الجمهورية الجزائرية الديمقراطية الشعبية République Algérienne démocratique et populaire

وزارة التعليم السعسالي و البحث العسلمي Ministère de l'enseignement supérieur et de la recherche scientifique

> جسامعة سعد دحلب البليدة Université SAAD DAHLAB de BLIDA

> > كلية التكفولوجيا Faculté de Technologie

قسم الإلكترونيك Département d'Électronique



Mémoire de Master

pour l'obtention du diplôme de Master en Électronique option Micro-optoélectronique

présenté par :

SAIAH DAHMANE Ilyas

&

SMAILI Mohamed Djamel

Etude et simulation d'une structure à base de GaBi_{1-x}N_x/GaBi

Proposé par : Mr A.AISSAT

Année Universitaire 2015-2016

الحمد لله

EN PRÉAMBULE À CE MÉMOIRE, JE SOUHAITAIS ADRESSER MES REMERCIEMENTS LES PLUS SINCÈRES AUX PERSONNES QUI M'ONT APPORTE AIDE ĒΤ QUI ONT CONTRIBUE LEUR A L'ÉLABORATION DE CE MÉMOIRE AINSI QU'À LA ANNÉE REUSSITE DÆ CETTE FORMID&BLE UNIVERSITAIRE. MES REMERCIEMENTS S'ADRESSENT SPÉCIALEMENT À MES PARENTS ET MES DEUX SŒURS MERIEM ET RIYANE POUR LEUR SOUTIEN MORALE ET SOUTIEN MORAL ET FINANCIER AU COURS DE MON PARCOURE SCOLAIRE ET UNIVERSITAIRE. JE TIENS À REMERCIER SINCEREMENT MONSIEUR A.AISSAT. QUI, EN TANT QUE DIRECTEUR DE MÉMOIRE, S'EST TOUJOURS MONTRÉ À L'ÉCOUTE ET TRÈS DISPONIBLE TOUT AU LONG DE LA RÉALISATION DE CE MÉMOIRE. AINSI POUR L'INSPIRATION. L'AIDE ET LE TEMPS QU'IL A BIEN VOULU ME CONSACRER ET SANS QUI CE MÉMOIRE N'AURAIT JAMAIS VU LE JOUR. J'EXPRIME MA GRATITUDE À TOUS LES CONSULTANTS ET INTERNAUTES RENCONTRÉS LORS DES RECHERCHES EFFECTUÉES ET QUI ONT ACCEPTÉ DE RÉPONDRE À MES QUESTIONS AVEC GENTILLESSE. JE N'OUBLIE PAS MES COLLÈGUES POUR LEUR CONTRIBUTION, LEUR SOUTIEN ET LEUR PATIENCE. J'ADRESSE MES PLUS SINCÈRES REMERCIEMENTS À TOUS MES PROCHES ET AMIS, QUI M'ONT TOUJOURS SOUTENUE ET ENCOURAGÉE AU COURS DE LA RÉALISATION DE CE MÉMOIRE. MERCI À TOUS ET À TOUTES.

Ilyas Saíah Dahmane

REMERCIEMENTS

JE REMERCIE TOUT D'ABORD DIEU LE TOUT PUISSANT ET MISÉRICORDIEUX DE M'AVOIR FACILITÉ LA TÂCHE POUR VENIR À BOUT CE MODESTE TRAVAIL.

J'ADRESSE MES SINCÈRES REMERCIEMENTS TOUT PARTICULIEREMENT À MON DIRECTEUR DE THÈSE, LE PROFESSEUR AISSAT ABDELKADER, QUI ÉTÉ INDULGENT ET DISPONIBLE, QUI SANS LUI JE NE POUVAIS ABSOLUMENT PAS TERMINER CE TRAVAIL À TEMPS.

JE REMERCIE AUSSI MES PARENTS ET SURTOUT MA MÈRE, DE M'AVOIR POUSSE ET ENCOURAGER TOUT LE LONG DE MES ÉTUDES, ET BIEN PLUS ENCORE.

JE REMERCIE VIVEMENT MME DEGHBOUCHE, POUR SON AIDE INESTIMABLE ET SON DÉVOUEMENT, ELLE A ÉTÉ COMME UNE GRANDE SŒUR POUR MOI.

MES SENTIMENTS DE RECONNAISSANCE ET MES REMERCIEMENTS LES PLUS RESPECTUEUX VONT AUSSI À TOUTE PERSONNE QUI A PARTICIPÉ DE PRÈS OU DE LOIN À LA RÉALISATION DE CE TRAVAIL, À TOUS LES ENSEIGNANTS, À TOUS MES COLLÈGUES DU M2 AVEC QUI ONT A PASSÉ UNE AGRÉABLE ANNÉE.

Smaili Djamel

Dédícace

À mes très chers parents

Pour tous leurs sacrifices qu'ils ont consentis pour me permettre de suivre mes études dans les meilleures conditions possibles. J'espère qu'ils trouvent dans ce travail toute ma reconnaissance et tout mon amour. À mes sœurs Riyane et Meriem leurs mari ainsi leurs enfants, *je leurs souhaite une* belle vie pleine de joie et d'amour.

À mes chères amis proches et loin, aussi les deux promos Mop et R&T merci infiniment pour ses bons souvenirs et leurs soutiens dans les moments difficiles et à tous mes autres amis sans exception sans oublié la plus proche personne a moi qui m'a pas laissé dans les moments difficile merci tous.

Ilyas Saíah Dahmane

هذا العمل هو دراسة بئر كمومي متكون من منطقة نشطة GaBiN على الركيزة GaBi , من أجل الحصول على طول موجة GaBiN.μm 1.55 عبارة عن خليط الثلاثي من أشباه النواقل N- V-III , يتميز بخصائص مهمة نظرا لإدخال الازوت على الركيزة GaBi . لقد قمنا بدراسة تأثير الازوت على تقلص البنية الطاقوية , الفجوة, , الطاقة الكمية, وهذا لايجاد البنية المثلى للبئر الكمومي التي تناسب طول موجتنا .

كلمات المفاتيح: أشباه النواقل, الازوت, المنطقة النشطة, بئر كمومي, طول الموجة.

ملخص:

Résumé :

Ce travail porte sur l'étude d'une structure laser à base d'un puits quantique et composé d'une zone active sur le substrat GaBiN/GaBi, en vue de l'obtention d'une longueur d'onde 1.55 µm. Cet alliage ternaire qui est un semi-conducteur III-V présente des caractéristiques importantes. D'une manière drastique due à l'incorporation de l'azote dans le substrat GaBi. Nous avons étudié l'effet de l'azote sur la contrainte, la structure de bande, l'énergie de transition, l'énergie de quantification et nous avons calculé la longueur d'onde en fonction de la largeur du puits à la zone actif ainsi que la concentration de l'azote.

Mots clés : Semi-conducteur, Azote, Zone active, Puits quantique, Longueur d'onde.

Abstract :

This work focuses on the study of a base of a quantum well laser structure comprises an active region on the GaBiN/GaBi substrate in order to obtain a wavelength 1.55 μ m. This alloy which is a ternary III-V semiconductor has important characteristics. We studied the effect of nitrogen on coercion, the band structure, transition energy, energy quantization and calculate the wavelength depending on the width of the well to the active area and the concentration of nitrogen.

Keywords: Semiconductor, nitrogen, Active zone, Quantum well, wavelength.

Figure I.1 : représentation de la bande d'énergie	4
Figure I.2 : tableau périodique de Mendeleïev	4
Figure I.3 : Maille élémentaire de la structure zinc blende	5
Figure I.4 : de bande du matériau semi-conducteur GaBi	6
Figure I.5 : structure d'un puits quantique	7
Figure I.6 : Représentation des différents types de puits quantiques	.8
Figure I.7 : Schéma d'une structure de puits quantique de type I	.8
Figure I.8 : Puits de potentiel rectangulaire infiniment profond	9
Figure I.9 : Energie de transition dans un puits quantique	.14
Figure I.10: Illustration des deux types de contraintes1	6
Figure I.11: Structure de bande d'un semi-conducteur à gap directe	17
Figure I.12 : Dislocation de désaccord de maille1	8
Figure II.1 : Variation du paramètre de maille du GaBiN en fonction de la	
concentration de l'azote	23
Figure II.2 : Variation du désaccord paramétrique en fonction de la concentration	tion de
l'azote	25
Figure II.3 : variation de l'épaisseur critique en fonction de la concentration	
d'azote	26
Figure II.4 : Eclatement de la bande de conduction en deux sous bandes Ec-	et Ec+
en fonction du pourcentage d'azote selon le modèle BAC	29
Figure II.5 : Evolution de l'énergie de la bande interdite pour le GaBiN	29
Figure II.6 : décalages énergétiques induits par la contrainte de cisaillement p	pour la
bande des trous lourds et des trous légers en fonction de concentrati	ion de
l'azote	.31

Figure II.7 : Evolution de l'énergie du gap contraint après éclatement pour le
GaBiN en fonction de fractions d'azote
Figure II.8 : Variation de l'indice de réfraction en fonction de la longueur d'onde
Pour la structure GaBiN
Figure II.9 : Variation du coefficient d'absorption en fonction de la longueur d'onde
Pour la structure GaBiN
Figure II.10 : L'énergie de quantification du niveau fondamentale d'électron35
Figure II. 11 : L'énergie de quantification des trous lourds
Figure II. 12(A, B) : L'énergie de quantification des trous lourds
Figure II. 13 : l'énergie de quantification des trous légers
Figure II. 14 : l'énergie de quantification des trous légers (niveau1)
Figure II. 15 : Énergie de transition des trous lourds vers la bande de
conduction
Figure II. 16 : Énergie de transition des trous lourds vers la bande de conduction
Figure II. 17(A.B) : Énergie de transition des trous légers vers BC
Figure II. 18(A.B): Longueur d'onde d'émission des trous lourds vers BC43
Figure II. 19 : Longueur d'onde d'émission des trous légers vers BC45

Liste des acronymes et abréviations

- E : Energie de photon
- h : Constante de Planck
- C : Vitesse de la lumière dans le vide
- λ : Longueur d'onde
- N: Azote
- Ga: Gallium
- Bi: Bismuth
- BC: Bande de conduction
- BV: Bande de valence
- **α**: Coefficient d'absorption
- q: Charge élémentaire
- K: Constante de Boltzmann
- Eg: Energie de gap
- ε : Déformation hydrostatique
- as: Paramètre de maille du substrat
- ae: Paramètre de maille de la couche active
- γ: Coefficient de poisson
- Cij : Tenseur d'élasticité
- Ev, moy : Centre de gravité de la bande de valence
- $\Delta 0$: Energie de spin orbite
- av: Potentiel de déformation dans la bande de valence
- ac: Potentiel de déformation dans la bande de conduction
- ΔEsh: Décalage énergétique induit par la contrainte de cisaillement
- b: Potentiel de déformation tétragonale

BAC : Modèle d'anticroisement de bandes.

VBAC: Modèle d'anticroisement de bandes de valence

 ΔElh : Décalage d'énergie de la bande de trou lourd

ΔEhh : Décalage d'énergie de la bande de trou léger

Egcont : Energie de gap contraint

Egncont : Energie de gap non contraint

n: Indice de réfraction

Table des matières :

Introduction générale	01
Chapitre I : Notions fondamentales	
1.1 Introduction	03
1.2 Généralité sur les Semi-conducteur III.V	04
1.2.1 Les Alliages	05
1.2.2 Structure des bandes.	06
1.3 Hétérostructure quantique	07
1.3.1 Les états énergétiques dans un puits quantique	09
a. Puits de profondeur infinie	09
b. Puits quantique de profondeur finie	11
1.3.2 Energie de transition	14
1.4 L'effet de la contrainte	15
1.5 L'épaisseur critique	18
1.6 Les propriétés optiques	
1.7 Les Photodétecteur	20
1.8 Choix du matériau	21
Chapitre II : Résulats et discussions	
2.1. Introduction	22
2.2. Les matériaux III-V-N	22
2.3. Etude des paramètres électroniques	23
2.3.1 Le paramètre de maille	23
2.3.2 La contrainte	24
2.3.3 L'épaisseur critique	26

2.4. Détermination de l'énergie de la bande interdite	27
2.4.1 La bande de conduction	28
2.4.2. Effet de la contrainte sur le gap	29
2.4.2. Le gap contraint avec éclatement	31
2.5 Propriétés optiques	32
2.5.1 Indice de réfraction	33
2.5.2 Le coefficient d'absorption	34
2.6. Résultats et simulation	35
2.6.1 L'énergie de quantification :	35
a. L'énergie de quantification des niveaux d'électron	35
b. L'énergie de quantification des niveaux des trous lourds	36
c. La quantification des niveaux des trous légers	37
2.6.2 L'énergie de transition	38
a. L'énergie de transition des trous lourds vers la bande de	
conduction	38
b. L'énergie de transition des trous légers vers la bande de	
conduction	40
2.6.3 Longueur d'onde d'émission	42
a. Longueur d'onde d'émission des trous lourds vers BC	42
b. Longueur d'onde d'émission des trous légers vers BC	43
Conclusion	45
Conclusion générale	46

L'optoélectronique, domaine en pleine expansion, draine vers les amphithéâtres et les laboratoires nombre d'étudiant d'ingénieurs qui se trouvent rapidement confrontés au problème de son apprentissage, optoélectronique est en effet difficile a enseigner car elle est le fruit d'un assemblage complexe de diverse disciplines souvent disjointes telles que l'optique quantique, la structure de bande des semiconducteurs ou encore la physique du transport dans les composants électroniques.

Dans ce travail concerne l'application de la théorie quantique a l'analyse des propriétés optoélectroniques des semiconducteurs du type III-V, propriétés qui conduisent a la conception des sources de lumières électroluminescentes, des diodes laser et des détecteurs infrarouges à puits quantiques.

Les extraordinaires progrès réalisés dès la fin des années soixante-dix dans la maîtrise de la croissance couche atomique par couche atomique, d'hétérostructures semi-conductrices ont t'entrainé le renouvellement total des études de physique fondamentale et des applications dans le domaine des semiconducteurs. S'est ainsi développée une véritable ingénierie quantique des composants, appelée <<ingénierie de la bande interdite >> , et l'un des meilleurs exemples en est le concept de confinement des porteurs dans les puits quantiques, qui a conduit aux améliorations considérables des performances des émetteurs laser semiconducteur, omniprésents dans nos lecteurs de disques compacts et dans les transmissions sur fibre optique.

Aujourd'hui, les applications optiques de ces puits quantiques dans les matériaux III-V sont nombreuses et importantes : les diodes électroluminescentes, les sources laser semiconductrices pour les télécommunication sur fibre, les sources laser semi-conductrices de puissance pour le pompage des lasers solides, pour le micro-usinage et pour la réalisation de lidars semiconducteurs un marché en croissance très rapide. Enfin les détecteurs a multipuits quantiques vont permettre la réalisation économique de matrices de détecteurs infrarouges de grande dimension dans la bande 8 à 12 μ m destinés a la vision nocturne et au contrôle en ligne des process industriels.

Les progrès dans ce domaine continuent à un rythme extrêmement rapide et vont bouleverser de grands domaines applicatifs. Citons des diodes lasers a émission verticale VCSEL, dans le domaine de la transmission des données, les diodes lasers de puissances dans le domaine industriel et de la santé, les diodes lasers <<Bleu>> dans le domaine du stockage optique et probablement de l'éclairage, et enfin les applications dans la projection à très haute définition**[1].**

Ce travail est présenté en deux chapitres :

- Le premier chapitre est consacré aux notions fondamentales des matériaux Semiconducteurs III-V et des généralités sur les lasers.
- Le deuxième chapitre présente l'étude du matériau GaBi_{1-x}N_x et ses caractéristiques structurelles, électroniques, optiques, et les résultats de la simulation des modèles théoriques sous MATLAB.

L'objectif de notre travail consiste à constituer une structure GaBiN/GaBi pour avoir un laser émettant une longueur d'onde de 1.55 µm pour transmissions par fibres optiques, en changeant les paramètres de la structure.

2

1.1 Introduction :

Les matériaux solides peuvent être classés en trois groupes qui sont les isolants, les semiconducteurs et les conducteurs. On considère comme isolants les matériaux de conductivité $\sigma < 10^{-8}$ S/cm , comme semi-conducteurs les matériaux tels que

 10^{-8} S/cm < σ < 10^{3} S/cm et comme conducteurs les matériaux tels que σ > 10^{3} S/cm.

Les propriétés électriques d'un matériau sont fonction des populations électroniques des différentes bandes permises. La conduction électrique résulte du déplacement des électrons à l'intérieur de chaque bande. Sous l'action du champ électrique appliqué au matériau l'électron acquiert une énergie cinétique dans le sens opposé au champ électrique. Considérons à présent une bande d'énergie vide, il est évident de par le fait qu'elle ne contient pas d'électrons, elle ne participe pas à la formation d'un courant électrique. Il en est de même pour une bande pleine. En effet, un électron ne peut se déplacer que s'il existe une place libre (un trou) dans sa bande d'énergie. Ainsi, un matériau dont les bandes d'énergie sont vides ou pleines est un isolant. Une telle configuration est obtenue pour des énergies de gap supérieures à ~9eV, car pour de telles énergies, l'agitation thermique à 300K, ne peut pas faire passer les électrons de la bande de valence à celle de conduction par cassure de liaisons électroniques. Les bandes d'énergie sont ainsi toutes vides ou toutes pleines.

Un semi-conducteur est un isolant pour une température de 0 K. Cependant ce type de matériau ayant une énergie de gap plus faible que l'isolant (~1eV), aura de par l'agitation thermique (T=300K), une bande de conduction légèrement peuplée d'électrons et une bande de valence légèrement dépeuplée. Sachant que la conduction est proportionnelle au nombre d'électrons pour une bande d'énergie presque vide et qu'elle est proportionnelle au nombre de trous pour une bande presque pleine, on déduit que la conduction d'un semi-conducteur peut être qualifiée de «mauvaise».

3

Pour un conducteur, l'interpénétration des bandes de valence et de conduction implique qu'il n'existe pas de gap d'énergie. La bande de conduction est alors partiellement pleine (même aux basses températures) et ainsi la conduction du matériau est « élevée ». **[2].**



Figure I.1 : représentation de la bande d'énergie. [3].

Certains cristaux composés de différents éléments peuvent également présenter des propriétés semi-conductrices.

1.2 Généralités sur les semi-conducteurs III-V :

Les semi-conducteurs III-V sont composés à partir des éléments des colonnes III et V du tableau périodique de Mendeleïev.



Figure I.2 : tableau périodique de Mendeleïev [4].

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 la figure I.3 qui nous intéresse, elle est caractérisée par deux sous-réseaux à faces centrées décalés l'un par rapport à l'autre d'un quart de la diagonale principale du cube élémentaire.



Figure 1.3 : Maille élémentaire de la structure zinc blende [5].

1.2.1 Les alliages :

Il est donc possible de former un solide dit ternaire ou quaternaire en mélangeant deux ou trois semiconducteurs III-V. Cependant, la structure de cet alliage n'est pas celle d'un cristal parfait, en raison de la distribution aléatoire des atomes sur chaque site de la structure zinc-blende qui interdit en particulier la la propriété d'invariance par translation. Afin de décrire les états électroniques de l'alliage, l'approximation du cristal virtuel est souvent utilisée; dans un tel modèle, le potentiel apériodique est remplacé par une moyenne. Si on considère par exemple un solide AB_{1-x}C_x ; l'atome A prend place dans les sites du premier sous réseau cubique faces centrées (CFC) de la structure zinc-blende, et les atomes B et C occupent aléatoirement, les sites du deuxième sous réseau CFC. Le potentiel aléatoire créé par B(VB) et C(VC) sera remplacé par un potentiel périodique dont la valeur est donnée par une interpolation linéaire entre VB et VC :

$$< V > = V_A + x.V_C + (1-x).V_B$$
 (I.1)

Où x est la concentration de C dans le cristal.

Les premiers travaux sur les alliages III-V-N ont vu le jour il y a quarante ans. Ces alliages ont

été préparés souvent par des techniques de croissance dans des conditions proches de l'équilibre, par épitaxie en phase liquide ou vapeur ,essentiellement pour obtenir des couches massives.[5.6]

La difficulté d'incorporation de l'azote s'explique par des considérations thermodynamiques qui prédisent une solubilité limitée de l'azote dans les matériaux III-V sous des conditions proches de l'équilibre. Pour des teneurs faibles, on parle du dopage iso-électronique par l'azote [7].

Les premiers résultats expérimentaux obtenus ont montré que malgré la large bande interdite du GaN, l'incorporation de l'azote dans GaBi entraîne une réduction drastique de la bande interdite qui est caractérisée par un paramètre de courbure très important ou « Bowing » (en anglais). **[8.9]**

Les alliages III-V-N sont devenus un tremplin vers une nouvelle famille de Semi-conducteurs à faible gap qui ouvrent de nombreuses applications potentielles, matérialisées très rapidement par le développement des dispositifs lasers, tels les lasers à cavité verticale émettant par la surface (VCSEL) qui représentent une alternative attractive aux diodes lasers standards. Cependant, bien des points concernant les propriétés optiques de ces matériaux restent à élucider.

1.2.2 Structure de bande :

Les semi-conducteurs III-V présentent le plus souvent, une structure de bande à gap direct. Le maximum de la bande de valence et le minimum de la bande de conduction se trouvent au même point de la zone de Brillouin. Le rendement de la détection et l'émission lumineuse sont alors élevés puisque les transitions radiatives sont alors possibles. Cette propriété ouvre les portes à l'élaboration de dispositifs optoélectroniques tels les diodes lasers ou les diodes électroluminescentes. Une meilleure compréhension de la structure de bande des matériaux III-V est donc primordiale.



Figure 1.4: Structure de bande du matériau semi-conducteur GaBi.[10].

1.3 Hétérostructure quantique :

L'idée a été proposée dans le but d'observer les oscillations de Bloch des électrons, et puis avoir des amplificateurs et générateurs de micro-ondes.

Grace aux techniques de croissance, il est devenu possible d'élaborer une structure superréseau, cristaux photonique et puits quantique, Par ces propriétés optiques et électroniques fort intéressantes, cette dernière variété a suscité un intérêt considérable et a été l'objet de nombreuses études durant les dernières décennies.

Le principe d'une hétérostructure consiste à faire confiner le matériau A entre deux barrières du matériau B, ce que l'on appelle un confinement des porteurs (pour des épaisseurs de puits inférieures typiquement à 300 Å).

Les puits quantiques sont à la base de nombreux dispositifs semi-conducteurs.

Pour bien l'illustrer on utilise un exemple d'un creux et une bille dedans, c'est ce qu'on appelle un puits de potentiel. Quand la bille est dans le trou, on dit qu'elle est confinée. A moins qu'elle n'ait une vitesse (énergie) suffisamment grande, elle ne pourra pas sortir du trou.

Dans un puits quantique, la bille est une particule, généralement un électron ou un trou, et la largeur du puits est si petite que l'énergie de la particule se discrétise. Cela signifie que la particule ne peut pas avoir n'importe quelle énergie mais prend des énergies bien précises qui dépendent des paramètres du puits.

Les puits quantiques sont réalisés par des couches de matériaux différents.



Figure 1.5 : structure d'un puits quantique.

Comme les matériaux A et B. Dans le matériau A, les électrons ont une énergie potentielle plus basse que dans le matériau B. ainsi , si on a une structure formée d'une couche fine de

matériau A prise en sandwich par deux couches de matériau B, un électron dans la couche A sera confiné et ne pourra pas en sortir si son énergie est suffisamment petite. On a donc un puits quantique.

Les deux principales configurations d'un puits quantique :



Figure I.6 : Représentation des différents types de puits quantiques.

Dans le cas d'une structure de type I, les électrons et les trous sont confinés dans le puits représenté par le semi-conducteur A, alors qu'ils sont spatialement séparés dans la configuration de type II. Dans les systèmes à puits quantiques le mouvement de l'électron est libre dans le plan de la couche mais n'est pas possible suivant la direction de croissance.



Figure 1.7 : Schéma d'une structure de puits quantique de type I.

1.3.1 Les états énergétiques dans un puits quantique :

Dans un puits quantique, les porteurs de charge son confinés a des niveaux énergétiques différents et pour définir ces valeurs propres d'énergie, on va étudier 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 **[11]** :

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*}\frac{d^2\varphi(x)}{dx^2} + V(x)\varphi(x) = E_n\varphi(x)$$
 I.2

Avec :

$$\hbar = \frac{h}{2\pi}$$
 I.3

h : Constante de Planck.

 m^* : La masse effective.

 φ : La fonction d'onde.

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

 E_n : L'énergie de quantification (m_e,m_{hh},m_{lh}).

a. Puits de profondeur infinie :

Pour une particule dans un puits infiniment profond de longueur L (figure I.8), où le potentiel est nul à l'intérieur du puits et vaut l'infini à l'extérieur, quel que soit l'énergie de cette dernière elle reste confinée dans le puits.



Figure 1.8 : puits de potentiel rectangulaire infiniment profond.

La particule ne peut pas se trouver dans la région où V est infini, car celle-ci aurait alors une énergie infinie, et pour que l'équation de Schrödinger soit vérifiée à l'extérieur du puits (où $V = \infty$), le produit $V(x)\varphi(x)$ 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 I.2 devient

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*}\frac{d^2\varphi(x)}{dx^2} = E_n\varphi(x) \qquad \qquad \text{I.4}$$

Les solutions de cette équation différentielle sont de la forme :

$$\varphi(x) = \sin kx \qquad \qquad \text{I.5}$$

$$\varphi(x) = \cos kx \qquad \qquad \text{I.6}$$

Avec :

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$
 I.7

L'équation I.2 a comme solution générale :

$$\varphi(x) = A\sin kx + B\cos kx \qquad I.8$$

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

- <u>Première barrière :</u>
 - Au point 0 (coté V infini)

$$\varphi(0) = 0 \tag{a1}$$

Au point 0 (coté V nul)

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

Donc des équations a1 et a2 on obtient

$$B = 0$$

- deuxième barrière :

Au point L (coté V infini)

$$\varphi(L) = 0 \tag{b1}$$

Au point L (coté V nul)

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

Et comme B=0 on obtient :

$$\varphi(L) = A \sin kL \tag{b2}$$

De b1 et b2, on aura :

 $A \sin kL = 0$

A ne peut être nul. Si on suppose A = 0, la fonction d'onde sera nul partout, ce qui est faux avec la présence d'une particule, donc la solution est sin kL = 0

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

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

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \frac{\hbar^2 n^2 \pi^2}{2mL^2} \quad ; n = 1, 2, \dots, \infty$$
 (I.9)

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

b. Puits quantique de profondeur finie :

Le potentiel carré délimite les trois régions suivantes :

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

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

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

Avec :

$$\begin{cases}
K_1 = \frac{\sqrt{2m_1^*E}}{\hbar} \\
K_2 = \frac{\sqrt{2m_2^*(V_0 - E)}}{\hbar}
\end{cases}$$
(I. 11)

(I.10)

Où :

 m_1^* : Est la masse effective de semi-conducteur SC₁dans la région2.

 m_2^\ast : Est la masse effective de semi-conducteur SC_2 dans les deux régions 1 et 3.

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

$$\begin{split} \Psi_{1} &= A_{1}e^{K_{2}z} + B_{1}e^{-K_{2}z} \\ \Psi_{2} &= A_{2}e^{jK_{1}z} + B_{2}e^{-jK_{1}z} \\ \Psi_{3} &= A_{3}e^{K_{2}(z-L_{1})} + B_{3}e^{-K_{2}(z-L_{1})} \end{split}$$
(I. 12)

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

$$\begin{cases}
\Psi_{1} = A_{1}e^{K_{2}z} \\
\Psi_{2} = A_{2}e^{jK_{1}z} + B_{2}e^{-jK_{1}z} \\
\Psi_{3} = B_{3}e^{(-K_{2}(z-L_{1}))}
\end{cases}$$
(I. 13)

Les constantes d'intégration A₁, A₂, B₂, B₃ 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=L₁.

En z=0

•
$$\Psi_1(0) = \Psi_2(0)$$

• $(1/m_1^*) \cdot d\Psi_1(0)/dz = (1/m_2^*) \cdot d\Psi_2(0)/dz$ (I.14)

On obtient

$$\begin{cases} A_1 - A_2 - B_2 = 0\\ (K_2/m_1^*) \cdot A_1 - j(K_1/m_2^*) \cdot A_2 + j(K_1/m_2^*) \cdot B_2 = 0 \end{cases}$$
(I. 15)

 $En z=L_1$

•
$$\Psi_2(L_1) = \Psi_3(L_1)$$
 (I. 16)

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

On obtient

$$\begin{cases} A_2 e^{jK_1 L_1} + B_2 e^{-K_1 L_1} - B_3 = 0 \\ j(K_1/m_2^*) \cdot A_2 e^{jK_1 L_1} - j(K_1/m_2^*) \cdot B_2 e^{-jK_1 L_1} + (K_2/m_1^*) \cdot B_3 = 0 \end{cases}$$
(I. 17)

D'où le système d'équations

$$\begin{cases} A_1 - A_2 - B_2 = 0 & (I. 18) \\ (K_2/m_1^*) \cdot A_1 - j(K_1/m_2^*) \cdot A_2 + j(K_1/m_2^*) \cdot B_2 = 0 \\ A_2 e^{jK_1L_1} + B_2 e^{-K_1L_1} - B_3 = 0 \\ j(K_1/m_2^*) \cdot A_2 e^{jK_1L_1} - j(K_1/m_2^*) \cdot B_2 e^{-jK_1L_1} + (K_2/m_1^*) \cdot B_3 = 0 \end{cases}$$

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

$$\begin{vmatrix} 1 & -1 & 0 & -1 \\ K_2/m_1^* & -j(K_1/m_2^*) & 0 & j(K_1/m_2^*) \\ 0 & e^{jK_1L_1} & -1 & e^{-K_1L_1} \\ 0 & j(K_1/m_2^*)e^{jK_1L_1} & K_2/m_1^* & -j(K_1/m_2^*)e^{-jK_1L_1} \end{vmatrix} = 0$$
(I.19)

D'où l'équation :

$$\sqrt{2m_2E_n/\hbar^2}$$
. L₁ = n. π + 2Arc tan[$\sqrt{m_2(V_0 - E_n)/m_1E_n}$] (I. 20)

Les valeurs propres E_n correspondantes à chaque entier n sont déterminées à partir de l'équation (1.20), ainsi appelée équation aux valeurs propres.

1.3.2 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 I.9) est donnée par la relation suivante :



Figure 1.9 : Energie de transition dans un puits quantique[18].

$$E_{tr_{i,j}} = E_g + E_{n_i} + E_{h_j}$$
; $i = 1, 2, \dots, n$, $j = 1, 2, \dots, n$ I.21

Avec

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

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

1.4 L'effet de la contrainte :

Lors de la croissance d'un matériau sur un autre, les deux matériaux représentent la couche active et la couche substrat, on suppose que ces deux derniers aient des paramètres de mailles différents mais très proches, dans le cas contraire on aura une dislocation comme indiqué dans la figure I.10. On peut tirer deux types de contrainte, selon les paramètres de mailles de matériaux utilisés, la couche épitaxieé se déforme dans deux sens, perpendiculaire et parallèle à la surface du substrat. Si l'épaisseur de la couche active est plus petite que celle de la couche substrat on peut dire donc qu'on a une tension, si l'épaisseur de la couche active est plus grande que celle de la couche substrat on dit qu'on â une compression comme montré dans la figure I.10.

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

La composante hydrostatique : Liée à la déformation selon l'axe de croissance (Oz), 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 : augmente la dégénérescence des états énergétique des trous lourds et des trous légers en k = 0 (typiquement d'une valeur $\Delta_{0(hh-lh)}$ de 60 – 80 MeV pour un désaccord paramétrique de 1%).

Pour une couche soumise à une contrainte bi-axiale de compression, la composante hydrostatique augmente le gap moyen entre les bandes de conduction et de valence, alors que la composante de cisaillement rend les bandes de valence fortement anisotropes.

← a _e →			

Couche épitaxieé



Figure 1.10: Illustration des deux types de contraintes.

Où :

- as : le paramètre de maille du substrat.
- ae: le paramètre de maille de la couche épitaxieé.



Figure I.11: Structure de bande d'un semi-conducteur à gap directe.

En l'absence de contrainte, les bandes de trous lourds et trous légers sont isotropes et dégénérées au centre de la zone de Brillouin, et la bande de trous spin-splittée est située à une énergie en dessous de ces deux bandes. En présence de la contrainte, les niveaux energétiques se séparent comme indiqué sur la figure I.11 b et c.

1.5 L'épaisseur critique :

La croissance d'une couche en surface du substrat est liée à la notion d'épaisseur critique. Ainsi, on parle de croissance cohérente pour une épaisseur de couche inférieure à l'épaisseur critique. Dans ce cas, la couche épitaxieé est en accord de maille avec le substrat, et la croissance est une croissance bidimensionnelle, monocouche par monocouche (MC). **[12].**

Pour une épaisseur épitaxieé supérieure à l'épaisseur critique, on peut observer un phénomène dit de relaxation. (Figure I.12)



Figure 1.12 : Dislocation de désaccord de maille.

1.6 Les propriétés optiques :

On peut citer deux principales propriétés optique d'un matériau son indice de réfraction et son coefficient d'absorption.

Ces deux dernières sont essentielles pour les composants optoélectroniques, précisément pour le déplacement de la lumière dans le matériau. Dans un composant composé de différents matériaux, la lumière a tendance à se propager dans les matériaux ayant le plus fort indice de réfraction. C'est le cas des lasers ou la lumière est confinée dans une couche particulière, et aussi dans les applications photovoltaïques afin d'augmenter l'efficacité d'absorptions de la lumière. On définit l'indice de réfraction avec la loi suivante :

$$n = \frac{c}{v}$$
(I.22)

Où C représente la vitesse de la lumière dans le vide, et V la vitesse de la lumière dans le matériau.

L'absorption en optique, ou en électromagnétisme, désigne un processus physique par lequel l'énergie électromagnétique est transformée en une autre forme d'énergie. **[13].**

Le coefficient d'absorption, α , est défini par :

$$\alpha (\lambda) = \frac{4\pi k(\lambda)}{\lambda}$$
(I.23)

avec k est le coefficient d'extinction linéique, il exprime l'atténuation de l'énergie du rayonnement électromagnétique à travers le milieu.

La valeur du coefficient d'absorption α varie entre différents matériaux et aussi avec la longueur d'onde pour un matériau particulier.

Pour les applications de la détection et les cellules solaires, le coefficient d'absorption est un paramètre important puisqu'il va déterminer la quantité de photons absorbés par le matériau, et donc la quantité de porteurs pouvant être produits. On choisira donc des matériaux avec de forts coefficients d'absorption pour la fabrication de cellules solaires. **[14].**

1.7 Les Photodétecteurs :

Les photodétecteurs sont des composants à semi-conducteurs qui détectent les signaux optiques par des processus électroniques **[15]**. Ces processus sont conditionnés par la transition optique des porteurs de charges d'un état lié à un état de conduction. Ce qui se traduit par l'augmentation de la conductivité du semiconducteur due à l'augmentation de la densité de porteurs de charge libres et par conséquent la génération d'un courant électrique d'ou la conversion des variations optiques en courant électrique **[16]**.

La sensibilité à une gamme de longueurs d'ondes est imposée principalement par la bande d'absorption du matériau, notons que les effets thermiques ont un effet notable sur la performance du détecteur.

Le phénomène d'absorption de photons qui crée des paires électron-trou (PETs) est vertical dans l'espace des **k**, donc il est souhaitable que le matériau soit à gap direct **[17]**. D'autres part on peut utiliser des matériaux composés dont l'avantage est qu'ils permettent d'ajuster les paramètres du détecteur en fonction de la composition **x** de l'alliage.

Il existe différentes structures de photodétecteurs dont on peut citer :

- les photoconducteurs.
- les photodétecteurs à jonction p-n.
- les photodiodes p-i-n.
- les photodiodes Schottky.
- les phototransistors.
- les photodétecteurs à hétérojonctions.

Les paramètres essentiels d'un photodétecteur sont :

- le rendement quantique η.
- le gain Г.
- Le temps de réponse R.

Parmi les applications des photodétecteurs, on peut citer les systèmes de communication

par fibre optique [0.8, 1.6] µm dont le principe de base repose sur l'utilisation des photodétecteurs. Ainsi les photodetecteurs sont largement utilisés, dans les ordinateurs, moniteurs de combustion ou environnementaux, détection de flammes et d'autres applications militaires et intersatéllitaires. Pour ces applications les photodétecteurs doivent satisfaire plusieurs besoins comme : haute sensibilité à des longueurs d'ondes opérationnelles, grande vitesse de réponse, minimum de bruit, le fonctionnement sous des conditions sévères. Ainsi que les circuits électroniques associés, les tensions d'alimentations et le prix sont aussi des éléments à considérer. **[15]**

1.8 Choix du matériau :

Les matériaux III-V sont utilisés en optoélectronique à cause de leur gap direct, donc ils sont rapides et efficaces pour les transitions optiques.

L'Incorporation de l'azote nous permet de mieux controler le gap et donc la longueur d'onde d'émission grâce à l'éclatement de bande de conduction.

2.1. Introduction :

Des résultats énormes ont été enregistrés dans le domaine microélectronique après la découverte du silicium, cela a poussé les chercheurs vers d'autres matériaux semiconducteurs qui ont des propriétés de transport supérieures à celles du Silicium, et conduit la plupart des grands laboratoires de recherches à s'intéresser à des nouveaux matériaux et en particulier les composés semi-conducteurs III-V.

La découverte d'hétérostructures à base de semi-conducteurs III-V a permis le développement de l'optoélectronique. Les nitrures d'éléments III-V (GaN, AlN, InN et leurs alliages) sont des semi-conducteurs aux propriétés remarquables. La plus importante est leur bande interdite directe qui varie de 1,9 eV pour InN à 3,4 eV pour GaN (de 0.365µm à 0.653µm). Ils ont une large bande interdite, ce qui est particulièrement attrayant pour la physique et les applications optoélectroniques.[17]

Ce chapitre porte sur la diminution de l'énergie de la bande interdite de l'alliage GaNBi avec l'incorporation d'azote. Nous allons étudier l'influence de l'incorporation de l'azote sur les caractéristiques de la structure GaNBi/GaBi : paramètre de maille, le gap, la contrainte, épaisseur critique et l'indice de réfraction. Le modèle d'anticroisement de bande est utilisé pour décrire la diminution de l'énergie de la bande interdite avec l'incorporation d'azote dans le binaire GaBi.

2.2.Les matériaux III-V-N :

Les alliages des nitrures-III-V ont attirés beaucoup d'attention depuis la dernière décennie. De nouvelles enquêtes sur les semiconducteurs III-V contenant le N ont été réalisées à partir de 1992, avec les techniques modernes de croissance épitaxiale. Les matériau étudiés sont des semiconducteurs faisant partie de la catégorie des III-V-N, c'est-à-dire, composés d'éléments de la colonne III, d'azote et d'éléments de la colonne V du tableau de Mendeleïev. L'introduction d'azote entraine de profondes modifications de la structure de bande de ces matériaux, notamment une forte réduction de l'énergie de la bande interdite.

2.3. Etude des paramètres électroniques :

La loi de Végard est une loi empirique indiquant que les valeurs des propriétés d'un alliage (gap d'énergie, paramètre de maille, constantes élastiques, etc.) peuvent être déterminées par une interpolation linéaire des valeurs des propriétés de ses composants. **[18]**

Pour le matériau GaBi1-xNx qui est un ternaire de type 1+2, le calcul des différents paramètres par cette loi est comme suit :

$$p(x) = (x) * p(GaN) + (1 - x) * p(GaBi)$$
 II-1

Où p (x) est le paramètre à déterminer.

2.3.1 Le 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 binaires suivant la loi de Végard qui est donnée par la relation suivante **[19]**:

a(x) = 1 - x * a(GaBi) + x * a(GaN) II-2

Les paramètres de maille des principaux semi-conducteurs sont donnés dans l'annexe B. Nous avons tracé le paramètre de maille de GaBiN en fonction des concentrations de l'azote N.



Figure II.1 : Variation de paramètre de maille du GaBiN en fonction de la concentration de l'azote.

La figure II.1 représente la variation du paramètre de maille en fonction de la concentration d'azote, On remarque que plus la concentration de l'azote augmente plus le paramètre de maille de GaBiN diminue, on a pour une concentration d'azote de 5% une valeur de 6.22 A° de paramètre de maille, nous pouvons dire que l'azote a pour effet de réduire le paramètre de maille.

2.3.2 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.

L'épitaxie du matériau GaBiN sur GaBi 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_{yy} et ε_{xx}) et uniaxiale (ε_{zz}). [15]

Les équations sont données par :

Biaxiale dans le plan de croissance :

$$\varepsilon_{\rm xx} = \varepsilon_{\rm yy} = \frac{a_{\rm s} - a_{\rm e}}{a_{\rm e}} = \varepsilon_{//}$$
 II.2

Uniaxiale dans la direction de croissance :

$$\varepsilon_{zz} = \frac{a_{\perp} - a_c}{a_c} = \varepsilon_{\perp} = -2 \frac{c_{12}}{c_{11}} \varepsilon_{//}$$
 II.3

On donne :

- ε : La déformation ou le désaccord de maille.
- as : Le paramètre de maille du substrat (GaBi).
- ae : Le paramètre de maille de la couche épitaxiée (GaBiN).
- Cij : Les coefficients d'élasticité.

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 voisins, 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.[20]



Figure II.2 : Variation du désaccord paramétrique en fonction de la concentration de l'azote.

Nous avons calculé et tracé sur la **figure II.2** chacune des équations **II.2** et **II.3** en utilisant l'équation de la loi de Végard **II.1** pour le calcul de a(x), C11(x) et C12(x). Nous pouvons voir que la déformation biaxiale ε_{xx} augmente avec l'augmentation de l'azote, par contre, la déformation uniaxiale ε_{zz} diminue avec l'augmentation de l'azote.

2.3.3 L'épaisseur critique:

Pour calculer l'épaisseur critique de notre système $GaN_xBi_{1-x}/GaBi$. On a utilisé le modèle le plus classique, celui de K. Koksal et B. Gonul **[21]**, 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 la contrainte. La valeur de l'épaisseur critique hc 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 **[21]** :

$$h_{c} = \frac{a_{e}}{\beta\sqrt{2}\pi\varepsilon} * \frac{1-0.25\gamma}{1+\gamma} * \ln\left(\frac{h_{c}\sqrt{2}}{a_{e}} + 1\right)$$
 II.4

Où

 ε : est le désaccord paramétrique.

 γ : est le coefficient de poisson donné par : $\gamma = \frac{C_{12}}{C_{11}+C_{12}}$

Où :

 C_{11} et C_{12} sont les coefficients d'élasticité obtenus par l'interpolation linéaire des binaires GaN, GaBi.



Figure II-3 : variation de l'épaisseur critique en fonction de la concentration d'azote

La figure II.3 montre l'évolution de l'épaisseur critique en fonction de la concentration de l'azote, on remarque que plus la concentration de l'azote augmente l'épaisseur critique diminue et devient petite, pour GaBi_{0.95}N_{0.05} on peut faire croitre une couche épitaxiée qui ne dépasse pas 210 A°, cela indique que la réalisation du matériau devient plus difficile lorsque on augmente la concentration de l'azote.

2.4. Détermination de l'énergie de la bande interdite :

Pour déterminer l'énergie de la bande interdite nous utilisons le modèle d'anticroisement de bandes pour calculer la bande de conduction. Puis nous introduisons l'effet de la contrainte sur la bande interdite.

Il a été montré par mesures de spectroscopie qu'à partir d'un certain pourcentage d'azote le gap se divise en deux sous bandes, et que plus la concentration d'azote augmente plus les deux sous bandes s'éloignent l'une de l'autre, ces résultats viennent appuyer ceux obtenus avec le modèle de BAC qui explique la diminution de l'énergie de gap par un éclatement de la bande de conduction avec l'incorporation de l'azote.[22]

2.4.1 La bande de conduction :

On peut donner la solution à la valeur propre sous la forme de la matrice par l'annulation du déterminant **[24]** :

$$\begin{vmatrix} E_M - E & V_{MN} \\ V_{MN} & E_N - E \end{vmatrix} = 0 \qquad \text{II.5}$$

Les solutions sont données par :

$$E_{C\pm} = \frac{1}{2} \left| E_N + E_C(GaBi) \pm \sqrt{\left(E_N - E_C(GaBi)\right)^2 + 4V_{MN}^2} \right| \qquad \text{II.6}$$

Avec $E_N (E_N=1,65ev)$ l'énergie du niveau de l'atome d'azote isolé, E_C (GaBi) est l'énergie de la bande de conduction du GaBi et V_{MN} décrit l'interaction entre ces deux types d'états. Cette interaction est d'autant plus forte que le nombre d'atomes d'Azote dans la matrice GaBiN est élevé, comme le montre l'équation suivante [24] :

$$V_{MN} = A_{MN}\sqrt{x} \qquad \qquad \text{II-7}$$

Avec : $A_{MN} = 2,7$

Où x est la fraction d'azote et A_{MN} est une constante.

Avec :

 $Eg(GaBiN) = E_c^- - Ev(GaBi)$



Figure II.4 : Eclatement de la bande de conduction en deux sous bandes Ec- et Ec+ en fonction du pourcentage d'azote selon le modèle BAC.

On peut voir la diminution de l'énergie de gap (Eg_{GaBiN}) de GaBiN lors de l'introduction de l'azote dans GaBi, ce qui donne une bande interdite plus petite pour une faible concentration de l'azote.



Figure II.5 : Evolution de l'énergie de la bande interdite pour le GaBiN.

2.4.2. Effet de la contrainte sur le gap :

En l'absence de la contrainte les bandes de trous lourds et trous légers sont isotropes et dégénérées au centre de la zone de Brillouin.

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

1) la composante hydrostatique, liée à la déformation selon l'axe de croissance (Oz), provoque un décalage du centre de gravité de la bande de valence ainsi que du centre de gravité de la bande de conduction ;

2) la contrainte de cisaillement, qui lève la dégénérescence des états énergétique des trous lourds et des trous légers en k=0 (typiquement d'une valeur $_{0 (hh-lh)}$ de 60-80 meV pour un désaccord paramétrique de 1%).

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 **[24]** :

$$E_{\nu,moy}^{hy} = a_{\nu}(2\varepsilon_{//} + \varepsilon_{\perp}) \qquad \text{II.8}$$
$$E_{C}^{hy} = a_{C}(2\varepsilon_{//} + \varepsilon_{\perp}) \qquad \text{II.9}$$

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 :

$$\Delta E_{hh}^{sh} = -\frac{1}{2} \delta E^{sh} \qquad \text{II-10}$$

$$E_{lh}^{sh} = -\frac{1}{2}\Delta_0 + \frac{1}{4}\delta E^{sh} + \frac{1}{2}\left[\Delta_0^2 + {}_0\delta E^{sh} + \frac{9}{4}(\delta E^{sh})^2\right]^{1/2}$$
 II-11

Avec :

$$E^{sh} = 2$$
 b $(- //)$ II-12

Où b est le potentiel de déformation tétragonale.

La figure II.6 montre l'évolution du décalage énergétique induit par la contrainte de cisaillement en fonction des fractions d'azote, on constate que le décalage augmente avec l'augmentation de la concentration de l'azote.



Figure II.6 décalages énergétiques induits par la contrainte de cisaillement pour la bande des trous lourds et des trous légers en fonction de concentration de l'azote.

2.4.3. le gap contraint avec éclatement :

Les expressions de l'énergie de gap contraint éclaté sont données comme suit **[24]**: Pour une couche en compression :

$$E_{ghh} = E_g^- + E_C^{hy} - \Delta E_{\nu,moy}^{hy} - \Delta E_{hh}^{sh}$$
 II.13

Pour une couche en tension :

$$\mathsf{E}_{\mathrm{lh}} = \mathsf{E}_{\mathrm{g}}^{-} + \mathsf{E}_{C}^{hy} - \Delta \mathsf{E}_{\nu,moy}^{hy} - \Delta \mathsf{E}_{lh}^{sh} \qquad \text{II.14}$$

Dans la figure **II.7** on a simulé la variation du gap contraint avec éclatement pour le cas d'une couche en compression calculé par l'équation II.13 et celle d'une couche en tension calculé par l'équation II.14.

Avec : E_g^- est l'énergie de la bande interdite non contrainte Où :

$$E_{g}^{-} = E_{C}^{-} - E_{v} \qquad \qquad \text{II.15}$$



Figure II.7 Evolution de l'énergie de gap contraint après éclatement pour le GaBiN en fonction de fractions d'azote.

Dans la figure II.7 qui représente la variation de l'énergie de gap contraint après l'éclatement en fonction de concentration de l'azote, on note que pour une concentration de l'azote qui varie jus qu'a 5% l'énergie de gap diminue, on note aussi que l'énergie de gap contraint éclaté pour une compression (Eg_{hh}) diminue plus rapidement que celle de la tension (Eg_{lh}).

2.5 Propriétés optiques :

On peut citer plusieurs propriétés optique d'un matériau, comme l'indice de réfraction Cette propriété est primordiale pour les composants optoélectroniques puisqu'elle régit le déplacement de la lumière dans le composant.

2.5.1 Indice de réfraction :

La réfraction est un phénomène qui affecte la lumière (mais aussi toutes les autres ondes électromagnétiques et certaines ondes mécaniques) lorsqu'elle se propage dans un milieu hétérogène. Dans un milieu homogène la lumière se propage en ligne droite mais ce n'est plus le cas lorsqu'elle change de milieu ou lorsque le milieu n'est plus homogène : elle est alors déviée, on dit qu'elle est réfractée [25].

L'indice de réfraction provient du phénomène de réfraction qui désigne le changement de direction de la lumière au passage d'un milieu à un autre. La notion d'indice de réfraction a d'abord été introduite empiriquement comme coefficient dans les lois de Snell-Descartes **[26]** :

$$n^{2}(\lambda) = (A + \frac{B}{1 - C/\lambda^{2}} + \frac{D}{1 - E/\lambda^{2}})$$
 II.16

Avec λ en micromètre et A, B, C, D et E sont les coefficients de Sellmeier. Les coefficients de Sellmeier des principaux binaires III-V **[26]**. On calcule ensuite l'indice de réfraction avec la loi de Végard :

$$n^{2}(x) = x * n^{2}(GaN) + (1-x) * n^{2}(GaBi)$$
 II. 17

On constate a partir de la figure II.8 qui représente la variation de l'indice de réfaction en fonction de la longueur d'onde que l'indice de réfraction diminue lorsque la longueur d'onde augmente ainsi que l'augmentation de la concentration de l'azote l'affaiblit. Il faut tenir compte de cette dépendance car si l'indice varie sensiblement on aura des pertes dans le matériaux dû au phénomène de dispersions, et des distortions dans le signal informatif (en cas d'utilisation dans les telecoms).



Figure II.8 : Variation de l'indice de réfraction en fonction de la longueur d'onde Pour la structure GaBiN.

2.5.2 Le coefficient d'absorption :

L'interaction entre les photons et le semiconducteur se traduit par une caractéristique essentielle du matériau dans le domaine photovoltaïque : le coefficient d'absorption. Il traduit le nombre de photons absorbés par unité d'épaisseur du matériau en fonction de leur longueur d'onde. L'augmentation de la longueur d'onde des photons entraîne une diminution du coefficient d'absorption. Lorsque l'énergie du photon devient inférieure à celle du gap du matériau, la transition des électrons vers la bande de conduction n'est plus possible et le photon n'est pas absorbé **[28].**

Le coefficient d'absorption $\alpha(E)$, pour une énergie du photon E supérieure à l'énergie du gap est donné par la relation suivante [29]:

$$\alpha(E) = (\alpha_0 \sqrt{E - Eg})/E$$
; avec $E(ev) = \frac{1.24}{\lambda(\mu m)}$.

 α : Coefficient d'absorption en fonction de l'énergie du photon E.

 α_0 : constant d'absorption.

Nous avons représenté sur la figure II.9, l'évolution du coefficient d'absorption pour différentes concentrations d'azote en fonction des longueurs d'ondes des photons incidents pour la structure GaBiN/GaBi, on remarque que le coefficient d'absorption atteint son maximum a λ =0.5 µm, puis il diminue jusqu'à devenir nul, on note aussi que l'incorporation de l'azote augmente le coefficient d'absorption.



Figure II.9 : Variation de coefficient d'absorption en fonction de la longueur d'onde.

2.6. Résultats et simulation :

Dans cette partie nous allons voir les résultats obtenus lors de la simulation sous MATLAB de la structure $GaBi_{1-x}Nx/GaBi$. tels que la quantification des niveaux d'électron(niveau fondamental), trous lourds et trous légers aussi que l'énergie de transition vers la bande de conduction et la longueur d'onde d'émission en variant la largeur de puits quantique et la concentration de l'azote.

2.6.1 L'énergie de quantification :

a. L'énergie de quantification des niveaux d'électron :

La figure II.9 représente l'énergie d'électron de premier niveau fondamental en fonction de la largeur L du puits quantique avec les différentes concentrations de l'azote.

On déduit que plus la concentration de l'azote diminue l'énergie d'électron, aussi diminue ainsi que la largeur du puits lorsqu'elle augmente elle diminue cette énergie d'électron.



Figure II.10 L'énergie de quantification du niveau fondamentale d'électron.

b. L'énergie de quantification des niveaux des trous lourds :

Lorsque l'atome reçoit certaines longueurs d'ondes électromagnétiques, ses électrons peuvent absorber de l'énergie en absorbant un photon ou bien peuvent émettre de l'énergie en émettant un photon.

Le gain d'énergie peut se faire si l'atome absorbe une radiation lumineuse de fréquence v ou de longueur d'onde λ (dans le spectre de la lumière éclairant l'atome, on aura une raie sombre sur fond brillant et le spectre de la lumière reçue sera un spectre de raies d'absorption).

L'émission de lumière peut se faire, par perte d'énergie de l'électron, si l'électron passe d'un niveau excité à un niveau de plus basse énergie : raie brillante sur un fond sombre et on aura un spectre de raies d'émission.



Figure II. 11 L'énergie de quantification des trous lourds.



Figure II. 12(A,B) L'énergie de quantification des trous lourds, en agrandissant la figure pour plus de clarté.

La figure II.10 représente les niveaux d'énergies pour les 2 premiers niveaux de quantification des trous lourds en fonction de la largeur de puits quantique en variant la concentration de l'azote de 1% a 5%.

L'énergie de quantification des trous lourds devient de plus en plus faible lorsque la largeur de puits devient plus grande, on remarque aussi que l'énergie diminue avec incorporation de l'azote.

c. L'énergie de quantification des niveaux des trous légers :

On constate a partir de la figure II.12 qui représente l'énergie de quantification des trous légers en fonction de la largeur du puits et la concentration de l'azote que ces deux derniers jouent un rôle très important dans la diminution de l'énergie de quantification.

Dans la figure II.13 on voit bien cette diminution de l'énergie de quantification, la figure II.13 représente le premier niveau de trous légers.

Dans notre étude et simulation on s'intéresse beaucoup plus sur le premier niveau par ce qu'il représente une population des porteurs très importante par rapport aux autres niveaux de quantification.



Figure II. 13 l'énergie de quantification des trous légers.



Figure II. 14 l'énergie de quantification des trous légers (niveau1).

2.6.2 L'énergie de transition :

a. L'énergie de transition des trous lourds vers la bande de conduction :

L'énergie de transition des trous lourds vers la bande de conduction c'est l'énergie nécessaire pour qu'un électron puisse se déplacer vers la bande de conduction.

Cette énergie est représentée dans le deux figures suivantes en fonction de la largeur de puits aussi la concentration de l'azote.



Figure II. 15 Énergie de transition des trous lourds vers la bande de conduction.

La figure II.14 montre la variation de l'énergie de transition des trous lourds en fonctionne de la largeur de puits et la concentration de l'azote.

L'énergie de transition des trous lourds diminue avec l'incorporation de l'azote, ainsi que l'augmentation de la largeur de puits diminue cette énergie rapidement, sur la figure II.15 on voit juste pour une augmentation de 5 A° dans la largeur de puits a causé une diminution de \approx 0.12 ev de l'énergie de transition, c'est une diminution très importante.



Figure II. 16 Énergie de transition des trous lourds vers la bande de conduction.

b. L'énergie de transition des trous légers vers la bande de conduction :

L'évolution de l'énergie de transition des trous légers en fonction de la largeur du puits quantique pour les différentes concentrations de l'azote est représentée sur la figure II.16

A partir de la figure II.16 on constate que l'incorporation de l'azote diminue légèrement l'énergie de transition des trous légers vers la bande de conduction, cette diminution devient plus importante lorsque on agrandit la largeur du puits quantique.

On comparant l'énergie de transition des trous lourds avec celle des trous légers on remarque que l'énergie de transition des trous lourds diminue plus rapidement que l'énergie des trous légers.



Figure II. 17(A, B) Énergie de transition des trous légers vers la bande de conduction.

2.6.3 Longueur d'onde d'émission :





Figure II. 18(A,B) Longueur d'onde d'émission des trous lourds vers BC.

Sur la figure II.17 qui représente la variation de la longueur d'onde en fonction de la largeur du puits pour les différentes concentrations de l'azote, On peut bien voir la longueur d'onde d'émission évolue à une forme croissante avec l'évolution de la largeur de puits, On note aussi que l'incorporation de l'azote augmente la longueur d'onde d'émission.

b. Longueur d'onde d'émission des trous légers vers la bande de conduction :

La figure II.18 ci dessous montre l'évolution de la longueur d'onde d'émission pour trous légers en variant la largeur de puits et la concentration de l'azote.

On remarque que la longueur d'onde d'émission augmente avec l'augmentation de la largeur de puits, et aussi l'incorporation de l'azote qui fait une augmentation remarquable dans la longueur d'onde d'émission.

Pour comparer les longueurs d'onde d'émission obtenues par les trous légers et les trous lourds, on remarque que ces derniers ont un léger avantage par rapport aux trous légers.



Figure II. 19 Longueur d'onde d'émission des trous légers vers BC.

Remarques et conclusion :

Dans ce chapitre nous avons simulé les différents paramètres caractérisant la structure GaBiN/GaBi et nous avons abouti aux résultats cités ci-dessous :

• L'incorporation de l'azote éclate la bande de conduction, donc elle diminue l'énergie de gap.

• L'augmentation de la longueur d'onde d'émission avec une petite incorporation de l'azote.

.on en conclue qu'on peut choisir plusieurs longueurs d'onde selon l'application désirée. Pour ce qui est de notre cas, la largeur du puits optimale est de : 143 A° (inferieure a l'épaisseur critique qui est de 200 A°) pour une concentration de l'azote de 2% et une contrainte de 0.6%.

Conclusion générale et perspectives :

Le travail effectué dans le cadre de ce projet de fin d'études porte sur l'étude et la simulation d'une structure GaBiN/GaBi, à partir des différentes relations théoriques et des simulations faites a l'aide du logiciel MATLAB.

Pour cela nous avons commencé par présenter dans le premier chapitre quelques généralités sur les semi-conducteurs en général et sur les semi-conducteurs III-V-N en particulier.

Dans le deuxième chapitre nous avons abordé l'étude du matériau ternaire GaBiN/GaBi et l'influence des concentrations d'azote sur les différents paramètres physiques, électronique et optique de ce dernier. Le calcul de la bande interdite était effectué en utilisant le modèle d'anticroisement de bandes BAC, et nous avons vu l'influence de l'incorporation de l'azote qui a pour effet de diminuer le gap, par la suite, nous avons effectué différentes simulations qui concernent la structure GaBiN/GaBi.

En outre nous avons interprété les résultats obtenus par cette simulation, et on a pu enregistrer des résultats intéressants pour différentes teneurs d'azote.

Les perspectives de ce travail sont nombreuses, nous pensons qu'une structure pareille peut être utilisée pour les télécommunications, vu qu'on peut avoir des longueurs d'ondes d'émission de l'ordre de 1.55 μ m ce qui est très important pour la transmission via les fibres optiques, aussi pour les amplificateurs optique.

GaN	GaBi
4.5	6.324
3.24	-1.45
-2.2	-6.85
-5.2	0.79
-6.5	-6.28
0.017	2.15
-2.2	-1.4
9.3	11.92
5.9	5.99
0.13	0.039
3.07	13.4
0.86	4.7
0.23	0.021
4.6	1.8
1000	3000
3 50	1000
	GaN 4.5 3.24 -2.2 -5.2 -6.5 0.017 -2.2 9.3 5.9 0.13 3.07 0.86 0.23 4.6 1000 3 50

 Tableau A.1 Paramètres physiques fondamentaux des principaux binaires III-V[9].

Bibliographie

[1] ROSENCHER Emmanuel; optoélectronique (livre); Préface, avant propos VII, IIX;Masson; 1998.

[2]; Plate-forme Matière Condensée et Cristallographie (MCC), C.E.S.I.R.E; Université J.Fourier Grenoble .

[3] Pr Robert Valls & Dr Richard Fréze ; chemie du solide et matériaux (cours) .
[4]Konagai,M(Konagai,Makoto) JAPANESE JOURNAL OF APPLIED PHYSICS , Present Status and Future Prospects of Silicon Thin-Film Solar Cells MAR 2011
[5] D. G. Thomas, J. J. Hopfield, et C. J. Frosch; Phys Rev Lett 15, 857; 1965.

[6] J. J. Hopfield, D. G. Thomas, et R. T. Lynch; Phys Rev Lett 17, 312 ; 1966.

[7]B. Gil etE.Tournié; Mixed III-V-N semiconductors: Challenge for Tomorrow? , Low Dimensional nitride semiconductors; Oxford Science Publications; 9 series, 416 ; 2002.

[8] M. Weyers, M. Sato et H. Ando ; Appl Phys Part2-31, L853 ; 1992.

[9] J. N. Baillargeon, K. Y. Cheng, G. E. Hofler, P. J. Pearah, et K. C. HsiehApplPhysLett 60, 2540; 1992.

[10] I. Vurgaftman et J. R. Meyer ; J ApplPhys 94, 3675 ; 2003.

[11] A.MOKHTAROVA : « Puits quantique de composés Nitrures InGaN/GaN pour le photovoltaïque », Thèse de doctorat, physique/Nanophysique, 2016, Université de Grenoble. .

[12]H. Jones et C. Zener; Proc Roy Soc A 144, 101; 1934.

[13] L.Royer ; De l'épitaxie : quelques remarques sur les problèmes qu'elle soulève ; Bull. Soc. franç. Minér. Crist. 77, 1004-1028 ; 1954.

[14] Laurent Sacco, Futura-Sciences, 06/08/2015.

[15]Vanessa GORGE ; Caractérisations de matériaux et tests de composants des cellules solaires à base des nitrures des éléments III-V ; thèse de DOCTORAT, UNIVERSITE PARIS-SUD 11 ; 2012.

[16] Simon M. Sze; Semiconductors Devices: Physics and Technology;At. Bell, Marry HILL. New Jersey. May 1985.

[17] Emmanuel R, Borge V; Optoelectronique; 2^{ième}édition, Dunod; Paris, 2002.
[18] M. Mébarki; Réalisation et étude de structure épitaxies III-V à base de GaSb : Application à la photodétection; Thèse de docteur d'état; Académie de Montpellier; 1989.

[19] Article proposé par : Nicolas Grandjean& Jean Massies en collaboration avec M. Leroux, B. Damilano, F. Semond, B. Gil et P. Lefebvre ; Matériaux de basse dimensionnalité : Les nitrures d'éléments III : des semiconducteurs III-V singuliers ; CNRS (université de Montpellier II).

[20]M. Abd-Lefdil ;Chapitre 1 : Etat Cristallin, Introduction à la physique des matériaux ; Laboratoire de Physique des Matériaux, faculté des sciences RABAT,MAROC ; 2008-2009.

[21] KERKAR Fouzia ; Calcul du gain optique d'un puits quantique à base de GalnNAs/GaAs pour son utilisation dans les télécommunications optiques émettant à une longueur d'onde de 1.3 μm ; UNIVERSITE SAAD DAHLAB DE BLIDA, 2006

[22]Guilhem ASTRE; Fiabilité des dispositifs HEMT en technologie GaN; Doctorat de l'Université de TOULOUSE; 17 janvier 2012.

[23] K. Köksal, B. Gönül and M. Oduncuoglu; Critical layer thickness of GaIn(N)As(Sb) QWs on GaAs and InP substrates for (001) and (111) orientations; Eur. Phys. J. B69, 211–218 ; 2009.

[24] SEGHILANI Mohamed seghir ; MODELISATION ET SIMULATION D'UNE STRUCTURE A MULTIPUITS QUANTIQUES CONTRAINTS A BASE DE <<GainNAsSb/GaAs>> ; mémoire de MAGISTERE, Université SAAD DAHLEB DE BLIDA, 2006.

[25] Tarik BOURAGBA ; PROPRIETES OPTIQUES DE PUITS QUANTIQUES <<GalnAsN/GaAs>>, thèse de DOCTORAT, Université BLAISE PASCAL, 2006.

[26] S.Nacer, A.Aissat, B. Alshehri, J.P. Vilcot; Theoretical investigation of GaAsNBi/GaAs materials for optoelectronic applications; Materials Science in Semiconductor ProcessingVolume 31, Pages 568–572; March 2015.

[27]Harris Benson ; Physique : 3, Ondes, optique et physique moderne ; De Boeck, coll. « De Boeck Supérieur » , 4e éd., 544 p ; juin 2009.

[28] Tamer Bécherrawy, Optique géométrique ; De Boeck, coll. « De Boeck Supérieur », p.404 ;décembre 2005.

[29]Germain Chartier ; Manuel d'optique ; éd.Hermés, Paris ; 21 octobre 1997