الجمهورية الجزائرية الديمقراطية الشعبية République Algérienne démocratique et populaire

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

> جامعة سعد دحلب البليدة Université SAAD DAHLAB de BLIDA

> > كليةَ التكنولوجيا Faculté de Technologie

فَسم الظَّمَرونيكُ Département d'Électronique



# Mémoire de Master

Mention Électronique Spécialité Traitement de l'Information et Systèmes Électroniques

#### présenté par

Merouani Roumaissa

&

Fettar Amina Yasmine

# Calcul de la longueur d'onde d'une structure à puits quantiques à base de GaN/Al<sub>x</sub> Ga<sub>1-x</sub> N par l'émission ultraviolet

Proposé par : Pr. Aissat Abdelkader

Année Universitaire 2021-2022

Nous remercie **ALLAH** le Tout-puissant de nous avoir donné le courage, la volonté et la patience de mener à terme ce présent travail.

En second lieu, nous tenons à remercier notre encadreur Mr : **AISSAT ABDELKADER**, pour son aide et ses précieux conseils durant toute la période du travail.

Nos vifs remerciements vont également aux membres du jury pour l'intérêt qu'ils ont porté à notre recherche en acceptant d'examiner notre travail et de l'enrichir par leurs propositions.

Nous remercions aussi nos professeurs Mr SAID NECER, Mm ZERROUK, Mr BOUNEMRI qui nous a soutenus durant notre formation à l'université USDB.

Sans oublier la contribution de nous collègues et nos amis de département d'électronique et surtout à Mlle ZEROUALA FERIEL et tous camarades de nos l'option MICROELECTRONIQUE promo M2De 2020. nous avoir encouragé et de nous soutenir moralement durant toute la période de la préparation de notre travail sans oublier les personnes du corps administratif du département de d'électronique.

On remercie finalement tous ceux qui, de près ou de loin, nous ont permis à bien mener ce travail.

# **Dédicace**

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 mon frère unique Yacine, mes adorables sœurs SAMIHA,FAIROUZ et CHAIMAA, je leurs souhaite une belle vie pleine de joie et d'amour.

Merouani Roumaissa

# Dédicace :

J'ai le grand plaisir de dédier ce modeste travail : À mes chers parents ; aucune dédicace ne serait témoin de mon profond amour, mon immense gratitude et mon plus grand respect, car je ne pourrais jamais oublier la tendresse et l'amour dévoué par lesquels ils m'ont toujours entourée depuis mon enfance.

À ma sœur Soumia, qui m'a toujours soutenu et encouragé durant mes années d'études.

À mes chères amies, tout particulièrement Asmaa, Manel et Bouchra, qui m'ont encouragé et à qui je souhaite plus de succès, et à tous mes collègues de section microélectronique.

Yasmine

ملخص:

في هذا العمل ركزنا على دراسة وحساب طول الموجة للتركيبة GaN/AlGaN المكونة من مواد نصف ناقلة من الصنف V-III للانبعاثات فوق البنفسجية. يتميز هذا الصنف بخصائص فيزيائية هامة ولهذا قمنا بحساب معلمة الشبكة وسمك الحرجة,

وخصائص كهربائية مثل طاقة الفجوة والطاقة الانتقالية.

ثانيا قمنا بدراسة تاثير تركيز الالمنيوم في التركيبة بهدف الوصول الى تركيبة البءر الكمومي التي تسمح بحساب طول الموجة للانبعاثات فوق البنفسجية 1.33 ميكرون.

كلمات مفتاحية: مواد شبه موصلة,طول الموجة, بئر كمومي .

**Résumé** : Dans ce travail, nous avons concentré notre attention sur l'étude et le calcul de longueur d'onde de la structure GaN/AlGaN de l'émission ultra-violet. Les semiconducteurs III-V ont des caractéristiques très importantes, pour cela nous avons étudiés les différentes paramètres structurales comme (paramètre de maille, désaccord de maille, épaisseur critique ...etc.)et électroniques comme l'énergie de son gap, l'énergie de quantification..., Nous avons également étudié les différents facteurs liés au laser, que nous avons utilisé pour calculer la longueur d'onde émise à un puits quantique par la résolution de l'équation de Schrödinger en utilisant l'un des méthodes numériques.

Mots clés : semi-conducteur; longueur d'onde ;puits quantiques.

**Abstract**: In this work, we focused our attention on the study of wavelength calculation of the GaN/AlGaN structure for the ultraviolet emission. For this we studied the different structural parameters such as (mesh parameter, mesh disagreement, critical thickness ... etc.) and electronics such as the energy of its gap, the energy of quantification..., We studied the principle of operation related to the laser, which we used to calculate the wavelength emitted to a quantum well by the resolution of the Schrödinger equation using one of the numerical methods

Keywords : semiconductor, laser, wavelength.

## Table des matières

- Introduction générale
- Chapitre1 : Généralité et définition
- 1.1.Introduction
- 1.2. Définition de semi-conducteur
- 1.2.1Bande de conduction
- 1.2.2 Bande de valence
- 1.3 Semi-conducteur III- V
- 1..4 Propriétés des matériaux III-V
- 1.4.1 Structure cristallines
- 1.4.2La structure zinc blende
- 1.4.3 La structure wurtzite :
- 1.3. Energie de gap
- 1.3.1 Energie direct
- 1.3.2 Energie indirect
- 1.5 Notion d'épitaxie
- 1.6Puits quantiques
- 1.6 Puits de Type I
- 1.6 Puits de Type II
- 1.7. Etude des paramètres électronique
- 1.7.1.Parametre de maille
- 1.7.2.La contrainte
- 1.7.3 Epaisseur critique
- 1.7.4 L'énergie de gap :
- 1.8 Effet de la contrainte sur le gap
- 1.9 La longueur d'onde :
- 1.10 L'équation de Schrödinger dans un puits quantique

- 1.11Puits quantique de profondeur finie
- 1.12. Conclusion

Chapitre2 : Résultats et discussions des simulations

- 2.1 Introduction
- 2.2 Le paramètre de maille
- 2.3 la contrainte
- 2.4 L'épaisseur critique
- 2.5 L'energie de la bande interdite sans contrainte
- 2.6 L'influence de la température sur la bande interdite
- 2.7 L'énergie des trous lourds Ehh et des trous légers Elh
- 2.8 Barrière de potentiel
- 2.9 Taux de confinement
- 2.10Energie de quantification
- 2.10.1Energie des quantification des Electrons
- 2.10.2Energie des quantification des trous lourds
- 2.10.31Energie des quantification des trous légers
- 2.11 Energie de transition
- 2.11 .1Energie de transition des trous lourds
- 2.11.2 Energie de transition des trous lèges
- 2.12. Energie de transition (effet de température)
- 2.12.1 Energie de transition des trous lourds(effet de température)
- 2.12.2 Energie de transition des trous légers (effet de température)
- 2.13 La longueur d'onde
- 2.13.1 La longueur d'onde de transition
- 2.13.2 La longueur d'onde de transition des trous lourds
- 2.13.3 La longueur d'onde de transition des trous lourds (effet de température).
- 2..14 Conclusion

Conclusion générale

annexe

Références

# Listes des figures

Figure I.1:Diagramme énergétique pour les trois types de matériaux a) métal b) conducteur c) isolant
Figurel.2:Structure de bande de GaN *6+5
Figure I.3:La structure Zinc Blende7
Figure I.4:La structure Wurtzite *6 +
Figurel.5 :Energie de gap a) gap direct, b) gap indirect8
Figure I.6:Géométrie de la structure du puits quantique9
Figure 1.7 :Structure d'un puits quantique de GaN/AlGaN10
Figure1.8:les types de puits quantiques10
Figure1.9 :maille cristalline
Figure II.10(a,b,c). Structure de bande d'un semi-conducteur à gap direct dans les trois cas (a) Non contraint (b) contraint en compression (c) contraint en tension14
Figure2.1 La variation du paramètre de maille en fonction de la concentration
d'aluminium19
Figure2.2 La variation de la déformation en fonction de la concentration d'aluminium
Figure2.3 La variation de l'épaisseur critique en fonction de la concentration d'aluminium
Figure2.4 La variation de l'énergie de la bande interdite en fonction de la concentration d'aluminium
Figure2.5 L'influence de la température sur l'énergie de la bande interdite
Figure2.6 L'énergie des trous lourds Ehh et des trous légers Elh en fonction de la concentration d'aluminium
Figure2.6 L'énergie des trous lourds Ehh et des trous légers Elh en fonction de la concentration d'aluminium
Figure2.7 L'effet de la concentration d'aluminium sur le décalage des bandes d'énergies23
Figure 2.8 La variation de taux de confinement en fonction de la concentration d'aluminium

<b>Figure 2.9</b> .(a,b,c) Energie de quantification des électrons a) pour n=1, x=0.1 b) pour n=1, x=0.2, c) pour	)
n=1,x=0.3	.4
Figure 2.10.(a,b,c) Energie de quantification des trous lourds a) pour n=1, x=0.1 b) pour n=1, x=0.pourn=1,x=0.3	.2, c)
<b>Figure 2.11</b> .(a,b,c) Energie de quantification des trous légers a) pour n=1, x=0.1 b) pour n=1, x=0. pour n=1, x=0.3	2, c)
Figure 2.12.(a,b,c) Energie de transition des trous lourds a) pour n=1, x=0.1 b) pour n=1, x=0.2, c)pour n=1, x=0.3	1
<b>Figure 2.13</b> . (a,b,c) Energie de transition des trous lourds (effet de température)a) pour n=1, x=0.1 pour n=1, x=0.2, c) pour n=1, x=0.3	1 b)
Figure 2.14. La longueur d'onde	
Figure 2.15. La longueur d'onde de transition des trous lourds	
Figure 2.16. La longueur d'onde de transition des trous lourds (effet de température)36	

# Liste des tableaux

l <b>eau 1.1</b> :Propriété des principaux composés binaires III-V à 300K6			
Tableau I.2 :valeurs du coefficient $\beta$	13		
<b>Tableau A.</b> et B : Paramètres physiques fondamentaux des principaux binaires300k	III-V	a 39	

#### Listes des acronymes et abréviations

Ga:Gallium.

- N:L'azote.
- *Al*:Aluminium.
- *x* : Concentration d'Aluminium.
- *L*<sub>w</sub>: Largeur du puits quantique.
- $\Delta a$ : Désaccord paramétrique.
- *Eg* : Énergie de gap.
- $\Delta_{so}$ :Bande spin orbite « split-off ».
- *lh* : Trou léger (Light hole).
- *hh*: Trou lourd (Heavy holes).
- Ev:Energie de la bande conduction.
- *Ec* : Energie de la bande valence.
- BC: Bande de conduction.
- BV : Bande de valence.
- K: Vecteur d'onde.
- *a* : Paramètre de maille.
- *c*: Vitesse de la lumière dans le vide.
- $\varepsilon_0$ : La permittivité dans le vide.
- $m_0$ : La masse effective de l'électron.
- b : Coefficient de courbure (Bowing).
- $E_i$ : Niveaux d'énergies.
- *hv* : Énergie de photon.
- *E<sub>e</sub>*: L'énergie des électrons.
- $E_{nhh}$ : L'énième niveau d'énergie des trous lourds (l'énergie quantifiée).
- $E_{nlh}$ : L'énième niveau d'énergie des trous légers (l'énergie quantifiée).

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

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

- $\lambda$ : Longueur d'onde.
- me\* : Masse effective des électrons.
- KT : L'énergie thermique.

 $E_n$ : L'énergie de quantification.

- $m_{hh}$ : Masses effectives isotropes.
- $m^*_{hh}$ : Masse effective supérieure (bande des trous lourds).
- $m^*_{lh}$ : Masse effective inferieure (bande des trous légers).
- $a_e$ : Le paramètre de maille de la couche épitaxie(GaN).
- $a_s$ : Le paramètre de maille du substrat (AlGaN).
- $\varepsilon$ : La déformation ou le désaccord de maille.
- C<sub>ij</sub>: Les coefficients d'élasticité.
- $\varepsilon_{||}$  ( $\varepsilon_{yy ou} \varepsilon_{zz}$ ): Déformation biaxiale.
- $\varepsilon_{\perp}$  ( $\varepsilon_{xx}$ ) : Déformation uni-axiale.
- $E_{v moy}$ : L'énergie moyenne de la bande de valence.
- *m*<sub>e</sub>: la masse de l'électron

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

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

 $\Delta_{hh-lh}$ : Dégénérescence des états énergétiques entre trous lourds et trous légers en k = 0.

 $E_{V,m\sigma y}^{hvd}$ Énergie de centre de gravité de la bande de valence en k=0 qui varient à la contrainte.

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

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

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

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

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

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

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

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

 $E_g^{cont}$ : Énergie de Gap sous contrainte.

 $h_{\mathcal{C}}$ : L'épaisseur critique.

*m*<sub>e</sub>: Masse de l'électron.

h : Constante de Planck.

 $Eg_{hh}$  et $Eg_{lh}$ : L'énergie de la bande interdite gap trous lourds et trous légers.

Le développement dans le domaine de la micro-électronique a connu une énorme croissance durant le demi-siècle dernier. Ce développement est dû en grande partie aux évolutions techniques et en particulier à l'optoélectronique. Cette dernière est l'étude des composants qui interagissent avec de la lumière. Elle est généralement considérée comme une sous branche de la photonique. [1]

Les progrès spectaculaires réalisés dans le domaine de la physique des semiconducteurs et de ses applications ont été rendus possibles par une bonne maîtrise des méthodes de croissance. Plusieurs techniques ont été développées à partir des années 1970 conduisant au contrôle ultime du dépôt d'atomes, monocouche par monocouche. Ainsi, on a pu concevoir des structures semi-conductrices dont les tailles sont réduites à des dimensions de l'ordre de la longueur d'onde de l'électron dans le milieu (typiquement quelques nanomètres) et dont les compositions peuvent également varier à l'échelle du nanomètre. Dans ce type de structure, des effets de confinement apparaissent du fait de la discontinuité du potentiel électronique aux interfaces entre deux matériaux d'énergie de bande interdite différente. Les porteurs ne sont plus libres de se mouvoir dans toutes les directions et leurs états d'énergie deviennent quantifiés dans les directions de confinement. [2]

Suivant le degré de confinement (le nombre de direction suivant lesquelles le mouvement des électrons est restreint), nous avons trois types d'hétéro-structures semi-conductrices à confinement quantique.

Les puits quantiques ont été les premières structures réalisées. Ils se distinguent du matériau massif par la quantification partielle des états électronique induit par le confinement dans une direction spatiale. Depuis une décennie, d'importants efforts

1

ont été réalisés en vue d'améliorer les techniques de croissance des structures de plus basse dimension à l'instar des fils quantiques, qui constituent des systèmes 1D, et des boîtes quantiques, qui sont des systèmes 3D. [3]

Notre mémoire est composé de deux chapitres, dans le premier chapitre nous présentons tout d'abord les notions fondamentales et des définitions sur les semiconducteurs et en particulier les semi- conducteurs III-V, ensuite nous présentons les puits quantiques. Et à la fin de ce chapitre nous allons présenter des généralités sur les lasers (principe de fonctionnement, les différents types des lasers,...).

#### **1.1 Introduction**

Dans ce premier chapitre, nous allons voir quelques notions et définitions sur les semi-conducteurs tels que : bande de valence et bande de conduction. Ensuite, Nous allons définir les matériaux III-V, décrire leurs propriétés physiques, électroniques et optiques essentielles avant de présenter un certain nombre de leurs applications. Et à la fin nous allons voir les puits quantiques et quelques équations mathématiques.

#### 1.2 Définition de semi-conducteur :

Un semi-conducteur est un matériau plus petit qu'un grain de sable et qui a les propriétés électriques d'un isolant et d'un conducteur, et sa résistivité se situe entre les deux et varie de  $10^{-3}$  à  $10^4 \Omega$ .cm (ou plus). Les électrons libres et les trous mobiles sont les porteurs de charges responsables de la conductivité électrique. La conductivité des semi-conducteurs se situe entre celle des métaux et celle des isolants.

Il existe trois types de matériaux : les isolants, les conducteurs et les semiconducteurs.

- \* Isolants : les bandes d'énergie les plus faibles sont entièrement pleines. La hauteur de la bande interdite est grande (≥ 5eV).il n'y a pas de niveaux d'énergie accessibles et pas de conduction. [4]
- Conducteurs : la dernière bande occupée est partiellement remplie, il existe beaucoup de niveaux disponibles et la conduction est grande. [4]

 Semi-conducteurs : le taux de remplissage de la dernière bande occupée est soit très faible soit très important. La hauteur de la bande interdite est faible. La conduction est faible est varié beaucoup avec la température. [4]





#### 1.2.1 Bande de conduction :

Les structures de bande des semi-conducteurs diffèrent essentiellement par la bande de Conduction. En effet, tous les semi-conducteurs ont le maximum de leur bande de valence au centre de la zone de Brillouin, ce qui n'est pas toujours le cas du minimum de la bande de conduction. Le minimum de la bande de conduction pour l'AlGaN se trouve au centre de la zone de Brillouin, c'est-à-dire en vallée. Si un électron peut passer directement de la bande de valence à la bande de conduction ont dit alors c'est un gap direct.

#### 1.2.2 Bande de valence :

Il existe 3 bandes de valence dont les maximas sont en*r*. Ces bandes sont issues des orbitaux pliants triplements dégénérés. Cette dégénérescence est partiellement levée par l'interaction spin-orbite. La prise en compte de l'hamiltonien d'interaction spin-orbite décale de so. On l'appelle bande « split-off » l'une des 3 bandes de valence. Les

3 bandes présentent des courbures différentes, donc des masses différentes. Les deux bandes qui restent dégénérées en k = 0 sont appelées bande de trous lourds (ou hh pour heavy holes) et bande de trous légers (ou lh pour light holes). Ce sont essentiellement ces deux bandes qui déterminent les propriétés de transport des trous dans le semi-conducteur. [5]

La bande de Valence et la bande de conduction sont séparées par un espace appelé bande interdite.



Figure 1.2 Structure de bande de GaN [6]

#### **1.3 Les semi-conducteurs III-V :**

Les matériaux semi-conducteurs III-V sont formes a partir d'un ou plusieurs éléments de la colonnes III et d'autres éléments de la colonne V de la classification périodique de Mendeleiev. Les semi-conducteurs III-V sont très intéressants pour l'application dans l'optoélectronique grâce à ces propriétés électrique et optique.

Composé III-V	longueur de Eg (ev)	$\mu c(m^2/VS)$	a (A°)
AlN	4.9	200	4.38
GaN	3,36	380	a=3,189 (b=5,185)
GaP	2,26	110	5,4512
GaAs	1,42	8500	5,6533
GaSp	0,72	5000	6,0959
InP	1,35	4600	5,8686
InAs	0,36	33000	6,0584

Figure 1.4 Propriété des principaux composés binaires III-V à 300 K[7]

## 1.4 Propriétés des semi-conducteurs III-V :

Les composés III-V et leurs alliages sont considérés comme des matériaux très prometteurs pour la réalisation des dispositifs optoélectronique.

#### **1.4.1 Structure cristallines :**

Un cristal peut être représenté à partir d'une cellule de base qui est répétée périodiquement. Selon la nature des opérations de symétrie qui laissent la structure cristalline invariante. Les composés III-V se cristallisent sous deux formes de structures : structure zinc blende et structure wurtzite.

#### a) La structure zinc blende :

Les semi-conducteurs III-V binaires ont une structure cristalline Zinc blende qui est constituée de deux réseaux cubiques à faces centrées, l'un est décalé du quart de la diagonale principale par rapport à l'autre. [8]





#### b) La structure wurtzite :

Cette structure est formée de deux réseaux de Bravais hexagonaux, certains semiconducteurs peuvent existent sous forme de la structure Zinc Blende mais ils croissent sous la structure cristalline wirtzite, par exemple le GaN comme montre ans la figure

suivante[9]



Figure I.4:La structure Wurtzite [10]

#### 1.4.2 Energie de bande interdite :

L'énergie de la bande interdite (gap) est la bande d'énergie séparant la bande de valence de la bande de conduction des semi-conducteurs, et suivant laquelle les matériaux semi-conducteurs se découpent en deux types : à gap direct et à gap indirect.

#### a) Energie de bande interdite directe :

C'est Au moment où le maximum de la bande de valence et au minimum de la bande de conduction il correspond un même vecteur d'onde « k ». L'avantage d'un gap direct est que les matériaux qui ont cette caractéristique sont plus utilisés dans des dispositifs optiques, les transitions sont directes.

#### b) Energie de bande interdite indirecte :

Les bandes de conduction et de valence sont décalées l'une par rapport à l'autre, donc différents alors on parle de gap indirect. Du coup les matériaux ayant un gap indirect ne sont pas bien s'accordés pour les dispositifs optiques (exemple silicium)



#### 1.5 Notion d'épitaxie

L'épitaxie est une méthode de déposition d'une couche monocristalline sur un substrat monocristalline, la couche déposer est dénotée comme une couche épitaxie, elle peut être cultivée à partir de précurseurs gazeux ou liquides.

#### **1.6 Puits Quantiques**

Les structures appelées puits quantiques sont formées en prenant en sandwich une très fine couche d'un matériau à faible bande interdite entre deux couches d'un matériau à large bande interdite. [11] la figure suivante illustre la géométrie de puits quantique. La discontinuité entre les bandes d'énergies dans les deux matériaux crée une barrière de potentiel qui confine les porteurs (électron-trous) dans le puits quantique.



Figure 1.4 (1,2) Géométrie de la structure du puits quantique



Figure I.7 : Structure d'un puits quantique de GaN/AlGaN.

#### 1.6.1 Puits de Type I :

Les électrons et les trous sont confinés dans le même matériau constituant le puits. L'énergie du photon dépend des énergies de confinement des porteurs et du gap du matériau puits.

#### 1.6.2 Puits de Type II :

Les porteurs sont confinés dans deux matériaux adjacents. Dans ce cas, l'énergie du photon est fonction des énergies de confinement des porteurs mais aussi des gaps de deux matériauxformant l'hétérostructure [12].



Figure 1.6 les types de puits quantiques

#### 1.7 Etude des paramètres électronique

#### 1.7.1 Paramètre de maille :

Du point de vu géométrique, à deux dimension, la maille est le plus petit parallélogramme qui suffit à décrire le plan, cette maille est définie par les vecteurs a et b et l'angle compris entre ces deux vecteurs. Le paramètre de maille varie linéairement suivant

$$a_{AlxGa1-xN}(x) = (1 - x). a_{GaN} + x. a_{AlN}$$
 (1.1)



Figure 1.7 maille cristalline

#### 1.7.2 La contrainte :

L'épitaxie des matériaux et leurs paramètres de maille initialement différents provoquent une contrainte. Le paramètre de maille de substrat as différent de celui de la couche épitaxie  $\mathbf{a}_{e}$ , impose sa maille à cette dernière, cette différence de maille provoque une déformation de la couche épitaxie, soit en tension ou en compression par des déformations bi-axiales ( $\varepsilon_{yy}$  et  $\varepsilon_{zz}$ ) et uni-axiale ( $\varepsilon_{xx}$ ) [13]. Cette déformation est exprimée par :

- biaxiale dans le plan de croissance :

$$\varepsilon_{XX} = \varepsilon_{yy} = \frac{as - ae}{ae} = \varepsilon //$$
(1.2)

- uniaxiale dans la direction de croissance :

$$\varepsilon_{ZZ} = -2 \frac{c^{12}}{c^{11}} \varepsilon_{XX} = \varepsilon_{\perp} \quad (1.2) \tag{1.3}$$

où :

- ε : La déformation ou le désaccord de maille.
- a<sub>s</sub> : Le paramètre de maille du substrat.
- ae : Le paramètre de maille de la couche épitaxie.
- Cij : Les coefficients d'élasticité.



Figure 1.8 Schéma montrant l'effet de la contrainte

#### 1.7.3 Epaisseur critique :

Lors de l'épitaxie d'un matériau sur un substrat de paramètre de maille différent, les couches contraintes commencent à relaxer, et génèrent des dislocations qui se propagent de l'interface de contact vers le ternaire, qui s'accompagne d'une accumulation d'énergie élastique. Cette épaisseur limite est appelée épaisseur critique. Au-delà de cette épaisseur critique, l'énergie élastique emmagasinée devient suffisante pour générer des défauts structuraux qui relaxent partiellement les contraintes dans le cristal.

L'épaisseur critique de la couche contrainte hc est l'un des paramètres les plus importants que nous devons prendre en compte. La valeur de l'épaisseur critique hc qui en résulte dans le cas d'un matériau de structure sphalérite (zinc blende) épitaxie sur la surface (001) est donnée par l'équation suivante :

$$hc = \frac{ae}{\beta\sqrt{2\pi\Delta}} \times \frac{1 - (0.25.\gamma)}{(1+\gamma)} \times \ln\left(\frac{hc\sqrt{2}}{ae} + 1\right)$$
(1.4)

• Δ : le désaccord paramétrique qui est donné par

$$\Delta = \left| \frac{as - ae}{as} \right| \tag{1.5}$$

- k : Coefficient égal à 1 dans le cas d'un super-réseau ; à 2 pour un puits quantique ; 4 dans lecas d'une couche unique.
- γ : Coefficient de poisson qui est donné par

$$\gamma = \frac{C_{12}}{C_{11} + C_{12}} \tag{1.6}$$

- C<sub>i,j</sub> sont les Coefficients d'élasticités
- β : est un coefficient qui prend les valeurs suivantes selon le type de la structure.

Structure	Couche unique	Puits quantique	Super réseau
Valeur de β	4	2	1

Tableau 1.2Tableau	I.2 .valeurs du	coefficient β.

#### 1.7.4 L'énergie de gap :

L'énergie du Gap **Eg** est la mesure de la quantité d'énergie nécessaire à un électron pour passer de la bande de valence à la bande de conduction lorsque celui-ci est soumis à une excitation. Le gap énergétique pour la plupart des alliages ternaires est approximativement donné sous la forme d'une fonction quadratique (la loi de Vegard)

 $Eg(ALGaN) = x \cdot Eg(AlN) + (1 - x) \cdot Eg(GaN) - x \cdot (1 - x) \cdot c$ (1.7)

#### 1.8 Effet de la contrainte sur les bandes d'énergies :

L'effet de la contrainte sur les bandes de valence et de conduction peut être décomposé en deux composantes [29].

- Une composante hydrostatique : qui diminue l'énergie de bande interdite dans le cas d'une augmentation de volume ou qui l'augmente dans le cas contraire.
- \* Une composante de cisaillement : qui a pour effet de lever la dégénérescence trous lourds, trous légers du haut de la bande de valence figure

En première approximation, même si les boîtes quantiques ne sont pas symétriques dans le plan perpendiculaire à l'axe de croissance, rappelons que la décomposition dela contrainte en première approximation, même si les boîtes quantiques ne sont pas symétriques dans le plan perpendiculaire à l'axe de croissance, rappelons que la décomposition de la contrainte hydrostatique et bi-axiale conduit aux composantes de déformations suivantes



*Figure 1.9* 16 (a,b,c). Structure de bande d'un semi-conducteur à gap direct dans les trois cas (a) Non contraint (b) contraint en compression (c) contraint en tension

#### 1.9 La longueur d'onde :

La longueur d'onde électromagnétique périodique est la distance que parcourt la lumière dans le vide pendant le temps qui sépare deux crêtes successives de cette onde électromagnétique. On la dénote communément par la lettre grecque  $\lambda$  (*lambda*).

$$\Lambda = \frac{1.24}{Eg} \tag{1.8}$$

où :

- $\lambda = \underline{\text{longueur}} d'\underline{\text{onde}} de l'\underline{\text{onde}}$
- $c = vitesse de la lumière (3 \times 10^8 m/s)$
- v = <u>fréquence</u> de l'onde

#### 1.10 L'équation de Schrödinger dans un puits quantique :

En 1926 Schrödinger a montré que la fonction d'onde et l'énergie sont la solution d'une équation au dérivé partielle du second ordre cette équation s'écrit.

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta (x) + (z)^i (x) = E^i T^i (x)$$
(1.9)

Avec :

- Δ : le La platien.
- *m<sub>e</sub>* : la masse de l'électron.
- *V* : l'énergie potentiel.
- *E<sup>i</sup>* : l'énergie totale de l'électron.
- $T^i$ : la fonction d'onde.
- $\hbar = \frac{\pi}{2\pi}$  c'est la constante de Planck.

On peut l'écrire sous la forme :

$$[-(\frac{h^2}{8\pi^2 me}) \Delta + V] = E^i T^i$$
 (1.10)

$$H^i = E^i T^i \tag{1.11}$$

Où *H<sup>i</sup>* : l'opérateur Hamiltonien.

#### 1.10.1 Puits quantique de profondeur finie :

On cherche les énergies possibles d'une particule dans un puits de potentiel rectangulaire de profondeur V0, de largeur L symétrique. On ne s'intéresse qu'aux états liés, c'est-à-dire ceux d'énergie telle que 0 < En < V0. On suppose que l'énergie n'est pas suffisante pour que la particule sorte du puits.



#### a. Equation de Schrodinger :

$$\begin{aligned} \text{Région (I):} \quad & \frac{d^2 \varphi_I(x)}{dx^2} - \frac{2m_1^*}{h^2} (V_0 - E_n) \varphi_I(x) = 0 \\ \text{Région (II):} \quad & \frac{d^2 \varphi_{II}(x)}{dx^2} + \frac{2m_2^*}{h^2} E_n \varphi_{II}(x) = 0 \\ \text{Région (III):} \quad & \frac{d^2 \varphi_{III}(x)}{dx^2} - \frac{2m_1^*}{h^2} (V_0 - E_n) \varphi_{III}(x) = 0 \\ \text{Région (I):} \quad & \frac{d^2 \varphi_I(x)}{dx^2} - k_1^2 \varphi_I(x) = 0 \\ \text{Région (II):} \quad & \frac{d^2 \varphi_{II}(x)}{dx^2} + k_2^2 \varphi_{II}(x) = 0 \\ \end{aligned}$$

Région (III):  $\frac{d^2\varphi_{III}(x)}{dx^2} - k_1^2 \varphi_{III}(x) = 0$ 

#### **b.** Les solutions :

Région I :

Solution générale :  $\varphi_I(x) = Ae^{k_1x} + Be^{-k_1x}$ La valeur de  $Ae^{k_1x} = 0$  lorsque  $(x \Rightarrow -\infty)$  (On suppose B = 0) La fonction d'onde devient :  $\varphi_I(x) = Ae^{k_1x}$ 

Région III :

Solution générale :  $\varphi_{\text{III}}(x) = Ce^{k_1x} + De^{-k_1x}$ La valeur de  $De^{-k_1x} = 0$  lorsque  $(x \mapsto -\infty)$  (On suppose C = 0) La fonction d'onde devient :  $\varphi_{\text{III}}(x) = De^{-k_1x}$ 

Région II : La fonction d'onde :  $\varphi_{II}(x) = B \sin(k_2 x + \Phi)$ 

$$\begin{split} \varphi_{I}(x) &= Ae^{k_{1}x}\\ \varphi_{II}(x) &= B\sin(k_{2}x+\Phi)\\ \varphi_{III}(x) &= De^{-k_{1}x} \end{split}$$

#### c. Détermination des constantes d'intégrations :

Pour déterminer les constantes, on utilise la continuité des fonctions d'ondes à l'interface puits-barrière :

Pour x = 0

$$\varphi_{I}(0) = \varphi_{II}(0) \longrightarrow A = B \sin \varphi$$

$$\frac{1}{m_{1}^{*}} \varphi'_{I}(0) = \frac{1}{m_{2}^{*}} \varphi'_{II}(0) \longrightarrow A \frac{k_{1}}{m_{1}^{*}} = B \frac{k_{2}}{m_{2}^{*}} \cos \varphi$$

$$(1)$$

$$(2)$$

Pour x = L

$$\begin{array}{lll}
\varphi_{II}(L) = \varphi_{III}(L) & \to & B\sin(k_2L + \Phi) = De^{-k_1L} & (3) \\
\frac{1}{m_2^*}\varphi_{II}(L) = \frac{1}{m_1^*}\varphi_{III}(0) & \to & B\frac{k_2}{m_2^*}\cos(k_2L + \Phi) = -D\frac{k_1}{m_1^*}e^{-k_1L} & (4)
\end{array}$$

En divisant les équations (1) sur (2) et (3) sur (4) on obtient :

$$\tan \varphi = \frac{k_2 m_1^*}{k_1 m_2^*}$$
$$\tan(k_2 L + \Phi) = -\frac{k_2 m_1^*}{k_1 m_2^*}$$

On a :

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

Donc :

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

 $\tan \varphi = -\tan(k_{2}L + \varphi) \qquad \varphi = -(k_{2}L + \varphi) + n\pi$   $k_{2}L = n\pi - 2\varphi$   $k_{2}L = n\pi - 2 \sin^{-1}(\frac{\frac{k_{2}}{m_{2}}}{\sqrt{\frac{k_{2}^{2}}{m_{2}^{2}} + \frac{k_{1}^{2}}{m_{1}^{2}}}})$   $\frac{\sqrt{2m_{2}^{*}E_{n}}}{\hbar}L = n\pi - 2 \arcsin \sqrt{\frac{E_{n}}{\sqrt{\frac{V_{0}m_{2}^{*}}{m_{1}^{*}} + E_{n}\left(1 - \frac{m_{2}^{*}}{m_{1}^{*}}\right)}}$ 

#### **Conclusion :**

Ce chapitre résume le développement et l'avancement technologique dans le domaine optique. Et puis Nous avons décrit les différents paramètres physiques qui rentrent en jeu.

#### 2.1 Introduction

Dans ce chapitre nous allons commenter, interpréter, et discuter les résultats obtenus par la simulation de la structure GaN/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>N en utilisant le logiciel Matlab, afin de déterminer les concentrations de l'aluminium qui résulte la longueur d'onde par l'émission ultraviolet après l'étude de quelque paramètres électroniques tels que le paramètre de maille, l'épaisseur critique, énergie de quantification...

#### 2.2 Paramètre de maille

La figure 2.1 montre l'impact de la concentration d'aluminium x sur le paramètre de maille de la couche active GaN a T=300k, On note que l'accroissement de la concentration d'aluminium diminue linéairement le paramètre de maille de la couche active GaN selon la loi de Vegard. Par exemple pour x=0.1 on a  $a_{AlGaN}$  =3.189 (Å) et pour x=0.4 on  $a_{AlGaN}$  =3.158 (Å) c'est-à-dire qu'on a une diminution de  $\Delta a$  = 0.077 Å. Cette étude nous permet d'optimiser la couche épitaxie afin d'éviter l'instabilité de la structure à puits quantique.



d'aluminium

#### 2.3 La contrainte

La figure 2.2 représente la variation de la contrainte uni-axiale  $\varepsilon_{xx}$  et bi-axiale  $\varepsilon_{zz}$  en fonction de la concentration d'aluminium x a T=300 k. Cette étude nous permet d'optimiser la stabilité de la structure. On remarque que la contrainte uni-axiale diminue avec l'augmentation de la concentration de l'aluminium x d'où elle varie de 0% à 2.4%, par contre l'augmentation de la concentration x aura un effet contraire sur la déformation bi-axiale  $\varepsilon_{zz}$ . La contrainte est de type compression alors on doit choisir la concentration x dans l'intervalle [0 0.4] pour avoir une déformation minimale afin d'augmenter la performance de la structure.





## 2.4 L'épaisseur critique

La figure 2.3 illustre la variation de l'épaisseur critique **Lc** de la couche active GaN en fonction de la concentration d'aluminium x a T=300k. On observe que l'épaisseur critique diminue d'une façon semi-log avec l'accroissement de la concentration d'aluminium x, ça valeur doit être **>= 50 (Å)** pour éviter la dislocation de matériau, on prend par exemple **Lc =94.6** pour une concentration **x = 0.4%**.



Figure2.3 La variation de l'épaisseur critique en fonction de la concentration d'aluminium

## 2.5 L'énergie de la bande interdite sans contrainte

La figure 2.4 montre la variation de l'énergie de la bande interdite **Eg** sans contrainte de la structure GaN/Al<sub>x</sub> Ga<sub>1-x</sub> N en fonction de la concentration d'aluminium à T=300K et à T=0k, pour les deux températures on observe que l'énergie de la bande interdite augmente avec l'augmentation de la concentration x sachant que Eg (0k) > Eg (300k), par exemple pour x=0.4 on a **Eg** (300k)=3.699 et **Eg** (0k)= 4.188.



*Figure2.4* La variation de l'énergie de la bande interdite en fonction de la concentration d'aluminium

# 2.6 L'influence de la température sur l'énergie de la bande interdite

La figure 2.5 illustre l'influence de la température sur l'énergie de la bande interdite de la structure GaN/Al<sub>x</sub> Ga<sub>1-x</sub> N. On remarque que l'énergie de la bande interdite diminue également avec l'augmentation de la concentration et la température.



Figure 2.5 L'influence de la température sur l'énergie de la bande interdite

# 2.7 L'énergie des trous lourds Ehh et des trous légers Elh

La figure 2.6 montre l'énergie des trous lourd Ehh (heavy hols) et des trous légers Elh (light hols) en fonction de la concentration d'aluminium x. On remarque que les énergies Ehh et Elh ont une relation proportionnelle avec la concentration d'aluminium x, donc l'augmentation de la concentration provoque un accroissement de l'énergie des trous lords et des trous légers. Sachant que Elh > Ehh, par exemple pour x=0.2 on a Ehh=0.05 ev et Elh=0.07 ev.



*Figure2.6* L'énergie des trous lourds Ehh et des trous légers Elh en fonction de la concentration d'aluminium

#### 2.8 Barriere de potentiel

La figure 2.6 montre l'effet de la concentration d'aluminium sur le décalage des bandes d'énergies  $\Delta$ Ec et  $\Delta$ Ev. On observe que le décalage des bandes d'énergie augmente avec l'augmentation de la concentration x, sachant que  $\Delta$ Ev >  $\Delta$ Ec



*Figure2.7* L'effet de la concentration d'aluminium sur le décalage des bandes d'énergies

#### 2.9 Taux de confinement

La figure 2.8 représente la variation de taux de confinement de barrière de potentiel de valence et de conduction en fonction de la concentration d'aluminium à T=300k. Dans notre étude on voudrait que les porteurs soit confines dans le puits pour qu'on puisse avoir le phénomène de l'émission stimulée. On remarque que le confinement dans la bande de conduction et le confinement dans la bande de valence sont inversent, on observe qu'il y a une symétrie entre le confinement dans les deux bandes, pour x=0 le confinement des porteurs dans la bande de valence **Qc** et de 30% et le confinement des porteurs dans la bande de valence **Qv** et de 70%.



Figure 2.8 La variation de taux de confinement en fonction de la concentration d'aluminium

### 2.10 Energie de quantifications

La résolution de l'équation aux valeurs propres par la méthode de Dichotomie nous donne l'évolution de l'énergie de quantification des porteurs électrons et trous lourds dans le puits quantique.

#### 2.10.1 Energie de quantification des électrons

La figure 2.9 (a,b,c) représente l'effet de la concentration d'aluminium sur l'énergie de confinement des électrons en fonction de la largeur de puits a T=300k. On note que l'augmentation de la largeur de puits provoque une diminution de l'énergie de confinement dans le puits quantique d'où elle commence à tendre vers le zéro à partir de  $L_w$ =150 (Å), aussi on remarque que l'accroissement de la concentration d'aluminium induit l'apparition des nouveaux niveaux d'énergie, mais dans notre cas on doit fixer la concentration a 30% puisque la contrainte devient importante à partir de cette concentration  $\epsilon_{xx}$ = 0.7% donc notre structure perdre sa stabilité.



(a)



Figure 2.9.(a,b,c) Energie de quantification des électrons

a) pour n=1, x=0.1 b) pour n=1, x=0.2, c) pour n=1, x=0.3

#### 2.10.2 Energie de quantification des trous lourds

La figure 2.10 représente l'effet de la concentration d'aluminium sur l'énergie de quantification des trous lourds en fonction de la largeur de puits Lw a T=300k. On observe que l'energie des trous diminue aves l'acroissement de la longeur de pouits.







Figure 2.10.(a,b,c) Energie de quantification des trous lourds

a) pour n=1, x=0.1 b) pour n=1, x=0.2, c) pour n=1, x=0.3

#### 2.10.3 Energie de quantification des trous legers

La figure 2.11 représente l'effet de la concentration d'aluminium sur l'énergie de quantification des trous legers en fonction de la largeur de puits Lw a T=300k. On observe que l'energie des trous lh diminue aves l'acroissement de la longeur de pouits.





(b)



(c)

Figure 2.11.(a,b,c) Energie de quantification des trous légers

a) pour n=1, x=0.1 b) pour n=1, x=0.2, c) pour n=1, x=0.3

## 2.11 Energie de transition

#### 2.11.1 Energie de transition des trous lourds

La figure 2.12 (a,b,c) La figure 2.10 représente l'effet de la concentration d'aluminium sur l'énergie de transition des trous lourds en fonction de la largeur de puits Lw a T=300k. On observe que l'energie de transition des trous hh diminue aves l'acroissement de la longeur de pouits.





(b)



(c)

Figure 2.12.(a,b,c) Energie de transition des trous lourds

a) pour n=1, x=0.1 b) pour n=1, x=0.2, c) pour n=1, x=0.3

#### 2.11.2 Energie de transition des trous légers

La figure 2.13 (a,b,c) La figure 2.10 représente l'effet de la concentration d'aluminium sur l'énergie de transition des trous legers en fonction de la largeur de puits Lw a T=300k. On observe que l'energie de transition des trous lh diminue aves l'acroissement de la longeur de pouits.





(b)



Figure 2.13.(a,b,c) Energie de transition des trous légers

a) pour n=1, x=0.1 b) pour n=1, x=0.2, c) pour n=1, x=0.3

# 2.12 Energie de transition (effet de température)

#### 2.12.1 Energie de transition des trous lourds (effet de température)

La figure 2.14 (a,b,c) représente l'effet de la température et la concentration d'aluminium sur l'énergie de transition des trous lourds hh, l'augmentation de la temperature et la concentration provoque une diminution de l'energie de transition des trous lourds.







**Figure 2.13**. (a,b,c) Energie de transition des trous lourds (effet de température) a) pour n=1, x=0.1 b) pour n=1, x=0.2, c) pour n=1, x=0.3

# 2.13 La longueur d'onde

#### 2.13.1 Longueur d'onde

La figur 2.14 représente l'impact de la longueur de puits sur la longueur d'onde. On remarque que lorsque la longueur de puits augmente la longueur de puits diminue.



Figure 2.14. la longueur d'onde

#### 2.13.1 Longueur d'onde de transition des trous lourds

La figure 2.15 représente l'impact de la longueur de puits sur la longueur d'onde de transition des tous lourds pour des concentrations d'aluminium déférentes a T=300k. On remarque que lorsque la longueur de puits augmente provoque une croissance importante dans la longueur d'onde de transition.





(a)





(c)

*Figure 2.15*. La longueur d'onde de transition des trous lourds

# 2.13.1 Longueur d'onde de transition des trous lourds (effet de température)

La figure 2.16 illustre l'effet de la température de la longueur de puits sur la longueur d'onde de transition des tous lourds pour des concentrations d'aluminium déférentes. On remarque que lorsque la longueur de puits augmente provoque une croissance importante dans la longueur d'onde de transition.







*Figure 2.16*. La longueur d'onde de transition des trous lourds (effet de température)

# 2.14 Conclusion

Dans ce deuxième chapitre, on a étudié les résultats de la simulation de matériau GaN/AlGaN. Notre simulation nous donne la possibilité de trouver l'énergie de la bande interdite afin de détecter les longueurs d'ondes pour l'émission ultra-violet.

# **Conclusion générale**

Dans le cadre de ce travail de mémoire fin d'étude, nous sommes concentre sur la structure  $GaN/Al_xGn_{1-x}N$  a puits quantique appliquée aux systèmes de télécommunications.

En premier lieu, nous a abordé des généralités sur les semi-conducteurs et en particuliers les semi-conducteurs III-V et on a défini ces différentes caractéristiques tel que le paramètre de maille, l'épaisseur critique, structure cristalline, on a parlé de laser et des puits quantiques avec des équations mathématiques.

Dans le deuxième chapitre nous avons présentés nos résultats de simulations Matlab pour les paramètre de notre structure GaN/Al<sub>x</sub>Gn<sub>1-x</sub>N, en montrant l'effet de la contrainte en compression et en extension, l'épaisseur critique, l'énergie de la bande inédite, l'effet de la contrainte sur l'énergie de la bande interdite, tout cela en fonction de la concentration d'aluminium. Ensuite on a simulé l'énergie de quantification, l'énergie de transition et enfin la longueur d'onde.

Cette dernière donne l'émission dans l'ultraviolet alors des applications pour les télécommunications.

#### **Bibliographies**

- S.Claire-Marie : « Contrôle optique de l'exciton dans des boîtes quantiques individuelles », thèse de doctorat, université de Toulouse, 2010.
- [2] E. Alexandre : « Contrôle cohérent des excitations électroniques dans une boîte quantique unique. Rapport de stage M2. Institut des nanosciences de Paris, 2007.
- [3] : Benatmane Khaled :,'Etude de lasers à base de semi-conducteurs III-V ', Thése de Magister, Université Elhadj Lakhdar Batna ;2011

[4] : Abdelmoumene Benahmed :'Etude et modélisation des structures à base des boitesquantiques pour la conversion photovoltaique', Thèse de doctorat, Université de Blida 1, 2017

[5]Khilifi Zahra & Mouaici Sarah :'Etude et simulation des boites quantiques à base delnAs/GaAs', Université Saad Dahlab de Blida,2013-2014

[6] Alain Chovet & Pascal Masson : 'Cours de Physique des Semi-conducteurs' École Polytechnique Universitaire de Marseille, IMT, Technopole de Château-Gombert, 13451, Marseille cedex 20 2004/2005.

[7] : Thi Dak Ha NGUYEN ,'RÉALISATION ET CARACTÉRISATION DE HEMTS AlGaN/GaN SUR SILICIUM POUR APPLICATIONS À HAUTE TENSION', THÈSE DE DOCTORAT, UNIVERSITE PARIS-SUD,2013.

[8]Gerald Bastard, Wave mechanics applied to semiconductor heterostructures, Les éditions de physique, paris, (1988).

[9]Nicolas Trenado, Modélisation et simulation des composants optoélectroniques à puits quantiques, thèse doctorat, Université de ROUEN,2002.

[10]:M.Henini.Dilute nitrides semiconductors.Elsevier.2004.

[11] Encychlopedia of physical science and technology.2003

[12] :D.A.B Miller: "physical reasons for optical interconnecting". Optoelectronicx (1997).

[13] John H. Davies, The physics of low-dimensional semiconductors, CambridgeUniversity Press, (1998). [14] Damien BORDEL : "Développement de nouveaux substrats compliants pour l'hétéroépitaxie de semi-conducteurs Thèse de doctorat". École central de Lyon 2007.

[15]: I. Vurgaftman, J. R. Meyer, and L. R. Ram-Mohan,' Band parameters forIII–V compound semiconductors and their alloys',2001

[16] SEGHILANI MOHAMED SEGHIR,' MODELISATION ET SIMULATION D'UNE STRUCTURE A MULTIPUITS QUANTIQUES A BASE DE GaInAs(N,Sb)/GaAs', MEMOIRE DE MAGISTER,saad dahleb blida,2011

#### Annexe :

A : Caractéristique des matériaux massifs :

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

TABLE X. Recommended band structure parameters for wurtzite nitride binaries.

Parameters	GaN	AIN	InN
$a_{\rm kt}$ (Å) at $T = 300  {\rm K}$	3.189	3.112	3.545
$c_{\rm le}$ (Å) at $T=300{\rm K}$	5.185	4.982	5.703
$E_{e}$ (eV)	3.507	6.23	1.994
a (meV/K)	0.909	1.799	0.245
β (K)	830	1462	624
Δ., (eV)	0.019	-0.164	0.041
$\Delta_{m}$ (eV)	0.014	0.019	0.001
$m^{i}$	0.20	0.28	0.12
m	0.20	0.32	0.12
A	-6.56	-3.95	-8.21
A	-0.91	-0.27	-0.68
A1	5.65	3.68	7.57
A <sub>4</sub>	-2.83	-1.84	-5.23
A	-3.13	-1.95	-5.11
As	-4.86	-2.91	-5.96
$E_{\mu}$ (eV)	14.0	14.5	14.6
F	0	0	0
VBO (eV)	-2.64	-3.44	-1.59
a1 (eV)	-6.5	-9.0	-3.5
a2 (eV)	-11.8	-9.0	-3.5
$D_1 (eV)$	-3.0	-3.0	-3.0
$D_{\pm}$ (eV)	3.6	3.6	3.6
$D_1$ (eV)	8.82	9.6	8.82
$D_4$ (eV)	-4.41	-4.8	-4.41
$D_5$ (eV)	-4.0	-4.0	-4.0
$D_6 (eV)$	-5.1	-5.1	-5.1
c11 (GPa)	390	396	223

**Tableau A.** *Et* **B** Paramètres physiques fondamentaux des principaux binaires III-V a 300k.[15]

Parameters	GaN	AIN	InN
$a_{\rm lo}$ (Å) at $T=300$ K	4.50	4.38	4.98
$E_{e}^{\Gamma}$ (eV)	3.299	4.9	1.94
$a(\Gamma)$ (meV/K)	0.593	0.593	0.245
$\beta(\Gamma)$ (K)	600	600	624
$E_{a}^{V}$ (eV)	4.52	6.0	2.51
a(X) (K)	0.593	0.593	0.245
$\beta(X)$ (meV/K)	600	600	624
$E_{a}^{L}$ (eV)	5.59	9.3	5.82
a(L) (K)	0.593	0.593	0.245
$\beta(L)$ (meV/K)	600	600	624
$\Delta_{so}$ (eV)	0.017	0.019	0.006
$m^*(\Gamma)$	0.15	0.25	0.12
$m_I^*(X)$	0.5	0.53	0.48
$m^*(X)$	0.3	0.31	0.27
<b>y</b> 1	2.67	1.92	3.72
Y2	0.75	0.47	1.26
Y3	1.10	0.85	1.63
m =	0.29	0.47	0.3
$E_{\mu}$ (eV)	25.0	27.1	25.0
F	-0.92	0.76	-0.92
VBO (eV)	-2.64	-3.44	-2.38
$a_c (eV)$	-2.2	-6.0	-1.85
$a_v$ (eV)	-5.2	-3.4	-1.5
δ (eV)	-2.2	-1.9	-1.2
d (eV)	-3.4	-10	-9.3
CII (GPa)	293	304	187
$c_{12}$ (GPa)	159	160	125
c44 (GPa)	155	193	86

TABLE XI. Recommended band structure parameters for zinc blende nitride binaries.

Tableau B