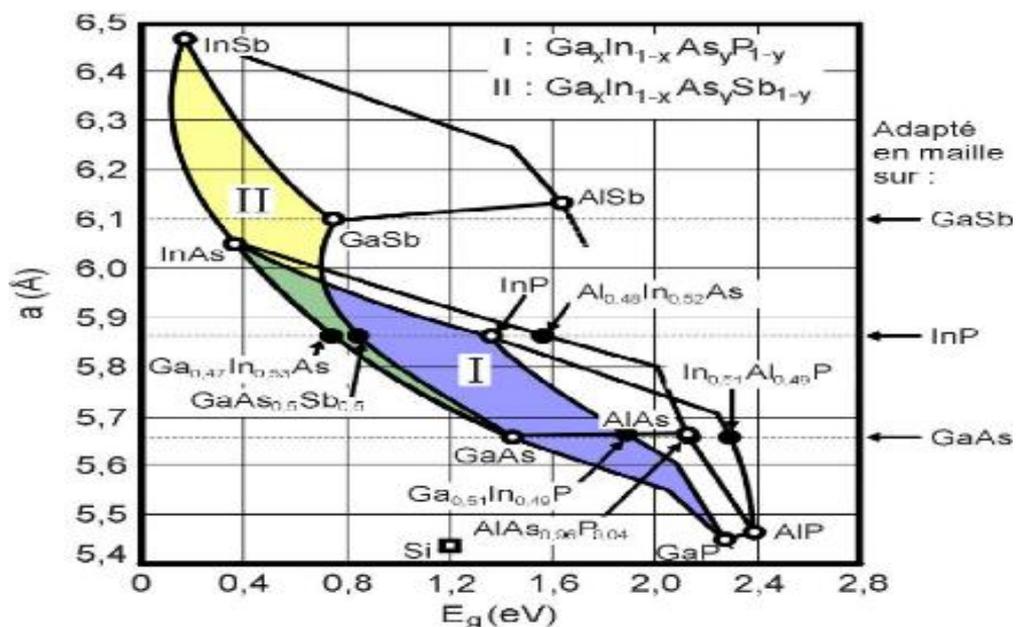


Figure 1.4. Evolutions de l'énergie de bande interdite et du paramètre cristallin des alliages de composés III-V [11].

Les matériaux III-V offrent donc une grande variété de compositions permettant de modifier leurs propriétés électroniques [11].

1.2.6 Gap direct et gap indirect

Pour un cristal semi-conducteur, le maximum de la bande de valence et le minimum de la bande de conduction sont caractérisés par une énergie E et un vecteur d'onde \vec{k} . Dans l'espace réciproque, si ce maximum et ce minimum correspondent à la même valeur de \vec{k} : on dit que le semi-conducteur est à gap direct. Si au contraire, ce maximum et ce minimum correspondent à des valeurs de \vec{k} différentes : on dit que le semi-conducteur est à gap indirect; c'est le cas du silicium et du germanium. Cette distinction entre matériaux semi-conducteurs à gap direct ou indirect est importante, particulièrement pour les applications optoélectroniques qui mettent en jeu à la fois des électrons et des photons. On distingue deux types de gap figure 1.5, suivant lesquels les matériaux Semi-conducteurs se divisent : à gap direct et à gap indirect.

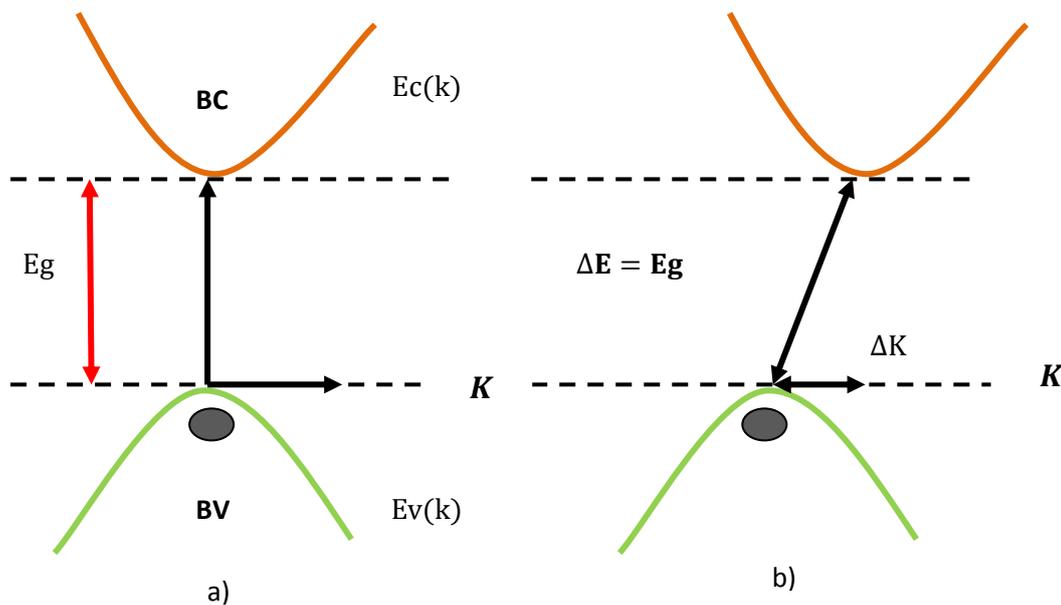


Figure 1.5. Le gap direct (a) et le gap indirect (b) où \vec{K} est le vecteur d'onde associé à un électron

1.2.7 Les hétérostructures

Différents types de semi-conducteurs, tels que les composés III-V ou II-VI et leurs alliages respectifs, peuvent être épitaxiés les uns sur les autres pour former différents

types d'hétérostructures. Considérons une hétérostructure constituée d'une couche de semi-conducteur (SC1) d'épaisseur L_1 en sandwich entre deux couches d'un semi-conducteur SC2 tel que $E_{g1} < E_{g2}$.

Le diagramme énergétique de la structure est représenté sur la Figure 1.6.

- Dans le cas de la Figure 1.6.a, les extrema des bandes de valence et de conduction sont situés dans le même matériau, c'est-à-dire dans la même région de l'espace ; ces hétérostructures sont dites de type I.
- Dans le cas de la Figure 1.6.b, ces extrema sont spatialement séparés, ces hétérostructures sont dites de type II.

Il est évident que ces deux types d'hétérostructures présentent des propriétés différentes [12].

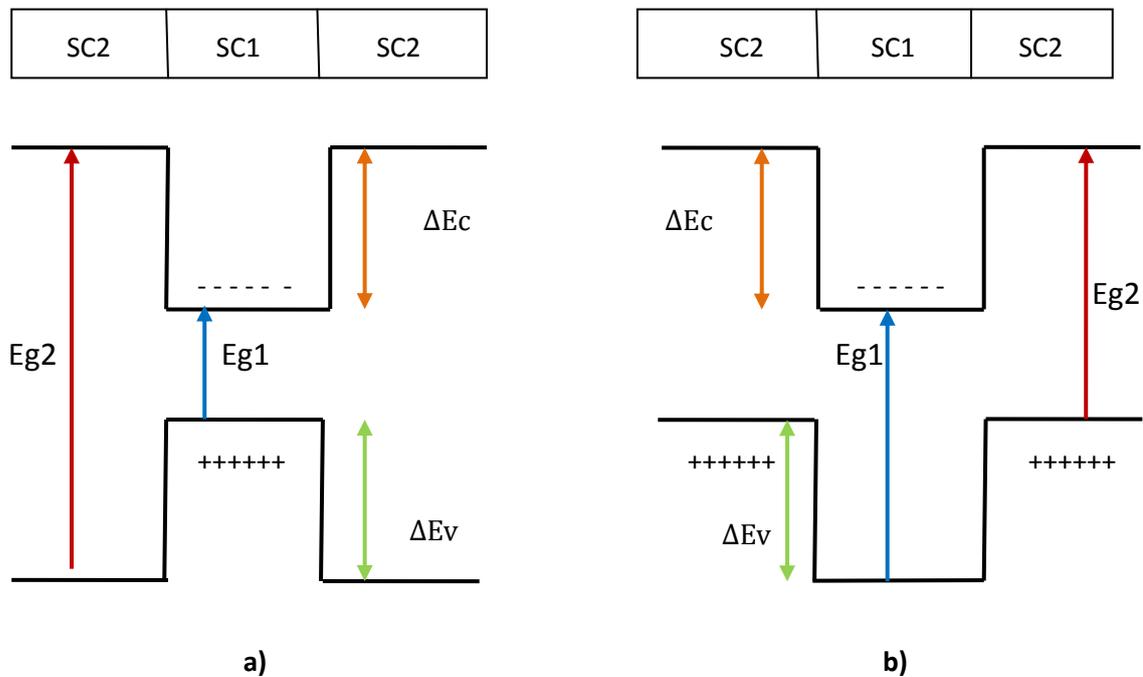


Figure 1.6. Configuration des bandes de conduction et de valence dans une hétérostructure de type I (a) et une hétérostructure de type II (b).

Il est évident que ces deux types d'hétérostructures présentent des propriétés différentes. Si des porteurs sont injectés dans la structure, ces porteurs sont confinés dans les puits de potentiel que constituent les extrema des bandes. Dans l'hétérostructure de type I les électrons et les trous sont piégés dans le même semi-conducteur (SC1), et leurs recombinaisons seront importantes. Tandis que dans l'hétérostructure de type II les

électrons et les trous sont spatialement séparés et ces recombinaisons seront beaucoup moins probables [12].

1.3 Physique du laser

La connaissance des règles fondamentales des lasers est essentielle et permette l'explication des résultats est tenus de la modélisation. Donc l'objet de cette section est de rappeler la physique du laser et de donner quelques brèves définitions des différentes structures lasers à puits quantiques qui seront par la suite exploitées dans la partie calcul.

1.3.1 Définition

Le terme "**laser**" est un acronyme qui signifie amplification de lumière par émission stimulée (**L**ight **A**mplification by **S**timulated **E**mission of **R**adiation). Tout laser est constitué de trois éléments : un milieu amplificateur, une cavité résonante et une source de pompage. Le milieu amplificateur est un milieu optiquement actif qui transforme en photons l'énergie injectée par le pompage et dans lequel il y a du gain (émission stimulée).

1.3.2 Emissions spontanée et stimulée

Dans un système à deux niveaux, un photon ayant une énergie égale à l'énergie E séparant les niveaux peut être absorbé pour conduire l'électron du niveau fondamental à l'état excité. Si aucun photon n'arrive avec cette énergie pendant que l'électron se trouve dans cet état, l'électron relaxe son excès d'énergie E spontanément au bout d'un certain temps, en émettant un photon de phase et de direction aléatoires. C'est le phénomène d'émission spontanée.

Par contre quand l'électron se trouve dans un état excité et qu'un photon d'énergie E arrive, une autre possibilité de recombinaison radiative est possible: l'émission stimulée. Voir la (figure 1.7).

Dans un semi conducteur massif, ce sont les bandes de conduction et de valence qui vont jouer le rôle d'état fondamental et d'état excité. Ces deux bandes sont séparées par une énergie appelée énergie de bande interdite E_g .

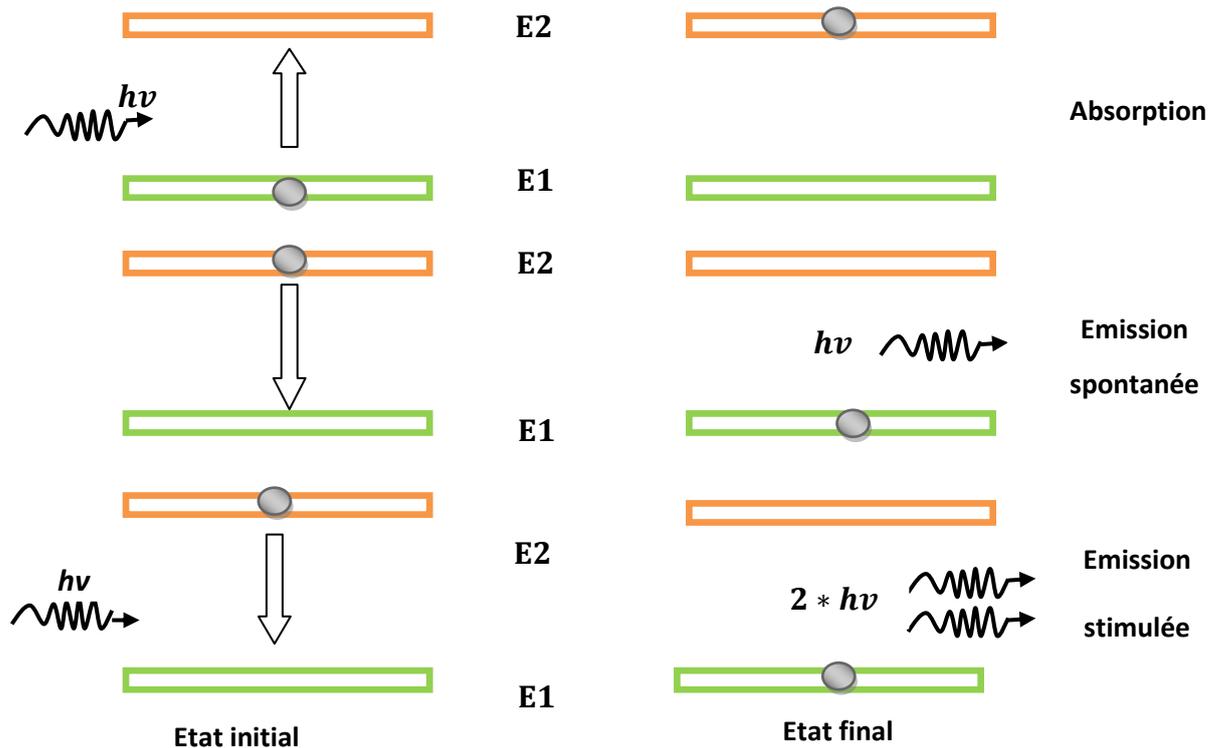


Figure 1.7. Illustration des trois mécanismes d'interaction du photon avec un système à deux niveaux.

1.3.3 Principe d'inversion de population

Dans un corps à l'équilibre thermique à température ambiante il n'y a pratiquement pas d'atomes à l'état excité. Ainsi un rayonnement incident a une probabilité très voisine de zéro de provoquer une émission stimulée, et une probabilité très voisine de un d'être absorbé. Donc pour avoir une émission stimulée importante, il faut que la population d'atomes excités (N_2) du corps stimulé soit supérieure à la population d'atomes à l'état fondamental (N_1) c'est-à-dire $N_2 > N_1$. Ceci sera réalisé, hors de l'équilibre thermique, par une excitation « pompage », c'est le principe de pompage qui produit l'inversion de population [13].

1.4 L'effet laser

Les semi-conducteurs qui possèdent une bande interdite de type directe autorisant l'émission lumineuse ont été intensément étudiés. Ils sont nombreux et selon l'énergie de cette bande interdite, ils émettent dans un très large éventail de longueurs d'onde :

de l'Ultra-violet (0.2 nm) à l'Infrarouge (30 nm). L'effet laser se, produit lorsque, d'une part, l'émission stimulée devient prépondérante par rapport à l'émission spontanée (inversion de population) et, d'autre part, le gain dans le milieu amplificateur devient supérieur aux pertes optiques dans la cavité :

- Pertes par propagation.
- Pertes par réflexions sur les miroirs.

Dans le cas d'un laser à semi-conducteurs, il existe trois types de pompage couramment utilisés

1.4.1 Le pompage optique

Le matériau laser est pompé par une excitation optique : soit un flash lumineux très intense soit un autre laser de longueur d'onde plus courte appelé laser de pompe. C'est la technique utilisée dans le premier laser fabriqué en 1960 (laser à rubis) [14].

1.4.2 Le pompage par injection électrique

La technique standard utilisée dans les diodes lasers. L'excitation se fait par un courant électrique circulant entre des régions dopées n et p de la diode laser, Le premier laser semi conducteur fonctionnant par injection de courant. Il s'agissait d'une jonction PN en GaAs.

1.4.3 Le pompage électronique

Ce type de pompage est basé sur le même principe que la cathode luminescence ; un faisceau d'électrons accélérés sous une tension de l'ordre d'une dizaine de kilo volts est utilisé pour exciter le milieu actif [15].

1.5 Caractéristique de la lumière laser

Un faisceau laser est unidirectionnel, intense, monochromatique et cohérent

1.5.1 Unidirectionnel

Le faisceau se dirige dans une direction unique. Cependant, il peut y avoir une divergence de 1 degré d'arc provoquée par la diffraction lorsque le faisceau se propage

dans un milieu, ainsi, le diamètre du faisceau peut augmenter jusqu'à 1mm par mètre parcouru. La divergence d'un faisceau laser dans l'aire est :

$$\theta = \frac{\lambda}{w_0} \quad (1.1)$$

1.5.2 Intense

Les lasers émettent une lumière très intense, bien que certain laser semble peu puissant (quelque milliwatts) leur lumière est concentrée sur une toute petit surface parfois d'à peine quelques millimètres carrés. C'est pourquoi il est très important de ne jamais recevoir un faisceau directement dans les yeux, ce qui pourrait provoquer une cécité permanente en endommageant la rétine.

1.5.3 Monochromatique

Contrairement à la lumière émise par le soleil ou par une ampoule à incandescence qui est polychromatique (constituée de plusieurs longueurs d'onde), la lumière produite par un laser est monochromatique. Elle contient très peu de longueurs d'onde d'opération du laser [16].

1.5.4 Cohérent

La lumière produite par un laser est ordonnée dans le temps et dans l'espace. Ainsi, chaque photon qui la compose oscille en même temps de la même manière. La directivité de la lumière laser est d'ailleurs une conséquence de sa cohérence. Dans un laser, la lumière est produite par émission simultanée: deux atomes voisins se comportent alors comme des sources cohérentes, propriété qui confère à la lumière laser sa grande cohérence. Cette grande cohérence est utilisée:

- en laboratoire: hologrammes, mesures,
- dans la vie quotidienne: lecture de CD ou de DVD

1.6 Choix du matériau $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_{1-y}\text{Bi}_y$

Les composés III-V permettent de balayer une large plage de valeurs du gap, ce qui offre la possibilité de couvrir un large spectre de longueurs d'ondes, constituant ainsi, une propriété très importante du point de vue de l'optique [17].

L'intérêt pratique des matériaux III-V est renforcé par la possibilité de fabriquer des alliages ternaires et quaternaires par substitution partielle de l'un des éléments par un élément de la même colonne [17].

L'incorporation du bismuth et d'indium dans GaAs peut réduire considérablement la concentration d'indium nécessaire pour diminuer la largeur de la bande interdite. 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 [18].

Le quaternaire utilise l'effet cumulé de diminution de l'énergie de la bande interdite par l'indium et Bismuth, ce qui autorise une grande flexibilité en terme de cette énergie et d'états de contrainte, permettant ainsi la réalisation des composés à très faible courant d'obscurité. [18].

1.7 Etude des paramètres électronique

Plusieurs paramètres de l'alliage InGaAsBi peuvent être déterminés par l'interpolation linéaire des paramètres binaires parents qui le composent, cette interpolation est appelée loi de Vegard, elle est donnée par l'expression suivante pour le quaternaire $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_{1-y}\text{Bi}_y$ [19] :

$$p(x,y) = x(1-y) * p_{\text{InAs}} + x * y * p_{\text{InBi}} + (1-x) * (1-y) * p_{\text{GaAs}} + (1-x) * y * p_{\text{GaBi}} \quad (1.2)$$

Où $p(x, y)$ est le paramètre à déterminer.

1.7.1 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 [20]. Les paramètres de maille des principaux semi-conducteurs sont donnés dans l'annexe B.

1.7.2 La contrainte

L'épitaxie de matériaux désaccordés est devenue bien maîtrisée, grâce notamment aux progrès accomplis au niveau des techniques de croissance. Ainsi, l'accord de maille n'est plus un impératif, mieux encore les effets des contraintes sont exploités dans plusieurs composants électroniques et optoélectroniques performants. En effet, l'utilisation d'hétérostructures à contrainte permet d'ajuster la longueur d'onde d'émission, en modifiant les positions en énergie des bandes de valence et de conduction. L'épitaxie du matériau $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_{1-y}\text{Bi}_y$ sur GaAs de paramètre de maille initialement différent provoque une contrainte. Le substrat de paramètre de maille a_s différent de celui de la couche épitaxiée a_e , impose sa maille à cette dernière, cette différence de maille provoque une déformation de la couche épitaxiée, soit en tension ou en compression par des déformations biaxiales ε_{\parallel} (ε_{yy} et ε_{zz}) et ε_{\perp} uniaxiale (ε_{xx}). Les déformations sont données par [21] :

- dans le plan de la couche :

$$\varepsilon_{\parallel} = \frac{a_s - a_e}{a_e} \quad (1.3)$$

- dans la direction de croissance :

$$\varepsilon_{\perp} = \frac{a_{\perp} - a_e}{a_e} \quad (1.4)$$

où :

La condition nécessaire à une bonne hétéro-épitaxie est évidemment que les deux matériaux aient la même structure cristalline.

Lorsque les paramètres de mailles sont différents, le matériau constituant la couche de plus grande épaisseur impose sa maille à l'autre, au moins au voisinage de l'interface. Ceci entraîne l'existence, dans le matériau de faible épaisseur, d'une contrainte biaxiale dans le plan des couches [22]. Prenons le cas des deux cristaux comme le montre la figure 1.8(a.b).

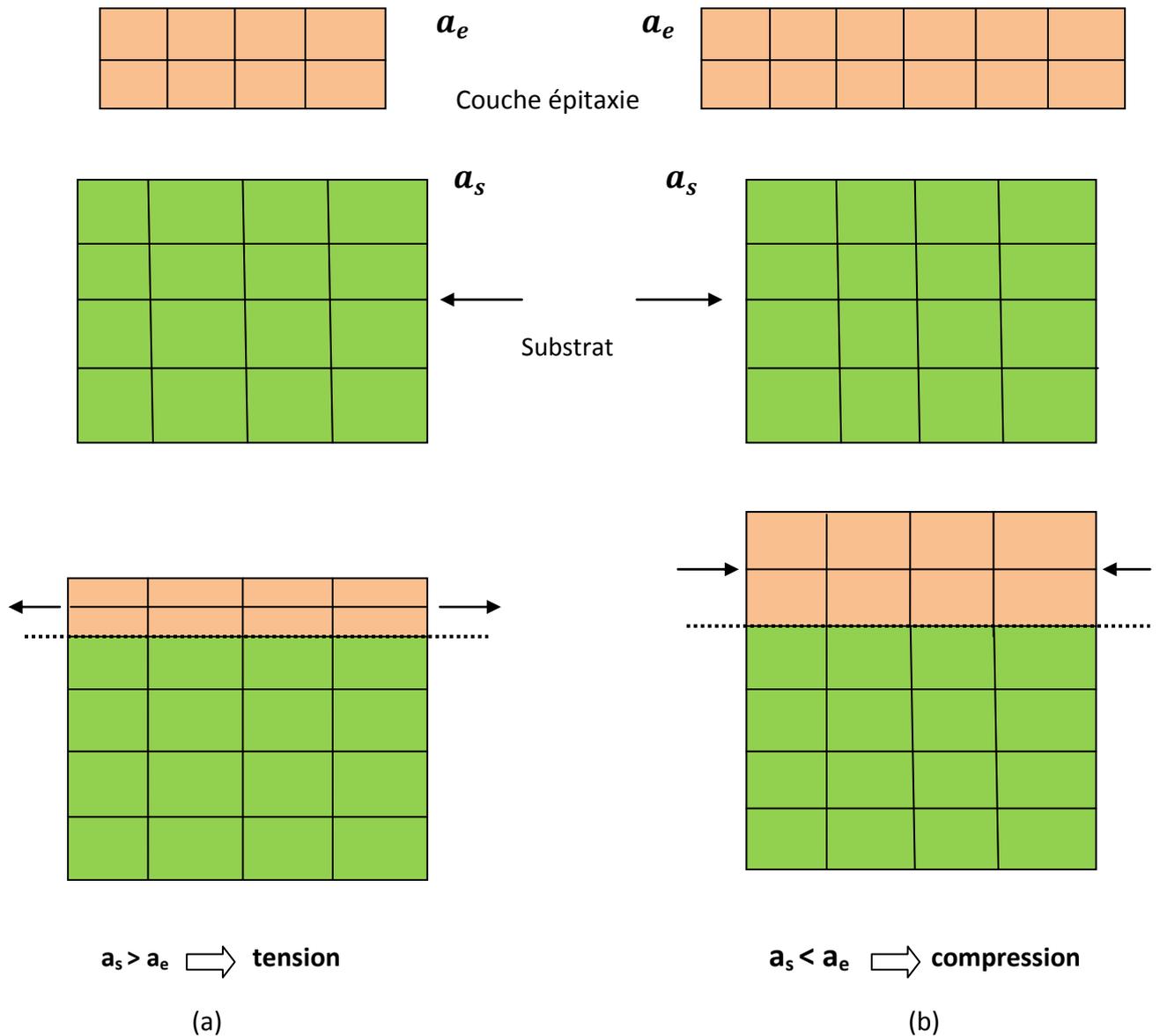


Figure 1.8 (a.b). Illustration des deux types de contraintes.

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

1.7.3 Epaisseur critique

L'épaisseur au-delà de laquelle la couche épitaxie commence à relaxer est appelé épaisseur critique figure 1.9 (a.b). Cette épaisseur critique dépend des propriétés mécaniques des matériaux (coefficients élastiques), ainsi que du degré de désaccord paramétrique (équation 1.4) entre le substrat et la couche épitaxie. Si l'épaisseur de la couche épitaxie dépasse la valeur de l'épaisseur critique, 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 [23].

Pour calculer l'épaisseur critique de notre système. On a utilisé le modèle le plus classique, celui de K. Koksai et B. Gonul [24], Qui traite le cas d'un matériau faiblement désaccordé par rapport au substrat (désaccord de maille <2%). Il définit l'épaisseur critique comme l'épaisseur à partir de laquelle une dislocation initialement présente à l'interface de contact se propage latéralement sous l'effet du champ de contrainte. La valeur de l'épaisseur critique h_c qui en résulte dans le cas d'un matériau de structure sphalérite (blende de zinc) épitaxié sur la surface (001) est donnée par l'équation suivante [24] :

$$h_c = \frac{a_{ep}}{k \cdot \pi \cdot \varepsilon_{\parallel} \sqrt{2}} \times \frac{1 - (0.25 \cdot \gamma)}{(1 + \gamma)} \times \ln \left(\frac{h_c \cdot \sqrt{2}}{a_e} + 1 \right) \quad (1.5)$$

ε_{\parallel} : Désaccord paramétrique.

γ : Coefficient de Poisson donné par : $\gamma = \frac{C_{11}}{C_{11} + C_{12}}$

C_{ij} : Les coefficients élastiques (cm^{-2}), obtenus par l'interpolation linéaire des binaires GaAs, InAs, GaBi, InBi [Annexe A].

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

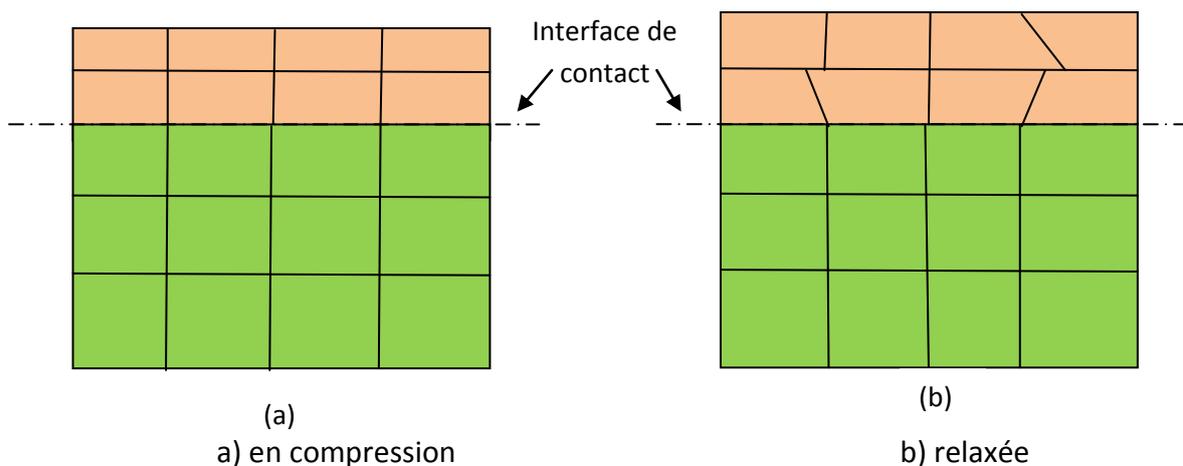


Figure 1.9 (a.b). Illustration d'une couche contrainte

1.8 Effet de la contrainte sur le gap

Pour la description de l'effet de la contrainte sur la structure de bande nous avons utilisé le modèle de Van et Walle et le formalisme de Krijin [25]. Les deux composantes parallèle et perpendiculaire du tenseur de la déformation peuvent être définies de la manière suivante :

$$\varepsilon_{\parallel} = \frac{a_s - a_e}{a_e}$$

$$\varepsilon_{\perp} = \frac{a_{\perp} - a_e}{a_e} \quad (1.6)$$

L'effet de la contrainte biaxiale sur la structure de bandes de la couche épitaxiée est illustré sur la figure 1.10. Cette figure 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.

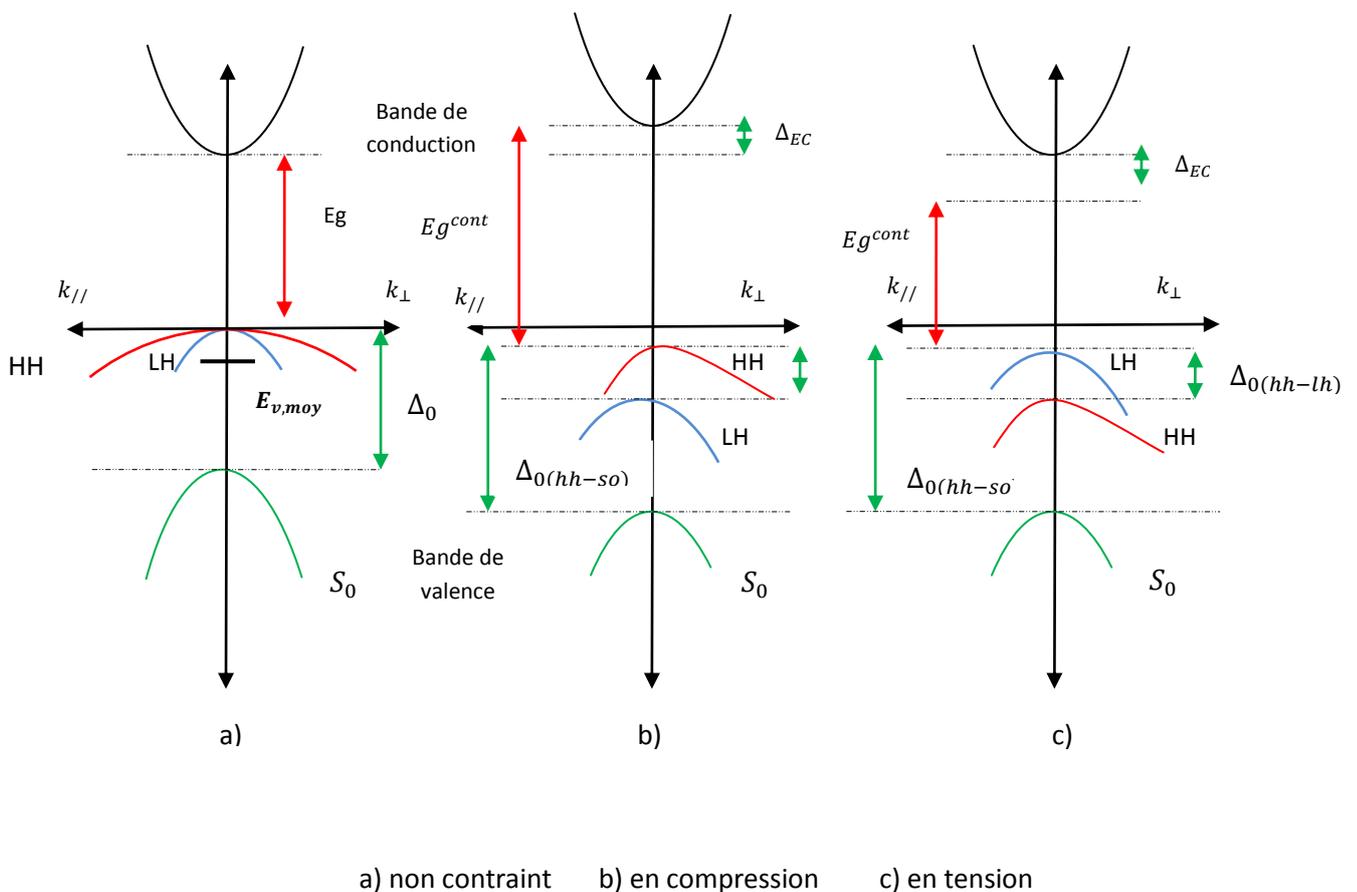


Figure 1.10. Structure de bande d'un semi-conducteur à gap direct.

En absence de contrainte, les bandes des trous lourds et des trous légers sont isotropes et dégénérées, et la bande de trous spin-splittée est située à une énergie en dessous de ces deux bandes. Le centre de gravité de la bande de valence d'énergie moyenne se trouve par conséquent au dessous du haut de la bande de valence en $k=0$, figure 1.10.a.

$$E_{V,moy} = \frac{E_{HH} + E_{LH} + \Delta_0}{3} \quad (1.7)$$

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.

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

- La composante hydrostatique : liée à la déformation selon l'axe de croissance (Oz), qui provoque un décalage du centre de gravité de la bande de valence ainsi que du centre de gravité de la bande de conduction ;
- La contrainte de cisaillement : qui lève la dégénérescence des états énergétique des trous lourds et des trous légers en $k=0$

Pour une couche soumise à une contrainte bi-axiale de compression (figure 1.10.b), la composante hydrostatique augmente le gap moyen entre les bandes de conduction et de valence, alors que la composante de cisaillement rends les bandes de valence fortement anisotropes [26]: la bande de plus haute énergie (improprement appelée bande HH) devient lourde selon k_{\perp} et légère selon $k_{//}$. La bande d'énergie inférieure (improprement appelée bande LH) devient elle légère selon k_{\perp} et lourde selon $k_{//}$.

Si la couche est soumise à une contrainte bi-axiale de tension (figure 1.10.c), le gap moyen diminue et les bandes de valences sont inversées par rapport à celles d'une couche en compression, la bande de plus haute énergie (bande LH) restant légère selon k_{\perp} , et lourde selon $k_{//}$ [26].

1.8.1 Les décalages énergétiques des bandes

Les décalages en énergie des centres de gravité de la bande de valence et de la bande de conduction en $k=0$ varient proportionnellement à la contrainte [26]:

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

$$\Delta E_c^{hy} = a_c(2\varepsilon_{\parallel} + \varepsilon_{\perp}) \quad (1.9)$$

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

Les décalages énergétiques induits par la contrainte de cisaillement pour chacune des bandes constituant la bande de valence sont les suivants [25]:

$$\Delta E_{hh}^{cisa} = -\frac{1}{2} \times \delta E^{cisa} \quad (1.10)$$

$$\Delta E_{lh}^{cisa} = -\frac{1}{2} \Delta_0 + \frac{1}{4} \delta E^{cisa} + \frac{1}{2} \cdot \sqrt{\Delta_0^2 + \Delta_0 \delta E^{cisa} + \frac{9}{4} (\delta E^{cisa})^2} \quad (1.11)$$

$$\Delta E_{so}^{cisa} = -\frac{1}{2} \Delta_0 + \frac{1}{4} \delta E^{cisa} - \frac{1}{2} \cdot \sqrt{\Delta_0^2 + \Delta_0 \delta E^{cisa} + \frac{9}{4} (\delta E^{cisa})^2} \quad (1.12)$$

Avec :

$$\delta E^{cisa} = 2 \cdot b \cdot (\varepsilon_{\parallel} + \varepsilon_{\perp}) \quad (1.13)$$

où b : est le potentiel de déformation tétragonale.

En prenant comme référence énergétique (équation 1.7), et compte tenu des équations (1.8), (1.9), (1.10), (1.11), on peut définir l'énergie du haut de la bande de valence et l'énergie du bas de la bande de conduction.

L'énergie du haut de la bande de valence est :

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

L'énergie du bas de la bande de conduction est :

$$E_c = E_{v,moy} + \frac{\Delta_0}{3} + E_g + \Delta E_c^{hyd} \quad (1.15)$$

Dans ces expressions, l'éclatement Spin-orbite et l'énergie de gap sont relatifs au matériau non contraint. via les équations (1.14) et (1.15) on peut déterminer l'équation du Gap contraint :

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

Pour une couche soumise à une contrainte en compression la bande des trous lourds est au dessus de la bande des trous légers (figure2.10.b) et l'on a :

$$\max(\Delta E_{hh}^{cisa}, \Delta E_{lh}^{cisa}) = \Delta E_{hh}^{cisa}$$

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 (figure2.10.c) et l'on a :

$$\max(\Delta E_{hh}^{cisa}, \Delta E_{lh}^{cisa}) = \Delta E_{lh}^{cisa}$$

Donc l'équation (1.18) devient pour une couche en compression :

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

et pour une couche en tension :

$$E_g^{cont,ten} = E_g + \Delta E_c^{hyd} - \Delta E_{v,moy}^{hyd} - \Delta E_{lh}^{cisa} \quad (1.18)$$

La détermination du Gap contraint nécessite la connaissance du Gap non contraint et l'éclatement spin-orbite de la couche relaxée, les constantes élastiques de la couche, les potentiels de déformation hydrostatique, ainsi que le potentiel de déformation tétragonale b.

1.9 Effet de bismuth sur la bande de valence

Pour déterminer la configuration de la bande de valence après l'incorporation de Bismuth, nous utilisons le modèle d'anticroisement de bandes de valence « VBAC ». Ce modèle est basé sur la fameuse méthode *kp* en considérant six états de valence du

semi-conducteur couplés avec six états de valence des atomes introduits impuretés, la diagonalisation du hamiltonien mène vers six valeurs propres doubles et dégénérées correspondant à deux bandes : une bande supérieure et une bande inférieure [22].

Nous avons utilisé ce modèle pour déterminer l'influence de bismuth sur la bande de valence pour cela nous l'avons appliqué avec l'énergie de localisation du Bi « E_{Bi} » et le paramètre de couplage C_{Bi} [22]. La résolution de l'équation aux valeurs propres en remplaçant le V_{MN} par V_{PQ} et E_N par E_{Bi} permet de déterminer les états propres des trous lourds et des trous légers [22] :

$$E_v^{\pm} = \frac{1}{2} |E_{Bi} + E_v(k) \pm \sqrt{(E_{Bi} - E_v(k))^2 + 4V_{pq}^2}| \quad (1.19)$$

$$V_{PQ} = C_{Bi} \sqrt{y} \quad (1.20)$$

Où :

- $E_{Bi} = -0.4$ eV.
- $C_{Bi} = 1.6$.
- y : Concentration de bismuth.

avec :

$$E_v = \begin{cases} E_{v,moy} + \frac{\Delta_{SO}}{3} + \delta E_{HH} & , \text{ pour trous lourds.} \\ E_{v,moy} + \frac{\Delta_{SO}}{3} + \delta E_{LH} & , \text{ pour trous légers.} \end{cases} \quad (1.21)$$

avec $E_{v,moy}$ et Δ_{SO} est l'énergie moyenne de la bande de valence et l'énergie de spin orbite, respectivement. $(\delta E_{HH}, \delta E_{LH})$ Est le décalage du haut de la bande de valence contrainte par rapport à celui de non contraint, ce qui conduit à l'éclatement de la bande de valence.

1.10 Etude des puits quantiques

Un puits quantique est formé par une fine couche (quelques nm) d'un matériau semi-conducteur de faible gap entouré de matériaux de plus grand gap. Voir la (figure 1.11). 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. L'utilisation de puits quantiques au sein de la zone active engendre un confinement des électrons et des trous dans un plus faible volume,

ce qui pour une injection donnée, permet d'augmenter la densité des porteurs et atteindre l'inversion de population plus facilement.

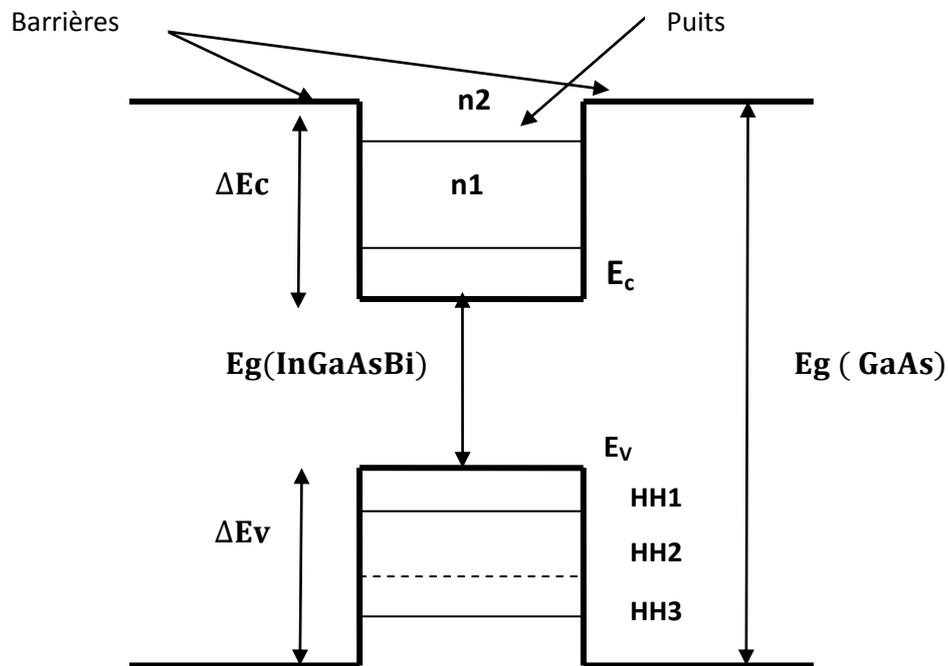


Figure 1.11. Puits quantique

Trois types de puits quantiques existent :

a Puits quantique de type-I

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

b Puits quantique de type-II

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

c Puits quantiques de type-III

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

1.11 Les états énergétiques dans un puits quantique

Dans un puits quantique, les porteurs de charge son confinés a des niveaux énergétiques différents, pour définir ces valeurs propre d'énergie, on étudie le comportement d'une particule confinée dans un puits de potentiel unidimensionnel et d'une largeur L selon la direction de l'axe x. L'équation de Schrödinger indépendante du temps peut être écrite [27]

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2\varphi(x)}{dx^2} + V(x)\varphi(x) = E\varphi(x) \quad (1.22)$$

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.

1.11.1 Puits de profondeur infinie

Pour une particule dans un puits infiniment profond de longueur « L » figure 1.12, ou le potentiel est nul à l'intérieur du puits est vaut l'infini à l'extérieur, quelque soit l'énergie de cette dernière elle reste confinée dans le puits.

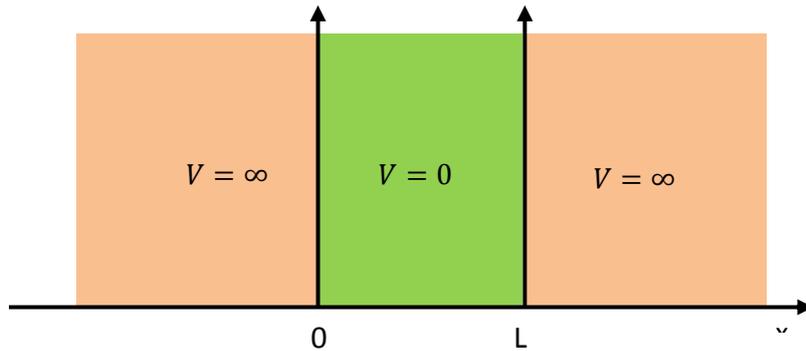


Figure 1.12. Puits de potentiel rectangulaire infiniment profond

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 des puits (ou $V = \infty$), le produit $V(x) \cdot \varphi(x)$ doit être nul et cela n'est possible que pour $\varphi(x) = 0$.

Dans le puits ($0 < x < L$), le potentiel est nul, l'équation (1.22) devient

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2\varphi(x)}{dx^2} = E\varphi(x) \quad (1.23)$$

Les solutions de cette équation différentielle sont de la forme :

$$\varphi(x) = \sin kx$$

$$\varphi(x) = \cos kx$$

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

L'équation (1.23) a comme solution générale :

$$\varphi(x) = A \sin kx + B \cos kx \quad (1.24)$$

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

- Première barrière :

➤ Au point 0 (coté V infini)

$$\varphi(0) = 0 \quad (a1)$$

➤ Au point 0 (coté V nul)

$$\varphi(0) = A \sin 0 + B \cos 0 = B \quad (a2)$$

Donc des équations a1 et a2 on obtient

$$B = 0$$

- deuxième barrière :

➤ Au point L (coté V infini)

$$\varphi(L) = 0 \quad (b1)$$

➤ Au point L (coté V nul)

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

Et comme B=0 on obtient :

$$\varphi(L) = A \sin kL \quad (b2)$$

De b1 et b2, on aura :

$$A \sin kL = 0$$

A ne peut pas être nul, si on suppose $A = 0$, la fonction d'onde sera nul sur tout l'espace x, 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 :

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \frac{\hbar^2 n^2 \pi^2}{2mL^2} ; n = 1, 2, \dots, \infty \quad (1.25)$$

L'énergie est quantifiée, l'état d'énergie le plus bas dans le puits appelé état fondamental pour $n=1$, et les états d'énergie pour $n>1$ sont appelés états excités.

1.11.2 Puits quantique de profondeur finie

Le potentiel carré délimite les trois régions suivantes :

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

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

$$\begin{cases} (d^2\Psi_1/dz^2) - K_2^2\Psi_1 = 0 \\ (d^2\Psi_2/dz^2) - K_1^2\Psi_2 = 0 \\ (d^2\Psi_3/dz^2) - K_2^2\Psi_3 = 0 \end{cases} \quad (1.26)$$

Avec :

$$\begin{cases} K_1 = \frac{\sqrt{2m_1^*E}}{\hbar} \\ K_2 = \frac{\sqrt{2m_2^*(V_0 - E)}}{\hbar} \end{cases} \quad (1.27)$$

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 :

$$\begin{aligned} \Psi_1 &= A_1 e^{K_2 z} + B_1 e^{-K_2 z} \\ \Psi_2 &= A_2 e^{jK_1 z} + B_2 e^{-jK_1 z} \\ \Psi_3 &= A_3 e^{K_2(z-L_1)} + B_3 e^{-K_2(z-L_1)} \end{aligned} \quad (1.28)$$

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

$$\begin{cases} \Psi_1 = A_1 e^{K_2 z} \\ \Psi_2 = A_2 e^{jK_1 z} + B_2 e^{-jK_1 z} \\ \Psi_3 = B_3 e^{(-K_2(z-L_1))} \end{cases} \quad (1.29)$$

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 $z=0$

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

(1.30)

On obtient

$$\begin{cases} A_1 - A_2 - B_2 = 0 \\ (K_2/m_1^*) \cdot A_1 - j(K_1/m_2^*) \cdot A_2 + j(K_1/m_2^*) \cdot B_2 = 0 \end{cases} \quad (1.31)$$

En $z=L_1$

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

(1.32)

On obtient

$$\begin{cases} A_2 e^{jK_1 L_1} + B_2 e^{-K_1 L_1} - B_3 = 0 \\ j(K_1/m_2^*) \cdot A_2 e^{jK_1 L_1} - j(K_1/m_2^*) \cdot B_2 e^{-jK_1 L_1} + (K_2/m_1^*) \cdot B_3 = 0 \end{cases} \quad (1.32)$$

D'où le système d'équations

$$\begin{cases} A_1 - A_2 - B_2 = 0 \\ (K_2/m_1^*) \cdot A_1 - j(K_1/m_2^*) \cdot A_2 + j(K_1/m_2^*) \cdot B_2 = 0 \\ A_2 e^{jK_1 L_1} + B_2 e^{-K_1 L_1} - B_3 = 0 \\ j(K_1/m_2^*) \cdot A_2 e^{jK_1 L_1} - j(K_1/m_2^*) \cdot B_2 e^{-jK_1 L_1} + (K_2/m_1^*) \cdot B_3 = 0 \end{cases} \quad (1.33)$$

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

$$\begin{vmatrix} 1 & -1 & 0 & -1 \\ K_2/m_1^* & -j(K_1/m_2^*) & 0 & j(K_1/m_2^*) \\ 0 & e^{jK_1L_1} & -1 & e^{-K_1L_1} \\ 0 & j(K_1/m_2^*)e^{jK_1L_1} & K_2/m_1^* & -j(K_1/m_2^*)e^{-jK_1L_1} \end{vmatrix} = 0 \quad (1.34)$$

d'où l'équation :

$$\sqrt{2m_2E_n/\hbar^2} \cdot L_1 = n \cdot \pi + 2 \text{Arc tan}[\sqrt{m_2(V_0 - E_n)/m_1E_n}] \quad (1.35)$$

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 Energie de transition

Dans un puits quantique, les niveaux énergétiques sont quantifiés et l'énergie nécessaire pour qu'un électron passe de la bande de valence vers la bande de conduction appelée l'énergie de transition Figure 1.13 donnée par la relation suivante :

$$E_{tr_{i,j}} = E_g + E_{n_i} + E_{h_j} ; i = 1, 2, \dots, \infty, j = 1, 2, \dots, \infty \quad (1.36)$$

avec

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

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

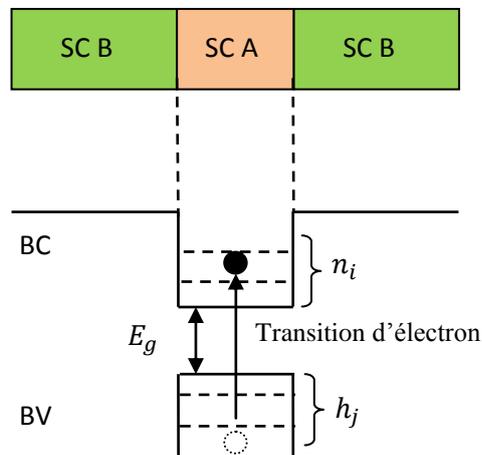


Figure 1.13. Energie de transition dans un puits quantique.

Avec la longueur d'onde d'émission égale :

$$\lambda = \frac{1.24}{E_{tr_{i,j}}} \quad (1.37)$$

1.13 Conclusion

Dans ce chapitre nous avons rappelé quelques notions fondamentales en concernant les semi-conducteurs comme : l'énergie de gap, la structure cristalline, notion de la contrainte et de l'épaisseur critique,....Après, nous avons cité des généralités sur les lasers, ensuite nous avons expliqué le principe de l'émission laser ainsi que les constituants de base d'un laser. Aussi l'étude des propriétés très particulières du matériau quaternaire $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_{1-y}\text{Bi}_y$. Le chapitre suivant, est consacré à la présentation des différents résultats de calcul des paramètres de la structure à puis quantique InGaAsBi/GaAs dans le but de déterminer la longueur d'onde d'émission pour différentes concentrations de bismuth et de l'indium dans le quaternaire $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_{1-y}\text{Bi}_y$.

Chapitre 2 Résultats et discussions

2.1 Introduction

La simulation numérique est toujours utilisée pour décrire le comportement des composants électroniques. Cette méthode nous permet de vérifier des résultats comparables à ceux de l'expérience, de ce fait la simulation numérique est indispensable avant la réalisation des dispositifs. Le but de ce chapitre, est de présenter et interpréter les résultats de simulation de la structure à puits quantique InGaAsBi/GaAs, pour déterminer la concentration de bismuth et d'indium qui résulte la meilleure longueur d'onde d'émission par cette structure.

2.2 Résultat de la simulation des paramètres électronique

2.2.1 Paramètre de maille et désaccord paramétrique

Nous avons tracé le paramètre de maille de $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_{1-y}\text{Bi}_y$ en fonction des concentrations du Bismuth et d'indium sur la figure 2.1, nous pouvons voir que le Bismuth a pour effet de diminuer le paramètre de maille légèrement, et l'indium de l'augmenter rapidement.

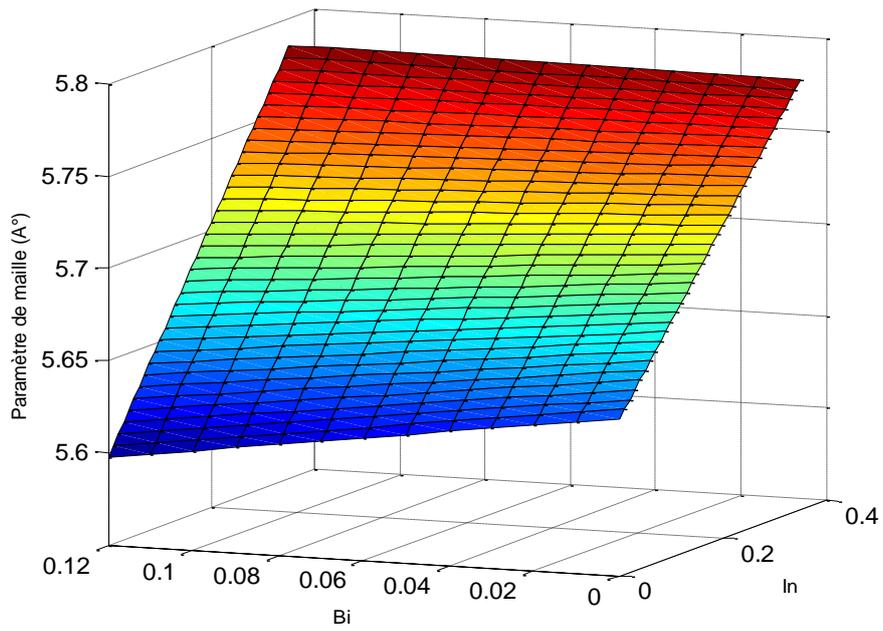


Figure 2.1. Variation du paramètre de maille en fonction de la concentration de bismuth l'indium.

On a calculé le désaccord paramétrique de notre structure $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_{1-y}\text{Bi}_y$ /GaAs par rapport a la variation de la densité du Bismuth et d'indium

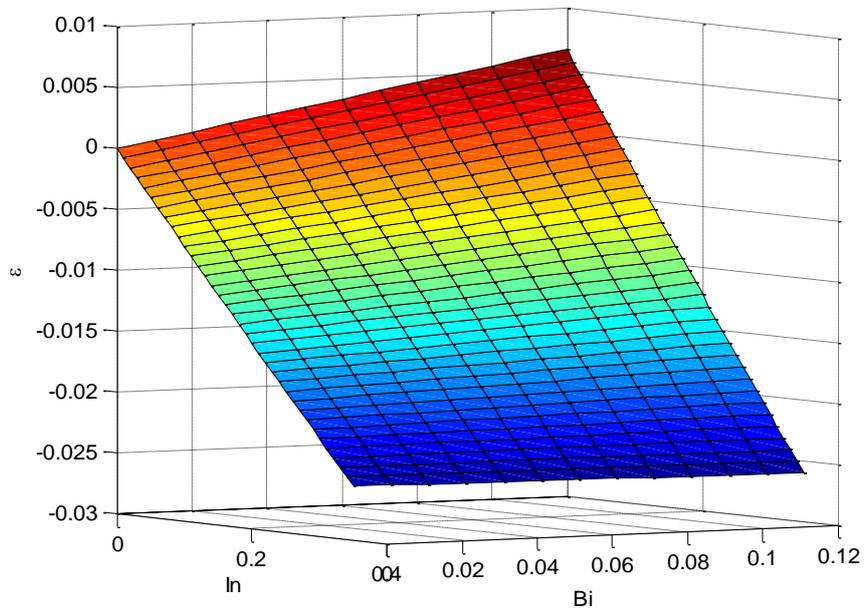


Figure 2.2. Variation du désaccord paramétrique en fonction de la concentration In et Bi

Les Figures 2.2 et 2.3, montrent qu'on obtient une contrainte en compression de 2.2% avec l'augmentation des concentrations de x et y.

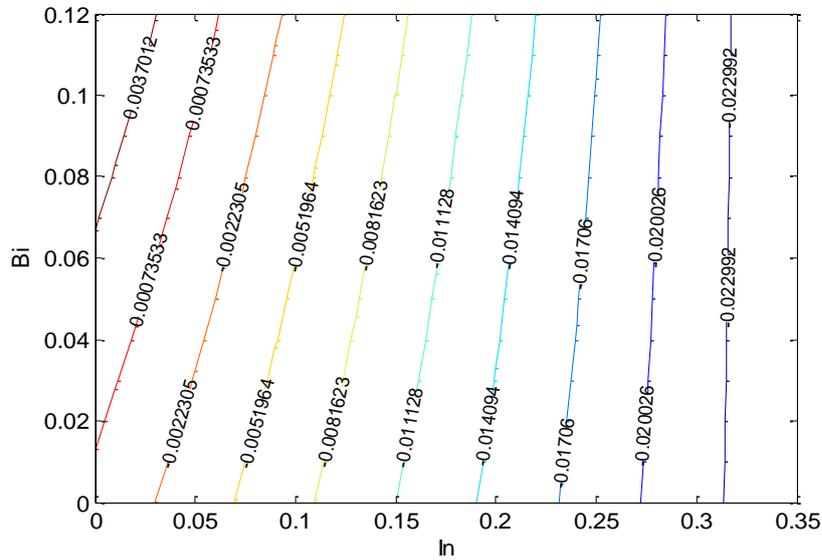


Figure 2.3 Variation du désaccord paramétrique en fonction de la concentration ln et Bi forma isotrope.

2.2.2 Calcul de l'épaisseur critique

Nous avons tracé sur la figure 2.4 la variation de l'épaisseur critique de la structure $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_{1-y}\text{Bi}_y$ avec une couche GaAs en fonction des fractions du Bismuth et d'indium.

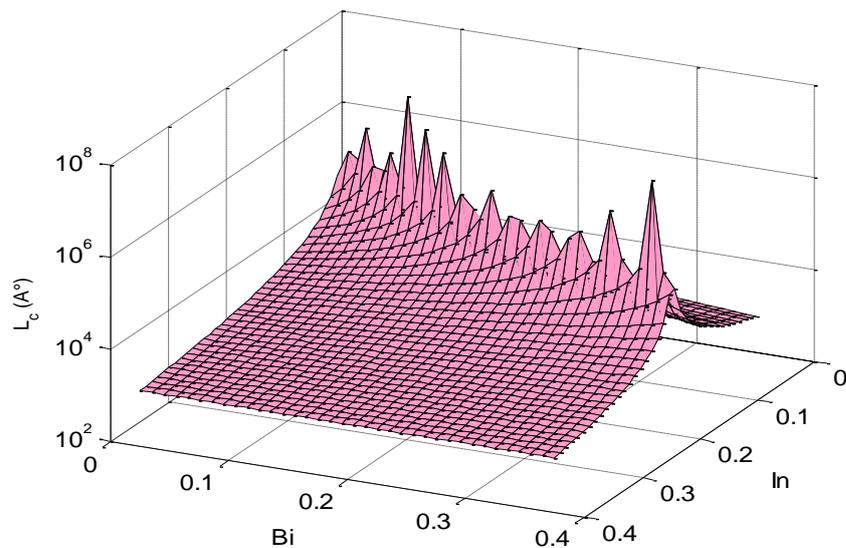


Figure 2.4. Variation de l'épaisseur critique en fonction des fractions d'indium et Bismuth.

Nous constatons que l'indium a pour effet d'augmenter l'épaisseur critique jusqu'à l'accord de maille pour des concentrations bien déterminées, et à partir de (0.15%) d'indium l'épaisseur critique va diminuer, alors que le bismuth le fait augmenter.

2.2.3 Effet de la contrainte sur la bande de conduction et la bande de valence

a Bande de conduction

La Figure 2.5 illustre la variation de l'énergie de la bande de conduction en fonction de la concentration d'indium et de bismuth. On remarque que l'augmentation des concentrations de bismuth et d'indium dans la structure $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_{1-y}\text{Bi}_y$ décroît l'énergie E_c (eV).

Pour $x=0.1, y=0.06$ on a $E_c=0.65$ eV et pour $x=0.1, y=0.02$ $E_c=0.81$, alors $\Delta E_c = 0.16$ eV

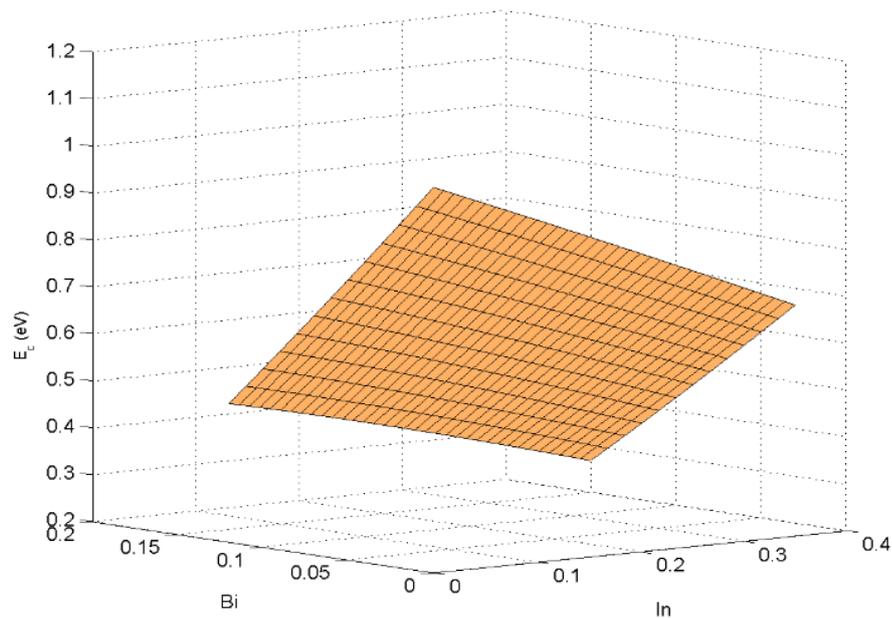


Figure 2.5. Variation de l'énergie de la bande de conduction en fonction des concentrations de Bismuth et d'indium

b Bande de valence

La figure 2.6 représente la variation de l'énergie des sous bandes E_V^- (a) et E_V^+ (b) en fonction de la concentration d'indium et du Bismuth ; on remarque que plus la concentration du Bismuth augmente plus les sous bandes de la bande de valence s'éloignent l'une de l'autre.

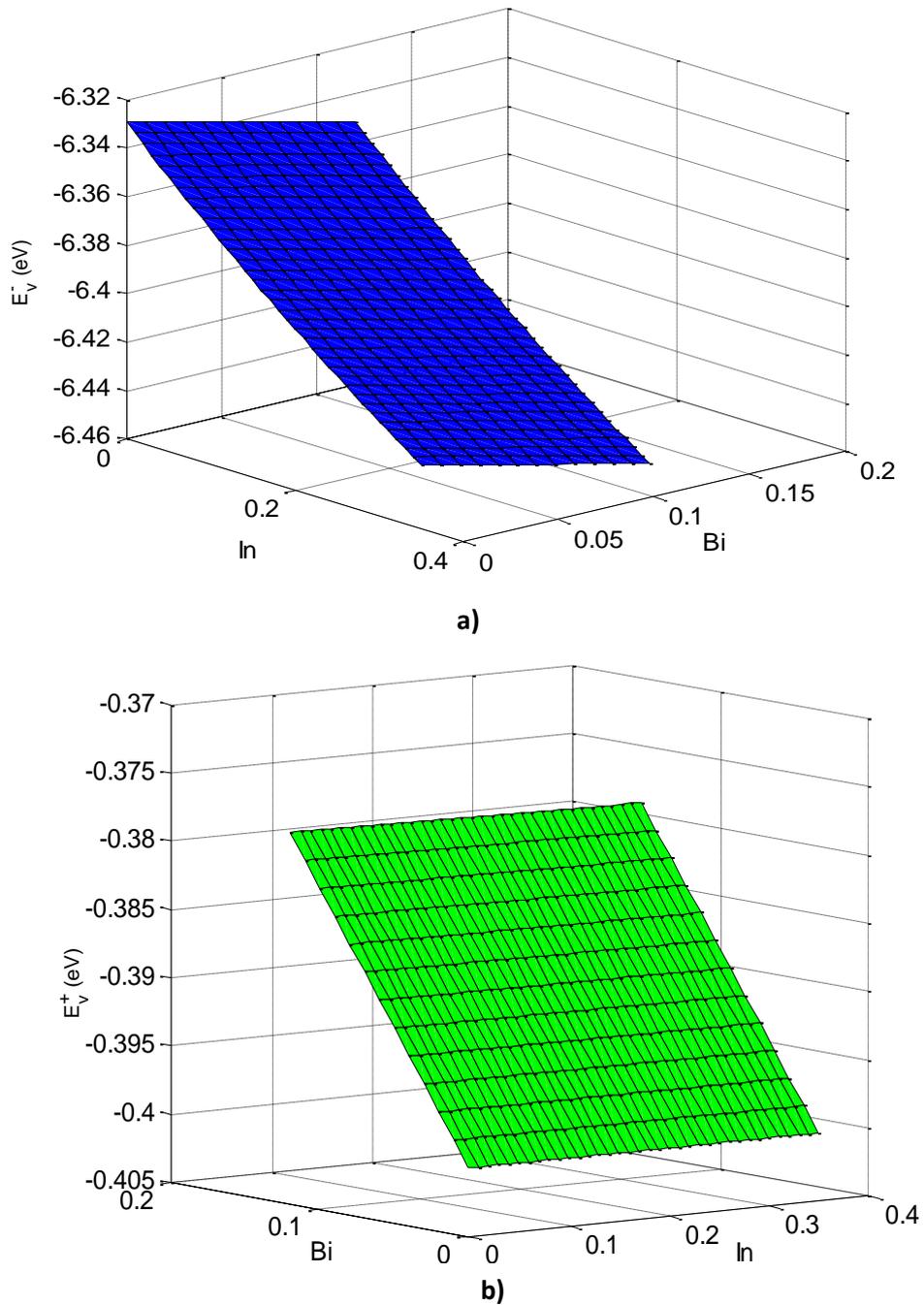


Figure 2.6. Variation de l'énergie des sous bandes (E_V^+ et E_V^-) en fonction de concentration d'indium et du Bismuth de la structure $In_xGa_{1-x}As_{1-y}Bi_y$

2.3 Effet de la contrainte sur le gap

La Figure 2.7 illustre la variation de l'énergie de Gap de $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_{1-y}\text{Bi}_y$ contraint sur un substrat de GaAs, le gap diminue en fonction de l'augmentation de la concentration d'Indium et de bismuth dans la structure, et la contrainte rend les bandes de valence fortement anisotropes, et comme on un accord de maille le Gap des trous lourds ($E_{g_{hh}}$) et inferieur a celui des trous légers ($E_{g_{lh}}$) pour une contrainte compressive

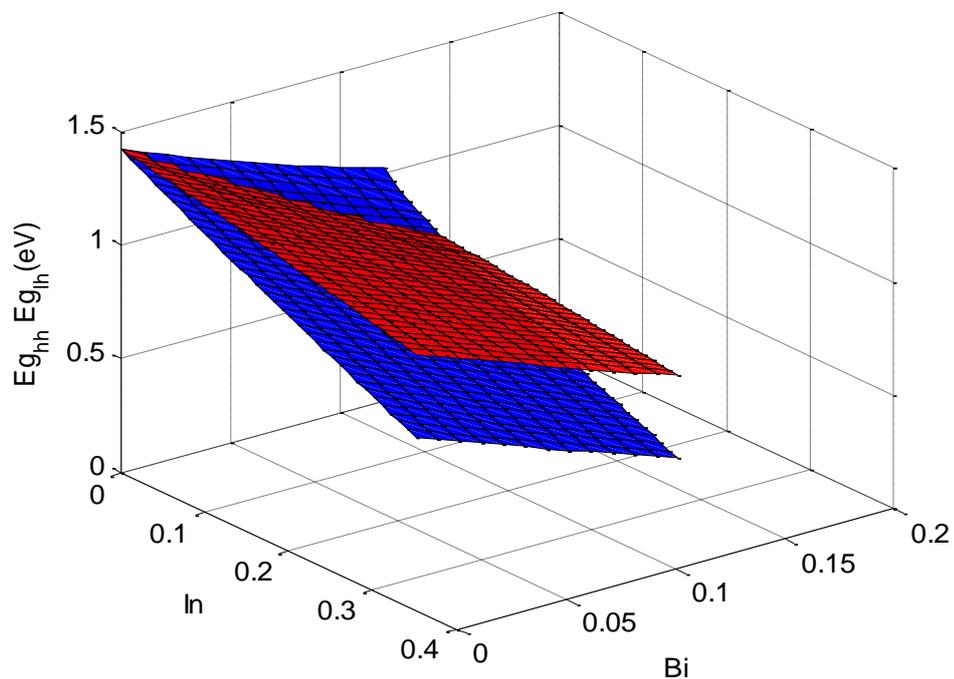


Figure 2.7. $E_{g_{hh}}$, $E_{g_{lh}}$ En fonction de la concentration d'indium et de bismuth

2.4 Barrière de potentiel

La figure 2.8, montre la variation des barrières de potentiel de puits quantique InGaAsBi/GaAs (ΔE_c) en fonction de la concentration de bismuth et d'indium. Dans cette simulation la barrière (ΔE_c) augmente légèrement avec la concentration d'indium et rapidement avec la concentration de bismuth.

On not que pour $x=0.1$ et $y=0.02$ $\Delta E_c = 0.17\text{eV}$

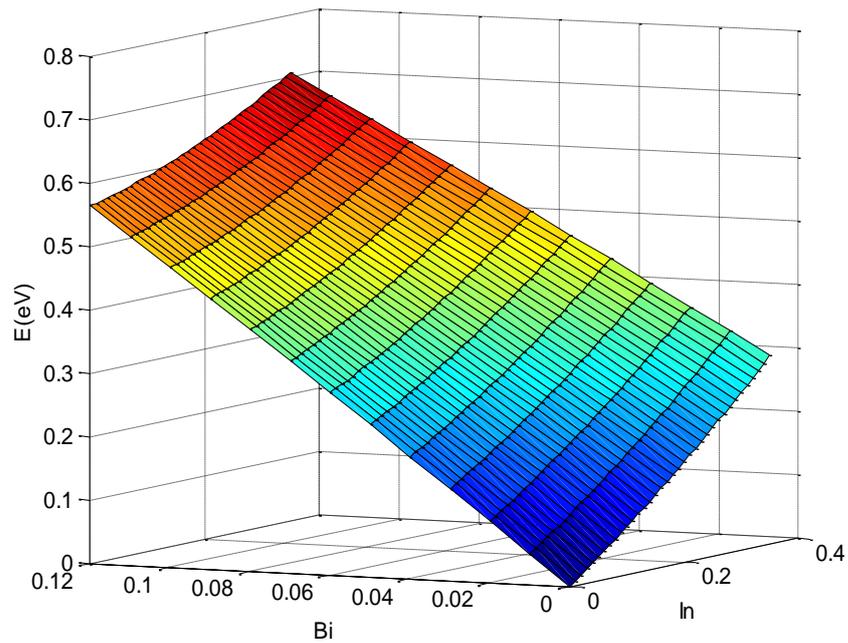


Figure 2.8. La barrière de potentiel de la BC en fonction de la concentration d'indium et de bismuth

Par contre dans la figure 2.9 , montre la variation des barrières de potentiel (ΔE_V) de puits quantique InGaAsBi/GaAs en fonction de la concentration des bismuth et d'indium. Dans cette simulation la barrière diminue légèrement avec la concentration d'indium et rapidement avec la concentration de bismuth.

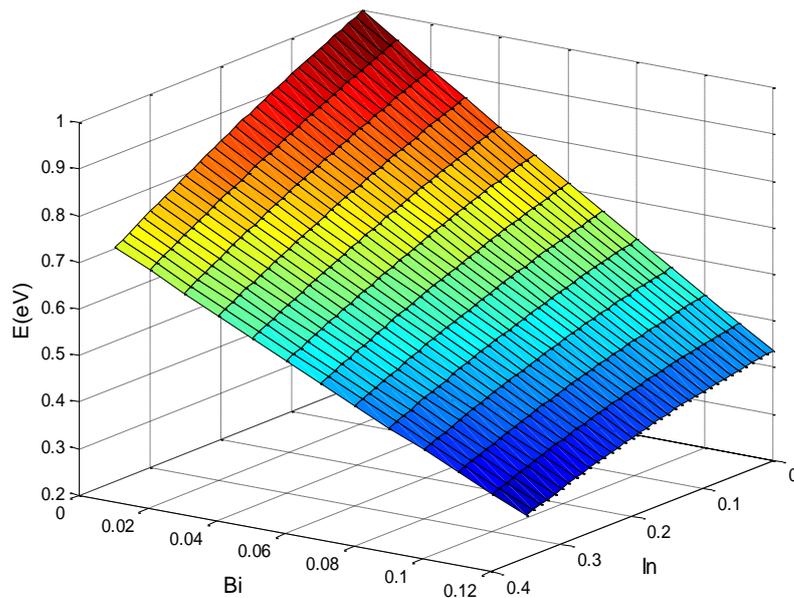


Figure 2.9. Barrière de potentiel de BV en fonction de la concentration d'In et de bismuth

2.5 Taux de confinement des électrons

La figure 2.10 présente le taux de confinement dans le puits quantique InGaAsBi/GaAs en fonction des concentrations du Bismuth et d'indium, on remarque que le taux de confinement de la BV va diminuer rapidement avec l'incorporation de bismuth et la BC augmente. Par contre l'incorporation de l'indium va augmenter la BC légèrement et la BV diminue. Alors le taux de confinement de la BC est le plus grand. On not que pour $x=0.1$ et $y=0.02$ $Q_c \approx 0.75$ et $Q_v \approx 0.25$, donc on a une totalité de 100%.

avec :

$$Q_c = \frac{\Delta E_c}{\Delta E_c + \Delta E_v} \quad (2.1)$$

$$Q_v = 1 - Q_c \quad (2.2)$$

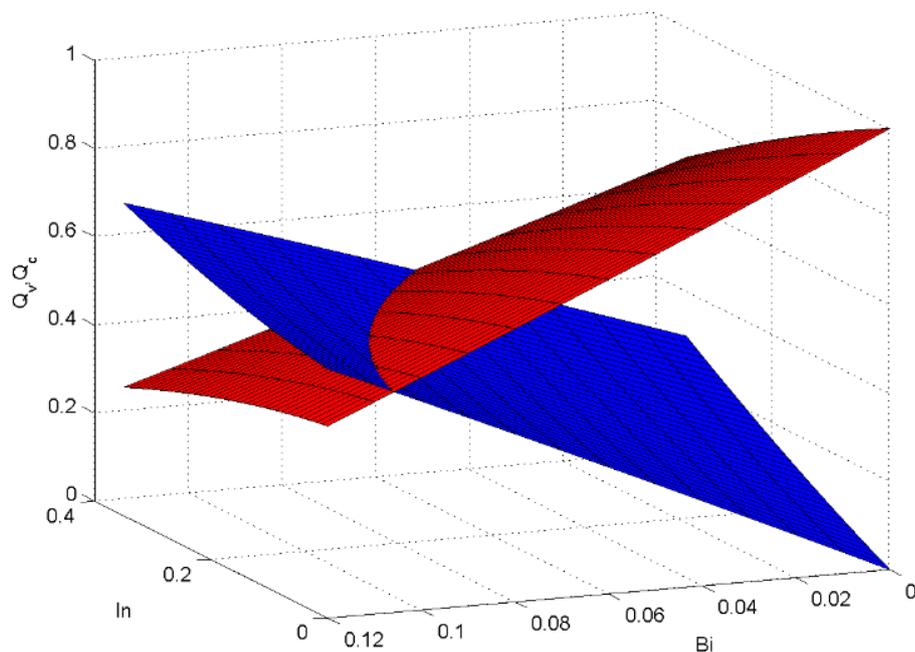


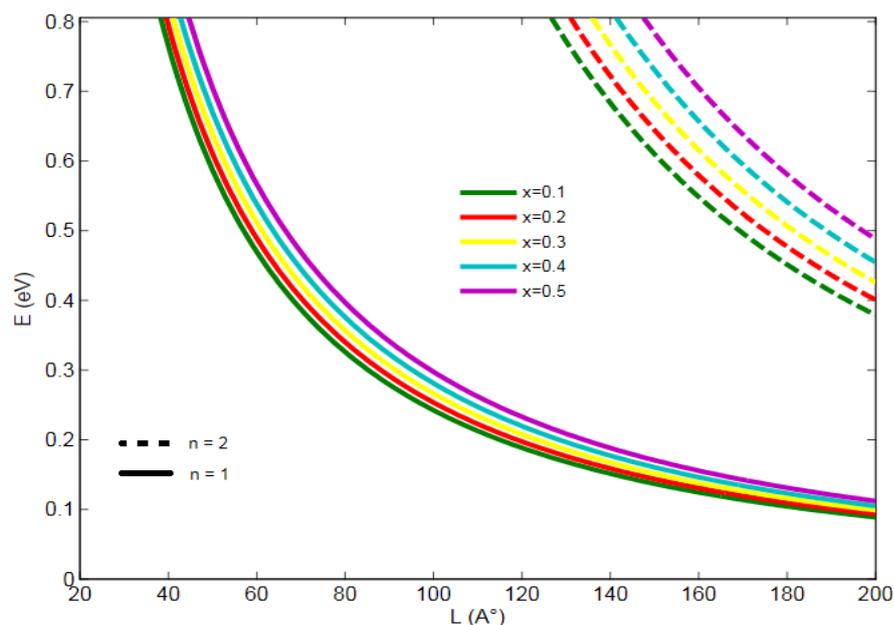
Figure 2.10. Taux de confinement dans le puits

2.6 La quantification

2.6.1 Quantification des électrons dans le puits

La simulation de niveau d'énergie d'électron dans le puits quantique InGaAsBi/GaAs en fonction de la largeur de puits Figure 2.11, montre qu'il existe deux niveaux d'énergie. Aussi l'incorporation de l'indium dans la structure InGaAsBi entraîne une augmentation des niveaux d'énergie.

Cette figure montre la variation des niveaux des trous lourds et légers en fonction de la largeur de puits pour plusieurs concentrations d'indium. Les niveaux d'énergie diminuent avec l'élargissement de puits en ligne continue le premier niveau, qui augmente avec une valeur $\Delta = 0,04 \text{ eV}$ et en ligne discret le deuxième niveau qui augmente avec une valeur $\Delta = 0,16 \text{ eV}$



La figure 2.11. La variation de niveau de trous lourds et en fonction du largeur de puits pour $x=0.35$ et $y=0.12$.

2.6.2 Quantification des trous lourds dans le puits pour plusieurs valeurs de x avec y fixe

La figure 2.12, montre la variation de niveau de trous lourds en fonction du largeur de puits pour plusieurs concentrations d'indium. et une concentration de bismuth fixe,

Le niveau d'énergie diminue avec l'élargissement de puits et aussi avec l'incorporation de l'indium dans l'alliage InGaAsBi. Cette simulation Démontre qu'il y a un seul niveau d'énergie de trou dans le puits InGaAsBi/GaAs

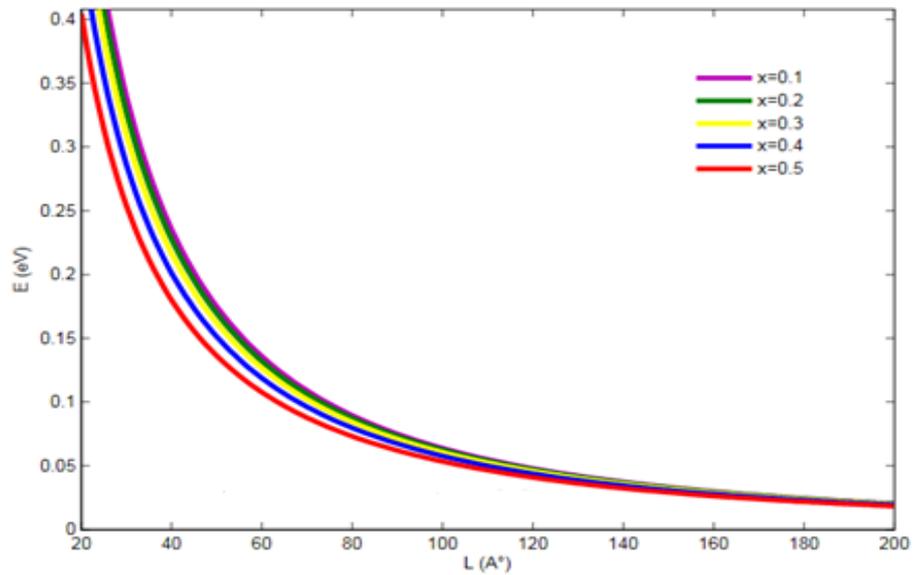


Figure 2.12. Quantification des trous lourds dans le puits pour plusieurs valeurs d'In et $y=0.12$.

2.6.3 Quantification des trous lourds dans le puits pour plusieurs niveaux avec x et y fixe

La figure 2.13 illustre la quantification des trous lourds pour des concentrations fixes, et les différents niveaux possibles dans le puits.

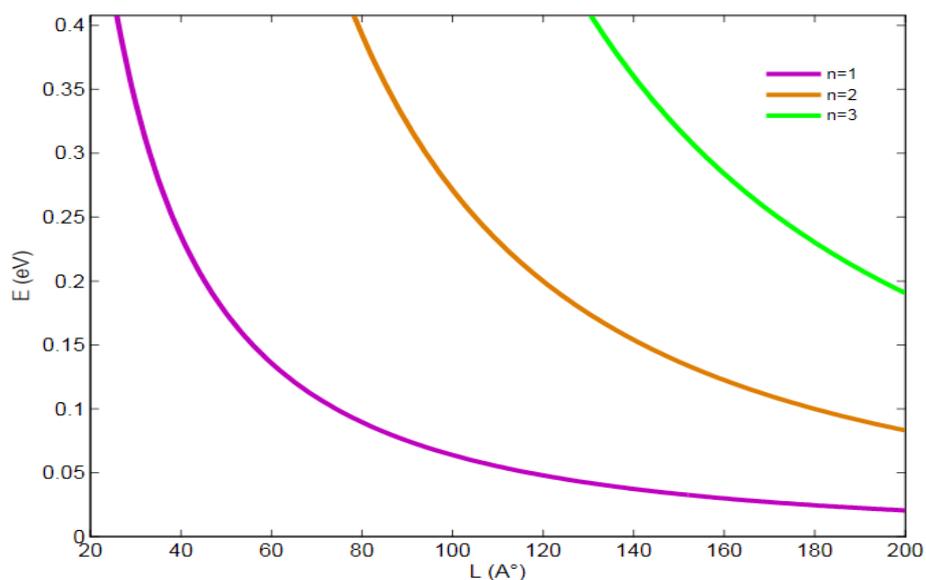


Figure 2.13. Quantification des trous lourds pour $x=0.35$ et $y=0.12$.

On remarque que l'énergie du premier niveau diminue très rapidement et décroît longuement pour les autres niveaux on conclue que l'indium et le bismuth induisent un élargissement de puits ce qui explique l'augmentation des niveaux d'énergie dans le puits.

2.7 Calcule de l'énergie de transition

La figure 2.14 illustre les différentes transitions possibles dans le puits, c'est à dire E_{hh1} et E_{hh2} E_{hh3} vers le premier niveau d'électron de la bande de conduction dans le puits quantique **InGaAsBi/GaAs**, on constate que l'énergie de transition diminue avec l'augmentation de largeur de puits par exemple $\Delta E1 = E_{hh2} - E_{hh1} = 0,6$ eV pour $L= 60$ Å et $\Delta E2 = E_{hh3} - E_{hh2} = 0,4$ eV pour $L=100$ Å.

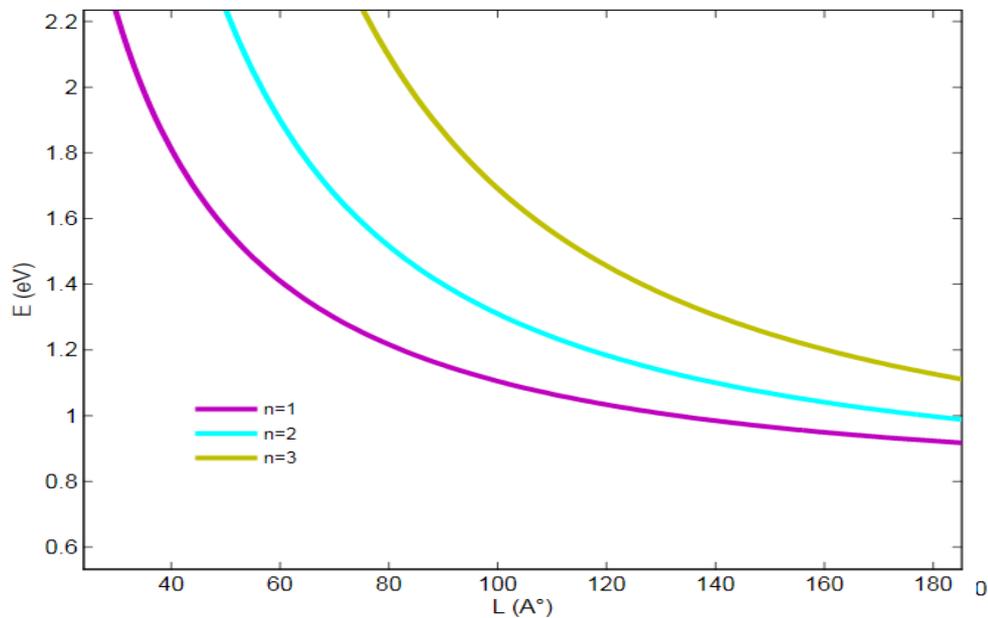


Figure 2.14. L'énergie de transition des trous lourds vers le premier niveau de la bande de conduction en fonction de la largeur de puits avec $x=0.35$ et $y=0.12$.

La figure 2.15 illustre les différentes transitions possibles dans le puits, c'est à dire E_{HH1} et E_{hh2} E_{hh3} vers le deuxième niveau d'électron de la bande de conduction Pour une concentration fixe de l'indium et bismuth on constate une décroissance d'énergie de transition avec l'augmentation de la largeur du puits, par exemple :

$$\Delta E1 = E_{hh2} - E_{hh1} = 0,13 \text{ eV, pour } L= 150 \text{ Å. Et } \Delta E2 = E_{hh3} - E_{hh2} = 0,1 \text{ eV pour } L=180 \text{ Å.}$$

On déduit que l'énergie de transition nécessaire pour une transition trous lourds vers le premier niveau de la bande de conduction est inférieure à la transition d'énergie vers le deuxième niveau d'électron.

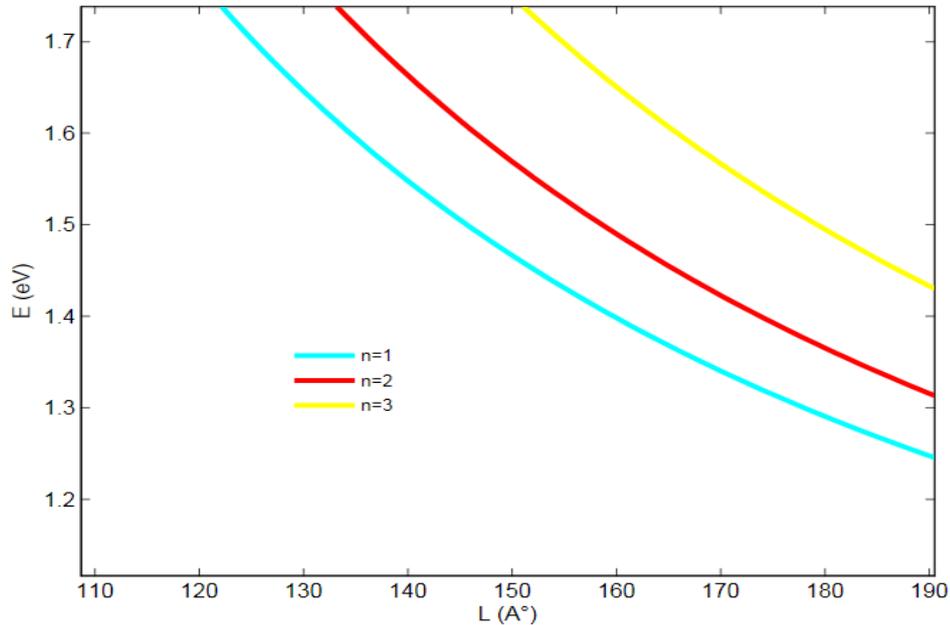


Figure 2.15. L'énergie de transition des trous lourds vers le deuxième niveau d'électron de la bande de conduction en fonction de la largeur de puits avec $x=0.35$ et $y=0.12$.

2.8 La détermination de la longueur d'onde d'émission

La figure 2.16 montre la longueur d'onde d'émission de la structure InGaAsBi/GaAs en fonction de la largeur de puits. On remarque que la longueur d'onde est plus grande dans le cas de transition HH1 de BV vers le premier niveau de la BC d'une valeur maximale atteint à $\lambda = 1,3 \mu m$ pour $x = 0,35$ et $y = 0,12$. c'est-à-dire, $\Delta\lambda_1 = \lambda_{hh1} - \lambda_{hh2} = 0,28 \mu m$, et $\Delta\lambda_2 = \lambda_{hh2} - \lambda_{hh3} = 0,25 \mu m$ pour $L=80 \text{ \AA}$.

On a aussi sur la figure 2.17 la variation de la longueur d'onde pour les transitions vers le deuxième niveau de BC en fonction de la largeur de puits, on constate que la valeur de la longueur d'onde est plus importante pour une transition HH1 de BV vers le deuxième niveau de la BC d'une valeur maximale égale $\lambda = 1,08 \mu m$ pour $x = 0,35$ et $y = 0,12$, c'est à dire $\lambda_{hh1} = 1,08 \mu m$, $\lambda_{hh2} = 0,96 \mu m$ $\lambda_{hh3} = 0,89 \mu m$ pour $L=200 \text{ \AA}$. On conclue que la longueur d'onde est supérieure pour la transition d'énergie vers le premier niveau de la BC.

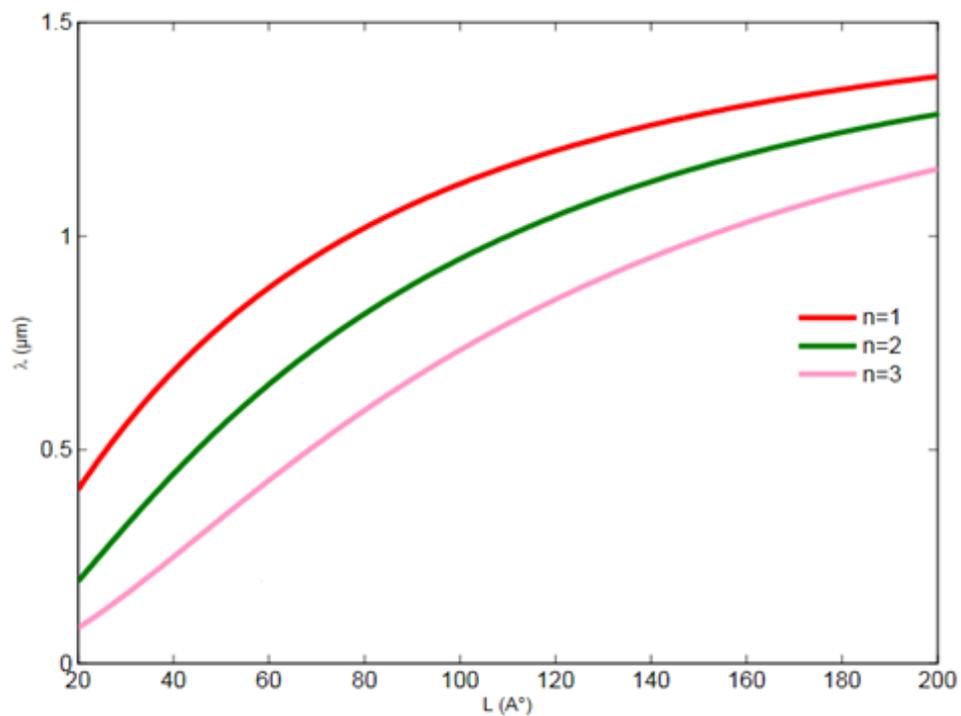


Figure 2.16. La longueur d'onde pour le premier niveau de la BC en fonction d'élargissement de puits pour $x=0.35$ et $y=0.12$.

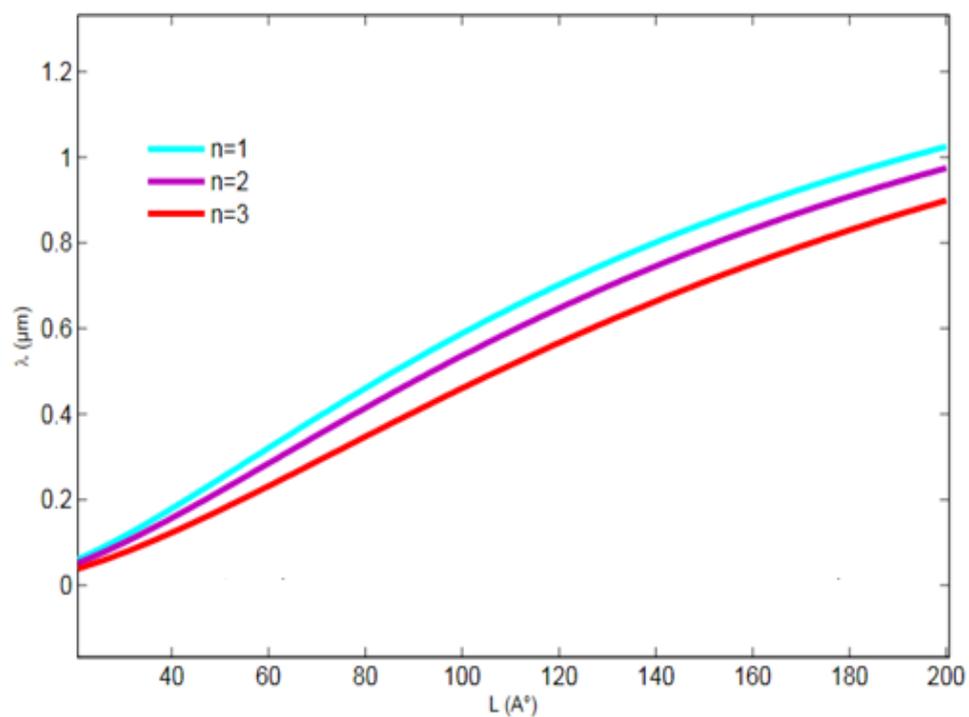


Figure 2.17. La longueur d'onde pour le deuxième niveau de la BC en fonction d'élargissement de puits avec $x=0.35$ et $y=0.12$.

2.9 L'effet de variation des concentrations d'In et Bi

2.9.1 Energie de transition

La figure 2.18,représente l'évolution de l'énergie de transition en fonction de la concentration d'indium, du bismuth Pour $x=0.1, y=(a=0.02; b=0.04; c=0.06; d=0.1)$ et du largeur du puits. On voit que lorsque $x=10\%$ et $y=10\%$, l'énergie de transition pour le premier niveau vaut $E_{1TR}=1,21$ eV, le deuxième niveau $E_{2TR}=1,42$ eV et pour le troisième niveau $E_{3TR}=1,81$ eV .

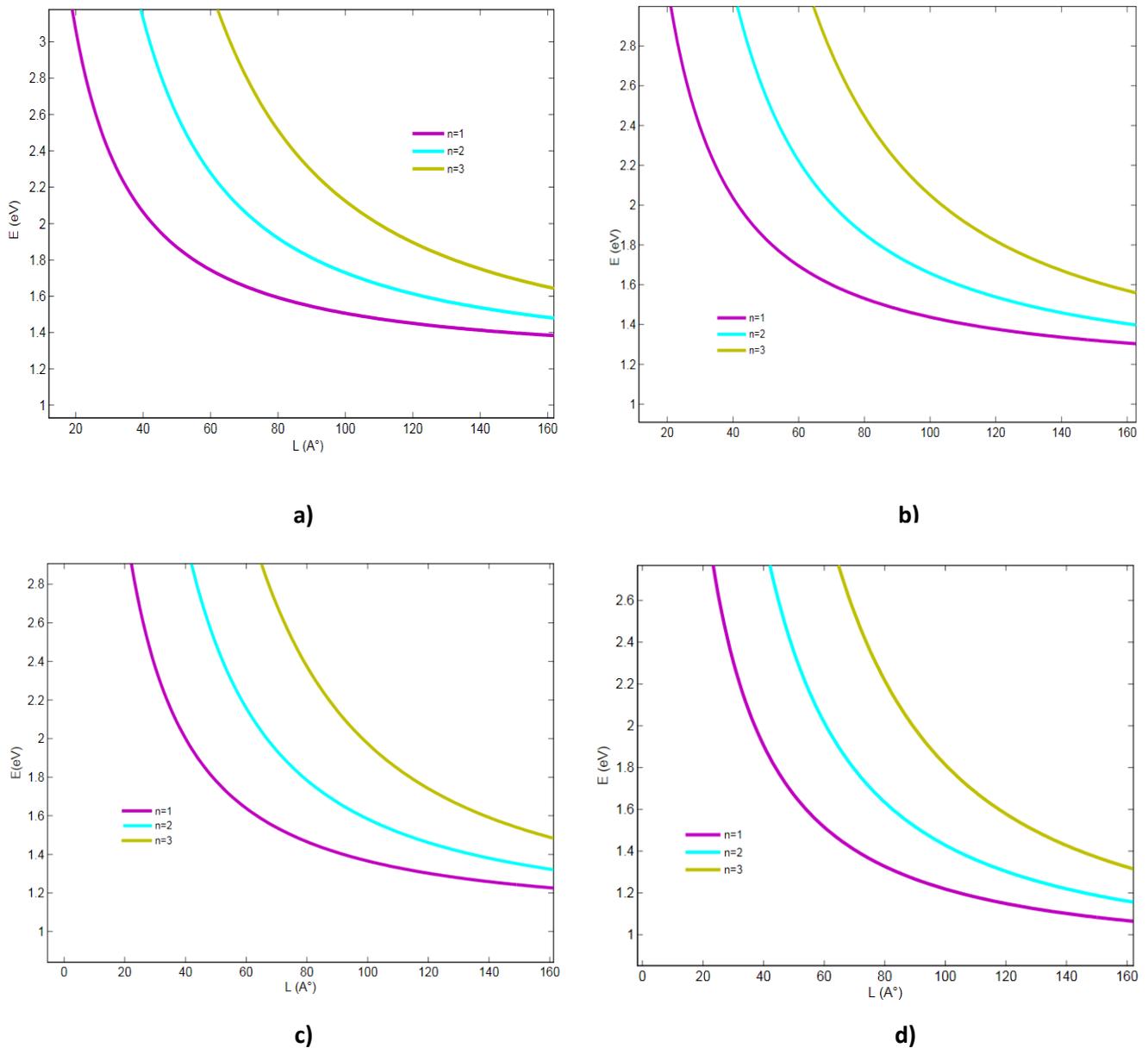


Figure 2.18 (a,b,c et d). La variation de l'énergie de transition des trous lourds vers le premier niveau de BC pour $x=0,1$ et plusieurs compositions de y

La figure 2.19 Représente l'évolution de l'énergie de transition en fonction de la concentration d'indium ,du bismuth pour $x=(0.3),y=(a=0.02;b=0.04;c=0.06;d=0.1)$ et de la largeur du puits. On voit que lorsque $x=30\%$ et $y=2\%$, l'énergie de transition pour le 1^{er} niveau vaut $E_{1TR}=1,34$ eV et pour le 2^{ème} niveau $E_{2TR}=1,57$ eV et pour le 3^{ème} $E_{3TR}=1,97$ eV pour un largeur de puits de $L=100$ Å. Si on augmente le Bi à 4%, 6% et 10%, on constate pour le 1^{er}, ainsi que pour les niveaux 2^{ème} et 3^{ème}, une diminution de l'énergie de transition, on conclue que l'énergie au premier niveau est nettement inferieur par rapport aux autres niveaux.

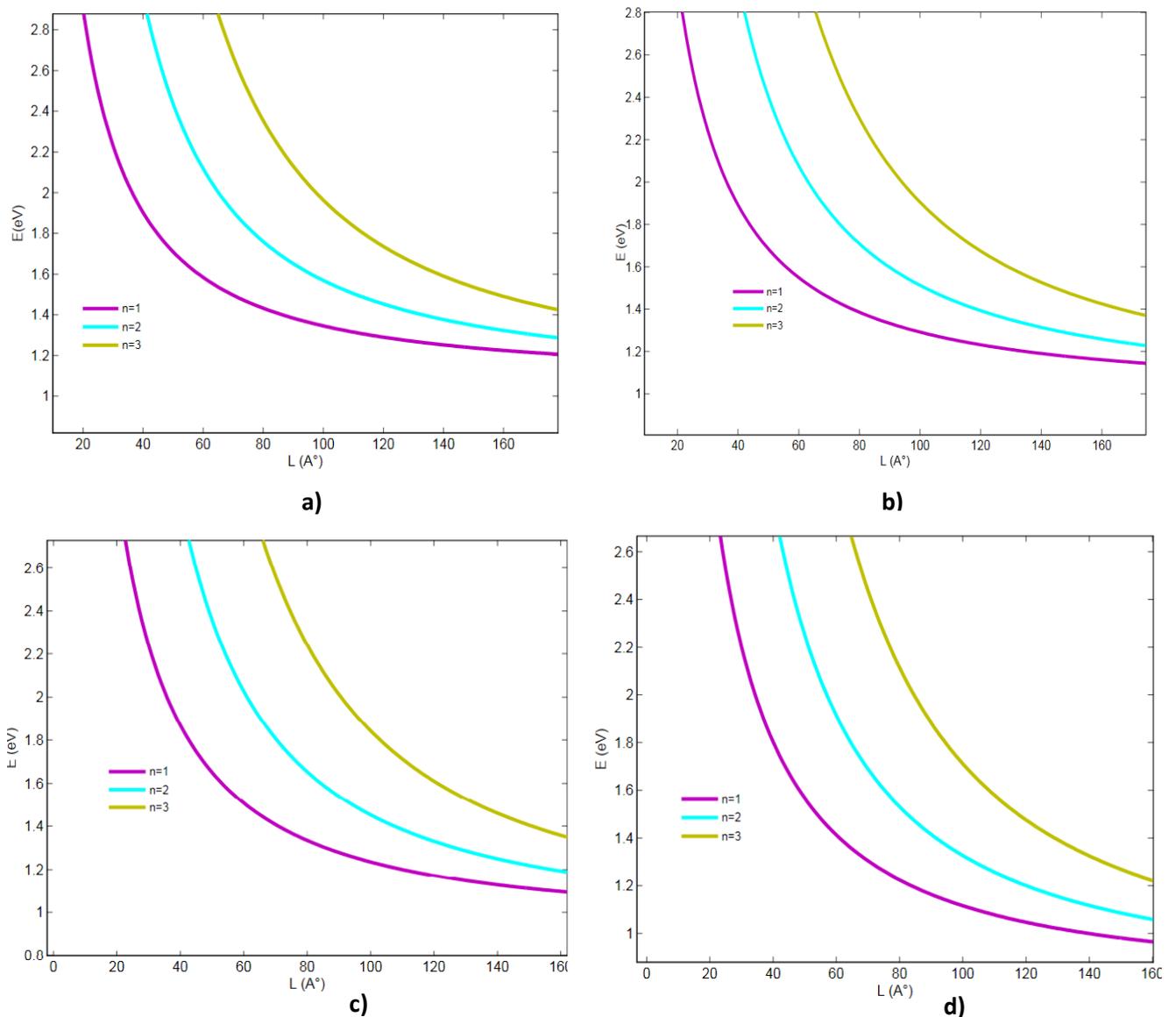


Figure 2.19 (a,b,c et d). La variation de l'énergie de transition trous lourds vers le premier niveau pour $x=0,3$ et plusieurs compositions de Y en fonction de la largeur de puits.

La figure 2.20 Représente l'évolution de l'énergie de transition en fonction de la concentration d'indium $x=20\%$, du bismuth $y=4\%$ et du largeur du puits. On voit que l'énergie de transition pour le 1^{er} niveau vaut $E_{1TR}=1,20$ eV, pour le 2^{ème} $E_{2TR}=1,28$ eV et pour le 3^{ème} $E_{3TR}=1.49$ eV avec un largeur de puits de $L=100$ Å. Si on augmente le In voir (figure 2.19.b), on constate pour le 1^{er} niveau, ainsi que pour les niveaux 2 et 3, une diminution de l'énergie de transition, on conclue que l'énergie au premier niveau est nettement inferieur par rapport aux autres niveaux.

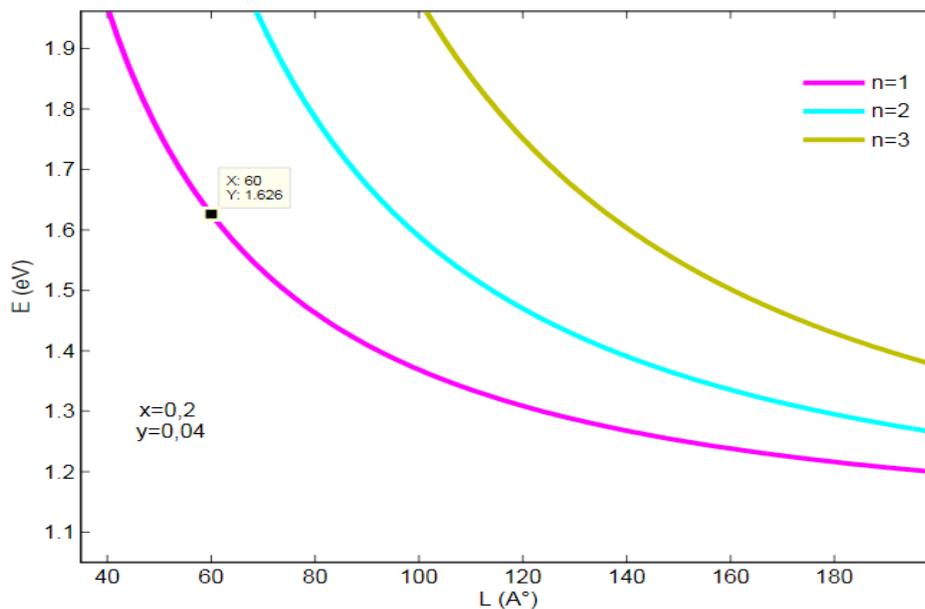


Figure 2.20. L'énergie de transition des trous lourds en fonction de la largeur de puits pour $y=0,04$ et $x=0.2$.

La figure 2.21 représente l'évolution de l'énergie de transition en fonction de la concentration d'indium, du bismuth et du largeur du puits. On voit que lorsque $x=20\%$ et $y=10\%$, l'énergie de transition pour le 1^{er} niveau vaut $E_{1TR}=0,99$ eV, 2^{ème} niveau $E_{2TR}=1,05$ eV et pour le 3^{ème} niveau $E_{3TR}=1,15$ eV avec une largeur de puits de $L=100$ Å. Si on augmente le In a 30% voir (figure 2.19.d), on constate pour le niveau 1, ainsi que pour les niveaux 2 et 3, une diminution de l'énergie de transition, on conclue que l'énergie au premier niveau est nettement inferieur par rapport aux autres niveaux.

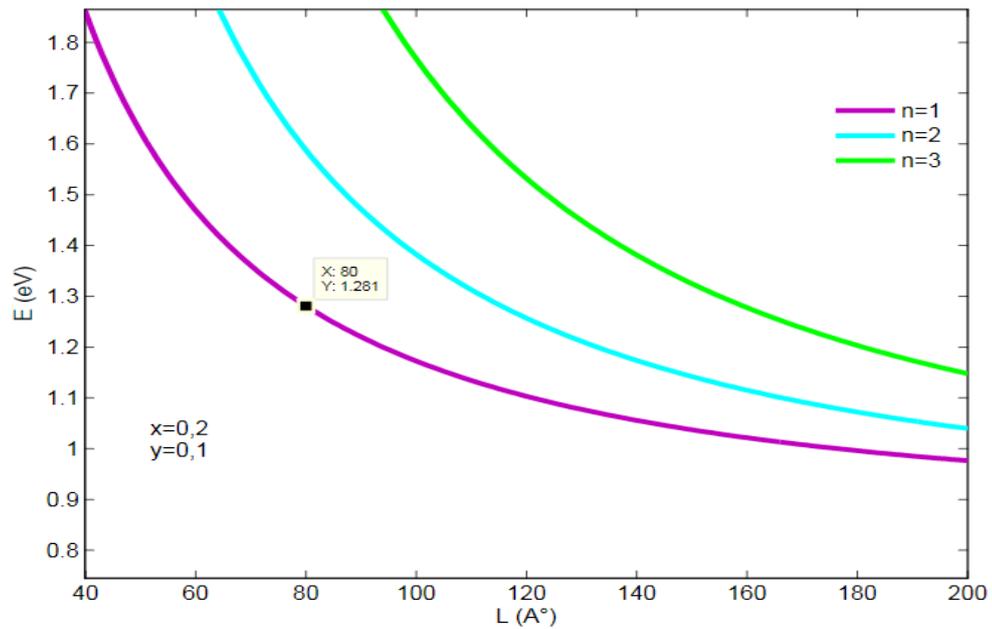
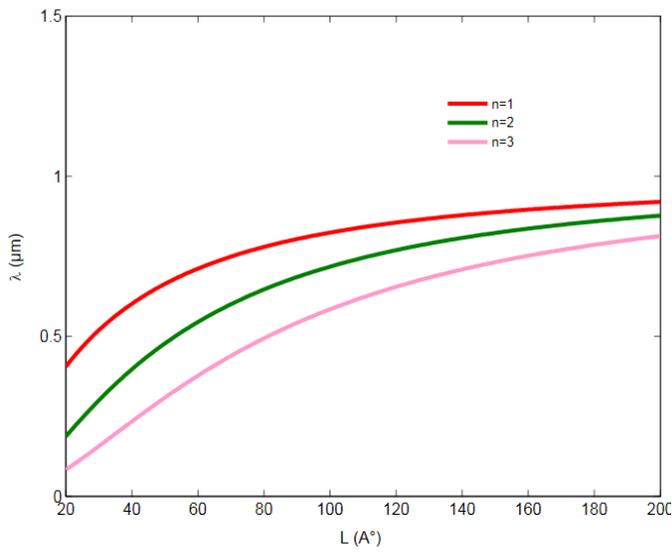


Figure 2.21. L'énergie de transition des trous lourds en fonction de la largeur de puits pour $y=0,1$ et plusieurs compositions de x .

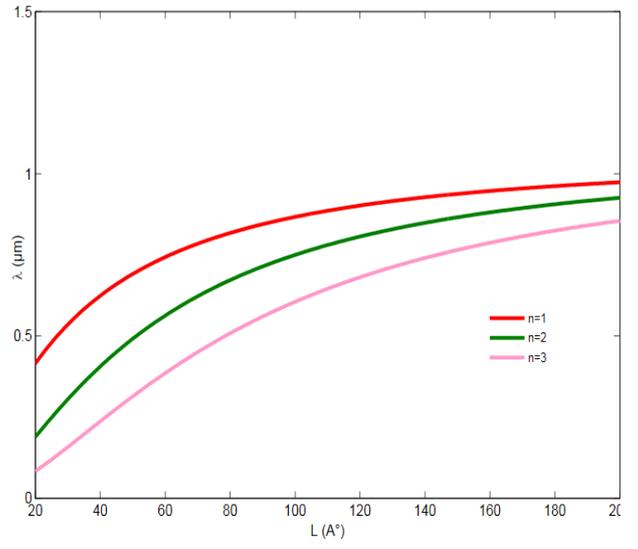
2.9.2 La Longueur d'onde d'émission

a Transition vers le premier niveau de la BC

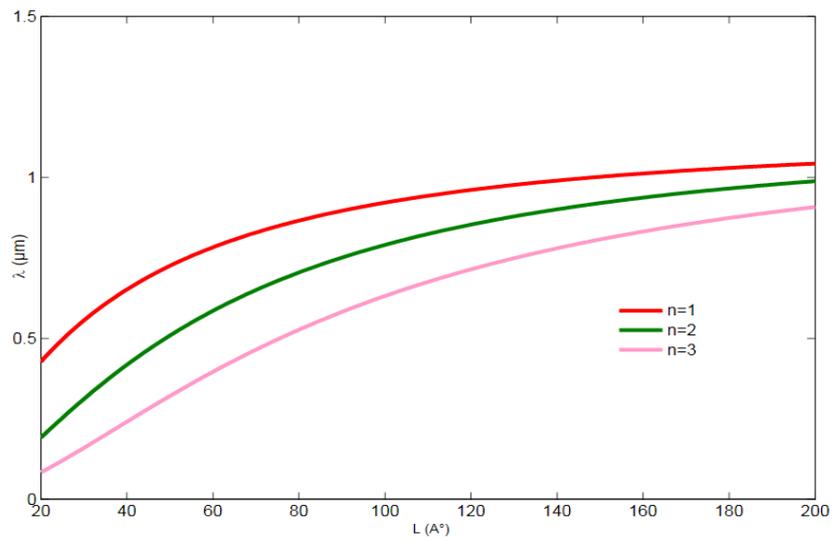
La figure 2.22 illustre la variation de la longueur d'onde d'émission pour plusieurs concentrations d'indium $x=$ ($a=10\%$, $b=20\%$, $c=30\%$) avec une concentration de bismuth fixe (2%), on remarque que plus la concentration d'indium augmente la longueur d'onde augmente légèrement. La longueur d'onde est plus grande dans le premier niveau, atteint jusqu'à $1\mu\text{m}$.



a)



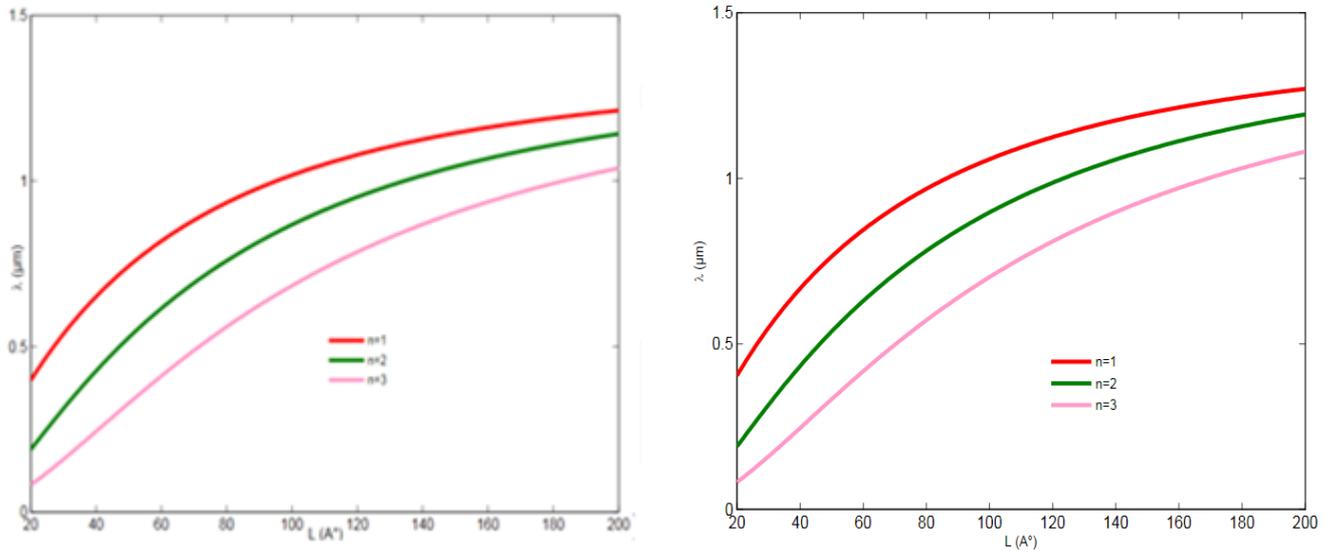
b)



c)

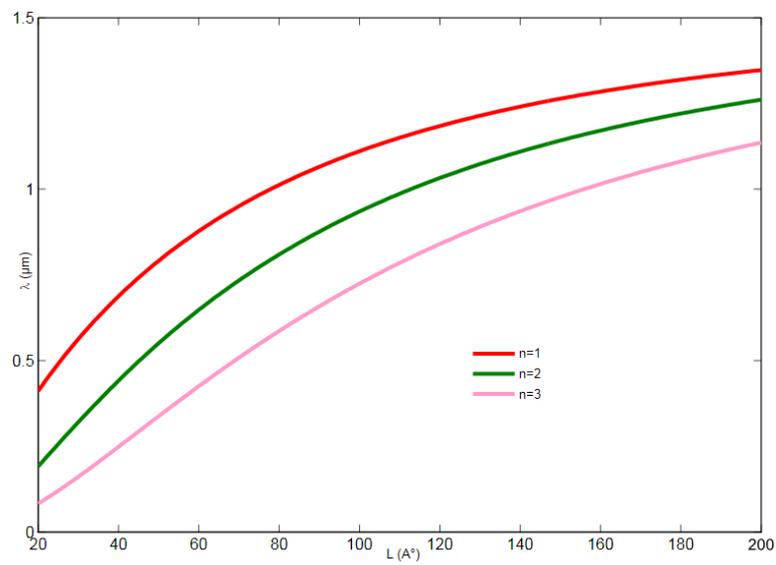
Figure 2.22 (a, b et c). Variation de la longueur d'onde d'émission pour plusieurs concentrations I_n et $\gamma=2\%$.

Avec l'augmentation de concentration de bismuth on remarque sur La figure 2.23 que la longueur d'onde d'émission attendre une valeur maximale $1.3\mu\text{m}$ pour plusieurs concentrations d'indium avec une grande concertation de bismuth (10%).



a)

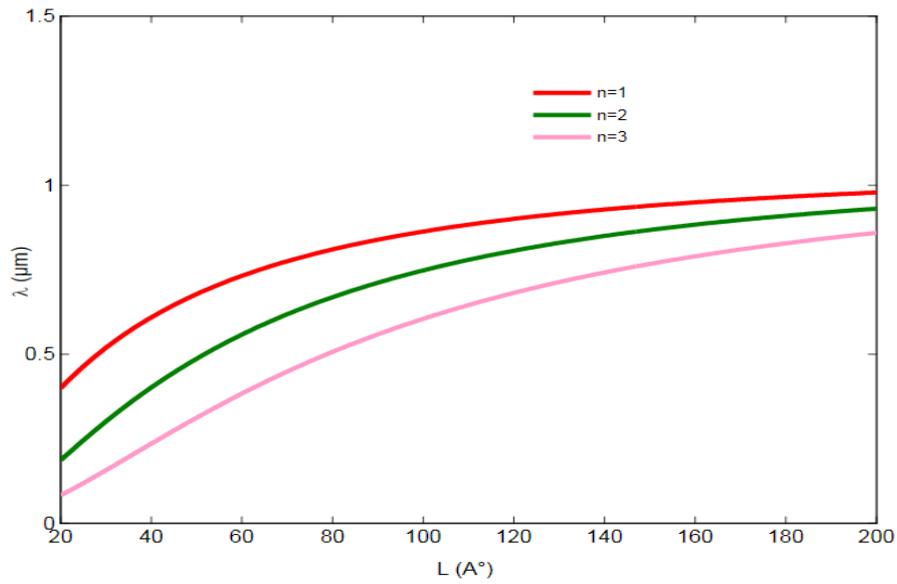
b)



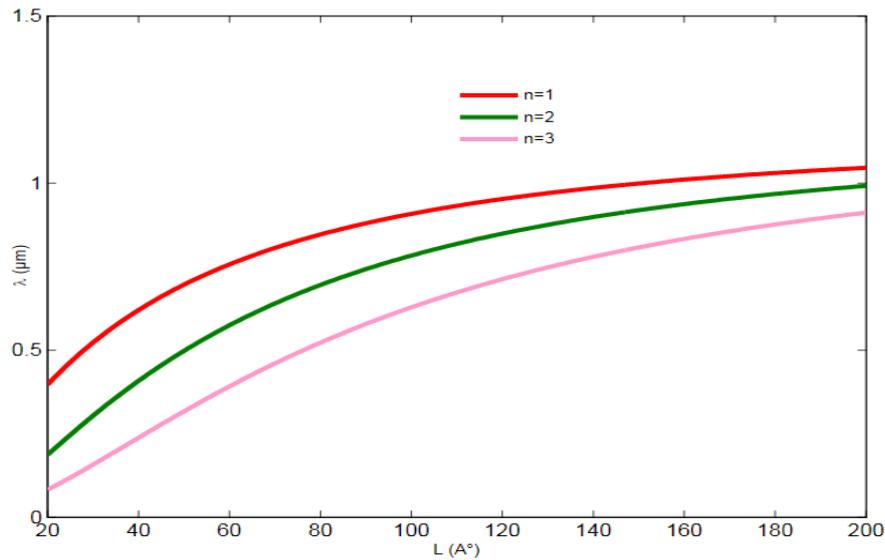
c)

Figure 2.23 (a,b et c). Variation de la longueur d'onde d'émission pour plusieurs concentrations In avec et $\gamma=10\%$

Ces figures si dessous représentent la variation de la longueur d'onde pour deux concentrations de bismuth ($a=0.04$, $b=0.06$) et $x=10\%$, on enregistre une petite croissance de la longueur d'onde $0,99 \mu\text{m}$ pour $y=0.04$ et $1 \mu\text{m}$ pour $y=0.06$ pour une transition vers le premier niveau de la bande de conduction pour une largeur de puits 100 \AA . si on augmente la concentration de bismuth a 10% voir (figure 2.23.a) la longueur d'onde vaut $1.3\mu\text{m}$ pour une transition niveau fondamentale de la BV vers le premier niveau de BC



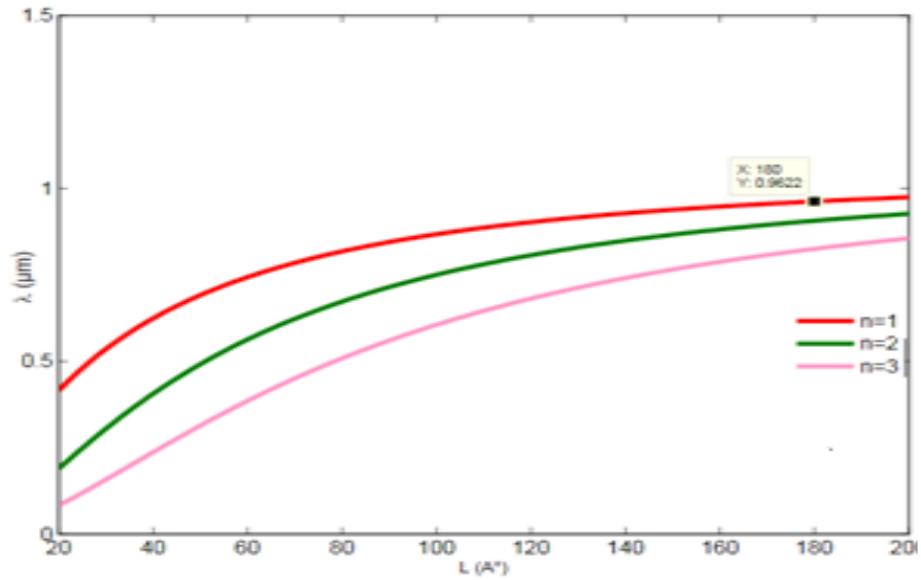
a)



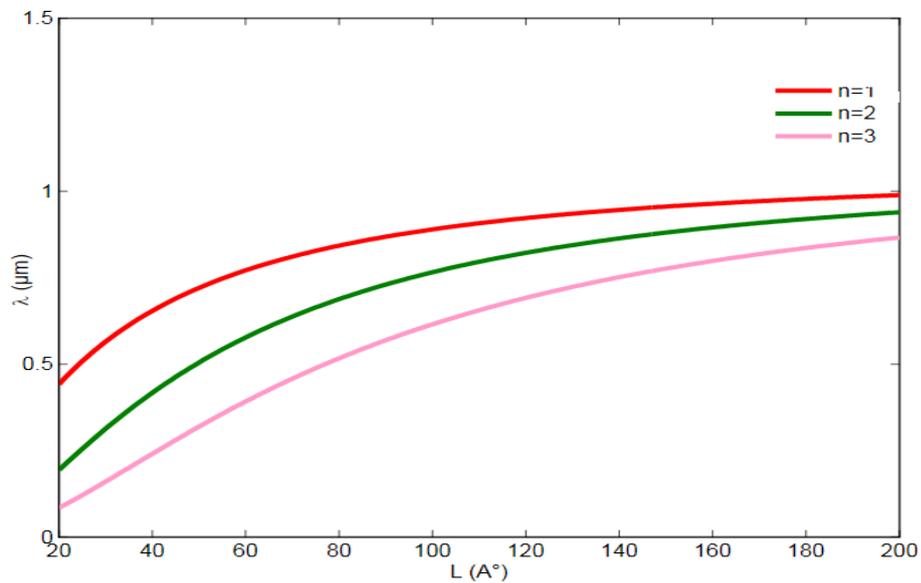
b)

Figure 2.24 (a et b). La longueur d'onde pour le premier niveau de transition avec $x=10\%$

La figure 2.25 représente la variation de la longueur d'onde pour $\gamma=0.04, 0.06$ et une seule concentration d'indium $x=0,3$. On enregistre une faible croissance de la longueur d'onde de $0,99 \mu\text{m}$ à $1 \mu\text{m}$.



a)

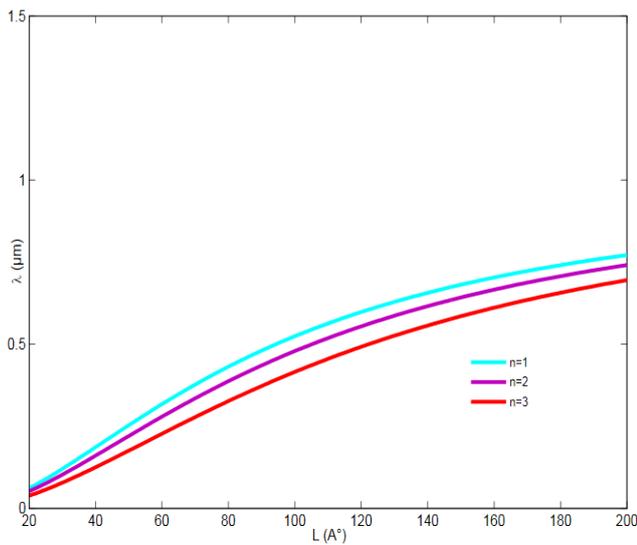


b)

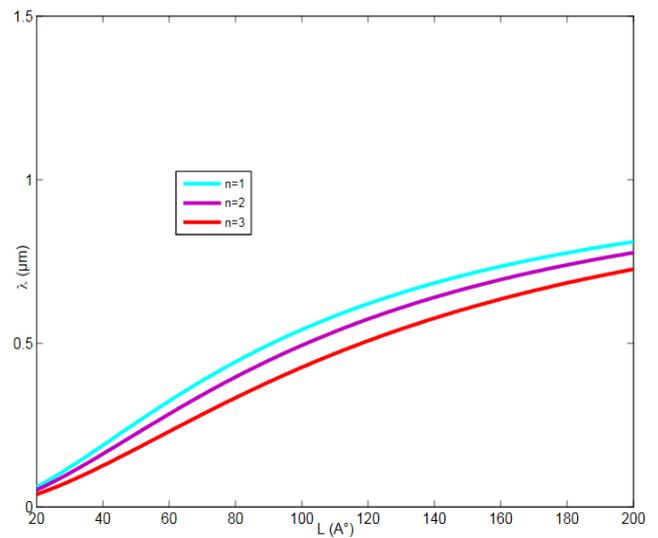
Figure 2.25(a et b). La longueur d'onde d'émission pour le premier niveau de transition avec $x=30\%$.

b Transition vers le deuxième niveau de la BC

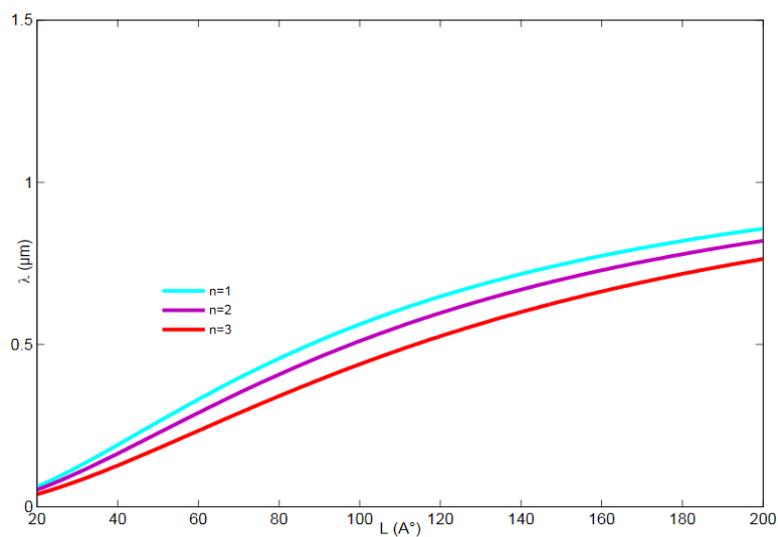
La figure 2.26 représente la variation de la longueur d'onde d'émission vers le deuxième niveau pour différentes concentrations d'indium pour $x = (a=10\%, b=20\%, c=30\%)$ avec une concentration de bismuth faible et fixe $a (2\%)$, les graphes de simulation montrent une faible augmentation dans la longueur d'onde qui ne dépasse pas $0.85\mu\text{m}$.



a)



b)



c)

Figure 2.26(a,b et c). La longueur d'onde d'émission pour le deuxième niveau de transition avec $\gamma=2\%$.

Avec l'augmentation de concentration de bismuth 10% on remarque dans La figure 2.27 que la longueur d'onde d'émission attendre une valeur maximale $1\mu\text{m}$ pour plusieurs concentrations d'indium avec une grande concertation de bismuth. Alors on constat que la transition vers le premier niveau de la BC donne la meilleur longueur d'onde d'émission.

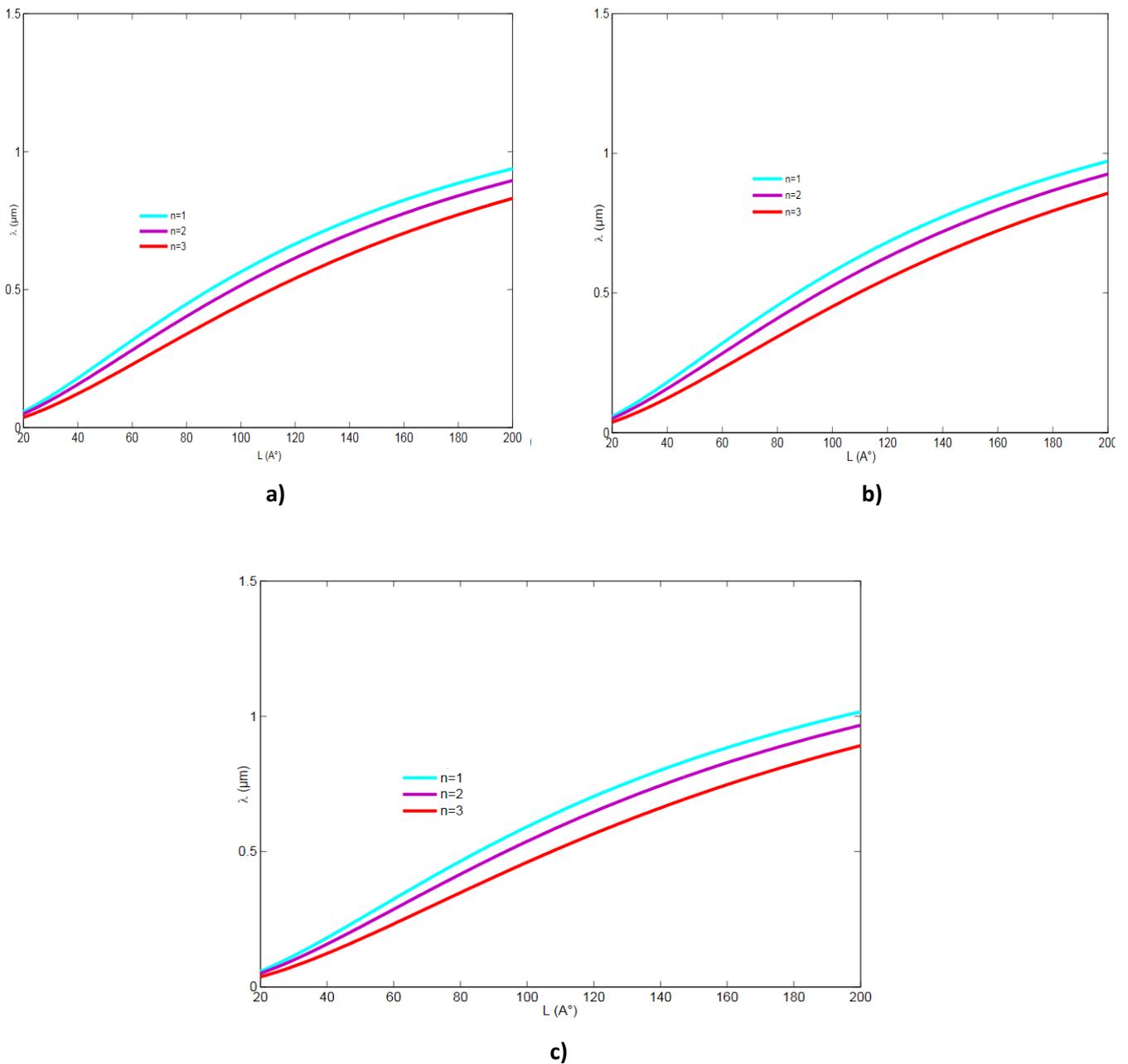


Figure 2.27 (a,b et c). La longueur d'onde d'émission pour le deuxième niveau de transition avec $\gamma=10\%$.

Les figures suivantes démontrent que pour une augmentation des valeurs de $y=(a=0.04,b=0.06)$ avec x fixe a 10%, qu'il ya une faible augmentation de la longueur d'onde d'une valeur maximal atteint $0,61\mu\text{m}$ pour $y= 6\%$ pour une transition vers le 1^{er} niveau de la bande de conduction.

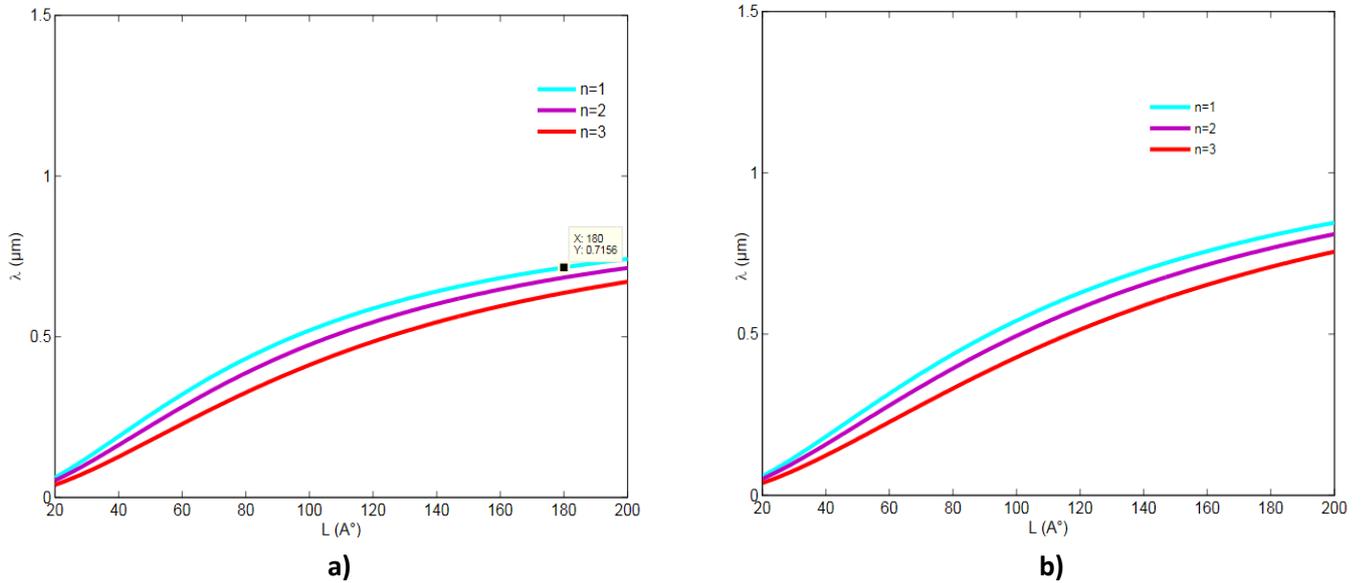


Figure 2.28 (a et b). La longueur d'émission pour le deuxième niveau de transition avec $x=10\%$.

La figures 2.29 démontrent que pour une augmentation des valeurs de $x=30\%$ et $y=(a=0.04$ et $0.06)$. On remarque qu'il ya une faible augmentation de la longueur d'onde d'une valeur maximal atteint a $0,82\mu\text{m}$ pour $y= 0.06$ pour le premier niveau.

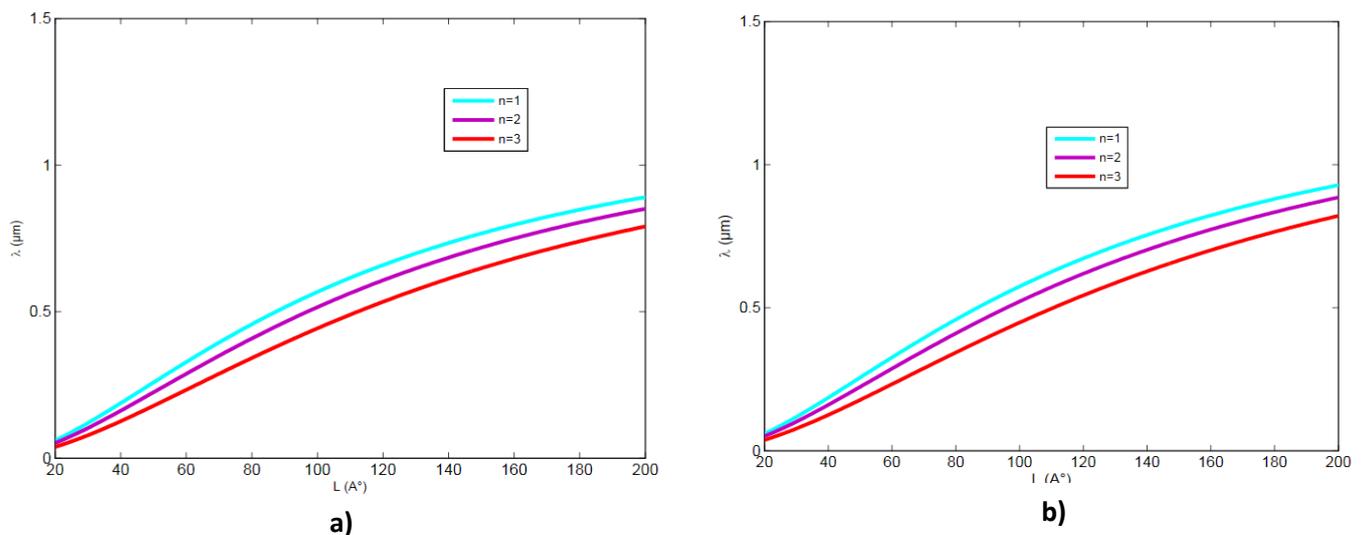


Figure 2.29 (a et b). La longueur d'onde d'émission pour le deuxième niveau de transition avec $x=30\%$

2.10 Longueur d'onde d'émission avec un niveau d'énergie fixe

Ces figures représentent les variations de la longueur d'onde pour les différentes compositions de In (a=10 %, b=20%, c=30 %), et composition de Bi fixe a 2% en fonction de la largeur de puits, on remarque pour Bi=2% et In=30 % elle atteint le maximum 1.02 μ m pour une transition de niveaux fondamentale trous lourds vers le niveau fondamental de la BC et aussi pour une grande concentration d'indium. On déduit que λ au premier niveau de transition est supérieure aux autres niveaux.

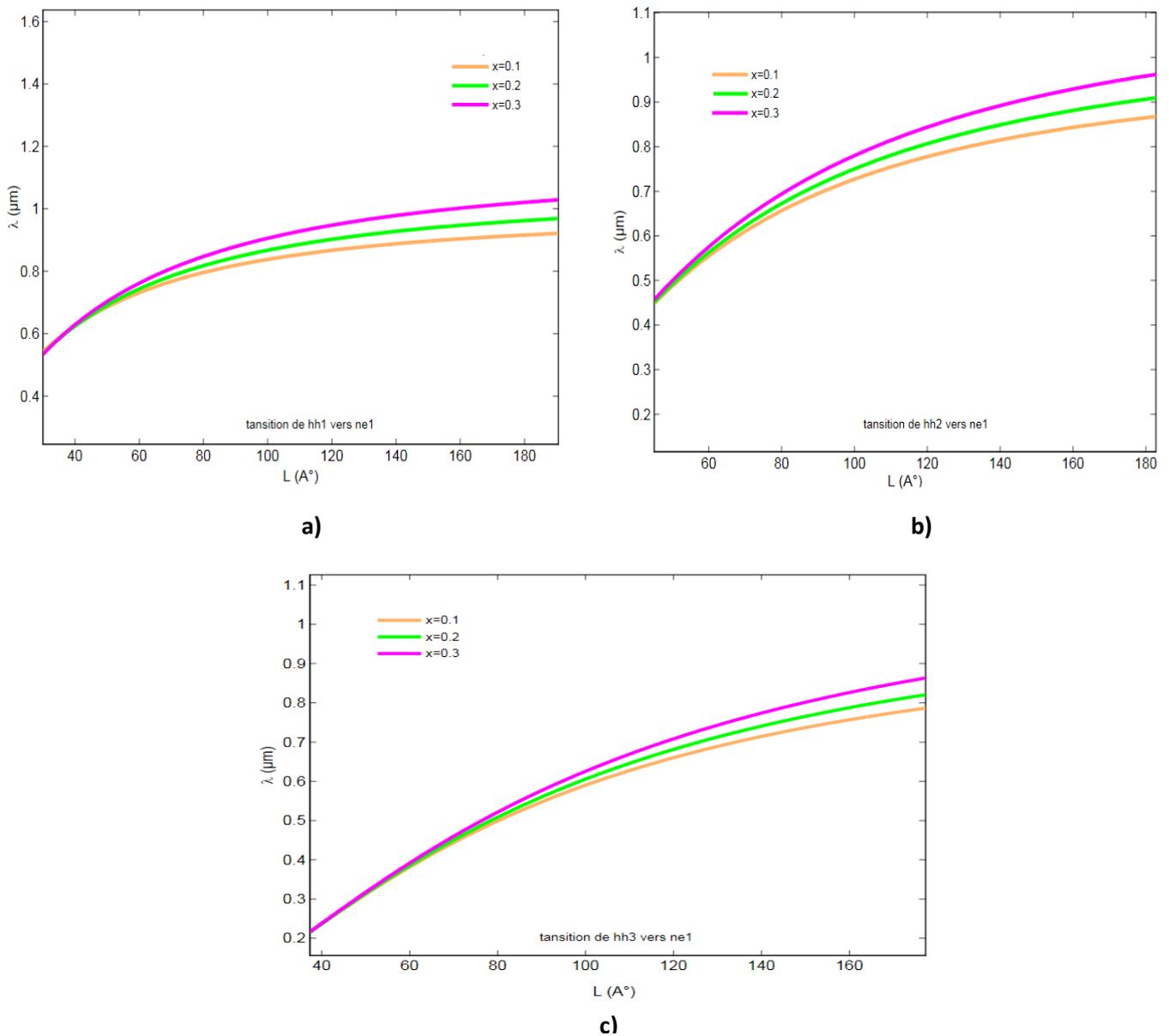
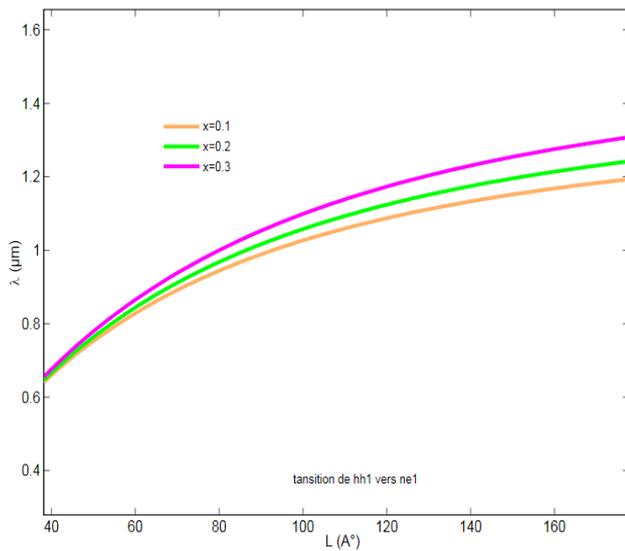
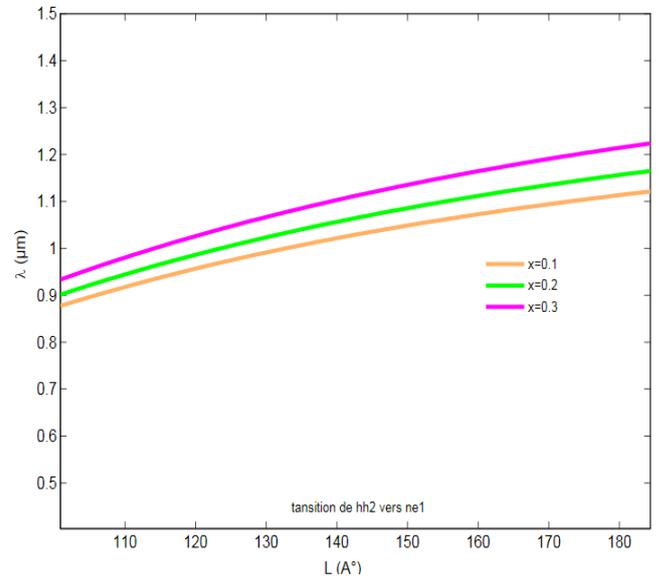


Figure 2.30 (a,b et c). La variation de Longueur d'onde d'émission avec n fixe $\gamma=2\%$

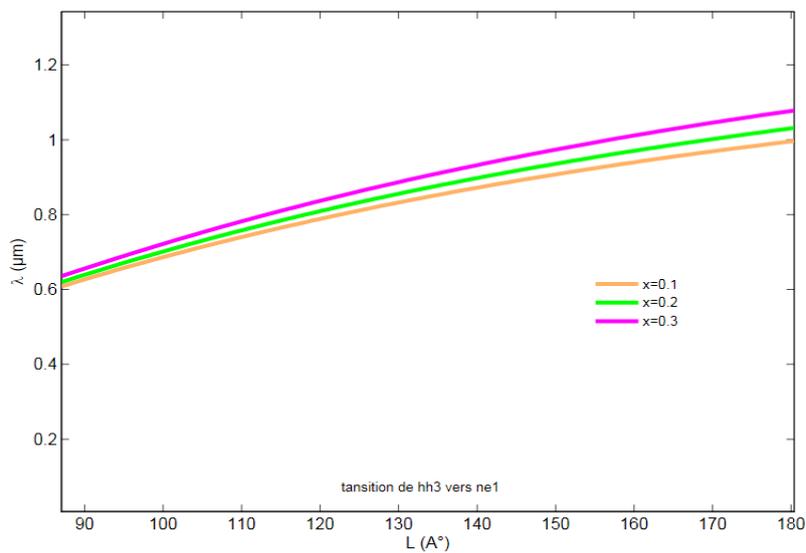
Dans la figures 2.31 on augmente la concentration de bismuth a 10%, on remarque que la longueur d'onde d'émission pour $x= 30\%$, devient plus élevé $1.3\mu\text{m}$. Alors l'augmentation de Bi a un effet sur la longueur d'onde d'émission.



a)



b)



c)

Figure 2.31 (a, b et c). La variation de Longueur d'onde d'émission avec n fixe $x=10\%$

2.11 Energie de transition avec plusieurs concentrations de Bi

La figure 2.32, montre que l'énergie de transition diminue avec l'élargissement de puits et avec l'augmentation de la concentration de bismuth dans la structure InGaAsBi/GaAs pour $x = (a=0.1, b=0.2, c=0.3)$.

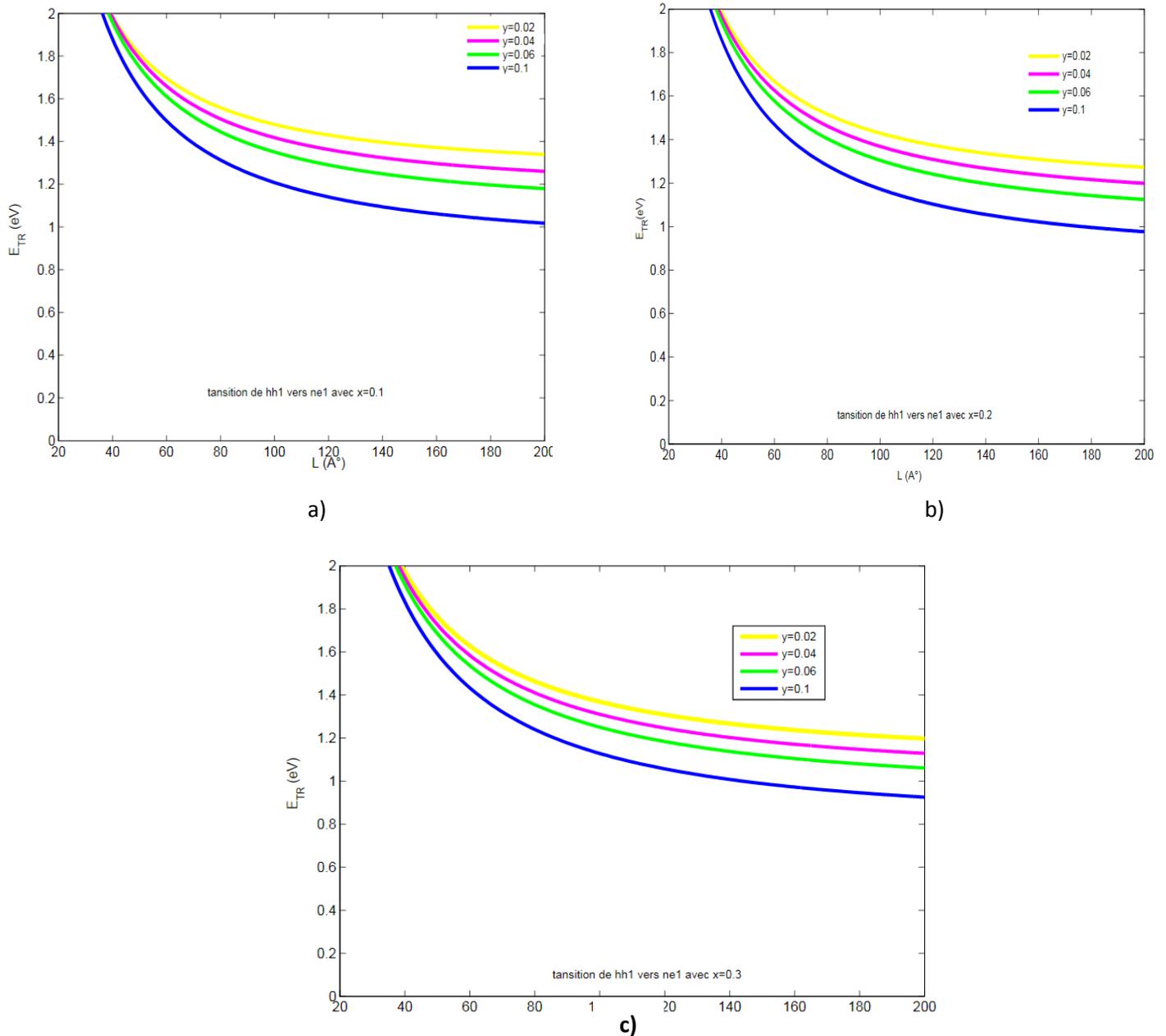


Figure 2.32 (a,b. et c) La variation de l'énergie de transition avec plusieurs y et x fixe

2.12 Conclusion

Les simulations effectuées dans ce chapitre montre que : Qu'on a une contrainte en compression qui se présente dans la structure InGaAsBi contraint sur le substrat de GaAs, et cette contrainte varie en fonction de la concentration de bismuth et d'indium.

La contrainte rend les bandes de valence fortement anisotropes et comme la contrainte est toujours compressive le gap des trous lourds et au-dessous de gap des trous légers.

La quaternaire présente par conséquent l'avantage d'une longueur d'onde élevée, avec des contraintes induites par le désaccord de maille réduites. Il peut même être épitaxié, dans certaines proportions, en accord de maille avec le GaAs.

Une diminution de gap ouvre une amélioration de la longueur d'onde d'émission. Avec l'augmentation des compositions de L'indium et de bismuth

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.

Finalement la simulation de la structure InGaAsBi / GaAs a base d'un puits quantique en fonction de la concentration d'indium et bismuth résulte une longueur d'onde d'émission maximal de $1.3\mu\text{m}$ pour $x=30\%$ et $y= 10\%$

Conclusion générale

Le travail réalisé au cours de cette thèse reposait sur l'étude d'une structure de laser à puits quantique InGaAsBi/GaAs

Dans une première approche, nous avons présenté le principe de fonctionnement des lasers à puits quantique et une description générale du fonctionnement et l'évolution d'un laser à semi-conducteur et leur structure élémentaire.

En suite rappels des concepts fondamentaux des alliages semi-conducteurs ainsi que les lois d'interpolation obéissant à la loi de Vegard nous ont permis de déterminer toutes les données utilisées dans notre simulation (paramètre de maille, gap d'énergie, contrainte...épaisseur critique), D' autre part, à l' aide de la résolution de l' équation de Schrödinger nous avons déterminé la quantification des porteurs et leurs niveaux d'énergie.

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 anisotrope des bandes de valence (HH, LH).

Nous sommes ainsi remontés aux valeurs de certaines concentrations d'indium et de bismuth tels que l'énergie de transition des trous lourds et la longueur d'onde vers les deux niveaux, nous avons par la suite établi une comparaison entre les figures.

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 $x=30\%$ et $y=10\%$ Cette longueur d'ondes optimale pour les télécommunications par fibre optique, car pour cette longueur d'ondes la fibre optique en silice présente le minimum d'atténuation.

Ce serait de poursuivre notre étude sera continue de calculé le gain optique et le courant de seuil à fin de réalisé un composent laser émettent une longueur d'onde $1.3\mu\text{m}$.

ANNEXE A

A.1 Tableau périodique

	I																	VIII
1	H 1																	He 2
2	Li 3	Be 4										B 5	C 6	N 7	O 8	F 9		Ne 10
3	Na 11	Mg 12										Al 13	Si 14	P 15	S 16	Cl 17		Ar 18
4	K 19	Ca 20	Sc 21	Ti 22	V 23	Cr 24	Mn 25	Fe 26	Ce 27	Ni 28	Cu 29	Zn 30	Ga 31	Ge 32	As 33	Se 34	Br 35	Kr 36
5	Rb 37	Sr 38	Y 39	Zr 40	Nb 41	Mo 42	Tc 43	Ru 44	Rh 45	Pd 46	Ag 47	Cd 48	In 49	Sn 50	Sb 51	Te 52	I 53	Xe 54
6	Cs 55	Ba 56	Lu 71	Hf 72	Ta 73	W 74	Re 75	Os 76	Ir 77	Pt 78	Au 79	Hg 80	Tl 81	Pb 82	Bi 83	Po 84	At 85	Rn 86
7	Fr 87	Ra 88	Lr 103	Rf 104	Db 105	Sg 106	Bh 107	Hs 108	Mt 109	Uun 110	Uuu 111	Uub 112						

Tableau A.1 Tableau périodique des éléments.

A.2 Caractéristique des matériaux massifs

Paramètre \ Matériau	InAs	InBi	GaAs	GaBi
Paramètre de maille (Å)	6.058	6.686	5.635	5.324
ac (eV)	-1.00	- 6.94	- 7.17	- 7.5
av (eV)	-5.08	-0.36	-1.16	-0.8
Déformation de cisaillement b (eV)	-1.8	-2	-2	-2
C11 (GPa)	832.9	684.7	1221	884.2
C12 (GPa)	452.6	373.5	566	402.6
me (m0)	0.026	0.0135	0.067	0.039
γ_1	20	34.8	6.98	13.4
γ_2	8.5	15.5	2.06	4.7
Eg (eV)	0.41	-1.63	1.42	-1.45
m_{hh}^*	0.33	0.263	0.35	0.25
m_{ih}^*	0.027	0.017	0.090	0.043
Deltao (eV)	0.39	0.81	0.34	0.76

Tableau A.2 Paramètres physiques fondamentaux des principaux binaires III-V.

A.3 Expression des paramètres

Pour les alliages ternaires ou quaternaires, les paramètres a , E_g , a_c , a_v , δ_0 , b , C_{11} , C_{12} , m_e , γ_1 , γ_2 sont déterminés à partir de la loi de Végard (2.1).

Pour déterminer les masses des trous lourds et des trous légers on utilise ces relations :

$$m_{hh} = \frac{1}{\gamma_1 - 2\gamma_2} \quad \text{A. 1}$$

$$m_{lh} = \frac{1}{\gamma_1 + 2\gamma_2} \quad \text{A. 2}$$

Bibliographie

- [01] Laid Abdelali. "Etude des niveaux d'énergie dans la structure de la diode laser gainp/algainp par la méthode du pseudopotentiel". Mémoire de magister 2009, Université Djilali Liabes Sidi Bel-Abbes -
- [02] A.Chovet & P.Masson: «physique des semi-conducteurs», Ecole Polytechnique Universitaire De Marseille, 2004/2005.
- [03] Département E.E.A: «Physique et technologie des composants de puissance
- [04] R.Castagné et all. "Circuits intégrés en arséniure de Gallium. Physique, technologie et règles de conception", Masson et CINET ENST Paris, 1989 université de Bordeaux 1, 2003
- [05] MORNAY Thomas & VERNAY Alexis & VOLLE Marion: «les cellules photovoltaïques», Institution de chartreux, Année 2004-2005.
- [06] Henry Mathieu & Hervé Fanet. "physiques des semi-conducteurs et des composants électroniques." DUNOD, 6e édition.
- [07] Francis Levy. Traité des matériaux (18). Physique et technologie des semi-conducteurs. Presses polytechniques et universitaires Romandes (1995)
- [08] R. Castagné et all. Circuits Intégrés en arséniure de Gallium. Physique, technologie et règles de conception. Masson et CINET ENST Paris, (1989).
- [09] S.Laval .Physique des semi-conducteurs III-V, Ecole d'été d'optoélectronique (2002).
- [10] Benaïcha Mouna: «Etude des matériaux semi-conducteurs III-V Application à la conversion photovoltaïque», UNIVERSITE COLONEL HADJ LAKHDAR, BATNA, 2007
- [11] <http://www.polytech-lille.fr/cours-transistor-effet-champ/hemt>.

- [12] H.P. Hjalmarson, P. Vogl, D.J. Woldford, et J.D. Dow, Phys Rev Lett 44, 810 (1980).
- [13] LODI G. et al, Systematic Review of Randomized Trials for the Treatment of Oral Leukoplakia. J. Dent. Educ., 2002, 66, 8, p896-902. Review
- [14] D. Botez, «Design Considerations and Analytical Approximations for High Continuous-Wave Power, Broad-Waveguide Diode Lasers » Applied Physics Letters, Vol. 76, pp. 3102-3104, May (1999).
- [15] S. Porowski «Bulk and homoepitaxial GaN-growth and characterization » J. Cryst.Growth 189-190, 153 (1998).
- [16] MORITZ, A., Advantages of a pulsed CO2 laser in direct pulp capping: a long-term in vivo study. Lasers Surg. Med., 1998, 22, p288-293
- [17] Mark Csele, fundamentals of light sources and lasers, United States of America, A Wiley-Interscience publication, 2004.
- [18] A. Aissat, B. Alshehri, S. Nacera, J.P. Vilcot « Theoretical investigation of GaAsN_{0.5}Bi_{0.5}/GaAs materials for optoelectronic applications »
- [19] Vanessa GORGE. "Caractérisations de matériaux et tests de composants des cellules solaires à base des nitrures des éléments III-V. " thèse de doctorat, Université paris-SUD 11, 2012.
- [20] SAYAH NAIMI. "Etude et optimisation des paramètres physiques de la diode laser GaAsSbN/GaAs. " Mémoire de magister, Université Djillali Liabès de Sidi bel abas, 2011.
- [21] KERKAR Fouzia. "Calcul du gain optique d'un puits quantique à base de GaInNAs/GaAs pour son utilisation dans les télécommunications optiques émettant à une longueur d'onde de 1.3 μm ." Université Saad Dahlab de Blida, 2006.
- [22] SEGHILANI Mohamed seghir. " Modélisation et simulation d'une structure à multi puits quantiques contraints à base de GaInNAsSb/GaAs. " Mémoire de magister, Université Saad Dahleb de Blida, 2006.

[23] Bestam Rachid. "Modélisation et simulation d'une structure à base de semiconducteurs III-V pour le photovoltaïque." Mémoire de magister, 2011, signaux et systèmes, Université de Blida

[24] K. Koksai, B. G., "Critical Layer Thickness of GaIn(n)As(sb) qws on GaAs and InP Substrates for (001) and (111) Orientations". the European Physical Journal(5 may 2009), 211–218.

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

[26] Bediar, M., "Caracteristiques des Structures Laseres à Puits Quantiques Contraints", Université de Bataba, (2007).

[27] Anne MOKHTAROVA., " Puits quantique de composés Nitrures InGaN/GaN pour le photovoltaïque". Thèse de doctorat, physique/Nanophysique, 2016, Université de Grenoble