

الجمهورية الجزائرية الديمقراطية الشعبية
République Algérienne démocratique et populaire

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

جامعة سعد دحلب البلدة
Université SAAD DAHLAB de BLIDA

كلية التكنولوجيا
Faculté de Technologie

قسم الإلكترونيك
Département d'Électronique



Mémoire de Master

Filière TÉLÉCOMMUNICATION
Spécialité RÉSEAUX ET TÉLÉCOMMUNICATION

présenté par
MEKHELFI ILHEM
&
LAGOUG IMENE

ETUDE ET SIMULATION D'UNE STRUCTURE A PUIFS QUANTIQUE GaNAsBi/InP POUR DES SYSTÈMES DES COMMUNICATIONS OPTIQUES DE 1,3 & 1,55 μm

Promoteur:

M^r Aissat Abdelkader

Co-promotrice :

M^{me}. Chenini Lynda

Année Universitaire 2019-2020

Remerciements

On tient en premier lieu à remercier le bon Dieu pour la bénédiction de la science et de la raison, pour le courage, la patience et la force durant toute notre vie et notre parcours d'étude.

On remercie très sincèrement le professeur à l'université de Saad Dahlab Blida, M^r Aissat. Abdelkader, En tant que promoteur de mémoire de fin d'étude, et de nous avoir encadrées, et de nous avoir permis de travailler dans de très bonnes conditions, qu'il trouve ici, l'expression de notre haute considération et de notre profond respect.

On exprime toute notre reconnaissance et nos particuliers remerciements à notre Co-promotrice, M^{me} Chenini Lynda, qui nous a permis de réaliser ce travail, pour son suivi permanent, ses conseils, ses lectures attentives. On a beaucoup apprécié son enthousiasme pour la recherche et la physique. Elle nous a largement fait profiter de son expérience dans le domaine des matériaux. Les échanges que nous avons pu avoir avec elle ont été très enrichissants. Elle a assuré l'encadrement au quotidien du mémoire.

On adresse nos sincères remerciements à tous les professeurs, tout au long de notre parcours universitaire, particulièrement M^r M. Bensebti, et également toutes les personnes qui par leurs paroles, leurs écrits, leurs conseils et leurs critiques ont guidé notre réflexion.

Enfin, on remercie nos très chères familles, pour leur amour, confiance et leur soutien à la fois moral et économique, ainsi qu'à des personnes très chers à nos yeux pour leur patience et pour leur s'incère amour.

Dédicaces

À mes chers parents, pour tous leurs sacrifices, leur amour, leur tendresse, leur soutien et leurs prières tout au long de mes études.

À mes chères sœurs Mouna et Nihad pour leurs encouragements permanents, et leur soutien moral.

À mes chers frères Ahmed que Dieu soit avec lui et Khair-Eddine pour leur appui et leur encouragement.

À mon adorable nièce Tasnim, ma boule d'amour qui est devenue en si peu de temps mon grand espoir dans ma vie que Dieu la protège.

À toutes mes amies, pour leur soutien tout au long de mon parcours universitaire.

Que ce travail soit l'accomplissement de vos vœux tant allégués, et le fruit de votre soutien infallible.

Merci d'être toujours là pour moi.

Mekhelfi Ilhem

Dédicaces

Ce résultat, fruit de cinq années d'études, d'efforts pour lesquelles Je dédie ce modeste travail :

- ❖ À mes très chers parents pour tous leurs sacrifices qu'ils ont consentis pour me permettre de faire mes études dans les meilleures conditions possibles, leur amour, leur tendresse, leur soutien et leurs prières tout au long de mes études, J'espère qu'ils trouvent dans ce travail toute ma reconnaissance et tout mon amour.*
- ❖ À mes adorables sœurs Soumia et Roumaïssa, pour leurs encouragements permanents et leur soutien moral. Je leur souhaite une belle vie pleine de joie et d'amour.*
 - ❖ À tous les membres de ma famille.*
- ❖ À mon binôme Ilhem pour ses efforts, son soutien et sa motivation.*
 - ❖ Ainsi mes chers amis et collègues.*
- ❖ À tous ceux qui m'ont aidé dans mon travail de près ou de loin.*

Merci d'être toujours là pour moi.

LAGOUG Imene

ملخص

يهدف هذا العمل إلى دراسة و محاكاة بنية بئر كمومي GaNAsBi / InP خصوصاً تقييم تأثير دمج النيتروجين (N) و البيسموث (Bi) على بنية النطاق و الكسب البصري باستخدام نموذج مضاد تقاطع النطاق (BAC).

أولاً، سنحدد الخواص الفيزيائية والهيكلية للمواد III-V، لصنع سبيكة رباعية لبنية البئر الكمومي GaNAsBi/InP، ثم ندرس تأثير دمج تركيز منخفض من النيتروجين و البيسموث في السبيكة الرباعية. يؤدي دمج البيسموث إلى تقسيم نطاق التكافؤ إلى نطاقين فرعيين وينطبق الشيء نفسه على دمج النيتروجين الذي يتسبب في انقسام نطاق التوصيل إلى نطاقين فرعيين. ميزة هذا التأثير هي التسبب في انخفاض ملحوظ في فجوة النطاق، الحصول على أقصى مكسب بصري وكذلك تغيير طول موجة البث من أجل الوصول إلى أطوال موجات البث القابلة للاستغلال من قبل الألياف البصرية 1.33 و 1.55 μm للاتصالات.

الكلمات الرئيسية: أشباه الموصلات; أبار الكم; GaNAsBi; BAC

Résumé

Ce travail porte sur l'étude et la simulation d'une structure à puits quantique GaNAsBi/InP. Il s'agit plus précisément d'évaluer l'influence de l'incorporation d'azote 'N' et de bismuth 'Bi' sur la structure de bandes et le gain optique en utilisant le modèle anticrossing des bandes (BAC).

En premier lieu, on va définir les propriétés physiques et structurales des matériaux III-V, pour en faire un alliage quaternaire d'une structure à puits quantique, ensuite, on étudie l'effet de l'incorporation d'une faible concentration d'azote et du bismuth dans l'alliage quaternaire GaNAsBi. L'incorporation du bismuth provoque l'éclatement de la bande de valence en deux sous bandes. Il en est de même pour l'incorporation d'azote qui provoque un éclatement de la bande de conduction en deux sous bandes. L'avantage de cet effet est de provoquer une réduction remarquable de la bande interdite, et obtenir un maximum de gain optique ainsi que de varier la longueur d'onde d'émission afin d'atteindre les longueurs d'onde d'émission exploitables par les fibres optiques 1.33 et 1.55 μm pour la télécommunication.

Mots clés : Semiconducteurs III-V ; puits quantiques ; GaNAsBi; BAC.

Abstract

This work concerns the study and simulation of a GaNAsBi / InP quantum well structure. More precisely, it is a question of evaluating the influence of incorporation of nitrogen 'N' and bismuth 'Bi' on the band structure and the optical gain using the band anticrossing model (BAC).

First, we will define the physical and structural properties of III-V materials, to make a quaternary alloy of a quantum well structure, and then we study the effect of incorporating a low concentration of nitrogen and bismuth in the GaNAsBi quaternary alloy. The incorporation of bismuth causes the splitting of the valence band into two subbands. It will be the same for the incorporation of nitrogen, which causes the splitting of the conduction band into two subbands. The advantage of this effect is to cause a remarkable reduction of the band gap, obtain maximum optical gain as well as to vary the emission wavelength in order to reach the emission wavelengths exploitable by the 1.33 and 1.55 μm optical fibers for telecommunications.

Keywords: III-V semiconductors; quantum wells; GaNAsBi; BAC.

Table des matières

<u>Introduction Générale</u>	1
<u>Chapitre 1 : Généralités</u>	
<u>1.1 Introduction</u>	3
1.2 Définition du semi-conducteur.....	3
1.3 La structure cristalline	6
1.4 Semi-conducteur intrinsèque et extrinsèque.....	9
1.5 La Structure des bandes d'énergie électronique	9
1.6 Semi-conducteur à gap direct et indirect	12
1.7 L'épitaxie.....	13
1.8 Epaisseur critique.....	14
1.9 La contrainte	15
1.10 Structure à puits quantique	17
1.11 Taux de confinement Q_c et Q_v	22
1.12 Niveaux d'énergies dans les puits quantiques.....	22
Conclusion	24
Chapitre 2 : Etude d'une structure à puits quantique à base de GaAsNBi/InP	
2.1 Introduction	25
2.2. Propriétés optoélectroniques.....	25
2.2.1. Paramètre de maille	26
2.2.2. La contrainte	27
2.2.3. L'énergie de la bande interdite	29
2.2.4. La masse effective	31
2.2.5. Les alignements des bandes	33
2.2.6. Taux de confinement Q_c et Q_v	36
2.2.7 Le gain optique	38
Conclusion	43
Conclusion Générale et perspectives	44

Liste des figures

Chapitre1 : Généralités

Figure 1.1 : Tableau de Mendeleïev.....	4
Figure 1.2 : Les réseaux des structures cristallines	7
Figure 1.3 : Structure « Zinc Blende ».....	8
Figure 1.4 : La structure « Wurtzite ».....	8
Figure 1.5: Structure de bande d'énergie.....	9
Figure 1.6 : Les énergies de bande d'isolant, semi-conducteur et conducteur.....	10
Figure 1.7 : Evolution de l'énergie de bande interdite et du paramètre cristallin des alliages des composés III-V....	11
Figure 1.8: (a) semiconducteur à gap direct, (b) semiconducteur à gap indirect.....	12
Figure 1.9: Bâti d'épitaxie par jet moléculaire.....	13
Figure 1.10 : Banc d'épitaxie en phase vapeur.....	14
Figure 1.11 : Schéma (a) montrant une couche sans dislocation, (b) schéma montrant la dislocation de la couche.....	15
Figure 1.12 : Croissance épitaxiale d'une couche contrainte en tension/compression et non contrainte.....	16
Figure 1.13 : Diagramme de puits quantiques en 3D	17
Figure 1.14: Diagramme de bandes d'énergie d'une hétérostructure semiconductrice.....	18
Figure 1.15 : Puits quantique type I.....	20
Figure 1.16 : Puits quantique type II.....	21
Figure 1.17 : Puits quantique type III.....	21
Figure 1.18 : Structure des niveaux énergétiques dans un puits quantique.....	23

Chapitre 2 : Etude d'une structure à puits quantique à base de GaAsNBi/InP.

Figure 2.1: Schéma de la structure à puits quantique GaAsNBi/InP.....	25
Figure 2.2 : Variation du paramètre de maille de GaNAsBi en fonction de la concentration de N et Bi.....	27
Figure 2. 3 : Variation de la contrainte en fonction des concentrations (N) et (Bi) de la structure $\text{GaN}_x\text{As}_{1-x-y}\text{Bi}_y/\text{InP}$	28
Figure 2.4: l'état des bandes d'énergie dans la structure $\text{GaN}_x\text{As}_{1-x-y}\text{Bi}_y/\text{InP}$ avant (1) et après éclatement (2)	30
Figure 2 .5: variation d'énergie de bande interdite en fonction des concentrations (N) et (Bi) de la structure $\text{GaN}_x\text{As}_{1-x-y}\text{Bi}_y/\text{InP}$	31
Figure 2.6: Variation de la masse effective en fonction des concentrations (N) et (Bi) de la structure $\text{GaN}_x\text{As}_{1-x-y}\text{Bi}_y/\text{InP}$	32
Figure 2 .7 : Schéma du décalage des bandes ΔE_c et ΔE_v dans la structure à puits quantique $\text{GaN}_x\text{As}_{1-x-y}\text{Bi}_y/\text{InP}$	33
Figure 2.8: Variation de décalage de bande ΔE_c en fonction de la concentration de bismuth (Bi) et l'azote (N).....	35
Figure 2.9: Variation de décalage de bande ΔE_v en fonction de la concentration de bismuth (Bi) et l'azote(N).....	35
Figure 2. 10 : Variation de Q_c en fonction de la concentration de l'azote (N) et le bismuth (Bi).....	37
Figure 2. 11 : Variation de Q_v en fonction de la concentration de l'azote(N) et le bismuth (Bi).....	37
Figure 2.12: Variation du gain optique en fonction de la longueur d'onde (λ) pour différentes valeurs d'injections. 39	39
Figure 2.13: Variation du gain optique en fonction de la longueur d'onde (λ) pour différentes largeur du puits.	39
Figure 2.14 : Variation du gain optique en fonction de la longueur d'onde (λ) pour différentes valeurs de concentration de bismuth.....	40
Figure 2.15 : Variation du gain optique en fonction de la longueur d'onde (λ) pour différentes valeurs d'azote.....	41
Figure 2.16 : Variation de la longueur d'onde (λ) en fonction de la concentration	

d'azote pour la structure $\text{GaN}_x\text{As}_{0.95-x}\text{Bi}_{0.05}$	42
Figure 2.17: Variation de la longueur d'onde (λ) en fonction de concentration du bismuth pour la structure $\text{GaN}_{0.025}\text{As}_{0.975-y}\text{Bi}_y$	42

Liste des tableaux

Tableau 1.1 : Propriétés des principaux composés binaires III-V.....	5
Tableau 1.2 : Applications commerciales pour les dispositifs optoélectroniques	6
Tableau 2.1 : Paramètre de maille des matériaux binaires GaN, GaAs et GaBi	26

Liste des abréviations

a_e	Paramètre de maille du matériau épitaxié
a_s	Paramètre de maille du substrat
BAC	Band anticrossing model
BC	Bande de conduction
BI	Bande interdite
BV	Bande de valence
C	Célérité de la lumière
C_{Bi}	Terme de couplage.
C_N	Terme de couplage.
Δ_0	Energie du couplage spin-orbite.
ΔE_c	Discontinuité de la bande de conduction
ΔE_v	Discontinuité de la bande de valence
ϵ_0	La permittivité du vide
e	La charge de l'électron
E_{Bi}	État d'impureté résonant avec la bande de valence du GaAs
E_c	L'énergie de la bande de conduction
E_{c+}	Sous-bande de conduction +
E_{c-}	Sous-bande de conduction –
E_g	Energie de gap
E_i	Energie de niveau d'énergie i
E_{ij}	Energie de transition
E_j	Energie de transition d'un niveau j
E_N	État d'impureté résonant avec la bande de conduction du GaAs

E_{ne}	Niveaux d'énergies des porteurs électrons
E_{nhh}	Niveaux d'énergies des porteurs trous lourds
E_{nlh}	Niveaux d'énergies des porteurs trous légers
E_v	L'énergie de la bande de valence
$E_{v,av}$	Energie moyenne de la bande de valence.
E_{v+}	Sous-bande de Valence +
E_{v-}	Sous-bande de Valence –
F_c, F_v	Les fonctions de Fermi
$h\nu$	Energie du photon
\hbar	La constante réduite de Planck
k	Constante de Boltzmann
K	Vecteur d'onde
L_p	La largeur de puits quantique
λ	Longueur d'onde
m_0	La masse de l'électron
MBE	Molecular beam Epitaxy
n_{eff}	L'indice de réfraction relatif du matériau
PQ	Puits quantique
Q_c	Taux de confinement dans la bande de conduction
Q_v	Taux de confinement dans la bande de valence
SC	Semi-conducteur
T	Température.
WZ	Wurtzite
ZB	Zinc blende

Introduction générale

Le besoin accru en rapidité, efficacité et faible consommation d'énergie avec des coûts réduits, dans le domaine des télécommunications et des nouvelles technologies, a révolutionné le monde des semiconducteurs en motivant la recherche afin de développer et d'améliorer les dispositifs existants. Les matériaux III-V sont la clé de voûte de l'optoélectronique et du photovoltaïque à haut rendement. La recherche d'alliages toujours plus performants a motivé l'exploration des combinaisons des matériaux. Pour cela les composés semi-conducteurs III-V sont préférables car ils sont dotés d'une forte mobilité électronique et une bande interdite directe permettant l'émission de lumière.

Les semiconducteurs à base de nitrure dilué III-N-V ont suscité beaucoup d'intérêt marqué par de très nombreuses recherches dans les années 1990 et 2000, en raison de leurs propriétés électroniques remarquables induite par l'incorporation de l'azote (N). En effet, l'introduction de seulement 1% de N provoque une diminution de l'énergie de bande interdite d'environ 150 meV, due à une forte perturbation des états de conduction. Les matériaux nitrures sont aussi utilisés afin d'obtenir des structures à faible résistance thermique et une haute réflectivité [1].

Cependant, l'incorporation de bismuth (Bi) en substitution de l'arsenic a ouvert la voie à la famille des bismures dilués, dont les propriétés électroniques singulières permettent d'envisager un large champ d'applications [1].

Nous nous intéressons dans ce mémoire à l'étude de la structure à puits quantique GaNAsBi/InP. L'attrait s'explique par les propriétés remarquables de cet alliage. Effectivement, lorsqu'une petite fraction d'azote est ajoutée aux matrices des semiconducteurs III-V conventionnels, à savoir l'arséniure de gallium (GaAs), nous obtenons une largeur de bande interdite inférieure à celle de GaAs, d'où l'intérêt pour des applications dans le domaine de l'optoélectronique et télécommunication tels que les diodes lasers émettant à 1,3 et 1,55 μm . Ce mémoire est donc organisé de la manière suivante:

Le premier chapitre présente les semiconducteurs III-V et a pour but d'apporter les notions fondamentales ainsi que leurs caractéristiques et propriétés physiques et électroniques, il contient des définitions sur les composés d'alliages possibles: (binaire,

ternaire, quaternaire) et la structure cristalline, la notion de la structure de bande, d'énergie de gap, ainsi les différentes techniques d'épitaxie et aussi certaines propriétés importantes comme l'épaisseur critique, la contrainte, les alignements de bande...etc.

Le dernier chapitre se compose de deux parties. Dans la première partie, nous allons présenter et interpréter les résultats obtenus par simulation de la structure à puits quantique GaNAsBi/InP afin de déterminer les effets de la composition de l'azote (N) et du bismuth (Bi) sur les propriétés structurales et électroniques tel que: le paramètre de maille, la bande interdite (gap) ainsi que les alignements des bandes et les offset ratios Q_c et Q_v , la masse effective...etc.

Dans la deuxième partie, nous allons vérifier ces effets sur le gain optique et enfin nous concluons le mémoire par une conclusion générale

Chapitre 1 : Généralités

1.1. Introduction :

Dans l'ensemble des matériaux, les semi-conducteurs III-V constituent une classe bien définie à cause de leurs propriétés physiques particulières qui sont sources d'intérêt au plan de la connaissance fondamentale et à celui des applications. Ces deux facteurs indissociables font l'importance de ces matériaux, malgré le nombre limité d'éléments et de composés semi-conducteurs.

Principalement remarquables par leurs propriétés électroniques, les semi-conducteurs III-V interviennent dans presque tous les équipements électriques et optiques en électronique rapide et en optoélectronique, dans les domaines radiofréquences et hyper fréquences, applications militaires et spatiales [2].

On citera pour exemple quelques composés binaires: GaAs, InP, ... et ternaires: GaAlAs, InGaAs, ...etc. Les propriétés de ces matériaux sont très intéressantes pour les performances de ces dispositifs. Les composés semi-conducteurs III-V sont préférables que d'autres matériaux, si on prend le silicium comme exemple, les propriétés de ce dernier sont insuffisantes en termes de mobilité des porteurs relativement petite ainsi que les transitions électroniques indirectes.

1.2. Définition du semi-conducteur :

Les semi-conducteurs III-V, sont des matériaux composés d'un ou plusieurs éléments de la colonne III et la colonne V du tableau périodique. La figure 1.1 regroupe l'ensemble de cette classification (les chiffres en haut et bas représentent respectivement, le nombre atomique et la masse atomique), voici le tableau périodique de Mendeleïev.

Le tableau de Mendeleïev est présenté avec des couleurs correspondant à des groupes d'éléments :

- Alkali Metal** (Métaux alcalins) : 1A, 2A
- Alkaline Earth** (Terres alcalines) : 3A, 4A, 5A, 6A, 7A
- Transition Metal** (Métaux de transition) : 3B à 10B
- Basic Metal** (Métaux basiques) : 11B, 12B
- Semimetals** (Sémi-conducteurs) : 13A, 14A, 15A, 16A, 17A
- Nonmetals** (Non-métaux) : 18A
- Halogens** (Halogènes) : 17A
- Noble Gas** (Gaz nobles) : 18A
- Lanthanides** (Lanthanides) : Série des lanthanides (57-71)
- Actinides** (Actinides) : Série des actinides (89-103)

Figure 1.1 : Tableau de Mendeleïev [3]

1.2.1. Les alliages des semi-conducteurs III-V :

A partir des éléments cités dans le tableau périodique, on peut former les semi-conducteurs composés suivants :

- Binaire.
- Ternaire.
- Quaternaire.

1.2.1.1 Les composés binaires :

Les composés binaires possibles n'ont pas tous le même intérêt potentiel. L'étude de leurs propriétés, et en particulier de la structure de bande montre que les éléments les plus légers donnent des composés dont laquelle la bande interdite est large et indirecte et dont laquelle aussi la masse effective des électrons est élevée.

Les composés contenant du bore, de l'aluminium ou de l'azote entrent dans cette catégorie, ils ont en général peu d'intérêt pour l'électronique rapide [4], qui demande des semi-conducteurs à forte mobilité de porteurs ou pour l'optoélectronique où une structure de bande directe est nécessaire pour que les transitions optiques soient efficaces [4].

A l'autre extrémité, les éléments lourds comme le thallium ou le bismuth donnent des composés à base de Galium (GaAs, GaSb) ou d'indium (InP, InAs, InSb) dont les propriétés sont les plus intéressantes. Le tableau 1.1 résume quelques paramètres pour différents matériaux de la famille III-V [5].

Tableau 1.1: Propriétés des principaux composés binaires III-V [5].

Composés binaires III - V	E_g (eV)	A (Å)	Structure de bande
AIP	2.45	5.4510	Indirecte
AIAs	2.16	5.6622	Indirecte
Alsb	1.58	6.1335	Indirecte
BN	7.5	3.6150	Indirecte
BP	2.0	4.5380	Indirecte
GaP	2.26	5.4512	Indirecte
GaAs	1.42	5.6532	Directe
GaSb	0.73	6.0959	Directe
InP	1.35	5.8688	Directe
InAs	0.36	6.0584	Directe
InSb	0.17	6.4794	Directe

1.2.1.2. Les composés ternaires :

Pour obtenir un alliage ternaire, on doit substituer partiellement l'un des éléments III ou V par un élément de la même colonne tels que $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ ou $\text{InP}_y\text{As}_{1-y}$. avec x et y des coefficients stœchiométriques qui varient entre 0 et 1.

1.2.1.3. Les composés quaternaires :

Ce type d'alliage fait intervenir quatre composés binaires AC, AD, BC et BD, ces alliages ont la forme : $\text{A}_x\text{B}_{1-x}\text{C}_y\text{D}_{1-y}$, par exemple : $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{In}_y\text{P}_{1-y}$, $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}$. Le tableau 1.2 représente les matériaux semi-conducteurs III-V importants pour l'optoélectronique et leurs applications [5].

Tableau 1.2 : Applications commerciales pour les dispositifs optoélectroniques [5].

Matériaux	Dispositifs	Application
GaAs	Détecteurs, LEDs, infrarouges, lasers	Télécommande de TV, communication par fibre optique
InP	Cellules solaires	Pour les satellites (cellules solaires spatiales)
InP/InGaP	LED infrarouge, laser	Communication par fibre optique
InGaAs	Détecteurs (1-1,67 μm)	Communication par fibre optique
InGaAlAs	Détecteurs (1,67 μm -2,4 μm)	Application militaire, médecine
GaSb / InSb	Détecteurs de grande onde	Image infrarouge, application militaire

1.3 La structure cristalline :

La plupart des semi-conducteurs se cristallisent selon un système cubique, Ce dernier comprend trois (03) réseaux différents. La figure 1.2 montre les trois réseaux, selon la disposition des atomes :

- ❖ Cubique simple (CS) : les atomes sont aux sommets du cube.
- ❖ Cubique centré (CC) : identique au cubique simple mais avec un atome au centre du cube.
- ❖ Cubique face centrée (CFC) : ayant un atome au centre de chaque face du cube.

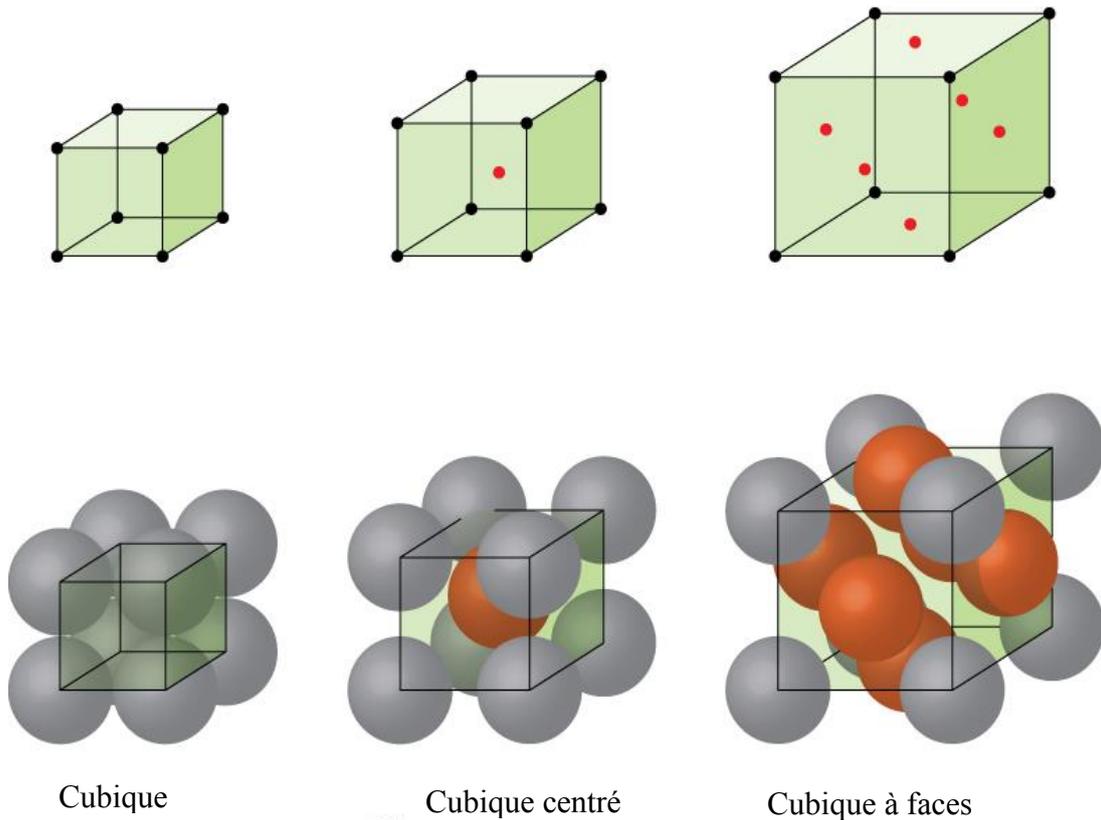


Figure 1.2 : les réseaux des structures cristallines.

1.3.1. Structure Zinc blende :

En général les semi-conducteurs III-V existent sous la forme cristallographique « Zinc Blende », cette structure s'apparente à celle du diamant et elle est constituée de deux sous-réseaux cubiques à faces centrées, l'un étant formé par les éléments de la colonne III et l'autre par les éléments de la colonne V, décalé l'un par rapport à l'autre du quart de la diagonale principale, elle est constituée de deux sous-réseaux à l'autre le

long de la diagonale du cube ,c'est-à-dire $a\sqrt{3}/4$, d'une quantité $(a_0/4, a_0/4, a_0/4)$, a_0 étant le paramètre cristallin, c'est-à-dire la longueur de l'arête du cube élémentaire . La figure 1.3 illustre la structure de Zinc blende.

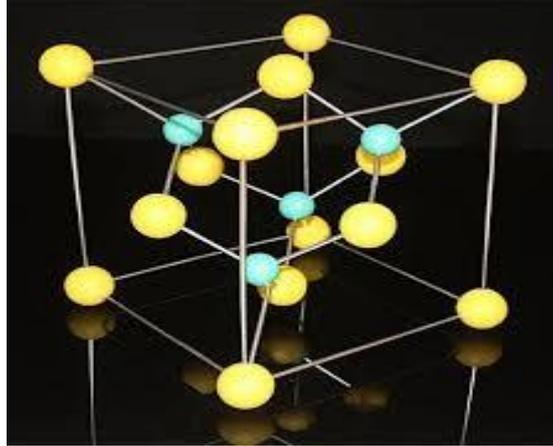


Figure 1.3: structure « Zinc Blende » [6].

1.3.2. Structure Wurtzite :

Concernant la structure Wurtzite illustrée sur la figure 1.4 Cette structure est constituée de deux réseaux de Bravais hexagonaux, c'est la structure la plus stable, ce qui est bien car tout système physique cherche à avoir la stabilité.

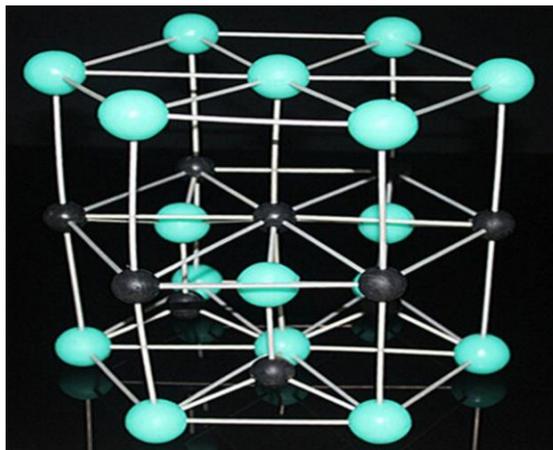


Figure 1.4: La structure « Wurtzite » [6].

1.4. Semi-conducteur intrinsèque et extrinsèque :

On distingue deux types de semi-conducteurs :

- ❖ Sc naturel (intrinsèque).
- ❖ Sc dopé (extrinsèque).

1.4.1. Semi-conducteur intrinsèque :

Seule l'agitation thermique provoque le passage des électrons de la bande de valence (BV) à la bande de conduction (BC) ce qui mène à l'augmentation de la conductivité en fonction de la température.

1.4.2. Semi-conducteur extrinsèque :

Ce type est obtenu en introduisant des impuretés par le dopage de type p (Positive) ou de type n (Négative), qui va augmenter la conductivité des semi-conducteurs intrinsèques, dont les porteurs libres (électron e trou) introduisant une bande d'énergie supplémentaire dans la bande interdite du semi-conducteur à un niveau accepteur ou donneur selon le type de dopage p (accepteur) ou n (donneur).

1.5. La Structure des bandes d'énergie électronique :

Les bandes d'énergie donnent les états d'énergie possibles pour les électrons en fonction de leur vecteur d'onde. On les représente donc dans l'espace réciproque, et pour simplifier, dans les directions de plus hautes symétries de la première zone de Brillouin. Elles se décomposent en une bande plus basse qui est la bande de valence et une bande plus haute qui est la bande de conduction (Figure 1.5).

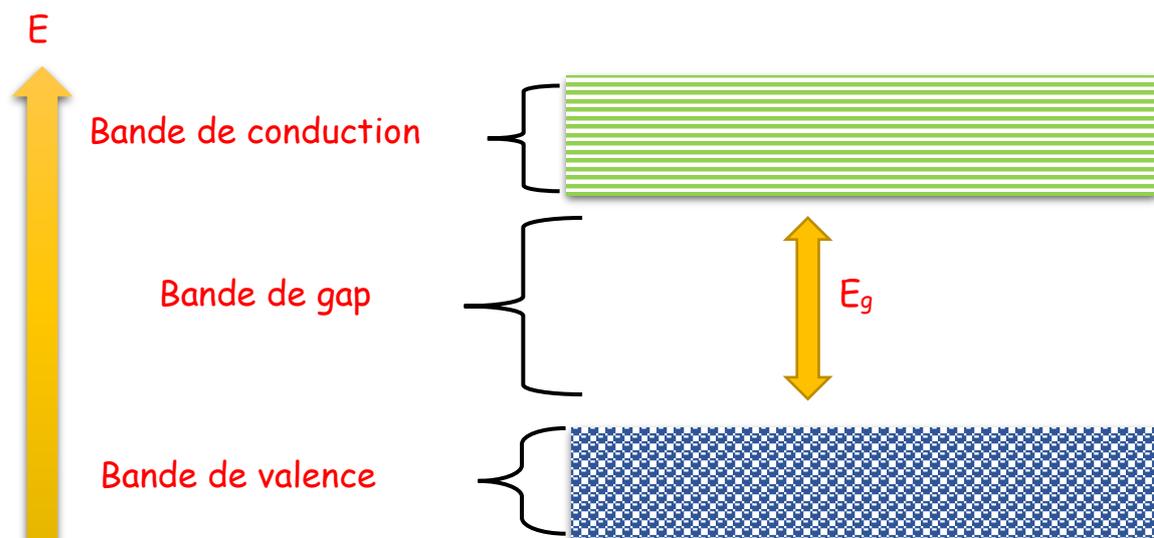


Figure 1.5: Structure de bande d'énergie.

Un semi-conducteur est un matériau qui présente une conductivité intermédiaire entre celle des métaux (conducteurs) et des isolants. À $T=0K$, les semi-conducteurs se comportent comme des isolants, alors qu'à $T=300K$, ils se comportent comme des conducteurs.

La bande interdite qui sépare les deux bandes décrites précédemment détermine principalement les propriétés de transport dans le semi-conducteur tel que l'on peut voir sur la figure 1.6

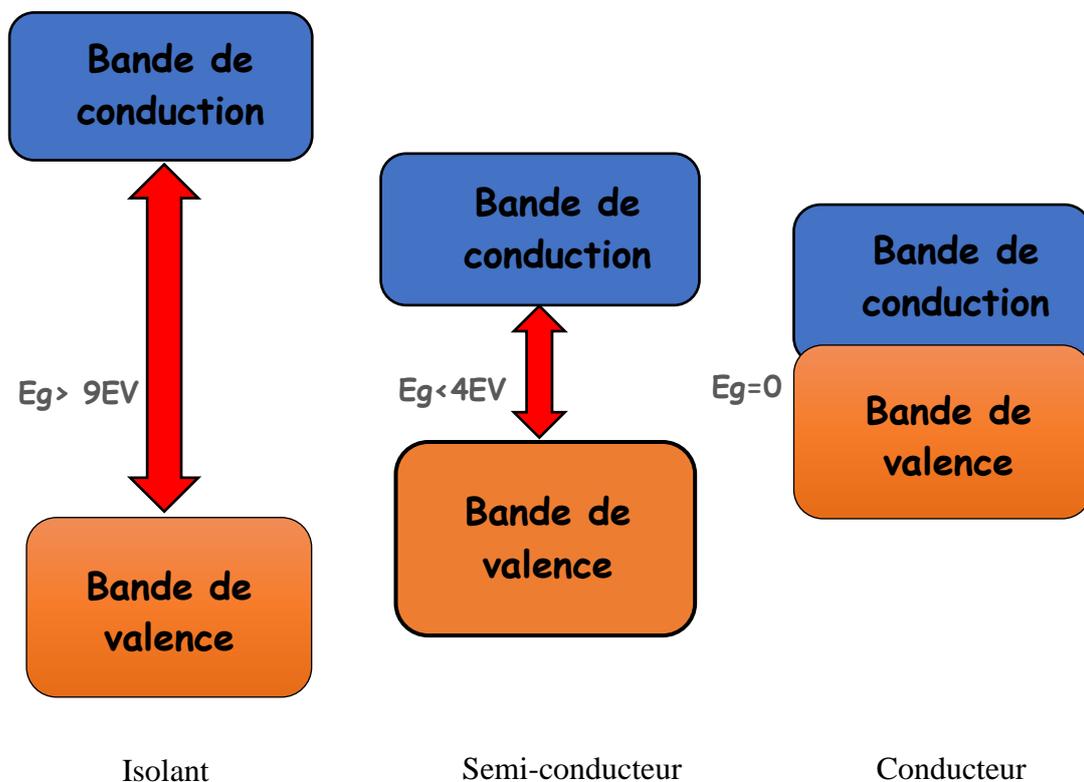


Figure 1.6: Les énergies de bande d'isolant, semi-conducteur et conducteur.

1.5.1. Energie de bande interdite :

Le terme de gap apparaît dans le cadre de la physique des semi-conducteurs. Il existe une bande d'énergie entre la BV et la BC où il n'existe aucun état électronique. Cette bande s'appelle la bande interdite ou énergie de gap, notée E_g . Contrairement au cas des isolants, la bande interdite des semi-conducteurs est suffisamment étroite pour permettre à un nombre d'électrons important d'être excités thermiquement de la BV à la BC à température ambiante.

La variation de l'énergie de bande interdite en fonction du paramètre cristallin a qui varie lui-même avec la composition est représentée sur le diagramme de la figure 1.7. Les points sur le graphe désignent la position des composés binaires stœchiométriques et les lignes représentent l'évolution du gap E_g et du paramètre cristallin a en fonction de la composition des alliages ternaires.

Certaines lignes présentent un point anguleux qui dénote une transition entre un gap direct et un gap indirect. Ce diagramme est donc très important parce qu'il permet de connaître la composition de tout alliage ternaire susceptible d'être déposé en couche mince, par épitaxie, sur un substrat binaire comme le GaAs ou l'InP [7].

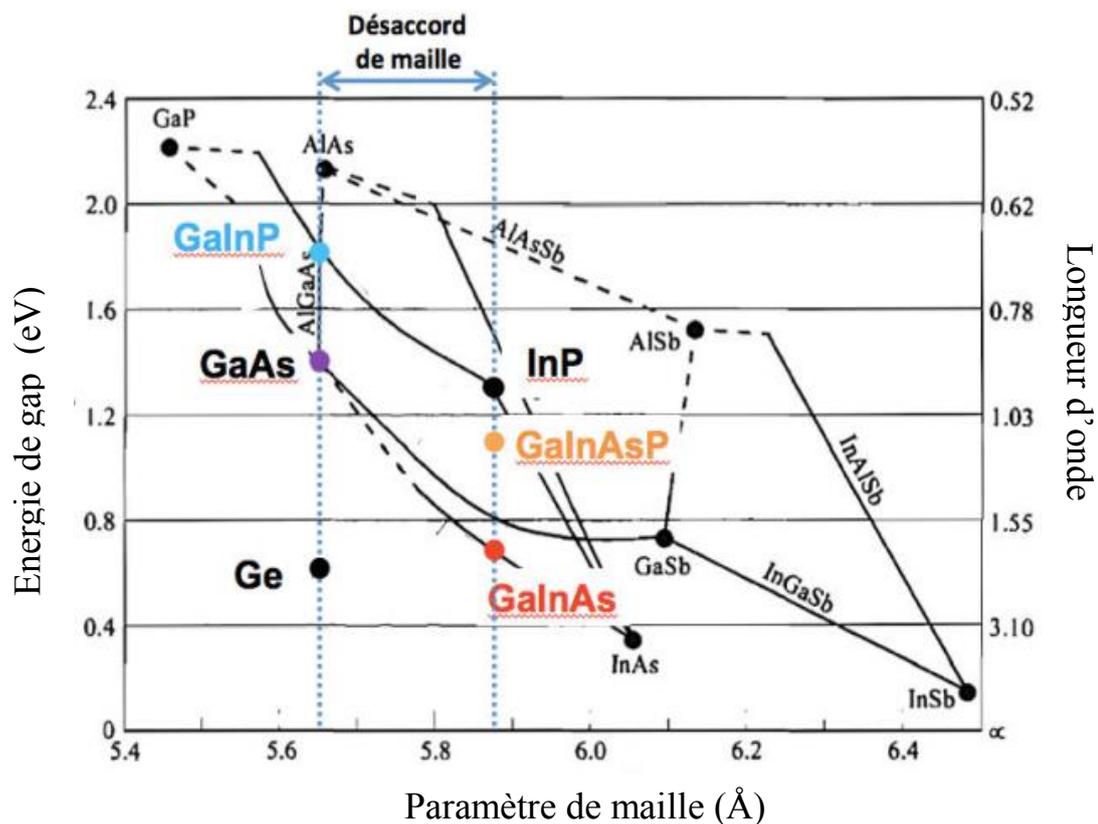


Figure 1.7 : Evolution de l'énergie de bande interdite et du paramètre cristallin des alliages des composés III-V [7].

1.6. Semi-conducteur à gap direct et indirect :

1.6.1. Semi-conducteur à gap direct :

Un semi-conducteur est à gap direct si le maximum de la bande de valence et le minimum de la bande de conduction peuvent correspondre au même vecteur d'onde k voir la figure 1.8. a.

1.6.2. Semi-conducteur à gap indirect :

Un semi-conducteur est à gap indirect si le maximum de la bande de valence et le minimum de la bande de conduction ne correspondent pas au même vecteur d'onde k , voir la figure 1.8b). La distinction entre les semi-conducteurs à gap direct et indirect est très importante, notamment dans les processus radiatifs. Les processus d'absorption ou d'émission sont considérablement plus importants dans les semi-conducteurs à gap direct que dans les semi-conducteurs à gap indirect [8].

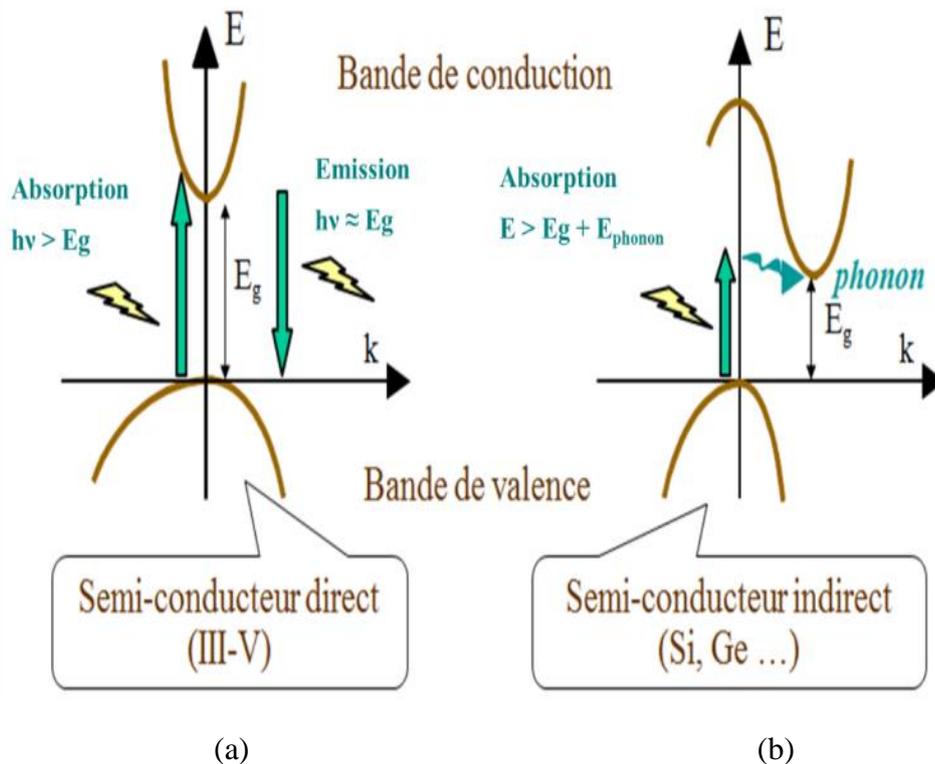


Figure 1.8 : (a) semiconducteur à gap direct, (b) semiconducteur à gap indirect [8].

On remarque, que dans un semi-conducteur à gap direct un électron du haut de la BV qui acquière une énergie E_g passe dans la BC sans changer de quantité de mouvement, ce qui n'est pas le cas dans un semi-conducteur à gap indirect.

1.7. L'épitaxie :

Le terme épitaxie signifie en grec épi « par-dessus » et taxie « ordre ». L'épitaxie est utilisée pour faire croître des couches minces, de quelques nanomètres d'épaisseur. Pour cela des atomes sont déposés sur la surface parfaitement polie d'un monocristal, le substrat. Ce dernier est choisi de façon à avoir des paramètres de maille proches de ceux du cristal qu'on souhaite obtenir.

1.7. 1. L'épitaxie par jet moléculaire (EJM):

Connue en anglais sous le nom de Molecular Beam Epitaxy (MBE), est une technique consistant à envoyer un ou plusieurs jets moléculaires vers un substrat préalablement choisis pour réaliser une croissance épitaxiale. Elle permet de faire croître des échantillons nano structurés de plusieurs cm^2 à une vitesse d'environ une monocouche atomique par seconde (voir figure 1.9).

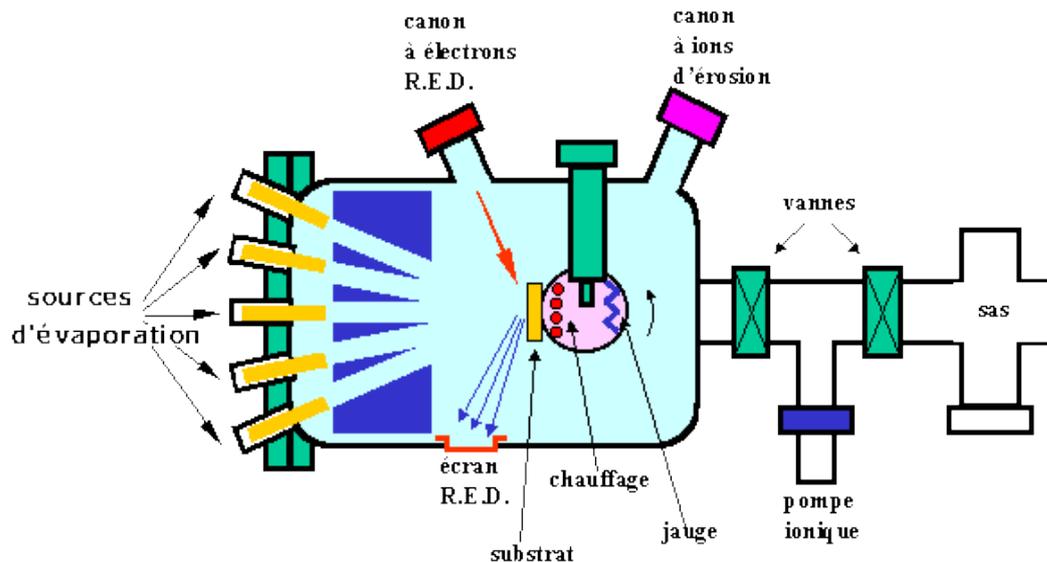


Figure 1.9: Bâti d'épitaxie par jet moléculaire [9].

1.7. 2. L'épitaxie en phase vapeur (VPE ou CVD) :

Cette opération consiste à faire croître le cristal à partir des sources de gaz contenant les éléments dopants. Dans le réacteur, les gaz se dissocient pour fournir par exemple le silicium qui se dépose à la surface des plaquettes. Pour assurer une bonne croissance ces dernières sont chauffées. Les réactions mises en jeu sont très différentes et elles peuvent même conduire à des effets négatifs. Il faudra donc aussi contrôler les équilibres chimiques par injections de gaz résultant de la décomposition de la source. La figure 1.10 donne un aperçu sur un banc d'épithaxie en phase vapeur.

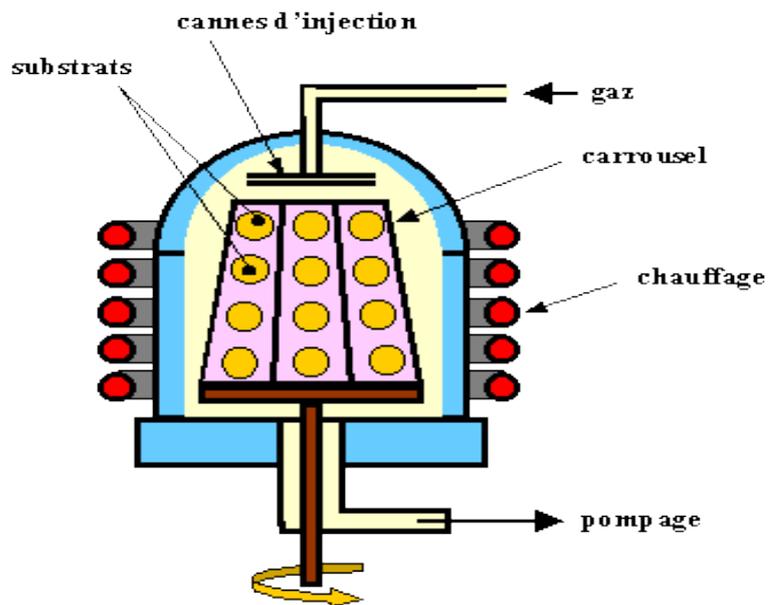


Figure 1.10 : Banc d'épithaxie en phase vapeur [9].

1.8. Épaisseur critique :

L'épaisseur critique, représente la valeur maximale de l'épaisseur de la couche épithaxiée qu'on ne doit pas dépasser lors du dépôt, Cela veut dire qu'au-delà de cette épaisseur correspond à la situation où l'énergie élastique est suffisante pour créer un réseau de dislocation qui affecte la qualité cristalline du matériau tel que l'on peut voir sur la figure 1.11. La croissance parfaite d'une hétéro-épithaxie n'est possible que si l'épaisseur de la couche épithaxiée ne dépasse pas l'épaisseur critique.

- ✚ A : Couche épitaxiée ;
- ✚ B : Couche substrat;
- ✚ X : Relaxation de la couche;
- ✚ Y : Propagation de la dislocation.

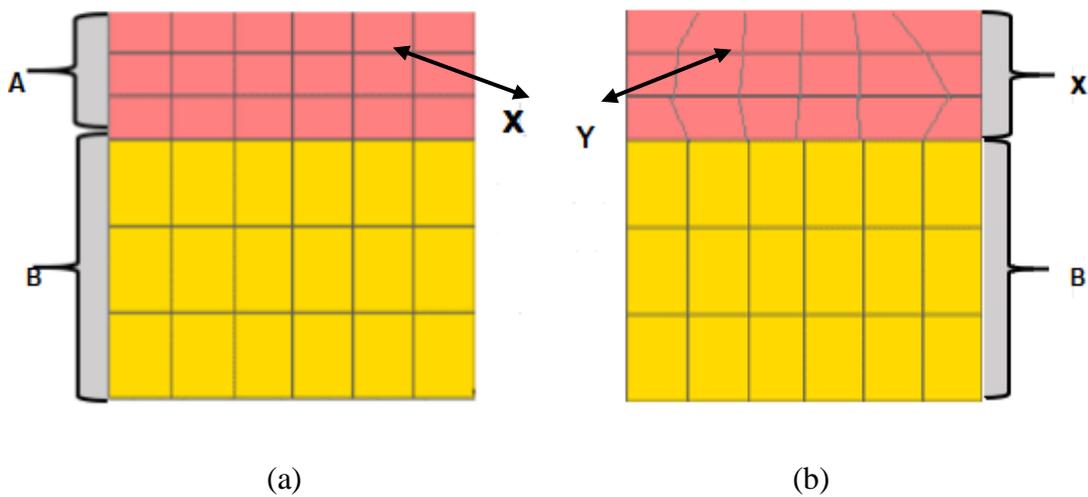


Figure 1.11: Schéma (a) montrant une couche sans dislocation, (b) schéma montrant la dislocation de la couche.

1.9. La contrainte :

La contrainte est un effort qui implique une déformation, une rupture, ou un désaccord paramétrique générée lorsque l'on fait croître deux semi-conducteurs l'un sur l'autre, et que les deux matériaux constituant le substrat et la couche active ont la même structure cristalline ainsi que des paramètres de maille différents comme le montre la figure (1.12).

En effet, le matériau constituant la couche de plus grande épaisseur impose sa maille à l'autre au voisinage de l'interface, dans le cas où les couches épitaxiées sont suffisamment fines, la maille du matériau épitaxié se déforme de manière élastique dans la direction parallèle et perpendiculaire à la surface de croissance.

La constitution de la couche épitaxiée et celle du substrat se fait par la liaison de plusieurs mailles, considérons un substrat de paramètre de maille a_s et un matériau épitaxié de même structure ayant un paramètre de maille a_e .

Dans le cas où il n'y a pas de contrainte on a un accord de maille ($a_{e//} = a_s$), voir (figure 1.12). On distingue deux autres cas: si ($a_{e//} > a_s$) : dans ce cas, la maille se comprime pour adapter son paramètre de maille dans le plan parallèle, et s'allonge selon l'axe de croissance pour préserver son volume.

C'est la contrainte en compression, (figure 1.12). Si ($a_{e//} < a_s$): dans ce cas, la maille se dilate pour adapter son paramètre de maille dans le plan parallèle, et s'allonge selon l'axe de croissance pour préserver son volume. C'est la contrainte en tension, (figure 1.12).

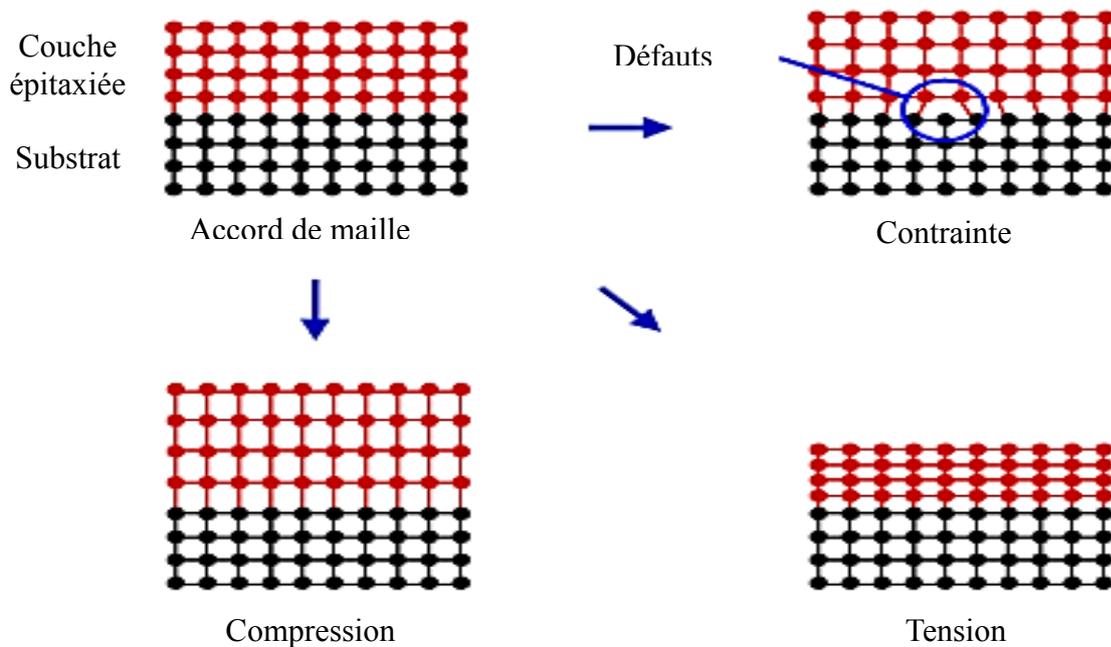


Figure 1.12 : Croissance épitaxiale d'une couche contrainte en tension/compression et non contrainte.

1.10. Structure à puits quantique :

Un puits quantique est une structure cristalline qui désigne une hétérostructure de semi-conducteurs. Il est obtenu en faisant croître une couche d'un matériau semi-conducteur A entre deux couches d'un autre matériau semi-conducteur B. Ce dernier a un gap d'énergie supérieur à celui du matériau A. La discontinuité entre les bandes

d'énergie dans les deux matériaux crée une barrière de potentiel qui confine les porteurs (électron et trou) dans le puits quantique.

La dénomination quantique intervient quand il y a confinement des porteurs, c'est-à-dire pour des épaisseurs de puits inférieures typiquement à 300 Å. La figure 1.13 montre un diagramme de puits en 3D.

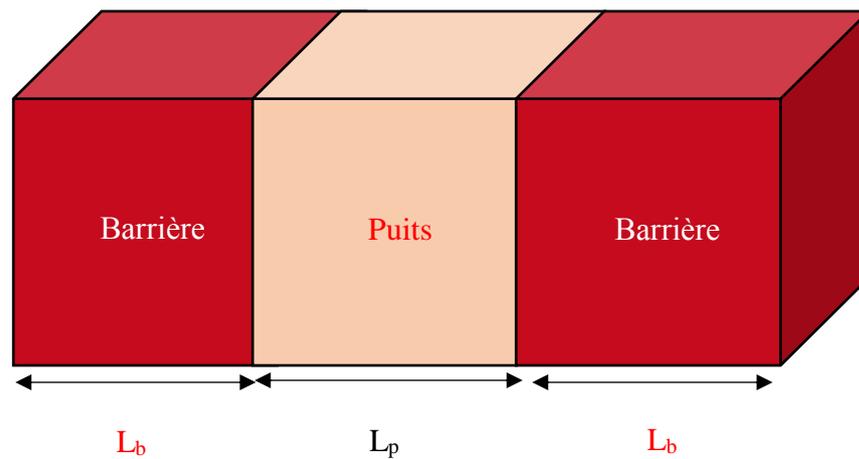


Figure 1.13 : Diagramme de puits quantiques en 3D.

Dans le puits quantique, il y a trois paramètres principaux qui peuvent modifier l'énergie de confinement :

- La largeur de puits quantique L_p .
- L'énergie de la bande de conduction ΔE_c .
- L'énergie de la bande de valence ΔE_v .

1.10.1. Les alignements des bandes :

Le décalage des bandes décrit l'alignement relatif des bandes d'énergie dans une hétérojonction semi-conductrice. Dans cette dernière, les bandes d'énergie des deux matériaux différents se rejoignent, conduisant à une interaction. Les deux structures de bande sont positionnées de manière discontinue l'une par rapport à l'autre, ce qui les amène à s'aligner près de l'interface. Cet alignement relatif des bandes d'énergie au niveau de ces hétérojonctions semi-conductrices est appelé décalage de bande tel que l'on peut voir sur la figure 1.14.

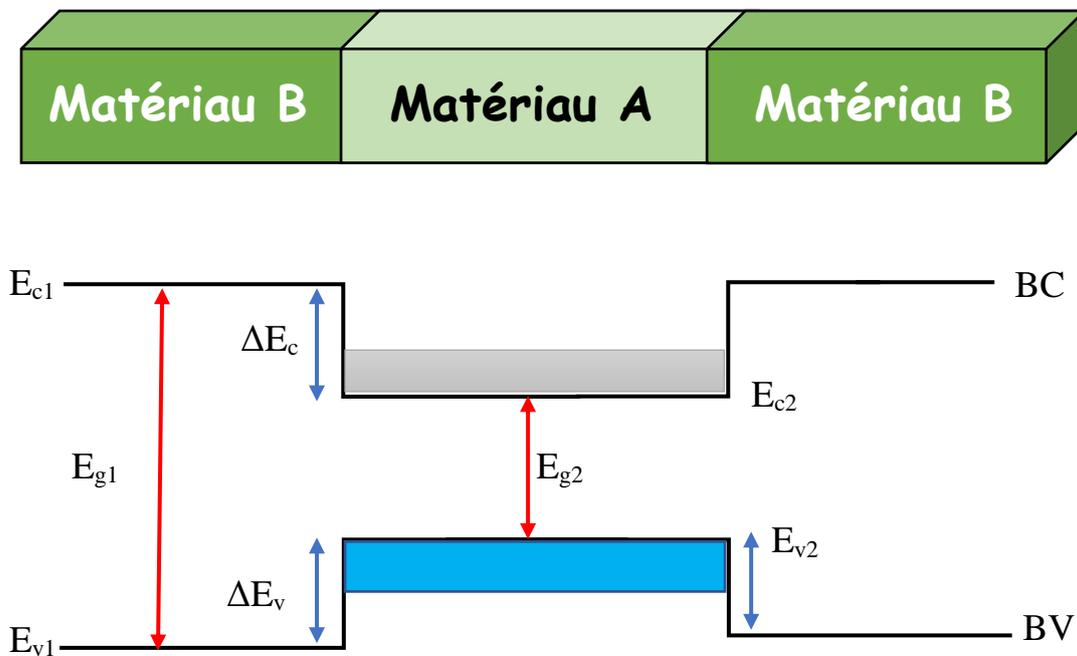


Figure 1.14: Diagramme de bandes d'énergie d'une hétérostructure semiconductrice.

- Band-offset ΔE_c : c'est la différence d'énergie qui sépare la bande de conduction du matériau B et celle de matériau A où la bande de conduction du matériau A est plus basse pour les électrons que celle de matériau B.

- Band-offset ΔE_v : c'est la différence d'énergie qui sépare la bande de valence du matériau A et celle du matériau B où la bande de valence du matériau B est plus basse pour les trous que celle du matériau A.

En conséquence, les électrons vont s'accumuler dans la bande de conduction de la couche du matériau A et les trous font de même dans la bande de valence de la couche du matériau A également. Le matériau A, joue le rôle d'une zone d'accumulation des électrons et des trous quant au matériau B, il joue le rôle de zone de déplétion pour les électrons et les trous.

1.10. 2. Les types de puits quantique:

Selon la nature de la discontinuité des bandes interdites à l'interface Puits/barrière, on distingue trois types de puits quantiques :

1.10.2.1. Puits quantique type I :

Les électrons et les trous sont confinés dans le même matériau constituant le puits illustré sur la figure 1.15. L'énergie du photon émis dépend des énergies de confinement des porteurs et du gap du matériau puits. Les conditions générales pour obtenir une hétérostructure de type I sont comme suit :

- Condition 1 : $E_{g1} > E_{g2}$
- Condition 2 : $e\chi_1 < e\chi_2$
- Condition 3 : $e\chi_1 + E_{g1} > e\chi_2 + E_{g2}$

Où : - E_{g1} est l'énergie de la bande interdite du matériau A qui forme la barrière de potentiel.

- E_{g2} est le gap du matériau B qui forme le puits quantique.

- $e\chi_1$ est l'affinité électronique du matériau A.

- $e\chi_2$ est l'affinité électronique du matériau B.

La principale propriété de l'hétérostructure de type I c'est que les transitions électroniques entre les états de bandes de valence et de conduction sont des transitions

directes. Ceci découle directement du fait que les électrons et les trous sont confinés dans le même matériau qui forme le puits quantique.

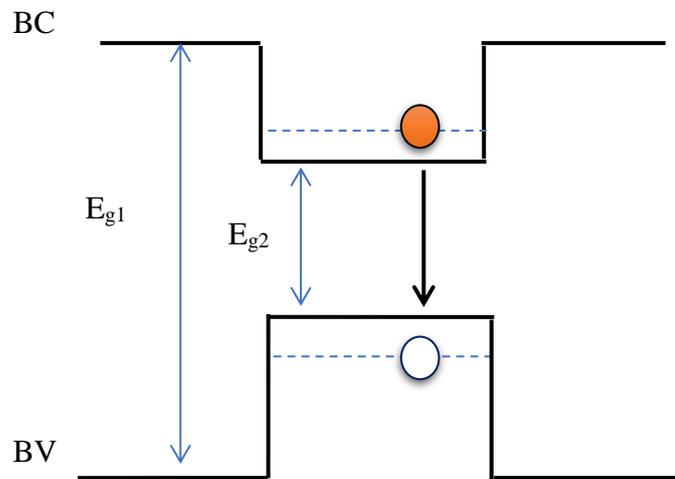


Figure 1.15 : Puits quantique type I.

1.10.2.2. Puits quantique type II :

Les électrons et les trous sont confinés séparément dans les deux matériaux puits et barrière respectivement tels que l'on peut voir sur la figure 1.16. Dans ce cas, l'énergie du photon dépend des énergies de confinement des porteurs mais aussi des gaps des deux matériaux formant l'hétérostructure.

- Le matériau SC_1 joue le rôle de puits quantique pour les électrons et de barrière de potentiel pour les trous.
- Le matériau SC_2 joue le rôle de puits quantique pour les trous et de barrière de potentiel pour les électrons.

Cette hétérostructure de type II diffère fondamentalement de celle de type I, en dans le sens que les électrons et les trous ne sont pas confinés au même endroit et donc il y aura une conséquence importante : les transitions seront indirectes, en particulier, les transitions optiques.

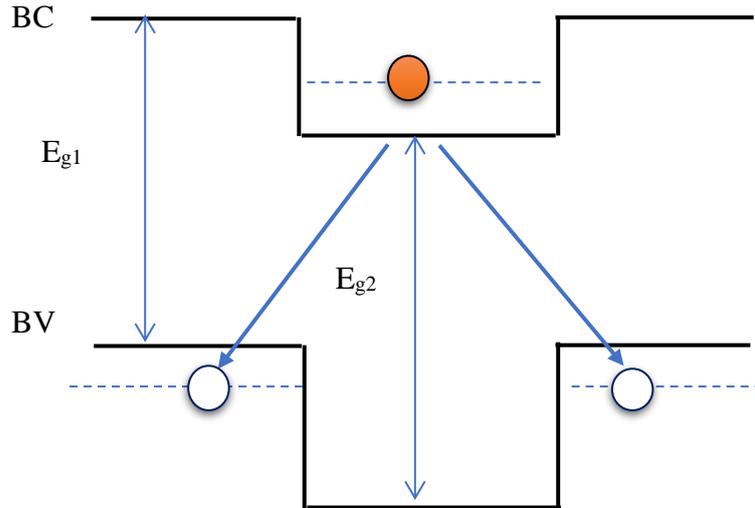


Figure 1.16 : Puits quantique type II.

1.10.2.3. Puits quantique de type III :

C'est un cas particulier du type II, lorsque la bande de conduction du Semi-conducteur 1 «SC₁ » a une énergie inférieure à celle de la bande de valence du semi-conducteur 2 «SC₂ ». On dit qu'on a une structure à "gap brisé en anglais "Broken gap". Il en résulte une structure typique à celle de la figure 1.17 où les électrons confinés dans le puits d'électrons SC₁ sont en face des trous confinés dans le puits des trous SC₂. Les conséquences sont :

- Absence totale de toute transition directe interbande dans ce type d'hétérostructures
- Même les transitions indirectes sont éteintes.

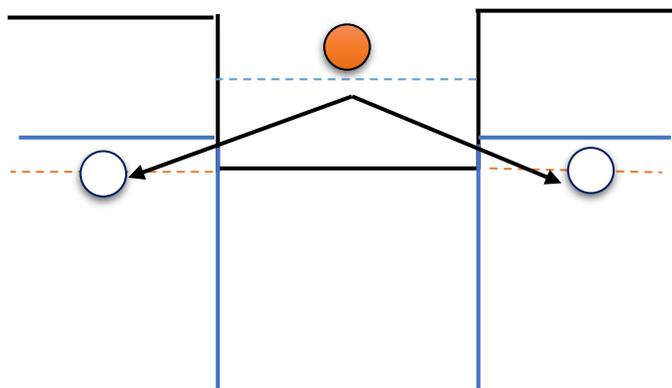


Figure 1.17 : Puits quantique type III.

1.11. Taux de confinement Q_c et Q_v :

Pour un matériau optoélectronique bien conçu, la structure et la forme de son alignement de bande est un facteur important. L'alignement des bandes comme nous l'avons vu, est défini par la discontinuité des bandes entre la couche active et la barrière et la distribution de cette discontinuité sur les bandes relatives.

La discontinuité distribuée des bandes de conduction et de valence. En accord avec la théorie du modèle solide de Van der Waals, les rapports des décalages des bandes de la bande de conduction et celle de valence, notés respectivement, Q_c et Q_v sont déterminés respectivement par les fractions de discontinuités de $\Delta E_c/\Delta E_g$ et $\Delta E_v/\Delta E_g$.

1.12. Niveaux d'énergies dans les puits quantiques :

Il y a des niveaux d'énergie possibles pour les électrons dans la bande de conduction et d'autres niveaux pour les trous dans la bande de valence (voir figure 1.18).

En principe, des transitions sont possibles entre les différents niveaux de la bande de conduction et de la bande de valence pour l'émission ou pour l'absorption de la lumière.

Ces transitions sont régies par des règles de sélections quantiques associées aux symétries des fonctions d'ondes. Il existe trois niveaux d'énergie dans un semi-conducteur à puits quantiques :

- ✚ niveaux d'énergies des porteurs électrons (E_{ne}).
- ✚ niveaux d'énergies des porteurs trous lourds (E_{nhh}).
- ✚ niveaux d'énergies des porteurs trous légers (E_{nlh}).

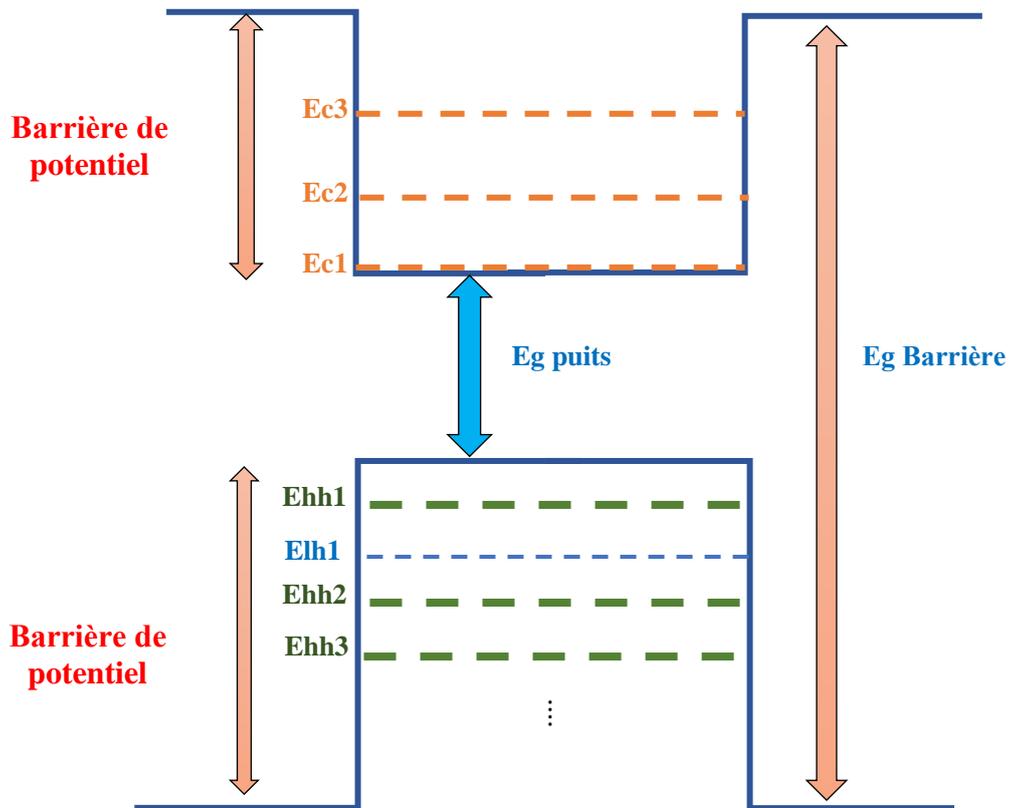


Figure 1.18 : Structure des niveaux énergétiques dans un puits quantique.

Dans un puits quantique, les porteurs de charge sont confinés à des niveaux énergétiques différents, pour définir ces valeurs propres d'énergie, on étudie le comportement d'une particule confinée dans un puits de potentiel unidimensionnel et d'une largeur L_p selon la direction de l'axe x . L'équation de Schrödinger indépendante du temps peut être écrite [10].

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2\varphi(x)}{dx^2} + V(x)\varphi(x) = E\varphi(x) \quad (1.1)$$

Avec :

- \hbar : Constante de Planck.
- m^* : La masse de la particule.
- $\varphi(x)$: La fonction d'onde.
- $V(x)$: Fonction décrivant le potentiel pour chaque valeur de x .
- E : L'énergie de quantification.

L'équation de Schrödinger prévoit en effet que l'énergie de la particule évoluant dans un tel puits est quantifiée. L'étude de puits quantiques de forme variée (puits carré, puits harmonique, couplage entre deux puits voisins, ...) fait partie intégrante de l'apprentissage de la mécanique quantique.

Conclusion :

Dans ce chapitre, on a abordé d'une façon générale quelques notions fondamentales sur les matériaux semi-conducteurs, plus précisément sur les semi-conducteurs III-V, qui nous intéressent vu leurs caractéristiques et propriétés physiques et électroniques particulières, commençant par définir leurs composés d'alliages possibles : (binaire, ternaire, quaternaire) et la structure cristalline.

Nous avons présenté par la suite la notation de la structure de bande d'énergie de gap, ainsi les différentes techniques d'épitaxie et aussi certaines propriétés importantes comme l'épaisseur critique, la contrainte les alignements de bande...

On s'est intéressées aussi aux différents types de puits quantique et on a fini par décrire les niveaux énergétiques présents obtenus par la résolution l'équation de Schrödinger.

Chapitre 2 : Etude d'une structure à puits quantique à base de GaNAsBi/InP.

2.1. Introduction :

Le besoin accru en rapidité, efficacité et faible consommation d'énergie avec des coûts réduits, dans le domaine des télécommunications et des nouvelles technologies, a révolutionné le monde des semiconducteurs en motivant la recherche afin de développer et d'améliorer les dispositifs existants. La recherche d'alliages toujours plus performants a motivé l'exploration des combinaisons des matériaux III-V. L'incorporation de l'azote (N) et du bismuth (Bi) en substitution de l'arsenic a ouvert la voie à des propriétés électroniques et optiques singulières permettant ainsi d'envisager un large champ d'applications [1]. Dans l'ensemble de ce chapitre nous allons effectuer une étude théorique sur les propriétés optoélectroniques de la structure à puits quantique GaNAsBi/InP.

Dans la première partie, nous allons vérifier l'effet de la composition de l'azote (N) et du bismuth (Bi) sur le paramètre de maille, la bande interdite (gap) ainsi que les alignements des bandes et les taux de confinement Q_c et Q_v . Dans une deuxième partie, nous allons voir cet effet sur le gain optique.

2.2. Propriétés optoélectroniques:

La figure 2.1 nous montre la structure dont on va étudier.

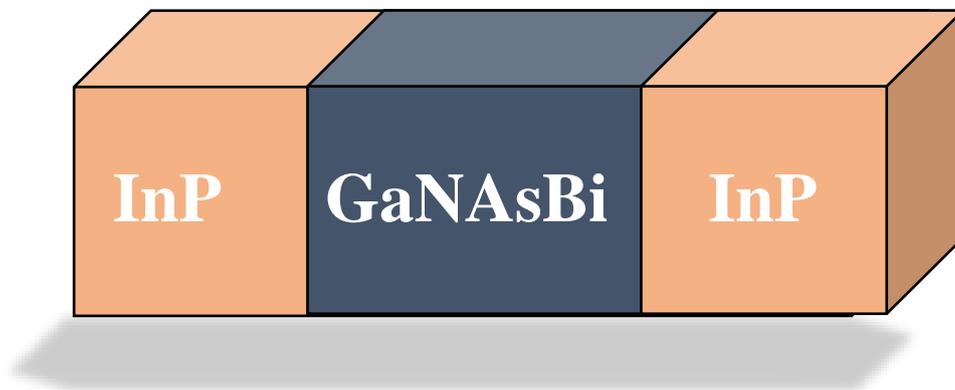


Figure 2.1: Schéma de la structure à puits quantique GaAsNBi/InP.

2.2.1. Paramètre de maille :

Le paramètre de maille se définit comme étant la distance séparant deux mailles consécutives. Lors de la réalisation d'alliages avec des semi-conducteurs différents, le paramètre de maille de l'alliage évolue linéairement en fonction de la composition des différents binaires qui le constituent [11].

Le paramètre de maille du matériau $\text{GaN}_x\text{As}_{1-x-y}\text{Bi}_y$, se définit par l'interpolation linéaire des paramètres binaires qui le composent à l'aide de loi de Végard [11].

Il sera défini par l'expression suivante :

$$P(x, y) = x.P(\text{GaN}) + y.P(\text{GaBi}) + (1 - x - y).P(\text{GaAs}). \quad (2.1)$$

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

Le tableau suivant donne le paramètre de maille des binaires des semi-conducteurs III-V : GaN, GaAs et GaBi utilisés dans ce travail.

Tableau 2.1 : Paramètre de maille des matériaux binaires GaN, GaAs et GaBi [11]

	GaAs	GaN	GaBi
a (Å)	5.6533	4.5111	6.2331

La figure (2.2) illustre la variation du paramètre de maille de l'alliage quaternaire $\text{GaN}_x\text{As}_{1-x-y}\text{Bi}_y$ en fonction des concentrations de l'azote (N) et du bismuth (Bi).

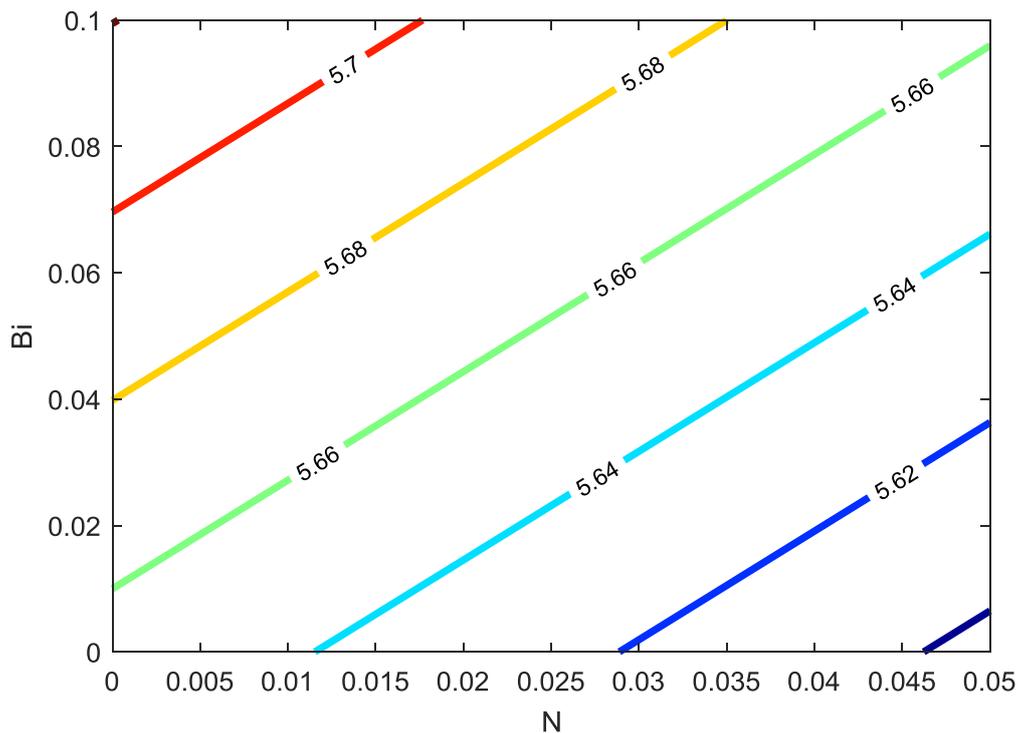


Figure 2.2 : Variation du paramètre de maille de GaNAsBi en fonction de la concentration de N et Bi.

On constate que le paramètre de maille croit en augmentant la concentration de bismuth (Bi), par contre l'augmentation de la concentration d'azote (N) diminue la valeur de ce dernier.

2.2.2. La contrainte :

L'épitaxie des matériaux désaccordés est devenue bien maîtrisée grâce aux progrès accomplis au niveau des techniques de croissance. Ainsi, l'accord de maille n'est plus un impératif, mieux encore les effets des contraintes sont d'une très grande utilité car l'utilisation d'hétérostructures contraintes permettra d'ajuster la longueur d'onde d'émission, et cela en modifiant les positions en énergie des bandes de valence et de conduction .

Dans notre travail, l'épitaxie du matériau $\text{GaN}_x\text{As}_{1-x-y}\text{Bi}_y$ sur un substrat InP, et vue la différence des valeurs des paramètres de mailles, provoque l'apparition de la contrainte.

Dans le plan de la couche, on aura une contrainte biaxiale :

$$\varepsilon_{//} = \frac{a_s - a_e}{a_e} \quad (2.2)$$

a_s est le paramètre de maille du substrat InP et a_e celui du matériau épitaxié GaN_xAs_{1-x-y}Bi_y.

Dans la direction de croissance, on aura une contrainte uniaxiale:

$$\varepsilon_{\perp} = -2 \cdot \frac{c_{12}}{c_{11}} \cdot \varepsilon_{//} \quad (2.3)$$

La figure 2.3 montre l'évolution de la contrainte en tension en fonction des concentrations de l'azote et du bismuth.

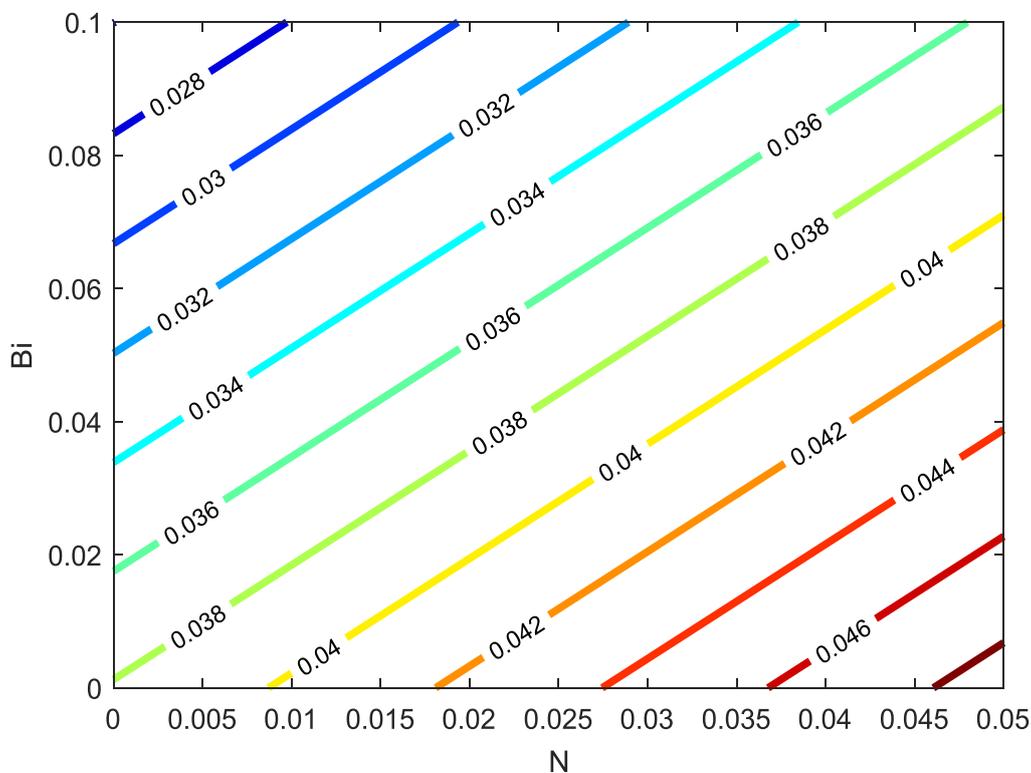


Figure 2. 3 : Variation de la contrainte en fonction des concentrations (N) et (Bi) de la structure GaN_xAs_{1-x-y}Bi_y/InP.

L'augmentation de la concentration d'azote (N) mène à une croissance de la valeur de la contrainte alors que d'autre part l'augmentation de Bi décroît cette dernière.

2.2.3. L'énergie de la bande interdite :

L'incorporation des atomes Bi et N dans le GaAs peut être modélisée en utilisant le modèle BAC (band anticrossing model) qui démontre que l'ajout d'atomes N en GaAs conduit à la création des états localisés conduisant à la génération des sous-bandes de conduction E_{c+} et E_{c-} .

Cela se produit par l'interaction entre le niveau de résonance de l'azote et la bande de conduction en raison de la grande différence dans l'électronégativité entre les atomes d'As et N [12].

L'introduction de Bi dans la matrice de GaAs induit une perturbation des états électroniques qui se répercute essentiellement dans la bande de valence. A l'instar de l'effet de l'azote sur la bande de conduction de GaAsN, l'introduction de bismuth modifiait les états de valence et l'éclate en deux sous bandes E_{v+} et E_{v-} [13]. Le maximum de la bande de valence est repoussé vers les hautes énergies, entraînant une diminution de E_g comme on peut le voir sur la figure 2.4. Les énergies des nouvelles bandes sont obtenues à partir des équations (2.4) et (2.5).

$$E_{c\pm} = \frac{1}{2} \left[E_N + E_c(GaAs) \pm \sqrt{(E_N + E_c(GaAs))^2 + 4C_N^2 x} \right] \quad (2.4)$$

$$E_{v\pm} = \frac{1}{2} \left[E_{Bi} + E_v(GaAs) \pm \sqrt{(E_{Bi} + E_v(GaAs))^2 + 4C_{Bi}^2 y} \right] \quad (2.5)$$

Où $E_N = 1.65 \text{ eV}$ et $E_{Bi} = -0.4 \text{ eV}$, sont respectivement les états d'impuretés résonants avec la bande de conduction et la bande de valence du GaAs, $C_N=2.7 \text{ eV}$ et $C_{Bi}=1.55 \text{ eV}$ sont des termes de couplage.

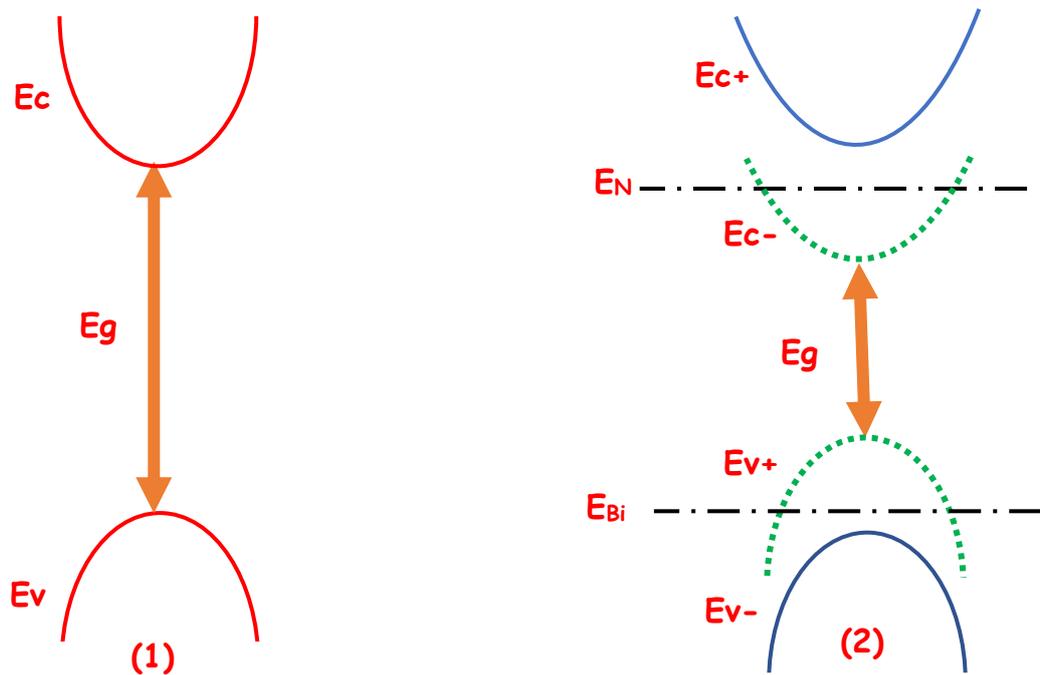


Figure 2.4: L'état des bandes d'énergie dans la structure $\text{GaN}_x\text{As}_{1-x-y}\text{Bi}_y/\text{InP}$ avant (1) et après éclatement (2).

La figure (2.5) suivante montre la variation de l'énergie de la bande interdite (gap) de la structure $\text{GaN}_x\text{As}_{1-x-y}\text{Bi}_y/\text{InP}$, avec l'incorporation simultanée des concentrations d'azote(N) et du bismuth (Bi).

On constate que l'introduction d'azote (N) et du Bismuth (Bi) à faibles quantités dans la structure diminue l'énergie de la bande interdite.

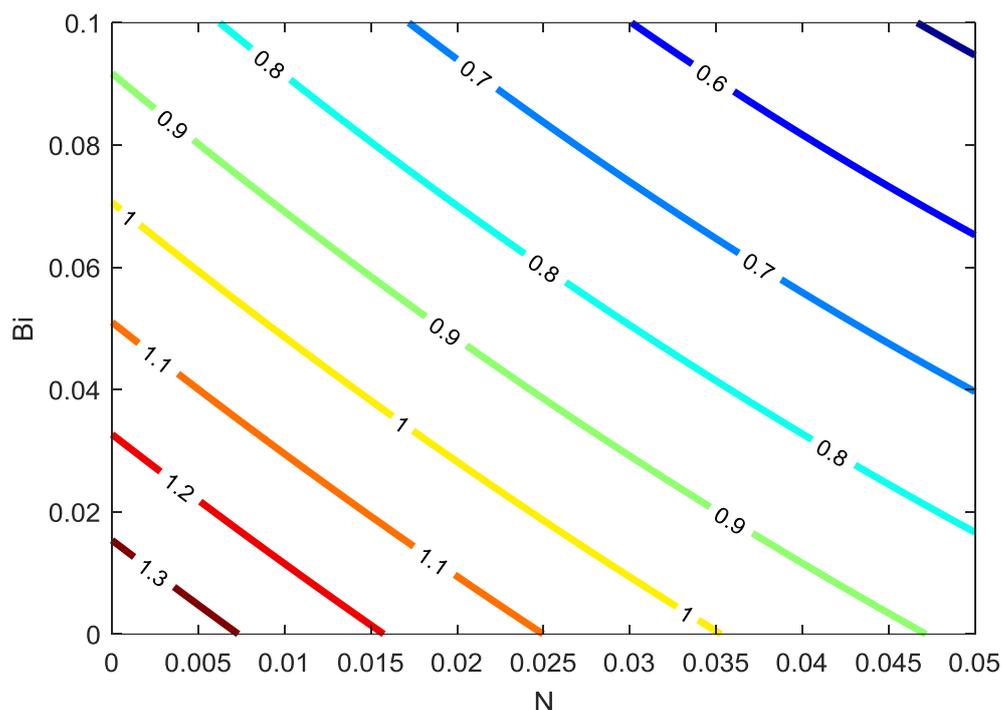


Figure 2.5 : variation d'énergie de bande interdite en fonction des concentrations (N) et (Bi) de la structure $\text{GaN}_x\text{As}_{1-x-y}\text{Bi}_y/\text{InP}$.

L'augmentation des concentrations d'azote (N) et de bismuth (Bi) diminue fortement le gap d'énergie.

2.2.4. La masse effective :

La masse effective est une notion utilisée en physique du solide pour l'étude du transport des électrons. Plutôt que de décrire des électrons de masse fixée évoluant dans un potentiel donné, on les décrit comme des électrons libres dont la masse effective varie. Cette masse effective peut-être positive ou négative, supérieure ou inférieure à la masse réelle de l'électron.

✚ Dans le cas d'un semiconducteur à bande interdite directe (GaAs), la bande de conduction est isotrope au voisinage de $k=0$, dont la masse effective isotrope et la mobilité électronique dans le cristal sera constante quelle que soit la direction de propagation.

✚ Dans le cas d'une bande interdite indirecte (tel que le silicium Si), la bande de conduction n'est plus isotrope, La surface $E(k)=C^{te}$ n'est plus une sphère comme dans le cas précédent, mais une série d'ellipsoïdes orientés selon les trois directions de l'espace [14].

La masse effective des porteurs donnée par l'équation (2.6) est inversement proportionnelle à la dérivée seconde de la courbe de dispersion de l'énergie dans l'espace k .

$$m^* = \frac{\hbar^2}{(\partial^2 E / \partial k^2)} \quad (2.6)$$

D'après la figure (2.6) on remarque que l'incorporation du Bismuth (Bi) va diminuer la masse effective et l'incorporation de l'azote (N) dans la structure augmente la masse effective.

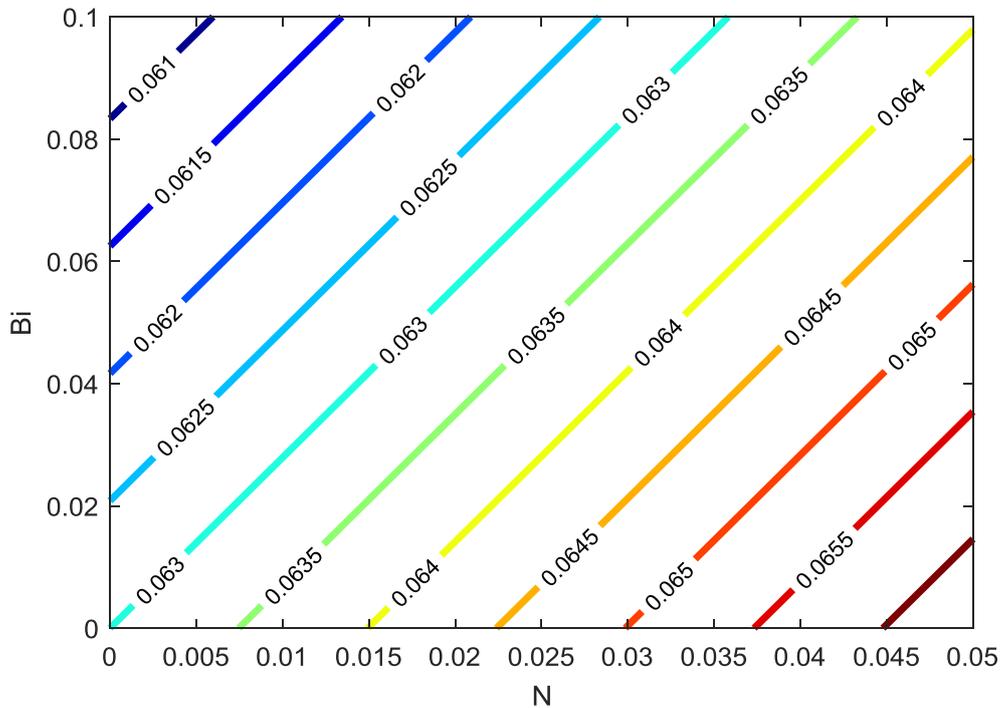


Figure 2.6: Variation de la masse effective en fonction des concentrations (N) et (Bi) de la structure $GaN_xAs_{1-x-y}Bi_y/InP$.

2.2.5. Les alignements des bandes :

Dans une hétérojonction semiconductrice, les bandes d'énergie des deux matériaux différents se réunissent, ce qui conduit à une interaction. Les deux structures de bandes sont positionnées de façon discontinue les unes des autres. Cet alignement relatif des bandes d'énergie est appelé **band offset** tel que nous avons déjà vu au chapitre précédent.

Les décalages des bandes sont dus à la différence des largeurs des bandes interdites du puits GaAsNBi et du substrat InP et sont réparties entre deux discontinuités de bandes, la discontinuité de la bande de conduction ΔE_c et la discontinuité de la bande de valence ΔE_v , comme on la illustré sur le schéma de la figure 2.7 suivant :

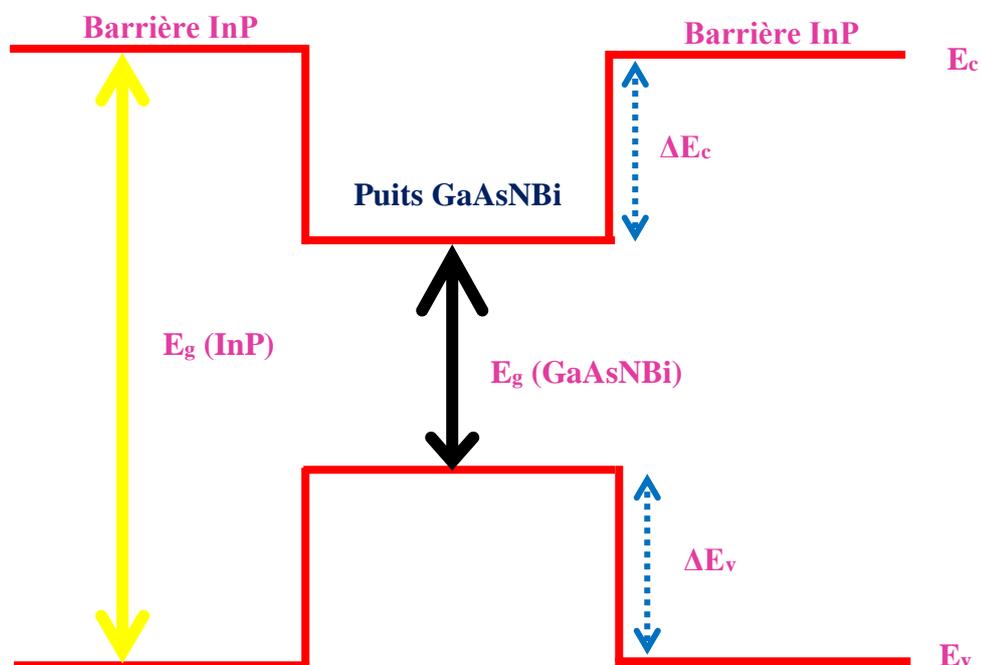


Figure 2. 7 : Schéma du décalage des bandes ΔE_c et ΔE_v dans la structure à puits quantique $\text{GaN}_x\text{As}_{1-x-y}\text{Bi}_y/\text{InP}$.

Le calcul des décalages des bandes se fait par la méthode de Van De Walle (la théorie de solide) et sont obtenus par les équations suivantes [15] :

$$E_c(\text{GaNASBi}) = E_v(\text{GaNASBi}) + E_g(\text{GaNASBi}) \quad (2.7)$$

$$E_v(\text{GaNASBi}) = E_{v,av} + \frac{\Delta_0}{3} \quad (2.8)$$

Avec : E_c et E_v sont respectivement l'énergie de la bande de conduction et l'énergie de la bande de valence du puits GaNASBi.

$E_{v,av}$: Energie moyenne de la bande de valence.

Δ_0 : Energie du décalage spin-orbite.

Les décalages de bandes seront donc donnés par les équations (2.9) et (2.10) :

$$\Delta E_c = E_c(\text{InP}) - E_c(\text{GaAsNBi}) \quad (2.9)$$

$$\Delta E_v = E_v(\text{GaAsNBi}) - E_v(\text{InP}) \quad (2.10)$$

Les figures (2.8) et (2.9) nous présentent le décalage de bande de la bande de conduction ΔE_c et le décalage de la bande de valence ΔE_v entre le puits GaAsNBi et la barrière InP en fonction de la concentration de l'azote (N) et le Bismuth (Bi).

On peut constater de la figure (2.8) que le décalage de bande de la bande de conduction ΔE_c augmente rapidement avec l'incorporation de bismuth (Bi) ce qui est de même pour l'incorporation de l'azote dans cette même structure.

La figure (2.9), nous montre que le décalage de bande de la bande de valence ΔE_v augmente progressivement avec l'incorporation du bismuth (Bi) par contre il diminue avec l'augmentation de la concentration de l'azote (N).

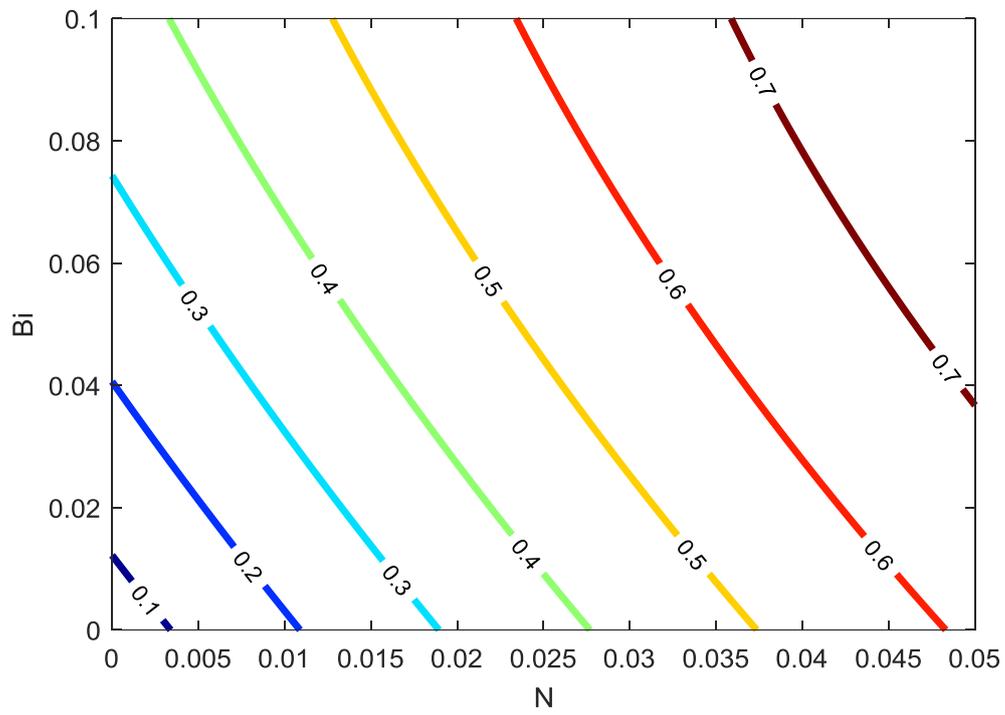


Figure 2.8: Variation de décalage de bande ΔE_c en fonction de la concentration de bismuth (Bi) et l'azote (N).

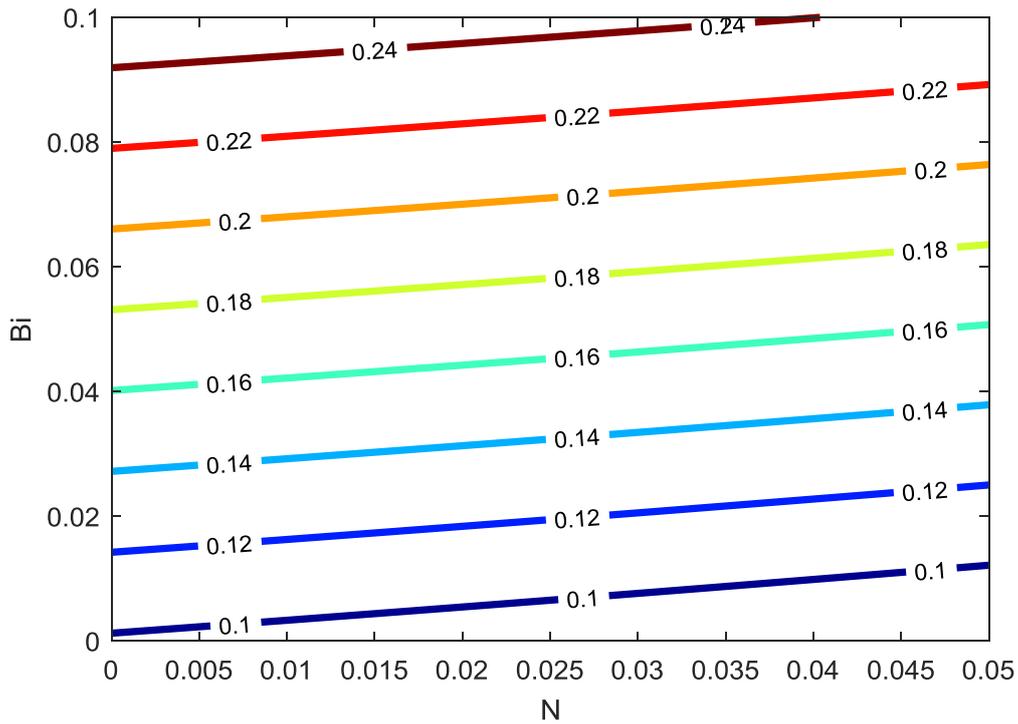


Figure 2.9: Variation de décalage de bande ΔE_v en fonction de la concentration de bismuth (Bi) et l'azote(N).

2.2.6. Q_c et Q_v :

Le calcul des décalages de bandes de la bande de conduction ΔE_c et de la bande de valence ΔE_v nous permettent de déterminer deux paramètres qui s'appellent les taux de confinement (Offset ratios) Q_c et Q_v des porteurs dans la bande de conduction et la bande de valence, respectivement.

Ces deux paramètres indiquent la quantité des porteurs (trous et électrons) dans la bande de conduction et la bande de valence. Ils sont déterminés par les équations (2.11) et (2.12) suivantes:

$$Q_c = \frac{\Delta E_c}{\Delta E_c + \Delta E_v} \quad (2.11)$$

$$Q_v = 1 - Q_c \quad (2.12)$$

Les figures (2.10) et (2.11) montrent la variation, respectivement, des Q_c et Q_v en fonction de la concentration de bismuth et l'azote dans le puits quantique $\text{GaN}_x\text{As}_{1-x-y}\text{Bi}_y/\text{InP}$.

D'après la figure (2.10), il est clair que l'incorporation de bismuth (Bi) mène à une croissance dans le rapport de décalage de bande de la bande de conduction Q_c , et de même l'augmentation de la concentration de l'azote (N) a pour effet d'augmenter ce rapport.

On remarque de la figure (2.11) que le rapport de décalage de bande de la bande de valence Q_v va diminuer rapidement avec l'incorporation de bismuth (Bi), on peut voir aussi que l'incorporation de l'azote (N) mène à une diminution du Q_v .

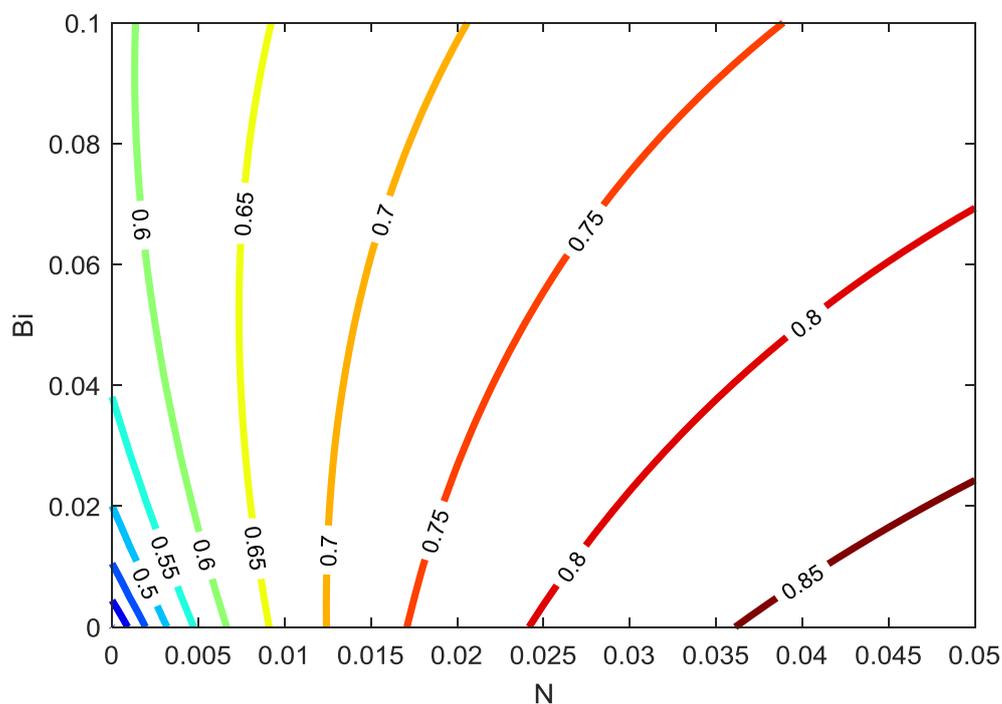


Figure 2. 10 : Variation de Q_c en fonction de la concentration de l'azote (N) et le bismuth (Bi).

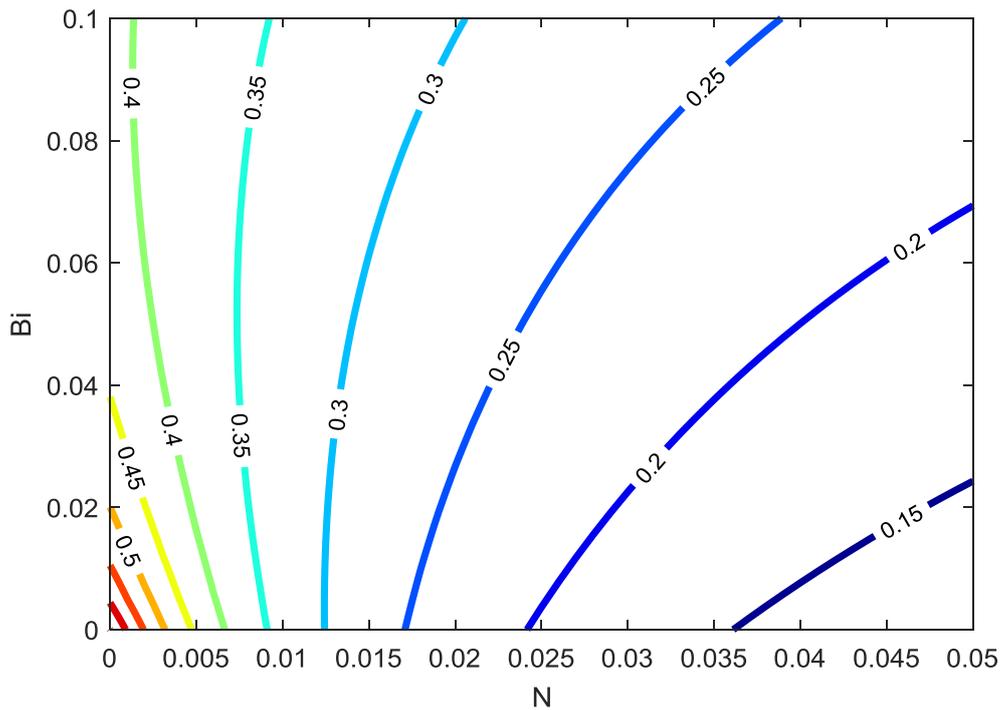


Figure 2.11 : Variation de Q_v en fonction de la concentration de l'azote(N) et le bismuth (Bi).

2.2.7 Le gain optique :

Le gain optique est l'exigence la plus importante pour la réalisation d'un laser à semi-conducteur, car il décrit l'amplification optique dans le matériau semi-conducteur. Ce gain optique est dû à une émission stimulée associée à une émission lumineuse créée par la recombinaison d'électrons et de trous.

Le gain optique est proportionnel à la probabilité qu'un photon déclenche une transition d'un niveau (j) à un niveau d'énergie inférieure (i), l'énergie du photon ($h\nu$) doit être égale à l'énergie de transition $E_{ij} = E_j - E_i$. Le gain dans le puits quantique est donné par l'équation (2.13), [16] :

$$G = \frac{2\pi e^2}{n_{eff}\epsilon_0 m_0^2 c \omega \Omega} \frac{e^2 \hbar^2}{2E_{ij} E_g m_e} \cdot \frac{E_g(E_g + \Delta_{SO})}{E_g + \frac{2}{3}\Delta_{SO}} \sum \sum \delta(E_v^j - E_v^i - \hbar\omega) (F_c - F_v) \quad (2.13)$$

Avec :

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;

F_c, F_v : les fonctions de Fermi données par la relation (2.14) :

$$F_{c,v} = 1/1 + \exp \left[\frac{(E - E_{F_{c,v}})}{kT} \right] \quad (2.14)$$

c : célérité de la lumière; n_{eff} : L'indice de réfraction relatif du matériau, k : la constante de Boltzmann et T la température.

La figure (2.12) nous montre la variation du gain optique en fonction de la longueur d'onde d'émission λ (μm) pour plusieurs valeurs d'injections, dans la structure $\text{GaN}_{0.025}\text{As}_{0.925}\text{Bi}_y/\text{InP}$. D'après la figure (2.12) on remarque un élargissement, une augmentation du gain maximum et un décalage du gain optique vers les petites longueurs d'ondes.

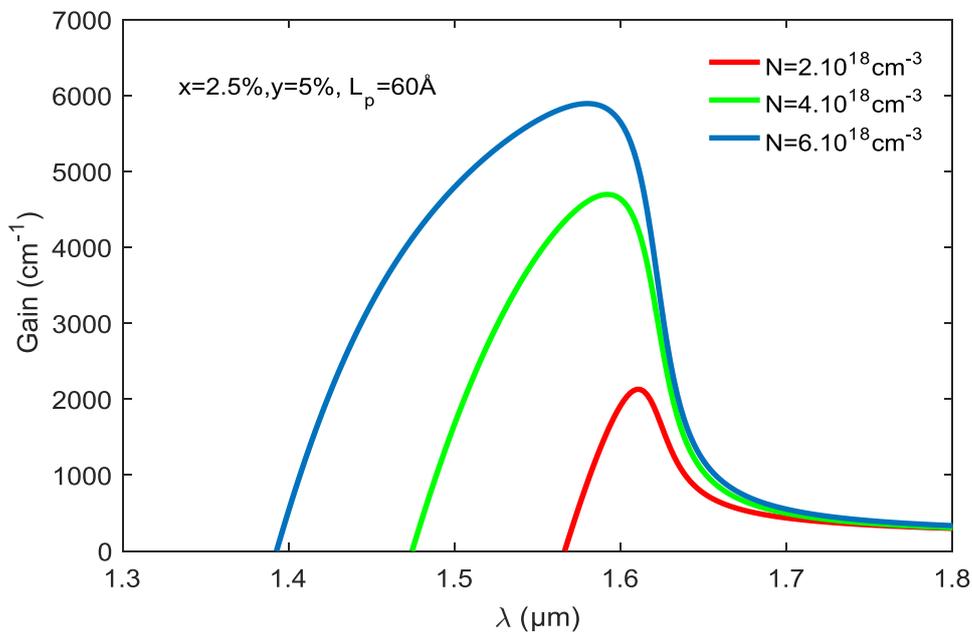


Figure 2.12: Variation du gain optique en fonction de la longueur d'onde (λ) pour différentes valeurs d'injections.

La figure (2.13) illustre la variation du gain optique en fonction de la longueur d'onde d'émission λ (μm) pour plusieurs largeurs du puits, dans la structure $\text{GaN}_x\text{As}_{1-x}$.

x - y Bi_y/InP. Une augmentation de la largeur du puits diminue le gain et on aura un décalage du gain optique vers les grandes longueurs d'ondes.

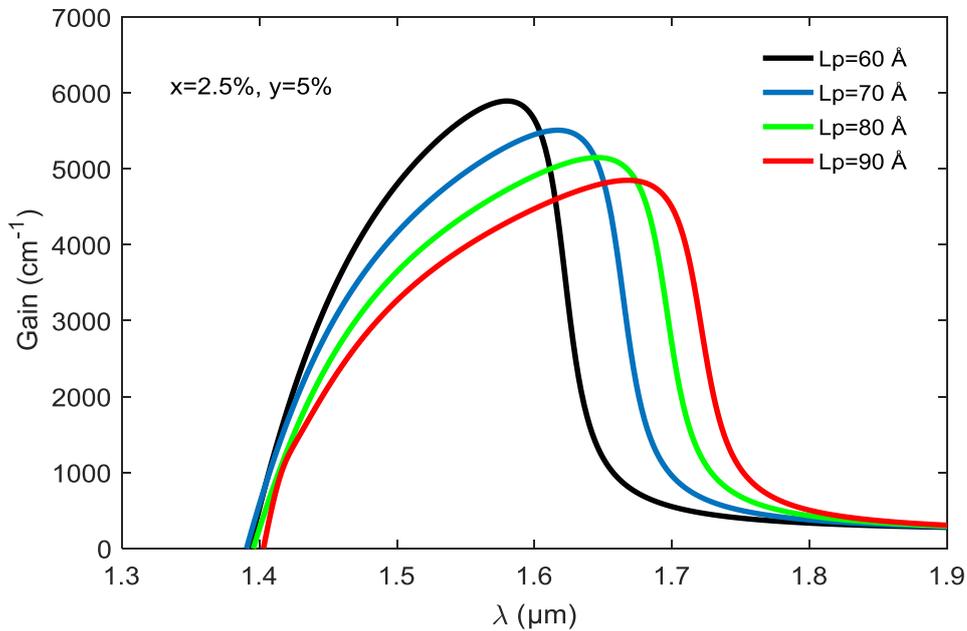


Figure 2.13: Variation du gain optique en fonction de la longueur d'onde (λ) pour différentes largeur du puits.

La figure (2.14) nous montre la variation du gain optique en fonction de la longueur d'onde d'émission λ (μm) pour plusieurs valeurs de concentration en Bi, dans la structure GaN_{0.025}As_{0.975}Bi_y/InP.

D'après la figure (2.14) on remarque un élargissement, une augmentation du gain maximum et un décalage du gain optique vers les grandes longueurs d'ondes.

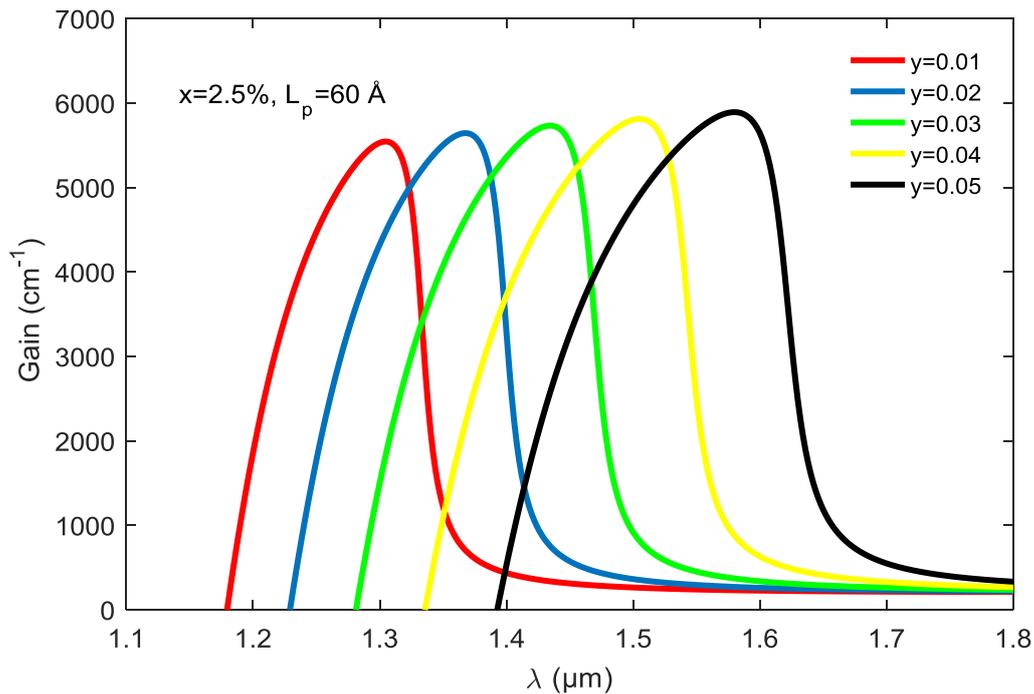


Figure 2.14: Variation du gain optique en fonction de la longueur d'onde (λ) pour différentes valeurs de concentration de bismuth.

La figure (2.15) illustre la variation du gain optique en fonction de la longueur d'onde d'émission λ (μm) pour plusieurs concentrations de l'azote (x), dans la structure $\text{GaN}_x\text{As}_{1-x-y}\text{Bi}_y/\text{InP}$.

On constate de la figure (2.15) qu'un élargissement avec un décalage du gain optique vers les grandes longueurs d'ondes ainsi qu'une diminution du gain maximum sont obtenus en augmentant la concentration de l'Azote (N), ce décalage est dû à la diminution de la bande interdite du matériau.

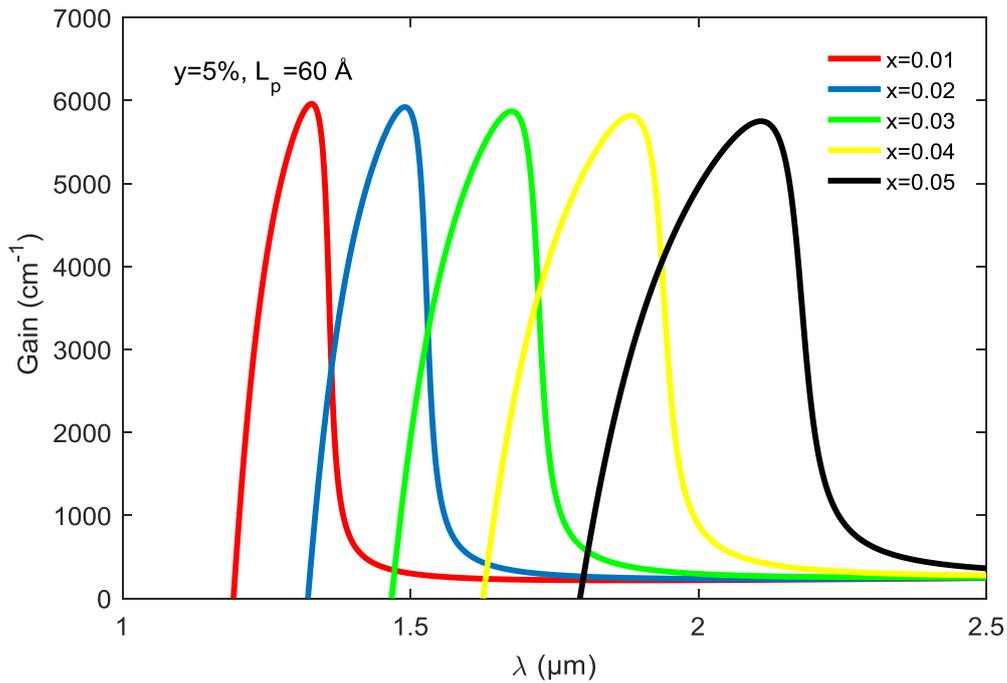


Figure 2.15 : Variation du gain optique en fonction de la longueur d'onde (λ) pour différentes valeurs d'azote.

Sur les figures 2.16 et 2.17, nous avons simulé la variation des longueurs d'ondes d'émission en fonction des concentrations de l'azote et du bismuth, respectivement, pour des puits de largeur 60\AA et $N=6.10^{18}\text{ cm}^{-3}$.

Nous pouvons voir sur la figure 2.16 que la structure $\text{GaN}_{0.008}\text{As}_{0.942}\text{Bi}_{0.05}/\text{InP}$ a la possibilité d'émettre une longueur d'onde d'émission de $1.3\text{ }\mu\text{m}$ alors que la structure $\text{GaN}_{0.0235}\text{As}_{0.9265}\text{Bi}_{0.05}/\text{InP}$ émet une longueur d'onde d'émission de $1.55\text{ }\mu\text{m}$.

Tandis que sur la figure 2.17, on peut constater que la structure $\text{GaN}_{0.025}\text{As}_{0.965}\text{Bi}_{0.01}/\text{InP}$ émet une longueur de $1.3\text{ }\mu\text{m}$ alors que celle $\text{GaN}_{0.025}\text{As}_{0.929}\text{Bi}_{0.046}/\text{InP}$ émet une longueur d'onde d'émission de $1.55\text{ }\mu\text{m}$

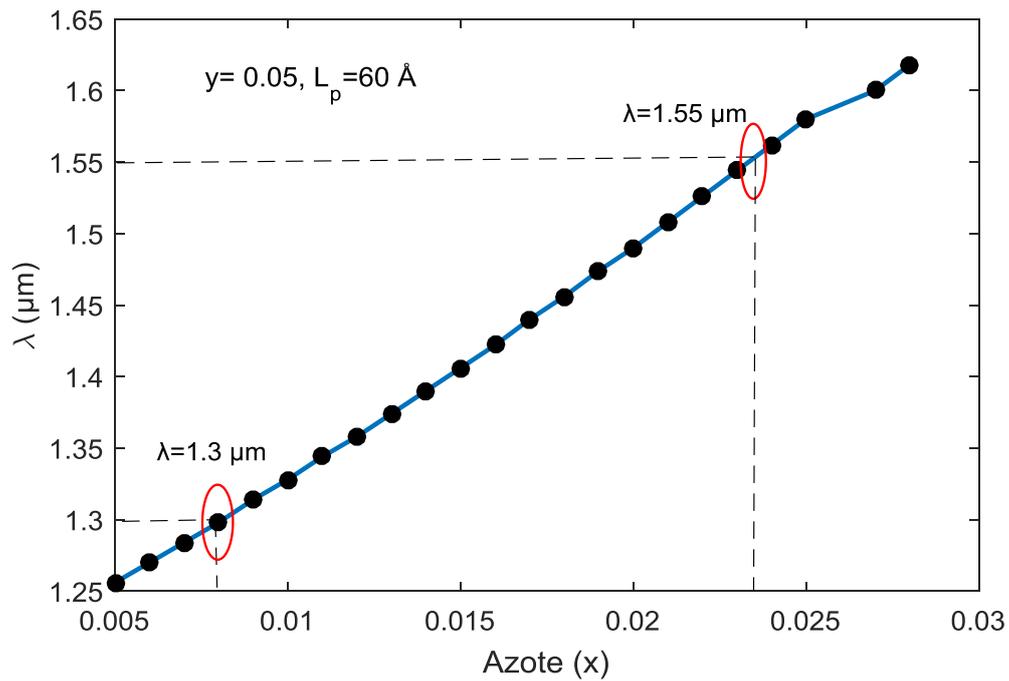


Figure 2.16 : Variation de la longueur d'onde (λ) en fonction de la concentration d'azote pour la structure $\text{GaN}_x\text{As}_{0.95-x}\text{Bi}_{0.05}$.

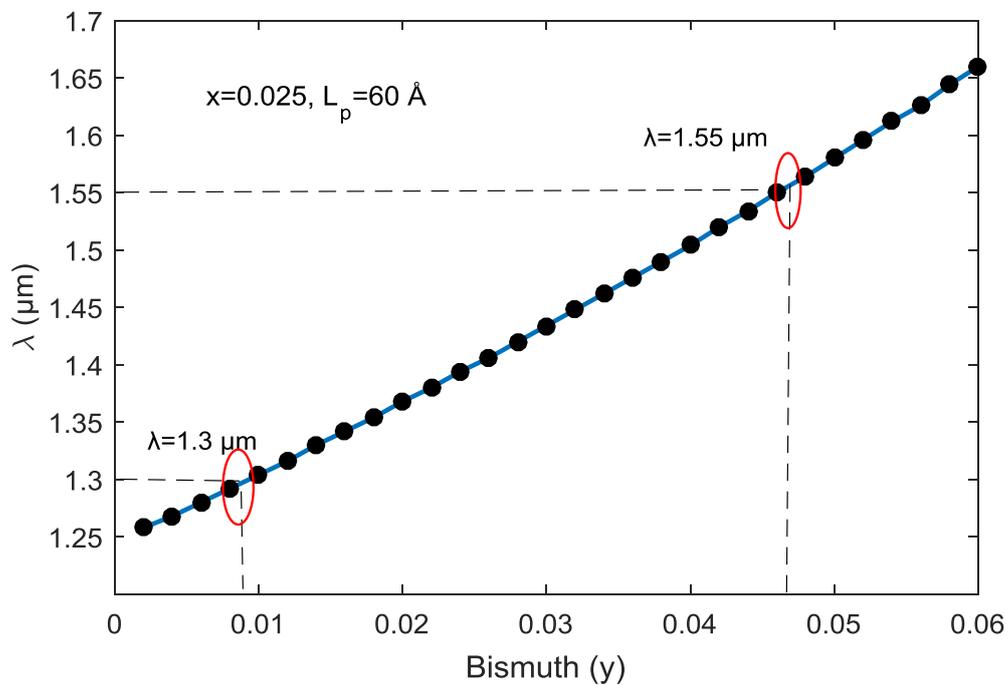


Figure 2.17 : Variation de la longueur d'onde (λ) en fonction de concentration du bismuth pour la structure $\text{GaN}_{0.025}\text{As}_{0.975-y}\text{Bi}_y$.

Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons étudié l'effet de l'incorporation d'une faible concentration d'azote et du bismuth dans les structures à puits quantique GaNAsBi/Inp.

Dans la première partie de ce chapitre, on a vérifié cet effet sur les propriétés structurales tels que le paramètre de maille, l'énergie de la bande interdite (gap), la masse effective, ...etc.

Nous avons utilisé le modèle BAC qui explique bien la réduction de la bande interdite.

Dans la deuxième partie de ce chapitre, on a vérifié l'effet de cette incorporation sur le gain optique ainsi que la longueur d'onde d'émission, Nous avons constaté que l'ajout des concentrations d'azote et de bismuth a des effets spectaculaires.

Nous avons par la suite essayé de choisir les structures optimales et les mieux adaptées à l'utilisation dans la transmission par fibres optique. Nous avons proposé quatre structures avec leurs principales caractéristiques, les deux premières émettant à $1.3\mu\text{m}$ et les deux restantes émettant à $1.55\mu\text{m}$.

Conclusion générale et perspectives

Les semiconducteurs III-V sont omniprésents et où le besoin en rapidité, l'efficacité et la faible consommation avec des coûts réduits, accélère le rythme de la recherche et le développement des matériaux et des dispositifs optoélectroniques.

L'objectif de ce travail est d'étudier les propriétés optoélectroniques de l'alliage semiconducteur GaNAsBi afin de pouvoir obtenir des structures à puits quantique GaNAsBi/InP émettant dans la gamme 1.3-1.55 μm , ce qui montre le potentiel d'applications de ce type de structures dans une technologie des télécommunications par fibres optiques.

L'incorporation de l'azote et du bismuth dans l'alliage lui a permis d'avoir des propriétés très particulières et attrayantes, la plus importante étant la diminution de l'énergie de la bande interdite due au splitting de la bande de conduction ainsi que la bande de valence. Le modèle d'anticroisement de bandes nous a permis de décrire ces propriétés. Une autre propriété très importante, est que l'incorporation de l'azote et du bismuth, permet un meilleur confinement des électrons et des trous dans le puits, ce qui diminue sensiblement le courant de seuil, diminuant ainsi la consommation en énergie des composants et augmentant leur durée de vie.

Pour atteindre cet objective nous avons opté pour un rappel sur leurs propriétés structurales tel que la notation de l'énergie de gap, l'épaisseur critique, la contrainte et les alignements de bandes.

Ensuite nous avons calculé les énergies de confinement des électrons et des trous dans ce type de puits quantique afin de pouvoir déterminer l'énergie de transition et la longueur d'onde par la suite. L'étude ne sera pas satisfaisante sans avoir vérifié l'effet de l'incorporation de l'azote et le bismuth sur le gain optique dans ces structures. Le bismuth cause une augmentation du gain maximum et un décalage du gain optique vers les grandes longueurs d'ondes. De même pour l'introduction de l'azote qui mène à un décalage du gain optique vers les grandes longueurs d'ondes ainsi qu'une diminution du gain maximum.

Cette étude nous a permis une meilleure compréhension des propriétés de cet alliage, ce qui nous a aidé à atteindre notre objectif et choisir les structures les mieux

adaptées à l'émission autour des longueurs d'ondes 1.3-1.55 μm . On propose les structures suivantes :

$$\text{GaN}_{0.008}\text{As}_{0.942}\text{Bi}_{0.05}/\text{InP}, Q_c=0.656, Q_v=0.344, \varepsilon_{xx} = 3.3\% \rightarrow 1.3 \mu\text{m}$$

$$\text{GaN}_{0.0235}\text{As}_{0.9265}\text{Bi}_{0.05} / \text{InP}, Q_c=0.746, Q_v=0.254, \varepsilon_{xx} = 3.6\% \rightarrow 1.55 \mu\text{m}$$

$$\text{GaN}_{0.025}\text{As}_{0.965}\text{Bi}_{0.01}/\text{InP}, Q_c=0.792, Q_v=0.208, \varepsilon_{xx} = 4.2\% \rightarrow 1.3 \mu\text{m}$$

$$\text{GaN}_{0.025}\text{As}_{0.929}\text{Bi}_{0.046}/\text{InP}, Q_c=0.758, Q_v=0.242, \varepsilon_{xx} = 3.8\% \rightarrow 1.55 \mu\text{m}$$

On peut voir que les structures proposées nous assurent les longueurs d'ondes voulues avec un très bon taux de confinement des porteurs mais avec des valeurs de contraintes un peu élevés, il serait important de trouver dans le futur un compromis entre les différents paramètres afin d'avoir des structures qui atteindront les mêmes objectifs mais en améliorant la contrainte afin d'avoir des matériaux plus stables.

Liste des références

[1] S. Azaizia, Alliages à base de GaAs pour applications optoélectroniques et spintroniques, Thèse de doctorat, université de Toulouse, 158p, 2018.

[2] N. Baghdadli, « Etude des propriétés optoélectroniques des semiconducteurs III-V à base de galium », université de Tlemcen, 2010.

[3] <https://www.alamyimages.fr/photo-image-tableau-periodique-des-elements-chimiques-de-mendeleiev-tableau-137215966.html>.

[4] H. Chergui, « Optimisation d'une structure à base d'un matériau III-V pour la diode laser », université de Blida, 2018.

[5] A. Aoutli, « Etude de lasers à base d'hétérostructures de semi-conducteurs III-V », mémoire de master, Université El hadj Kader-Batna, (2008).

[6] <https://fr.aliexpress.com/item/1909299223.html> .

[7] X. Blot, « Réalisation, caractérisation et modélisation de collages de matériaux III-V pour cellules photovoltaïques à concentration », Thèse de doctorat, université Grenoble Alpes, 2015.

[8] O. I. Elmi, « Nouvelles structures de cellules solaires à base de silicium: texturation, passivation et association de réseaux de nanostructures métalliques avec une couche Down-Conversion », université de Lille 1, 2017.

[9] <https://microelectronique.univ-rennes1.fr/fr/ch4c.htm>.

[10] C. Bencheikh, F. Nezefar, « Etude et simulation de la structure InGaAsBi/GaAs a puits Quantique pour l'émission proche et moyen infrarouge », mémoire de master , Université Blida, 24 p, 2016.

[11] A. Aissat, B. Alshehri, S. Nacer, J. P. Vilmot, «Theoretical investigation of GaAsNBi/GaAs materials for optoelectronic applications», Materials Science in Semiconductor Processing, V. 31, 2015, 568-572.

[12] W. Shan, K. M. Yu, W. Walukiewicz, and J. W. Ager III, « Reduction of band-gap energy in GaNAs and AlGaNAs synthesized by N⁺ implantation », Appl. Phy. Lett, V 75, 1999, 1410-1412.

[13] K. Alberi, O.D Dubon, W. Walukiewicz, K.M. Yu, K. Bertulis, and A. Krotkus, «Valence band anticrossing in GaBi_xAs_{1-x}», Appl. Phy. Lett, V. 91, 2007, 051909.

[14] F. Fossard, « Spectroscopie infrarouge de fils et boîtes quantiques d'InAs/InAlAs/InP(001) », Thèse de doctorat, Université Paris-sud, 2002.

[15] CG Van de Walle, « Band lineups and deformation potentials in the model-solid theory », Phy. Rev.B, V. 39, 1989, 1871-1883

[16] F. Kerkar, « Etude et calcul des propriétés de la structure à puits quantique Ga_xIn_{1-x}N_yAs_{1-y}/GaAs en vue de son utilisation dans les diodes lasers émettant autour de 1.3 μm », these de magister, université de Blida, 2005.