

الجمهورية الجزائرية الديمقراطية الشعبية
République Algérienne démocratique et populaire

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

جامعة سعد دحلب البلدية
Université SAAD DAHLAB de BLIDA

كلية التكنولوجيا
Faculté de Technologie

قسم الإلكترونيك
Département d'Électronique



Mémoire de Master

Filière ELECTRONIQUE

OPTION : SYSTÈMES DE TÉLÉCOMMUNICATIONS

Code : ST10

Présenté par

HANANE BENALOUANE

Perfectionnement de l'architecture d'un capteur optique à base de GaAsBi/GaAsP pour les applications optoélectroniques.

Encadrée par

M^{me} Chenini Lynda

et

M^r Aissat Abdelkader

2024-2025

Remerciements

J'exprime toute ma reconnaissance au grand DIEU, Maître des temps et des circonstances ; de m'avoir donné la force et la volonté durant toutes ces années d'études afin que je puisse arriver à ce stade.

Mes remerciements particuliers à ma promotrice, M^{me} CHENINI LYNDIA. Merci pour votre confiance et votre patience. Le soutien et les conseils qu'elle m'a apportés tout au long de ce travail m'ont permis de réaliser ce mémoire dans des conditions favorables à l'approfondissement de ma réflexion. Travailler avec elle a été une expérience agréable.

Je remercie également mon promoteur Mr A. Aïssat d'avoir guidé et dirigé ce travail, je lui suis très reconnaissante.

Je remercie infiniment les membres du jury qui ont accepté d'examiner ce travail.

Je désire adresser un chaleureux remerciement à M^{me} Kilaci Amel, et à tous mes encadrants durant mes stages pratiques avec qui j'ai eu l'opportunité de collaborer pendant cette période, pour leur aide constante, leurs discussions enrichissantes et leur esprit de collaboration.

Dédicaces

*Au nom d'Allah, le Tout Miséricordieux, Louange à Dieu,
autant de fois que le cœur bat, que l'oiseau vole, et que la
plume trace...*

À Lui la gratitude, aujourd'hui et à jamais

*À mes chers parents, lumière de mon chemin et pilier de ma
force, Vous avez semé en moi la persévérance et abreuvé mes
pas de vos prières. Grâce à votre bienveillance, j'ai pu arriver
à ce moment de récolte.*

*À mes frères et sœurs, refuge et chaleur quand la vie devenait
froide, Vous avez été mon abri dans les tempêtes. Pour cela, je
vous dois un amour éternel.*

*À mon futur époux, Tu as une place dans cette dédicace, car
tu fais partie de ce que le destin a de plus beau à offrir.
Un lien inscrit dans l'invisible, que j'espère voir fleurir en
fidélité, en compréhension et en appui mutuel.*

*À tous mes enseignants, à chaque étape de mon parcours,
À ceux qui m'ont transmis le savoir et éveillé l'amour de la
connaissance, Recevez mon respect et ma gratitude pour
l'impact que vous avez eu sur mon esprit et mon avenir.*

Hanane

ملخص

تهدف هذه الدراسة إلى دراسة التحولات بين النطاقات الفرعية وتحسين معامل الامتصاص ضمن بنية بئر الكم GaAsBi/GaAsP. في البداية، قمنا بتقييم الخصائص البصرية الإلكترونية الرئيسية التي تميز هذه البنية. بعد ذلك، درسنا كيفية تأثير مزيج البسموت والفسفور على معامل الامتصاص بين النطاقات الفرعية. لتعزيز معامل الامتصاص، من الضروري خفض تراكيز هذه العناصر وضبط الطول الموجي المرتبط بها إلى أطوال أقصر، والتي يمكن ضبطها بدقة في طيف الأشعة تحت الحمراء بناءً على التطبيق المحدد.

الكلمات الدالة:

GaAs_{1-x}Bi_x/ GaAs_{1-y}P_y ، البسموت ،الفسفور، امتصاص

Résumé

L'objectif de cette recherche est d'explorer les transitions intersousbandes tout en améliorant le coefficient d'absorption au sein de l'architecture à puits quantiques GaAsBi/GaAsP. Nous avons d'abord examiné les propriétés optoélectroniques essentielles qui définissent cette architecture. Par la suite, nous avons analysé l'impact de l'association du bismuth et du phosphore sur le coefficient d'absorption intersousbandes. Pour accroître le coefficient d'absorption, il est nécessaire de réduire les concentrations de ces deux éléments tout en déplaçant la longueur d'onde associée vers des valeurs plus courtes, et cela peut être ajustée dans le domaine infrarouge suivant l'usage envisagé.

Mots clés :

GaAs_{1-x}Bi_x/ GaAs_{1-y}P_y, Bismuth, Phosphore, intersousbandes, absorption.

Summary

The aim of this study is to investigate intersubband transitions and enhance the absorption coefficient within the GaAsBi/GaAsP quantum well architecture. Initially, we evaluated the key optoelectronic characteristics that characterize this architecture. After that, we looked at how the combination of bismuth and phosphorus influences the intersubband absorption coefficient. In order to boost the absorption coefficient, it is essential to lower the concentrations of these elements and adjust the related wavelength to shorter lengths, which can be fine-tuned in the infrared spectrum based on the specific application.

Key words:

GaAs_{1-x}Bi_x/ GaAs_{1-y}P_y, Bismuth, Phosphore, intersubbands, absorption.

Table des matières

Remerciements	
Dédicaces	
Résumé	
Liste des abréviations	
Liste des figures	
Liste des tableaux	
Introduction générale	1
Chapitre 1 : Généralités sur les semiconducteurs	
1.1 Introduction.	3
1.2 . Définition des semiconducteurs.	3
1.3 . Définition des semiconducteurs III-V.	4
1.4 . Structure cristalline.	5
1.5. Paramètre de maille.	6
1.6. L'épithaxie.	7
1.7. Défauts cristallins.	9
1.8. La contrainte.	10
1.9. L'épaisseur critique.	12
1.10. Les hétérostructures.	13
1.11. Les puits quantiques.	15
1.12. Décalage des bandes.	15
1.13. L'équation de Schrödinger dans un puits quantique	16
1.14. Masse effective des électrons.	19
1.15. Transitions intersousbandes	19
1.16. Absorption intersousbandes	20
1.17. Applications des semiconducteurs.....	21
1.18. Conclusion.....	22
 Chapitre 2 : Simulation de la structure à puits quantique à base de GaAsBi/GaAsP	
2.1. Introduction	24
2.2. Structure de puits GaAsBi/GaAsP.....	24
2.3. Paramètre de maille.	24
2.4. La contrainte.	25

2.5. Energie de spin-orbite.....	26
2.6. Energie de la bande interdite.....	27
2.7. La masse effective	28
2.8. Décalage de la bande de conduction	28
2.9. Energie de quantification des électrons	30
2.10. Absorption intersousbandes.	32
2.11. Conclusion.	33
Conclusion générale.	34
Références	

Liste des abréviations

a : Paramètre de maille
 a_c : Potentiel de déformation dans la bande de conduction
 a_e : Paramètre de maille de la couche active
As : Arsenic
 a_s : Paramètre de maille du substrat
 a_v : Potentiel de déformation dans la bande de valence
 b : Potentiel de déformation tétragonale
BC : Bande de conduction
Bi : Bismuth
BV : Bande de valence
 C_{ij} : Coefficient d'élasticité
 E_c : L'énergie du bas de la bande de conduction
 E_g : Energie de gap
 E_n : Niveau d'énergie
 E_{tr} : Energie de transition
 E_v : L'énergie du haut de la bande de valence
Ga : Gallium
 h : Constante de Planck.
 h_c : Epaisseur critique
 hh : Trous lourds
 lh : Trous légers
 L_p : Largeur du puits
 m_e^* : Masse effective des électrons
P : Phosphore
 ε : Contrainte
 $\varepsilon_{//}$: Contrainte biaxiale
 $\varepsilon_{\perp}$: Contrainte uniaxiale
 Δ_{SO} : Energie spin orbite
 ΔE_c : Décalage de la bande de conduction
 ΔE_v : Décalage de la bande de valence
 $\psi(x)$: Fonction d'onde.

λ : Longueur d'onde

α : Coefficient d'absorption

Liste des figures

Figure.1.1.Structure électronique des matériaux.	4
Figure 1.2.Structure zinc blende du GaAs.	5
Figure 1.3.Représentation en 3D de la structure wurtzite	6
Figure 1.4.Un bâti d'épithaxie par jet moléculaire.	8
Figure 1.5.Dispositif d'épithaxie en phase liquide.	8
Figure 1.6.Banc d'épithaxie en phase vapeur	9
Figure 1.7.Défauts ponctuels.	10
Figure 1.8.Défauts linéaires..	10
Figure 1.9.Les deux types de deformation.....	11
Figure 1.10. a) Croissance adaptée pour $h < h_c$, b) sstructure relaxée pour $h > h_c$	12
Figure 1.11.Schéma d'une hétérojonction	13
Figure 1.12.Hétérostructure de type 1.	14
Figure 1.13.Hétérostructure de type 2.	14
Figure 1.14. Schéma d'un puits quantique et différents niveaux énergétiques.	15
Figure 1.15.Puits de profondeur infinie.	16
Figure 1.16.Puits de potentiel à profondeur finie.	18
Figure 1.17. Transitions intersousbandes dans un puits quantique.	20

Figure 2.1. Variation du paramètre de maille des alliages $\text{GaAs}_{1-x}\text{Bi}_x$ et $\text{GaAs}_{1-y}\text{P}_y$ en fonction de la concentration de Bi (x) et P (y)	25
Figure 2.2. Variation de la contrainte en fonction de la concentration de Bi.	26
Figure 2.3. Variation de l'énergie spin-orbite des alliages GaAsBi et GaAsP	26
Figure 2.4. Evolution de E_g de GaAsBi et GaAsP selon la quantité de Bi et de P.	27
Figure 2.5. Variation de la masse effective des é selon la quantité de Bi et de P.....	28
Figure 2.6. Structure à puits quantique $\text{GaAs}_{1-x}\text{Bi}_x/\text{GaAs}_{1-y}\text{P}_y$	29
Figure 2.7. Variation de ΔE_c en foction de Bi et P pour la structure $\text{GaAs}_{1-x}\text{Bi}_x/\text{GaAs}_{1-y}\text{P}_y$...	29
Figure2.8.Variation de l'énergie de quantification des électrons de la structure $\text{GaAs}_{0.975}\text{Bi}_{0.025}/\text{GaAs}_{0.8}\text{P}_{0.2}$	30

Figure 2.9. Variation de l'énergie de quantification des électrons de la structure GaAs _{0.965} Bi _{0.035} /GaAs _{0.8} P _{0.2}	31
Figure 2.10. Variation de l'énergie de quantification des électrons de la structure GaAs _{0.965} Bi _{0.035} /GaAs _{0.6} P _{0.4}	31
Figure 2.11. Variation du coefficient d'absorption intersousbandes en fonction de λ pour différentes concentrations de bismuth ($L_p=60\text{\AA}$), $y=0.3$	32
Figure 2.12. Variation du coefficient d'absorption intersousbandes en fonction de λ pour différentes concentrations de phosphore ($L_p=60\text{\AA}$), $x=0.025$	33

Liste des tableaux

Tableau 1.1. Catégories des matériaux semiconducteurs III-V.....	4
Tableau 2.1. Paramètres physiques des constituants de la structure GaAsBi/GaAsP.....	25

Introduction générale

Une transformation authentique est en cours depuis plusieurs années, le domaine de l'électronique subit une profonde évolution qui a conduit à la création de nouveaux domaines d'application auparavant inexplorés. Résultant d'une recherche minutieuse, de l'émergence de technologies récentes et du développement de matériaux et techniques de production novateurs, des solutions d'éclairage et d'affichage de pointe commencent progressivement à faire leur entrée sur le marché.

Parmi les divers matériaux employés, on retrouve les semiconducteurs qui jouent un rôle central dans plusieurs technologies avancées qui conçoivent les infrastructures du demain. Les semiconducteurs sélectionnés possèdent des propriétés déterminées, qu'ils satisfassent ou pas aux exigences requises.

Dans les années soixante, une nouvelle catégorie de matériaux est née : celle des III-V. Grâce à leurs caractéristiques physiques remarquablement intéressantes et leur faible toxicité, les semiconducteurs de type III-V pourraient relever ce défi.

L'évolution de la technologie des semiconducteurs au cours des dernières décennies a transformé l'univers de l'électronique et de l'optoélectronique. Cela a conduit à la création de structures de couches semiconductrices extrêmement fines et de haute qualité, ainsi qu'à l'émergence de nouvelles innovations.

Dans les décennies 80 et 90, la physique et les usages des transitions intersousbandes ont connu un développement impressionnant. Il y a encore aujourd'hui deux limites à découvrir : l'élargissement vers les grandes longueurs d'onde du domaine THz et vers le proche infrarouge. L'objectif des recherches actuelles vise donc à créer de nouveaux matériaux dérivés des semiconducteurs possédant des caractéristiques inédites.

Dans ce travail, nous explorons les caractéristiques optoélectroniques des structures GaAsBi/GaAsP à puits quantiques. Il s'agit d'une étude théorique fondée sur des simulations, visant particulièrement à analyser comment l'ajout de bismuth et de phosphore affecte les propriétés de cette configuration.

Ce mémoire sera divisé en deux chapitres. Le premier chapitre sera dédiée à l'examen des principales caractéristiques des matériaux semiconducteurs de type III-V. Nous commencerons ce chapitre par une vue d'ensemble de ces matériaux, suivie d'une définition de leurs propriétés.

Dans le deuxième chapitre, nous examinerons en profondeur la structure à puits quantiques GaAsBi/GaAsP, en mettant l'accent sur les transitions intersousbandes et le coefficient d'absorption intersousbande. Enfin, une synthèse de l'ensemble de cette recherche sera fournie à la conclusion de ce mémoire.

Chapitre 1. Généralités sur les semiconducteurs

1.1. Introduction

Dans l'ensemble des matériaux, les semiconducteurs forment une catégorie distincte avec des caractéristiques physiques spécifiques. Ils suscitent un intérêt tant pour les connaissances fondamentales que pour leurs possibilités d'utilisation technologique.

Ils se distinguent principalement par leurs caractéristiques électroniques. En effet, les semiconducteurs sont essentiels dans la fabrication de quasiment tous les dispositifs électriques et optiques : ordinateurs, systèmes de communication, télévision, radio, appareils électroménagers, etc.

Les semiconducteurs de type III-V revêtent une importance considérable en raison de leurs propriétés exceptionnelles [1].

Dans ce chapitre, nous allons définir et présenter certaines caractéristiques des alliages semiconducteurs, en mettant particulièrement l'accent sur les III-V.

1.2. Définition des semiconducteurs

Un semiconducteur est un type de matériau qui se situe entre les conducteurs et les isolants, comme illustré dans la figure 1.1.

- ✓ Les isolants possèdent une large bande interdite, ce qui rend impossible le passage d'un électron de la bande de valence à celle de conduction, entraînant une absence de circulation de courant électrique en raison de l'absence de charges mobiles.
- ✓ À l'opposé, les conducteurs présentent un chevauchement entre les bandes de valence et de conduction, permettant aux électrons de se déplacer sans restriction dans l'atome.
- ✓ Un semiconducteur représente un intermédiaire entre un isolant et un conducteur. La largeur de la bande interdite est modérée, ce qui permet aux électrons de la franchir. Ce semiconducteur peut être de nature pure, ce que l'on qualifie d'intrinsèque, ou bien il peut être dopé avec des impuretés de type N ou de type P, ce qui le catégorise alors comme extrinsèque.

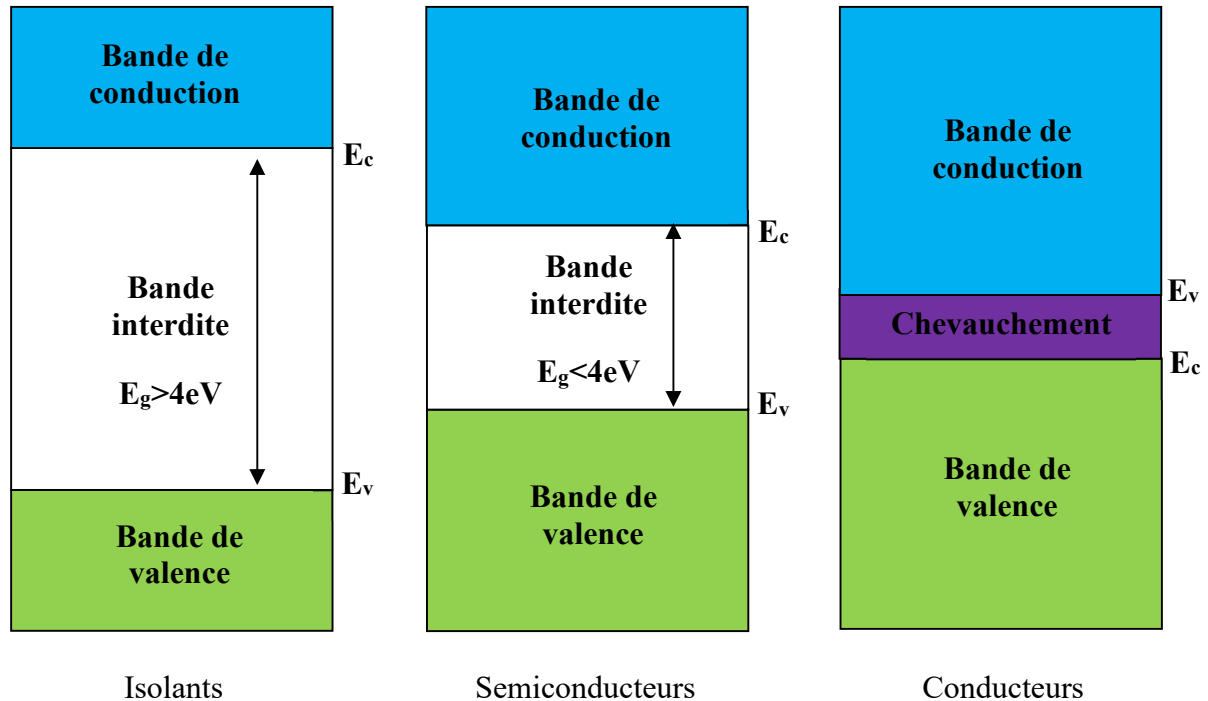


Figure 1.1. Structure électronique des matériaux.

1.3. Semiconducteurs III-V

Les semiconducteurs de type III-V sont des matériaux constitués d'un ou plusieurs éléments provenant du groupe III et d'un ou plusieurs éléments issus du groupe V du tableau périodique de Mendeleïev. Ces matériaux sont caractérisés par une excellente mobilité des porteurs de charge et une bande interdite directe, ce qui leur permet d'être employés dans divers domaines optoélectroniques tels que les lasers et les panneaux photovoltaïques, ainsi que dans le secteur électronique. Ils sont actuellement très utilisés dans le secteur industriel.

Tableau 1.1. Catégories des matériaux semiconducteurs III-V.

Semiconducteurs III-V	Binaire	GaAs , InAs, InSb, GaP, GaSb
	Ternaire	$\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, $\text{GaN}_y\text{As}_{1-y}$
	Quaternaire	$\text{GaN}_x\text{As}_{1-x-y}\text{Bi}_y$, $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}$

1.4. Structure cristalline

La configuration cristalline d'un matériau illustre la forme de l'organisation tridimensionnelle des éléments qui forment sa structure cristalline. Les semiconducteurs III-V sont obtenus, soit par tirage de monocristaux massifs, soit par croissance épitaxiale de couches minces et se cristallisent dans la structure Zinc Blende (ZB) et/ou Würtzite (WZ).

1.4.1. La structure zinc-blende

La configuration appelée zinc-blende, ou structure blende, se caractérise par une forme cristalline cubique à faces centrées, où l'on trouve deux types atomiques distincts.

Elle est fréquemment illustrée par deux réseaux CFC qui s'entrelacent, décalés d'un quart de la diagonale du cube.

À la différence de la structure diamant, où tous les atomes sont identiques, la structure blende renferme deux genres d'atomes, tels que le gallium (Ga) et l'arsenic (As) dans le cas de GaAs, (figure 1.2).

Chaque atome se trouve entouré de quatre atomes de l'autre type, établissant une configuration tétraédrique. Cela indique que chaque atome est lié à 4 atomes voisins.

Les atomes du réseau se positionnent en deux sous réseaux de type faces centrées (CFC) décalés l'un par rapport l'autre d'un vecteur $(a/4, a/4, a/4)$, a étant le paramètre de maille.

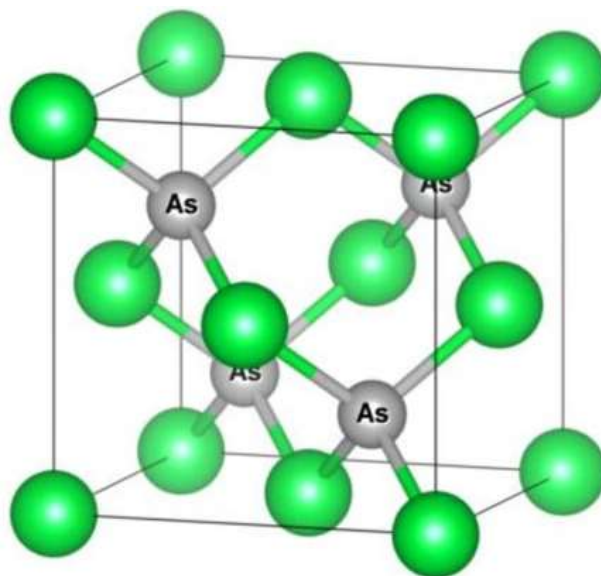
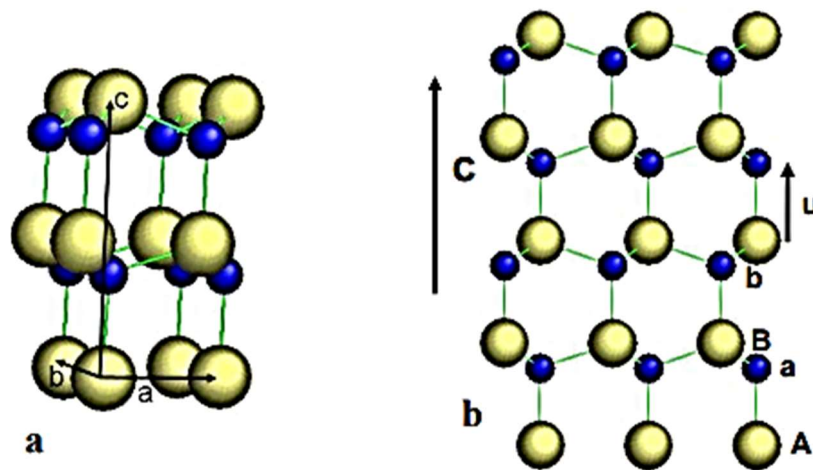


Figure 1.2. Structure zinc blende du GaAs [2].

1.4.2. La structure wurtzite

La structure wurtzite est présentée sur la figure 1.3, c'est un hexagonal compact. Les paramètres utilisés pour décrire la structure sont le côté a de l'hexagone dans le plan (0001), et c correspondant à la hauteur de la maille selon l'axe [0001].

La structure wurtzite est non-centrosymétrique (c'est-à-dire sans symétrie centrale). À cause de cela, les cristaux de type wurtzite peuvent posséder (et possèdent souvent) des propriétés telles que la piézoélectricité et la pyroélectricité, que les cristaux centrosymétriques n'ont pas. La structure wurtzite est obtenue depuis la structure blende en déplaçant certains plans atomiques (111).



1.5. Paramètre de maille

Le paramètre de maille est défini comme la distance entre deux mailles successives. Identifier les paramètres de maille constitue la première phase pour établir la structure d'un cristal. La technique privilégiée est la diffraction des rayons X, des neutrons ou des électrons. Pour obtenir le paramètre de maille d'un alliage.

Les paramètres cristallins déterminent l'espace vide entre les atomes du réseau, c'est-à-dire la taille des sites interstitiels. Cela revêt une importance capitale pour le concept de solution solide, et permet de saisir et anticiper les changements que les matériaux peuvent subir face aux fluctuations de température et de pression.

1.6. L'épitaxie

1.6.1. Définition

L'épitaxie est une étape technologique consistant à faire croître des couches cristallines minces sur un substrat. Elle permet de :

- Contrôler précisément l'orientation et la qualité cristalline des couches.
- Produire des matériaux avec des propriétés spécifiques, utiles dans divers domaines.

Il existe diverses catégories d'épitaxie, parmi lesquelles se trouvent l'épitaxie par jet moléculaire (MBE), l'épitaxie par vapeur (VPE) et l'épitaxie par liquides (LPE). Chaque technique présente des avantages et des inconvénients spécifiques en ce qui concerne la vitesse de la croissance, la pureté cristalline et le coût.

1.6.2. Les différentes techniques d'épitaxie

On distingue trois différentes techniques d'épitaxie :

- **L'épitaxie par jet moléculaire**

L'épitaxie par jets moléculaires, également appelée EJM ou MBE en anglais, est une méthode de dépôt pour des couches minces de matériaux, utilisée principalement pour les semiconducteurs de type III-V. Cette technique permet de contrôler l'épaisseur appliquée à une fraction près d'une couche monocristalline.

La croissance des matériaux a lieu dans une chambre EJM maintenue sous un vide très poussé. Le dispositif échantillon est introduit dans le four de croissance. Les sources contenant différents éléments sont dirigées vers cet échantillon et sont couvertes par des caches (figure 1.4), [4].

La pression des jets émis est suffisamment basse pour que ceux-ci se comportent de manière moléculaire selon la théorie cinétique des gaz, ce qui signifie que les atomes ou molécules dans les flux ne se croisent pas avant d'atteindre le substrat. Les flux sont régulés en ajustant la température des sources.

La pression équivalente de flux qui atteint l'échantillon est déterminée par une jauge ionique. Dans des conditions de croissance habituelles, la pression de flux de zinc se situe autour de 5.10^{-6} Torr, [4].

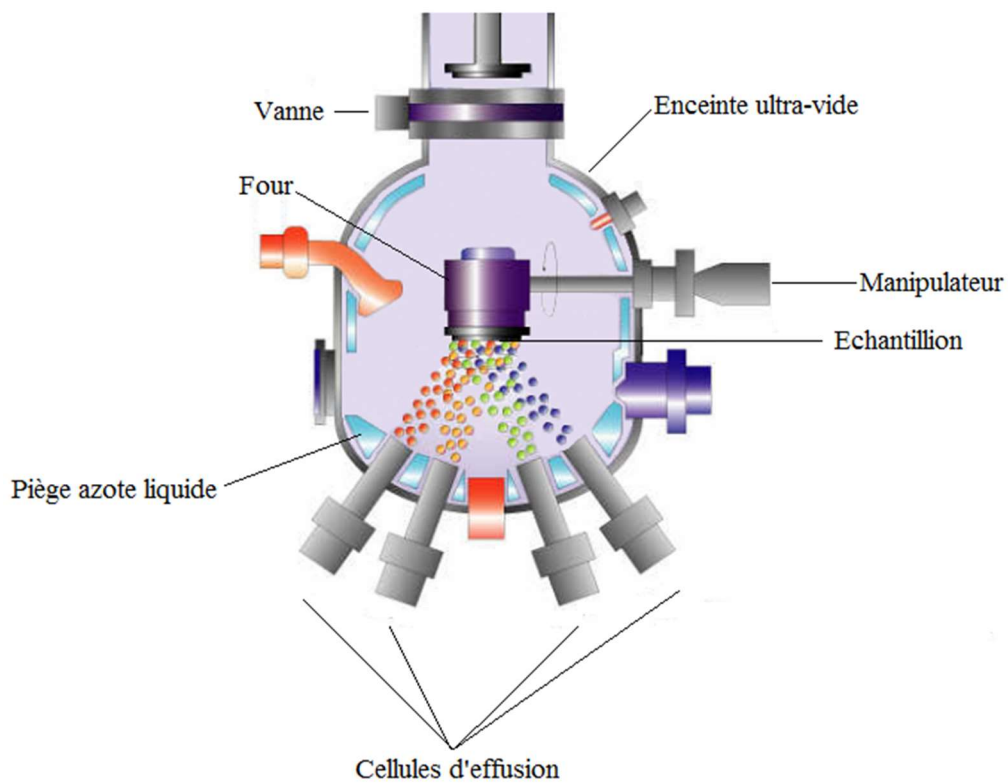


Figure 1.4. Un bâti d'épitanie par jet moléculaire [4].

- **L'épitanie en phase liquide**

Cette méthode implique la croissance d'un cristal en plaçant un substrat en contact avec un liquide. C'est fondamentalement le même concept que le tirage d'un lingot selon la technique de Czchralski. Il est crucial de gérer les transferts de chaleur afin de ne pas faire fondre le cristal déjà formé. Cette approche est extrêmement rapide, mais sa précision est inférieure à celle des épitanies en phase gazeuse [5]. La figure 1.5 représente le dispositif de la méthode.

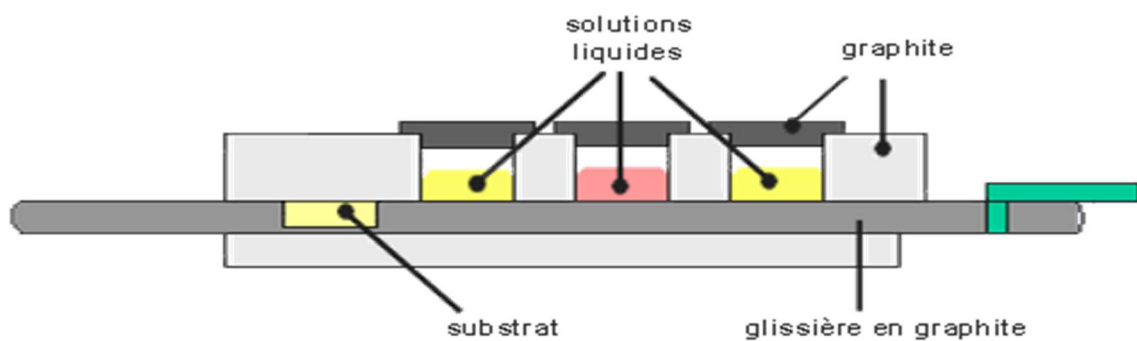


Figure 1.5. Dispositif d'épitanie en phase liquide [5].

- **L'épitaxie en phase vapeur**

L'épitaxie en phase vapeur (CVD) comme le montre la figure 1.6 consiste à faire croître un cristal à partir de sources gazeuses décomposées au contact d'un substrat monocristallin chauffé. La méthode CVD représente une approche flexible et rapide pour la fabrication de films, facilitant la création de revêtements homogènes en épaisseur et avec une porosité régulée, même sur des surfaces compliquées ou sculptées [6]. Cette technique offre une alternative évolutive, régulée et économique pour la production ascendante de matériaux en deux dimensions ou de films fins. La structure et la composition des films déposés dépendent des précurseurs et substrats utilisés, ainsi que des facteurs tels que la température, la pression de la chambre, le flux du gaz porteur, la quantité et le rapport des matériaux source, et la distance entre la source et le substrat durant le processus de CVD, [6].

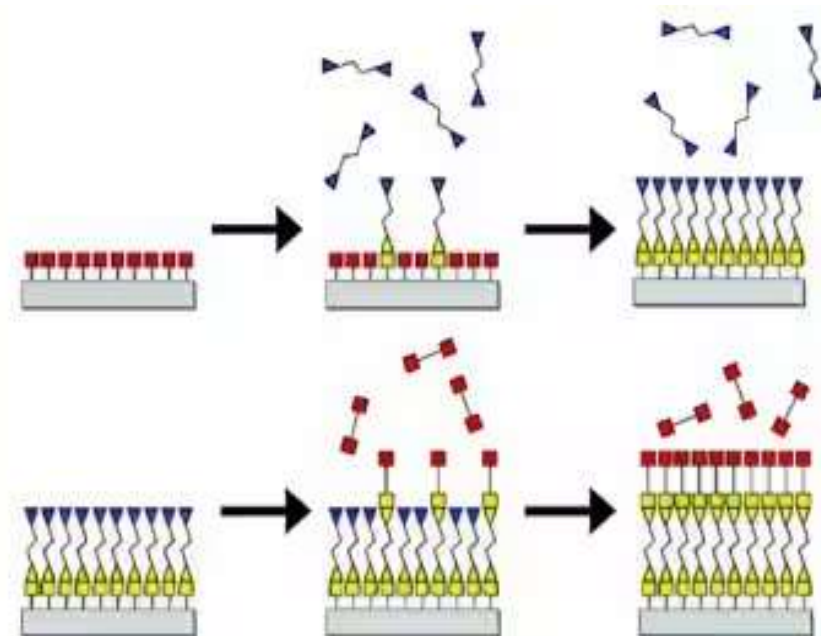
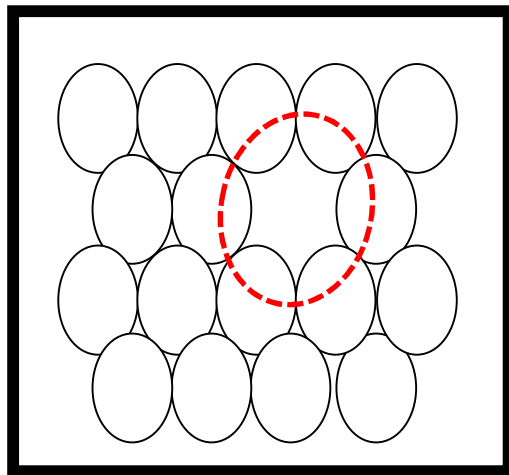


Figure .1.6. Banc d'épitaxie en phase vapeur [6].

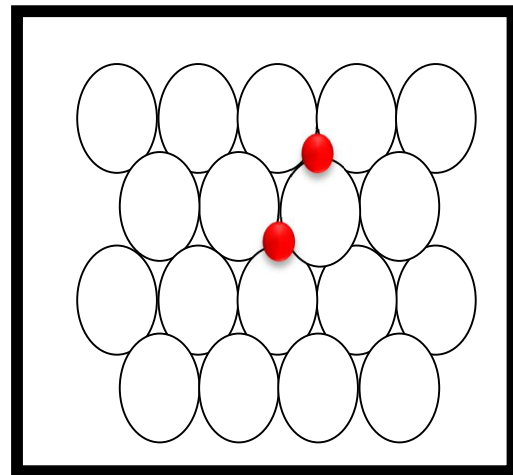
1.7. Défauts cristallins

Un défaut cristallin se définit comme une rupture dans la régularité du cristal. La régularité d'un cristal correspond à la répétition constante des emplacements atomiques dans les trois dimensions de l'espace. Traditionnellement, les défauts sont répartis en défauts ponctuels et défauts linéaires (figures 1.7 et 1.8).

-Défauts ponctuels : lacune et atome interstitiel (figure 1.7)



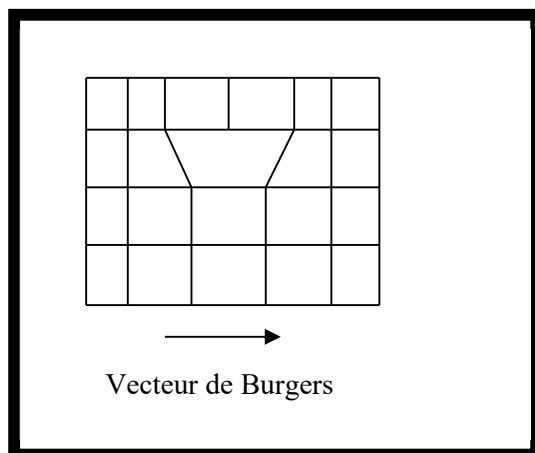
Lacune



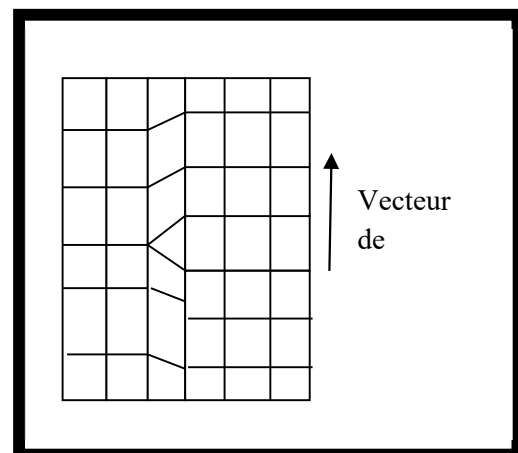
Atome interstitiel

Figure 1.7. Défauts ponctuels.

- Défauts linéaires: Dislocation vis et coin (figure 1.8).



Dislocation coin



Dislocation vis

Figure 1.8. Défauts linéaires.

1.8. La contrainte

Quand on épitaxie un semiconducteur sur un autre et que les deux composants, formant le substrat et la couche active, possèdent une structure cristalline identique mais des paramètres de maille distincts, la maille du matériau épitaxié subit une déformation élastique dans les deux

dimensions parallèles et perpendiculaires à la surface de croissance. En fonction du fait que le paramètre de la couche épitaxiée soit inférieur ou supérieur à celui du substrat, la déformation est :

- Une elongation "couche en tension" : si le paramètre de la couche épitaxiée est plus petit que celui du substrat ($a_e < a_s$), (voir figure 1.9. a).
- Un rétrécissement "couche en compression" : si le paramètre de la couche épitaxiée est plus grand que celui du substrat ($a_e > a_s$), (voir figure 1.9. b).

Les deux déformations sont exprimées suivant les relations suivantes :

- Dans le plan de la couche :

$$\varepsilon_{\parallel} = \varepsilon_{xx} = \varepsilon_{yy} = \frac{a_s - a_e}{a_e} \quad (1.1)$$

- Dans la direction de croissance :

$$\varepsilon_{\perp} = \varepsilon_{zz} = -2 \frac{c_{12}}{c_{11}} \varepsilon_{xx} \quad (1.2)$$

C_{11} et C_{12} sont les coefficients d'élasticité.

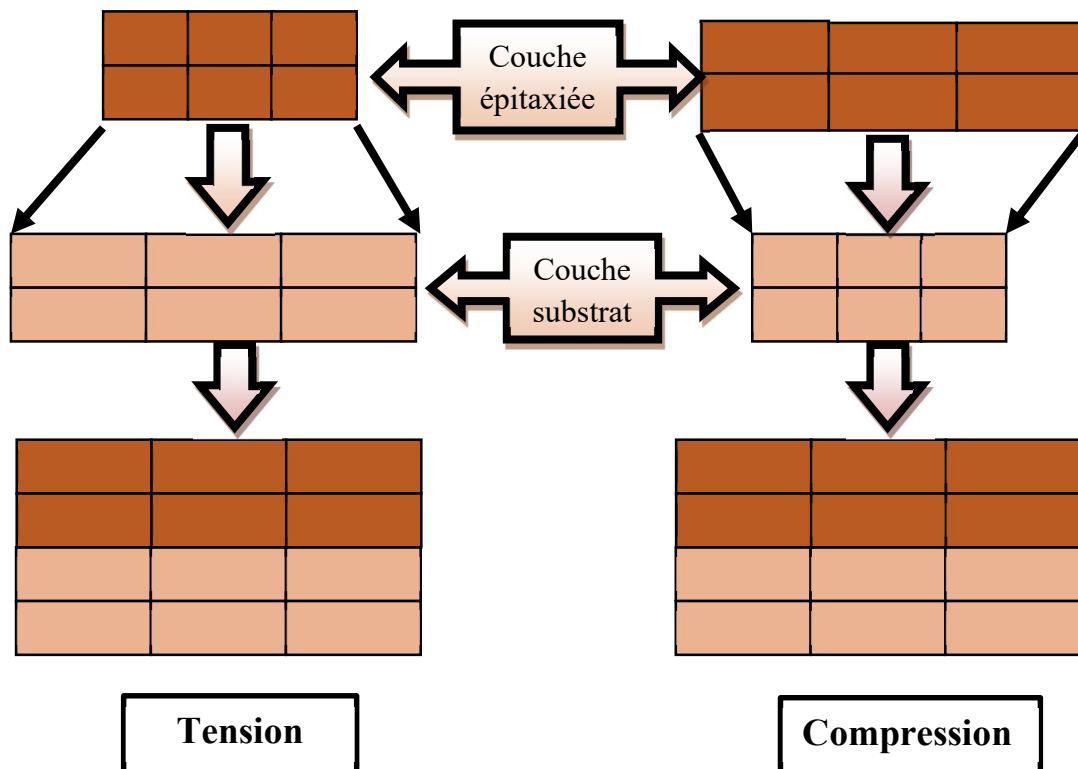


Figure 1.9. Les deux types de déformation.

1.9. L'épaisseur critique

L'épaisseur à partir de laquelle la couche épitaxiée commence à se détendre est désignée comme l'épaisseur critique. Lorsque l'épaisseur de la couche épitaxiée excède la valeur de cette épaisseur critique, les mailles ne sont plus soumises aux contraintes mécaniques du substrat et le paramètre de maille correspond à celui du matériau massif (figure 1.10). Le réseau se trouve complètement détendu, [7].

Cette épaisseur critique est calculée comme suit, [8]:

$$h_c = \frac{a}{\beta \cdot \sqrt{2} \cdot \pi \cdot \varepsilon} \cdot \frac{1-0,25 \cdot \gamma}{1+\gamma} \cdot \ln \left(\frac{h_c \cdot \sqrt{2}}{a} + 1 \right) \quad (1.3)$$

Où :

a : est le paramètre de maille de la couche relaxée.

ε : est le désaccord paramétrique.

β : Un coefficient qui prend les valeurs suivantes selon le type de la structure.

γ : est le coefficient de poisson.

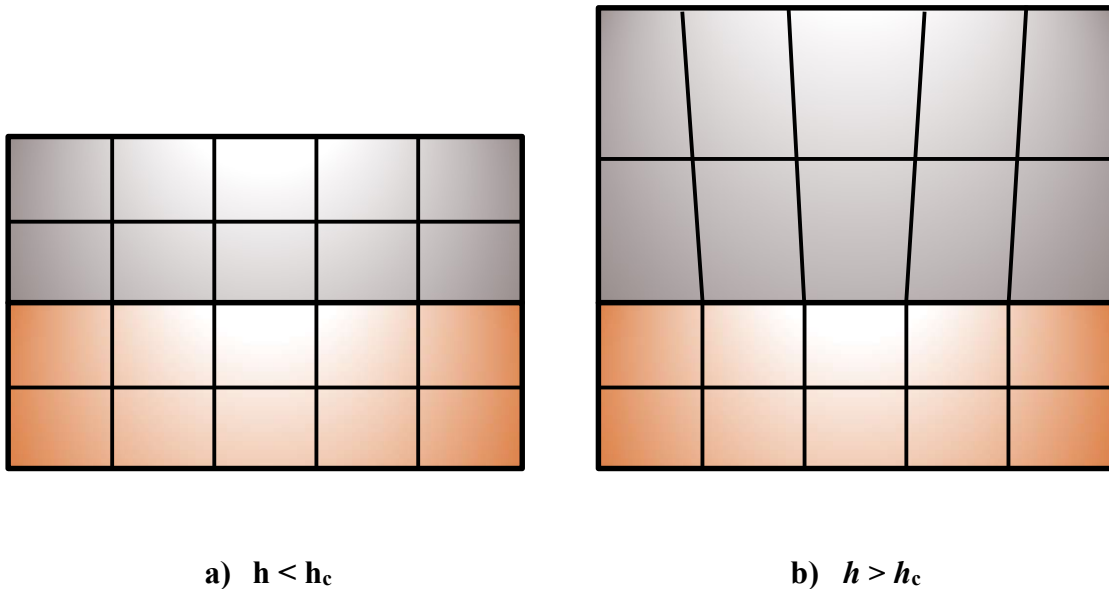


Figure 1.10. a) Croissance adaptée pour $h < h_c$, b) sstructure relaxée pour $h > h_c$.

1.10. Les hétérostructures

Une hétérostructure fait référence à une construction constituée de deux ou davantage de matériaux semiconducteurs variés, souvent dotée d'interfaces nettement délimitées. Ces matériaux peuvent présenter des caractéristiques physiques distinctes, telles que des bandes interdites variées ou des indices de réfraction divers, ce qui permet de tirer parti des phénomènes de confinement et de gestion des porteurs de charge.

Ces structures ont au moins une dimension inférieure à la longueur d'onde de de Broglie, ce qui entraîne un confinement quantique des porteurs de charge.

Les hétérostructures trouvent des applications étendues dans le domaine de l'électronique, de l'optoélectronique, ainsi que dans les secteurs de la nanoélectronique.

Le principe d'une hétérostructure est constitué d'un semiconducteur B pris en «sandwich» entre deux barrières d'un semiconducteur A (figure 1.11). Le semiconducteur B possède un gap inférieur à celui du matériau semiconducteur.

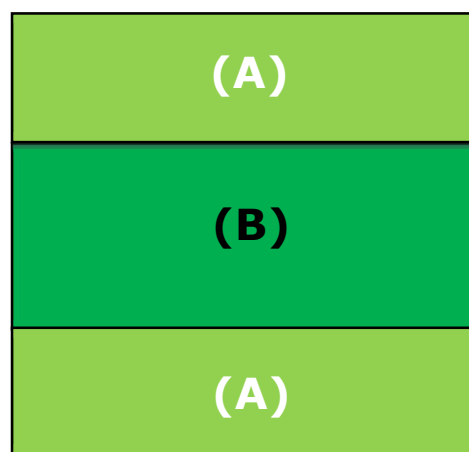


Figure 1. 11. Schéma d'une hétérojonction.

Il existe deux types d'hétérostructures :

- **Hétérostructure de type 1**

Les électrons et les trous seront confinés dans le même matériau B (indiqués dans la figure 1.12). La probabilité de recombinaison sera donc élevée car les passages de la bande de valence à la bande de conduction seront directs et de nature radiative (émission de photons).

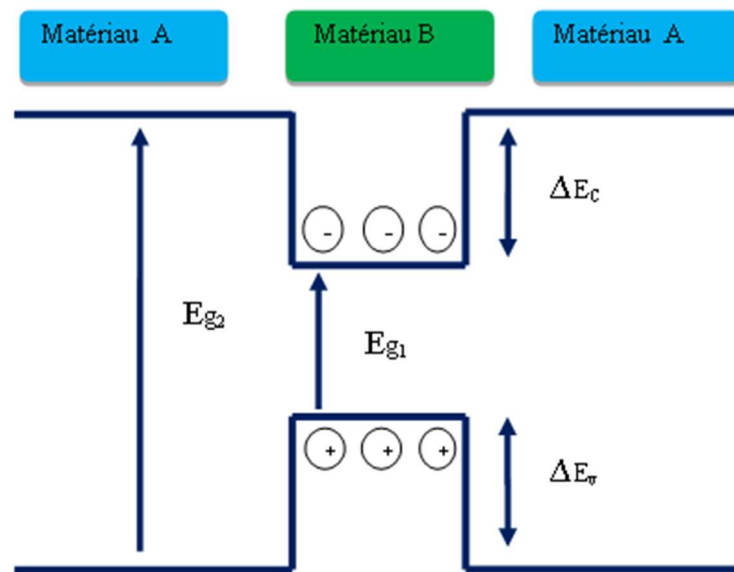


Figure 1.12. Hétérostructure de type 1.

- **Hétérostructure de type 2**

Les électrons et les trous sont confinés séparément (figure 1.13), ce qui rend leur recombinaison moins probable et indirecte, entraînant des transitions non radiatives (émission de phonons).

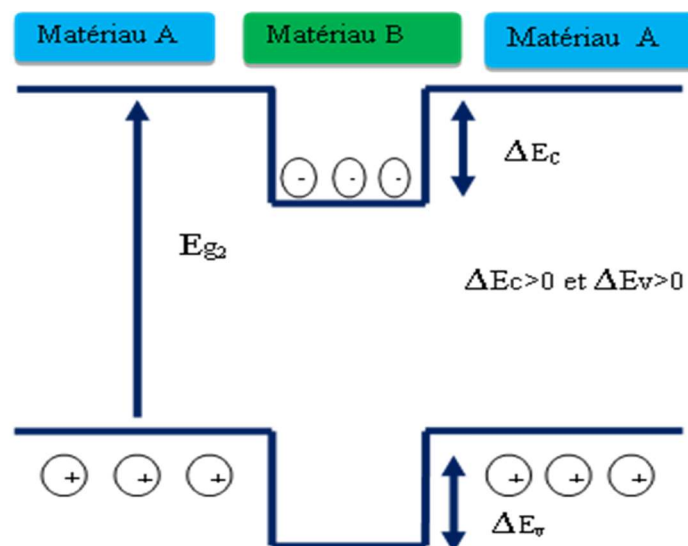


Figure 1.13. Hétérostructure de type 2.

1.11. Les puits quantiques

Les puits quantiques se composent de superpositions de couches de cristaux en alternance. Pour créer un puits quantique, deux matériaux (A) et (B) sont employées. La procédure implique la croissance par épitaxie du matériau (B) sur le support constitué du matériau (A), suivie d'une nouvelle croissance du matériau (A) sur celui de (B). Il est essentiel que les matériaux (A) et (B) possèdent des énergies de bandes interdites distinctes (figure 1.14).

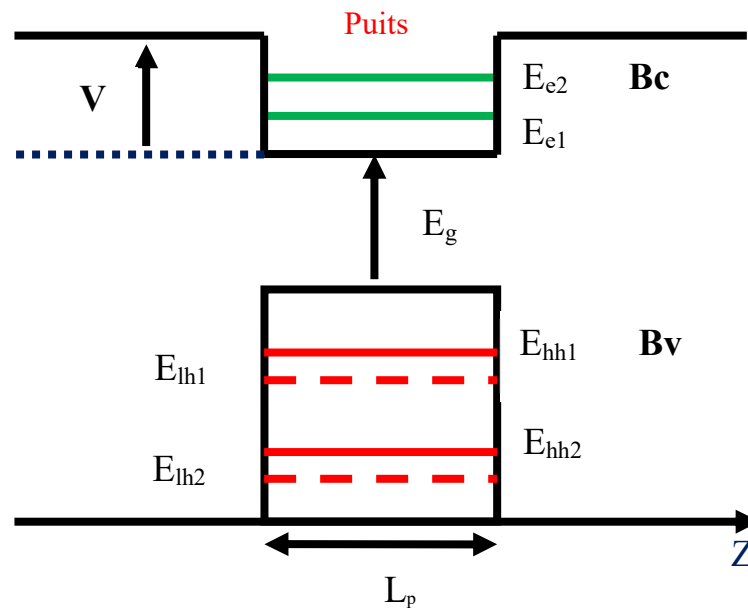


Figure 1.14. Schéma d'un puits quantique et différents niveaux énergétiques.

Où:

E_{en} : le $n^{\text{ème}}$ niveau d'énergie des électrons.

E_{hhn} : le $n^{\text{ème}}$ niveau d'énergie des trous lourds.

E_{hln} : le $n^{\text{ème}}$ niveau d'énergie des trous légers.

1.12. Décalage des bandes

Le décalage de bande constitue une propriété fondamentale des matériaux, en particulier des semi-conducteurs. Ce décalage affecte la conductivité électrique, la capacité d'un matériau à capter ou émettre de la lumière, de même que d'autres caractéristiques optiques et électroniques. Il représente un élément central dans la conception de dispositifs électroniques

comme les diodes, les transistors, et les panneaux solaires. Les décalages des bandes de valence et de conduction sont donnés par :

$$\Delta E_c = E_{c \text{ barrière}} - E_{c \text{ puits}} \quad (1.4)$$

$$\Delta E_v = E_{v \text{ puits}} - E_{v \text{ barrière}} \quad (1.5)$$

1.13. L'équation de Schrödinger dans un puits quantique

Dans le cadre d'un puits quantique, l'équation de Schrödinger décrit l'évolution temporelle d'une particule quantique confinée dans un potentiel. Elle révèle que l'énergie de la particule est quantifiée, c'est-à-dire qu'elle ne peut prendre que des valeurs discrètes. Cette équation s'écrit [9] :

$$\frac{-\hbar^2}{2m_e^*} \Delta \Psi(z) + V(z) \Psi(z) = E \Psi(z) \quad (1.6)$$

Où:

Δ : Laplacien, m_e^* : la masse effective de l'électron, V : l'énergie potentielle, E : l'énergie totale de l'électron, Ψ : la fonction d'onde, $\hbar = \frac{h}{2\pi}$ ou h est la constante de Planck.

- **L'équation de Schrödinger dans un puits de profondeur infinie :**

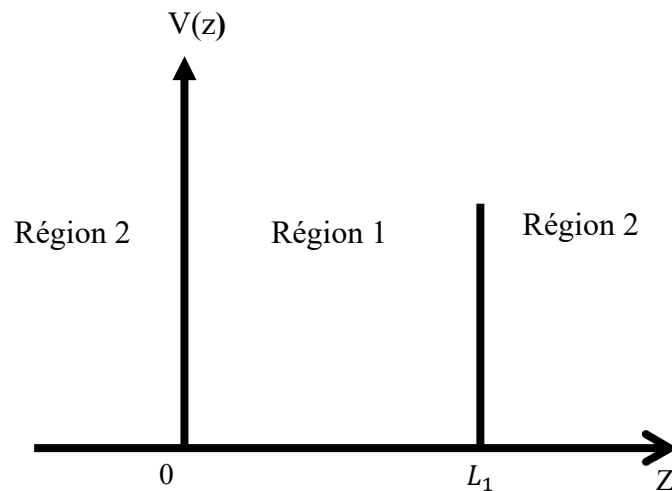


Figure 1.15. Puits de profondeur infinie

On peut considérer dans un premier temps que les électrons sont confinés dans l'intervalle de l'espace $0 < z < L_1$, par des barrières de potentiel de hauteur infinie.

Le potentiel s'écrit alors :

$$\begin{cases} V(z) = \infty & \text{pour } z < 0 \text{ et } z > L_1 \\ V(z) = 0 & \text{pour } 0 < z < L_1 \end{cases} \quad (1.7)$$

Les conditions aux limites sont par conséquent : $\Psi(z=0) = 0$, $\Psi(z=L_1) = 0$

Dans le puits, le potentiel $V(z) = 0$, l'équation de Schrödinger s'écrit :

$$\frac{d^2\Psi(z)}{dz^2} = \frac{-2m_1^*E}{\hbar^2} \Psi(z) \quad (1.8)$$

$$\frac{d^2\Psi(z)}{dz^2} + \frac{2m_1^*E}{\hbar^2} \Psi(z) = 0 \quad (1.9)$$

m_1^* : la masse effective des électrons dans la région 1.

L'équation (1.9) est une équation différentielle du deuxième ordre dont la solution est de la forme :

$$\Psi(z) = A \sin(K_z \cdot z) + B \cos(K_z \cdot z) \quad (1.10)$$

Où:

$$K_z = \sqrt{\frac{2m_1^*E}{\hbar^2}} \quad (1.11)$$

- **L'équation de Schrödinger a puits quantique de profondeur finie :**

Nous examinons un modèle à une seule dimension le long de l'axe (oz) où un puits de potentiel fini est illustré comme indiqué sur la figure 1.16.

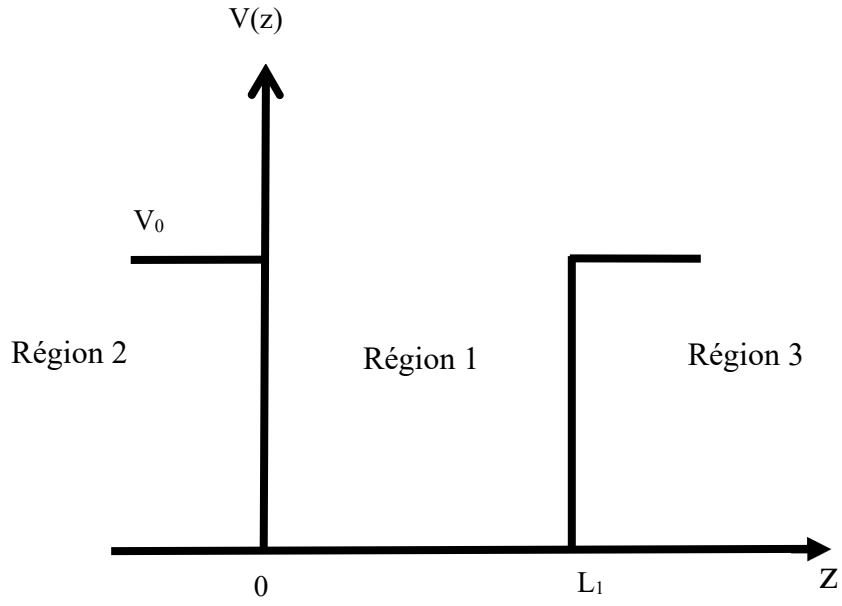


Figure 1.16. Puits de potentiel à profondeur finie.

Nous nous intéressons aux états d'énergies associés aux particules confinées dans le puits tel que $E < V_0$. On désigne par K_1 et K_2 :

$$\begin{cases} K_1^2 = \frac{2m_1^*E}{\hbar^2} \\ K_2^2 = \frac{2m_2^*(V_0 - E)}{\hbar^2} \end{cases} \quad (1.12)$$

Où :

m_1^* : est la masse effective de la particule dans la région 1

m_2^* : est la masse effective de la particule dans les régions 2 et 3.

V_0 : est la profondeur du puits et $\hbar$ la constante de Planck.

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

$$\begin{cases} \left(\frac{d^2 \Psi_1}{dz^2}\right) - K_2^2 \Psi_1 = 0 \\ \left(\frac{d^2 \Psi_2}{dz^2}\right) - K_1^2 \Psi_2 = 0 \\ \left(\frac{d^2 \Psi_3}{dz^2}\right) - K_2^2 \Psi_3 = 0 \end{cases} \quad (1.13)$$

Soit :

$$\left\{ \begin{array}{l} \Psi_1 = A_1 e^{K_2 z} + B_1 e^{-K_2 z} \\ \Psi_2 = A_2 e^{jK_1 z} + B_2 e^{-jK_1 z} \\ \Psi_3 = A_3 e^{K_2(z-L_1)} + B_3 e^{-K_2(z-L_1)} \end{array} \right. \quad (1.14)$$

1.14. Masse effective des électrons

En physique du solide, la masse effective est utilisée pour décrire le comportement des électrons dans les cristaux. Elle est souvent utilisée pour calculer la mobilité des porteurs de charge (électrons et trous) dans les semiconducteurs, ainsi que pour déterminer la densité d'états dans ces matériaux. La masse effective d'un électron ou d'un trou n'est pas la même pour tous les matériaux. Elle dépend de la structure du cristal et de la nature des forces qui agissent sur la particule

Elle est obtenue directement de la structure de bande du matériau, la masse effective devient une quantité scalaire et indépendante de la direction.

L'inverse de la masse effective $\frac{1}{m_e^*}$ est donc proportionnel à la deuxième dérivée de l'énergie $E(\vec{K})$ par rapport aux composantes du vecteur d'onde $\vec{K}(K_x, K_y, K_z)$, elle est de la forme, [10] :

$$\frac{1}{m_e^*} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E(\vec{K})}{\partial K^2} \quad (1.15)$$

En général, la masse effective est anisotrope, c'est-à-dire qu'elle peut être différente selon la direction dans laquelle la force est appliquée. La masse effective des porteurs de charge joue un rôle important dans les performances des dispositifs électroniques, notamment les transistors et les LED.

1.15. Transitions intersousbandes

Les transitions intersousbandes impliquent une seule catégorie de porteurs de charge qui se déplacent à travers l'ensemble de la structure. Ces échanges électroniques entre sous-bandes proviennent de la quantification de la bande de conduction au sein d'une hétérostructure. Ces mouvements se déroulent au sein d'une seule sous-bande électronique (figure 1.17), tandis que la transition interbande se fait entre la bande de conduction et celle de valence. Les transitions

intersousbandes sont caractérisées par leur rapidité, surpassant celles interbandes. Cette rapidité est principalement due à la très courte durée de vie des électrons dans les sous-bandes excitées.

Ce phénomène est fondamental dans les systèmes à puits quantiques et est essentiel pour l'avancement de l'optoélectronique dans le domaine infrarouge.

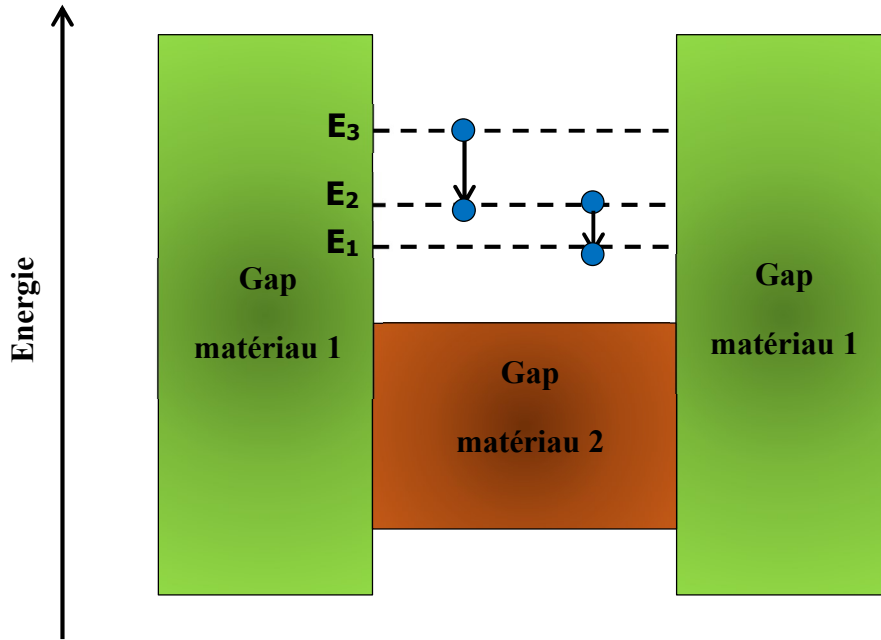


Figure 1.17. Transitions intersousbandes dans un puits quantique.

1.16. Absorption intersousbandes

L'absorption intra-bande fait référence à l'absorption lumineuse résultant des transitions entre divers niveaux énergétiques au sein de la bande de conduction d'un matériau semi-conducteur. Le coefficient d'absorption α est défini comme étant le rapport entre l'énergie absorbée par unité de volume et par unité de temps, et l'énergie incidente. Pour une transition entre les sousbandes i et f , il est donné par l'équation (1.16), [11] :

$$\alpha = \frac{\pi e^2 (E_i - E_f)}{2m_0 L_p \omega n c \epsilon_0} f_{12} \frac{(\sin \theta)^2}{\cos \theta} (n_i^s - n_f^s) g(E_f - E_i - \hbar \omega) \quad (1.16)$$

e la charge de l'électron; m_0 la masse de l'électron; $\hbar$ la constante réduite de Planck; ϵ_0 la permittivité du vide; L_p la largeur du puits quantique ; c célérité de la lumière; n L'indice de réfraction relatif du matériau.

f_{12} : la force d'oscillateur décrivant la force de couplage quantique entre les sousbandes i et f , donnée par la relation :

$$f_{12} = \frac{2m_0}{\hbar^2} (E_2 - E_1)^2 |z_{12}|^2 \quad (1.17)$$

$z_{12} = \langle \psi_1 | z | \psi_2 \rangle$, est le moment dipolaire électrique des transitions entre les deux niveaux énergétiques initial 1 et final 2.

$n_i^s - n_f^s$ est la différence de population entre les sousbandes i et f par unité de volume.

$g(E)$ correspond à une fonction de type Lorentzien, elle est donnée par :

$$g(E) = \frac{\hbar\Gamma}{\pi} \frac{1}{(E_f - E_i - \hbar\omega)^2 + (\hbar\Gamma)^2} \quad (1.18)$$

Γ : la largeur à mi-hauteur du maximum des spectres d'absorption, ce facteur dépend du temps de relaxation intersousbande, $\Gamma = 1/\tau_{in}$.

1.17. Applications des semiconducteurs

Les matériaux semi-conducteurs sont des éléments adaptés qui ont transformé le domaine de l'électronique et sont essentiels pour la majorité des technologies contemporaines. Ils constituent l'élément central de nombreux dispositifs électroniques, tels que les ordinateurs, les smartphones, les téléviseurs, les appareils photographiques, les capteurs, et bien d'autres encore.

✓ Diodes

Les diodes, qui sont des composants semi-conducteurs, servent à convertir le courant alternatif, à stabiliser la tension et à détecter la lumière.

✓ Transistors

Les transistors représentent des composants semi-conducteurs qui servent à l'amplification ainsi qu'à la commutation, constituant la fondation des circuits intégrés.

✓ Circuits intégrés

Les circuits intégrés, qui se classifient parmi les dispositifs semi-conducteurs, trouvent leur utilité dans de nombreuses applications, y compris les microprocesseurs, les systèmes de mémoire et les circuits de communication.

✓ **Conversion d'énergie**

Les semiconducteurs jouent un rôle clé dans les panneaux solaires, transformant la lumière en électricité, et dans les onduleurs, où ils convertissent l'énergie électrique.

✓ **Capteurs**

Les capteurs à base de semiconducteurs sont utilisés pour détecter divers paramètres, tels que la température, la pression, la lumière et le mouvement.

✓ **Électronique de puissance**

Les dispositifs semiconducteurs à puissance sont employés dans les alimentations électriques, les convertisseurs de fréquence pour moteurs et les dispositifs de conversion de courant.

✓ **Télécommunications**

Les semi-conducteurs jouent un rôle crucial dans les stations de télécommunication, les équipements radio et les réseaux de communication par fibre optique.

✓ **Industrie automobile**

Les semi-conducteurs sont intégrés dans les systèmes de contrôle, les dispositifs de navigation et les systèmes de gestion des moteurs.

✓ **Santé**

Les semiconducteurs sont présents dans les appareils d'imagerie par résonance magnétique, les dispositifs ultrasonores et les moniteurs de santé.

En résumé, les semiconducteurs, en tant que matériaux multifonctionnels, ont transformé le paysage de l'électronique et sont vitaux pour la majorité des technologies modernes.

1.18. Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons compilé les outils essentiels pour comprendre les propriétés optiques et électroniques des matériaux semiconducteurs. L'emploi de semiconducteurs offre de nombreux bénéfices en ce qui concerne les caractéristiques des matériaux. En réalité, l'objectif de leur production est d'exploiter les propriétés exceptionnelles de chaque type de matériau pour les rendre

plus aptes à des usages spécifiques. Ainsi, l'association de deux matériaux ou plus peut conduire à une amélioration des caractéristiques, ce qui a été le sujet de plusieurs recherches.

Nous avons également présenté un aperçu des transitions intersous-bandes, qui constituent la base de l'absorption intrabande, point central de notre étude qui sera développée dans le second chapitre pour la structure à puits quantique GaAsBi/GaAsP.

Chapitre 2. Simulation de la structure à puits quantique à base de GaAsBi/GaAsP

2.1. Introduction

Dans ce chapitre, nous nous pencherons sur une analyse théorique des caractéristiques optoélectroniques de la structure à puits quantique GaAsBi/GaAsP.

Dans la première section, nous examinerons l'influence des concentrations des atomes de bismuth (Bi) et de phosphore (P) sur divers paramètres définissant cette structure quantique, tels que le paramètre de maille, la bande interdite ainsi que les masses effectives et d'autres éléments.

Dans une seconde section, nous étudierons l'impact de ces concentrations sur le coefficient d'absorption intersousbandes.

2.2. Structure de puits GaAsBi/GaAsP

La structure de puits quantique qui suscite notre intérêt se base sur un alliage ternaire GaAsBi qui sera placé entre deux barrières formé d'un matériau ternaire GaAsP, avec les atomes de Ga provenant de la colonne III du tableau périodique et les éléments As, Bi et P se trouvant dans la colonne V. Ainsi l'alliage GaAsBi servira de matériau de puits tandis que l'alliage GaAsP agira en tant que substrat.

2.3. Paramètre de maille

Le paramètre de maille des alliages $\text{GaAs}_{1-x}\text{Bi}_x$ et $\text{GaAs}_{1-y}\text{P}_y$ sera déterminé selon la loi de Végard, impliquant une variation linéaire en relation avec la concentration de bismuth et de phosphore. Il sera précisé par les formules suivantes :

$$a_{\text{GaAsBi}} = (1 - x) \cdot a_{\text{GaAs}} + x \cdot a_{\text{GaBi}} \quad (2.1)$$

$$a_{\text{GaAsP}} = (1 - y) \cdot a_{\text{GaAs}} + y \cdot a_{\text{GaP}} \quad (2.2)$$

x et y sont les concentrations d'atomes de Bi et de P, respectivement.

La figure 2.1 illustre comment le paramètre de maille de l'alliage $\text{GaAs}_{1-x}\text{Bi}_x$ évolue selon la quantité de bismuth (Bi) et comment l'alliage $\text{GaAs}_{1-y}\text{P}_y$ change en fonction de la concentration de phosphore (P). On observe qu'une hausse de la concentration en Bi fait grimper de manière significative la valeur du paramètre de maille, tandis qu'une élévation de la concentration d'atomes de phosphore réduit cette valeur dans le matériau GaAsP.

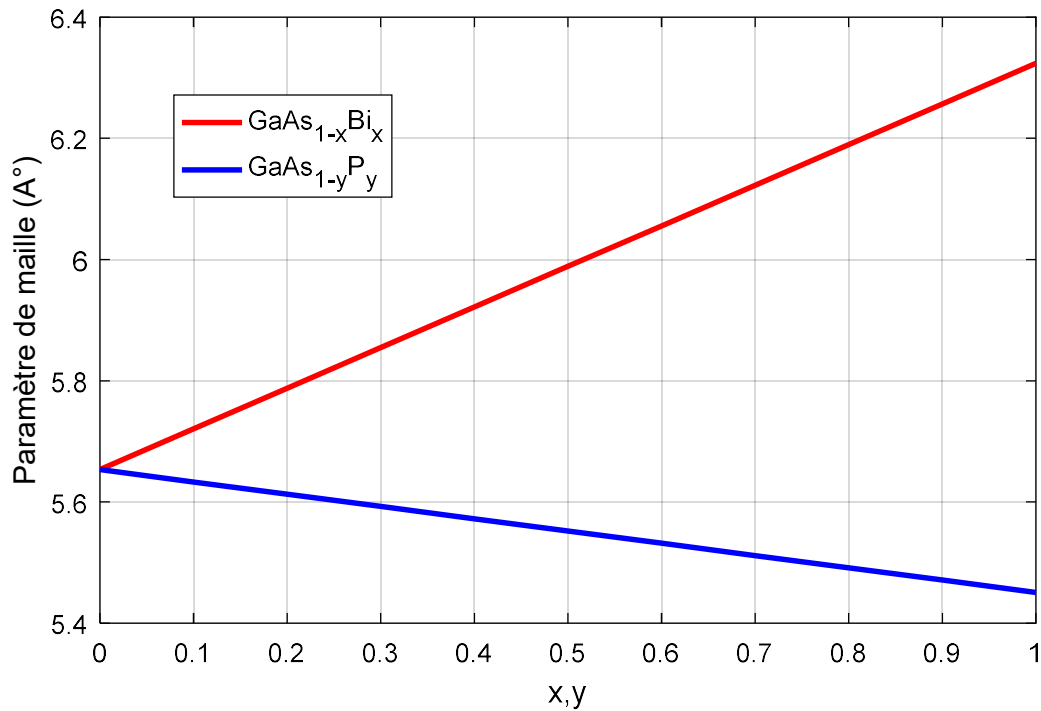


Figure 2.1. Variation du paramètre de maille des alliages GaAs_{1-x}Bi_x et GaAs_{1-y}P_y en fonction de la concentration de Bi (x) et P (y).

Tableau 2.1. Paramètres physiques des constituants de la structure GaAsBi/GaAsP [12,13]

Paramètres	GaAs	GaP	GaBi
a (Å)	5.6533	5.4508	6.324
E _g (eV)	1.43	2.76	-1.45
a _c (eV)	-11	-7.14	-6.85
a _v (eV)	-0.85	1.70	0.79
b (eV)	-1.85	-1.7	-1.4
C ₁₁ , C ₁₂ (10 ¹¹ dyn/cm ²)	11.88, 5.38	14.05, 6.203	11.92, 5.99

2.4. La contrainte

La variation des valeurs des paramètres de maille du matériau épitaxié GaAsBi sur un substrat GaAsP engendre la création de contraintes à l'interface. La figure 2.2 montre comment la contrainte évolue selon les niveaux de bismuth dans le matériau de puits pour différentes concentrations de phosphore dans la barrière. À ces concentrations, le type de contrainte est compressif.

L'incorporation de bismuth et de phosphore conduit à une augmentation de la contrainte en valeur absolue.

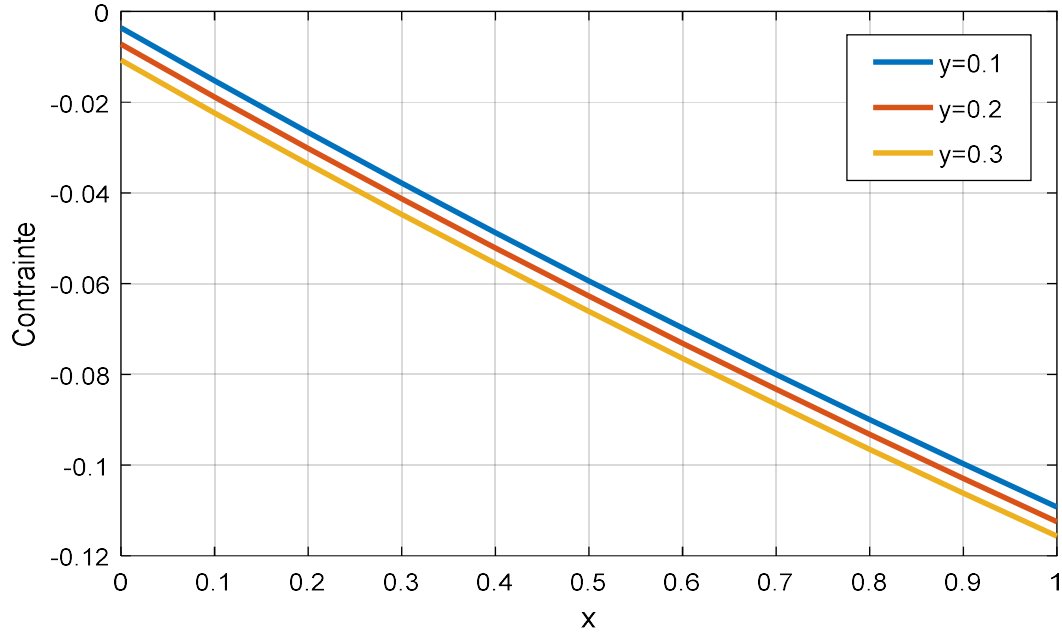


Figure 2.2. Variation de la contrainte en fonction de la concentration de Bi.

2.5. Energie spin-orbite

La figure 2.3 montre comment l'énergie de spin-orbite des composés GaAsBi et GaAsP change en fonction des teneurs en bismuth et en phosphore. Cette énergie est déterminée selon la règle de Végard. Nous constatons une élévation continue de l'énergie de spin-orbite avec l'accroissement de la concentration de bismuth, tandis que cette énergie diminue lorsque la quantité de phosphore dans la barrière GaAsP augmente.

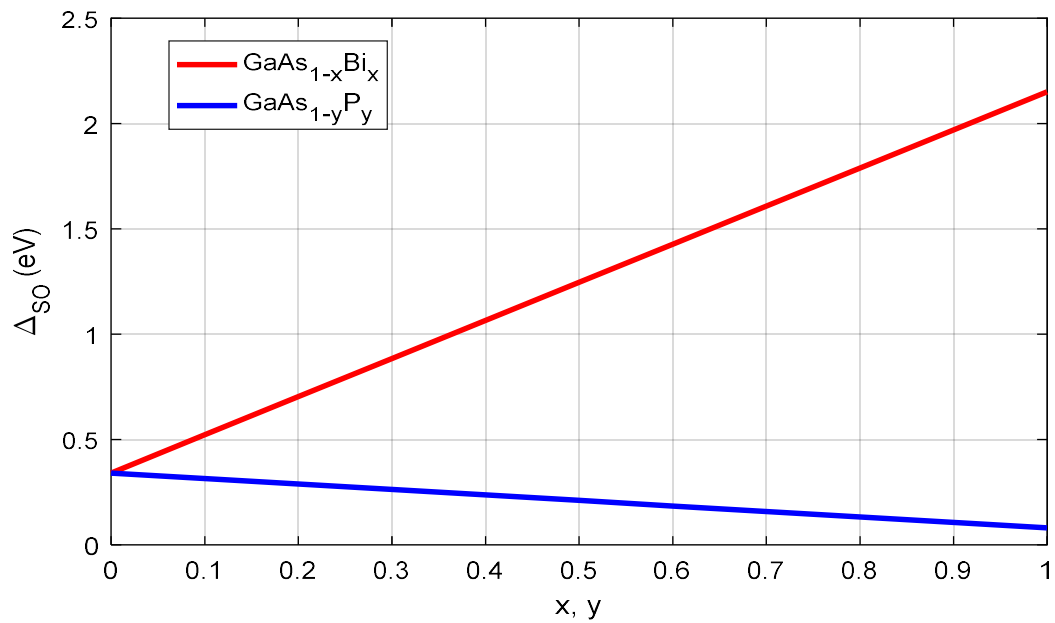


Figure 2.3. Variation de l'énergie spin-orbite des alliages GaAsBi et GaAsP.

2.6. Energie de la bande interdite

L'intégration des atomes de bismuth dans le matériau puits GaAsBi et du phosphore dans le matériau barrière GaAsP peut être représentée par la loi de Végard, en incluant le coefficient correctif de Bowing.

$$Eg_{(GaAsBi)} = (1 - x)Eg_{(GaAs)} + xEg_{(GaBi)} - 1.43x(1 - x) \quad (2.3)$$

$$Eg_{(GaAsP)} = (1 - y)Eg_{(GaAs)} + yEg_{(GaP)} - 0.19y(1 - y) \quad (2.4)$$

Les valeurs des énergies de gap des binaires GaAs, GaBi et GaP sont indiqués dans le tableau 2.1 que nous avons examiné auparavant.

La représentation 2.4 illustre comment l'énergie de la bande interdite des alliages ternaires GaAsBi et GaAsP change en fonction des proportions d'atomes de bismuth et de phosphore, respectivement. L'incorporation du bismuth entraîne une réduction de l'énergie du gap dans le cas du ternaire GaAsBi, tandis qu'une augmentation de la quantité de phosphore entraîne une élévation de l'énergie du gap dans le substrat. Les graphes présentent une forme non linéaire en raison du facteur de Bowing.

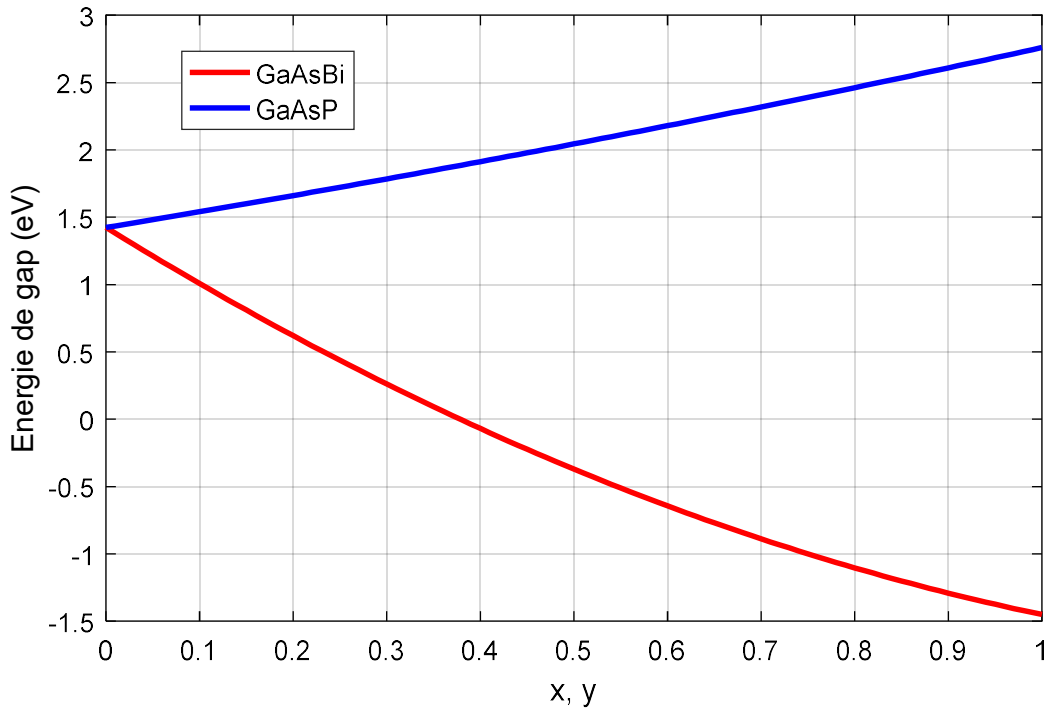


Figure 2.4. Evolution de E_g de GaAsBi et GaAsP selon la quantité de Bi et de P.

2.7. La masse effective

La représentation 2.5 illustre que l'ajout de Bi conduit à une réduction de la masse effective des électrons dans le matériau puits GaAsBi, tandis que l'introduction de P conduit à une élévation de la masse au sein du matériau GaAsP.

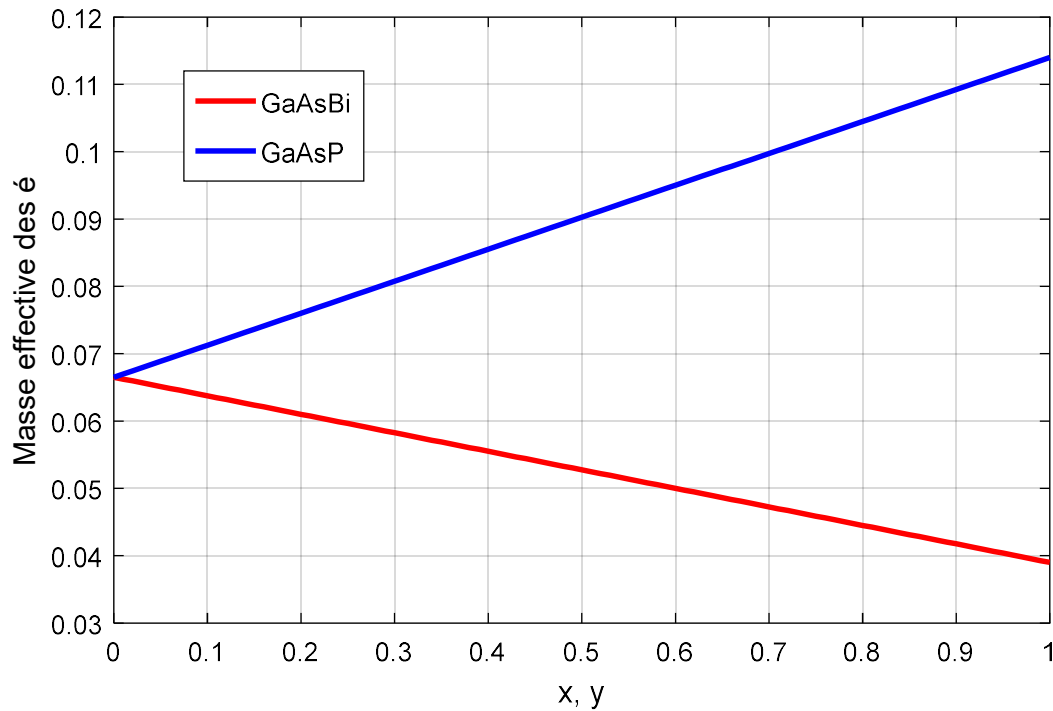


Figure 2.5. Variation de la masse effective des électrons selon la quantité de Bi et de P.

2.8. Décalage de la bande de conduction

Les deux configurations de bandes des deux matériaux, GaAsBi matériau épitaxié et le substrat GaAsP, sont disposées de manière discontinue comme le montre notre illustration dans la figure 2.6, où ΔE_c et ΔE_v représentent, respectivement, les décalages de la bande de conduction et de la bande de valence dus à la différence de la structure de bandes des deux matériaux.

La figure 2.7 montre le changement dans le décalage de la bande de conduction (ΔE_c) en fonction des teneurs en Bi et P pour la structure $\text{GaAs}_{1-x}\text{Bi}_x/\text{GaAs}_{1-y}\text{P}_y$. Ce graphique révèle que l'élévation des concentrations de ces deux éléments provoque une hausse de ce décalage dans cette architecture.

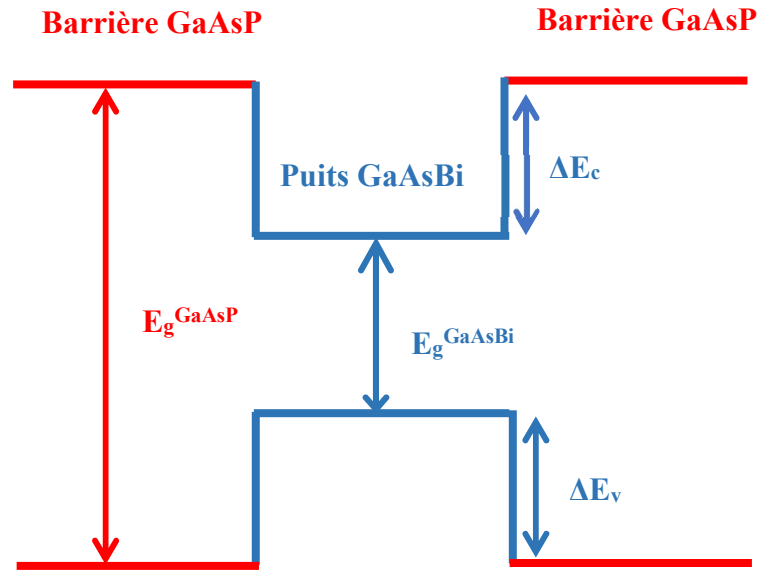


Figure 2.6. Structure à puits quantique GaAs_{1-x}Bi_x/GaAs_{1-y}P_y.

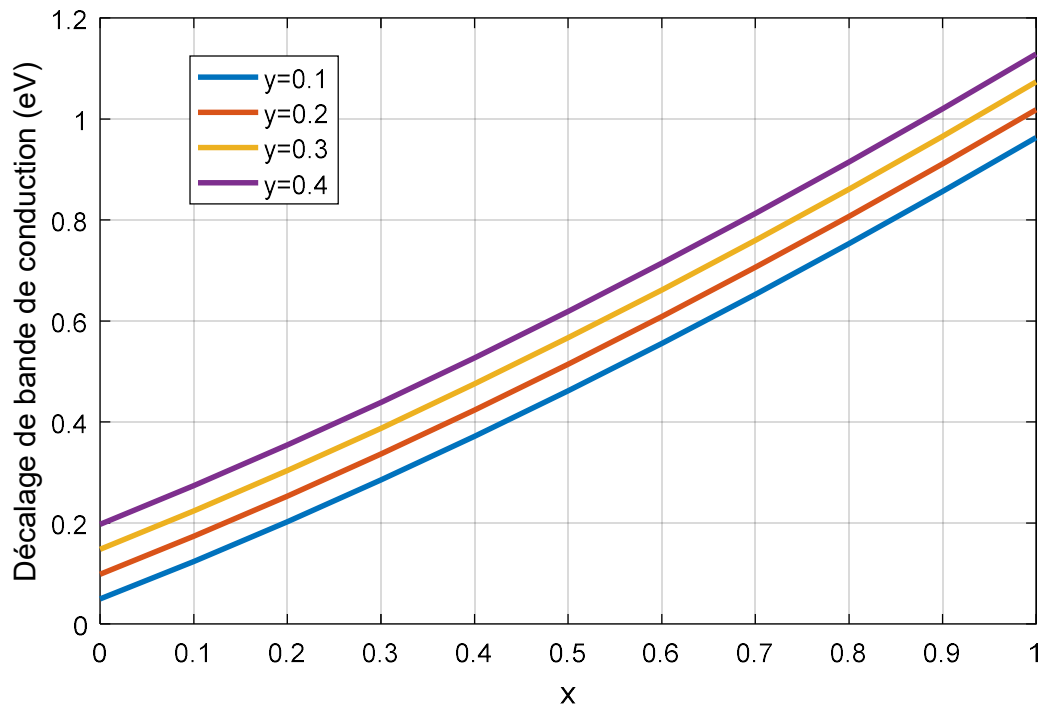


Figure 2.7. Variation de ΔE_c en fonction de Bi et P pour la structure GaAs_{1-x}Bi_x/GaAs_{1-y}P_y.

2.9. Energie de quantification des électrons

Les figures (2.8), (2.9) et (2.10) montrent la variation de l'énergie de quantification, respectivement, des structures $\text{GaAs}_{0.975}\text{Bi}_{0.025}/\text{GaAs}_{0.8}\text{P}_{0.2}$, $\text{GaAs}_{0.965}\text{Bi}_{0.035}/\text{GaAs}_{0.8}\text{P}_{0.2}$ et $\text{GaAs}_{0.965}\text{Bi}_{0.035}/\text{GaAs}_{0.6}\text{P}_{0.4}$.

L'intégration de bismuth contribue à un accroissement du nombre de niveaux énergétiques dans la bande de conduction. Il est observé qu'une configuration $\text{GaAs}_{0.975}\text{Bi}_{0.025}/\text{GaAs}_{0.8}\text{P}_{0.2}$ avec une largeur de puits de 60 Å présente un niveau énergétique unique, tandis que pour la configuration $\text{GaAs}_{0.965}\text{Bi}_{0.035}/\text{GaAs}_{0.8}\text{P}_{0.2}$, il y a deux niveaux énergétiques pour les électrons dans la bande de conduction, toujours pour la même largeur de puits, et l'énergie de quantification augmente. Une hausse de la concentration de phosphore dans le substrat entraînera une augmentation du nombre de niveaux énergétiques ainsi que l'énergie de quantification. Dans le cas de la structure $\text{GaAs}_{0.975}\text{Bi}_{0.025}/\text{GaAs}_{0.8}\text{P}_{0.2}$ avec une largeur de puits de 60 Å, l'énergie du premier niveau atteint 53 meV, alors que pour la structure $\text{GaAs}_{0.965}\text{Bi}_{0.035}/\text{GaAs}_{0.8}\text{P}_{0.2}$, elle s'élève à 56 meV et pour la structure $\text{GaAs}_{0.965}\text{Bi}_{0.035}/\text{GaAs}_{0.6}\text{P}_{0.4}$, elle sera de 65 meV.

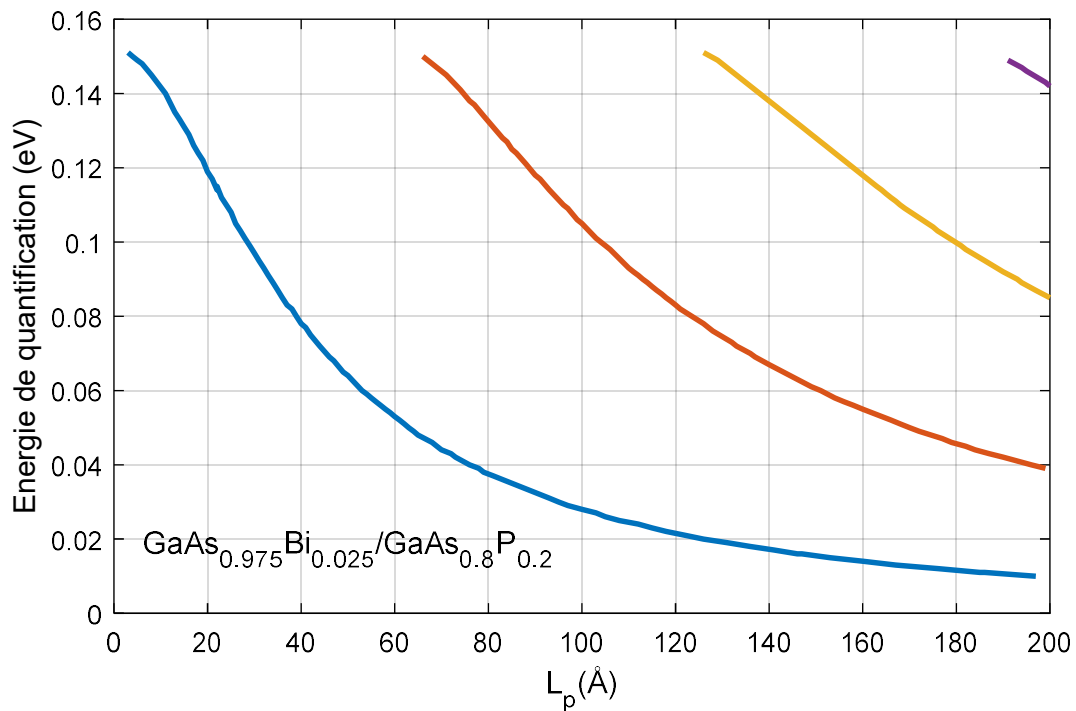


Figure 2.8. Variation de l'énergie de quantification des électrons de la structure $\text{GaAs}_{0.975}\text{Bi}_{0.025}/\text{GaAs}_{0.8}\text{P}_{0.2}$.

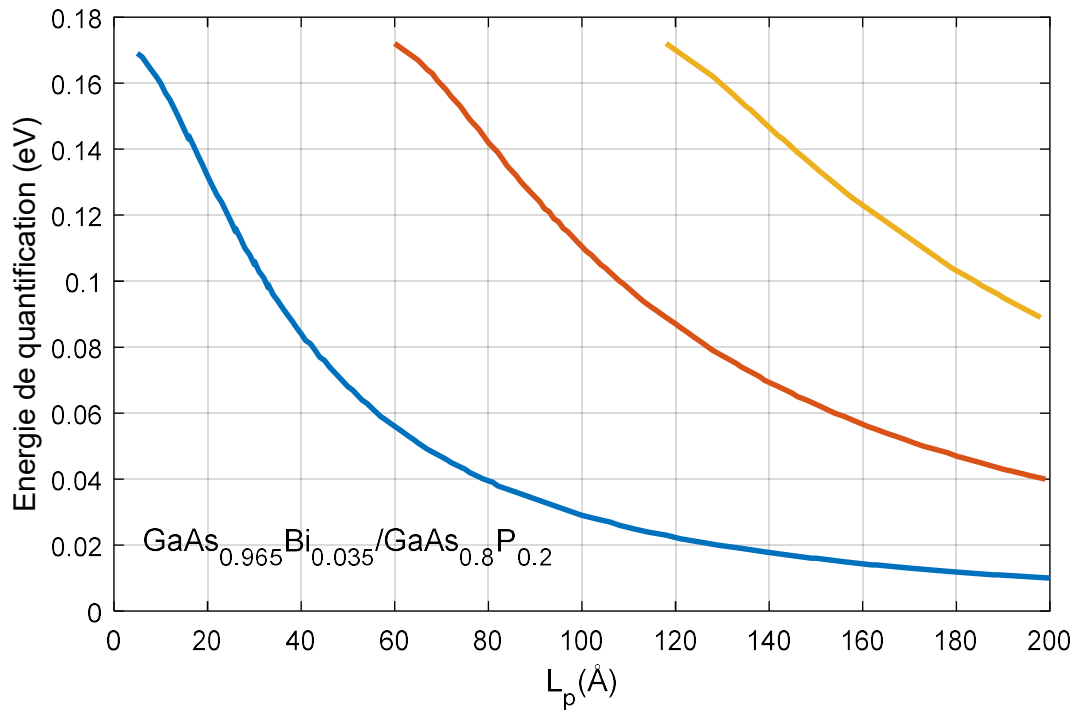


Figure 2.9. Variation de l'énergie de quantification des électrons de la structure $\text{GaAs}_{0.965}\text{Bi}_{0.035}/\text{GaAs}_{0.8}\text{P}_{0.2}$.

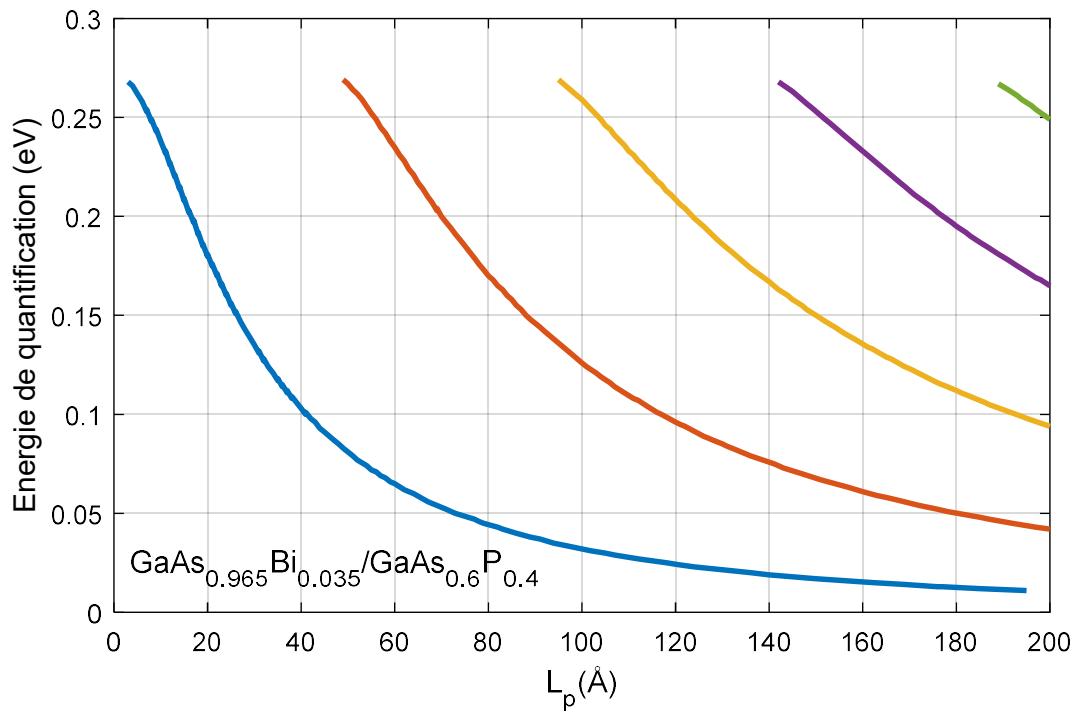


Figure 2.10. Variation de l'énergie de quantification des électrons de la structure $\text{GaAs}_{0.965}\text{Bi}_{0.035}/\text{GaAs}_{0.6}\text{P}_{0.4}$.

2.10. Absorption intersousbandes

La figure 2.11 illustre comment le coefficient d'absorption intersousbande évolue selon la longueur d'onde d'émission pour différentes concentrations de bismuth dans le puits quantique GaAsBi/GaAsP d'une largeur de 60 Å, avec une concentration de phosphore $y=0.3$. Lorsqu'on accroît la concentration de Bi, on observe une réduction de l'absorption ainsi qu'un décalage de la longueur d'onde d'émission vers des longueurs d'onde plus courtes.

La figure 2.12 illustre comment le coefficient d'absorption intersousbande évolue selon la longueur d'onde d'émission pour différentes concentrations de phosphore dans le puits quantique GaAsBi/GaAsP d'une largeur de 60 Å, avec une concentration de bismuth $x=0.025$. Lorsqu'on accroît la concentration de P, on observe une réduction de l'absorption ainsi qu'un décalage de la longueur d'onde d'émission vers des longueurs d'onde plus courtes.

Il est conseillé de réduire les niveaux de Bi et de P pour obtenir des valeurs maximales du coefficient d'absorption.

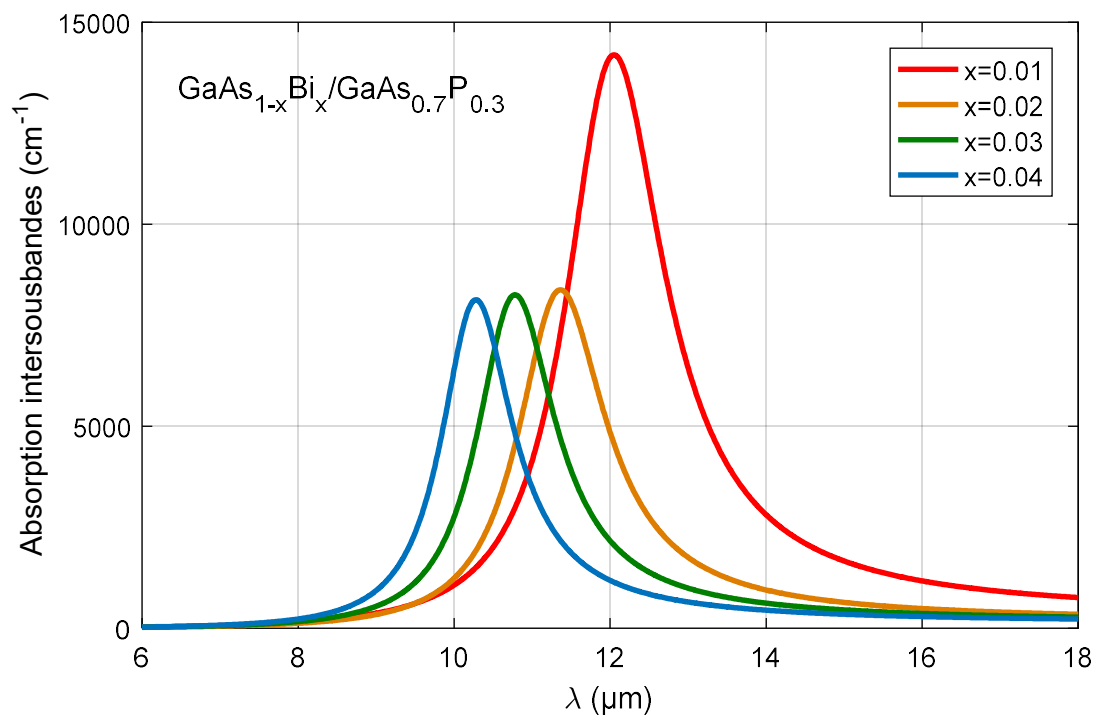


Figure 2.11. Variation du coefficient d'absorption intersousbandes en fonction de λ pour différentes concentrations de bismuth ($L_p=60\text{\AA}$), $y=0.3$.

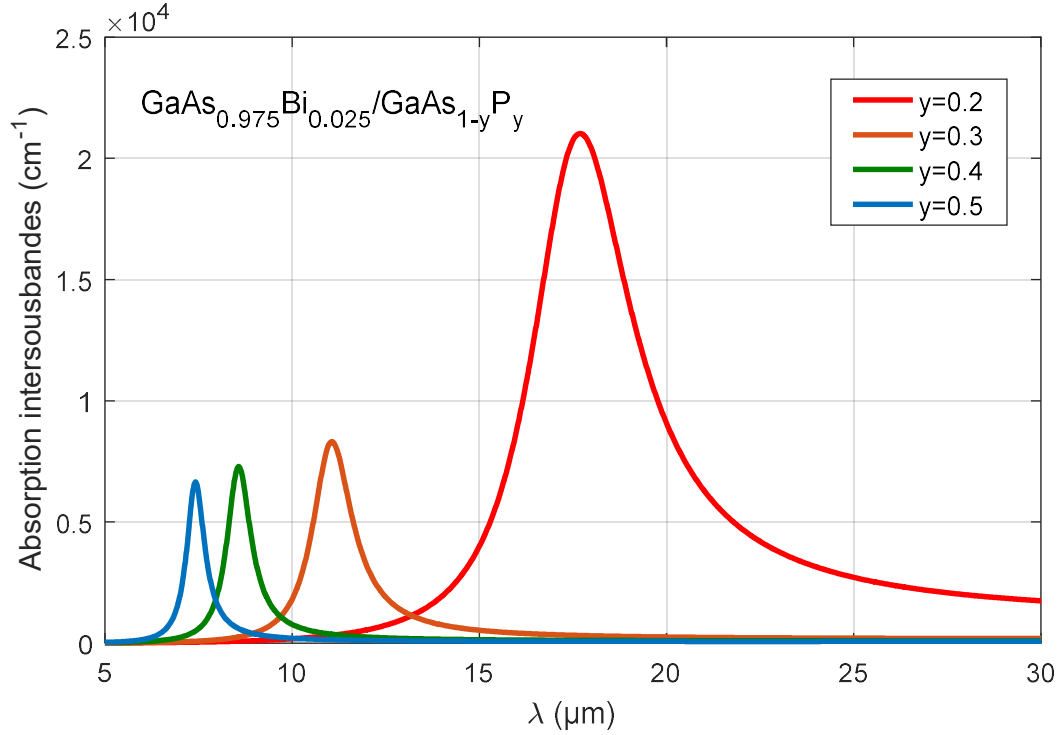


Figure 2.12. Variation du coefficient d'absorption intersousbandes en fonction de λ pour différentes concentrations de phosphore ($L_p=60\text{\AA}$), $x=0.025$.

2.11. Conclusion

Nous avons présenté une étude théorique des transitions intersousbandes au sein de la bande de conduction d'un puits quantique GaAsBi/GaAsP. Les facteurs qui déterminent le confinement quantique sont influencés par plusieurs éléments, notamment la masse effective et la discontinuité de potentiel dans la bande de conduction ΔE_c . De plus, nous avons observé que pour accroître le coefficient d'absorption, il est nécessaire de réduire la concentration de bismuth dans le matériau puits GaAsBi ainsi que celle de phosphore dans le matériau barrière, qui est le GaAsP. Par ailleurs, la longueur d'onde associée peut être ajustée dans la gamme de l'infrarouge en fonction des besoins spécifiques de l'application.

Conclusion générale

Les éléments semiconducteurs constituent le fondement essentiel de la microélectronique et de l'optoélectronique, permettant la création de composants tels que les transistors, les diodes électroluminescentes, les lasers semiconducteurs, les capteurs et les panneaux photovoltaïques.

Par conséquent, ces éléments revêtent une importance essentielle dans l'économie actuelle, en particulier pour les secteurs de la microélectronique et de l'énergie solaire. Malgré leur impact considérable, les semiconducteurs restent enveloppés de nombreux mystères et restent un domaine de recherche très dynamique.

L'exploration d'autres types de matériaux ouvre une large gamme d'investigations sur des matériaux innovants, compacts et rapides. Le but de cette étude est d'analyser les caractéristiques optoélectroniques de la structure à puits quantiques confinés en GaAsBi/GaAsP, en se concentrant sur les transitions intersousbandes au sein de la bande de conduction.

L'incorporation de Bi dans le matériau de puits GaAsBi entraîne une élévation du paramètre de maille de cet alliage, ainsi qu'une augmentation de la contrainte et du décalage spin-orbite. Cependant, elle cause également une réduction de l'énergie de gap et de la masse effective des électrons dans la bande de conduction.

Concernant l'effet de la concentration de phosphore dans le substrat GaAsP, une hausse de cette concentration provoque une diminution du paramètre de maille et de l'énergie de spin-orbite, mais entraîne également une augmentation de la compression, ainsi que de l'énergie de la bande interdite et de la masse effective des électrons présents dans la bande de conduction. L'augmentation des niveaux de ces deux composants entraîne un accroissement du décalage de la bande de conduction dans cette architecture.

L'intégration de bismuth contribue à un accroissement du nombre de niveaux énergétiques dans la bande de conduction et l'énergie de quantification augmente. Une hausse de la concentration de phosphore dans le substrat entraînera une augmentation du nombre de niveaux énergétiques ainsi que l'énergie de quantification. Lorsque la quantité de Bi augmente, cela mène à une diminution de l'absorption ainsi qu'un déplacement vers des longueurs d'onde plus courtes pour l'émission.

Cette tendance est similaire lorsque l'on modifie la concentration de phosphore. En augmentant la proportion de P, nous avons observé également une baisse de l'absorption et un déplacement de l'émission vers des longueurs d'onde plus courtes.

Il est recommandé de diminuer les concentrations de Bi et de P pour atteindre des valeurs optimales du coefficient d'absorption.

Les références

- [1] K. Souane, «Etudes ab-initio des propriétés électronique et optique des semiconducteurs III-V: Application au composé de GaAs », Thèse de Master, Université de Mostaganem, Algérie, 2015.
- [2] M. Azza, E. Chahid, A. Hmairrou, R. Abdia, M. Tridane, A. Malaoui, S. Belaaouad, «Numerical Simulation of p-i-n GaAs Photovoltaic Cell Using SCAPS-1D », Biointerface research in applied chemistry, Vol. 13, 253 (1/12), 2023.
- [3] P. vennegues, « Propriétés structurales de films de semi-conducteurs wurtzite hétéroépitaxiés selon des orientations non- et semi-polaires », Thèse de doctorat, Université Nice-Sophia Antipolis, France, 2009.
- [4] M. Hugues, "Croissance par épitaxie", thèse de doctorat, Université de Nice Sophia Antipolis, France, 2007.
- [5] D.V. Morgan and K. Boar, "An introduction to semiconductor technology", 2nd edition, John Wiley & sons, 1990
- [6] www.sigmaaldrich.com/DZ/en/applications/materials-science-and-engineering/chemical-vapor-deposition
- [7] J.M Bethoux, “Relaxation des contraintes dans les hétérostructures épaisses (Al,Ga)N : une piste originale pour la réalisation de diodes électroluminescentes à cavité résonante", Thèse de doctorat, Université de Nice Sophia-Antipolis, France, 2004.
- [8] J. W. Matthews et A. E. Blakeslee, “Defects in epitaxial multilayers. I. Misfit dislocations”, Journal of Crystal Growth, vol 27, p. 118-125, 1974.
- [9] N. K. Dutta, G.P.Agrawal, “Semi-conductor lasers”, Springer US, p 616, 1993

[10] F. Lévy, « physique et technologie des semiconducteurs », Vol. 18, Presses polytechnique, 1995.

[11] H. Machahadani, « Transitions intersousbandes dans les puits quantiques GaN/AlN du proche infrarouge au THz », Thèse de doctorat, université Paris-sud 11, France, 2011.

[12] S. Adachi, « III-V Ternary and Quaternary Compounds », Springer Handbook of Electronic and Photonic Materials, 725-741, 2017.

[13] I. Saiah Dahmane et D. Smail Mohamed, « Etude et simulation d'une structure à base de $\text{GaBi}_{1-x}\text{N}_x/\text{GaBi}$ », Thèse de Master, Université de Blida 1, Algérie, 2016.