

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 حطاب البليدة
Université SAAD DAHLAB de BLIDA

كلية التكنولوجيا
Faculté de Technologie

قسم الإلكترونيك
Département d'Électronique



Mémoire de Master

Filière ELECTRONIQUE

Spécialité ELECTRONIQUE DES SYSTEMES EMBARQUES

présenté par

ELGHRIBI Bilel

&

BAZERIA Abdelhak

ETUDE COMPARATIVE ENTRE LES STRUCTURES A PUIITS QUANTIQUES GaAsP/GaPETGaNAsP/GaP

Proposé par:

Professeur Aissat Abdelkader

Co-promotrice :

M^{me}. Chenini Lynda

Président :

Mr. Nacer S.

Examineur :

Mme. Zerrouk D.

Année Universitaire 2018-2019

ملخص

يتكون هذا العمل من دراسة مقارنة لهياكل بئر الكمون GaAsP/GaP و GaNAsP/GaP من خلال نمذجة الهيكليين. لقد درسنا أولاً تأثير إدخال الزرنيخ في أنصافالنواقل الثلاثية GaAsP وخصائصها الإلكترونية الضوئية ، ثم درسنا تأثير إدخال نسبة قليلة من النيتروجين في الأخير. في الواقع ، يؤدي دمج نسبة نيتروجينية منخفضة إلى انفجار نطاق التوصيل إلى نطاقين فرعيين. تحت تأثير هذا الإدماج ، سيكون هناك انخفاض في الشريط الممنوع. درسنا أيضاً تأثير الإجهاد و حسبنا طول موجة الانبعاث كدالة لعرض البئر والتراكيب x (الزرنيخ) و y (النيتروجين). كلا الهيكليين يتيحان لنا تطبيقات في مجال الأشعة تحت الحمراء القريبة.

Résumé

Ce travail consiste en une étude comparative des deux structures à puits quantiques GaAsP/GaP et GaNAsP/GaP et cela en modélisant les deux structures. Nous avons étudié d'abord l'effet de l'introduction de l'arsenic dans l'alliage ternaire GaAsP et ses propriétés optoélectroniques, puis nous avons étudié l'effet de l'introduction de quelques pour cent de l'azote dans cette dernière. En effet, l'incorporation d'une faible composition d'azote provoque l'éclatement de la bande de conduction en deux sousbandes. Sous l'effet de cet éclatement, il va y avoir une réduction de la bande interdite. Nous avons également étudié l'effet de la contrainte sur la structure de bande. Nous avons calculé la longueur d'onde d'émission en fonction de la largeur du puits et des compositions x (l'arsenic) et y (l'azote). Les deux structures nous permettent d'avoir des applications dans le domaine de l'infrarouge proche.

Summary

This work consists on a comparative study of the two GaAsP/GaP and GaNAsP/GaP quantum well structures by modeling the two structures. We first studied the effect of the introduction of arsenic into the GaAsP ternary alloy and its optoelectronic properties and then we studied the effect of introducing a few percent of the nitrogen into the latter structure. Indeed, the incorporation of a low nitrogen composition causes the splitting of the conduction band in two sub-bands. Under the effect of this splitting, there will be a reduction in the band gap. We also studied the effect of strain on the band structure. We calculated the emission wavelength as a function of well width and compositions x (arsenic) and y (nitrogen). Both structures allow us to have applications in the near infrared domain.

DEDICACE

C'est avec une immense fierté que je dédie ce modeste travail de fin d'étude :

A mes très chers parents Abderezak et Latifa pour leurs efforts et les sacrifices qu'ils m'ont prodigué, et surtout pour les profonds sentiments qui m'ont encouragé tout le long de mes études, qu'ils trouvent ici le témoignage de ma profonde gratitude.

A mes très chers frères.

A mes deux chères sœurs.

A toutes les familles : BAZERJA et KAIBICHE.

A mon très cher ami et mon binôme Bilel et toute la famille EL-GHRIBI.

Pour tous les gens qui m'ont accompagné durant cette année universitaire et les années précédentes.

A chaque personne qui m'a aidé de près ou de loin dans la réalisation de ce travail.

A mes amis, qui ont des cœurs remplis d'amour et d'amitié : Mohamed Redha, Tayeb Sarray, Abderrahmane Arab, Hichem Aoufi et les twins Lotfi et Nabil.

A tous mes amis d'El-Houma avec qui je partage toute ma vie.

Abdelhak

Dédicas

Je dédie ce travail à mes très chers parents, grâce à leurs soutiens indéfectibles, ce travail a pu avoir le jour, car ils ne cessent de me donner l'amour nécessaire pour que je puisse arriver à ce que je suis aujourd'hui.

A mes adorables sœurs.....

A toute ma famille et tous mes amis.

A tous ceux qui m'ont aidé de près ou de loin pour réaliser ce travail.

Que Dieu vous protège et que la réussite soit toujours à ma portée pour que je puisse vous combler de bonheur.

REMERCIEMENT

Toutefois, il parait difficile de remercier en seulement quelques lignes et comme nous le voudrions toutes les personnes qui, de près ou de loin, ont contribué à la réalisation de cette thèse car une thèse n'est pas l'histoire d'une seule personne.

Cette thèse nous a permis de nous enrichir aux plans scientifiques et techniques et également au plan humain. Sur tous ces aspects, nous nous devons remercier tous ceux qui ont contribué à ce que nous parvenons au bout de ce manuscrit.

Nos vifs remerciements au Professeur Mr. Aissat Abdelkader pour sa qualité de promoteur de thèse, pour sa disponibilité, et aussi pour m'avoir fait bénéficier de ses compétences scientifiques.

Il n'est pas facile d'exprimer toute nos gratitudees à Madame Chenini Lynda qui a dirigé ce travail. Sa disponibilité permanente et son aide ont été d'un soutien dont nous lui sommes particulièrement reconnaissants. Sa compétence et ses conseils avisés nous ont été d'un grand secours.

Nous remercions chaleureusement Monsieur NACER S. de l'université de Blida d'avoir accepté de présider le jury et de nous honorer de sa présence.

Nous sommes très reconnaissants au Madame ZERROUK D. d'avoir accepté d'examiner ce travail et de nous faire l'honneur de participer au jury.

Nous remercions les enseignants du département de l'électronique pour leurs soutiens, pour leurs conseils et leurs compétences et le professionnalisme dans le domaine scientifique

Un grand merci à nos parent.

Un merci pour tous les gens que nous ne pouvons pas citer, tout le monde sans exception, à l'université ou ailleurs, à tout ceux qui nous ont aidés, par un sourire, par un encouragement, par une information, tout le monde avait confiance en nous et ceci nous a donné de l'énergie pour nous assumer et aboutir.

Nous adressons nos remerciements les plus sincères à tous nos collègues et amis.

Sommaire

Remerciements

Dédicaces

Résumé

Table des matières

Liste des tableaux

Liste des figures

Introduction Générale..... 1

CHAPITRE I :Les matériaux semi-conducteurs

I.1 Introduction 4

I.2 Notions fondamentale 4

I.2.1 L'énergie d'un électron 4

I.2.2 Tableau périodique 6

I. 3 Premières zones de Brillouin 7

I. 3. 1 Les points de haute symétrie 7

I. 3. 2 Les lignes de haute symétrie 7

I. 4 Semi-conducteurs III-V 8

I. 4. 1 Définition 8

I. 4. 2 Les composés binaires 9

I. 4. 3 Les composés ternaires et quaternaires 10

I.5 Caractéristiques structurelles : 11

I. 5. 1 Les systèmes cristallins 11

I.	5.	3	Les	hétéro-	12
structures					
I.	6		La	masse	14
effective					
I.	6.	1	Masse	effective	des 14
électrons					
I.	6.	2	Masse	effective	des 14
trous.....					
I.	7		L'énergie	de	14
gap					
I. 7. 1 Semi-conducteur à gap direct					14
I.	7.	2	Semi-conducteur	à	gap 15
indirect					
I.		8		La	17
température					
I.	9	Détermination	des	paramètres (loi	de Végard) 20
.....					
I.		10		La	20
contrainte					
I.	10.1		Compression	et	20
tension					
I. 10.2 Épaisseur critique					23
I. 11 Puits quantique					25
I. 11.1 Définition					25
I. 11.2 Types de confinements					27
I. 11.3 Les Multi-Puits Quantiques					28
I.11.4. Énergie de quantification					29
I.12					30
Conclusion					

Chapitre II :

Etude de la structure à puits quantique à base de GaAsP/GaP

II.1 Introduction	31
II.2 Description du Phospho-arséniure de gallium (GaAsP)	31
II.2.1 Caractéristiques structurales	31
II.2.1.1 Structure cristalline	31
II.2.1.2 Paramètre de maille	33
II.2.2 La contrainte	34
II.2.3 L'épaisseur critique	34
II.2.4 L'énergie de la bande interdite	35
II.2.5 Evolution du gap en fonction de la température	37
II.2.6 La masse effective des porteurs.....	38
II.2.7 Spin-orbite du GaAsP.....	39
II.2.8 Les alignements de bandes de la bande de conduction et de la bande de valence.....	39
II.2.9 Energie de confinement.....	41
II.2.10 Calcul d'énergie de transition	45
II. Conclusion	3 46

Chapitre III :

Etude de la structure à puits quantique GaNAsP/GaP

III. 1 Introduction	47
III. 2 La structure à puits quantique GaAsNP/GaAs.....	47
III. 2. 1 L'influence de l'Azote sur la bande de conduction	48
III. 2. 2 L'énergie de gap	50

III.	3	Dépendance	du	gap	en	52	
température							
III.	4		Paramètres		de	53	
maille							
III.		5			La	54	
contrainte							
III.	6	La masse effective					56
III.	7		Décalage		des	57	
bandes							
III.	8	Niveaux énergétiques.....					59
III.	9	Energie de transition.....					63
III.	10.	Longueur d'onde.....					64
III.		11			Conclusion	65	
.....							
Conclusion générale.....							66
Bibliographie.....							67

Introduction générale

En moins d'un siècle, l'homme est passé du problème de prouver l'existence des atomes à celui de les manipuler un par un, de les assembler en fonction de ses besoins, pour créer des matériaux nouveaux aux propriétés étonnantes (alliages spéciaux, matériaux composites très légers et très résistants, cristaux liquides, semi-conducteurs....etc.). Cette progression dans la conception et la fabrication de nouveaux matériaux a constitué un domaine très actif de la recherche et de la technologie moderne [1].

Parmi les matériaux utilisés, on trouve les semi-conducteurs qui sont au cœur de nombreuses technologies électroniques de pointe qui façonnent les réseaux du futur. Les matériaux semi-conducteurs utilisés présentent des caractéristiques fixes, qu'elles répondent aux besoins ou non. Pour avoir plus de liberté dans les propriétés, l'emploi des alliages semi-conducteurs s'avère une solution miracle. En mélangeant les éléments entre eux, on peut fabriquer tout type d'alliages, des binaires, des ternaires, des quaternaires, des pentanaires et même des quasi binaires, tout dépend des propriétés que l'on veut obtenir. Plus le nombre de composés utilisés est grand, plus on élargit l'éventail d'ajustement des paramètres mais en parallèle, on voit croître la complexité des modèles qui les régissent.

Certains paramètres des alliages sont basés sur une interpolation linéaire de ceux des composés parents tels que le paramètre du réseau, la masse effective, mais d'autres tels que le gap énergétique dévient un peu de la linéarité par un terme correctif appelé bowing ou le paramètre de courbure tiré généralement de l'expérimentation [2].

Les propriétés électroniques des solides sont largement mises à profit pour la réalisation de nombreux dispositifs et de différents appareils de mesure. Les propriétés des binaires $GaAs$, $InAs$, $GaSb$, $InSb$, GaP , et InP étant les plus connues, par contre peu de résultats sont disponibles pour l'alliage semi-conducteur ternaire $GaAs_xP_{1-x}$ et le quaternaire $GaN_yAs_xP_{1-x}$. Malgré l'importance des propriétés électroniques des alliages à plusieurs composants qui ont été utilisés comme des substrats, couche de revêtement (cladding layers), éléments actifs dans les dispositifs optoélectroniques et pour d'autres

applications [3], beaucoup de recherches théoriques et expérimentales sont effectuées sur les alliages ternaires, mais seulement quelques alliages quaternaires ont été étudiés [3].

Durant cette même période, le développement dans le domaine de l'informatique a connu le même essor que la micro-électronique. Le coût exorbitant lors de la fabrication de nouveaux composants a poussé les chercheurs à utiliser la simulation pour mieux comprendre les phénomènes physiques et pour proposer des pistes d'améliorations des structures et de nouvelles architectures de dispositifs à moindre coût. Ces logiciels de simulation sont utilisés pour résoudre numériquement les systèmes d'équations obtenues par les lois de la physique qui sont difficiles à résoudre analytiquement.

Aujourd'hui, les logiciels de simulations jouent un rôle très important dans tous les domaines de l'électronique générale. En effet, avant la fabrication d'un composant électronique, on procède à une simulation. Cette simulation est définie dans le cas général comme une technique permettant de reproduire de façon virtuelle le comportement d'un phénomène réel, et dans ce cas, les résultats obtenus sont très satisfaisants, car la simulation gagne en terme de coût et de temps par rapport à la fabrication.

Le but de ce travail est de mener une étude comparative entre les deux structures à puits quantiques, la première est à base du ternaire $GaAsP/GaP$ et la deuxième consiste à ajouter de l'azote à cette dernière pour qu'elle devienne $GaNAsP/GaP$ et cela en investissant les paramètres optoélectroniques des deux structures à puits quantiques et en comparant et en discutant les résultats obtenus.

Pour développer toutes ces notions dans cette thèse, nous avons scindé notre mémoire en trois chapitres principaux entourés d'une brève introduction et d'une conclusion générale.

Le premier chapitre est consacré à l'étude des principales propriétés des matériaux semi-conducteurs III-V. Nous abordons ce chapitre par une présentation générale de ces matériaux, ensuite on définit leur réseau cristallin, leur réseau réciproque ainsi que leur structure de bande d'énergie et l'influence de la température sur cette structure. On donne aussi les expressions permettant de calculer les masses effectives des électrons ainsi que l'étude de la contrainte des composés qui vont venir par la suite.

Dans le chapitre deux, on explore la structure *GaAsP/GaP* en détaillant la théorie des bandes pour comprendre les fonctionnalités apparentes.

Le troisième chapitre sera une extension du deuxième chapitre qui vient pour détailler la structure *GaNAsP/GaP*. En ajoutant de l'azote, on aura à utiliser le modèle BAC (anticrossing band) vu le fort effet de l'introduction de l'azote puisqu'il mène à l'éclatement de la bande de conduction en deux sous bandes et par conséquent il sera très intéressant de voir qu'elle effet ça va avoir sur les propriétés de ce matériau.

Pour en finir, une conclusion résumant tout le travail en comparant les deux structures et qui vient pour éclaircir le chemin à suivre aux futurs preneurs.

Les différentes méthodes de résolution de l'équation de Schrödinger dans le puits, sont expliquées dans l'annexe à la fin de ce mémoire.

Liste des acronymes et abréviations

a_s : Paramètre de maille de substrat.

a_e : Paramètre de maille de la couche épitaxie.

ϵ : Constante de déformation.

$\epsilon_{//}$: Constante de déformation dans le plan de croissance.

ϵ_{\perp} : Constante de déformation dans la direction de croissance.

C_{ij} : Constante d'élasticité.

E_0 : Energies de bande interdite a 0(k).

A : Une constante empirique [ev.K^{-1}].

B : Une constante associée à la température de Debye [K].

m_e : La masse effective des électrons.

m_{hh} : Masse effective de trous lourd.

m_{lh} : Masse effective de trous léger.

a_c : Le potentiels de déformation hydrostatique de la bande de conduction.

A_v : Le potentiel de déformation hydrostatique de la bande de valence.

ΔE_c : Bande offset de la bande de conduction.

ΔE_v : Bande offset de la bande de valence.

$\frac{\Delta V}{V}$: Le changement relatif du volume.

h_c : Epaisseur critique.

Δa : Est le désaccord paramétrique.

γ : Est le coefficient de poisson.

E_F : Est le niveau de fermi.

K : La constante de Boltzmann.

$K_{//}$: Les énergies des minima des différentes sous-bandes de conduction varient comme n^2 , avec n entier.

V_0 : Décalage de bandes.

E_n : Valeurs propres de l'énergie (quantification).

τ : Est la constante de temps prenant en compte toutes les diffusions.

E_{tr} : L'énergie de transition.

λ : La longueur d'ondes.

φ : Température moyenne des phonons.

p : Paramètres de dispersion des phonons.

α : Constante.

E_{en} : Le nième niveau d'énergie des électrons (n=1,2...).

E_{hhn} : Le nième niveau d'énergie des trous lourds (n=1,2...).

E_{lhn} : Le nième niveau d'énergie des trous légers (n=1,2...).

λ_F : La longueur d'onde de De Broglie.

E_{n+1}, E_n : Niveaux d'énergie discrets.

t : Constante de temps prenant en compte toute les diffusions.

K_b : étant la constante de Boltzmann et T la température.

\hbar : La constante de Planck.

ψ : La fonction d'onde.

V : La profondeur du puits de potentiel.

L_p : L'épaisseur du puits.

m^* : La masse effective de la particule.

E_N : L'énergie du niveau de l'atome d'azote isolé

$E_M(k)$: L'énergie de la bande de conduction.

V_{MN} : Décrit l'interaction entre ces deux types d'états.

Liste des figures

Figure 1.1 :Schéma représentatif des bandes d'énergie	5
Figure 1.2 :Le tableau périodique Mendeleïev.....	6
Figure 1.3 : Première zone de Brillouin de la structure zinc blende avec la présentation des points et lignes de hautes symétries.....	8
Figure 1.4 : Mailles cristallographiques des structures a) wurtzite , b) Zinc Blende	12
Figure 1.5 :Hétérostructure de type I.....	13
Figure 1.6 :Hétérostructure de type II.....	13
Figure 1.7 :Semi-conducteur a gap direct.....	15
Figure 1.8 : Semi-conducteur a gap indirect.....	16
Figure 1.9 :L'énergie de gap en fonction du paramètre de maille pour les différents alliages	17
Figure 1.10 : Illustration de deux types de déformation, couche en tension et couche en compression.....	22
Figure 1.11 : Représentation schématique de la structure de bande d'un matériau SC (a) non contraint, (b) contrainte compressive, (c) contrainte en tension.....	22
Figure 1.12 :Schéma montrant une couche contrainte en compression (a) et une autre couche contrainte relaxée (b).....	23
Figure 1.13 : La contrainte dans le cas d'une DHS.....	24
Figure 1.14 : Illustration d'un puits quantique.....	25
Figure 1.15 :Schématisation d'une structure de type SCH.....	27
Figure 1.16 :Schématisation d'une structure de type GRINSCH.....	28
Figure 1. 17 :Schématisation d'une structure à multi-puits quantiques	28
Figure 2.1 : mailles cristallographiques de la structure Zinc Blende.....	32
Figure 2.2: Structure Zinc Blende en projection sur un plan.....	32

Figure 2.3: variation de paramètre de maille en fonction de la concentration	33
Figure 2.4: Variation de la contrainte en fonction de la concentration x du $GaAs_xP_{1-x}/GaP$	34
Figure 2.5 : Variation de l'épaisseur critique en fonction de la composition x	35
Figure 2.6: Energie de la bande interdite de la structure $GaAsP/GaP$ contrainte et non contrainte en fonction de la concentration x	36
Figure 2.7: Energie de bande interdite pour le $GaAsP$ en fonction de la Température...	37
Figure 2.8: variation de la masse effective en fonction de la concentration (x) du $GaAsP$	38
Figure 2.9: Spin-orbite du $GaAsP$ en fonction de la concentration x	39
Figure 2.10: Décalage de la bande de conduction et de la bande de valence du $GaAsP/GaP$	41
Figure 2.11: Evolution de l'énergie des électrons dans un puits quantique $GaAs_{0.15}P_{0.85}/GaP$	42
Figure 2.12: Evolution de l'énergie des électrons dans un puits quantique $GaAs_{0.25}P_{0.75}/GaP$	42
Figure 2.13: Evolution de l'énergie des électrons dans un puits quantique $GaAs_{0.35}P_{0.65}/GaP$	43
Figure 2.14: Evolution de l'énergie des trous lourds dans un puits quantique $GaAs_{0.35}P_{0.65}/GaP$	44
Figure 2.15: Evolution de l'énergie des trous lourds dans un puits quantique $GaAs_{0.35}P_{0.65}/GaP$	44
Figure 2.16: Evolution de l'énergie de transition dans un puits quantique $GaAsP/GaP$	45
Figure 2.17: Evolution de la longueur d'onde dans un puits quantique $GaAsP/GaP$	46
Figure 3.1 : Schéma d'une structure à puits quantiques à base de $GaNAsP/GaP$	48
Figure 3.2: Les bandes d'énergie dans une structure à puits quantique: (a) avant éclatement de la bande de conduction, (b) après éclatement.....	50
Figure 3.3 : Les deux sous bandes $E+$ et $E-$ de la bande de conduction du $GaNAsP/GaP$	

<i>GaP</i>	51
Figure 3.4 : Effet de l'azote sur l'énergie de gap contraint et non contraint pour le quaternaire $GaN_yAs_xP_{1-x-y}$	51
Figure 3.5 : Courbures iso-gap en fonction des compositions (x, y)	52
Figure 3.6 : Effet de la température sur le gap de la structure $GaN_yAs_xP_{1-x-y}$	53
Figure 3.7 : Paramètre de maille de $GaN_yAs_xP_{1-x-y}$ en fonction des paramètres (x, y)	54
Figure 3.8 : Déformation uni-axial et bi-axial en fonction de la concentration de l'azote y ($x=0.3$).....	55
Figure 3.9: courbure iso-contrainte: déformation bi-axial en fonction de la concentration de l'arsenic et de l'azote x, y respectivement.....	55
Figure 3.10 : Variation des masses effectives des électrons, trous lourds et légers en fonction d'azote.....	57
Figure 3.11: Schématisation des décalages des bandes.....	57
Figure 3.12: Variation de Q_c en fonction des paramètres de composition x et y	58
Figure 3.13: Variation de Q_v en fonction des paramètres de composition x et y	59
Figure 3.14 : Variation des niveaux des électrons pour $x = 0.25$ et $y = 0.005$	60
Figure 3.15: Variation des niveaux des électrons pour $x = 0.25$ et $y = 0.02$	60
Figure 3.16 : Variation des niveaux des trous HH pour $x = 0.25$ et $y = 0.005$	61
Figure 3.17: Variation des niveaux des trous HH pour $x = 0.25$ et $y = 0.02$	61
Figure 3.18 : Variation des niveaux des trous LH pour $x = 0.25$ et $y = 0.005$	62
Figure 3.19: Variation des niveaux des trous LH pour $x = 0.25$ et $y = 0.02$	62
Figure 3.20: Variation de l'énergie de transition en fonction de la largeur de puits L_p ($y = 0.005$)... ..	63
Figure 3.21: Variation de l'énergie de transition en fonction de la largeur de puits L_p ($y = 0.02$).....	63
Figure 3.22: Variation de la longueur d'onde en fonction de la largeur de puits pour $y = 0.005$	64
Figure 3.23 : Variation de la longueur d'onde en fonction de la largeur de puits pour $y = 0.005$	64

CHAPITRE I :

Les matériaux semi-conducteurs

I.1 Introduction

Selon leurs propriétés électriques, les matériaux peuvent être classés en trois groupes: les conducteurs, les semi-conducteurs et les isolants.

Les composants électroniques tels que les diodes, les transistors et les circuits intégrés sont fabriqués à partir de ces matériaux semi-conducteurs.

Pour comprendre le fonctionnement de ces composants, on doit posséder une connaissance de base de leurs structures et de l'interaction des particules qui les composent. Pour cela, nous allons examiner dans ce chapitre les propriétés des semi-conducteurs et ces principales caractéristiques telles que la structure de bande, la masse effective, les puits quantiques ainsi que l'effet de la contrainte et de la température.

I.2 Notions fondamentales

I.2.1 L'énergie d'un électron

Dans la théorie quantique, les électrons n'occupent pas une place définie, mais ont une certaine probabilité d'occuper une région de l'espace autour du noyau. Un électron isolé, détaché de tout atome ou de tout matériau peut prendre n'importe quelle valeur d'énergie dans un solide. Par contre, dans un semi-conducteur, ce qui nous intéresse le plus, la situation est intermédiaire : l'énergie des électrons peut prendre toute valeur à l'intérieur d'un intervalle dépendant de la structure du matériau, on parle de bandes d'énergie. Il existe deux types de bandes : les bandes permises. A l'inverse, les bandes interdites [4].

Deux bandes d'énergie permises jouent un rôle particulier :

- la dernière bande complètement remplie, appelée « **bande de valence** » ;
- la bande d'énergie permise suivante appelée « **bande de conduction** ».

L'énergie qui sépare ces deux bandes est appelée gap, nommée aussi **bande interdite** tel que l'on peut voir sur la figure 1.1.

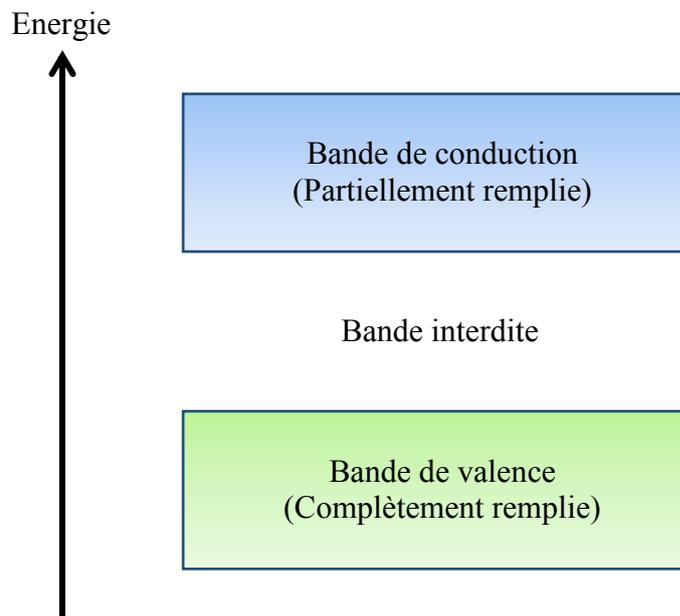


Figure 1.1 :schéma représentatif des bandes d'énergie.

La répartition des électrons dans les niveaux obéit aux lois de la thermodynamique statistique. Au zéro absolu, seuls sont peuplés les niveaux de plus basse énergie.

Dans les isolants, les bandes d'énergie les plus faibles sont entièrement pleines. La hauteur de la bande interdite est grande (> 5 eV). Il n'y a pas de niveaux d'énergie accessibles et pas de conduction.

Dans les conducteurs (métaux), la bande de conduction et la bande de valence se chevauchent. Les électrons peuvent donc passer directement de la bande de valence à la bande de conduction et circuler dans tout le solide.

L'unique différence entre un semi-conducteur et un isolant est la largeur de cette bande interdite. Dans un isolant, cette valeur est si grande (aux alentours de 6 eV pour le diamant par exemple) que les électrons ne peuvent pas passer de la bande de valence à la bande de conduction : les électrons ne circulent pas dans le solide.

Dans les semi-conducteurs, cette valeur est plus petite (1.12 eV pour le silicium, 0.66 eV pour le germanium, 2.26 eV pour le phosphore de gallium).

I.2.2 Tableau périodique

Le tableau périodique de Mendeleïev est un classement en affichage tabulaire de tous les éléments chimiques. Le tableau périodique actuel est un système où les éléments connus sont classés à ce jour. Ils sont placés de gauche à droite et de haut en bas dans l'ordre croissant de leurs numéros atomiques. Les éléments sont disposés en sept rangées horizontales appelées périodes, et en dix-huit colonnes verticales appelées groupes ou familles. En allant vers le bas et vers la gauche le rayon atomique et ainsi que le rayon ionique augmentent. En allant vers le haut et vers la droite c'est l'énergie d'ionisation, l'affinité électronique et l'électronégativité qui augmentent [5].

Les lignes de la table périodique sont appelées des périodes et les colonnes sont des groupes. Cette classification donne un autre nom à ce tableau : la classification périodique. Certains groupes ont des noms. Par exemple, le groupe 17 est celui des halogènes et le groupe 18 est celui des gaz nobles. La table est également divisée en quatre blocs avec des propriétés chimiques similaires.

Comme les positions sont ordonnées, la table peut être utilisée pour obtenir des relations entre les propriétés des éléments, ou pour prédire les propriétés de nouveaux éléments non encore découverts ou synthétisés. Le tableau périodique fournit un cadre utile pour l'analyse du comportement chimique et est largement utilisé en chimie et autres sciences.

Le tableau périodique de Mendeleïev est présenté avec une légende et un bloc des lanthanides/actinides. La légende indique les états de la matière (Solide, Liquide, Gazeux, Inconnu) et les familles d'éléments (Métaux alcalins, Métaux alcalino-terreux, Métaux de transition, Métaux pauvres, Lanthanides, Actinides, Métalloïdes, Non-métaux, Halogènes, Gaz rares). Le tableau est coloré en fonction de ces familles.

Légende																			
Sym Nom Masse atomique	n O	Solide	Liquide	Gazeux	Inconnu	Métaux alcalins	Métaux alcalino-terreux	Métaux de transition	Métaux pauvres	Lanthanides	Actinides	Métalloïdes	Non-métaux	Halogènes	Gaz rares				
1 H Hydrogène	2 He Hélium																		
3 Li Lithium	4 Be Béryllium	5 B Bore	6 C Carbone	7 N Azote	8 O Oxygène	9 F Fluore	10 Ne Neon												
11 Na Sodium	12 Mg Magnésium	13 Al Aluminium	14 Si Silicium	15 P Phosphore	16 S Soufre	17 Cl Chlore	18 Ar Argon												
19 K Potassium	20 Ca Calcium	21 Sc Scandium	22 Ti Titane	23 V Vanadium	24 Cr Chrome	25 Mn Manganèse	26 Fe Fer	27 Co Cobalt	28 Ni Nickel	29 Cu Cuivre	30 Zn Zinc	31 Ga Gallium	32 Ge Germanium	33 As Arsenic	34 Se Sélénium	35 Br Brome	36 Kr Krypton		
37 Rb Rubidium	38 Sr Strontium	39 Y Yttrium	40 Zr Zirconium	41 Nb Niobium	42 Mo Molybdène	43 Tc Technétium	44 Ru Ruthénium	45 Rh Rhodium	46 Pd Paladium	47 Ag Argent	48 Cd Cadmium	49 In Indium	50 Sn Étain	51 Sb Antimoine	52 Te Tellure	53 I Iode	54 Xe Xénon		
55 Cs Césium	56 Ba Baryum	57-71 Lanthanides	72 Hf Hafnium	73 Ta Tungstène	74 W Wolfram	75 Re Rhenium	76 Os Osmium	77 Ir Iridium	78 Pt Platine	79 Au Or	80 Hg Mercure	81 Tl Thallium	82 Pb Plomb	83 Bi Bismuth	84 Po Polonium	85 At Astatine	86 Rn Radon		
87 Fr Francium	88 Ra Radium	89-103 Actinides	104 Rf Rutherfordium	105 Db Dubnium	106 Sg Seaborgium	107 Bh Bohrium	108 Hs Hassium	109 Mt Meitnerium	110 Ds Darmstadtium	111 Rg Roentgenium	112 Cn Copernicium	113 Uut Ununseptium	114 Fl Flerovium	115 Uup Unpentium	116 Lv Livermorium	117 Uus Unseptium	118 Uuo Unoctium		
Lanthanides et Actinides																			
57 La Lanthane	58 Ce Cérite	59 Pr Praseodyme	60 Nd Néodyme	61 Pm Prométhée	62 Sm Samarium	63 Eu Europ	64 Gd Gadolinium	65 Tb Terbium	66 Dy Dysprosium	67 Ho Holmium	68 Er Erbium	69 Tm Thulium	70 Yb Ytterbium	71 Lu Lutécium					
89 Ac Actinium	90 Th Thorium	91 Pa Protactinium	92 U Uranium	93 Np Neptunium	94 Pu Plutonium	95 Am Americium	96 Cm Curium	97 Bk Berkélium	98 Cf Californium	99 Es Einsteinium	100 Fm Fermium	101 Md Mendelevium	102 No Nobelium	103 Lr Lawrencium					

Figure 1.2 :Le tableau périodique Mendeleïev

I.3 Première zone de Brillouin

La première zone de Brillouin est définie de manière unique comme la maille primitive dans l'espace réciproque. Pour la structure zinc-blende, cette zone a la forme d'un octaèdre tronqué (figure 1.3).

I.3.1 Les points de haute symétrie

- Γ : ce point est le centre de la première zone de Brillouin avec les coordonnées $k_r(0, 0, 0)$.
- X : ce point est le centre d'une face carrée de l'octaèdre qui appartient à l'un des axes k_x , k_y ou k_z . Nous avons donc :

$$k_x = \frac{2\pi}{a} (\pm 1, 0, 0), k_y = \frac{2\pi}{a} (0, \pm 1, 0) \text{ et } k_z = \frac{2\pi}{a} (0, 0, \pm 1)$$

- L : ce point est le centre d'une face hexagonale de l'octaèdre dont les coordonnées sont : $k_L = \frac{2\pi}{a} (1, 1, 1)$
- W : ce point se trouve sur l'un des sommets des faces carrées. Les coordonnées sont : $k_W = \frac{2\pi}{a} (0, \frac{1}{2}, 1)$
- Z : ce point est situé sur la ligne qui joint le centre d'une face carrée. Les coordonnées sont : $k_Z = \frac{2\pi}{a} (1, \frac{1}{2}, 1)$

I. 3. 2 Les lignes de haute symétrie

Les lignes de haute symétrie dans la première zone de Brillouin sont :

- Δ : cette ligne représente la direction [100]. Elle relie le centre Γ au point X
- Σ : c'est un point appartenant au plan de symétrie $k_x = k_y$ ou $k_y = k_z$ ou $k_x = k_z$.
- Λ : cette ligne est la direction [100]. Elle relie le centre de la zone (Γ) au centre d'une face hexagonale qui est le point L de l'octaèdre.

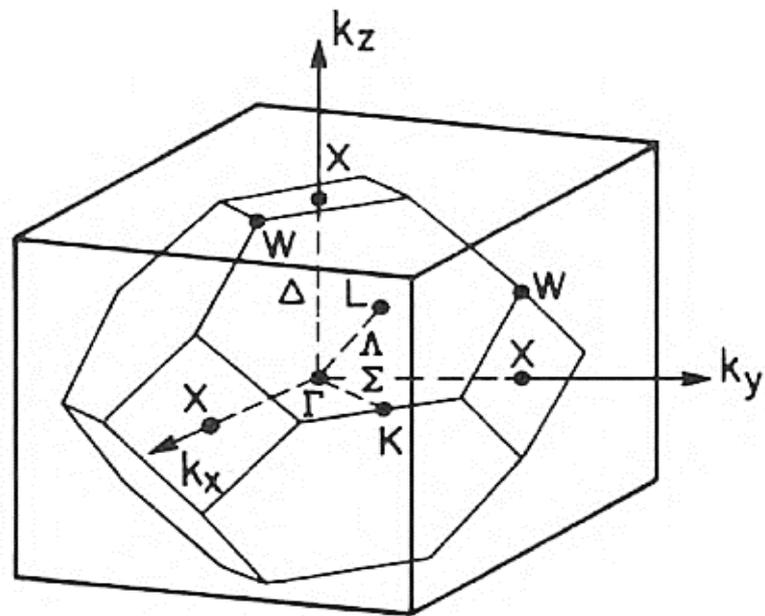


Figure 1.3 :Première zone de Brillouin de la structure zinc blende avec la représentation des points et lignes de hautes symétries.

I. 4 Semi-conducteurs III-V

I. 4.1 Définition

Un semi-conducteur à l'état pur (intrinsèque) n'est pas un bon conducteur ni un bon isolant. Les éléments les plus utilisés pour les semi-conducteurs sont le silicium, le germanium et le carbone ainsi que des éléments composés tels que l'arséniure de gallium (GaAs) et le phosphure d'indium (InP), sont aussi couramment utilisés pour les semi-conducteurs.

Les matériaux semi-conducteurs III-V sont des corps composés formés à partir d'un élément de la colonne III et d'un élément de la colonne V du tableau de la classification périodique de Mendeleïev (figure 1.2). Ainsi de nombreux composés binaires, ternaires et quaternaires peuvent être réalisés.

III		IV		V		VI	
	5 B Bore	6 C Carbone	7 N Azote	8 O Oxygène			
	13 Al Aluminium	14 Si Silicium	15 P Phosphore	16 S Soufre			
30 Zn Zinc	31 Ga Gallium	32 Ge Germanium	33 As Arsenic	34 Se Sélénium			
48 Cd Cadmium	49 In Indium	50 Sn Étain	51 Sb Antimoine	52 Te Tellure			
80 Hg Mercure	81 Tl Thallium	82 Pb Plomb	83 Bi Bismuth	84 Po Polonium			

Tableau 1.1 :Tableau périodique partiel [5]

I. 4.2 Les composés binaires

Les composés binaires possibles tels que l'arséniure de gallium (GaAs), l'arséniure d'indium (InAs) n'ont pas tous le même intérêt et le même potentiel. L'étude de leurs propriétés, et en particulier de la structure de bandes, montre que les éléments les plus légers donnent des composés à large bande interdite dont les propriétés se rapprochent de celles des isolants.

Les composés contenant du bore ou de l'aluminium entrent dans cette catégorie ; ils ont en général peu d'intérêt pour l'électronique rapide [6], 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 [6].

A l'autre extrémité, les éléments lourds comme le thallium ou le bismuth donnent des composés à caractère métallique. Pour des applications électroniques et optoélectroniques, on considérera essentiellement les composés à base de gallium (GaAs, GaSb) ou d'indium (InP, InAs) dont les propriétés sont les plus intéressantes. Le tableau (1.2) résume quelques paramètres pour différents matériaux de la famille III-V.

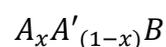
Composés III-V	E_g (eV)	m^*/m_0	μ ($cm^2/V.s$)	a (Å)
<i>BN</i>	7.5			3.6150
<i>AlP</i>	2.45			5.4510
<i>AlAs</i>	2.16			5.6605
<i>AlSb</i>	1.58	0.12	200	6.1355
<i>BP</i>	2.0			4.5380
<i>GaN</i>	3.36	0.19	380	a = 3.189 c = 5.185
<i>GaP</i>	2.26	0.82	110	5.4512
<i>GaAs</i>	1.42	0.067	8500	5.6533
<i>GaSb</i>	0.72	0.042	5000	6.0959
<i>InP</i>	1.35	0.077	4600	5.8686
<i>InAs</i>	0.36	0.023	33000	6.0584
<i>InSb</i>	0.17	0.0145	80000	6.794

Tableau 1.2 : Propriétés des principaux composés binaires III-V à 300 K[9].

I. 4.3 Les composés ternaires et quaternaires

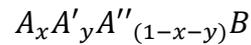
L'intérêt pratique des semi-conducteurs III-V est encore considérablement renforcé par la possibilité de réaliser des alliages et cela par substitution partielle de l'un des éléments par un autre élément de la même colonne. On peut obtenir, par exemple, des alliages ternaires, ou quaternaires qui sont identifiés de la façon suivante :

- **Alliages ternaires** : S'il y a substitution de 2 atomes sur l'un des sous réseaux, soit:



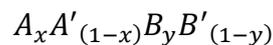
Exemple : $Ga_x In_{(1-x)} P$

-
- **Alliages quaternaires 1+3** : S'il y a substitution de 3 atomes sur des sous réseaux soit



Exemple : $Ga_x In_y Al_{(1-x-y)} B$

- **Alliages quaternaires 2+2** : S'il y a substitution de 2 atomes sur chacun des deux sous réseaux, soit :



Exemple: $Ga_x In_{(1-x)} P_y As_{(1-y)}$

La plupart des solutions solides ainsi réalisées sont complètes, la loi de Végard (relation linéaire entre le paramètre de réseau et la composition) est approximativement suivie, et on observe une évolution progressive et régulière des propriétés (dont la bande interdite et les paramètres cristallins) en fonction du taux de substitution [7].

I.5 Caractéristiques structurales

I. 5.1 Les systèmes cristallins

A l'exception des matériaux III-V nitrurés qui cristallisent suivant la structure hexagonale Wurtzite (Diamant), la majorité des matériaux III-V cristallisent suivant la structure cubique Zinc Blende qui est constituée de deux sous-réseaux cubique à face centrée CFC, l'un d'éléments III et l'autre d'éléments V, décalés l'un par rapport à l'autre de $(1/4, 1/4, 1/4)$ suivant la direction [111].

Cette structure est représentée soit en perspective, soit en projection sur un plan formé par une des faces du cube.

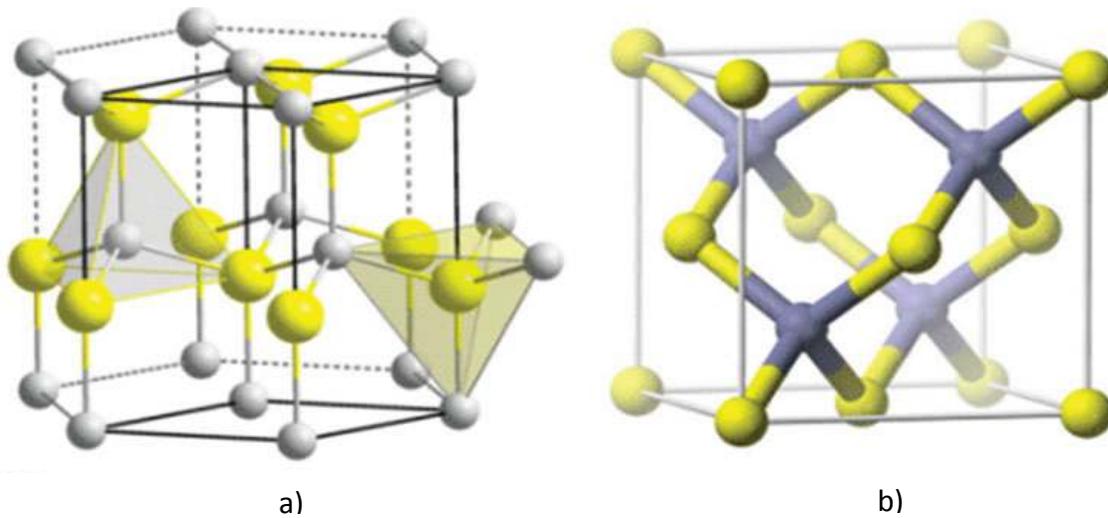


Figure 1.4 :Mailles cristallographiques des structures a) wurtzite , b) Zinc Blende[8]

I. 5.2 Les hétéro-structures :

Une hétérostructure est constituée d'un matériau semi-conducteur A pris en « sandwich » entre deux barrières d'un matériau semi-conducteur [9].

➤ Hétérostructures de type I :

Dans ce type de structures, les électrons et les trous seront confinés dans le même matériau B. La probabilité de recombinaison sera donc élevée.

$$\Delta E_g = E_{g1} - E_{g2} = \Delta E_c + \Delta E_v \quad (1.1)$$

$$\Delta E_c > 0 \text{ et } \Delta E_v > 0$$

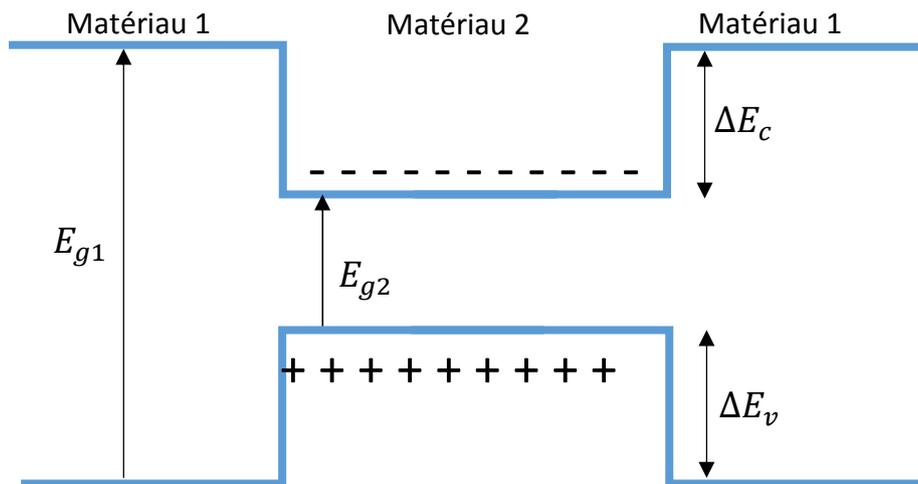


Figure 1.5 :Hétérostructure de type I.

➤ **Hétérostructure de type II :**

Les extrema des bandes de conduction et de valence sont spatialement séparés, les électrons et les trous seront donc confinés séparément et leurs recombinaisons seront moins probables

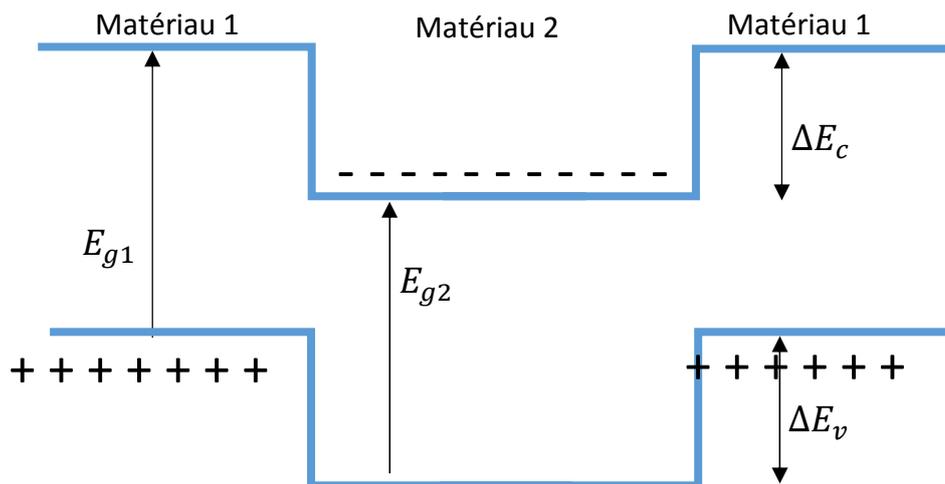


Figure 1.6 :Hétérostructure de type II.

I. 6 La masse effective

I. 6.1 Masse effective des électrons

La masse effective des électrons est inversement proportionnelle à la dérivée seconde de la courbe de dispersion de l'énergie dans l'espace \vec{k} .

$$m_e^* = \frac{\hbar^2}{d^2E/dk^2} \quad (1.2)$$

I. 6.2 Masse effective des trous

La masse effective des trous est définie comme celle des électrons, mais la bande de valence des semi-conducteurs cubique est composée de deux branches dégénérées en $K=0$. Les énergies des trous sont comptées positivement vers le bas. La bande de plus grande courbure, bande inférieure, correspond à des trous de masse effective inférieure (bande des trous légers) et la bande de plus faible courbure, bande supérieure, correspond à celle des trous lourds permettent de définir des masses effectives isotropes. Ils ont été calculés pour la plupart des semi-conducteurs.

$$m_{hh}^* = \frac{m_0}{\gamma_1 - \gamma} \quad , \quad m_{lh}^* = \frac{m_0}{\gamma_1 + \gamma} \quad (1.3)$$

$$\gamma = \sqrt{2(\gamma_2^2 + \gamma_3^2)} \quad (1.4)$$

γ_1, γ_2 et γ_3 sont les paramètres de Luttinger.

I. 7 L'énergie de gap

I. 7.1 Semi-conducteur à gap direct

On parle de gap direct lorsque les deux extremums de la bande de conduction et celui de la bande de valence correspondent au même quasi-moment (quantité de mouvement associée au vecteur d'onde dans la première zone de Brillouin). Les porteurs de

charge des matériaux à gap direct peuvent passer d'une bande à l'autre en échangeant simplement un photon, dont la quantité de mouvement est négligeable à ces niveaux d'énergie. Un certain nombre de semi-conducteurs III-V sont à gap direct, comme l'arséniure de gallium GaAs et l'arséniure d'indium InAs.

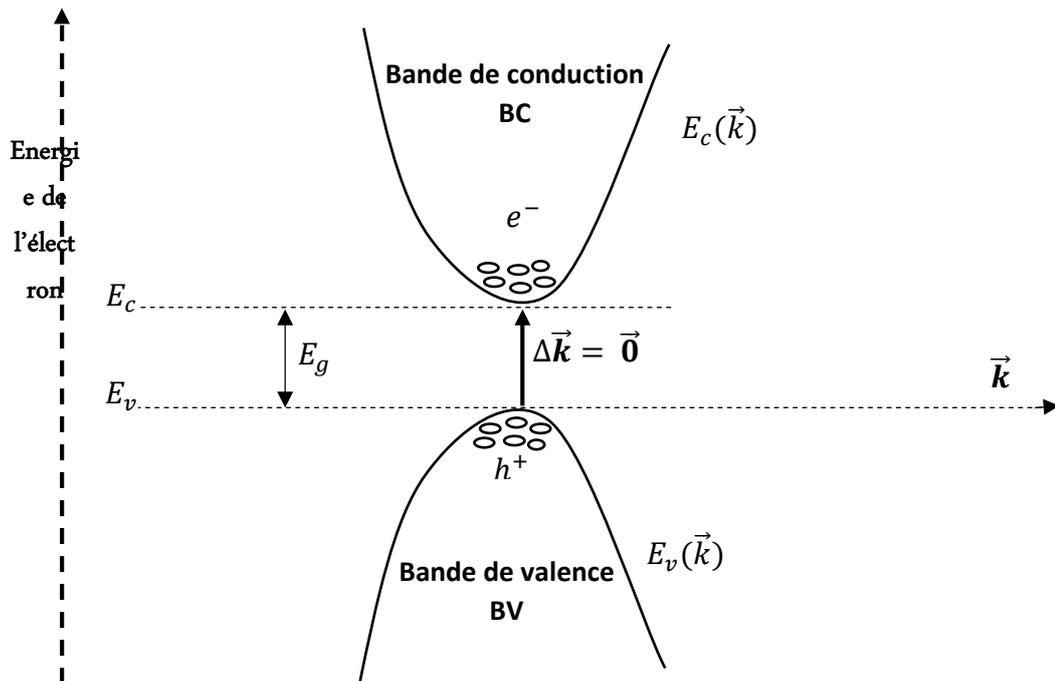


Figure 1.7 :Semi-conducteur à gap direct.

I. 7. 2 Semi-conducteur à gap indirect:

On parle de gap indirect lorsque la différence entre les vecteurs d'onde de ces deux extremums est non nulle. Les porteurs des matériaux à gap indirect doivent interagir à la fois avec un photon et avec un phonon tel que l'en voit sur la figure 1.8 afin de modifier leur vecteur d'onde, ce qui rend la transition bien moins probable comme l'antimoniure d'aluminium AlSb; le silicium et le germanium sont également des semi-conducteurs à gap indirect.

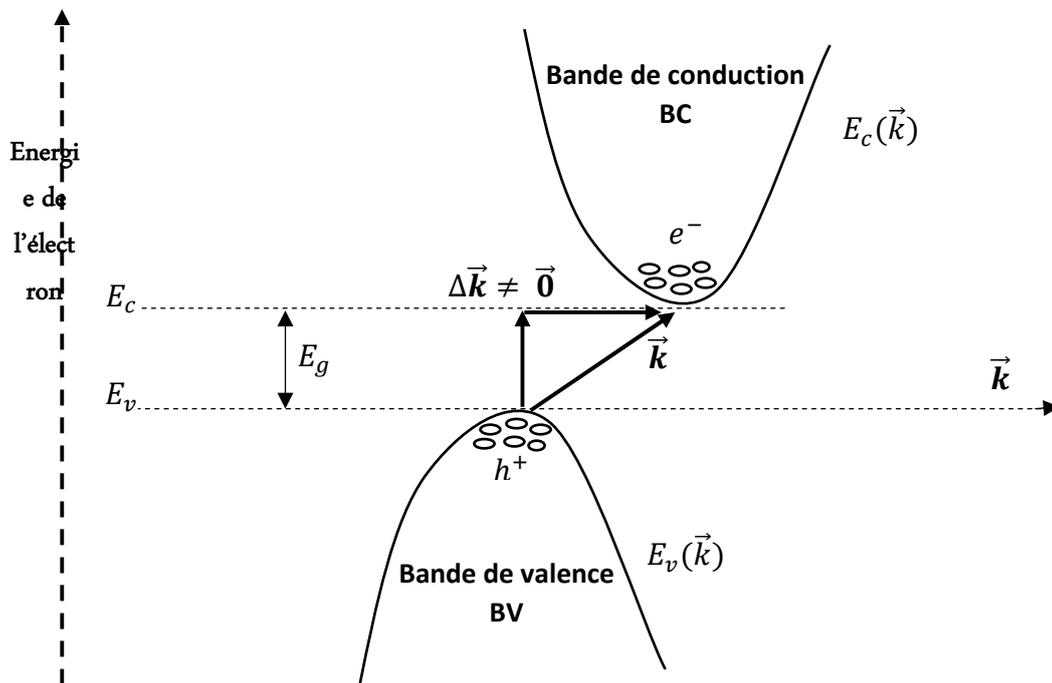


Figure 1.8: Semi-conducteur à gap indirect.

Les matériaux III-V offrent une grande variété de compositions permettant de modifier leurs propriétés électroniques.

Les points du graphe de la figure 1.9 montrent la position des composés binaires, et les lignes représentent l'évolution du gap E_g et du paramètre cristallin a en fonction de la composition des alliages ternaires.

L'utilité de ce diagramme est très importante car elle permet de connaître la composition de tout alliage ternaire susceptible d'être déposé en couche mince par épitaxie sur un substrat binaire tel que le *GaAs* ou l'*InP* en tenant compte que le paramètre cristallin doit être très proche de celui du substrat [10].

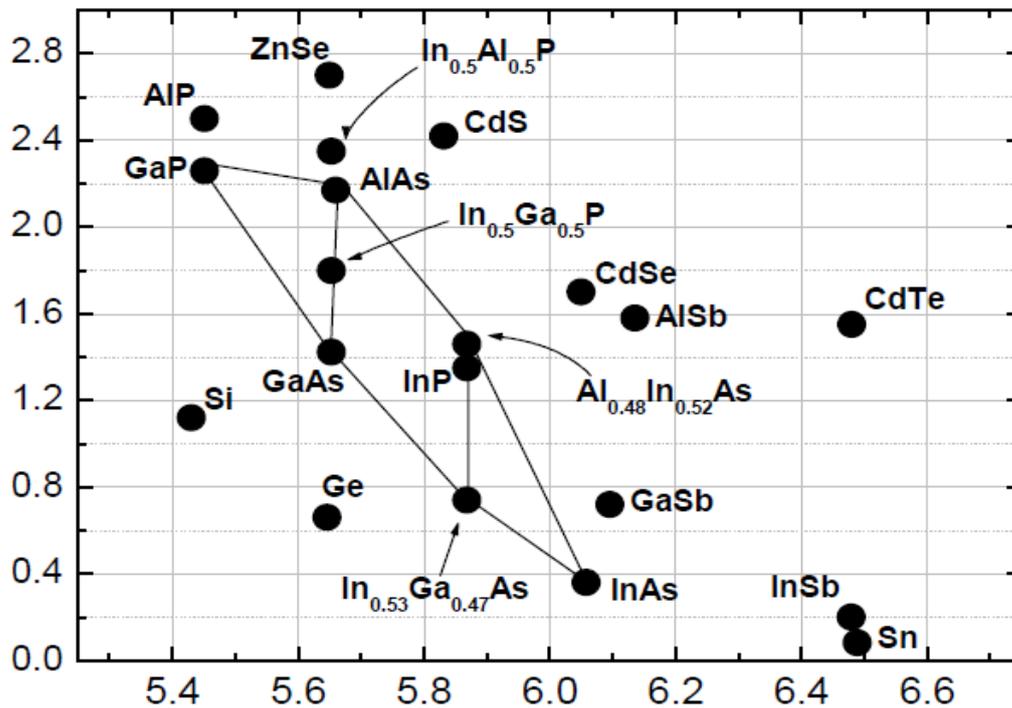


Figure 1.9 : l'énergie de gap en fonction du paramètre de maille pour les différents alliages [10].

I. 8 La température

Considérons le cas d'un semi-conducteur intrinsèque. L'énergie du gap E_g représente en fait la séparation minimum d'énergie entre la bande de conduction E_c et la bande de valence E_v soit :

$$E_g = E_c - E_v \quad (1.5)$$

E_g dépend fortement de la température. En effet cette énergie est le résultat de deux effets: soit un changement en volume due à la variation de la température, et une dispersion électron-photon qui dépend aussi de la variation de cette température, qui fait varier le maximum de la bande de valence et le minimum de la bande de conduction. L'énergie du gap dépend de la température selon la loi ci-dessous énoncé par Thurmond (1975) et qui s'exprime par :

$$E_g(T) = E_g(0) - \frac{A.T^2}{B+T} \quad (1.6)$$

Avec A et B sont les paramètres empiriques de Varshni donnés dans le tableau(1.3) pour les différentes directions.

Paramètres	E_g^Γ	E_g^X	E_g^L	A^Γ	B^Γ	A^X	B^X	A^L	B^L
Unité	(eV)	(eV)	(eV)	(meV/K)	(K)	(meV/K)	(K)	(meV/K)	(K)
<i>Si</i>	4.34	1.1557		0.391	125	0.702	1108	-	-
<i>GaAs</i>	1.519	1.981	1.815	0.5405	204	0.460	204	0.605	204
<i>InP</i>	1.423	2.384	2.014	0.363	162	-	-	0.363	162
<i>AlSb</i>	2.386	1.696	2.329	0.420	140	0.390	140	0.580	140
<i>InAs</i>	0.417	1.433	1.133	0.276	93	0.276	93	0.276	93
<i>GaP</i>	2.886	2.35	2.72	-	-	0.5771	372	0.5771	372

Tableau 1.3 :Energies de gap et les paramètres de Varshni des principaux semi-conducteurs à $T = 0k$ au voisinage des points Γ, X, L [9].

Et pour les composés qui ont une structure de type wurtzite, le gap et les paramètres sont donnés dans le tableau 1.4 suivant:

Paramètre	m_c^Γ	m_c^X	E_g	A	B	P	α	φ
Unité	m_0	m_0	eV	meV/K	K	-	meV/K	k
<i>InN</i>	0.11	0.11	1.994	0.245	624	2.9	0.21	453
<i>GaN</i>	0.20	0.18	3.47	0.909	830	2.62	0.599	504
<i>AlN</i>	0.33	0.25	6.20	1.799	1462	3.0	0.83	575

Tableau 1.4 :Les différents paramètres de nitrure de type wurtzite [9].

Une loi physique plus précise a été proposée récemment par Passler donnée par:

$$E_g(T) = E_g(0) - \frac{\alpha \cdot \varphi}{2} \left[\sqrt[p]{1 + \left(\frac{2T}{\varphi}\right)^p} - 1 \right] \quad (1.7)$$

Avec :

φ : Température moyenne des phonons.

p : Paramètres de dispersion des phonons.

α : Constante.

Les différents paramètres sont donnés par le tableau 1.5 suivant:

Paramètres	P	α	φ
Unité	-	meV/K	K
<i>Si(X)</i>	2.33	0.318	406
<i>Ge(L)</i>	1.38	0.407	230
<i>GaAs(Γ)</i>	2.44	0.472	230
<i>InP(Γ)</i>	2.51	0.391	243
<i>GaP(X)</i>	2.09	0.480	358
<i>InSb(Γ)</i>	2.68	0.250	136
<i>InAs(Γ)</i>	2.10	0.281	143
<i>AlP(X)</i>	2.5	0.350	130
<i>ZnSe(Γ)</i>	2.67	0.490	190
<i>ZnTe(Γ)</i>	2.71	0.454	145

Tableau 1.5 : Les paramètres de Passler à T=0 K [9].

I. 9 Détermination des paramètres (loi de Végard)

Pour calculer les paramètres d'une structure ternaire ou quaternaire il faut passer, en général, par la loi de Végard (loi d'interpolation linéaire). Les matériaux ternaires sont formés à partir de deux matériaux binaires AC et BC ayant un élément commun. Si x est la concentration en A , alors $(1 - x)$ est la concentration en B .

Les paramètres du matériau ternaire T varient selon une loi linéaire, fonction des paramètres des deux matériaux A et B :

$$T(x) = x.T_{AC} + (1 - x).T_{BC} \quad (1.8)$$

Par exemple, pour un alliage ternaire $GaAs_xP_{(1-x)}$, le paramètre de maille a_{GaAsP} s'écrira:

$$a_{GaAsP} = x.a_{GaAs} + (1 - x).a_{GaP} \quad (1.9)$$

Où a_{GaAs} et a_{GaP} sont respectivement les paramètres de maille des deux binaires GaAs et GaP.

I.10 La contrainte

I. 10.1 Compression et tension

Lorsqu'on fait croître un semi-conducteur sur un autre, si les deux matériaux constituant le substrat et la couche active ont des paramètres de mailles différents, le matériau constituant la couche de plus grande épaisseur impose sa maille à l'autre au voisinage de l'interface, donc pour les couches suffisamment fines, la maille du matériau épitaxié se déforme de manière élastique dans les deux directions parallèle ($k_{//}$) et perpendiculaire (k_{\perp}) à la surface de croissance.

Les effets de la contrainte sur les propriétés électroniques et optiques des semi-conducteurs ont fait l'objet de plusieurs études récentes dans le but de réaliser des dispositifs optoélectroniques fonctionnant à des vitesses élevés.

Due au désaccord des paramètres de maille du substrat et de la couche épitaxiée, la contrainte modifie les caractéristiques intrinsèques du semi-conducteur comme l'énergie de gap, les potentiels de déformation ainsi que les paramètres de structure de bandes comme les masses effectives.

Ces changements présentent plusieurs intérêts pour la réalisation des composants plus performants, et surtout avec des courants de seuils plus faibles [11].

La couche épitaxiée est déformée en compression ($a_s < a_e$) et en tension ($a_s > a_e$) par des déformations bi-axiales (ε_{xx} et ε_{yy}) est uni-axial (ε_{zz}) [10]

➤ Bi-axiale dans le plan croissance :

$$\varepsilon_{\perp} = \varepsilon_{xx} = \varepsilon_{yy} = \frac{a_s - a_e}{a_e} \quad (1.10)$$

➤ Uni-axial dans la direction de croissance :

$$\varepsilon_{\perp} = \varepsilon_{zz} = \frac{2.C_{12}}{C_{11}} \varepsilon_{xx} \quad (1.11)$$

Où :

ε : La déformation de maille.

a_s : Paramètre de maille de substrat.

a_e : Paramètre de maille de la couche épitaxie.

C_{11} et C_{12} : Constants d'élasticité.

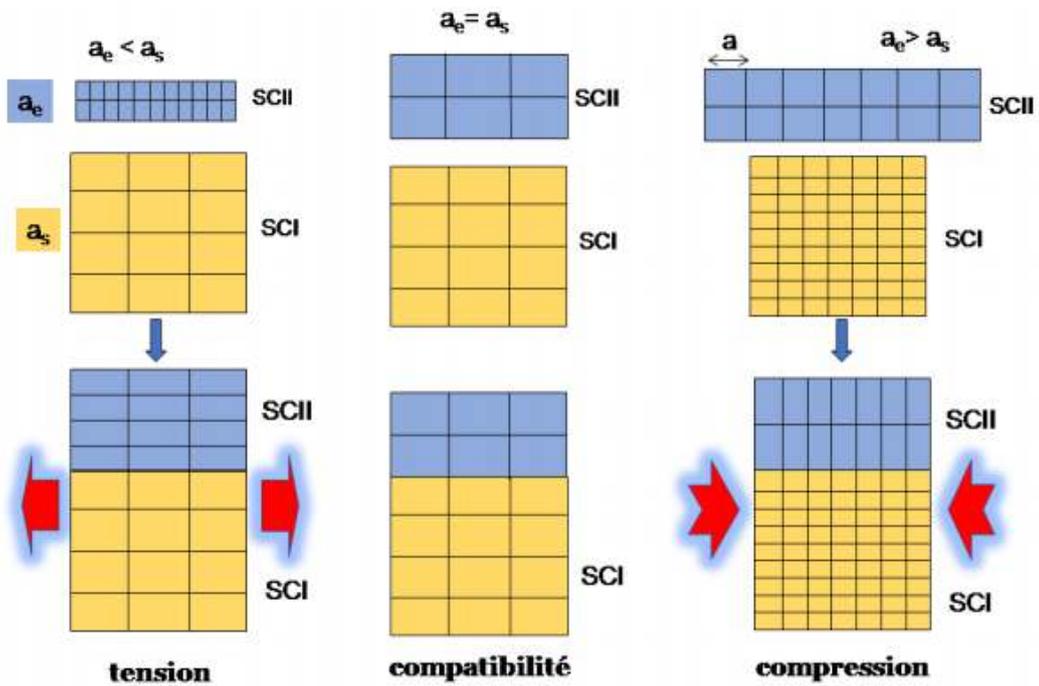


Figure 1.10 : Illustration de deux types de déformation, couche en tension et couche en compression.

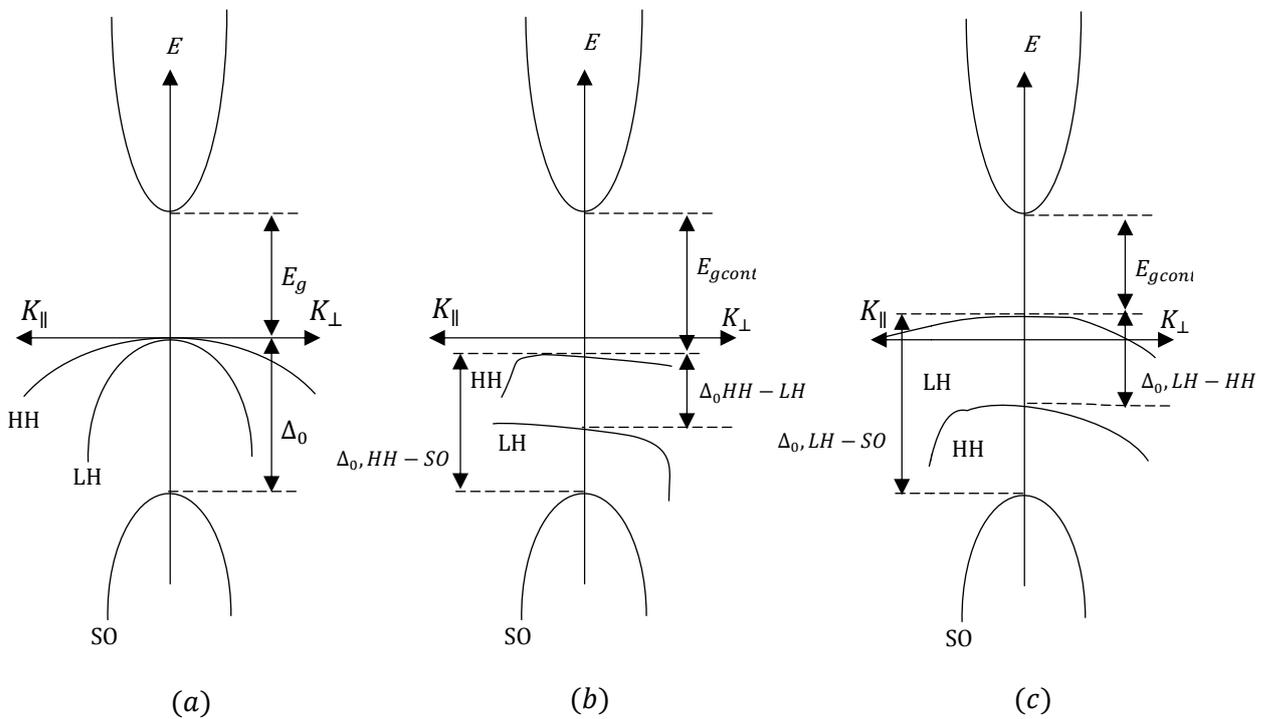


Figure 1.11: Représentation schématique de la structure de bande d'un matériau SC (a) non contraint, (b) contrainte compressive, (c) contrainte en tension

I. 10.2 Épaisseur critique

L'épaisseur au-delà de laquelle la couche épitaxiale commence à relaxer est appelée épaisseur critique. Cette épaisseur critique dépend des propriétés mécaniques des matériaux (coefficients élastiques C_{ij}), ainsi que du degré de désaccord paramétrique entre le substrat et la couche épitaxiée.

Si l'épaisseur de la couche épitaxiale dépasse la valeur de l'épaisseur critique, les mailles ne subissent plus les contraintes mécaniques imposées par le substrat et le paramètre de maille atteint celui du matériau massif. Le réseau est totalement relaxé [11].

$$\frac{\Delta a}{a} = \frac{a_s - a_e}{a_e} \quad (1.12)$$

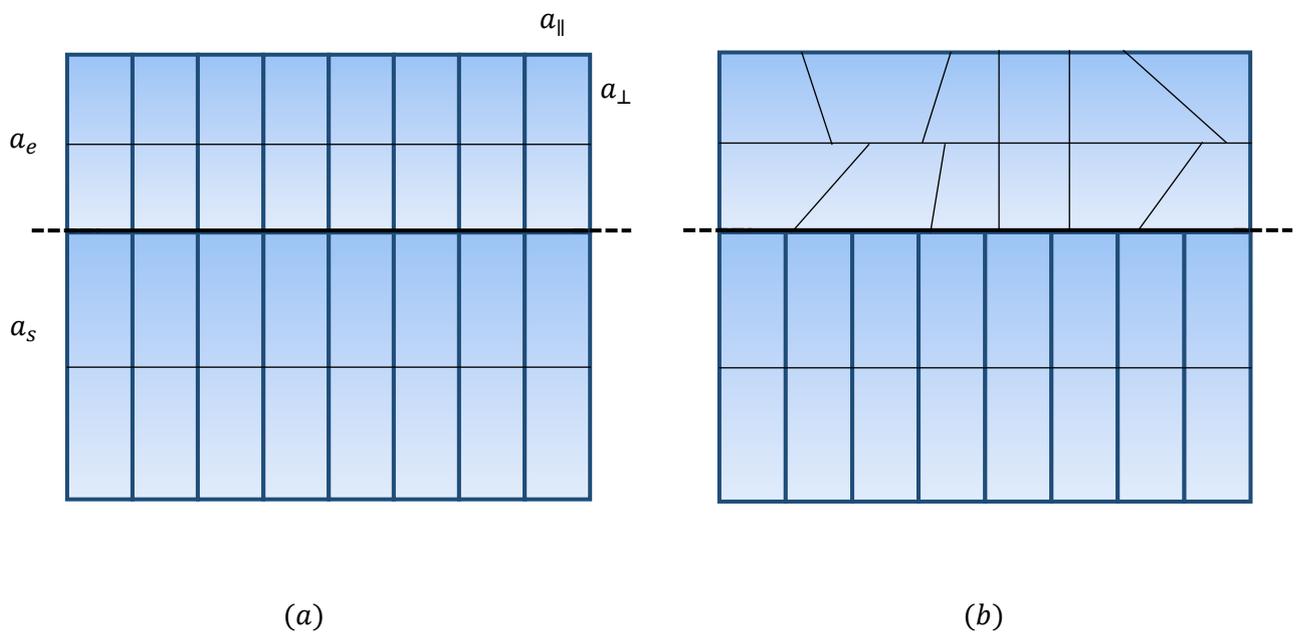


Figure 1.12: Schéma montrant une couche contrainte en compression (a) et une autre couche contrainte relaxée (b).

Dans une structure à puits quantique, et comme on a une double hétéro structure (DHS) la contrainte est répartie sur les deux interfaces de croissances comme montre la figure1.13:

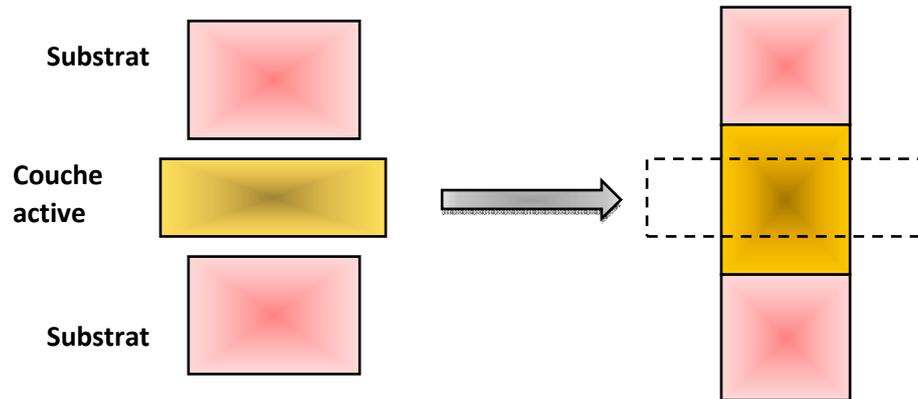


Figure 1.13 : la contrainte dans le cas d'une DHS.

Pour calculer l'épaisseur critique, on utilise le modèle proposé par Matthews et Blackeslee qui nous donne l'expression suivante [12]:

$$h_c = \frac{a}{\beta \cdot \sqrt{2} \cdot \pi \cdot \varepsilon} * \frac{1-0,25 \cdot \gamma}{1+\gamma} * \ln \left(\frac{h_c \cdot \sqrt{2}}{a} + 1 \right) \quad (1.13)$$

Où :

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

ε : est le désaccord paramétrique.

γ : est le coefficient de poisson donnée par :

$$\gamma = \frac{c_{12}}{c_{11} + c_{12}} \quad (1.14)$$

Avec :

c_{ij} : Les coefficients élastiques.

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

structure	Couche unique	Puits quantique	Super réseau
valeur de β	4	2	1

Tableau 1.6 : valeur de β selon le type de structure.

I. 11 Puits quantique

I. 11.1 Définition

Pour réaliser un puits quantique, on utilise deux matériaux (A) et (B), la méthode consiste à faire croître l'épitaxie du matériau B sur le substrat du matériau A, ensuite en faisant croître de nouveau le matériau A sur le matériau B [13]. Les matériaux (A) et (B) doivent avoir des énergies de bande interdite différentes.

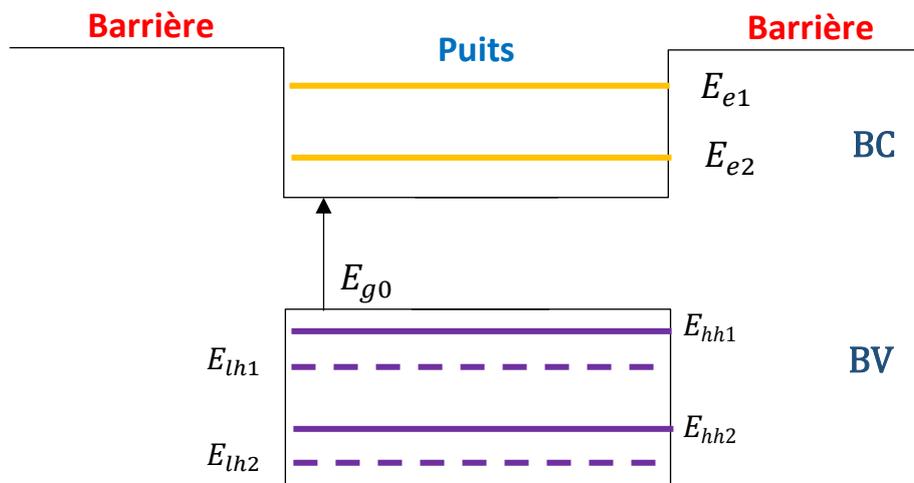


Figure 1.14 : Illustration d'un puits quantique [13].

Où :

E_{en} : Le nième niveau d'énergie des électrons ($n=1,2,\dots$).

E_{hhn} : Le nième niveau d'énergie des trous lourds ($n=1,2,\dots$).

E_{lhn} : Le nième niveau d'énergie des trous légers ($n=1,2,\dots$).

D'autre part, lorsque l'épaisseur de la couche active devient comparable à la longueur d'onde de De Broglie λ_F donnée par:

$$\lambda_F = \frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2 \cdot m_e^* \cdot E_F}} \quad (1.15)$$

E_F : Niveau de Fermi.

L'effet quantique apparait et le spectre d'énergie devient discret. L'augmentation de l'épaisseur de puits augmente le nombre de niveaux d'énergies, et diminue l'espacement entre ces niveaux, ceci traduit une limite sur l'épaisseur qui dépend du matériau:

$$E_{n+1} - E_n > \hbar t \quad (1.16)$$

Où :

E_{n+1}, E_n : Niveaux d'énergie discrets.

t : Constante de temps prenant en compte toute les diffusions.

Il faut aussi que l'écart entre deux niveaux soit plus grand que la distribution de Fermi due à la température [14].

$$E_{n+1} - E_n > K_b T \quad (1.17)$$

Où :

K_b : étant la constante de Boltzmann et T la température.

Avec l'apparition de l'effet quantique, les états électroniques ne correspondent plus au bas de la bande de conduction, mais ils sont quantifiés en structure de sous bande.

Le problème principal réside dans l'interaction entre l'onde optique et les porteurs, à cause de la faible largeur de puits. Ce désavantage peut être surmonté en adoptant une structure avec un confinement séparé il existe deux types de confinement [14] que nous allons voir dans le paragraphe suivant:

I.11.2 Types de confinements

- **Confinement à saut d'indice SCH :**

Dans ce type, le guide d'onde optique est réalisé grâce à un matériau barrière de composition constante [15] comme le montre la figure suivante :

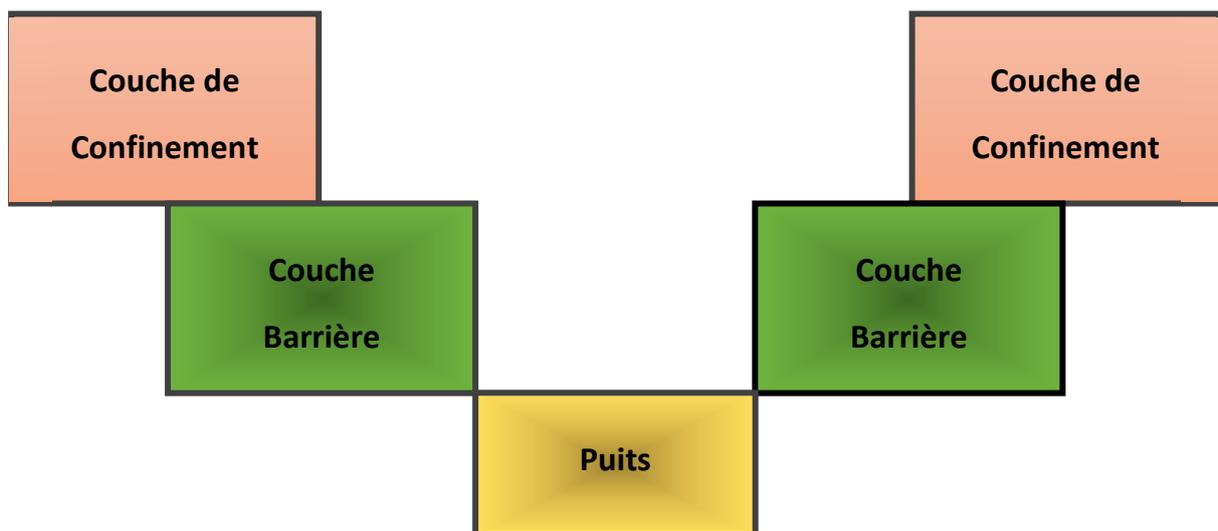


Figure 1.15 :Schématisation d'une structure de type SCH [14].

- **Confinement à indice graduel GRINSCH:**

Dans ce type, la structure est réalisée grâce à un matériau barrière de composition graduelle, épitaxiée sur la couche de confinement comme le montre sur la figure 1.16.

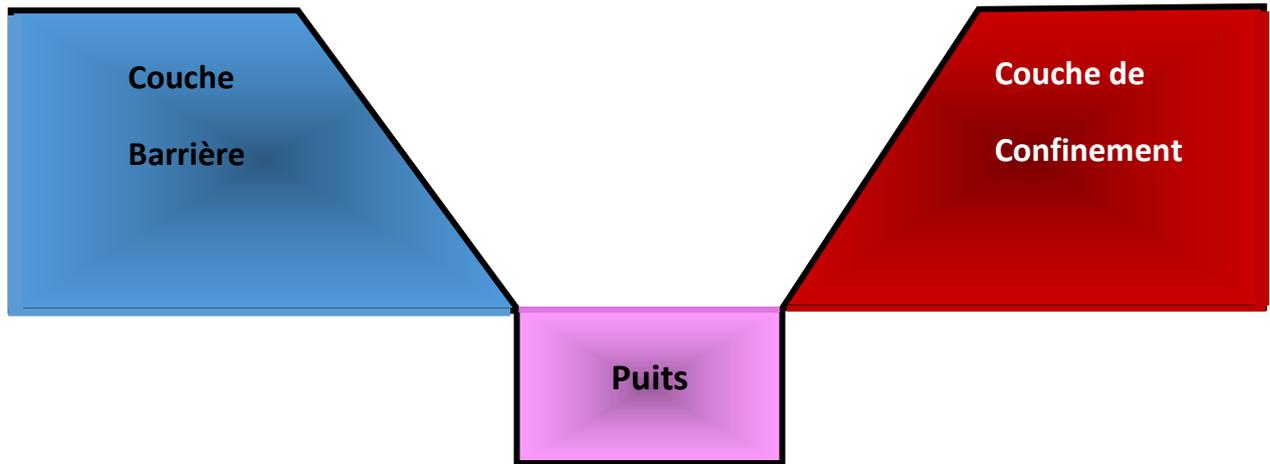


Figure 1.16: Schématisation d'une structure de type GRINSCH [14].

I. 11.3 Les Multi-Puits Quantiques

Un multi-puits quantique est constitué d'une succession alternée de couches de deux semi-conducteurs, lorsque les couches intermédiaires sont suffisamment épaisses, les fonctions d'ondes des électrons dans le puits de la bande de conduction ne pénètrent pas suffisamment les barrières qui les confinent.

Pour qu'il y ait un recouvrement appréciable avec la fonction d'onde en dehors du puits, ce qui implique une localisation de l'électron dans le puits dans lequel il se trouve.

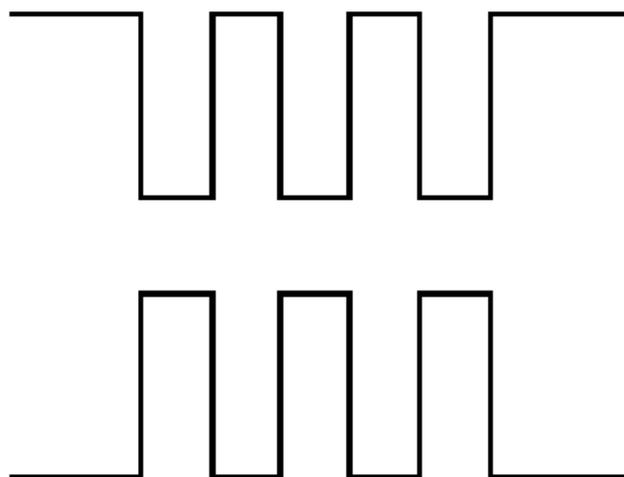


Figure 1. 17 :Schématisation d'une structure à multi-puits quantiques [15].

I.11.4. Énergie de quantification

Le but de ce paragraphe est de rappeler succinctement la méthode de détermination des niveaux quantifiés dans un puits quantique tel représenté sur la figure 1.14. Le puits a une profondeur V et de largeur L_p .

En prenant en compte les niveaux discrets le long de la direction z et le continuum d'états le long des directions x et y , les états d'énergie d'une particule confinée dans un puits quantique sont donnés par l'expression:

$$E(n, k_x, k_y) = E_n + \frac{\hbar^2}{2m^*} (k_x^2 + k_y^2) \quad (1.18)$$

L'équation de Schrödinger a les expressions suivantes:

$$\left\{ \begin{array}{l} -\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2\psi}{dz^2} + (V - E_n)\psi = 0 \text{ à l'extérieur du puits } \quad (z \geq L_p, z \leq 0) \\ (1.19) \\ -\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2\psi}{dz^2} - E_n\psi = 0 \text{ dans le puits } \quad (0 \leq z \leq L_p) \end{array} \right.$$

Où \hbar est la constante de Planck, ψ est la fonction d'onde, V est la profondeur du puits de potentiel, L_p est l'épaisseur du puits, m^* représente la masse effective de la particule.

L'écriture des conditions de raccordement des fonctions d'ondes et de leurs dérivées $\frac{1}{m^*} \frac{d\psi}{dz}$ qui doivent être continues aux interfaces $z=0$ et $z=L_p$, dans le cas de puits finis on aboutit à la forme suivante de la fonction enveloppe:

$$\psi = \begin{cases} A \exp(k_1 z) & , \quad z \leq 0 \\ B \exp(k_2 z + \delta) & , \quad 0 \leq z \leq L_p \\ C \exp(-k_1 z) & , \quad z \geq L_p \end{cases} \quad (1.20)$$

$$\text{Avec } k_1 = \left(\frac{2m^*(V-E_n)}{\hbar^2} \right)^{1/2} \quad \text{et} \quad k_2 = \left(\frac{2m^*E_n}{\hbar^2} \right)^{1/2}$$

où A, B, C et δ sont des constantes.

L'équation aux valeurs propres donnée par l'expression [15]:

$$\frac{\sqrt{2m_1E_n}}{\hbar} L_p = n\pi - 2 \arctg \left(\sqrt{\frac{m_2E_n}{m_1(V-E_n)}} \right) \quad (1.21)$$

où m_2 et m_1 sont respectivement les masses effectives de l'électron dans le puits et la barrière. Le potentiel V est une fonction de l'écart d'énergie de bande interdite ΔE_g de part et d'autre de l'hétérojonction puits/barrière, et est donnée par:

$$V = Q \cdot \Delta E_g \quad \text{avec} \quad \Delta E_g = E_{gbar} - E_g \quad (1.22)$$

Où E_{gbar} et E_g sont les énergies des bandes interdites des matériaux de barrière et du puits et $Q=70\%$.

I.12 Conclusion

Dans le premier chapitre, nous avons présentés les principales notions et propriétés des semi-conducteurs en générale et des semi-conducteurs III-V en particulier. Nous avons vu leurs cristallographies et quelques notions sur la structure des bandes. Ensuite, nous avons abordé les propriétés des hétéro-structures, la notion de la contrainte et finalement les principales notions théoriques des structures à puits quantiques qui vont nous aider à bien entamer le chapitre suivant.

Liste des tableaux

Tableau 1.1 : Tableau périodique partiel	9
Tableau 1.2 : Propriétés des principaux composés binaires III-V à 300 K	10
Tableau 1.3 : énergies de gap et les paramètres de Varshni des principaux semi-conducteurs a t=0k au voisinage des points Γ, X, L	18
Tableau 1.4 : Les différents paramètres de nitrure de type wurtzite.....	18
Tableau 1.5 : Les paramètres de Passler à T=0 k	19
Tableau 1.6 : valeur de β selon le type de structure	25
Tableau 2.1: Les énergies de bande interdite E_0, E_g^x et E_g^L , pour les binaires <i>GaP</i> et <i>GaAs</i> à 300 K.....	35
Tableau 2.2 : Energies de gap et les paramètres de Varshni.....	37
Tableau 2.3 : Masse effective des électrons pour certains Binaires <i>GaP</i> et <i>GaAs</i>	38
Tableau 2.4 :Potentiels de déformation pour GaAs et GaP.....	40

Chapitre II

Etude de la structure à puits quantique à base de GaAsP/GaP

II.1 Introduction

Après avoir donné un bref aperçu dans le premier chapitre sur les principales généralités sur les semi-conducteurs, nous allons aborder de près l'étude de notre structure GaAs_xP_{1-x}/GaP constitué des éléments de la colonne III (Ga) et de la colonne V (As, P) de la table périodique des éléments (figure 1.2), ses caractéristiques ainsi que les nombreux avantages qu'elle présente.

Dans ce chapitre aussi, nous allons présenter les résultats de calcul des énergies de quantification et l'énergie de transition dans cette structure.

II.2 Description du phospho-arséniure de gallium (GaAsP)

Le phospho-arséniure de gallium ou arséniure-phosphure de gallium (GaAsP) est un composé chimique d'arsenic, de gallium et de phosphore.

C'est un matériau semi-conducteur III-V à gap direct, utilisé en particulier pour réaliser des composants opto-électroniques, des diodes électro-luminescentes dans la lumière visible, et des photodétecteurs, des cellules photovoltaïques et des fenêtres optiques.

II.2.1 Caractéristiques structurelles

II.2.1.1 Structure cristalline

A l'exception des matériaux III-V nitrurés qui se cristallisent suivant la structure hexagonale Wurtzite, la majorité des matériaux III-V se cristallisent suivant la structure cubique Zinc Blende qui est constituée de deux sous-réseaux cubique à face centrée CFC, l'un d'éléments III et l'autre d'éléments V, décalés l'un par rapport à l'autre de $(1/4, 1/4, 1/4)$ suivant la direction $[111]$. Cette structure est représentée soit en perspective, soit en projection sur un plan formé par une des faces du cube tel que l'on peut voir sur les figures 2.1 et 2.2.

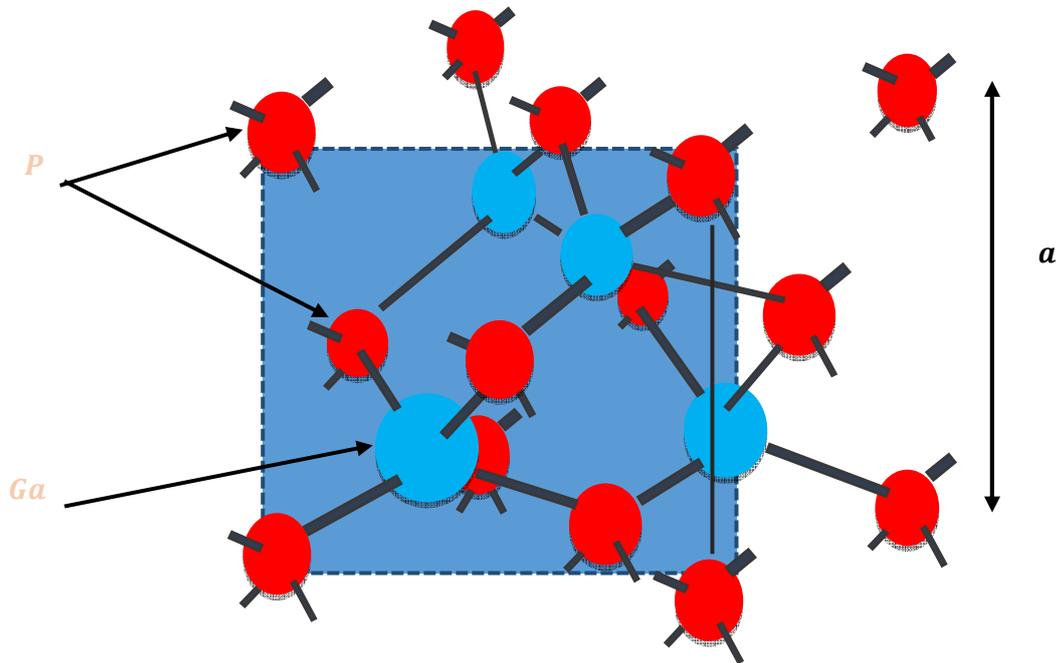


Figure 2.1:Maille cristallographique de la structure Zinc Blende.

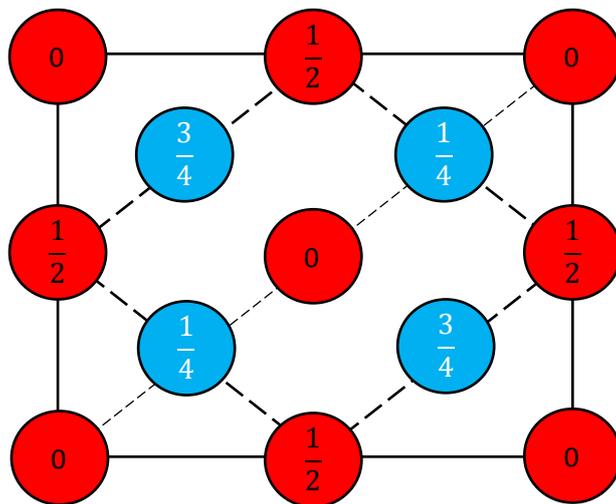


Figure 2.2:Structure Zinc Blende en projection sur un plan.

II.2.1.2 Paramètre de maille

Le calcul du paramètre de maille de $GaAsP$ est obtenu selon la loi de Végard et cela en utilisant les paramètres de maille des binaires de $GaAs$ ($a=5.6533 \text{ \AA}$) et le GaP ($a=5.4508 \text{ \AA}$):

$$a_{GaAsP} = xa_{GaAs} + (1 - x)a_{GaP} \quad (2.1)$$

La figure (2.3) présente l'évolution du paramètre de maille a du matériau $GaAs_xP_{1-x}$ en fonction de la concentration de l'arsenic x . D'après les résultats obtenus on constate que le paramètre de maille de $GaAsP$ augmente suivant la concentration de l'arsenic.

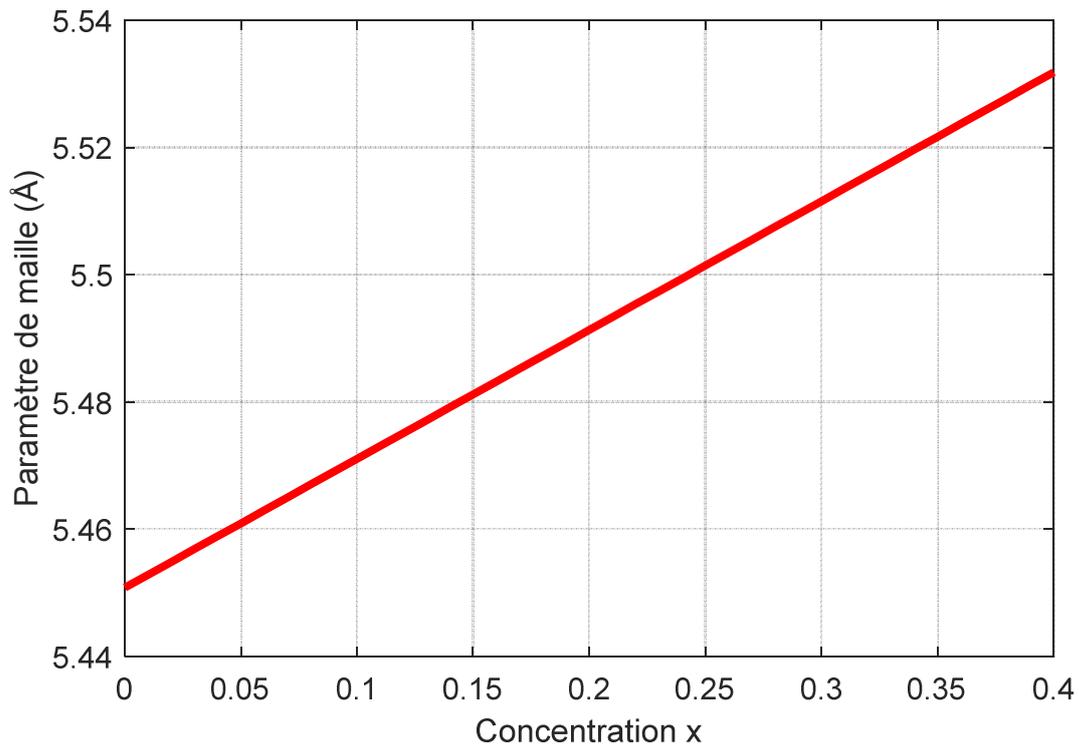


Figure 2.3: variation de paramètre de maille en fonction de la concentration x .

II.2.2 La contrainte

La contrainte parallèle ϵ_{xx} et perpendiculaire ϵ_{zz} sont illustrées sur la figure (2.4). L'augmentation de la concentration de l'arsenic mène à une diminution de la contrainte dans le plan (x,y) et à une augmentation de celle dans la direction de la croissance (z). On constate que le matériau subit une contrainte de compression.

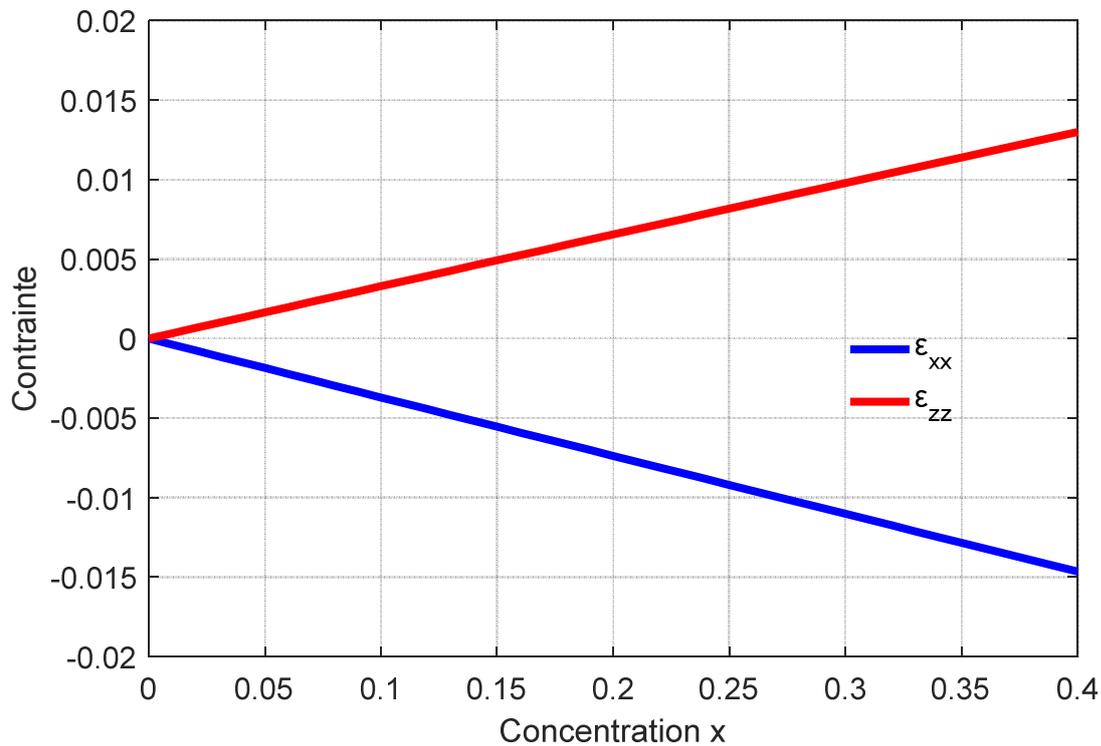


Figure 2.4: Variation de la contrainte en fonction de la concentration x du $\text{GaAs}_x\text{P}_{1-x}/\text{GaP}$.

II.2.3 L'épaisseur critique

Tel que nous avons vu dans le chapitre 1, l'épaisseur critique est celle à partir de laquelle les défauts commencent à apparaître.

La figure 2.5 présente la variation de l'épaisseur critique en fonction de la concentration de l'arsenic.

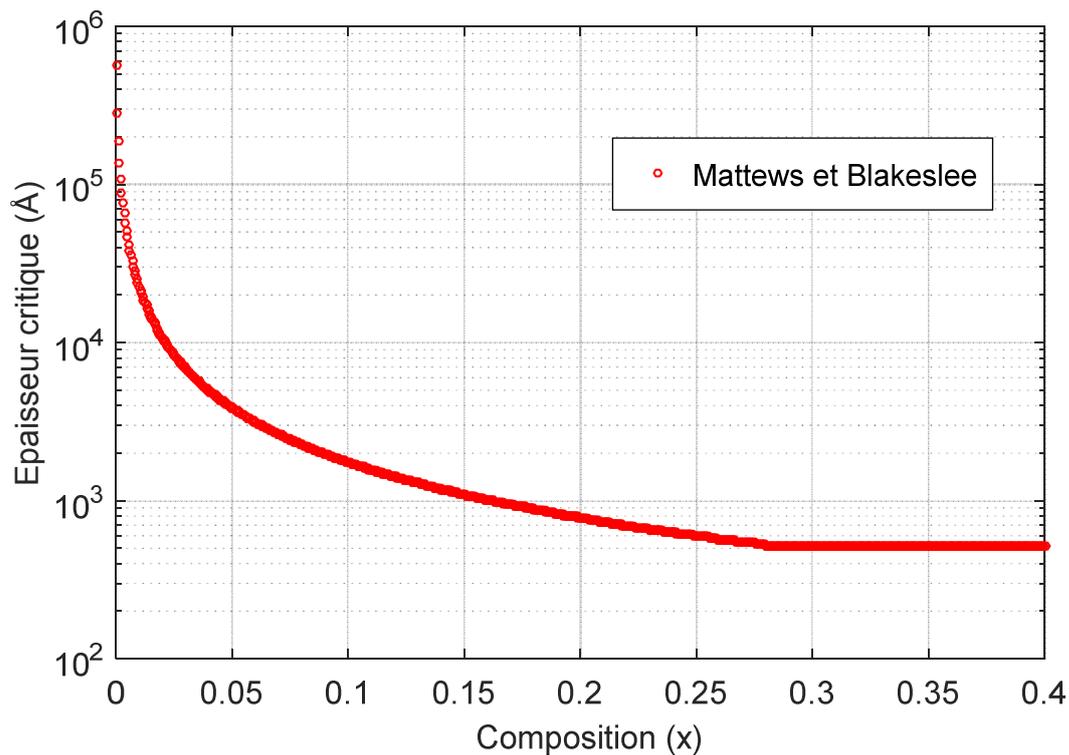


Figure 2.5 : Variation de l'épaisseur critique en fonction de la composition x .

II.2.4 L'énergie de la bande interdite

Les semi-conducteurs *GaAs*, *GaP*, ont un gap direct c'est à dire le minimum de la bande de conduction et le maximum de la bande de valence se trouve au même point k au centre de la zone de Brillouin tel que nous avons vu dans le chapitre 1.

Les valeurs des énergies de gap aux différentes vallées des binaires *GaAs* et *GaP* à 300 K sont indiquées dans le tableau 2.1.

Binaire	E_g^Γ (ev)	E_g^X (ev)	E_g^L (ev)
GaAs	1.43	1.91	1.72
GaP	2.76	2.261	2.63

Tableau 2.1: Les énergies de bande interdite E_0, E_g^X et E_g^L , pour les binaires *GaP* et *GaAs* à 300 K [4].

L'énergie de bande pour le *GaAsP* est obtenue selon l'équation suivante :

$$E_g(\text{GaAsP}) = x.E_g(\text{GaAs}) + (1 - x)E_g(\text{GaP}) + x.(1 - x).C \quad (2.2)$$

C, est le Paramètre de Bowing définissant la courbure de l'énergie de gap ayant comme valeur -0.19 eV.

La figure (2.6) présente la variation du gap de GaAsP dans les deux cas: contraint et non contraint en fonction de la concentration de l'arsenic, x.

On remarque que lorsque la concentration x augmente, l'énergie de la bande interdite diminue dans les deux cas. Pour des valeurs de $x > 0.05$, la contrainte augmente la valeur de l'énergie de la bande interdite, ce qui veut dire qu'on aura des longueurs d'ondes plus petites.

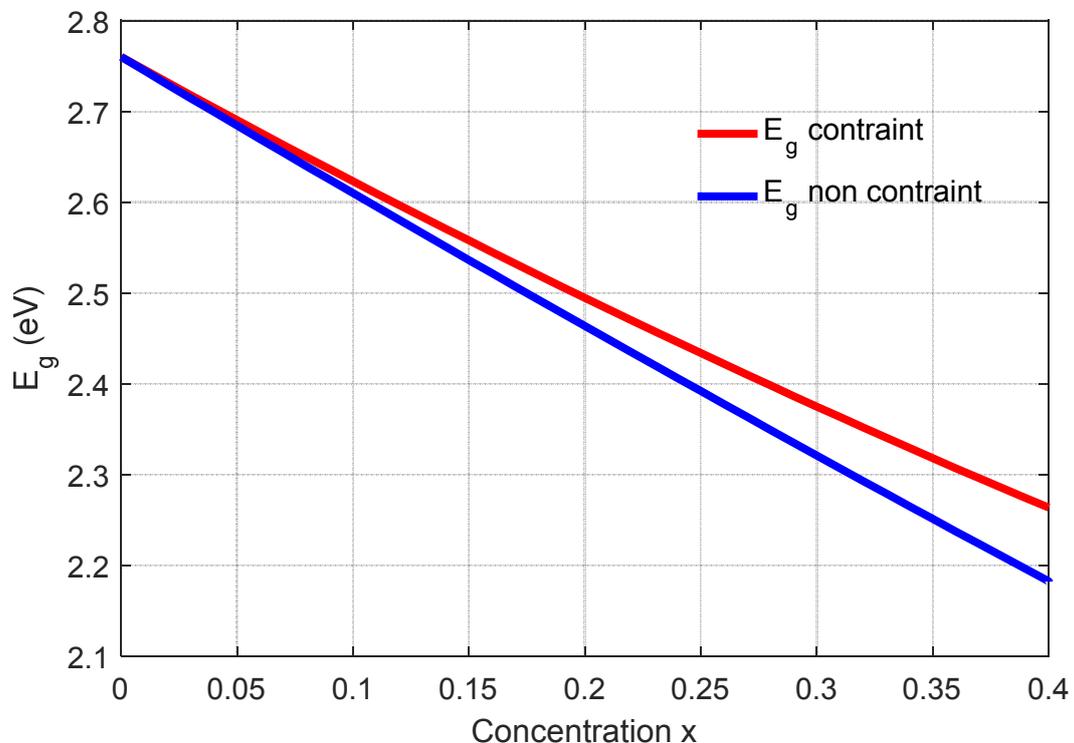


Figure 2.6: Energie de la bande interdite de la structure *GaAsP/GaP* contrainte et non contrainte en fonction de la concentration x.

II.2.5 Evolution du gap en fonction de la température

L'évolution de l'énergie de la bande interdite en fonction de la température peut généralement être décrite par l'expression de Varshni:

$$E_g(T) = E_g(0) - \frac{A.T^2}{B+T} \quad (2.3)$$

Avec :

$E_g(0)$: L'énergie du gap à 0K.

A : une constante empirique [eV.K⁻¹]

B : une constante associée à la température de Debye [K]

Matériaux	A(e.K ⁻¹)	B(K)	E _g (0)
GaAs	5.580 . 10 ⁻⁴	220	1.43
GaP	5.771 . 10 ⁻⁴	372	2.76

Tableau 2.2 : Energies de gap et les paramètres de Varshni[4].

La figure (2.7) présente la variation du gap de GaAs en fonction de la température T, on constate que l'énergie de la bande interdite diminue lorsque la température augmente (T varie de 0 jusqu'au 500K).

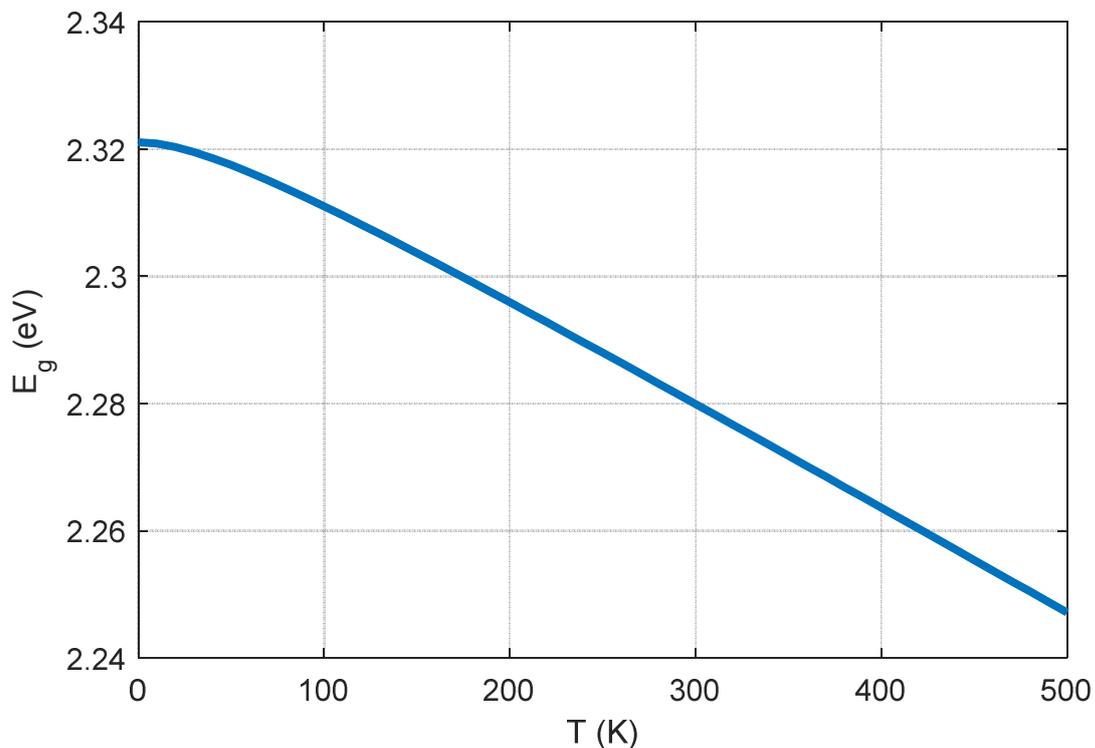


Figure 2.7: Energie de bande interdite pour le GaAs en fonction de la température (Varshni).

II.2.6 La masse effective des porteurs

La masse effective des électrons, trous lourds et les trous légers du matériau $GaAsP$ est donné par l'équation suivante:

$$m_i^*(GaAsP) = x \cdot m_i^*(GaAs) + (1 - x) \cdot m_i^*(GaP) \quad (2.4)$$

L'indice i désigne les notations suivantes e , HH et LH.

Binaire	m_e^*	m_{HH}^*	m_{LH}^*
GaAs	0.067	0.55	0.083
GaP	0.114	0.52	0.17

Tableau 2.3 : Masse effective des électrons pour certains Binaires GaP et $GaAs$ [4].

La figure (2.8) illustre la variation des masses effectives des porteurs, c'est-à-dire les électrons (m_e^*), les trous lourds (m_{HH}^*), et les trous légers (m_{LH}^*), en fonction de la concentration x . On constate que les masses effectives des électrons et des trous légers diminuent lorsque la concentration x augmente, tandis que la masse des trous lourds augmente.

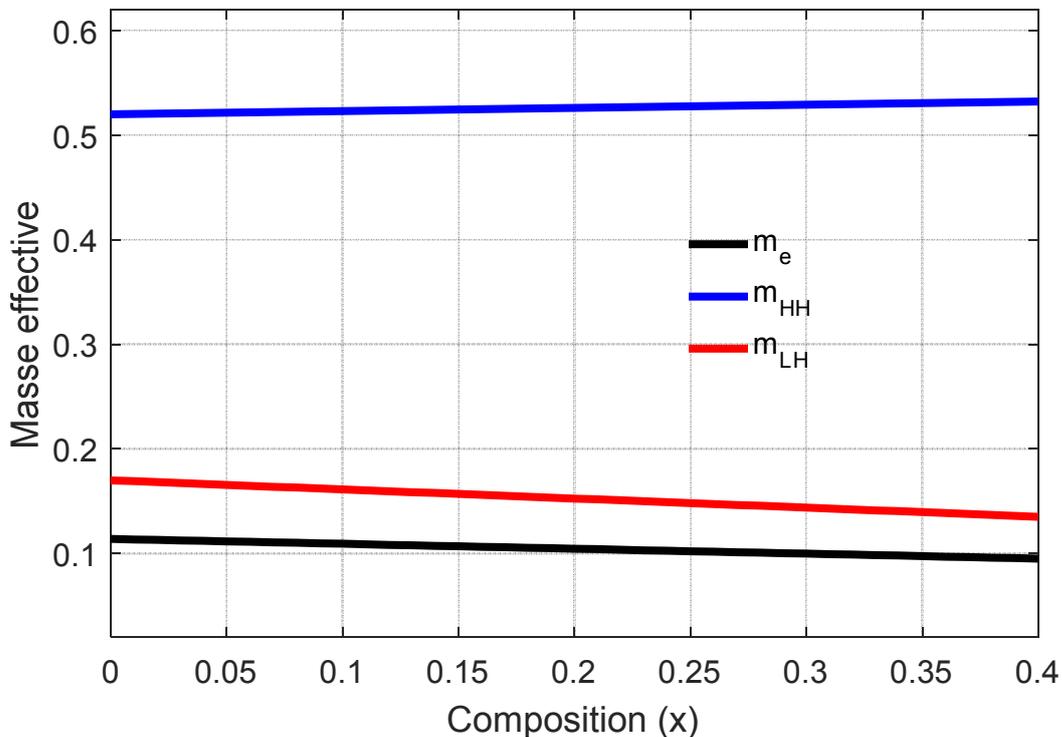


Figure 2.8: variation de la masse effective en fonction de la concentration (x) du $GaAsP$.

II.2.7 Spin-orbite du GaAsP

La figure (2.9) présente la variation du spin-orbite (Δ) du GaAsP en fonction de la concentration x , on remarque qu'une augmentation de la concentration mène à une augmentation du spin-orbite, une propriété qui est très importante pour les lasers.

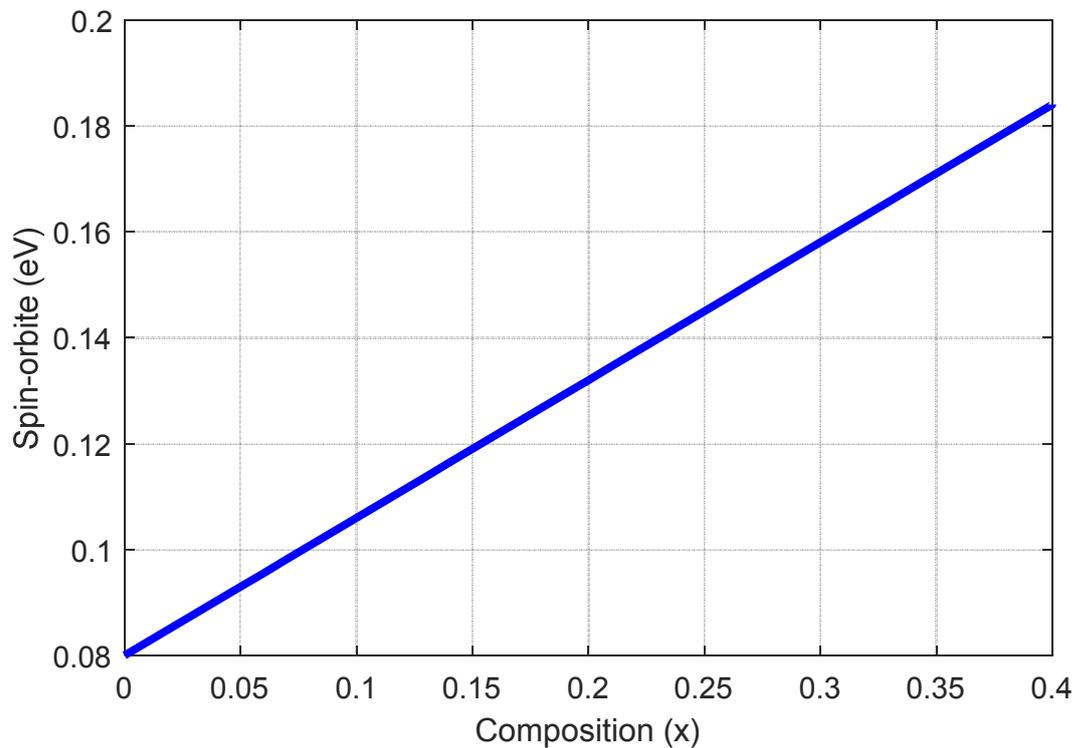


Figure 2.9: Spin-orbite du *GaAsP* en fonction de la concentration x .

Les décalages en énergies des centres de gravités de la bande de valence et de la bande conduction en $k=0$ varient proportionnellement à la contrainte

II.2.8 Les alignements de bandes de la bande de conduction et de la bande de valence

Les décalages de bandes de la bande de conduction et de la bande de valence sont des paramètres très importants à déterminer.

Les décalages en énergie des centres de gravités de la bande de valence et de la bande de conduction en $k=0$ varient proportionnellement à la contrainte.

$$\Delta E_{vmoy}^{hyd} = a_v (2\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{zz}) \quad (2.5)$$

$$\Delta E_{cmoy}^{hyd} = a_c (2\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{zz}) \quad (2.6)$$

Où a_c et a_v sont respectivement les potentiels hydrostatiques de déformation pour la bande de conduction et la bande de valence.

Binaire	$a_v(\text{ev})$	$a_c(\text{ev})$
GaAs	-0.85	-11.0
GaP	-1.70	-7.14

Tableau 2.4: Potentiels de déformation pour *GaAs* et *GaP*[4].

Les décalages énergétiques induits par la contrainte de cisaillement pour chacune des bandes constituant la bande de valence sont les suivantes:

$$\Delta E_{hh}^{Sh} = -\frac{1}{2} \delta E^{Sh} \quad (2.7)$$

$$\Delta E_{lh}^{Sh} = -\frac{1}{2} \Delta + \frac{1}{4} \delta E^{Sh} + \frac{1}{2} \left[\Delta^2 + \Delta \cdot \delta E^{Sh} + \frac{9}{4} (\delta E^{Sh})^2 \right]^{1/2} \quad (2.8)$$

$$\delta E^{Sh} = 2b(\varepsilon_{zz} - \varepsilon_{xx}) \quad (2.9)$$

L'énergie E_v de la bande de valence est:

$$E_v = E_{vmoy} + \frac{\Delta}{3} + E_g + \Delta E_{vmoy}^{hyd} + \max(\Delta E_{lh}^{Sh}, \Delta E_{hh}^{Sh}) \quad (2.10)$$

L'énergie E_c de la bande de conduction est:

$$E_c = E_{cmoy} + \frac{\Delta}{3} + E_g + \Delta E_{vmoy}^{hyd} + \Delta E_c^{hyd} \quad (2.11)$$

Les décalages de bandes seront donc:

$$\Delta E_c = E_{cb} - E_{cp} \quad (2.12)$$

$$\Delta E_v = E_{vb} - E_{vp} \quad (2.13)$$

La figure (2.10) nous montre le décalage de la bande de conduction ΔE_c et de la bande de valence ΔE_v entre le puits *GaAsP* et le substrat *GaAs* en fonction de la composition d'arsenic x . On constate que les décalages des bandes de conduction et de valence augmentent quand la concentration x augmente. On remarque que le décalage de la bande de conduction est supérieur à celui de la bande de valence.

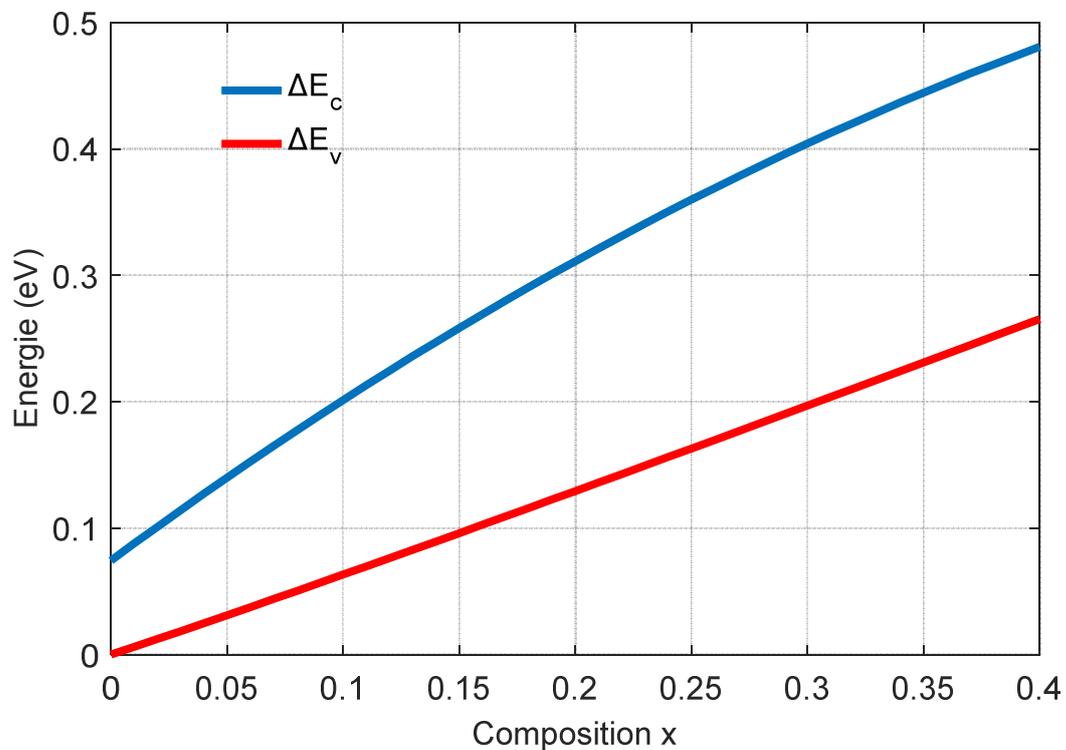


Figure 2.10: Décalage de la bande de conduction et de la bande de valence du *GaAsP/GaP*.

II.2.9 Energie de confinement

La résolution de l'équation de Schrödinger tel qu'on a vu dans le chapitre 1 selon l'équation 1.22, nous donne les énergies de quantification des é. Cette évolution pour trois valeurs de x (0.15, 0.25 et 0.35).

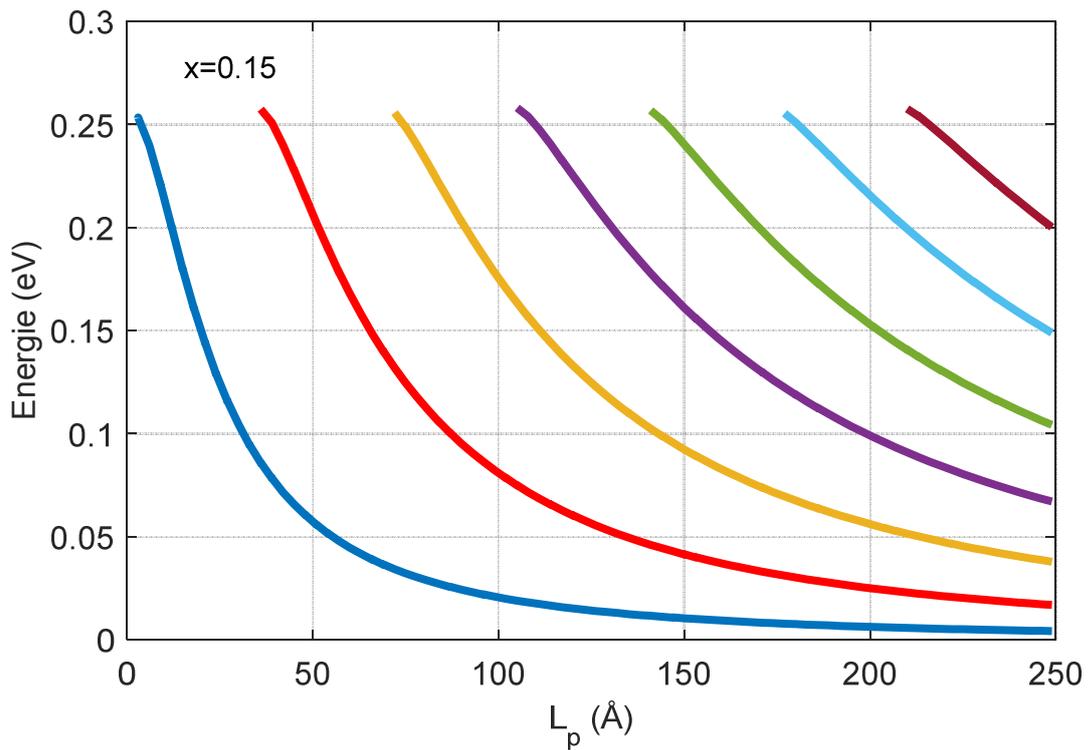


Figure 2.11: Evolution de l'énergie des électrons dans un puits quantique GaAs_{0.15}P_{0.85}/GaP

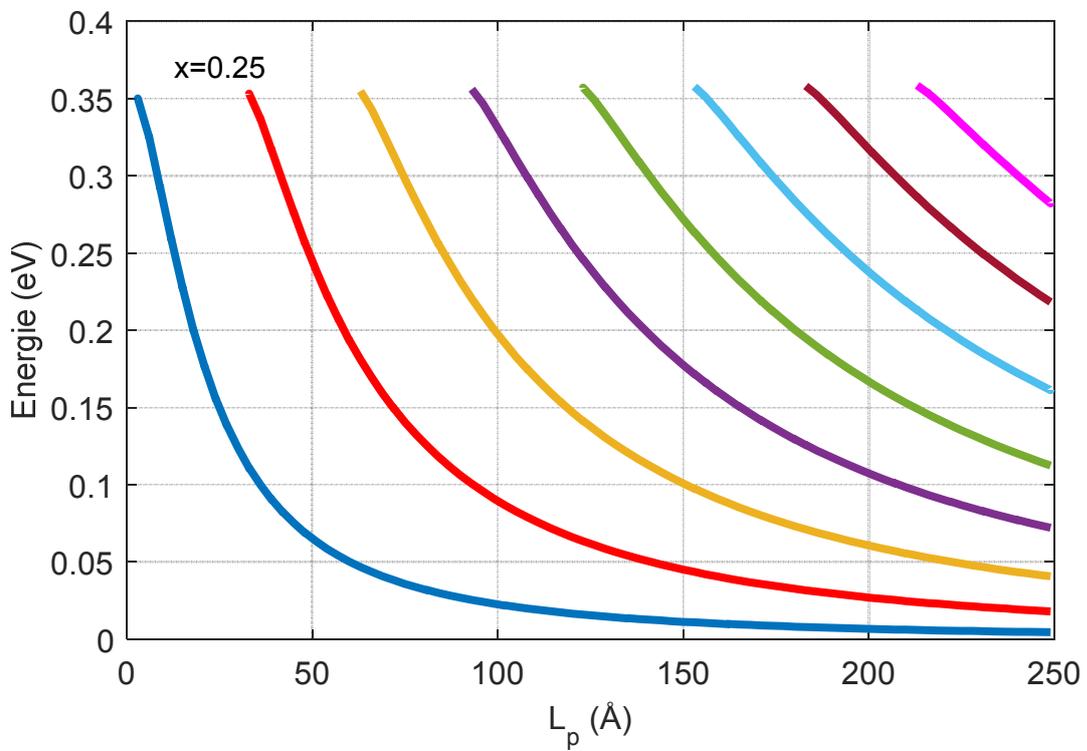


Figure 2.12: Evolution de l'énergie des électrons dans un puits quantique GaAs_{0.25}P_{0.75}/GaP.

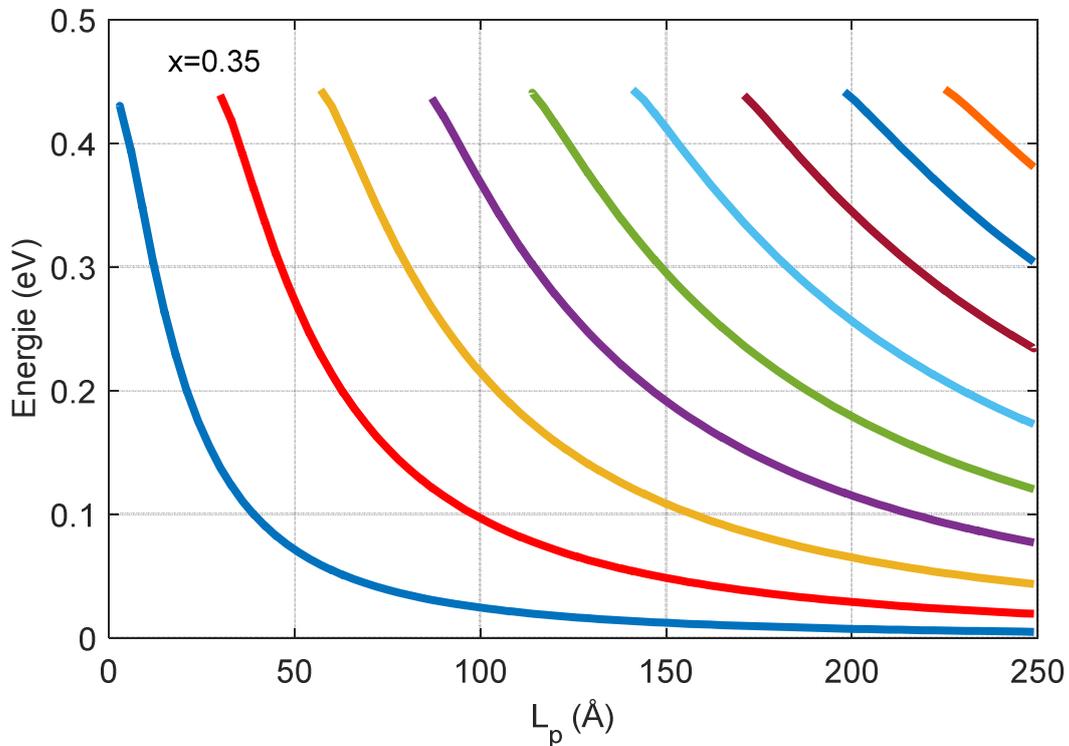


Figure 2.13: Evolution de l'énergie des électrons dans un puits quantique GaAs_{0.35}P_{0.65}/GaP.

On constate que l'énergie de quantification des électrons diminue avec l'augmentation de la largeur de puits.

Sur les figures 2.11, 2.12 et 2.13 on peut voir que l'augmentation des fractions d'arsenic augmente l'énergie de quantification dans le puits, ainsi que le nombre de niveaux qui est de 7 pour 15% d'arsenic et 9 niveaux pour 35% d'arsenic.

De même, nous avons fait pour les trous lourds et on pourra voir sur les figures 2.14 et 2.15 que l'augmentation du pourcentage d'arsenic accroît l'énergie de quantification des trous lourds.

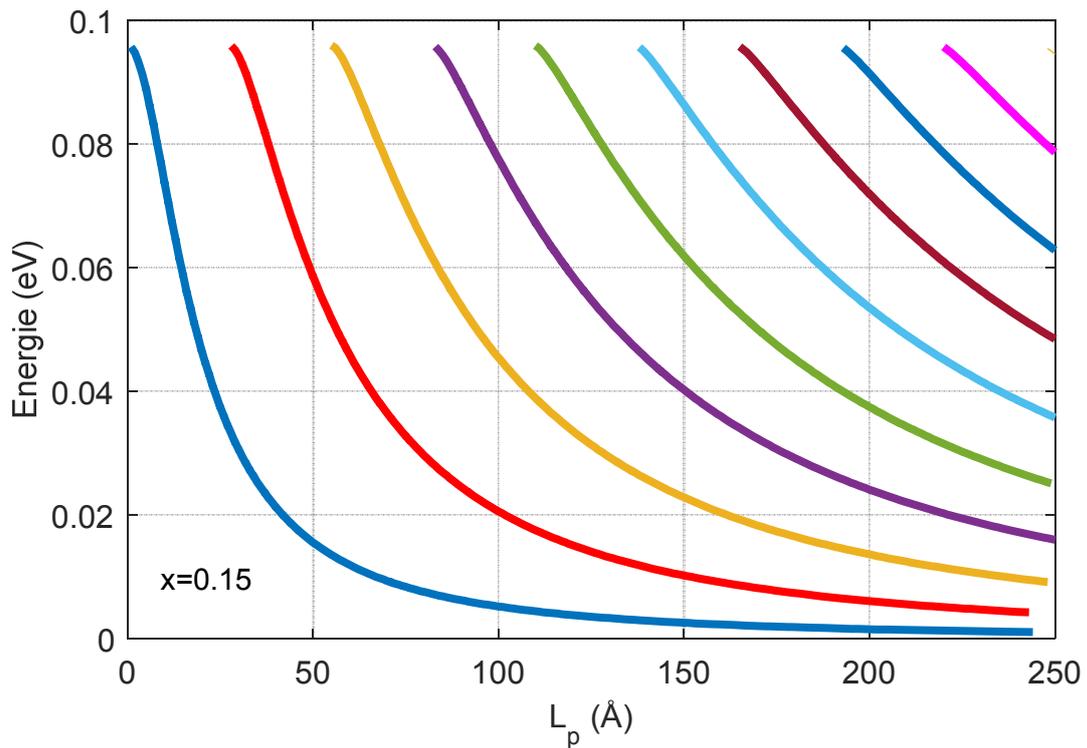


Figure2.14: Evolution de l'énergie des trous lourds dans un puits quantique $\text{GaAs}_{0.35}\text{P}_{0.65}/\text{GaP}$.

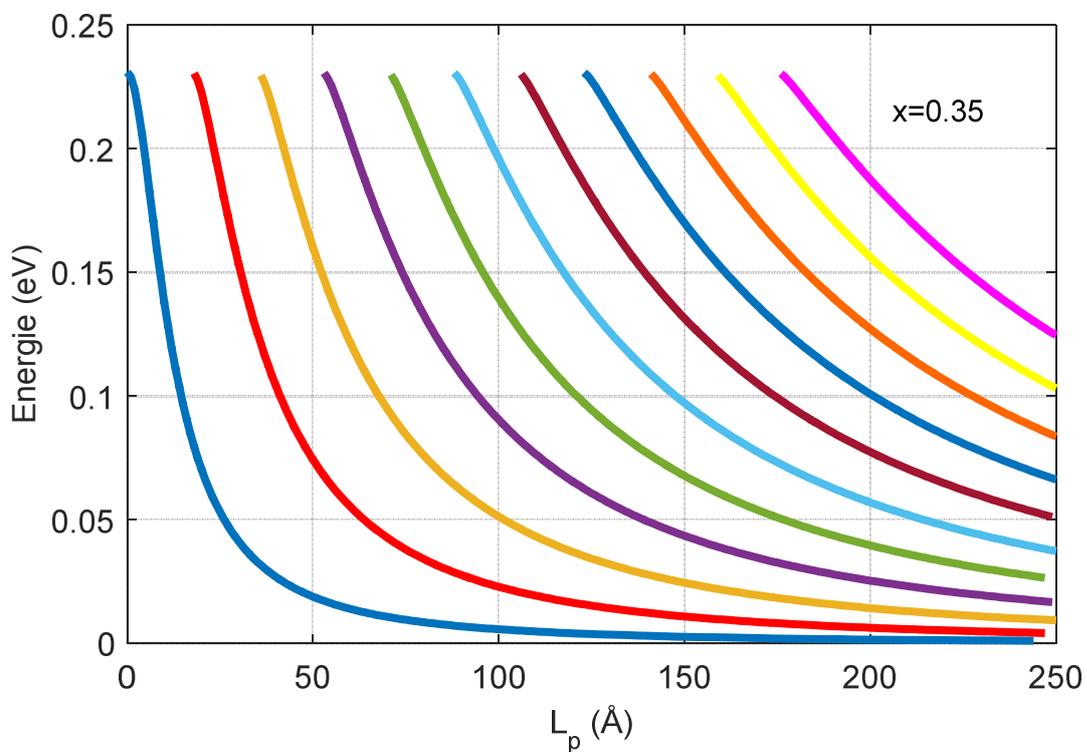


Figure2.15: Evolution de l'énergie des trous lourds dans un puits quantique $\text{GaAs}_{0.35}\text{P}_{0.65}/\text{GaP}$.

II.2.10 Calcul d'énergie de transition

L'énergie de recombinaison électrons-trous lourds est donnée par la relation suivante:

$$E_{tr} = E_g^{contr} + E_{ne} + E_{hhn} \quad (2.14)$$

La longueur d'ondes correspondante est:

$$\lambda (\mu m) = \frac{1.24}{E_{tr}} \quad (2.15)$$

Où E_{tr} est l'énergie de transition

Sur la figure 2.16, nous avons représenté l'énergie de transition entre le premier niveau des électrons et celui des trous lourds pour les deux valeurs $x=0.15$ et $x=0.35$.

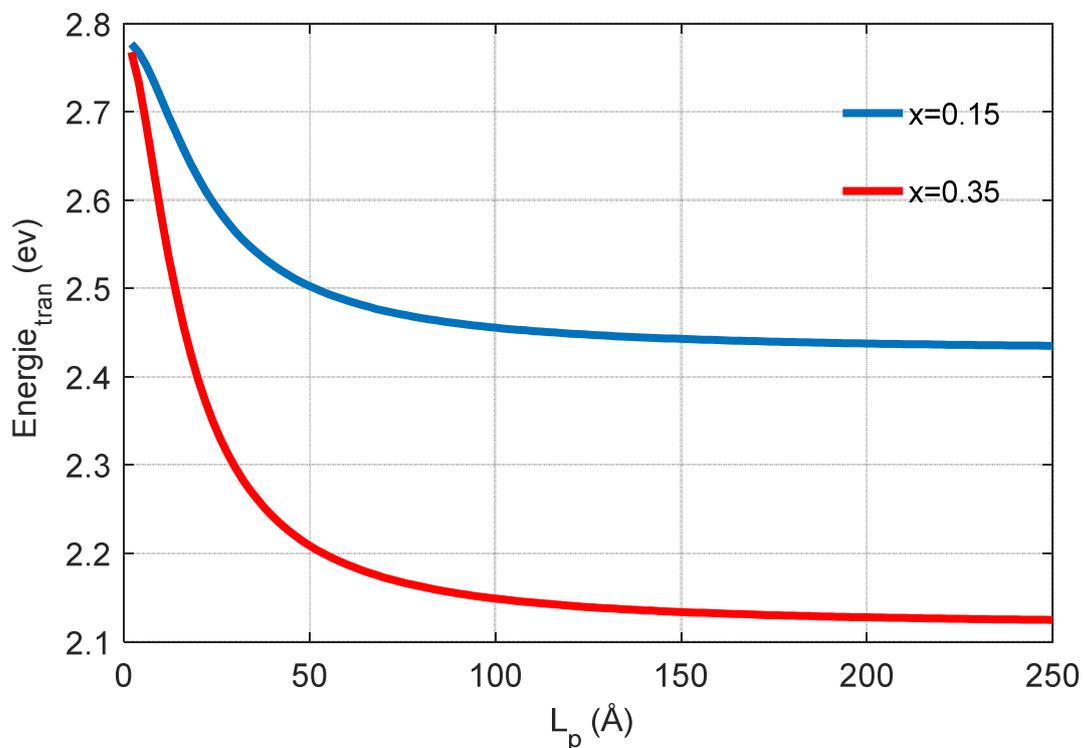


Figure 2.16: Evolution de l'énergie de transition dans un puits quantique $GaAsP/GaP$.

Il est clair que l'augmentation de la composition d'arsenic diminue l'énergie de transition ce qui a pour effet d'augmenter la longueur d'onde tel que l'on peut voir dans la figure 2.17.

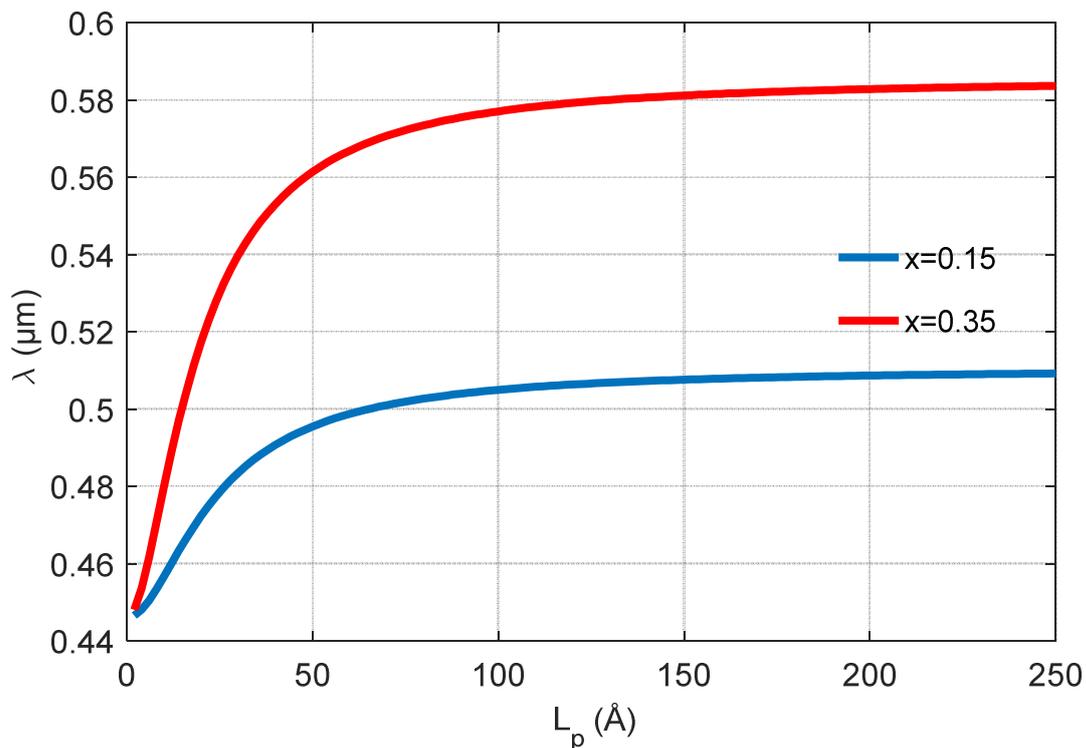


Figure 2.17: Evolution de la longueur d'onde dans un puits quantique $GaAsP/GaP$.

II. 3 Conclusion

Dans ce chapitre nous avons vérifié l'effet de la concentration de l'arsenic x sur les différents paramètres de la structure à puits quantique $GaAsP/GaP$. Nous constatons que la concentration x a un effet remarquable sur ces paramètres. De même les effets de la température et de la contrainte ont aussi été vérifiés. Tous deux affectent l'énergie de la bande interdite, ouvrant ainsi de nouvelles applications technologiques. Dans le chapitre qui suit, nous allons voir l'effet de l'introduction du nitrogène dans la structure à puits quantique $GaAsP/GaP$.

Chapitre III:

Etude de la structure à puits quantique GaNAsP/GaP

III. 1 Introduction

Un matériau prometteur qui peut être adapté à la structure de bande optimale est l'alliage *GaNAsP* appartenant à ce que l'on appelle les nitrures dilués [16,17]. Ces matériaux possèdent un certain nombre de propriétés fascinantes. La croissance du *GaNAsP* sous la forme de couches épitaxiales et de structures à puits quantiques empilés a été démontrée [18,19].

Plus récemment, le *GaNAsP* a également été fabriqué dans la géométrie des nano fils [20], ce qui ouvre la voie à de nouvelles applications technologiques prometteuses. Pour activer cette nouvelle technologie, les effets de l'introduction d'azote dans le *GaAsP* doivent être bien compris, mais ils sont jusqu'à présent méconnus. Dans ce travail, nous abordons ces questions importantes en nous basant sur des études complètes de caractérisation structurelle et optique.

Nous allons dans ce chapitre voir l'effet de l'ajout de l'azote sur la bande de conduction ainsi que les simulations qui ont été faites afin d'étudier l'effet de la contrainte créée entre le substrat et la couche active sur les différents paramètres comme le gap et l'épaisseur critique. Ainsi que la masse effective et le décalage des bandes.

III. 2 La structure à puits quantique GaAsNP/GaAs

Maintenant que le grand potentiel qu'a le quaternaire $GaN_yAs_xP_{1-x-y}$ a été mis en évidence, on entame l'étude de cette structure faisant l'objet de ce chapitre. Comme le montre la figure (3.1), elle sera composée d'une couche de *GaNAsP* entre deux couches *GaP*.

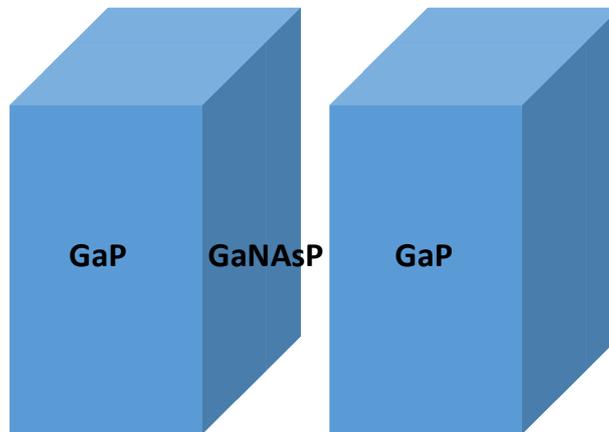


Figure 3.1 : Schéma d'une structure à puits quantiques à base de $GaNAsP/GaP$.

L'alliage de $GaN_yAs_xP_{1-x-y}$ constituant le puits a des propriétés électroniques et optiques très particulières et attrayantes, comme la réduction de l'énergie de la bande interdite, la réduction de la dépendance du gap en température [21].

Dans cette partie nous nous intéressons dans un premier temps à l'effet de l'azote sur la bande de conduction, ensuite sur le gap, en utilisant le modèle d'anti-croisement de bandes. Puis en deuxième partie, nous nous penchons sur les effets physiques de l'origine de ces modifications, puis nous allons voir l'effet de l'azote et l'arsenic sur le procédé de croissance de ces structures.

III. 2. 1 L'influence de l'Azote sur la bande conduction

La substitution de l'azote en faible quantité à de l'arsenic dans la structure $GaAs_xP_{1-x}$ aura un effet spectaculaire sur la structure de bande. Effectivement, le caractère très électronégatif de l'atome N introduit un niveau accepteur dit iso-électronique car la valence de l'atome d'azote est identique à celle de l'atome d'arsenic.

Dans le $GaAs_xP_{1-x}$, le niveau d'impureté N ainsi créé, est résonant avec la bande de conduction, ce niveau, très localisé dans l'espace réel, est donc très délocalisé dans l'espace des k (espace réciproque) d'après la relation de Heisenberg : $\Delta x \cdot \Delta k \geq \hbar$.

Selon le modèle d'anti-croisement de bande appelé souvent BAC (Bande Anti Crossing) qui a été proposé par Shan et al [22] que, dans l'alliage $GaN_yAs_xP_{1-x-y}$, ces états localisés dus aux atomes d'azote isolés dans la matrice $GaAsP$ soient couplés avec les états délocalisés du minimum Γ de la bande de conduction de la matrice $GaAsP$.

Pour cela, la description mathématique de cette interaction donne deux solutions :

$$\begin{vmatrix} E_M(k) - E & V_{MN} \\ V_{MN} & E_N - E \end{vmatrix} = 0 \quad (3.1)$$

Les solutions sont données par:

$$E_{\pm} = \frac{1}{2} \left[E_N + E_M(k) \pm \sqrt{(E_N - E_M(k))^2 + 4V_{MN}^2} \right] \quad (3.2)$$

Où E_N est l'énergie du niveau de l'atome d'azote isolé, $E_M(k)$ est l'énergie de la bande de conduction Γ du $GaAsP$ et V_{MN} décrit l'interaction entre ces deux types d'états. Cette interaction est d'autant plus forte que le nombre d'atomes d'azote dans la matrice de $GaAsP$ est élevé avec $V_{MN} = 2.7 \cdot \sqrt{y}$ et $E_n = 1.52 - 3.9y$.

Où : y est la fraction d'azote.

A partir de l'équation 3.2, on constate qu'à cause de l'interaction de $E_M(k)$ avec E_N , la bande de conduction se divise en deux sous bandes non paraboliques. Plus la concentration de l'azote augmente plus les deux niveaux se repoussent et donc plus le minimum de la

bande de conduction de l'alliage formé diminue, et ceci mène vers une réduction de la bande interdite, que nous allons voir par la suite.

III.2.2 l'énergie du gap

En utilisant le modèle de BAC, l'expression de l'énergie de la bande interdite est donnée par l'expression (3.3):

$$E_g(GaAsNP) = \frac{1}{2} \left[E_g(GaAsP) + E_N \pm \sqrt{(E_g(GaAsP) - E_N)^2 + 4V_{MN}^2(y)} \right] \quad (3.3)$$

$E_g(GaAsP)$ est l'énergie de la bande interdite du ternaire GaAsP.

C'est donc la répulsion des deux sous bandes qui serait à l'origine de la réduction de l'énergie de la bande interdite avec l'incorporation de l'azote, ceci est illustré par le schéma de la figure (3.2).

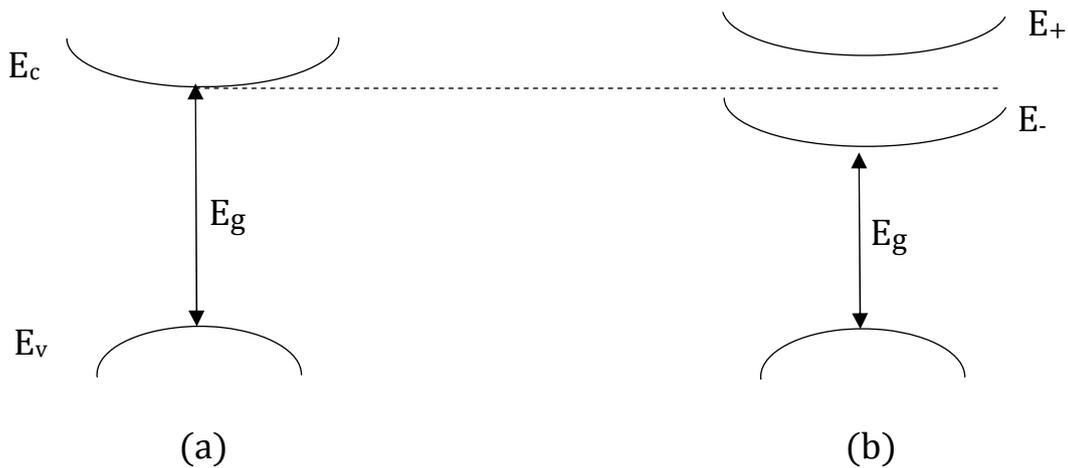


Figure 3.2: Les bandes d'énergie dans une structure à puits quantique: (a) avant éclatement de la bande de conduction, (b) après éclatement.

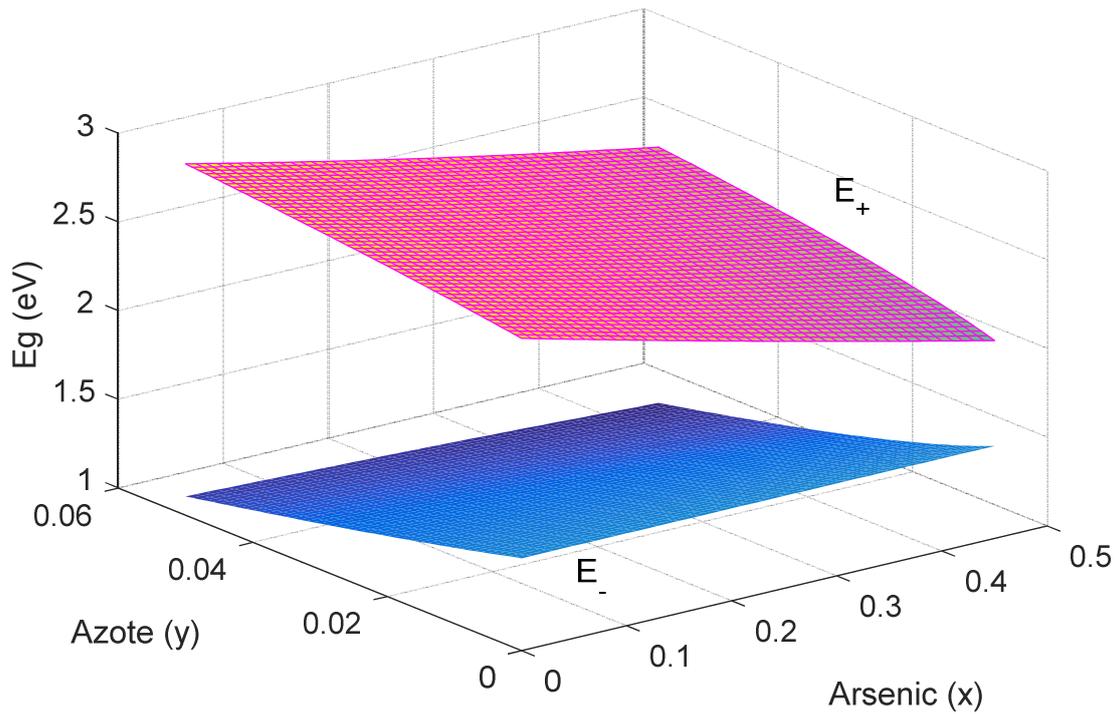


Figure 3.3 :Les deux sous bandes E_+ et E_- de la bande de conduction du $GaNAsP/GaP$.

On peut voir sur la figure 3.4 l'augmentation de la concentration de l'azote diminue l'énergie de la bande interdite.

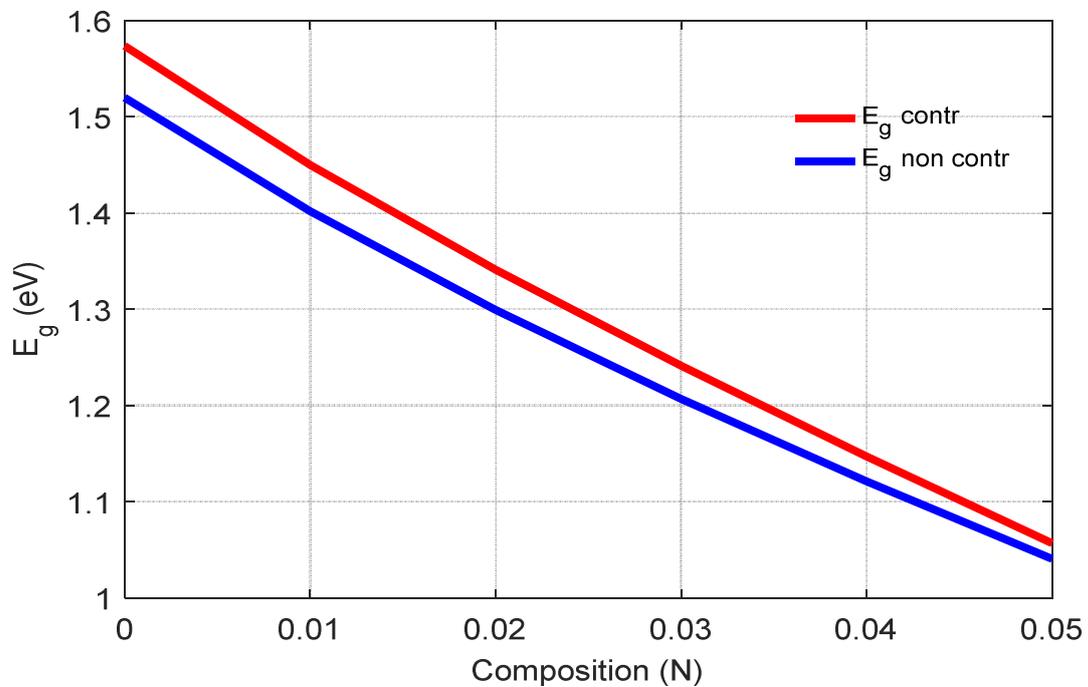


Figure 3.4:Effet de l'azote sur l'énergie de gap contraint et non contraint pour le quaternaire $GaN_yAs_xP_{1-x-y}$

Comme on vient de le voir sur la figure 3.4, l'incorporation de l'azote a pour effet de diminuer l'énergie de la bande interdite, il s'est avéré que l'introduction de l'arsenic diminue aussi le gap, pour illustré cet effet, la figure 3.5 nous montre l'évolution de gap avec les compositions de l'arsenic x et de l'azote y simultanément.

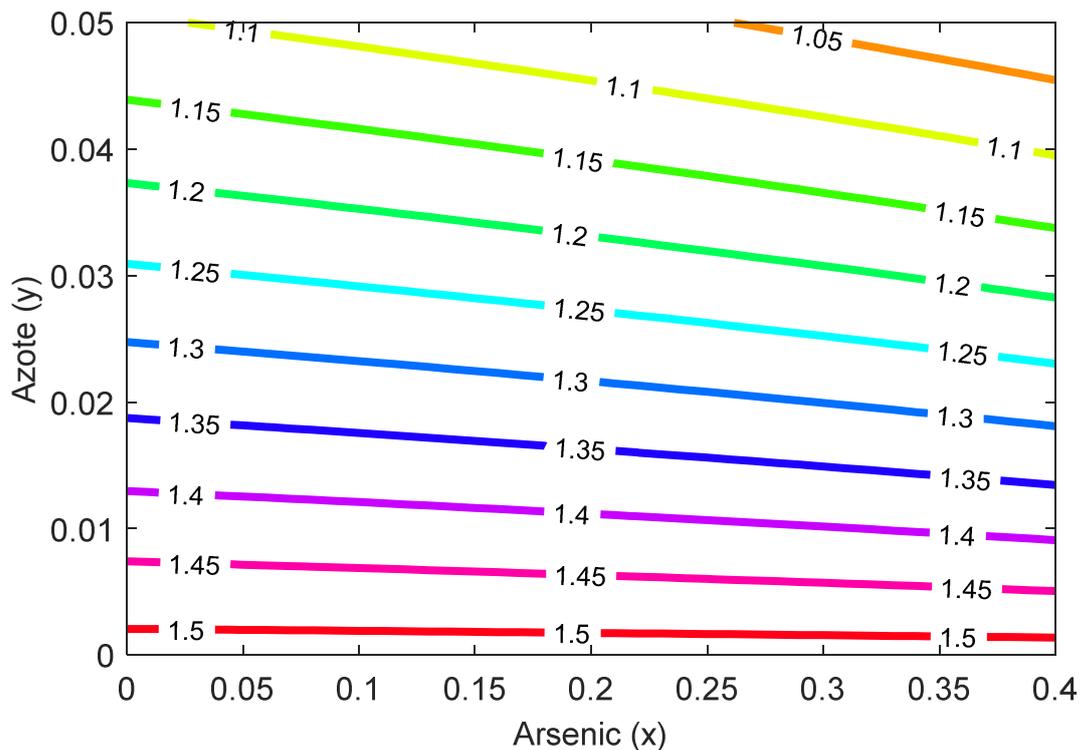


Figure 3.5: Courbures iso-gap en fonction des compositions (x, y).

III. 3 Dépendance du gap en température

L'augmentation de capacité des dispositifs exige des sources lasers avec une bonne stabilité en température. C'est la raison pour laquelle on vérifie dans cette partie l'effet de la température sur l'énergie de gap pour plusieurs valeurs d'azote.

Cette variation est illustrée sur la figure 3.6 en utilisant la relation de Varshni et l'augmentation des deux paramètres mènent à une diminution de l'énergie de la bande interdite.

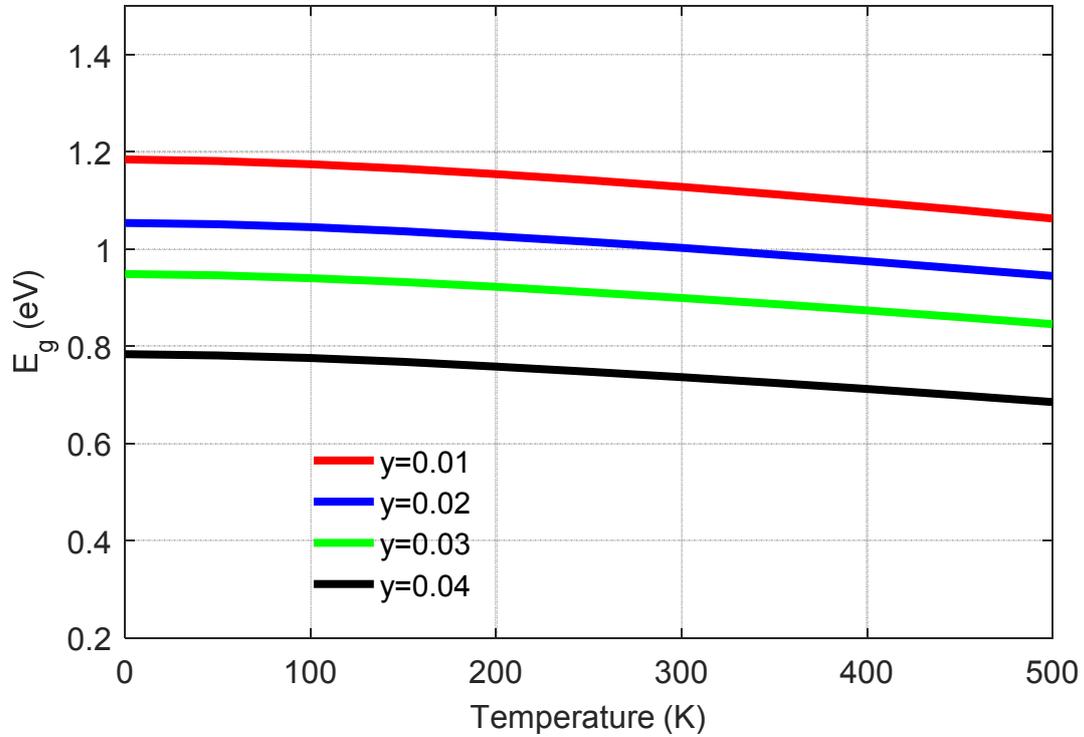


Figure 3.6: Effet de la température sur le gap de la structure $GaN_yAs_xP_{1-x-y}$.

III. 4 Paramètre de maille

Le paramètre de maille du $GaN_yAs_xP_{1-x-y}$ est tel que la plupart des autres paramètres, obtenu en utilisant la loi de Végard donnée par l'expression pour les quaternaires:

$$a(GaN_yAs_xP_{1-x-y}) = x \cdot a(GaAs) + y \cdot a(GaN) + (1 - x - y) \cdot a(GaP) \quad (3.4)$$

Nous avons tracé l'évolution du paramètre de maille en fonction des compositions x et y , on peut voir que l'arsenic a pour effet d'augmenter le paramètre de maille, par contre, l'azote le diminue.

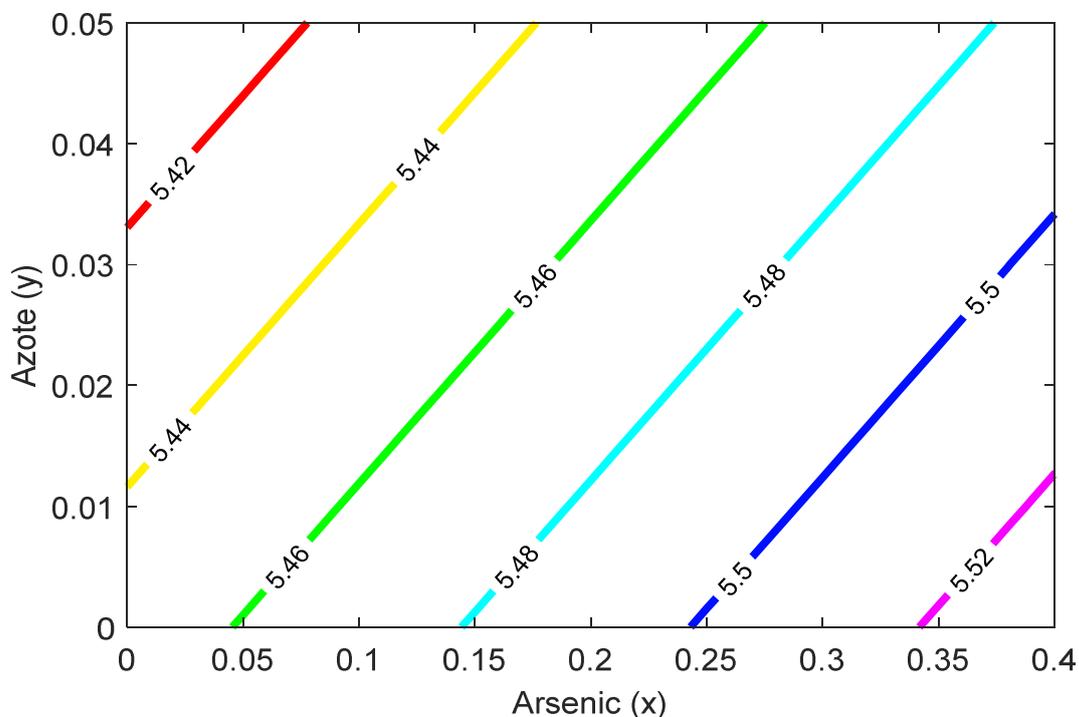


Figure 3.7: Paramètre de maille de $GaN_yAs_xP_{1-x-y}$ en fonction des paramètres (x, y) .

III. 5 La contrainte

L'effet de l'azote sur la contrainte bi-axiale et uni-axiale est illustré sur la figure 3.8. On voit bien que l'addition de l'azote mène à une diminution de ε_{zz} alors que cette même addition va mener à une augmentation de ε_{xx} .

Quant à la figure 3.9, c'est la courbure iso-contrainte de la déformation bi-axiale en fonction de la concentration de l'arsenic et de l'azote.

La surface des valeurs positives représente la zone des couplets (x, y) de tension, celle des valeurs négatives représente la zone des couplets (x, y) de compression et la ligne de '0' représente les valeurs pour lesquelles le matériau puits sera en accord de maille avec le substrat.

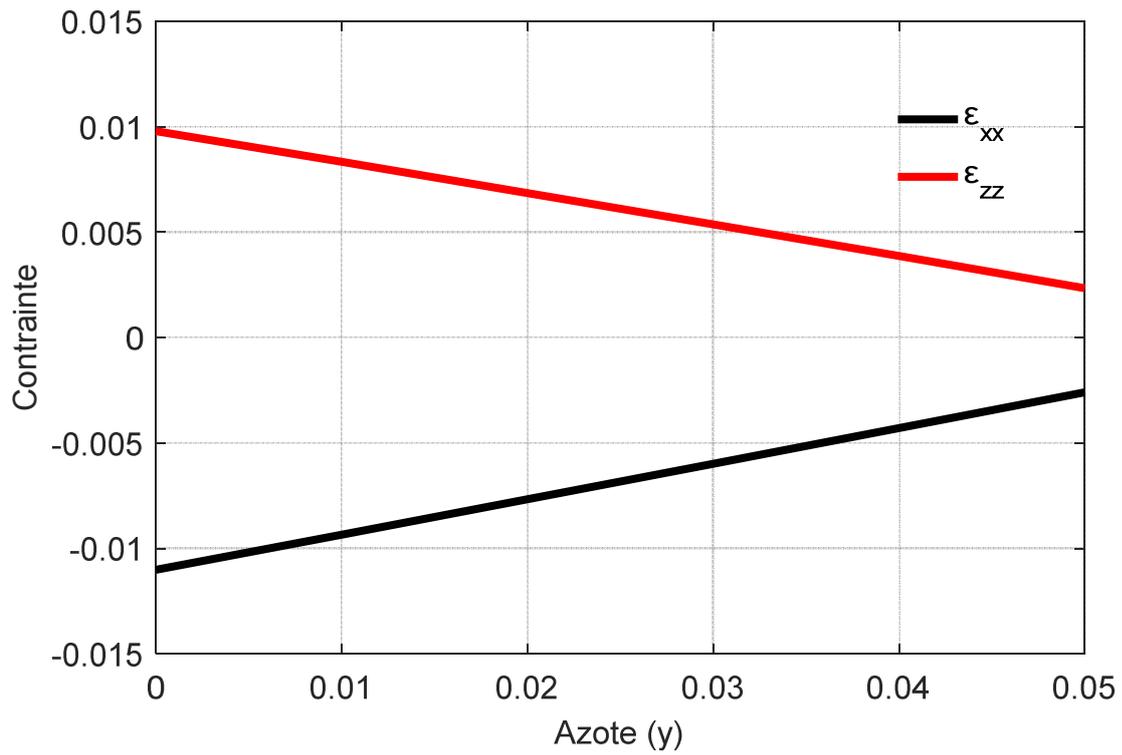


Figure 3.8: Déformation uni-axial et bi-axial en fonction de la concentration de l'azote ($x=0.3$)

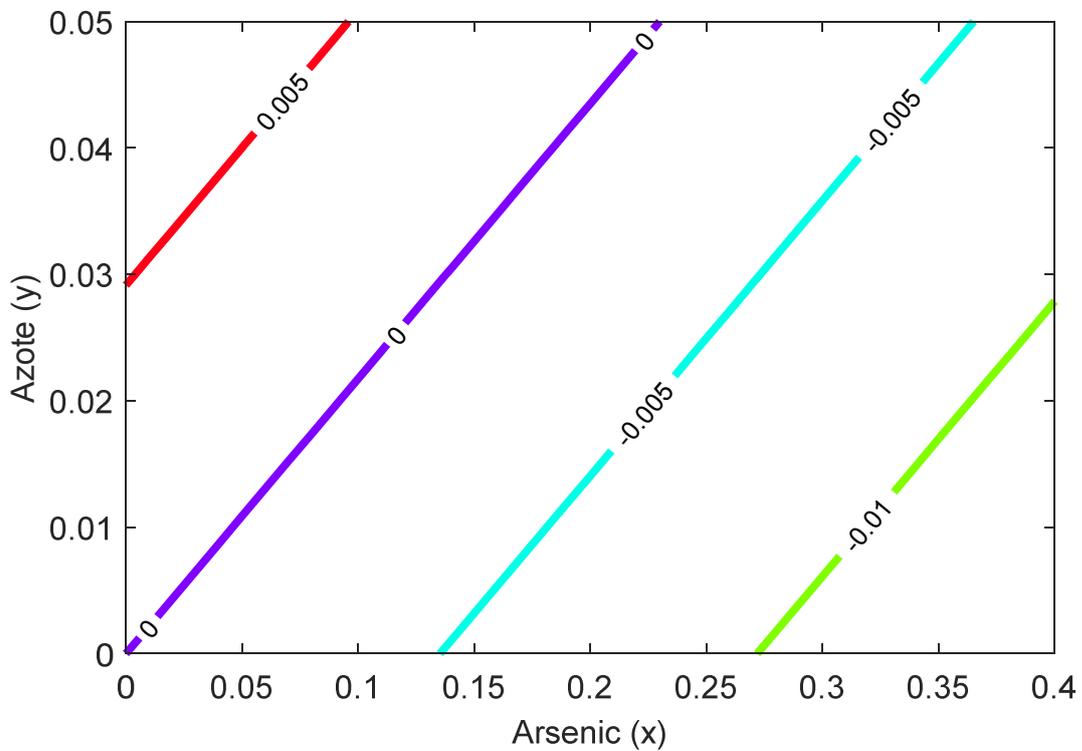


Figure 3.9: courbure iso-contraite: déformation bi-axial en fonction de la concentration de l'arsenic et de l'azote x, y respectivement.

III. 6 La masse effective

Comme nous l'avons déjà vu dans le premier chapitre, la masse effective des électrons est inversement proportionnelle à la courbure de bande de conduction, et après l'éclatement due à l'incorporation de l'azote, la bande de conduction E_c devient fortement non parabolique et de courbure plus faible, on s'attend donc à ce que la masse effective des électrons dans cet alliage diminue fortement avec l'addition de l'azote.

Cette diminution est expliquée par une forte interaction du minimum de la bande de conduction avec les états localisés de N . La masse effective m_e^* est donnée par:

$$m_e^*(GaAs_xN_yP_{1-x-y}) = 2 \cdot \frac{m_e^*(GaAs_xP_{1-x})}{\left[1 - \frac{E_c - E_N}{\sqrt{(E_c - E_N)^2 + 4 \cdot V_{MN}(y)}}\right]} \quad (3.5)$$

Et pour la détermination de la masse effective $m_e^*(GaAsP)$ on utilise l'interpolation linéaire selon la loi de Vegard:

$$m_e^*(GaAs_xP_{1-x}) = (1 - x) \cdot m_e^*(GaP) + x \cdot m_e^*(GaAs). \quad (3.6)$$

La figure (3.7) montre la variation de la masse effective des électrons, trous lourds et trous légers en fonction de l'azote pour des différentes concentrations d'arsenic.

On constate que l'azote a pour effet de diminuer la masse effective des porteurs, les résultats mentionnent la diminution de la masse effective des électrons, même chose pour les trous lourds et légers.

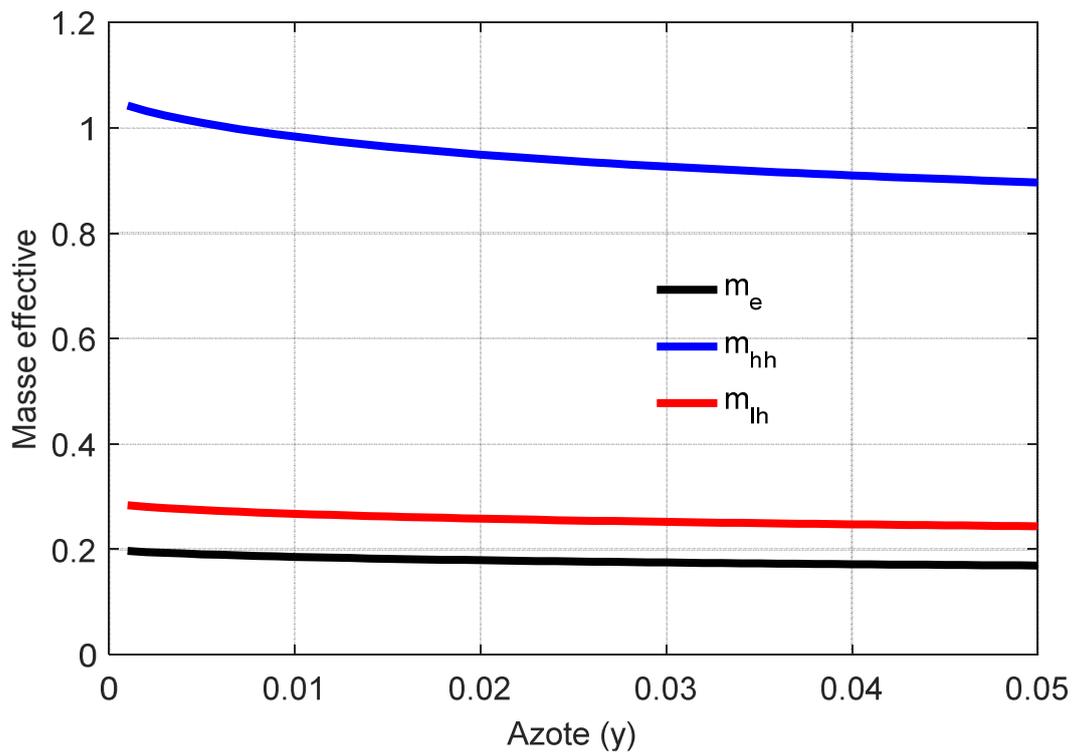


Figure 3.10: Variation des masses effectives des électrons, trous lourds et légers en fonction d'azote.

III. 7 Décalage des bandes

Ce sont les décalages ΔE_c , ΔE_v entre les bandes de conduction et de valence, des deux matériaux constituant la barrière et le puits comme illustré sur le schéma suivant:

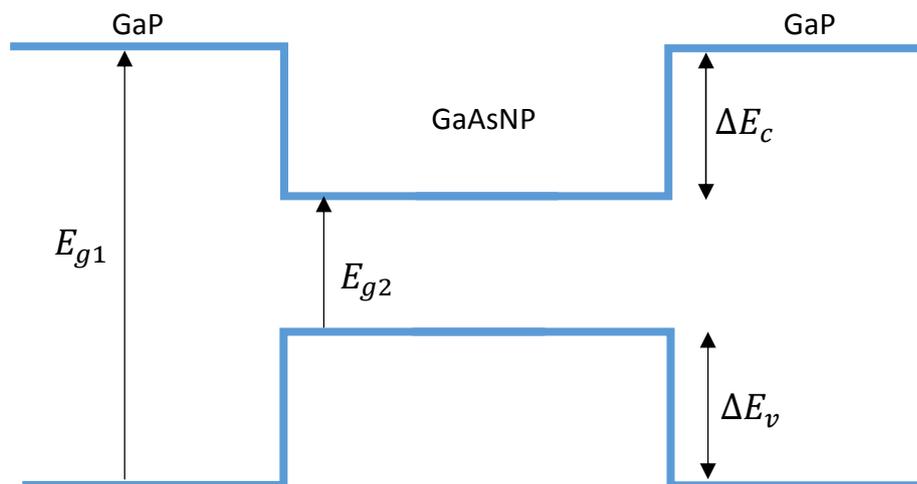


Figure 3.11: Schématisation des décalages des bandes.

Ces décalages de bandes permettront d'avoir deux autres paramètres qui sont eux aussi importants et qui sont les Q_c et Q_v offset ratio donnés par les équations:

$$Q_c = \frac{\Delta E_c}{\Delta E_c + \Delta E_v^{hh}} \quad (3.7)$$

$$Q_v = \frac{\Delta E_v^{hh}}{\Delta E_c + \Delta E_v^{hh}} \quad (3.8)$$

Sur la figure 3.12, on simule la variation du paramètre Q_c en fonction de la composition d'arsenic pour différentes valeurs d'azotes. Pour des valeurs d'arsenic inférieures à 0.1, le Q_c augmente, alors que pour des valeurs supérieures à 0.1, le Q_c diminue. Alors que l'augmentation de l'arsenic mène à une diminution de Q_c .

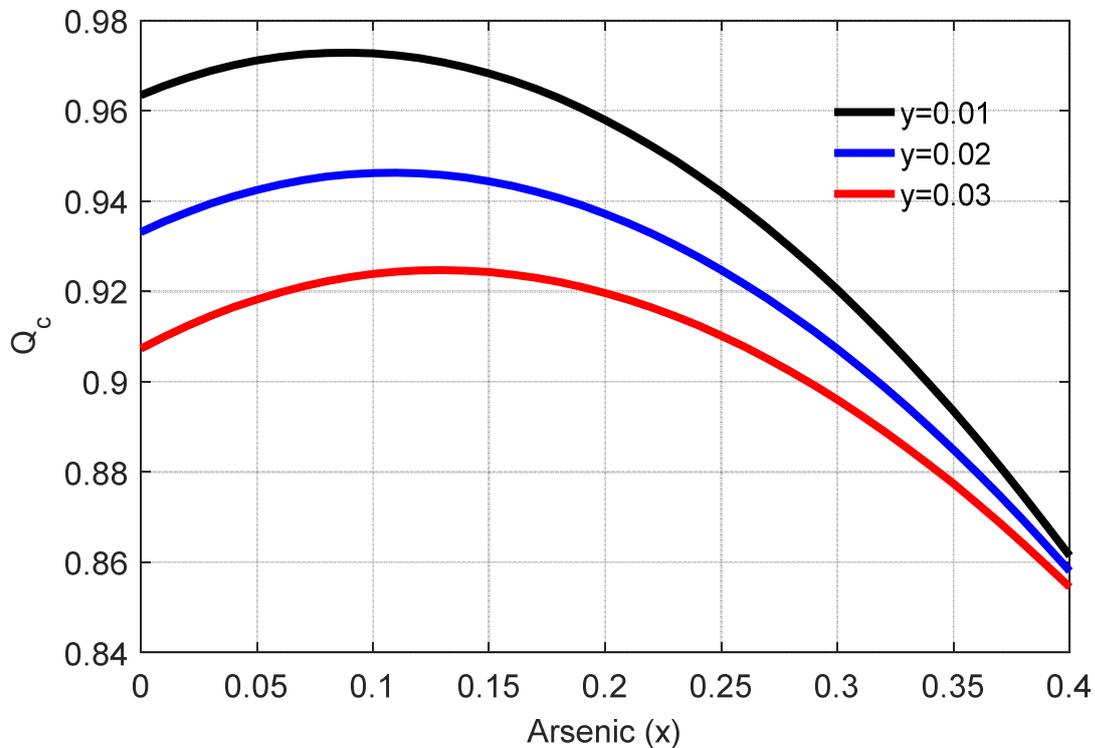


Figure 3.12: Variation de Q_c en fonction des paramètres de composition x et y .

La figure 3.13 montre la variation du Qv en fonction du pourcentage de l'arsenic pour plusieurs valeurs d'azote. L'augmentation de la concentration d'azote mène à une augmentation du Qv alors que l'azote diminue le Qv .

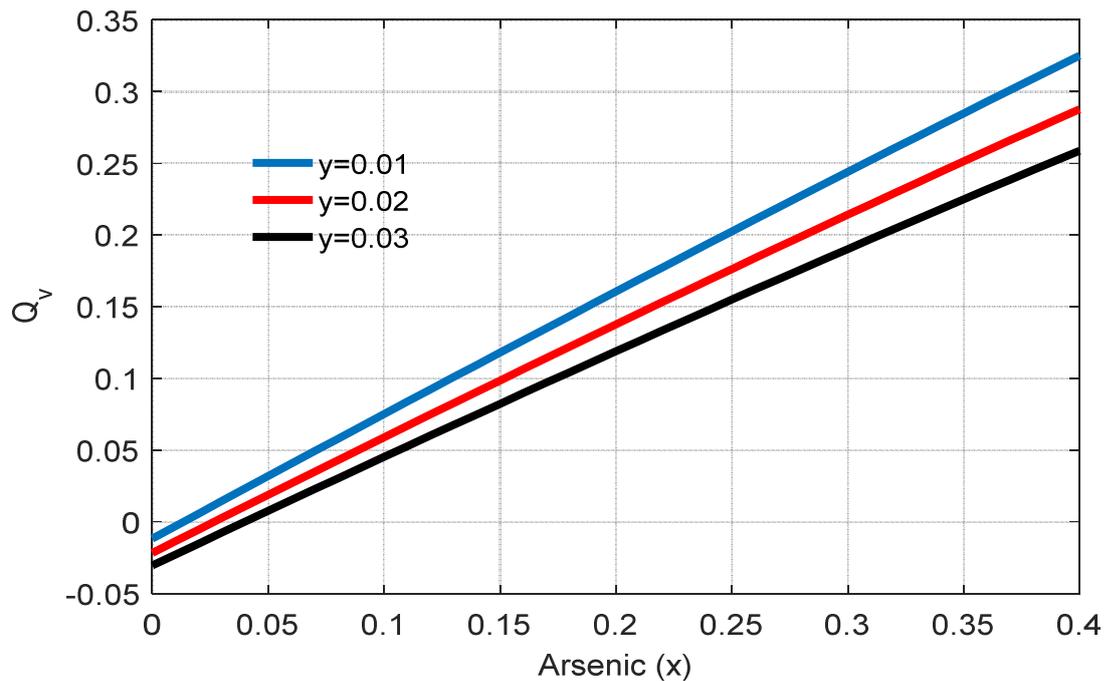


Figure 3.13:Variation de Qv en fonction des paramètres de composition x et y

III. 8 Niveaux énergétiques

L'augmentation de la concentration d'azote diminue le nombre des niveaux énergétiques des électrons et élargit la séparation entre ces niveaux tels que l'on peut voir sur les figures 3.14 et 3.15.

De même pour les niveaux énergétiques des trous lourds, L'augmentation de la concentration d'azote diminue le nombre des niveaux énergétiques des trous lourds et élargit la séparation entre ces niveaux tels que l'on peut voir sur les figures 3.16 et 3.17.

Même remarque pour les niveaux énergétiques des trous légers, L'augmentation de la concentration d'azote diminue le nombre des niveaux énergétiques des trous légers et élargit la séparation entre ces niveaux tels que l'on peut voir sur les figures 3.18 et 3.19.

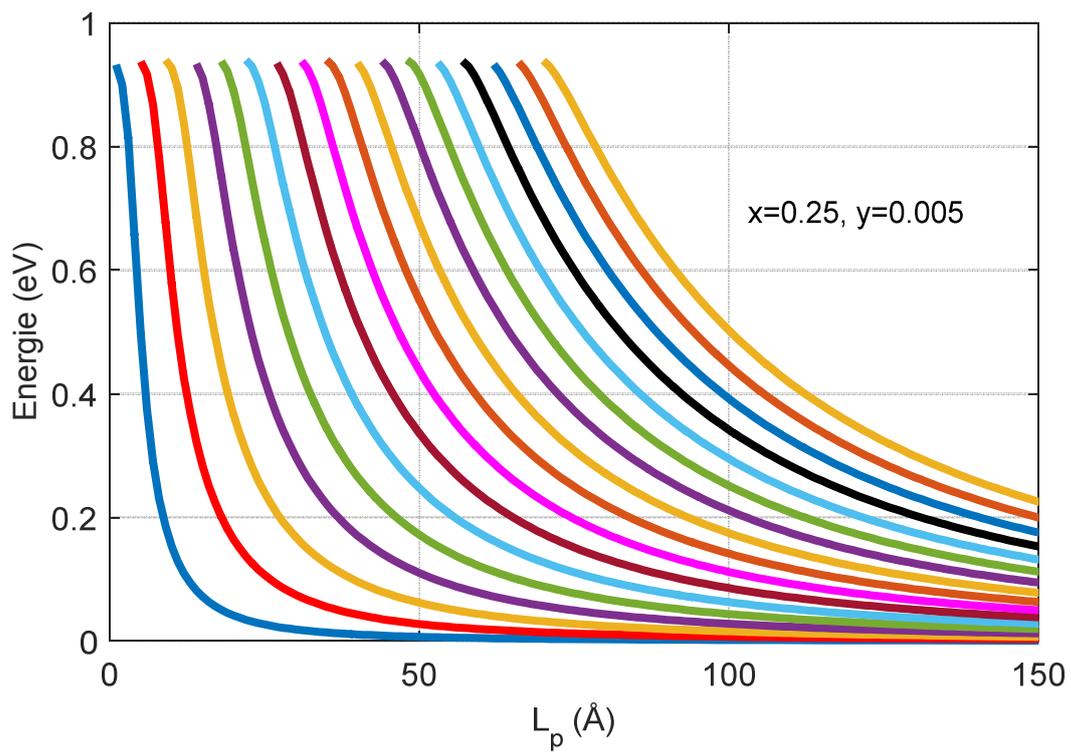


Figure 3.14: Variation des niveaux des électrons pour $x = 0.25$ et $y = 0.005$.

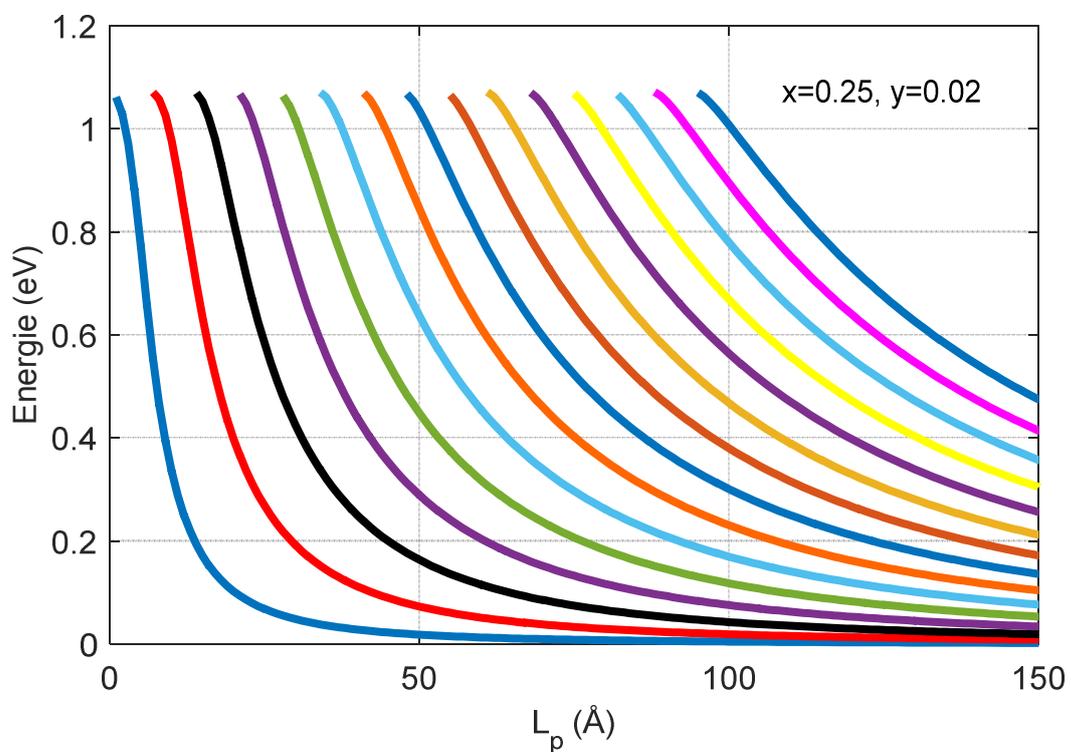


Figure 3.15: Variation des niveaux des électrons pour $x = 0.25$ et $y = 0.02$.

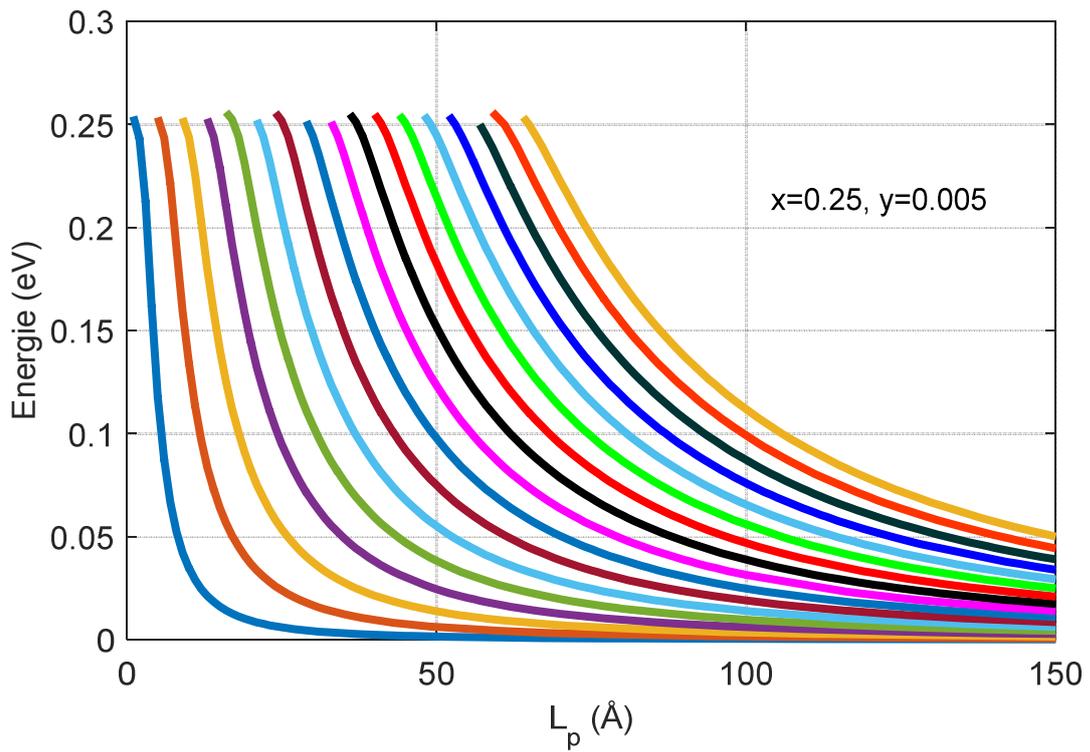


Figure 3.16:Variation des niveaux des trous HHpour $x = 0.25$ et $y = 0.005$.

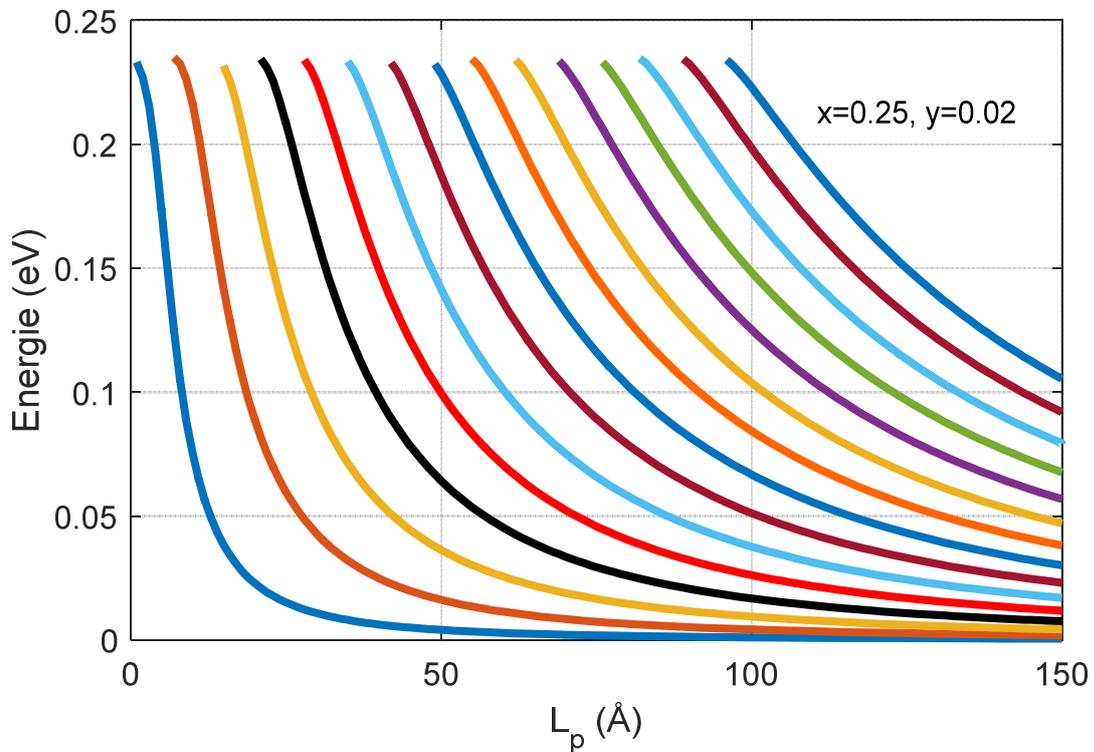


Figure 3.17:Variation des niveaux des trous HHpour $x = 0.25$ et $y = 0.02$.

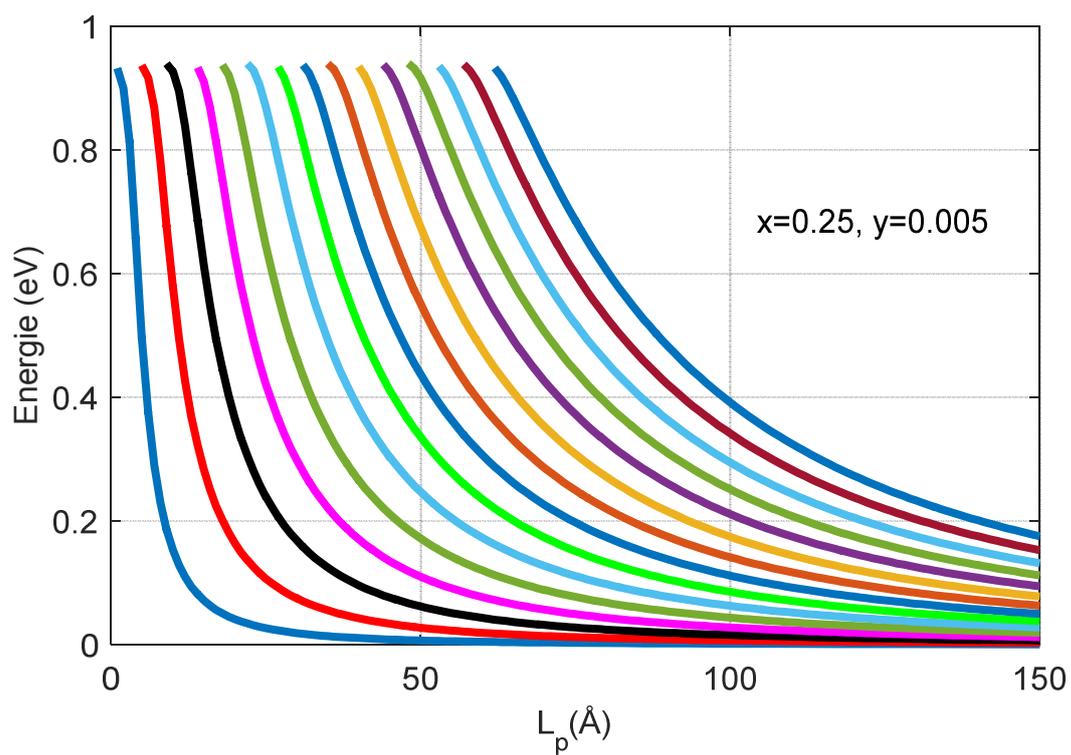


Figure 3.18: Variation des niveaux des trous LH pour $x = 0.25$ et $y = 0.005$.

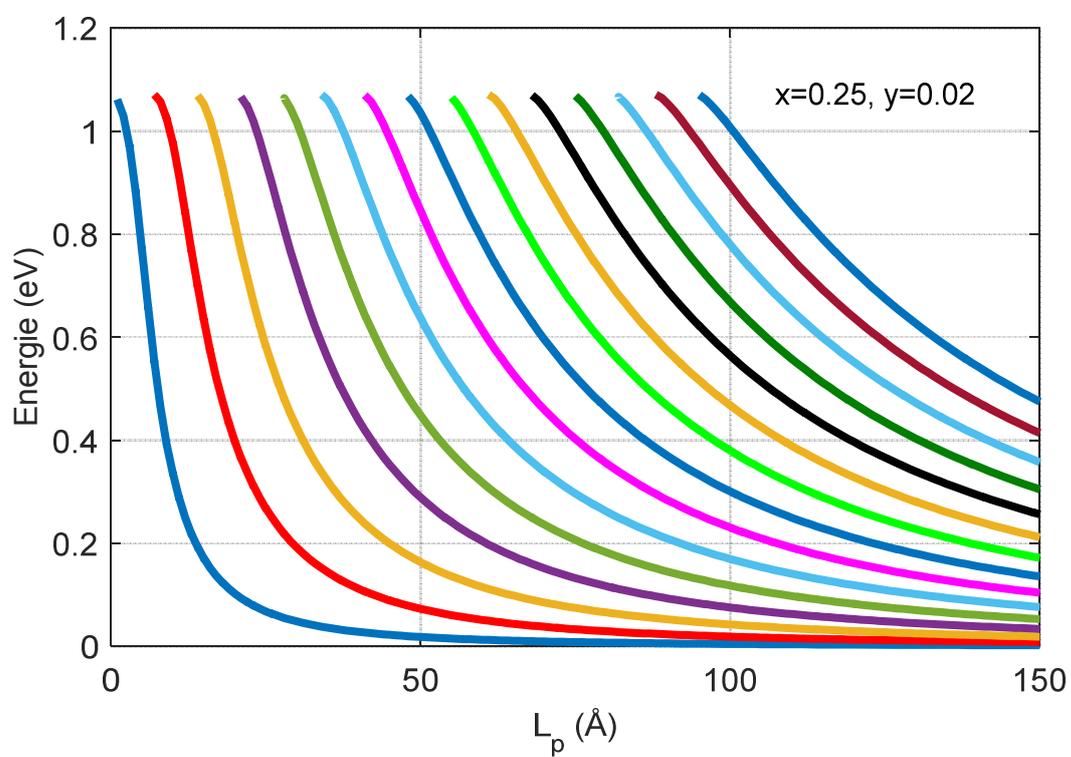


Figure 3.19: Variation des niveaux des trous LH pour $x = 0.25$ et $y = 0.02$.

III. 9Energie de transition

L'augmentation de x et y diminue l'énergie de transition tel que l'on peut voir sur les figures 3.20 et 3.21.

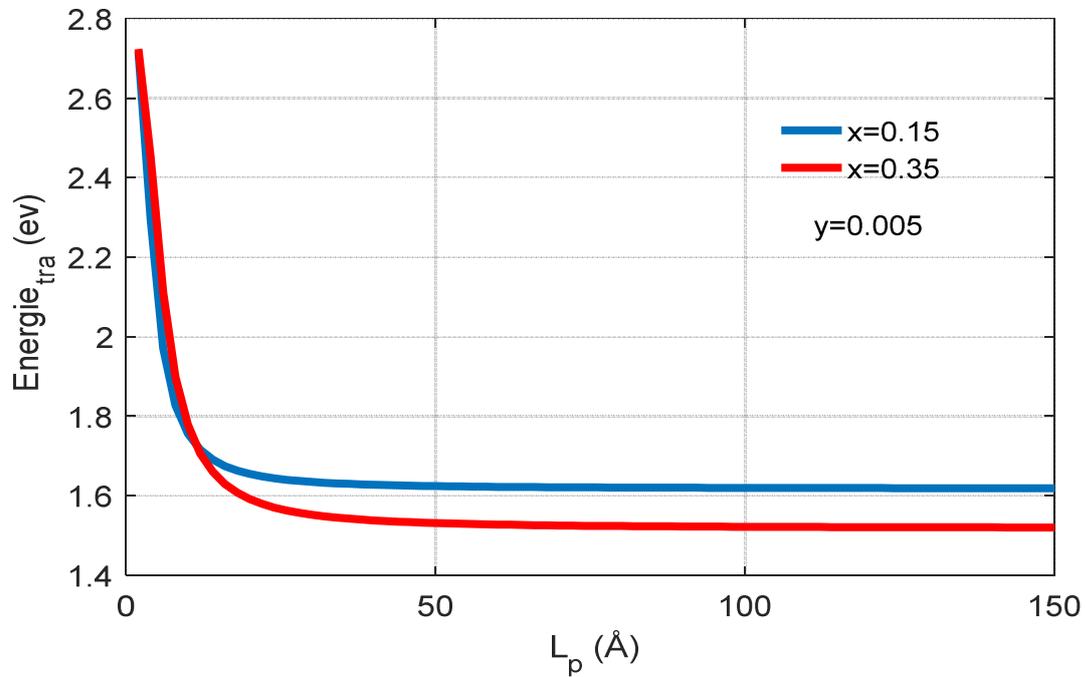


Figure 3.20: Variation de l'énergie de transition en fonction de la largeur de puits L_p ($y = 0.005$).

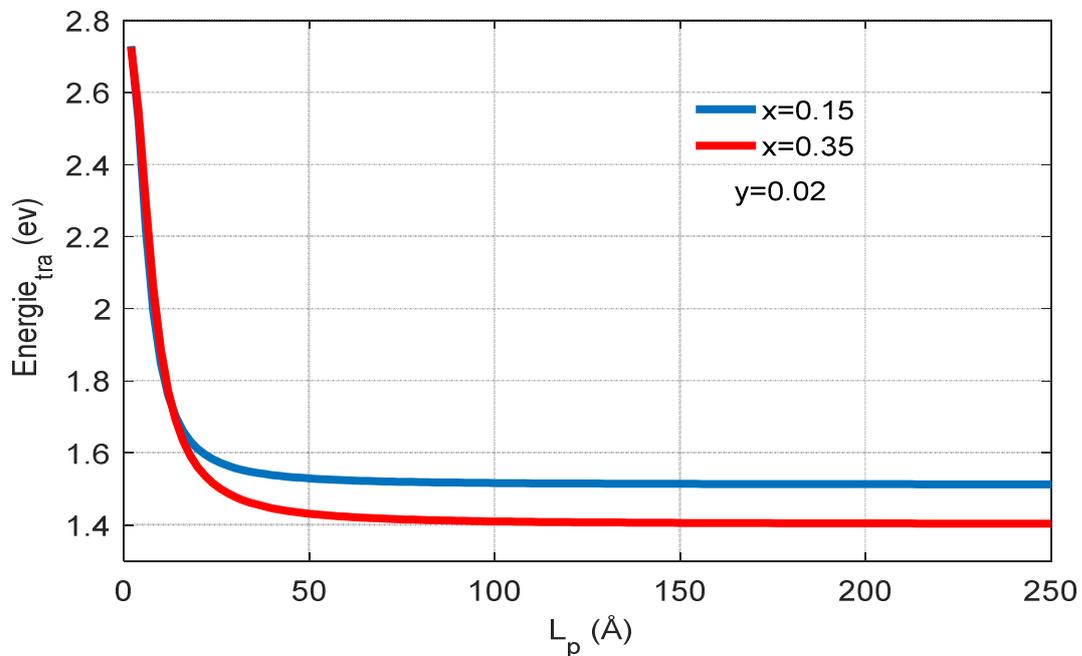


Figure 3.21: Variation de l'énergie de transition en fonction de la largeur de puits L_p ($y = 0.02$).

III. 10 Longueur d'onde

L'augmentation de x et y augmente la longueur d'onde d'émission telle que l'on peut voir sur les figures 3.22 et 3.23.

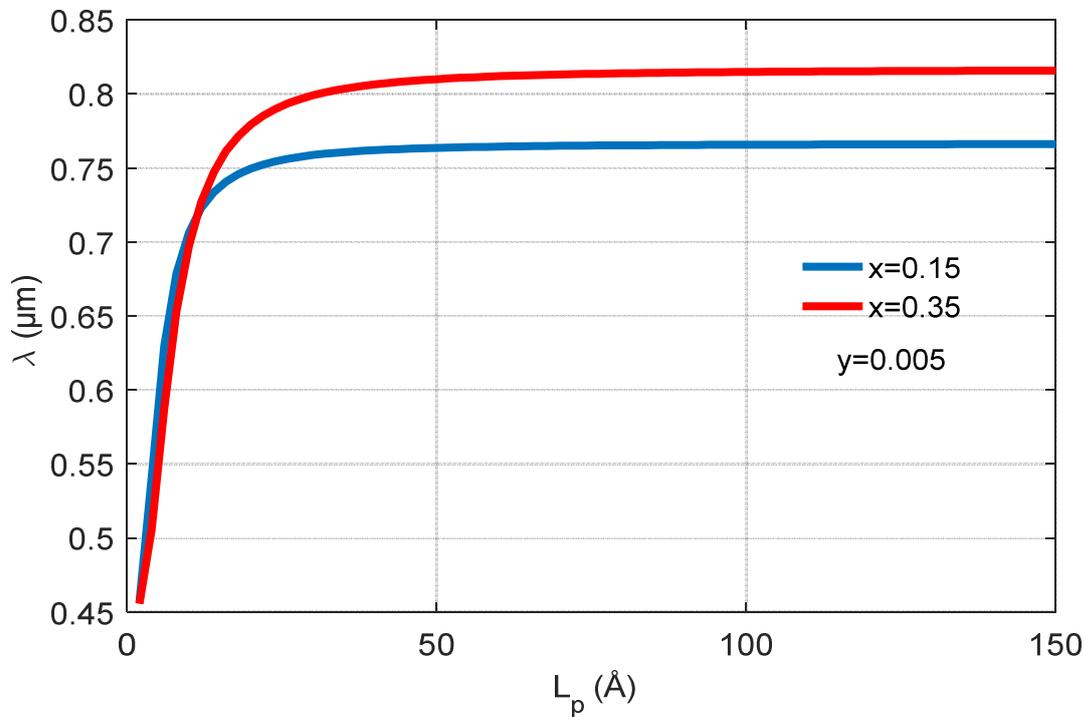


Figure 3.22: Variation de la longueur d'onde en fonction de la largeur de puits pour $y = 0.005$.

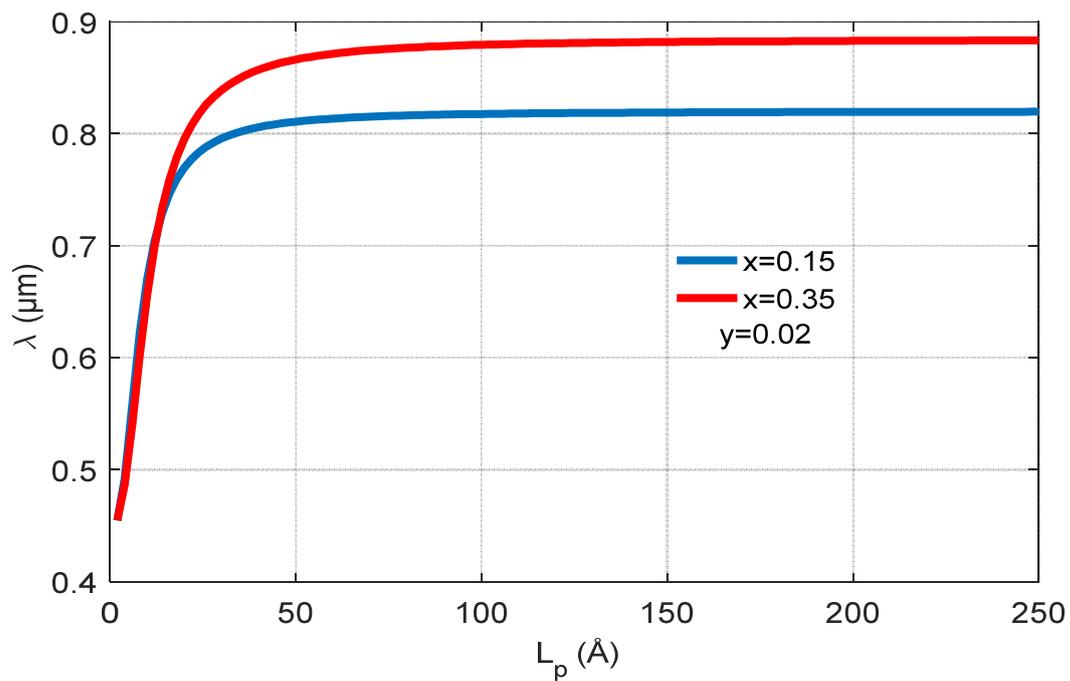


Figure 3.23: Variation de la longueur d'onde en fonction de la largeur de puits L_p pour $y = 0.02$.

III. 11 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons étudié les propriétés très particulières de la structure à puits quantique *GaNAsP/GaP*. Ces propriétés attrayantes sont dues à l'incorporation de l'azote qui mène à l'éclatement de la bande de conduction en deux sous bandes ce qui cause la diminution de la bande interdite et l'augmentation de la longueur d'onde d'émission.

Nous avons étudié le gap et donner son évolution en fonction des paramètres de composition x et y ainsi que la dépendance du gap en température, puis, nous avons vu les masses effectives des porteurs, le paramètre de maille, la contrainte et finalement les décalages des bandes ainsi que les niveaux énergétiques, l'énergie de transition entre le premier niveau électronique et celui des trous lourds et la longueur d'onde correspondante.

Conclusion générale

Dans le domaine des matériaux qui est la base de tous les dispositifs fabriqués, on est tout le temps en train d'explorer d'autres classes de matériaux. L'emploi des semi-conducteurs s'est avéré très fructueux et divers dispositifs ont prouvé leurs importances dans notre vie quotidienne. L'exploit d'autres classes de matériaux ouvre un grand éventail de recherches de matériaux magiques, petits et rapides.

L'objectif de ce travail est d'étudier et de comparer les propriétés optoélectroniques des deux structures à puits quantiques contraintes le $GaAsP/GaP$ et le $GaNAsP/GaP$.

Tous deux se cristallisent dans une structure zinc blende. Concernant la première structure ($GaAs_xP_{1-x}/GaP$), l'ajout de l'arsenic augmente le paramètre de maille, l'énergie spin-orbite, la masse effective des électrons et celle des trous légers ainsi que les décalages des bandes. Alors que l'augmentation de la concentration de ce paramètre diminue la contrainte, l'énergie de la bande interdite et la masse effective des trous lourds.

Dans la deuxième structure ($GaN_yAs_xP_{1-x-y}/GaP$), l'ajout de l'azote en toute petite quantité dans la première structure mène à un éclatement de la bande de conduction en deux sous bandes ce qui mène à son tour à une diminution de la bande interdite, du paramètre de maille ainsi que la masse effective des électrons, trous lourds et celle des trous légers, sans oublier le Qc . Par contre, cet ajout mène à une augmentation de la contrainte et le paramètre Qv . Concernant l'énergie de confinement, l'addition des deux compositions influe sur le nombre des niveaux énergétiques des différents porteurs. Nous avons aussi vérifié l'énergie de transition et nous avons constaté que tous deux mènent à une diminution de l'énergie de transition ce qui mène à son tour à une augmentation de la longueur d'onde d'émission.

Pour un puits quantique $GaAsP$ de largeur 50 \AA et des valeurs d'arsenic $x = 0.15$ et $x = 0.35$, on aura des longueurs d'ondes correspondantes égales à 0.495 \mu m et 0.561 \mu m , respectivement. L'ajout de l'azote dans le $GaAsP$, pour les mêmes valeurs de L_p et x précédentes, en toute petites quantité, prenant comme exemple $y=0.005$ et $y=0.02$, nous permette d'avoir des longueurs d'ondes de valeurs égales à 0.763 \mu m , 0.81 \mu m (pour $y=0.005$) et 0.810 \mu m et 0.866 \mu m (pour $y=0.02$) ce qui élargit le domaine d'application.

Références Bibliographiques

[1] : Louis Marchildon, " Mécanique quantique ", Bruxelles, 2000.

[2] : L. Vegard, Z. Phys. 5, 17, 1921.

[3] : K. Shim, H. Rabitz, Ji-H. Chang, and T. Yao, J. Cryst. Growth, 214/215 (2000) 350.

[4] : W. A. Harrison. Electronic structure and the properties of solids : the physics of the chemical bond. Dover Publications, 1989.

[5] : <https://www.aquaportail.com/definition-9250-tableau-periodique.html>

visiter le 07.09.2019

[6] : Yacine MAROUF : « Modélisation des cellules solaires en InGaN en utilisant Atlas Silvaco » thèse de magister université de Beskra 2013.

[7] : B. Terek : « Propriétés optiques de puits quantiques GaInAsN /GaAs », Thèse doctorat, Université de Blaise Pascal, le 12 mai 2006.

[8] : N. Aggarwal, A. Vasishth, B. Singh and B. I. Singh, Investigation of room temperature ferromagnetic behaviour in dilute magnetic oxides, Integrated Ferroelectr., VOL. 186, pp. 10-16, 2018.

[9] : Adachi 2017

[10] : K. Amina .n Meriem : « Etude et simulation de l'effet tunnel dans une structure à double puits quantiques » thèse de master université de Blida 2013.

[11] : Y. Van CLUMINAL

Réalisation et étude des diodes lasers à base de GaSb émettant vers 2.3 μm pour applications à l'analyse des gaz

[12] : L. Ali : « Etude des propriétés optiques de puits quantiques contraints ultra-minces d'InAs/InP », Thèse doctorat, Université de Montréal, Juin 2006.

[13] : AISSAT Abdelkader :

“Cours matériaux pour l'optoélectronique”. Université de Blida 2017.

[14] : SEGhilani Mohamed Seghir :

“Modélisation et simulations d’une structure à multi-puits quantiques à base de GaInAs (N,Sb)/GaAs”. Thèse de magistère. Université de Blida. Département d’électronique.

[15] AISSAT ABDELKADER :

“Modélisation et calcul du gain optique et du courant de seuil d’un laser à puits quantique contraint à base de GaInAs/InP”. Thèse de magistère. Université BLIDA, 1999.

[16] R. Kudrawiec, A. V. Luce, M. Gladysiewicz, M. Ting, Y. J. Kuang, C. W. Tu, O. D. Dubon, K. M. Yu, X. Walukiewicz, Electronic Band Structure of $\text{GaN}_x\text{P}_y\text{As}_{1-x-y}$ Highly Mismatched Alloys: Suitability for Intermediate-Band Solar Cells, Phys. Rev. Appl, Vol. 1, pp. 034007 ().

[17] Physics and Applications of Dilute Nitrides; Buyanova, I. A., Chen, W. M., Eds.; Taylor & Francis Books, Inc: New York, 2004.

[18] Kuang, Y. J.; Yu, K. M.; Kudrawiec, R.; Luce, A. V.; Ting, M.; Walukiewicz, W.; Tu, C. W. GaNASP: An Intermediate Band Semiconductor Grown by Gas-Source Molecular Beam Epitaxy. Appl. Phys. Lett. 2013, 102, 112105.

[19] Karcher, C.; Grüning, H.; Gü ngerlich, M.; Klar, P. J.; Volz, K.; Stolz, W.; Heimbrodt, W. Optical Properties of Ga(NAsP) Lattice Matched to Si. Phys. Status Solidi C 2009, 6, 2638–2643.

[20] La, R.; Pan, J. L.; Bastiman, F.; Tu, C. W. Self-Catalyzed Ga(N)AsP Nanowires and GaAsP/GaNASP Core-Shell Nanowires Grown on Si (111) by Gas-Source Molecular Beam Epitaxy. J. Vac. Sci. Technol., B: Nanotechnol. Microelectron.: Mater., Process., Meas., Phenom. 2016, 34, 02L108.

[21] : A. Aïssat, S. Nacer, M. Bensebti, J.P. Vilcot

Investigation on the emissionwavelength of GaInNASstrainedquantiumwells on GaAssubstrates.

Microelectronics journal 39, 2008 pp 63-66

[22] : W. Shan, W. Walkiewiczand J.W. Ager III

Band anti-crossing in GaInNASalloys.

Phys. Rev 1999 vol 82, n° 6 pp 1221-1224.

Résolution de l'équation de Schrödinger pour un potentiel coulombien

Il s'agit de résoudre l'équation de Schrödinger indépendante du temps pour un potentiel central en $1/r$ (avec $r = |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|$) :

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U(\vec{r}) \right) \phi(\vec{r}) = E\phi(\vec{r}) \quad \text{avec} \quad U(\vec{r}) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \quad (1)$$

En raison de la forme du potentiel, nous pouvons traiter ce problème en symétrie sphérique pour laquelle l'opérateur Δ s'écrit (fastidieux, quelques éléments sont donnés à la fin de ce complément) :

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \left(\frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \frac{1}{\text{tg}\theta} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right) \quad (2)$$

Il est alors intéressant de calculer le moment cinétique, d'abord en coordonnées cartésiennes, puis converti en coordonnées sphériques :

$$\vec{L} = \vec{r} \wedge \vec{p} \quad \text{et} \quad p_u = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial u} \quad \text{avec } u=x, y, \text{ ou } z$$

$$\text{D'où : } \vec{L} = \frac{\hbar}{i} \begin{pmatrix} -\frac{\cos\varphi}{\text{tg}\theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} - \sin\varphi \frac{\partial}{\partial \theta} \\ -\frac{\sin\varphi}{\text{tg}\theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} + \cos\varphi \frac{\partial}{\partial \theta} \\ \frac{\partial}{\partial \varphi} \end{pmatrix}$$

Et on remarque alors que :

$$L^2 = -\hbar^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial \theta^2} - \frac{1}{\text{tg}\theta} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right)$$

On est donc amené à résoudre l'équation suivante :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{L^2}{2mr^2} + U(r) - E \right] \psi(r, \varphi, \theta) = 0$$

On remarque que les opérateurs comportent soit la coordonnée r , soient les coordonnées φ et θ , mais elles ne sont pas mélangées. A partir de ce constat, on peut écrire une solution du type :

$$\phi(r, \theta, \varphi) = R(r)Y(\theta, \varphi)$$

Dans ce cas, l'équation devient, en divisant par RY et en multipliant par r^2 :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{R} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) (R) + U(r) - E \right] r^2 = -\frac{L^2 Y}{2mY} = \text{constante}$$

En effet, la partie de gauche ne dépend que de r , et la partie droite que de φ et θ , donc le tout est constant, puisque cette équation doit être valable quelques soient r , φ et θ . On obtient ainsi 2 équations, une radiale et une azimutale. En fait l'équation azimutale représente une équation aux valeurs propres. En mathématiques, les solutions de cette équation sont connues. Elles sont appelées harmoniques sphériques, et sont fonctions propres de L^2 avec la valeur propre $l(l+1)\hbar^2$, c'est-à-dire :

$$L^2 Y_l = \hbar^2 l(l+1) Y_l$$

En utilisant l'astuce suivante :

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) (R) = \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} (rR),$$

il reste alors à déterminer la partie radiale qui satisfait l'équation :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{1}{r} \frac{\partial^2 (rR)}{\partial r^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} R \right] + (U(r) - E)R = 0$$

Pour l'instant nous n'avons fait aucune hypothèse sur la forme du potentiel, si ce n'est qu'il ne dépend que de r (et pas des angles). Or nous savons que pour $l=0$, on doit retomber sur les niveaux simples de Bohr, qui sont des niveaux discrets qui s'écrivent en fonction de la constante de Rydberg E_o . Il doit donc exister plusieurs solutions discrètes dépendant du nombre quantique n , mais également de l . Nous écrirons dès lors ces solutions comme $R_{nl}(r)$. Pour simplifier l'écriture de cette équation, nous allons utiliser la constante de structure fine, le rayon de Bohr, ainsi que E_o :

$$\alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_o \hbar c} \quad \text{d'où} \quad a_B = \frac{\hbar}{\alpha m c}, \quad E_o = \frac{1}{2} \alpha^2 m c^2, \quad U(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_o r} = -\frac{\alpha \hbar c}{r}$$

Ainsi en posant $r = \rho \cdot a_B$, $u_{nl}(r) = r \cdot R_{nl}(r)$ et $\epsilon_{nl} = -E_{nl}/E_o$, on obtient :

$$u_{nl}''(\rho) + \left(\frac{2}{\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} - \epsilon_{nl} \right) u_{nl}(\rho) = 0$$

Les solutions de cette équation se trouvent en examinant les cas où $\rho \rightarrow 0$ (dans ce cas le terme en $1/\rho$ est prépondérant) et où $\rho \rightarrow \infty$ (dans ce cas seul reste le terme ϵ_{nl}) :

$$\begin{aligned} \rho \rightarrow 0 \quad v''(\rho) - \frac{l(l+1)}{\rho^2} v(\rho) = 0 \quad \text{qui a pour solution} \quad v = \lambda \rho^{l+1} + \frac{\mu}{\rho^l} \\ \rho \rightarrow \infty \quad w''(\rho) - \epsilon_{nl} w(\rho) = 0 \quad \text{qui a pour solution} \quad w = \lambda' \exp(-\sqrt{\epsilon_{nl}} \rho) + \mu' \exp(\sqrt{\epsilon_{nl}} \rho) \end{aligned}$$

En raison du fait que la fonction d'onde ne peut être infinie en $\rho = 0$ ou $\rho = \infty$, la solution générale s'écrit alors comme :

$$u_{nl}(\rho) = (a_{l+1} \rho^{l+1} + a_{l+2} \rho^{l+2} + \dots + a_k \rho^k + \dots) \exp(-\sqrt{\epsilon_{nl}} \rho)$$

où le polynôme doit être fini pour que la fonction d'onde soit finie. En injectant cette solution dans l'équation initiale, on trouve la relation :

$$\frac{a_{k+1}}{a_k} = \frac{2(k\sqrt{\varepsilon_{nl}} - 1)}{k(k+1) - l(l+1)} \quad \text{avec } k \geq l+1$$

Si on considère que le polynôme s'arrête à l'ordre p , on doit donc avoir $a_{p+1} = 0$ ce qui conduit à $\sqrt{\varepsilon_{nl}} = 1/p$, et on remarque ainsi que le degré maximum du polynôme n'est autre que n . L'énergie des niveaux ne dépend donc pas de l et s'écrit bien comme le proposait Bohr :

$$\varepsilon_n = \frac{1}{n^2} \quad \text{soit} \quad E = -\frac{E_o}{n^2}$$

L'indice l doit donc vérifier $l+1 \leq n$, et on constate qu'il existe plusieurs sous-niveaux d'indice l différents pour une même valeur de n et donc de l'énergie. A partir de ces dernières expressions, on retrouve les fonctions radiales $R_{nl}(r) = u_{nl}(r)/r$ données dans le tableau au paragraphe III-3.