الجمهورية الجزائرية الديمقر اطية 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 التكنولوجيا Faculté de Technologie

قسم الإلكترونيك Département d'Électronique

Mémoire de Master

Mention Électronique Spécialité Traitement de l'Information et Systèmes Électroniques

présenté par

FOMBA Fanta

Modélisation et simulation des structures à base des nouveaux matériaux pour la télécommunication.

Proposé par: Professeur AISSAT Abdelkader

Année Universitaire 2016-2017



Je dédie cette modeste contribution :

A mes parents Fomba Tiémoko et Assitan Traoré, qui m'ont tout donné. Vous m'avez donné la vie, entretenu cette vie de toutes vos forces et de toute votre intelligence. Et depuis, vous me servez de guide dans chacune des étapes de ma vie. Vous n'avez ménagé aucun effort et aucun sacrifice ne fut de trop pour mon bonheur.

Sachez que vos sacrifices consentis pour moi et mes frères et sœurs resteront à jamais au plus profond de mon être. Sachez aussi Papa et Maman que ni les difficultés, ni les circonstances de temps et de lieu ne sauront me distraire de mon objectif de vous honorer en tout temps et en tout lieu ;

A ma sœur Mariam et mon frère Mamadou Lamine, qui me donnent ce qu'aucune richesse matériel ne peut acheter. Votre amour, votre soutien multiforme me guident vers d'avantage de lumière et donc de bonheur. Je ne saurais vous remercier mais trouvez ici l'expression de mon amour sans fin.

Que le bon Dieu de paix et d'amour vous garde et vous bénisse encore.

Au nom de Dieu le Clément, le Miséricordieux.

La paix et les bénédictions soient sur notre Prophète Muhammad (psl).

J'ai l'honneur et le plaisir d'exprimer ma gratitude et mes remerciements à mes très chers parents qui n'ont pas cessé de m'encourager et de me soutenir dans les moments difficiles en priant Dieu, et qui ont su m'entourer de toute leur affection et amour.

Je tiens à remercier mon encadreur Mr Abdelkader Aissat professeur à l'université de Blida qui a toujours été très serviable et attentionné tout au long de la réalisation de ce projet, ce qui m'a beaucoup aidé à développer ce modeste travail.

Et puis un remerciement chaleureux a monsieur Rachid pour m'avoir aidé dans mon travail.

Que MRS les membres du jury trouvent ici l'expression de ma sincère gratitude pour l'honneur qu'ils m'ont donné en acceptant de juger mon travail.

Je tiens à remercier tous mes amis et collègues pour leur soutien moral tout au long de cette préparation.

Ma gratitude va également à tous ceux qui ont participé de près ou de loin à l'élaboration de cette mémoire.

ملخص:

في هذا العمل ركزناعلى النمدجة و التخطيط للبنيات بقاعدة مواد جديدة مثل :InGaAs/GaAsP و GaSbBi/GaAs للاتصالات السلكية و اللاسلكية ،هذه البنيات الثلاثية هي عبارة عن شبه نواقل المجموعة V-III ، التي تقدم خصائص مهمة كرفع مستوى الناقلية الحرارية، خفض مستوى طاقة تنقل الالكترونات ،لها عامل امتصاص للاشعة مرتفع،طول موجة الانبعاث لديها عال.... الخ. نحن نهتم بدر اسة الخصائص الكثيرة للليزر بقاعدة المواد الشبه ناقلة للتيار.

كلمات المفاتيح: المواد الشبه ناقلة للتيار، ليزر، بئر كموني

Résumé : Dans cette étude, nous aborderons la modélisation et la simulation des structures à base des nouveaux matériaux comme InGaAs/GaAsP et GaSbBi/GaAs pour la télécommunication. Ces alliages ternaires qui sont des semi-conducteurs III-V présentent des caractéristiques importantes tels que: la diminution du gap, conductivité thermique élevée, un bon coefficient d'absorption, et une bonne longueur d'onde d'émission dans la fenêtre 1.55 µm etc....Nous nous sommes intéressé également à l'étude des différents paramètres caractérisant les lasers à semi-conducteurs et les Puits quantiques.

Mots clés : Semi-conducteur ; laser ; Puits quantique.

Abstract : Is this study, we will discuss the modeling and simulation of structures based on new materials such as InGaAs/GaAsP and GaSbBi/GaAs for detection applicable in telecommunications. These ternary allows which are III-V semiconductors have important characteristics such as : reduction of gap, high thermal conductivity good absorption coefficient, good emission wavelength. We were also interested in the study of the various parameters characterizing smiconductor lasers and quantum wells.

Keywords : Semiconductor; lasers; Quantum well.

Listes des acronymes et abréviations

- In : Indium
- Ga : Gallium
- As : Arsenic
- **P** : phosphore
- **Sb** : antimonium
- Bi : Bismuth
- X : concentration d'indium
- X1 : concentration de bismuth
- **Y** : concentration de phosphore
- E : Energie de photon
- H : Constante de planck
- C : vitesse de la lumière dans le vide
- **Λ** : Longueur d'onde
- BC: Bande de conduction
- B_V: Bande de valence
- Eg : Energie de gap
- $\pmb{\epsilon}$: Déformation hydrostatique
- **a**s: Paramètre de maille du substrat
- **a**_e : Paramètre de maille de la couche épitaxie
- **a**_v : Potentiel de déformation dans la bande de valence

a_c: Potentiel de déformation dans la bande de conduction

- b: Potentiel de déformation tétragonale
- ΔE_{sh}: Décalage énergétique induit par la contrainte de cisaillement
- ΔE_{hh} : Décalage d'énergie de la bande de trou lourd
- ΔE_{lh} : Décalage d'énergie de la bande de trou léger
- **Eg** ^{cont}: Energie de gap contraint
- Eg ncont: Energie de gap non contraint
- ε_{\parallel} (ε_{yy} et ε_{zz}) : Déformations bi axiales
- $\boldsymbol{\epsilon} \perp (\boldsymbol{\epsilon}_{xx})$: Déformations unixiale
- X : Coefficient de poisson donné
- C_{ij}: Les coefficients élastiques (cm⁻²)
- β : Est un coefficient qui prend les valeurs suivantes selon le type de la structure
- E_{HH} : Energie de la bande de trous lourds
- ELH : Energie de la bande de trous légers
- Δ₀ : Energie de décalage des bandes des trous spin-spilitée
- Ev.moy: L'énergie moyenne de la bande de valence
- Δ_{so} : L'énergie de spin orbite
- E_{hh}, E_{lh}: Les décalages du haut et de bas de la bande de valence contrainte par rapport à celui de non contraint.
- m : La masse de la particule
- $\boldsymbol{\Phi}$: La fonction d'onde

- V(x) : Fonction décrivant le potentiel pour chaque valeur de x
- Eni: Niveaux d'énergie dans la bande de conduction
- Enj: Niveaux d'énergie dans la bande de valence.

Table des matières

Introduction général	1
Chapitre 1 Généralités sur les matériaux de silicium	4
1.1 Introduction	4
1.2 Différentes types de silicium	4
1.2.1 Silicium amorphe hydrogéné a-Si : H	4
1.2.2 Silicium amorphe	5
1.2.3 Silicium microcristallin μ_c -Si:H	7
1.3 Propriétés physiques du silicium	8
1.4 Avantages et inconvénients du silicium	9
1.5 Quelques applications du silicium	10
1.6 Conclusion	10
Chapitre 2 Principales caractéristiques des semi-conducteurs III-V et l'étude des alliages ternaires InGaAs/GaAs et GaSbBi/GaAsP 1.1 2.1 Introduction 2.2 Les semi-conducteurs III-V	11 11 11
2.2.1 Structure cristalline	12
2.2.2 Les composés binaires, ternaires et quaternaires des semi-conducteurs III-V	13
2.2.3 Les bandes d'énergie	14
2.2.4 Les bandes interdites des principaux composés III-V	15
2.2.5 Gap direct-Gap indirect	16
2.2.6 Les avantages des semi-conducteurs III-V	17
2.3 Les hétérostsructures	18
2.4 Les états énergétiques dans un puits quantique	20
2.5 Energie de transition	23
2.6 Etude des paramètres électroniques	23
2.6.1 Paramètre de maille	24
2.6.2 La contrainte	24
2.6.3 Epaisseur critique	26
2.6.4 Effet de la contrainte sur la bande interdite	27

2.7 Le gain optique	30
2.8 Etude du laser à semi-conducteur	32
2.8.1 Principe de fonctionnement d'un laser	32
2.8.2 Le milieu amplificateur	33
2.8.3 Le pompage optique	34
2.8.4 Le pompage par injection électrique	34
2.8.5 Le pompage électronique	35
2.8.6 Caractéristique du laser	35
2.8.9 Effet du laser	35
2.9 Conclusion	36
Chapitre 3 Résultats et discussions	37
3.1 Introduction	37
3.2 Résultats et discussions	37
3.3 Conclusion	65
Conclusion générale	66
Annexe	68
Bibliographie	71

Liste des figures

Figure 1.1 Arrangement tétraédrique de liaison dans le Si cristallin	6
Figure 1.2 Réseau d'a-Si: H montrant des liaisons brisées d'atome de silicium, qui sont	
passivés par les atomes d'hydrogène	6
Figure 1.3 Silicium microcristallin hydrogéné	7
Figure 2.1 (a) Maille élémentaire de la structure zinc blende	12
Figure 2.1 (b) Vue de dessus de la structure zinc blende	12
Figure 2.2 Représentation des bandes de conduction et de valence et la définition du	
gap du matériau	14
Figure 2.3 Evolutions de l'énergie de bande interdite et du paramètre cristallin des	
alliages de composés III-V	16
Figure 2.4 les transitions optiques directes et indirectes	17
Figure 2.5 (a) Schéma synoptique disposition de couches semi-conductrices A et B	19
Figure 2.5 (b) barrière de potentiel crée entre les semi-conducteurs A et B	19
Figure 2.6 (a) Schéma des bandes énergétiques dans un puits du type I	19
Figure 2.6 (b) Schéma des bandes énergétiques dans un puits du type II	19
Figure 2.7 Puits de potentiel rectangulaire infiniment profond	21
Figure 2.8 L'équivalent quantique	21
Figure 2.9 Energie de transition dans le puits quantique	23
Figure 2.10 les deux types de déformation tension et compression	25
Figure 2.11 Propagation de dislocation dans la couche épitaxie épaisse	26
Figure 2.12 (a) Structure de bande d'un semi-conducteur à gap directe non contraint	28
Figure 2.12 (b) Structure de bande d'un semi-conducteur à gap directe en	
compression	28
Figure 2.12 (c) Structure de bande d'un semi-conducteur à gap directe en tension	28
Figure 2.13 Schéma d'un laser	33
Figure 3.1 (a) Variation du paramètre de maille en fonction de la concentration de	
phosphore de la structure GaAsP	37

Figure 3.1 (b,c) Variation du paramètre de maille en fonction de la concentration : (b)	
de la concentration d'indium de la structure InGaAs et (c) de la concentration de	
bismuth de la structure GaSbBi	38
Figure 3.2 (a,b) Variation du désaccord paramétrique en fonction : (a) de la	
concentration d'indium de la structure InGaAs et (b) de la concentration de bismuth de	
la structure GaSbBi	39
Figure 3.3 (a,b) Variation de l'épaisseur critique en fonction : (a) de la concentration	
d'indium et (b) de la concentration de bismuth	40
Figure 3.4(a) L'évolution du gap en fonction de la concentration d'indium de la	
structure InGaAs et de la concentration de bismuth de la structure GaSbBi	41
Figure 3.5 (a,b) L'évolution de la bande interdite des trous lourds et des trous légers	
en fonction de la concentration d'indium	42
Figure 3.5 (c) Schéma d'un puits quantique simple pour la structure InGaAs	43
Figure 3.6 (a) L'évolution de l'énergie de la bande interdite non contrainte en	
fonction de la concentration d'indium de la structure InGaAs	43
Figure 3.6 (b) L'évolution de l'énergie de la bande interdite non contrainte en fonction	
de la concentration de bismuth de la structure GaSbBi	44
Figure 3.6 (c) Puits quantique simple de la structure GaSbBi	44
Figure 3.7 L'évolution de la bande interdite avec contrainte en fonction de la	
concentration de Bismuth	45
Figure 3.8 (a,b) Variation de la bande interdite en fonction de la température et : (a) de	
la concentration d'indium de la structure InGaAs et (b) de la concentration de bismuth	
en 3D	46
Figure 3.9 Variation de la bande interdite en fonction de la température et de la	
concentration d'indium en ISO	47
Figure 3.10 (a) Variation du coefficient d'absorption en fonction de la température et	
de la concentration d'indium en 3D	47
Figure 3.10(b) Variation du coefficient d'absorption en fonction de la température et	
de la concentration d'indium en 3D	48
Figure 3.11 (a) Variation du coefficient d'absorption en fonction de la température et	-
de la concentration d'indium en ISO	48

Figure 3.11.b Variation du coefficient d'absorption en fonction de la température et de	
la concentration de bismuth en ISO	49
Figure 3.12.a Variation du coefficient d'absorption en fonction de la longueur d'onde	
et de la concentration d'indium en 3D	49
Figure 3.12.b Variation du coefficient d'absorption en fonction de la longueur d'onde	
et de la concentration de bismuth en 3D	50
Figure 3.13 (a) Variation du coefficient d'absorption en fonction de la longueur d'onde	
et de la concentration d'indium en ISO	50
Figure 3.13 (b) Variation du coefficient d'absorption en fonction de la longueur d'onde	
et de la concentration de bismuth en ISO	51
Figure 3.14 (a,b) Barrière de potentiel en fonction des concentrations d'indium et de	
bismuth	52
Figure 3.15 (a,b) Taux de confinnement des deux concentrations	53
Figure 3.16 (a,b) La variation des niveaux d'électrons en fonction de la largeur de puits	
dans InGaAs et GaSbBi	54
Figure 3.17 (a,b) La variation des niveaux énergétiques des trous lourds en fonction de	
la largeur de puits	55
Figure 3.18 (a,b) La variation des niveaux d'énergie des trous légers en fonction de la	
largeur de puits : (a) de la structure InGaAs et (b) de la structure GaSbBi	56
Figure 3.19 (a,b) Energie de transition en fonction de l'épaisseur du puits quantique	
pour les trous lourds	57
Figure 3.20 (a,b) Energie de transition en fonction de l'épaisseur du puits quantique	
pour les trous légers	58
Figure 3.21 (a,b) L'évolution de la longueur d'onde d'émission des trous lourds	59
Figure 3.22 (a,b) L'évolution de la longueur d'onde d'émission des trous légers	60
Figure 3.23 (a,b) La variation du gain optique en fonction de la longueur d'onde pour	
plusieurs concentrations d'indium et de bismuth	61
Figure 3.24 (a,b) La variation du gain optique en fonction de la longueur d'onde pour	
plusieurs valeurs de la largeur de Puits quantique	62
Figure 3.25 (a,b) La variation du gain optique en fonction de la longueur d'onde pour	
plusieurs concentrations d'électron	63

Figure 3.27 (a,b) Spectre du gain optique pour plusieurs températures...... 64

Liste des tableaux

Tableau 1.1	Paramètres de la variation de la bande interdite en fonction de la	
température		8
Tableau 1.2	Propriétés électriques du silicium (Si)	8
Tableau 1.3	Propriétés physiques du Si	9
Tableau 2.1	Un extrait du tableau périodique qui présente le placement des	
différents m	atériaux semi-conducteurs	12
Tableau 2.2	Propriétés des principaux composés binaires III-V à 300 K	13
Tableau 2.3	Gaps et longueur d'ondes d'émission à température ambiante pour	
quelques ser	ni- conducteurs	14
Tableau A1	Tableau périodique de Mendeleïev des éléments	67
Tableau A.2	Paramètres physiques fondamentaux des principaux binaires III-V	68

Les composants optoélectroniques sont des éléments clés des réseaux de télécommunications qui sont désormais le système nerveux de notre planète, ils traversent les océans, relient les villes entre elles, connectent les foyers et les entreprises, ils nous permettent d'échanger de plus en plus d'informations, de plus en plus rapidement. L'accroissement rapide des besoins en débit de transmission a conduit à introduire le multiplexage en longueur d'onde en supplément du multiplexage temporel offrant ainsi des capacités de transmission supérieures à 100 gigabits par seconde sur une seule fibre optique. Des débits de l'ordre du térabit par seconde apparaissent désormais comme prochains objectifs, nécessitant le développement des dispositifs optoélectroniques fonctionnant à très haut débit, compacts, non refroidis, peu onéreux, et émettant dans la fenêtre de transmission des fibres en silice (1.3-1.55µm). Ces évolutions suscitent un foisonnement de travaux, tant sur les diodes lasers, élément clés traditionnels des systèmes de transmission, que sur de nouveaux dispositifs optoélectroniques : modulateur, régénérateur, commutateur, convertisseur en longueur d'onde, multiplexeur et démultiplexeur. Malgré la diversité des fonctions, les travaux de conception et d'optimisation menés sur ces composants, tendent de façon similaire à tirer profit aux mieux des propriétés des matériaux semi-conducteurs, en améliorant les filières actuelles ou en développant de nouvelles filières d'alliages. Depuis le début des années 90, l'avènement des structures à puits quantiques contraints, accompagné de l'apparition des nouveaux matériaux 'nitrures d'éléments III-V' aux caractéristiques très attrayantes, a permis d'accroitre les potentialités des semi-conducteurs et d'améliorer les performances des dispositifs. Ainsi les diodes laser, les photo-détecteurs et les amplificateurs optiques, tout en conservant une excellente fiabilité, ont démontré un accroissement significatif de leur niveau de performance : diminution de la densité du courant de seuil et de la sensibilité en température, élargissement de la bande passante, réduction de la largeur de raie, et réalisation des d'amplificateurs optiques à faible bruit insensibles à la polarisation [1,2]. La réalisation de ces composants qui comprend l'épitaxie et la technologie auxquelles il faut ajouter la caractérisation pour évaluer leurs performances s'étend sur environ six mois. Le coût de fabrication de ces composants est, par ailleurs, très élevé. Il est donc préférable de pouvoir évaluer au mieux leurs performances avant de commencer un cycle de fabrication. C'est dans cet objectif que s'inscrivent la modélisation et la simulation des composants [3]. Dans l'ensemble des matériaux, les semi-conducteurs constituent une classe bien définies, avec des propriétés physique et optique particulières qui sont sources d'intérêt au plan de la connaissance fondamentale et d'applications [4]. Ces deux facteurs indissociables font l'importance de ces matériaux, malgré le nombre limité d'éléments et de composés semiconducteurs [5]. Un des matériaux le plus couramment utilisé est le silicium (qui appartient au groupe IV), il est le plus utilisé grâce à son faible coût, sa grande disponibilité et sa bonne conductivité thermique. La majorité des composants électroniques base sur le silicium, cependant ses propriétés sont insuffisantes (mobilités des porteurs relativement petites et transitions électroniques indirectes au seuil d'absorption optique). Les composés semiconducteurs 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. En plus de l'introduction et de la conclusion, ce travail de mémoire est présenté suivant trois chapitres, comportant chacun une introduction et une conclusion propre.

- Le premier chapitre est consacré sur quelques généralités sur les matériaux de silicium, en se basant sur l'insuffisance de ses propriétés physiques.
- Le deuxième chapitre consiste à faire une description des différents modèles mathématiques et l'interprétation de ces résultats de simulation qui permettront la détermination de l'effet de la concentration d'indium et de bismuth sur les paramètres physique et électrique de l'alliage InGaAs contraint sur le substrat GaAsP ainsi que de l'alliage GaSbBi contraint sur le substrat GaAs, comme paramètre de maille, la contrainte, épaisseur critique....
- Le troisième chapitre résume les résultats obtenus par simulation de l'alliage GaSbBi contraint sur GaAs, ces résultats sont accompagnés par des discussions et

interprétations, afin de faire une comparaison entre ces structures InGaAs/GaAsP et GaSbBi/GaAs et avec les résultats obtenues d'autres structures qui permettent d'avoir une meilleure longueur d'onde d'émission

Le travail sera finalisé par une conclusion générale avec des perspectives étudiées du gain optique.

1.1 Introduction

Le silicium étant un matériau semi-conducteur de largeur de bande interdite moyenne s'adapte bien aux contraintes imposées par les applications à des températures normales, soit de 0 à 100°C. A de plus hautes températures, la performance des technologies sur le silicium se dégrade progressivement. Le silicium fut découvert en 1824 par J.J. Berzelius à Stockholm, en Suède. C'est, après le carbone, l'élément le plus abondant de la terre. On le trouve généralement sous forme de silicate dans de nombreuses roches, argiles et terres. Le silicium est obtenu en réduisant la silice (le sable, SiO2) par le carbone. Une fusion en zone subséquente donne un élément plus pur pour des applications nécessitant un silicium de haute pureté (par exemple les semi-conducteurs) [6]. Le silicium possède 4 électrons sur sa couche périphérique car il appartient à la 4éme colonne de la classification périodique des éléments. Il est possible de le produire avec un haut degré de pureté (moins de 1 atome étranger pour 10¹¹ atomes de semi-conducteur): on parle alors de S.C. intrinsèque [7]. D'autres types de silicium ont été explorés, comme le silicium amorphe hydrogéné a-Si: H qui possède un gap de 1.7 eV et peut-être produit par dépôt en couches minces. Le silicium microcristallin µc-Si H peut également être fabriqué par dépôt en couches minces. Ce type de silicium possède un gap égal à ≈ 1.1 eV, plus petit que celui du silicium amorphe. Par contre les temps de dépôt typiques du silicium microcristallin sont plus longs que ceux du silicium amorphe rendant les coûts de production plus élevés [8]. Donc dans ce premier chapitre, on parlera sur les généralités du silicium.

1.2 Différents types de silicium

1.2.1 Silicium amorphe hydrogéné a-Si : H

L'a-Si produit sous vide ou par des méthodes de pulvérisation cathodique contient tellement de défauts que les états localisés dans la bande interdite interdisent son dopage. Des films minces au silicium amorphe ont été réalisés dès 1989 par la méthode de décharge électroluminescente 'glow discharge' [9]. Dans le procédé de décharge électroluminescente, la présence de 5 à 15 % d'hydrogène permet, grâce à la petite taille de cet atome de saturer les liaisons non satisfaites, réduisant par là même la densité d'états localisés dans la bande interdite. Le silicium amorphe hydrogéné a-Si : H (figure1.2) s'est fait connaître par l'annonce de WE.Spear et P.E. Lecomber de l'université de Dumdee [9] qu'il était possible de contrôler le dopage N ou P à condition d'ajouter de l'hydrogène pendant le dépôt. Dès 1977, David Carlson et l'équipe de RCA proclamaient qu'une cellule solaire de 5,5 % avait été réalisée avec un matériau en film mince extrêmement économique. Depuis d'autres méthodes de saturation des liaisons pendantes ont été testées, notamment l'utilisation du fluor (cellules à 6,5 % par Ovshinsky dès 1980). Vint ensuite la période commerciale du marché des calculettes solaires avec Sanyo, Tayio-Yuden et Kaneka au début des années 1980, et des améliorations successives du procédé qui permirent de passer en 15 ans d'un rendement de 4 à 8 % [10].

1.2.2 Silicium amorphe

Le silicium amorphe possède la structure tétraédrique (l'atome de silicium est au centre de quatre liaisons covalentes), mais il présente des distorsions aléatoires, si bien qu'au bout de quatre ou cinq distances interatomiques, l'ordre disparaît. En conséquence de ce désordre, certaines liaisons se cassent pour former des liaisons pendantes 'dangling bond'. Autrement dit, on retrouve des atomes de silicium avec un électron célibataire. Il en résulte une grande influence sur les propriétés électroniques. En effet, un second électron peut s'y fixer formant un centre chargé négativement. Dans ce cas, la liaison pendante constitue un piège à électron. L'électron célibataire peut quitter l'atome pour laisser un centre chargé positivement. Dans ce cas, la liaison pendante constitue un piège à trous. On dit que la liaison brisée présente un caractère amphotère &. A la fin du 19ième siècle, le silicium amorphe ne présentait pas des propriétés intéressantes. En fait, lors du dopage, les porteurs préfèrent se fixer sur les liaisons pendantes. Mais en 1975, Chittik [11] et Spear et le Comber [12] ont réussi à

Chapitre1 Généralités sur les matériaux de silicium

doper des couches de silicium amorphe contenant près de 10 % d'hydrogène, en montrant le caractère semi-conducteur de cet alliage. L'hydrogène sature les liaisons pendantes tout en offrant un matériau présentant un grand intérêt technologique. Les figures 1.1 et 1.2 présentent la différence entre les deux structures le silicium cristallin et le silicium amorphe hydrogéné [13].



Figure 1.1 Arrangement tétraédrique de liaison dans le Si cristallin.



Figure 1.2 Réseau d'a-Si: H montrant des liaisons brisées d'atome de silicium, qui sont passivés par les atomes d'hydrogène.

1.2.3 Silicium microcristallin μ_c -Si:H

Le silicium microcristallin se présente sous la forme de grains monocristallins (cristallites) séparés par des joints de grains (Figure 1.7). Il est considéré comme intermédiaire entre le silicium amorphe et le silicium cristallin. La taille des grains du silicium microcristallin se situe entre quelques nanomètres à environ 1 micromètre. Il est caractérisé par une technologie à faible cout de dépôt et une température faible en comparaison avec le silicium cristallin et proche de celle d'a-Si : H. mais le μ_c -Si : H a une structure ayant moins de défauts par rapport au a-Si : H du fait que : **s**a structure est intermédiaire entre le silicium cristallin qu'est ordonné et le silicium amorphe hydrogéné qu'est désordonné. L'hydrogène assure la saturation des liaisons brisées. La figure montre la structure du μ c-Si : H.



Figure 1.3 Silicium microcristallin hydrogéné.

1.3 Propriétés physiques du silicium

> Hauteur de la bande interdite

La taille E_g de la bande interdite donne des caractéristiques électriques importantes à chaque semi-conducteur (Tableau 1.1). L'expression donnée par :

$$E_g(T) = E_g(0) - \frac{aT^2}{(T+b)}$$
(1.15)

 $O\dot{u}$: E_g = Energie de la bande interdite

T = température

a = constante empirique [eV/K]

b = constante associée à la température de Debye [K].

Semi- conducteur	E _g (0) (eV)	a (eV/K)	b (K)
Si	1.12	4.73 .10 ⁻⁴	636

Tableau 1.1 Paramètres de la variation de la bande interdite en fonction de la

température [14].

Coefficient d'absorption

Le tableau 1.2 regroupe les propriétés électriques du Silicium.

Propriétés à 300°K		Si		
Energie de la bande interdite E _g (eV)		1,12		
Concentration d'atomes (/cm ³)		5. 10 ²²		
Concentration intrinsèque (/cm ³)		1,45. 10 ¹⁰		
	μn	1350		
Mobilités (cm²/V.s)	μρ	480		
Constantes diélectriques relatives εΓ		11,7		
Champ de claquage V/m		-30. 10 ⁶		

Tableau 1.2 Propriétés électriques du silicium (Si) [15].

Le coefficient d'absorption du Silicium est donné par l'expression suivante:

$\alpha(\mu m^{-1}) = -0.425 (E - E_g)^3 + 0.757 (E - E_g)^2 - 0.02 + 10^{-4} (1.1eV < E < 1.5eV)$
$\alpha(\mu m^{-1}) = 0.0287 exp [2.72(E - E_g)](E > 1.5eV) \dots (1.16)$

Le tableau 1.3 regroupe les propriétés physiques du Silicium.

Propriétés	Silicium
Structure	Diamant
Densité (g /cm ³)	2,328
Constante diélectrique	11,9
Nc (cm ⁻³)	2,8.10 ¹⁹
Nv (cm ⁻³)	1,04.10 ¹⁹
Energie de Gap à 300°K (eV)	1,12
Affinité d'électron,	4,05
Concentration intrinsèque des porteurs (cm ⁻³)	1,45.10 ¹⁰
Duré de vie minoritaire (s)	2,5.10 ⁻³
Mobilité des électrons (cm ² .V ⁻¹ .s ⁻¹)	1500
Mobilité des trous (cm ² .V ⁻¹ .s ⁻¹)	450
Indice de réfraction	3,44

Tableau 1.3 Propriétés physiques du Si [10].

1.4 Avantages et inconvénients du silicium

Le silicium est le matériau le plus utilisé grâce à sa grande disponibilité, son faible coût et sa bonne conductivité thermique. Cependant, ses propriétés physiques sont insuffisantes dû à sa bande interdite indirecte, qui n'est pas intéressante pour l'optoélectronique. Donc malgré sa grande disponibilité, le silicium est un mauvais émetteur de lumière.

1.5 Quelques applications du silicium

Le silicium peut être utilisé pour faire :

- Les cellules solaires
- Transistors
- Amplificateurs
- Diodes
- ➤ Lasers
- Il est beaucoup utilisé en médecine pour éviter des problèmes de la peau, il soulage irritation et solidifie le corps.
- ➢ Etc....

1.6 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons étudié les généralités du silicium en se basant sur ses propriétés physiques, optiques et électriques. Après l'analyse, on constate que malgré sa grande disponibilité et sa bonne conductivité thermique ses propriétés sont insuffisantes dues à la faible mobilité des porteurs libres, il a des transitions électroniques indirectes au seuil d'absorption optique et la présence des états localisés au niveau de la bande interdite. Donc il est préférable de faire une modélisation et une simulation des nouveaux matériaux plus performants comme l'InGaAs, le GaSbBi objet de ce travail de mémoire.

2.1 Introduction

Dans ce chapitre on abordera les principales caractéristiques des semiconducteurs III-V qui ont connus une grande révolution en électronique et en optoélectronique, ce qui a abouti à l'apparition des structures à couches semiconductrices très fines et très bonne qualité, d'où l'avènement des nouveaux produits (diodes, transistors, diodes laser à semi-conducteur) ainsi que les nanostructures (puits quantiques, boites quantiques, ...). On considéra dans ce chapitre les deux matériaux ternaires InGaAs et GaSbBi respectivement contraints sur les substrats GaAsP et GaAs qui sont des composés d'éléments de la colonne III, et d'éléments de la colonne V du tableau périodique de Mendeleïev. L'introduction d'indium et de bismuth permettent de modifier les paramètres caractéristiques de ces matériaux. On étudiera l'influence de l'incorporation d'indium et de bismuth sur les différentes caractéristiques de la structure InGaAs/GaAsP et GaSbBi/GaAs (paramètre de maille, contrainte, épaisseur critique, énergie de gap, coefficient d'absorption,...). On abordera les notions fondamentales, et les rappels théoriques constituant la base de la théorie des puits quantiques contraints. L'équation de Schrödinger dans le puits serait présenté, et l'utiliser par la suite pour calculer les états énergétiques confinés dans le puits quantique. Et aussi un rappel sur les lasers à semi-conducteur qui jouent un rôle important dans les domaines télécommunications et de l'électronique. Enfin par la suite on calculera le gain optique, en faisant le bilan des transitions optiques qui se produisent entre les niveaux énergétiques, en vue d'étudier l'influence des différents paramètres de la structure.

2.2 Les semi-conducteurs III-V

Les semi-conducteurs III-V, sont formés à partir d'un élément de la colonne III et d'un autre élément de la colonne V de la classification périodique, ils sont en majorité

à gap direct et plus utilisés surtout dans le domaine de l'optoélectronique [16]. Le tableau 2.1 représente un extrait de cette classification périodique contenant des matériaux semi-conducteurs.

1	II		IV	V	VI
		В	С	Ν	0
		Al	Si	Р	S
Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se
Ag	Cd	In	Sn	Sb	

Tableau 2.1 Un extrait du tableau périodique qui présente le placement des différents matériaux semi-conducteurs [16].

2.2.1 Structure cristalline

Presque tous les matériaux III-V se cristallisent dans la structure sphalérite dite "Zinc Blende" représentée sur la figure 2.1. Cette structure, qui s'apparente à celle du diamant, est constituée de deux sous-réseaux cubiques à faces centrées, l'un étant constitué des atomes de l'élément III, l'autre des atomes de l'élément V [17 18 19].



b) Vue de dessus de la structure zinc blende [20].

Ces deux sous-réseaux sont décalés l'un par rapport à l'autre le long de la diagonale du cube, d'une quantité (${a_0/4}$, ${a_0/4}$, ${a_0/4}$), a_0 étant le paramètre cristallin, c'est-àdire la longueur de l'arête du cube élémentaire. De ce fait dans les matériaux III-V, les liaisons ne sont pas simplement covalentes comme le silicium. Elles reposent sur le transfert d'électrons des atomes du groupe V sur ceux du groupe III.

2.2.2 Les composés binaires, ternaires et quaternaires des semiconducteurs III-V

L'étude de la structure des semi-conducteurs binaires comme l'arséniure de gallium (GaAs), l'antimoniure de gallium (GaSb), le phosphure d'indium (InP), l'arséniure d'indium (InAs), l'arséniure d'aluminium (AlAs), montre que les éléments les plus légers donnent des composés dont la bande interdite est large et indirecte, et dans laquelle la masse effective des électrons est élevée. Des matériaux dont les composés contenant du bore, ou d'aluminium, sont moins intéressants pour l'électronique rapide. Le tableau 2.2 résume cette situation en donnant l'énergie Eg de bande interdite, la masse effective m*/m₀ (ou m* et m₀ sont respectivement la masse effective et la masse de l'électron dans le vide) des électrons du bas de la bande de conduction, la mobilité électronique à champ faible μ et le paramètre cristallin a [21].

Les alliages ternaires et quaternaires qui en découlent, présentent des propriétés très intéressantes pour les applications hyperfréquences. Ces alliages ternaires et quaternaires sont réalisés par substitution partielle de l'un des éléments par un élément de la même colonne. On sait, par exemple, obtenir des alliages du type Ga_xAl_{1-x}As ou du type Ga_xIn_{1-x}As.

Chapitre2 Principaux caractéristiques des semi-conducteurs III-

V et l'étude des alliages ternaires InGaAs/GaAsP et

Composé III-V	Eg(ev ²)	m*/m ₀	μ (cm²/v.s)	a(A ⁰)
BN	7.5			3.6150
AIP	2.45			5.4510
AlAs	2.16			5.6605
AlSb	1.58	0.12	200	6.1355
BP	2.0			4.5380
GaN	3.36	0.19	380	a = 3.189
				c =5.185
GaP	2.26	0.82	110	5.4512
GaAs	1.42	0.067	8500	5.6533
GaSb	0.72	0.042	5000	6.0959
InP	1.35	0.077	4600	5.8686
InAs	0.36	0.023	33000	6.0584
InSb	0.17	0.0145	80000	6.4794

GaSbBi/GaAs.

Tableau 2.2 Propriétés des principaux composés binaires III-V à 300 K [22].

2.2.3 Les bandes d'énergies

Les trois types des matériaux (isolant, semi conducteur et métal) sont constitués d'une bande basse d'énergie appelée bande de valence et une bande haute d'énergie appelée bande de conduction. La différence entre les trois matériaux est la distance entre la bande de valence et la bande conduction appelée bande interdite ou " bande gap" [23]. La bande de conduction représente les énergies des électrons libres, dans la bande de valence se situent les électrons liés avec le réseau cristallin (figure2.2).



Figure 2.2 Représentation des bandes de conduction et de valence et la définition de la bande interdite du matériau.

Les matériaux qui nous intéressent sont les semi conducteurs III-V. Dans ces matériaux, le gap est beaucoup plus petit que dans le cas d'isolants et donne ainsi des photons par les transitions d'électrons de la bande de conduction vers la bande de valence ; en général les gaps des semi-conducteurs sont compris entre 1et 3eV. [24]. Le tableau 1.1 indique la valeur de la largeur de la bande interdite à 300K pour quelques semi-conducteurs, ainsi que la longueur d'onde λ_e émise due aux passages d'électrons de la bande de valence.

	Si	Ge	GaAs	CdTe	PbS	Se	CdS	Hgl_2	Pbl ₂
E _g (eV)	1.11	0.70	1.52	1.46	0.35	1.8	2.42	2.13	2.30
$\lambda_e(\mu_m)$	1.18	1.77	0.82	0.85	3.55	0.69	0.51	0.59	0.54

Tableau 2.3 Gaps et longueur d'ondes d'émission à température ambiante pour quelques semi- conducteurs [24].

2.2.4 Les 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 sont représentées dans le diagramme de la figure 2.3. Les points du graphe figurent la position des composés binaires stœchiométriques, et les lignes représentent l'évolution du gap Eg et du paramètre cristallin << a >>, en fonction de la composition des alliages ternaires. Certaines lignes représentent 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. Les matériaux III-V offrent donc une grande variété de compositions permettant de modifier leurs propriétés électroniques [22]. Chapitre2 Principaux caractéristiques des semi-conducteurs III-

V et l'étude des alliages ternaires InGaAs/GaAsP et



GaSbBi/GaAs.

Figure 2.3 Evolutions de l'énergie de bande interdite et du paramètre cristallin des alliages de composés III-V [22].

2.2.5 Gap direct – Gap indirect

Le gap est par définition la largeur de la bande interdite, c'est-à-dire la différence d'énergie entre le minimum absolu de la bande de conduction et le maximum absolu de la bande de valence. Les structures de la bande sont représentées dans la figure 2.3 et font apparaître deux cas fondamentaux de semi-conducteur. Les semi-conducteurs à gap direct, dont lesquels le minimum de la bande de conduction et le maximum de la bande de valence sont situés en des points différents de l'espace des k et les semiconducteurs à gap direct pour lesquels ces extrema sont situés au même point de l'espace des k (en k=0) [25]. Dans les semi-conducteurs à gap direct, le minimum central de la bande de conduction correspond à des électrons de faible masse effective, donc très mobiles. Par contre ceux qui ont un gap indirect, leur bande de conduction correspond à des électrons de grande masse effective, donc ayant une faible mobilité. Un semi-conducteur à bande interdite indirecte comme le GaP, est un très mauvais émetteur de lumière et c'est pourquoi le silicium qui a eu tant de succès n'est pas un bon

matériau pour l'optoélectronique. En revanche, un matériau à bande directe comme le GaAs, pour lequel électrons et trous se retrouvent sur les maxima de leurs bandes respectives qui sont tous les deux au point k = 0 (voir figure.2.4), est un bon émetteur de lumière.



Figure 2.4 les transitions optiques directes et indirectes [20].

2.2.6 Les avantages des semi-conducteurs III-V

Les principaux avantages des semi-conducteurs III-V sont les suivants :

- leur propriété semi-isolant (substrat SI) permet la fabrication des circuits intégrés hyperfréquences.

- leur résistance aux radiations.

- leur capacité de travailler à des températures plus importantes que celle du silicium standard, ce qui est important pour les applications militaires.

- Leurs performances vitesse/consommation nettement supérieure à celles des calculateurs utilisant des circuits en silicium (applications numériques).

 Leur très vaste domaine de fréquences couvert puisqu'il s'étend de 1 GHZ à plus de 100 GHZ. Ce dernier aspect est fondamental, parce que les composants à base de silicium sont actuellement limités à une fréquence inférieure à quelque Giga Hertz [26].

La filière des composés III-V est la seule filière hyperfréquence dont la technologie soit actuellement mature pour des réalisations au niveau industriel. Cette maturité et son développement ont donc permis d'aboutir à des coûts de production abordables, qui restent cependant largement supérieurs à ceux de la filière silicium [27]. Les composés III-V sont donc parfaitement appropriés à la réalisation de circuits hyperfréquences. On peut classer ces circuits par type circuits bas niveau : amplification faible bruit, fonction de contrôle, commutation, etc....

2.3 Les hétérostructures

Une hétérostructure est une jonction formée par la juxtaposition de deux matériaux de natures différentes. Les hétérostructures semi-conducteur-semiconducteur sont généralement des hétéroépitaxies car les deux semi-conducteurs mis en présence ont la même structure cristallographique (cubique faces centrées la plupart du temps) et un relatif accord de maille. L'idée des hétérostructures a été proposée dans le but d'observer les oscillations de Bloch des électrons, et par la suite d'obtenir des générateurs et amplificateurs de micro-ondes [28]. Il a donc été suggéré d'avoir recourt à des modulations de composition d'alliage ou de dopage [29]. Grâce au développement de la croissance, il est devenu possible d'élaborer des structures de types super-réseaux, cristaux photoniques et des puits quantiques. 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. La discontinuité entre les bandes d'énergie des semi-conducteurs A et B crée une barrière

de potentiel qui confine les porteurs de charges dans la couche active [24]. La dénomination quantique intervient quand il y a confinement des porteurs, c'est-à-dire pour des épaisseurs de puits inférieures typiquement à 300 A° selon le confinement des porteurs.



Figure 2.5 Schéma synoptique (a) disposition de couches semi-conductrices A et B (b) barrière de potentiel crée entre les semi-conducteurs A et B.

Selon la discontinuité des bandes d'énergie ΔE_c et ΔE_v à l'interface de contact des semi-conducteurs, on peut distinguer deux types de puits quantique (figure 2.6).



Figure 2.6 Schéma des bandes énergétiques (a) dans un puits du type I et (b) du type

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 d'où une structure bidimensionnelle. En raison de la faible épaisseur des puits, les niveaux d'énergie des porteurs sont quantifiés suivant la direction de croissance. Lorsque le confinement se fait suivant deux directions, on parle dans ce cas de fils quantiques, l'électron garde donc un seul degré de liberté. Enfin si le confinement a lieu dans les trois directions de l'espace, on parle de boîtes quantiques ou d'ilots 3D. Les progrès des techniques de croissance cristalline ont permis la réalisation et le contrôle de telles structures au niveau de la monocouche atomique.

2.4 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 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 [30].

$$-\frac{h^2 d^2 \varphi(x)}{2m^* dx^2} + V(x)\varphi(x) = E\varphi(x)$$
(2.1)

Avec : $\overline{h} = \frac{h}{2\pi}$;

- 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.





Pour une particule dans un puits infiniment profond de longueur << L >>figure 2.5, où le potentiel est nul à l'intérieur du puits et vaut V₀ à l'extérieur, quelques soit l'énergie du puits de cette dernière elle reste confinée dans le puits. L'équivalent quantique est une couche d'épaisseur à de semi conducteur, comprise entre deux couches d'isolants parfaits.



Figure 2.8 L'équivalent quantique.

La particule ne peut pas se trouver dans la région ou V est égal à V₀ et pour que l'équation de Schrödinger soit vérifiée à l'extérieur de puits(ou V= V₀), le produit V(x). ϕ (x) doit être nul et cela n'est possible que pour ϕ (x) = 0. Dans le puits (0<x<L), le potentiel est nul, l'équation (2.5) devient :

$-\frac{h^2 d^2 E(x)}{2m^* dx^2} = E(x)$	(2.2)
Les solutions de cette équation différentielle sont de la forme :	
φ(x) = sin kx	(2.3)
φ(x)= cos kx	(2.4)
avec :	
$k = \frac{\sqrt{2m^*E}}{h}$	(2.5)
L'équation (2.2) a comme solution générale :	
φ(x)= A sin k(x) + B cos k(x)	(2.6)

Au point L (côté V = V₀), φ (L) = 0

Avec B = $0 \rightarrow \phi(L) = A \sin kI = 0$

A ne peut pas être nul, si on suppose A = 0, la fonction d'onde sera nulle sur tout l'espace x, ce qui n'est pas juste avec la présence d'une particule.

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

Et comme k = $\frac{\sqrt{2m^*E}}{h}$ on aura :

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \frac{\hbar^2 n^2 \pi^2}{2mL^2} \quad ; n = 1, 2, \dots, \infty$$
 (2.7)

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.
2.5 Energie de transition

L'énergie nécessaire pour qu'un électron passe de la bande de valence vers la bande de conduction est appelée l'énergie de transition (Figure 2.10).



Figure 2.9 Energie de transition dans le puits quantique.

 $E_{tr_{i,j}} = E_g + E_{n_i} + E_{h_j} \quad ; i = 1, 2, \dots, \infty \quad , j = 1, 2, \dots.$ (2.8)

avec :

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

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

2.6 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, épaisseur critique, etc...) peuvent être déterminées par une interpolation linéaire des valeurs des propriétés de ses composants [31].

$$P(x) = x. P_{(InAs)} + (1 - x). P_{(GaAs)}$$
(2.9)

2.6.1. Le paramètre de maille

Le paramètre de maille « a » est égal à la distance entre deux atomes dans un cristal. Lorsqu'un atome étranger est introduit dans le réseau cristallin, il provoque en général une variation du paramètre cristallin qui se traduit par une expansion ou une contraction du réseau, en fonction de la taille des atomes. On dit que la variation de « a » obéit à la loi de Végard si elle est linéaire avec le taux de substitution x [31]. La loi de Végard donnée par l'équation (2.9) a été utilisée, pour le calcul du paramètre de maille de l'épitaxie :

$$a_e(x) = x \cdot a_{(InAs)} + (1 - x) \cdot a_{(GaAs)}$$
 (2.10)

2.6.2. La contrainte

Lors de l'épitaxie d'un matériau sur un substrat de paramètre de maille différent, un désaccord paramétrique est généré. Ce désaccord peut être rattrapé de deux façons différentes [32] :

 Dans le cas où les couches épitaxieés sont suffisamment fines, la maille du matériau épitaxié (ANNEXE) se déforme de manière élastique de telle sorte que le paramètre de maille s'accorde au paramètre du substrat dans la direction parallèle à l'interface.

- Dans la direction perpendiculaire à l'interface de croissance le réseau se déforme en s'allongeant ou en se comprimant selon que le paramètre de maille de la couche est plus petit ou plus grand que celui du substrat. Dans ce cas la couche est considérée comme étant totalement contrainte (figure 2.13).

Les deux composantes parallèle et perpendiculaire du tenseur de la déformation peuvent être définies de la manière suivante [33] :

$$\varepsilon_{//} = \varepsilon_{xx}(x) = \varepsilon_{yy}(x) = \frac{a_s - a_e(x)}{a_s(x)}$$
(2.11)

Pour une structure totalement contrainte:

$$\varepsilon_{\perp} = \varepsilon_{zz}(x) = -2 \frac{c_{12}(x)}{c_{11}(x)} \varepsilon_{//}$$
 (2.12)

où :

 ε : La déformation ou le désaccord de maille.

 a_s : Le paramètre de maille du substrat.

 a_e : Le paramètre de maille de la couche épitaxieé

c_{ij}: Les coefficients d'élasticité.



Figure 2.10 les deux types de déformation tension et compression.

Chapitre2 Principaux caractéristiques des semi-conducteurs III-

V et l'étude des alliages ternaires InGaAs/GaAsP et



GaSbBi/GaAs.

Figure 2.11 Propagation de dislocation dans la couche épitaxie épaisse [32].

 Dans le cas d'une couche épitaxieé plus épaisse, la déformation de la maille du matériau ne suffit plus à équilibrer l'énergie mécanique engendrée par la croissance.
 Le désaccord est alors rattrapé par la génération de dislocations à l'interface de croissance. Ces dislocations se propagent du substrat vers l'interface de croissance et la couche commence à relaxer.

2.6.3. Épaisseur critique

L'épaisseur au delà de laquelle la couche épitaxieé commence à relaxer est appelé épaisseur critique. L'épaisseur critique de la couche contrainte h_c est l'un des paramètres les plus importants que nous devons prendre en compte. Dans notre calcul, on a utilisé le modèle le plus classique, celui de K. Köksal et B.Gonul [17], qui traite le cas d'un matériau faiblement désaccordé par rapport au substrat (désaccord de maille < 2 %). La valeur de l'épaisseur critique h_c qui en résulte dans le cas d'un matériau de structure sphalérite (zinc blende) épitaxie sur la surface n'est donnée par l'équation suivante [17] :

$$h_c = \frac{a_e}{k \cdot \sqrt{2} \cdot \pi \cdot \Delta_a} \times \frac{1 - (0.25 \cdot Y)}{(1 + Y)} \times ln\left(\frac{h_c \cdot \sqrt{2}}{a_e} + 1\right)$$
(2.13)

avec :

ε: Le désaccord paramétrique qui est donné par : $\mathcal{E} = \frac{a_s - a_e}{a_s}$

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

Où, C₁₁ et C₁₂ sont les constantes d'élasticités obtenues par l'interpolation linéaire des binaires InAs, GaAs.

a_e : paramètre de maille de la couche relaxée.

k: C'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.

2.6.4 Effet de la contrainte sur la bande interdite

Pour la description du rôle de la contrainte sur la structure de bandes on a suivit le modèle de Van De Wallé, et utilisé le formalisme de Krijn [37]. Les deux composantes parallèle et perpendiculaire du tenseur de la déformation peuvent être définies de la manière suivante dans l'équation 2.13 et 2.14.Le rôle de la contrainte bi axiale sur la structure de bandes de la couche épitaxie est schématisé sur la figure 2.13. Celle-ci présente la structure de bande d'un semi-conducteur à gap direct en l'absence de contrainte (figure 2.13-a), soumis à une compression bi axiale(figure 2.13-b) et soumis à une contrainte bi axiale de tension (figure 2.13-c).

$$E_{\nu,moy} = \frac{E_{hh} + E_{lh} + \Delta_0}{3} \tag{2.14}$$

avec :

 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.



Figure 2.12 Structure de bande d'un semi-conducteur à gap directe. a) non contraint b) en compression c) en tension

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 : 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 2%).

Pour une couche épitaxie soumise à une contrainte bi-axiale de compression, la composante hydrostatique augmente l'écart entre la bande de valence et la bande de conduction, et la contrainte de cisaillement rend les bandes de valence fortement anisotropes [33] ; la bande de plus haute énergie devient lourde selon et légère selon (bande HH). La bande d'énergie inférieure devient elle légère selon et lourde selon (bande LH) (figure 2.2.b). Si la couche est soumise à une contrainte bi-axiale de tension (figure 2.2.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 et lourde selon k_{$\parallel}$ [33]. 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 [34]:</sub>

$$\Delta E_{V,moy}^{hyd} = a_v (2\mathcal{E}_{\parallel} + \mathcal{E}_{\perp})$$
(2.15)

$$\Delta E_c^{hyd} = a_c (2\mathcal{E}_{\parallel} + \mathcal{E}_{\perp}) \tag{2.16}$$

Avec a_c et av les potentiels hydrostatiques de déformation, respectivement, pour la bande de conduction et la bande de valence.Les décalages énergétiques induits par la contrainte de cisaillement pour chacune des bandes constituants la bande de valence sont les suivants [33]:

$$\Delta E_{hh}^{cisa} = -\frac{1}{2} \times \delta E^{cisa} \tag{2.17}$$

$$\Delta E_{lh}^{cisa} = -\frac{1}{2}\Delta_0 + \frac{1}{4}\delta E^{cisa} + \frac{1}{2}\sqrt{\Delta_0^2 + \Delta_0 \delta E^{cisa} + \frac{9}{4}(\delta E^{cisa})^2}$$
(2.18)

$$\Delta E_{so}^{cisa} = -\frac{1}{2}\Delta_0 + \frac{1}{4}\delta E^{cisa} - \frac{1}{2}\sqrt{\Delta_0^2 + \Delta_0 \delta E^{cisa} + \frac{9}{4}(\delta E^{cisa})^2}$$
(2.19)

Où :

b est le potentiel de déformation tétragone.

$$\delta E^{cisa} = 2. b. \left(\mathcal{E}_{\parallel} + \mathcal{E}_{\perp} \right) \tag{2.20}$$

2.7 Le gain optique

Le gain d'un matériau par unité de longueur est défini par le taux de croissance de la densité des photons pendant leur propogation suivant une direction dans le cristal.

$$g = \frac{1}{N_p} \frac{dN_p}{dz} = \frac{1}{v_{gN_p}} \frac{dN_p}{dt} = \frac{1}{v_{gN_p}} \left(R_{Est} - R_{ASt} \right)$$
(2.21)

où : N_p = nombre de photons par unité de volume

dN_p = densité des photons

dz = direction dans le cristal

 υ_g = la vitesse de propagation

$$R_{Est} = l'émission stimulée = R_r f_2(hw)(1 - f_1(hw))$$
(2.22)

$$R_{Ast} = R_r f_1(hw)(1 - f_2(hw))$$
(2.23)

Avec R_r (hw) = Probabilité de transition par unité de volume par seconde d'un matériau actif.

$$R_{\rm r}({\rm hw}) = \frac{1}{2} \frac{e_0^2 \lambda N_p}{c\varepsilon_0 m_0^2 n^2} \left| M_T(hw) \right|^2 \rho_j^{pq} (hw)$$
(2.24)

- C = vitesse de la lumière dans le vide
- ϵ_0 = la permittivité du vide
- m₀ = la masse effective de l'électron dans le vide
- n = indice de refraction
- λ = longueur d'onde

 ρ_i^{pq} (hw) = densités d'états finale

 $|M_T|^2$ = matrice de transition donnée par : $M_T^2 = \frac{m_0}{6} \left(\frac{m_0}{m_c} - 1 - 2F_b\right) \frac{E_g (E_g + \Delta_0)}{E_g + \Delta_0 / 3}$

m_c = la masse effective

 Δ_0 = energie du spin orbite

E_g = energie du gap

Le gain du matériau par unité de longueur est [34].

$$g(hw) = \frac{1}{2} \frac{e_0^2 \lambda}{c^2 \varepsilon_{0 m_t^2} n} |M_T(hw)|^2 \rho_j (hw) (f_2 (hw) - f_1 (hw))$$
(2.25)

 $=g_{max}(hw)(f_2(hw) - f_1(hw))$

où mt: masse effective trou

 f_2 = facteur de Fermi final

f₁ = facteur de Fermi initial

Où le gain maximum g_{max} est une propriété du matériau, et le facteur de Fermi $f_2 - f_1$ dépend des porteurs (pompage optique).Dans le cas de dimensions réduites (puits quantiques) la densité d'états ρ_j (*hw*)correspond à la densité d'états réduite ρ_r^{pq} (*hw*) entre deux sous-bandes.

g (hw) =
$$\sum \sum g_{(n_c, n_v)}(hw)$$
 (2.26)

où:

n_c = densité de la bande de conduction

n_v = densité de la bande de valence

La somme doit être faite sur toutes les combinaisons des sous-bandes. Pratiquement avec la règle de selection, le gain des pairs $n_c = n_v$ va être dominant, plus précisement le gain pour n = 1 est le plus grand.

2.8 Etude du Laser à semi-conducteurs

Le mot Laser signifie : Light amplification by Stimulated Emission of Radiation, il y a donc amplification par émission stimulée de lumière.

2.8.1 Principe de fonctionnement d'un Laser

Tout Laser est constitué de trois éléments : milieu amplificateur, une cavité resonnante et une source de pompage.



Figure 2.13 Schéma d'un laser.

2.8.2 Le milieu amplificateur

C'est un milieu optiquement actif qui transforme en photons l'énergie injectée par le pompage et dans lequel il ya du gain (émission stimulée).Considérons deux niveaux d'énergie d'un atome (état fondamental et état excité) et voyons les transitions possibles entre ces deux états [35] :

Absorption

L'électron absorbe l'énergie du photon pour passer à l'état excité.



Émission spontanée

Un atome excité est dans un état instable et peut donc revenir à son état fondamental en émettant un photon.



Lorsqu'un photon incident induit la recombinaison radiative d'une paire électron-trou, le photon émis a même phase et même direction que le photon incident.



2.8.3 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) [36].

2.8.4 Le pompage par injection électrique

La technique standard utilisée dans les diodes lasers. L'excitation se fait par un courant électrique circulant entre les 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.

2.8.4 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 [37].

2.8.8 Caractéristique du laser

Le laser est une source unidirectionnelle, intense, monochromatique et cohérente. Le faisceau se dirige dans une seule direction. Il peut y avoir une divergence provoquée par la diffraction lorsque le faisceau se propage dans un milieu permettant donc une augmentation de diamètre du faisceau. Les lasers émettent une lumière très intense, même si certain laser semble peu puissant, leur lumière est concentrée sur une toute petite surface. 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. Contrairement à la lumière émise par le soleil ou par une ampoule à incandescence qui est poly chromatique (constitué de plusieurs longueurs d'onde), la lumière produite par un laser est monochromatique (elle contient très peu de longueurs d'onde) [35]. 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.

2.8.9 Effet du laser

Les semi-conducteurs qui possèdent un gap direct autorisant l'émission lumineuse ont été intensément étudiés. Selon l'énergie de la bande interdite, ils émettent dans un 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 à

l'émission spontanée 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.

2.9 Conclusion

Dans ce deuxième chapitre, on a regroupé quelques propriétés générales des matériaux semi conducteur III -V (propriétés physique et propriétés électronique). Après les notions fondamentales de laser : le milieu amplificateur, la source de pompage et la cavité résonante et aussi les définitions du laser à semi conducteur et les puits quantique ont été mentionné. Dans le chapitre suivant on étudiera les résultats de la simulation des matériaux ternaires InGaAs/GaAsP et GaSbBi/GaAs et la mise en évidence du résultat obtenue avec d'autres résultats.

3.1 Introduction

Le but de ce chapitre, est de présenter et interpréter les résultats obtenus par simulation des structures à puits quantique InGaAs/GaAsP et GaSbBi/GaAs pour déterminer les concentrations optimales d'indium et de bismuth qui résultent des longueurs d'onde d'émission exploitable dans les fibres optique comme 0.85, 1.33 et 1.55 µm. Pour cela des simulations ont été faites afin d'étudier les effets de la contrainte et la concentration d'indium et de bismuth sur les différents paramètres comme le gap, la barrière de potentiel, l'énergie de quantification, l'énergie de transition des puits quantiques et le gain optique.

3.2 Résultats et discussions des simulations

La figure 3.1 (a,b,c), représente la variation des paramètres de maille des alliages ternaire GaAsP, InGaAs et GaSbBi respectivement, en fonction des concentrations de phosphore, d'indium et de bismuth. On constate que l'incorporation du phosphore entraîne une diminution du paramètre de maille dans la figure 3.1(a) tandis que l'incorporation d'indium et de bismuth augmente le paramètre de maille des alliages respectivement, InGaAs et GaSbBi.



Figure 3.1 (a) Variation du paramètre de maille en fonction de la concentration de phosphore.

Pour l'InGaAs, le paramètre de maille varie entre 5.657 et 6.058 Å dans la figure 3.1.b alors que pour le GaSbBi on a un accroissement entre 6.095 et 6.324 Å dans la figure 3.1.c avec l'insertion de Bismuth.



Figure 3.1 (b,c) Variation du paramètre de maille en fonction de la concentration : (b) d'indium de la structure InGaAs et (c) de bismuth de la structure GaSbBi.

La figure 3.2 illustre la contrainte créée entre les alliages et les substrats. La contrainte est en compression quelque soit la concentration d'indium et de Bismuth (ϵ < 2%). Si on fixe la concentration du phosphore y = 20% on a un désaccord ϵ = - 1.634 Å pour une concentration d'indium de x = 13 %, alors que pour x =10 % on a un désaccord ϵ = -1.424 %.

On remarque qu'il y un faible désaccord entre la couche épitaxie $In_xGa_{(1-x)}As$ et le substrat GaAsP. On traite le cas d'un matériau faiblement désaccordé par rapport au substrat. On remarque que la contrainte établit entre InGaAs/GaAsP est plus inférieur à celle du GaSbBi/GaAs. Donc on peut dire que InGaAs résulte une parfaite croissance sur le substrat GaAsP.



Figure 3.2 (a,b) Variation du désaccord paramétrique en fonction : (a) de la concentration d'indium de la structure InGaAs et (b) de la concentration de bismuth de la structure GaSbBi.

Les figures 3.3(a) et 3.3 (b) suivantes représentent respectivement les variations de l'épaisseur critique de la structure InGaAs avec une couche GaAsP pour plusieurs concentrations de phosphore et celui de GaSbBi avec une couche GaAs pour une concentration fixe de bismuth.



Figure 3.3 (a,b) Variation de l'épaisseur critique en fonction : (a) de la concentration d'indium et (b) de la concentration de bismuth.

Avec la contrainte en compression, l'épaisseur critique augmente pour des valeurs de la concentration d'indium et de bismuth < 2%, au delà de cette valeur on remarque une réduction de l'épaisseur critique pour qu'elle donne 25.74 Å à x = 100% concentration

d'indium pour une concentration de phosphore nulle dans le substrat GaAsP (1^{er} matériau) et il décroit pour atteindre 64.12 Å à 100% de la concentration de Bismuth. Si on compare les deux épaisseurs, on observe que l'épaisseur de GaSbBi est supérieure à celle d'InGaAs.

La figure 3.4.a indique l'évolution de la bande interdite en fonction de la concentration d'indium (avec x = 0.1%, on a un gap de 1.399 eV et pour x = 2%, on a un gap de 1.378 eV) et celle de la figure 3.4.b illustre l'évolution de la bande interdite par rapport à la concentration de Bismuth.



Figure 3.4 (a,b) L'évolution du gap en fonction : (a) de la concentration d'indium de la structure InGaAs et (b) de la concentration de bismuth de la structure GaSbBi.

On a une légère diminution de la bande interdite de 0.4092 eV avec l'augmentation de la concentration d'indium à x = 99% et de 0.15 eV pour une forte concentration de Bismuth dans le $2^{\text{ème}}$ matériau ensuite il devient constant.

Les figures 3.5.a et 3.5.b montrent respectivement l'évolution de la bande interdite des trous lourds et trous légers en fonction de la concentration d'indium pour plusieurs concentration de phosphore Avec l'incorporation d'indium l'énergie diminue jusqu'à 0.1713 eV pour (y = 0) pour les trous lourds et s'annule presque pour les trous légers.



Figure 3.5 (a,b) L'évolution de la bande interdite : (a) des trous lourds et (b) des trous légers en fonction de la concentration d'indium.

La meilleure concentration de phosphore est y = 0. Avec cette valeur, on à une augmentation de la barrière de potentiel du substrat GaAsP et les électrons restent confinés dans le puits InGaAs donc la structure devient InGaAs/GaAs (voir figure 3.5 (c)).



Figure 3.5 (c) Schéma d'un puits quantique simple pour la structure InGaAs.

InGaAs est le semi-conducteur A (SCA) qui joue le rôle de puits et GaAsP est le semiconducteur B (SCB) qui joue le rôle de barrière pour la structure InGaAs.

Les figures 3.6(a) et 3.6(b) montrent respectivement l'évolution de la bande interdite sans contrainte de l'alliage InGaAs en fonction de la concentration d'indium et de l'alliage GaSbBi en fonction de la concentration de Bismuth.



Figure 3.6 (a) L'évolution de l'énergie de la bande interdite non contrainte en fonction de la concentration d'indium de la structure InGaAs.



Figure 3.6 (b) L'évolution de l'énergie de la bande interdite non contrainte en fonction de la concentration de bismuth de la structure GaSbBi.



Figure 3.6(c) Puits quantique simple pour la structure GaSbBi.

Le GaSbBi est le semi-conducteur A (SCA) qui joue le rôle de puits quantique pris en sandwich entre deux barrières de semi-conducteur B (SCB) c'est-à-dire le GaAs qui joue le rôle de barrière dans la structure GaSbBi.

La figure 3.7 indique l'effet de l'incorporation de bismuth (Bi) dans la bande de valence. Le bismuth entraîne un éclatement de la bande de valence (B_v) en deux sous bandes. L'éclatement de la bande de valence induira encore à une réduction de la bande interdite du matériau en fonction de la concentration de bismuth.



Figure 3.7 L'évolution de la bande interdite avec contrainte en fonction de la concentration de Bismuth.

Comme la contrainte est en compression, la bande interdite des trous lourds est inférieur à la bande interdite des trous légers et l'élargissement entre ces gaps accroit avec l'augmentation de la concentration de Bismuth Bi.

La figure 3.8 indique l'évolution de la bande interdite en fonction de la température et des concentrations d'indium et de bismuth en 3D. Une augmentation de la température et des concentrations entraînent une diminution du gap dans les simulations. Pour une concentration d'indium x = 9 % et une température T = 300 K on a un gap de 1.145 eV alors qu'il est de 0.293 eV avec une concentration de bismuth de 8.9 %. A la température T = 420K on a un gap de 1.018 eV dans la structure InGaAs avec x = 13 % et 0.0255 eV dans GaSbBi pour une concentration de bismuth de 13.7 %. La température joue un rôle important pour la diminution de la bande interdite.



Figure 3.8(a,b) Variation de la bande interdite en fonction de la température et : (a) de la concentration d'indium de la structure InGaAs et (b) de la concentration de bismuth de la structure GaSbBi en 3D.

Le résultat de simulation qu'on a obtenu lors de la variation de la bande interdite en fonction de la température en ISO est représentée sur la figure 3.9 en fonction de la concentration d'indium.



Figure 3.9 Variation de la bande interdite en fonction de la température et de la concentration d'indium en ISO.

La figure 3.10 (a,b) illustre la variation du coefficient d'absorption α en fonction de la température T en 3D et des concentrations d'indium et de bismuth.



Figure 3.10 (a) Variation du coefficient d'absorption en fonction de la température et de la concentration d'indium en 3D.

A la température de 340 K, si on fixe x à 30 % on a coefficient d'absorption de 3.374e + 05 cm⁻¹ pour l'alliage InGaAs hors pour l'alliage GaSbBi on a un coefficient d'absorption de 4.867e+06 cm⁻¹ pour une concentration de bismuth de 12 %).



Figure 3.10 (b) Variation du coefficient d'absorption en fonction de la température et de la concentration (b) de bismuth en 3D.

La figure 3.11 montre le résultat de la simulation de la variation du coefficient d'absorption en fonction de la température et des deux concentrations (indium et bismuth) en ISO.



Figure 3.11 (a) Variation du coefficient d'absorption en fonction de la température et de la concentration d'indium en ISO.



Figure 3.11 (b) Variation du coefficient d'absorption en fonction de la température et de la concentration de bismuth en ISO.

La figure 3.12 (a,b) démontre la variation du coefficient d'absorption α en fonction des deux concentrations et de la longueur d'onde λ en 3D. Pour x = 1 %, λ = 0.90 µm, on a : α = 0 cm⁻¹ et pour x = 91 %, λ = 0.35µm, on a α = 9.646 e + 06 cm⁻¹ dans la figure 3.12(a) par contre dans la figure 3.12(b) qui est en fonction de la concentration de bismuth, en fixant cette concentration de bismuth de 11 % pour λ = 1.5 µm, on a α = 1.902e+07 cm⁻¹.



Figure 3.12 (a) Variation du coefficient d'absorption en fonction de la longueur d'onde et de la concentration d'indium en 3D.



Figure 3.12 (b) Variation du coefficient d'absorption en fonction de la longueur d'onde et de la concentration de bismuth en 3D.

En fixant la concentration d'indium à 30 %, on a α = 3.374e + 05 cm⁻¹ pour l'alliage InGaAs hors pour l'alliage GaSbBi on a : (α = 4.867e+06 cm⁻¹ pour une concentration de bismuth de 12%). Cette figure 3.13 (a,b) ci-dessous est la représentation en ISO du coefficient d'absorption en fonction de la longueur d'onde.



Figure 3.13 (a) Variation du coefficient d'absorption en fonction de la longueur d'onde et de la concentration d'indium en ISO.



Figure 3.13 (b) Variation du coefficient d'absorption en fonction de la longueur d'onde et de la concentration de bismuth en ISO.

On constate qu'une bonne longueur d'onde donne un bon coefficient d'absorption de la lumière.

La figure 3.14 (a) montre la variation des barrières de potentiel de Puits quantiques InGaAs / GaAsP (ΔE_c) en fonction de la concentration d'indium (x). On constate qu'avec une concentration nulle de phosphore, les deux barrières (valence et conduction) s'annulent aussi mais avec l'augmentation cette différence de potentiel entre l'alliage ternaire et le substrat augmente pour atteindre 1.2 eV dans la bande de conduction B_c et 0.2 eV dans la bande de valence Bv. Ces barrières sont très faibles pour créer un effet de confinement de porteurs. Dans la figure 3.14 (b) l'évolution de la barrière de potentiel entre l'alliage GaSbBi et le substrat GaAs atteint 0.9581 eV pour la bande de conduction et 0.07668 eV pour la bande de valence ce qui induit à un effet de confinement dans l'alliage GaSbBi donc un puits quantique.



Figure 3.14 (a,b) Barrière de potentiel en fonction des concentrations d'indium et de bismuth.

La figure 3.15, illustre la variation des taux de confinements des porteurs dans la bande de conduction en bleu et dans la bande de valence en vert pour les deux structures. Dans la bande de conduction où la barrière est importante, on a une diminution du taux entre 1 et 0.8348 % pour la première structure tandis qu'il diminue de 0.9254 % pour la deuxième. Dans la bande de valence ce taux augmente entre 0 et 0.1652 pour InGaAs et 0.07457 % pour GaSbBi.



Figure 3.15 (a,b) Taux de confinement en fonction des deux concentrations.

Les figures 3.16.a et 3.16.b illustrent les variations des niveaux électrons dans le Puits quantique en fonction de sa largeur L pour la concentration d'indium x = 0.35 % dans le 1^{er} matériau et dans le second matériau avec une concentration de bismuth de 0.12 %. Dans les deux simulations, on remarque que les niveaux de confinement augmentent tandis que les niveaux d'électrons diminuent avec l'élargissement du Puits quantique et pour des valeurs L supérieures à 12 nm il apparaît un deuxième niveau de confinement dans la 1^{ère} structure tandis qu'il apparaît pour L supérieures à 8 nm dans la 2^{ème} structure.



Figure 3.16 (a,b) La variation des niveaux d'électrons en fonction de la largeur de puits dans InGaAs et GaSbBi.

La figure 3.17 (a,b) illustre la variation des niveaux énergétiques des trous lourds dans le Puits quantique en fonction de sa largeur L pour des concentrations d'indium et de bismuth respectivement 0.35 et 0.12.

Dans les deux simulations, on remarque que les niveaux de confinement augmentent tandis que les niveaux d'électrons diminuent avec l'élargissement du Puits quantique et pour des valeurs L supérieures à 12 nm il apparaît un deuxième niveau de confinement dans la 1^{ère} structure tandis qu'il apparaît pour L supérieures à 8 nm dans la 2^{ème} structure.



Figure 3.17 (a,b) La variation des niveaux énergétiques des trous lourds en fonction de la largeur de puits.

Les figures 3.18 (a,b) ci-dessous sont assez similaires aux 2 précédentes mais cette foie-ci avec des trous légers et on a un deuxième niveau de confinement à L supérieur (à 18 nm pour la 1^{ère} structure).



Figure 3.18 (a,b) La variation des niveaux d'énergie des trous légers en fonction de la largeur de puits : (a) de la structure InGaAs et (b) de la structure GaSbBi.

La figure 3.19 (a,b) représente la variation de l'énergie libérée par la transition de l'électron de la bande de conduction vers la bande de valence (trous lourds) en fonction de la largeur de Puits quantique pour les deux concentrations. On remarque que les niveaux de transitions diminuent avec l'élargissement de Puits et l'énergie libérée devient importante entre les niveaux plus éloignés. Les énergies de transition faibles pour ($HH_1 - C_1 1^{er}$ niveau de la bande de valence vers 1^{er} niveau de la bande de conduction) sont faibles par rapport aux

énergies données par ($HH_1 - C_2$, $HH_2 - C_1$, $HH_2 - C_2$); cette différence est due à l'éclatement de la bande de valence et à la diminution de la bande interdite.



Figure 3.19 (a,b) Energie de transition en fonction de l'épaisseur du puits quantique pour les trous lourds.

La figure 3.20 (a,b) donne l'évolution de l'énergie de transition des trous légers. On a l'apparition du deuxième niveau de confinement pour L supérieur à 8 nm et une diminution du niveau d'énergie. Plus la largeur de puits augmente, plus le niveau de confinement augmente.



Cette figure est assez similaire à la figure précédente.

Figure 3.20 (a,b) Energie de transition en fonction de l'épaisseur du puits quantique pour les trous légers.

La figure 3.21 (a,b) indique les variations de la longueur d'onde d'émission des trous lourds en fonction de la largeur de Puits L. La longueur d'onde augmente avec l'élargissement de puits et aussi avec l'augmentation de la concentration d'indium dans le puits. Pour $HH_1 - C_1$ (1^{er} niveau du trou lourd de la bande de valence vers le 1^{er} niveau de la bande de conduction) avec L = 20 nm on a : une longueur d'onde de1.553 \mathbb{B}_m pour le
1er alliage et 3.794 \mathbb{D}_m pour le 2^{ème} alors qu'avec HH₁ – C₂ (1^{er} niveau des trous lourds de la bande de valence vers le 2^{ème} niveau de la bande de conduction), la longueur d'onde est de 1.302 \mathbb{D}_m pour l'alliage InGaAs et 3.601 \mathbb{D}_m pour le cas de GaSbBi.



Figure 3.21 (a,b) L'évolution de la longueur d'onde d'émission des trous lourds.

La figure 3.22 (a,b) est le cas des trous légers pour les deux concentrations. Pour $LH_1 - C_1$ on a 1.174 µm de longueur d'onde (InGaAs) et 3.016 µm (GaSbBi) et ainsi de suite. Donc la longueur d'onde des trous lourds est un peu important que celle des trous légers.



Figure 3.22 (a,b) L'évolution de la longueur d'onde d'émission des trous légers.

Ces figures 3.23 (a,b) ci-dessous illustrent les variations du gain en fonction de la longueur d'onde λ pour plusieurs concentrations d'indium dans la structure InGaAs et plusieurs concentrations de bismuth dans la structure GaSbBi avec une largeur de Puits L = 6 nm, une température T = 300K et une concentration d'électron N = 10^18 cm⁻³.



Figure 3.23 (a,b) La variation du gain optique en fonction de la longueur d'onde pour plusieurs concentrations d'indium et de bismuth.

La figure 3.24 (a) représente la variation du gain en fonction de la longueur d'onde λ pour plusieurs valeurs de la largeur de puits L avec une concentration d'indium x = 0.25, concentration de phosphore nulle (y = 0), la température T = 300 K et la densité des électrons (N = 10¹⁸ cm⁻³) dans la structure InGaAs. Dans la figure 3.24 (b) qui est le cas de l'alliage GaSbBi (L = 2 nm, L = 4 nm, L = 6 nm, L = 8 nm, L = 10 nm), (N = 5.10¹⁸) cm⁻³, T = 300K et avec une concentration de bismuth x = 0.10 %.



Figure 3.24 (a,b) La variation du gain optique en fonction de la longueur d'onde pour plusieurs valeurs de la largeur de Puits quantique.

Cette figure 3.25 (a,b) est la variation du gain pour plusieurs concentrations d'électrons (N = 1, N = 2, N = 3, N = 4, N = 5) avec des concentrations d'indium et de phosphore respectivement x = 0.25 et y = 0, une température T = 300K et la largeur de Puits L = 3 nm pour la 1^{ère} structure. Dans la 2^{ème} structure (N = 4, N = 6, N = 8, N = 10, N = 12, N = 16) avec

une concentration de bismuth fixe x = 0.10, T = 300K et L = 6 nm. On remarque une augmentation du gain à un certain seuil puis une diminution.



Figure 3.25 (a,b) La variation du gain optique en fonction de la longueur d'onde pour plusieurs concentrations d'électron.

La figure 3.26 (a,b) donne l'évolution du gain optique en fonction de la longueur d'onde pour différentes températures, pour x = 0.10 avec une injection N = 5.10^{18} cm⁻³ et une largeur de Puits L = 6 nm.



Figure 3.26 (a,b) Spectre du gain optique pour plusieurs températures.

On constate que lorsque la température augmente, le spectre du gain se déplace vers les grandes longueurs d'ondes car avec l'augmentation de la température la bande interdite diminue et la longueur d'onde augmente, on remarque aussi une diminution du gain maximal.

3.3 Conclusion

Dans ce 3ème chapitre, on s'est intéressé à l'optimisation des concentrations de In, de Bi et la largeur de puits quantique afin d'avoir des longueurs d'onde d'émission exploitables pour la télécommunication optique. Dans une première partie de ce chapitre, on a étudié l'effet de l'insertion de l'indium et de bismuth sur les propriétés physique des deux structures InGaAs/GaAs et GaSbBi/GaAs; la contrainte créée dans la deuxième structure est très importante que celle obtenue dans la première structure ce qui résulte une épaisseur critique faible. La simulation des barrières de potentiel dans les deux structures montre qu'il y a un confinement de porteurs mais plus importantes dans la 2^{ème} structure que dans la 1^{ère} puisque ces barrières de potentiel sont plus importantes. Dans la deuxième partie, on a procédé à la quantification des niveaux énergétiques des électrons et des trous ainsi que le calcul de la bande interdite, l'effet de l'incorporation de bismuth sur la bande de valence qui réduit la valeur de la bande interdite ; la somme des niveaux quantiques des électrons, des trous et de la bande interdite des matériaux actifs (InGaAs et GaSbBi) donnent les énergies de transition (énergie libérée pour les transitions inter sous bande de conduction et de valence). Finalement ; la longueur d'onde 1.55 µm a été obtenue pour des couples (x, L); on constate que si on augmente les deux concentrations, la longueur (1.55 µm) est obtenue pour des largeurs faibles, alors que si on réduit les concentrations, cette longueur va être obtenue avec des largeurs de puits plus importantes ce qui augmente le coût du dispositif.

Annexes

ANNEXE A

A.1 Tableau périodique de Mendeleïev



Tableau A1 Tableau périodique de Mendeleïev des éléments [17].

A.2 Caractéristique des matériaux massifs

Paramètre	InAs	GaAs	GaBi	GaSb
Paramètre de	6.05	5.65	5.324	6.09
maille (A°)				
Potentiel	-5.08	-7.17	-7.5	-7.5
hydrostatique				
de déformation				
de la bande de				
conduction a_c				
(eV)				
Potentiel	-1.00	1.16	-0.8	0.8
hydrostatique				
de déformation				
de la bande de				
valence a _v (eV)				
Potentiel de	-1.8	-2.0	-2	-2.0
déformation de				
cisaillement : b				
(eV)				
Constante	832.9	1221	884.2	884.2
élastique :				
c ₁₁ (GPa)				
Constante	452.6	566	402.6	402.6
élastique :				
C ₁₂ (GPa)				
Masse effective	0.0213	0.0632	0.039	0.039
des électrons m _e				
(m ₀)				
Masse effective	0.517	0.5	0.25	0.28
des trous lourds				
m _{hh} (m ₀)				
Masse effective	0.024	0.088	0.043	0.015
des trous légers				
$m_{lh}(m_0)$				
L'énergie Spin	0.39	0.34	0.76	0.82
orbite Δ_0 (eV)				
Bande interdite	0.414	1.422	-1.45	0.72
à 300 K				
E _g (eV)				

Il est nécessaire de connaitre un certain nombre de paramètre physiques.

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

A.3 Expression des paramètres

Pour les alliages ternaires, les paramètres a, Δ_{SO} , C_{11} , C_{12} , m_e , m_{hh} , m_{lh} , $N_c et N_v$ sont déterminés à partir de la relation de la loi de Végard (interpolation).

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

$$m_{hh} = \frac{1}{y_1 - 2*y_2}$$
 A.1

$$m_{hh} = \frac{1}{y_1 + 2*y_2}$$
 A.2

A.4 Epitaxie:

L'épitaxie est une étape technologique consistant à faire croître du cristal sur du cristal. Étymologiquement, « épi » signifie sur et « Taxie » arrangement. [1] Philipe Mercure: 'Calcul de gain optique de structures à puis quantiques sous contraintes' Thèse de doctorat. Ecole polytechnique de Montréal (2006).

[2] P.J.A. Thijs, L.F. Tiemijer, J.J.M BinsmaanT.VanDongen :' IEEE J.Quntum Electron', (1994).

[3] Nicolas Trenado,' Modélisation et simulation des composants optoélectroniques à puits quantiques', thèse de doctorat (2002), université de Rouen U.F.R. des sciences et techniques.

[4] Laid Abdelali, 'Etude des niveaux d'énergie dans la structure de la diode laser gainp/algainp par la méthode du pseudo potentiel', mémoire de magister 2009, université Djilali Liabes Sidi Bel-Abbes.

[5] http://membres.lycos.fr/procession/electronique/smcd06.pdf.

[6] Istophe DELERUE : 'Théorie des nanostructures de silicium', mémoire présenté à l'université des Sciences et Technologies de Lile pour obtenir l'habilitation à diriger des recherches.

[7] Sylvie FAŸ, 'l'oxyde de zinc par dépôt chimique en phase vapeur comme contact électrique transparent et diffuseur de lumière pour les cellules solaires', thèse de doctorat (2003), école polytechnique fédérale de Lausanne.

[8] Alain RICAUD, 'Filières technologiques photovoltaïques', technique de l'ingénieur n0 d
3940 – 1, /2009Cythelia.pdf.

[9] Lecomber, Solid State Comm. 17 (1975) N0 1193.

[10] P.R.Bauquis, 'Un point de vue sur les besoins et les approvisionnements en énergie à l'horizon 2050', Ecole doctorale, Fréjus, Mars 2003.

[11] Hubert Reeves, 'Mal de Terre, science ouverte', éditions du seuil, mars 2003.

[12] RAHMOUNI Mawahib, 'Etude des cellules photovoltaïques HIT en vue d'améliorer leur rendement', université des sciences et de la technologie d'Oran Mohamed Boudiaf (2009).

[13]http://ipn2.epfl.ch/LNM/cours/solide/pres/9.pdf,2004/PhysSemi/Cours/Sem/node2.ht ml.

[14] S. M. SZE, John Wiley & Sons, 'Physics of Semiconductor Devices', 1981.ISBN: 0-8493-9623-9.

[15] Dimitri Galayko, 'Introduction des composants à semi conducteur', cours, 2005, Unité enseignement Elec -info pour master ACSI à l'UPMC.

[16] Foundation, w. (2010, octobre 12). 'Fichier : Mendeleïev.jpg'. Consulté le mai 15,2011, sur www.wikipedia.org/wiki/fichier : Mendeleïev.jpg.

[17] K.Koksal, B.G., 'Critical Layer Thicknessog GaIn (n) As(Sb) qws on GaAs and InP substrates for (001) and (111) orientations', The European Physical journal (5may 2009), 211-218.

[18] Bediar, M., 'Caracteristiques des structures Lasers a Puits quantiques Contraints', Université de Bataba, (2007).

[19] Mathieu, H., 'Physique des semi-conducteurs et des composants Electronique', Masson, Paris, (1998).

[20] Tarik Bourgba, 'Propriétés optiques puis quantiques GalnAs /GaAs', thèse de doctorat,2006, université Blaise Pascal.

[21] S.Laval, 'Physique des semi-conducteurs III-V', Ecole d'été d'optoélectronique (2002).

[22] htpp://www.Polytech-lille.fr/cours-transistor-effet-champ/hemt.

[23] M.Farahmand, C.Garetto, E.Belotti, K.F.Breman, M.

[24] LumdbergOlle, Bodegard Marika Malmstrom Jonas, 'grading on Solarcell performance', ProgPhotovoltResAppl 2003 ; 11 :77e88.

[25] Henry Mathieu, 'Physique des semi-conducteurs et des composants électroniques', Dunod, ISBN 2 10 0056549, Paris, 2001.

[26] J.Zimmernann, thèse de doctorat d'état 'Etude par la méthode Monté Carlo des phénomènes de transport électronique dans le silicium de type N en régime stationnaires et non stationnaire. Application à la simulation de composants submicroniques', Université de l'île 1, (1980).

[27] W.T.Anderson ' simulation of semiconductor Device failure Mechanisms', Naval research Laboraty, washington.D.C,2.Fraunhower Institute, Freiburg, Germany (2003).

[28] H.jones et c.Zener, Proc Roy Soc A144, 101(1934).

[29] L.Esaki et R.Tsu, IBMJ ResDev 14,61 (1970).

[30] Anne Mokhtarova., 'Puits quantique de composés Nitures InGaN/Ga N pour le photovoltaïque'. Thèse de doctorat, Physique / Nano physique, 2016, Université de Grenoble.

[31] 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.

[32] Renard, C.,'Héterostructures Antimoniures/ Arséniures pour les applications optoélectroniques dans le moyen infrarouge', Université Paris VII, (30 Septembre 2005).

[33] Ghione, G., 'semiconductor Devices for High-Speed optoelectronics', Politecnico Ditorino, Italie, Cambridge University Press, (2009).

[34] M.G.A.Bernard and G.Duraffourg, 'Laser Conditions in Semiconductors', Physica Status Solidi (b), Vol.1, pp.699-703, 1961.

73

[35] Moritz, A.,' Advantages of a pulsed CO₂ laser in direct pulpcapping : a long-term in visio study.Lasers surg.Med',1998, 22, P288-293.

[36] D.Botez,' Design considerations and Analytical Approximations for High Continouswave Power, Broad-waveguide Diode Lasers' Applied PhysicsLetters, Vol.76, PP.3102-3104, May (1999).

[37] S.Porowski 'Bulk and homo epitaxialGaN-grouth and characterization', J.Cryst.Growth 189-190,153 (1998).