

**UNIVERSITE DE BLIDA 1**

**Faculté des Sciences**

Département de physique

**THESE DE MASTER**

en Physique

Spécialité: Physique des matériaux

**ETUDE DES PROPRIETES OPTOELECTRONIQUES DES STRUCTURES A**

**PUITS QUANTIQUES GaNAsP/GaP**

Par

**Boukrid Fella**

**Fridi Amira**

Devant le jury composé de :

M <sup>me</sup> S. OUIR	MCB	U. Blida1	Président
M <sup>f</sup> S. AMMI	MAA	U. Blida1	Examineur
M <sup>me</sup> L. CHENINI	MAA	U. Blida 1	Encadreur

Blida 2020

## Table des matières

Remerciements	
Résumé	
Liste des abréviations	
Liste des figures	
Liste des tableaux	
Introduction générale	1
<b>Chapitre 1 : Généralités sur les semi-conducteurs</b>	
1.1 Introduction	3
1.2 . Définition des semiconducteurs	3
1.3 . Définition des semiconducteurs III-V	4
1.4 . La structure cristalline	5
1.4.1.La structure zinc-blende	5
1.4.2. La structure wurtzite	6
1.5. Le paramètre de maille	7
1.6. L'épitaxie	7
1.6.1. Définition	7
1.6.2. Les différentes techniques d'épitaxie	7
1.7. Les défauts cristallins	9
1.8. La contrainte	11
1.9. L'épaisseur critique	12
1.10. Les hétérostructures	12
1.11. Les puits quantiques	14
1.12. Décalage des bandes	15
1.13. L'équation de Schrödinger dans un puits quantique	15
1.14. Masse effective des électrons	18
1.15.Taux de confinement	19
1.16. Effet laser	19
1.16. a. Définition du laser	19
1.16. 2. Principe du laser	19
1.16.3. L'absorption	20
1.16.4. Emission spontanée	20
1.16.5. Emission stimulée	21

1.17. Le gain optique .....	22
1.18 . Conclusion. ....	23
<b>Chapitre 2 : résultats &amp; discussions</b>	
2.1. Introduction .....	24
2.2. Paramètre de maille. ....	24
2.3. La contrainte. ....	26
2.4. L'effet de l'azote sur la structure de bande. ....	27
2.5. Le modèle anti- croisement (BAC). ....	27
2.6. L'énergie de bande interdite et éclatement de la bande de conduction... ..	28
2.7. La masse effective. ....	31
2.8. L'énergie spin-orbite. ....	32
2.9. Décalage des bandes. ....	33
2.10. La variation des niveaux des électrons .....	35
2.11. La Variation des niveaux des trous hh .....	37
2.12. L'énergie de transition. ....	39
2.13. La longueur d'onde. ....	40
2.14. Le gain optique. ....	42
2.15. Conclusion. ....	43
<b>Conclusion générale. ....</b>	<b>44</b>
<b>Références</b>	

# Remerciements

*Nous tenons tout d'abord à remercier Dieu le tout puissant et miséricordieux, qui nous a donné la force et la patience d'accomplir ce Modeste travail.*

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

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

*Nous remercions sincèrement les membres du jury qui ont accepté d'examiner ce travail.*

# *Dédicace*

A mes très chers parents,

Aucun mot, aucune dédicace ne peut exprimer mon respect, ma considération et l'amour éternel pour les sacrifices que vous avez consentis pour mon instruction et mon bien être.

Votre générosité et votre bonté ont toujours été exemple pour nous tous.

Trouvez en ce travail le fruit de votre dévouement, de votre patience et l'expression de ma gratitude et mon profond amour.

Je t'aime papa, je t'aime maman et sachez que je suis très reconnaissante.

A mes très chères sœurs Akila et Khadidja.

Vous m'avez toujours soutenu durant toutes mes études, je vous souhaite une vie pleine de joie, de bonheur et de réussite.

A mon frère Djilali et son épouse Meriem

A mes neveux Maram, Lilian, Wassim, Lina et Sarah.

A toute ma famille,

A mes amis

A tous ceux qui m'aiment

A tous ceux que j'aime

A tous ceux qui m'ont aidé de près ou de loin,

Je dédie ce travail avec hommage.

AMIRA

# *Dédicace*

*À mes chers parents*

*Aucune dédicace ne saurait exprimer mon respect, mon amour éternel et ma considération pour les sacrifices que vous avez consenti pour mon instruction et mon bien être.*

*Je vous remercie pour tout le soutien et l'amour que vous me portez depuis mon enfance.*

*Que ce modeste travail soit l'exaucement de vos vœux tant formulés, le fruit de vos innombrables sacrifices, bien que je ne vous en acquitterai jamais assez.*

*Puisse Dieu, le très haut, vous accordez santé, bonheur et longue vie et faire en sorte que jamais je ne vous déçoive.*

*À ma petite sœur Yousra, mes deux frères Hichem et Zakaria.*

*À mon mari Bilal qui m'a soutenu et été à mes côtés dans les moments difficiles.*

*À toute ma famille et ma belle-famille surtout à mes tantes et mon oncle.*

*À toute mes amies*

*Merci pour tout*

**FELLA**

## ملخص

هذا العمل يتضمن دراسة الخصائص الكهروضوئية لبنية أبار كمونية GaNAsP/GaP, بتعبير أدق دراسة تأثير دمج الزرنيخ As و النيتروجين N على البنية باستخدام نموذج نطاق مكافحة العبور (BAC). أولاً قمنا بدراسة ثابت الشبكة, الإجهاد, الكتلة الفعالة و طاقة فجوة الحزمة؛ دمج النيتروجين يؤدي إلى انقسام نطاق التكافؤ إلى فرعيين، وبالتالي انخفاض في طاقة فجوة الحزمة. ثم قمنا بدراسة تأثير الزرنيخ و النيتروجين على الكسب البصري و طول الموجة؛ ومنه نستنتج انه كلما زادت كمية الزرنيخ و النيتروجين زاد طول الموجة في مجال الأشعة تحت الحمراء القريبة.

## Résumé

Ce travail porte sur l'étude des propriétés optoélectroniques des structures GaNAsP/GaP à puis quantique. Il s'agit plus précisément d'évaluer l'influence de l'incorporation d'arsenic et d'azote sur la structure de bande en utilisant le modèle anticroisement (BAC). Nous avons d'abord étudié le paramètre de maille, la contrainte, la masse effective et l'énergie de bande interdite ; l'incorporation d'azote provoque l'éclatement de la bande de conduction en deux sous bandes donc l'énergie de bande interdite diminue. Ensuite, nous avons étudié l'influence de l'azote et l'arsenic sur le gain optique et la longueur d'onde. Cette incorporation augmente la longueur d'onde dans le domaine infrarouge proche.

## Abstract

This work relates to study the optoelectronic properties of GaNAsP/GaP structures. It is more precisely a question of evaluating the influence of arsenic and nitrogen incorporation on the band structure by using the anti-crossing band model (BAC). We first study the lattice parameter, strain, effective mass and the bandgap energy; the incorporation of nitrogen causes the splitting of the conduction band into two sub-bands so the bandgap energy decreases. Then we studied the influence of nitrogen and arsenic on optical gain and wavelength. This incorporation increases the wavelength in the near infrared range.

## Liste des abréviations

- $a$  : Paramètre de maille
- $a_c$  : Potentiel de déformation dans la bande de conduction
- $a_e$  : Paramètre de maille de la couche active
- As : Arsenic
- $a_s$  : Paramètre de maille du substrat
- $a_v$  : Potentiel de déformation dans la bande de valence
- $b$  : Potentiel de déformation tétragonale
- BAC : le modèle d'anti-croisement de bande
- BC : Bande de conduction
- BV : Bande de valence
- $C_{ij}$  : Coefficient d'élasticité
- $E_c$  : L'énergie du bas de la bande de conduction
- $E_g$  : Energie de gap
- $E_N$  : Niveau d'azote
- $E_{tr}$  : Energie de transition
- $E_v$  : L'énergie du haut de la bande de valence
- Ga : Gallium
- $h$  : Constante de Planck.
- $h_c$  : Epaisseur critique
- hh : Trous lourds
- lh : Trous légers
- $L_p$  : Largeur du puits
- $m_e^*$  : Masse effective des électrons
- $m_{hh}$  : Masse effective des trous lourds
- $m_{lh}$  : Masse effective des trous légers
- N : Azote
- P : Phosphore
- $Q_c$  : Taux de confinement dans la bande de conduction
- $Q_v$  : Taux de confinement dans la bande de valence
- $V_{MN}$  : Coefficient de couplage
- $\varepsilon$  : Contrainte
- $\varepsilon_{//}$  : Contrainte biaxiale

$\varepsilon_{\perp}$  : Contrainte uniaxiale

$\Delta_0$ : Energie spin orbite

$\Delta E_c$  : Décalage de la bande de conduction

$\Delta E_v$  : Décalage de la bande de valence

$\psi(x)$  : Fonction d'onde.

$\lambda$  : Longueur d'onde

$\alpha$ : Coefficient d'absorption

## Liste des figures

Figure 1.1 Structure électronique des matériaux. ....	4
Figure 1.2..Maille cristallographique de GaAs (zinc blende) .....	6
Figure 1.3.Représentation en 3D de la structure wurtzite .....	6
Figure 1.4.Un bâti d'épitaxie par jet moléculaire. ....	8
Figure 1.5.Dispositif d'épitaxie en phase liquide. ....	8
Figure 1.6.Banc d'épitaxie en phase vapeur .....	9
Figure 1.7.Défauts ponctuels. ....	10
Figure 1.8.Défauts planaires. ....	10
Figure 1.9.Défauts linéaires. ....	10
Figure 1.10.Les deux types de déformation. ....	12
Figure 1.11.Couche d'un matériau semi-conducteur B possédant un gap inférieur à celui du matériau semi-conducteur A. ....	13
Figure 1.12.Hétérostructure de type 1. ....	13
Figure 1.13.Hétérostructure de type 2. ....	14
Figure 1.14.Illustration d'un puits quantique. ....	14
Figure 1.15.Puits de profondeur infinie. ....	16
Figure 1.16.Puits de potentiel à profondeur finie. ...	17
Figure 1.17. Schéma d'un système laser.....	20
Figure 1.18. Illustration du processus d'absorption .....	20
Figure 1.19. Illustration du processus d'émission spontanée .....	21
Figure 1.20. Illustration du processus d'émission stimulée.....	21

\*\*\*\*\*

Figure 2.1. Variation de paramètre de maille du $GaN_xAs_yP_{(1-x-y)}$ en fonction de la concentration de l'azote et de l'arsenic. ....	25
Figure 2.2.Variation du désaccord paramétrique en fonction de la concentration d'azote et d'arsenic de la structure $GaN_xAs_yP_{(1-x-y)}/GaP$ . ....	26
Figure 2.3. Variation des bandes $E_{g-}$ et $E_{g+}$ et fonction d'azote et d'arsenic .....	29

Figure 2.4. Variation de l'énergie de bande interdite en fonction de la concentration des atomes d'azote pour différentes valeurs d'arsenic . . . . .	30
Figure 2.5. Variation de l'énergie de bande interdite en fonction de la concentration des atomes d'arsenic pour différentes valeurs d'azote. . . . .	30
Figure 2.6. Variation de la masse effective des électrons, trous lourds et trous légers en fonction de la concentration d'azote ( $y=25\%$ ) . . . . .	32
Figure 2.7. Variation du décalage spin-orbite en fonction de l'azote et d'arsenic . . . . .	33
Figure 2.8. Schématisation des décalages des bandes . . . . .	33
Figure 2.9. Variation du taux de confinement $Q_c$ et $Q_v$ en fonction de l'azote et de l'arsenic .	34
Figure 2.10. Variation de l'énergie de quantification des électrons en fonction d'azote et d'arsenic . . . . .	36
Figure 2.11. Variation des niveaux des trous hh en fonction d'azote et d'arsenic . . . . .	38
Figure 2.12.a. Variation de l'énergie de transition en fonction de la largeur de puits pour plusieurs concentrations d'arsenic et pour $x=1\%$ . . . . .	39
Figure 2.12.b. Variation de l'énergie de transition en fonction de la largeur du puits pour plusieurs concentrations d'arsenic et pour $x=2\%$ . . . . .	40
Figure 2.13.a. Variation de la longueur d'onde en fonction de la largeur du puits pour plusieurs concentrations d'arsenic et pour $x=1\%$ . . . . .	41
Figure 2.13.b. Variation de la longueur d'onde en fonction de la largeur du puits pour plusieurs concentrations d'arsenic et pour $x=2\%$ . . . . .	41
Figure 2.14. Variation du gain optique en fonction de la longueur d'onde d'émission $\lambda(\mu m)$ pour plusieurs valeurs d'arsenic. . . . .	42
Figure 2.15. Variation du gain optique en fonction de la longueur d'onde d'émission $\lambda(\mu m)$ pour plusieurs valeurs d'azote. . . . .	43

## Liste des tableaux

Tableau 1.1. Exemple de matériaux semiconducteurs III-V. ....	5
Tableau 2.1. Paramètres de maille des matériaux binaires. ....	25
Tableau 2.2. Les coefficients d'élasticité pour les matériaux binaires. ....	26
Tableau 2.3. Les valeurs des masses effectives des matériaux binaires. ....	31
Tableau 2.4. Les paramètres d'énergie spin-orbite des matériaux binaires. ....	32

## **Introduction générale**

Une véritable révolution est en marche depuis plusieurs années, le secteur de l'électronique connaît une forte mutation qui a mené à l'apparition de nouveaux champs d'application jusqu'alors inaccessibles. Obtenus de recherches intensives, de l'émergence de nouvelles technologies et de la mise au point de nouveaux matériaux et méthodes de fabrication, des dispositifs d'éclairage et d'affichage innovants sont peu à peu mis sur le marché. Ainsi, panneaux d'affichage animés, larges écrans fins et flexibles dotés de contrastes élevés, fenêtres transformées en surfaces d'éclairage à la tombée du jour, etc... feront sans doute bientôt partie de notre quotidien.

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.

Le monde des semi-conducteurs est dominé, en termes de marché, par le silicium. Ce dernier, a été l'un des premiers matériaux utilisés avec le germanium pour la fabrication des composants électroniques. Actuellement, la difficulté réside dans le fait que le silicium ne permet pas de fabriquer l'intégralité des fonctions nécessaires à un circuit optoélectronique. En effet, avec son énergie de bande interdite, le silicium est un très mauvais émetteur de lumière.

Dans les années 1960, une nouvelle famille est apparue, celle des matériaux III-V. Au vu de leurs propriétés physiques particulièrement attrayantes et de leur toxicité faible, les semi-conducteurs III-V sont susceptibles de relever un tel défi.

Le développement de la technologie des semi-conducteurs au cours de ces dernières années a révolutionné le monde de l'électronique et de l'optoélectronique. Ce qui a abouti à l'apparition des structures à couches semi-conducteurs très fine et de très bonne qualité, et à l'avènement de nouveaux produits.

L'objectif des travaux de recherche actuels est alors d'élaborer de nouveaux matériaux basés sur les semi-conducteurs ayant de nouvelles propriétés.

Dans ce travail, on s'intéresse à l'étude des propriétés optoélectroniques des structures GaNAsP/GaP à puits quantiques. C'est une étude théorique qui se base sur la simulation, il

s'agit plus précisément d'évaluer l'influence de l'incorporation d'arsenic et d'azote sur la structure de bande et cela en utilisant le modèle anticroisement (BAC).

Ce mémoire sera subdivisé en deux chapitres. 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 leurs propriétés. On donne aussi dans ce chapitre les principales expressions permettant de nous aider dans notre simulation.

Dans le deuxième chapitre, on étudiera en détaille la structure à puits quantique GaNAsP/GaP. On utilisera le modèle d'anticroisement BAC afin de vérifier qu'elle sera l'effet de l'ajout de l'azote et de l'arsenic sur les propriétés optoélectroniques de ce type de structures. Pour en finir, une conclusion résumant tout le travail sera présenté à la fin de ce mémoire.

# Chapitre 1

# Chapitre 1: Généralités sur les semiconducteurs

## 1.1. Introduction :

Dans l'ensemble des matériaux, les semiconducteurs constituent une classe bien définie avec des propriétés physiques particulières. Ils sont une source d'intérêt au plan des connaissances fondamentales et à celui des applications technologiques.

Ils sont principalement remarquables par leurs propriétés électroniques. Effectivement, les semiconducteurs interviennent dans la fabrication de presque tous les équipements électriques et optiques : les dispositifs informatiques, télécommunications, télévision et radio, électroménagers, etc....

Les semiconducteurs III-V sont d'une très grande importance à cause de leurs remarquables propriétés [1].

Dans ce chapitre, nous allons définir et exposer quelques propriétés des alliages semiconducteurs et en particulier les III-V.

## 1.2. Définition des semiconducteurs:

Un semiconducteur est un matériau se situant entre le conducteur et l'isolant tel que l'on peut voir sur la figure 1.1.

- ✚ Les isolants ont une bande interdite très grande, impossible d'apporter assez d'énergie pour qu'un électron de la bande de valence passe à la bande de conduction, aucun courant électrique ne circule, car il n'y a pas de charges mobiles.
- ✚ A l'inverse dans les conducteurs, la bande de valence et de conduction se chevauchent, les électrons se déplacent librement dans l'atome.
- ✚ Un semi-conducteur est intermédiaire entre l'isolant et le conducteur. La hauteur de la bande interdite est intermédiaire, elle est donc franchissable par l'électron.
- ✚ Le semiconducteur peut être pur, un tel cas est dit «intrinsèque», soit dopé par des impuretés de type N ou de type P, dans un tel cas, le semiconducteur est dit «extrinsèque».

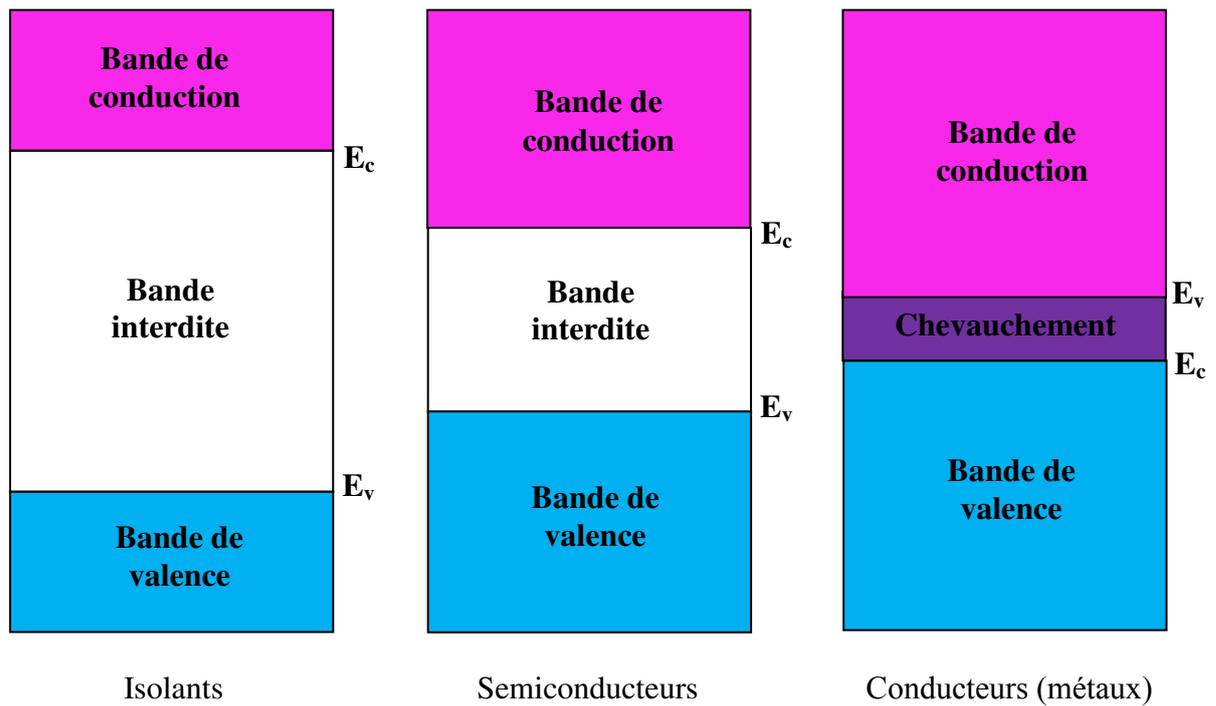


Figure 1.1. Structure électronique des matériaux.

### 1.3. Définition des semiconducteurs III-V :

Les semiconducteurs III-V, sont des matériaux composés d'un ou plusieurs éléments de la troisième colonne et d'un élément ou plusieurs éléments de la cinquième colonne de la classification périodique de Mendeleïev. Ils présentent généralement une haute mobilité électronique et une bande interdite directe, et sont utilisés dans des applications optoélectroniques (diodes lasers, cellules solaires, etc.) ainsi qu'électroniques.

Après le Silicium, ce sont les deuxièmes matériaux semi-conducteurs les plus utilisés dans l'industrie.

Tableau 1.1. Exemple des matériaux semiconducteurs III-V.

<b>Semiconducteur III-V</b>	Binaire	GaAs , GaP, GaSb, InAs ,InP, InSb
	Ternaire	$Al_xGa_{1-x}As, GaAs_yP_{1-y}$
	Quatenaire	$Al_xGa_{1-x}As_yP_{1-y}$

#### 1.4. La structure cristalline :

Les semi-conducteurs III-V sont composés à partir des éléments des colonnes III et V du tableau périodique de Mendeleïev. Ils sont obtenus, soit par tirage de monocristaux massifs, soit par croissance épitaxiale de couches minces et se cristallisent dans la structure Zinc Blende (ZB) et/ou Würtzite (WZ).

##### 1.4.1. La structure zinc-blende:

Un grand nombre de solides se cristallisent dans une structure périodique. La majorité des semi-conducteurs utilisés dans les applications électroniques ou optoélectroniques (Si, Ge, composés III-V comme le GaAs, etc...) sont basés sur une même structure cristallographique qui ressemble à celle du diamant (C), appelée Zinc blende ou sphalérite comme illustre la figure 1.2.

Les atomes du réseau se positionnent en deux sous réseaux de type faces centrées (CFC) décalés l'un par rapport l'autre d'un vecteur  $(a\sqrt{3}/4, a\sqrt{3}/4, a\sqrt{3}/4)$ ,  $a$  étant le paramètre de maille.

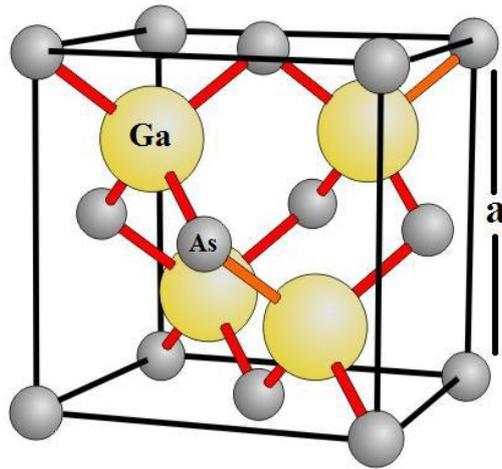


Figure 1. 2. Maille cristallographique du GaAs (zinc blende).

#### 1.4.2. La structure wurtzite:

La structure wurtzite est présentée sur la figure 1.3. Les paramètres utilisés pour décrire la structure sont le côté  $a$  de l'hexagone dans le plan (0001), et  $c$  correspondant à la hauteur de la maille selon l'axe [0001]. Si la structure blende est l'équivalente bi-atomique de la structure diamant, alors la structure wurtzite est l'équivalente bi-atomique du diamant hexagonal. Dans cette structure, le sous-réseau cristallin de chacun des deux éléments n'est pas CFC mais hexagonal compact. De nombreux matériaux cristallisant dans la structure blende ont aussi une forme polymorphique cristallisant dans la structure wurtzite. La structure wurtzite est obtenue depuis la structure blende en déplaçant certains plans atomiques (111).

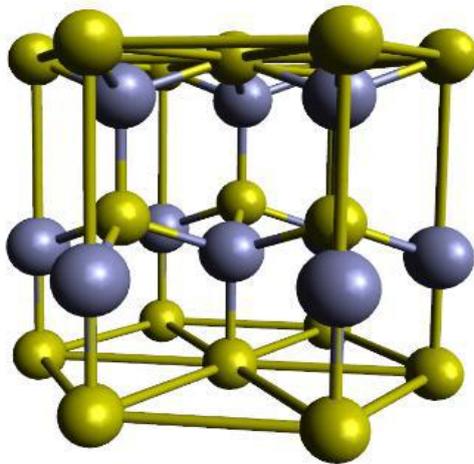


Figure 1.3. Représentation en 3D de la structure Wurtzite.

## 1.5. Le paramètre de maille :

Le paramètre de maille se définit comme étant la distance séparant deux mailles consécutives. La détermination des paramètres de maille est la première étape pour déterminer la structure d'un cristal. La diffraction des rayons X, de neutron ou d'électrons est la méthode la plus utilisée. Pour calculer le paramètre de maille d'un alliage il suffit d'appliquer directement la loi de Végard.

$$a_{A_x B_{(1-x)} C_y D_{(1-y)}} = x \cdot y \cdot a_{AC} + y \cdot (1-x) \cdot a_{BC} + (1-y) \cdot (1-x) \cdot a_{BD} + x \cdot (1-y) \cdot a_{AD}$$

## 1.6. L'épitaxie :

### 1.6.1. Définition :

L'épitaxie est une étape technologique consistant à faire croître du cristal sur du cristal, étymologiquement, "épi" signifie "sur" et "taxie", "arrangement".

La technique va donc consister à utiliser le substrat comme germe cristallin de croissance et à faire croître la couche par un apport d'éléments constituant la nouvelle couche.

### 1.6.2. Les différentes techniques d'épitaxie :

On distingue trois différentes techniques d'épitaxie :

- **L'épitaxie par jet moléculaire [2]:**

L'épitaxie par jet moléculaire consiste à envoyer sous ultravide des flux contrôlés d'atomes ou de molécules sur la surface d'un substrat convenablement chauffé.

L'utilisation d'un vide très poussé permet d'éviter tout choc ou contamination entre les espèces réactives et d'éventuels gaz résiduels. Les espèces réactives sont obtenues à partir de sources contenues dans des cellules de Knudsen et évaporées sous vide par chauffage. Ces sources peuvent être de nature et de dopage différents.

En choisissant les sources, on peut réaliser couche après couche des structures très complexes comme des diodes laser.

L'épitaxie par jet moléculaire permet une croissance à plus basse température mais, avec des vitesses de croissance faible de l'ordre de 0.1 à 1  $\mu\text{m/h}$ .

Industriellement, cette technique très coûteuse ne concerne donc que des dispositifs à forte valeur ajoutée, mais elle est concurrente de l'épitaxie en phase vapeur dans le cas des semiconducteurs III-V. La figure 1.4 représente un bâti d'épitaxie par jet moléculaire.

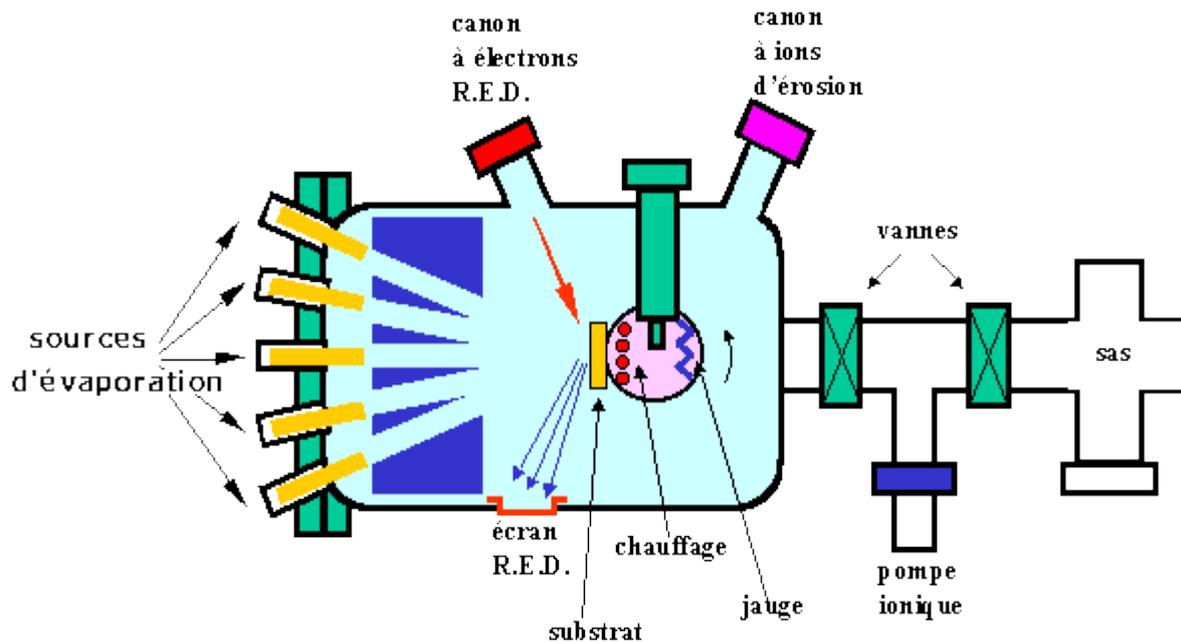


Figure 1.4. Un bâti d'épitaxie par jet moléculaire [3].

- **L'épitaxie en phase liquide:**

Cette technique consiste à faire croître le cristal par la mise en contact d'un substrat avec une source liquide. C'est le même principe que le tirage d'un lingot par la méthode Czochralski. Il faut bien contrôler les échanges thermiques pour éviter de liquéfier le cristal existant. Cette méthode présente l'avantage d'être très rapide mais elle est moins précise que les épitaxies en phase vapeur [3]. La figure 1.5 présente le dispositif de la méthode.

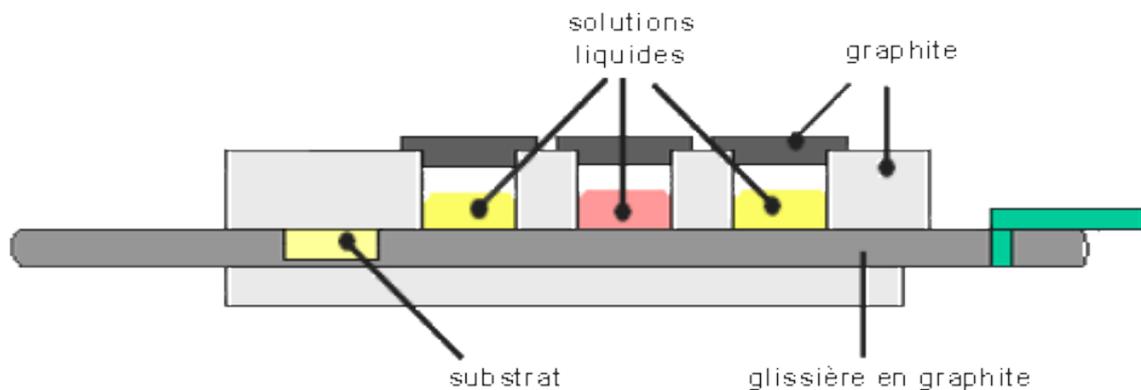


Figure 1.5. Dispositif d'épitaxie en phase liquide [3].

- **L'épitaxie en phase vapeur :**

L'épitaxie en phase vapeur comme le montre la figure 1.6 consiste à faire croître un cristal à partir de sources gazeuses décomposées au contact d'un substrat monocristallin chauffé. La multiplicité des sources gazeuses assure une grande diversité tant dans la nature du matériau épitaxié que dans ses possibilités de dopage.

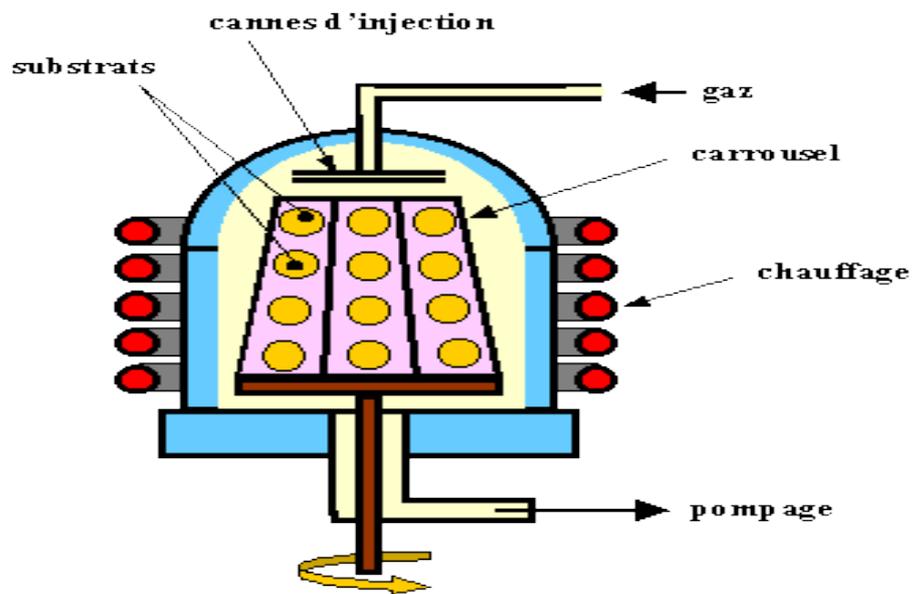


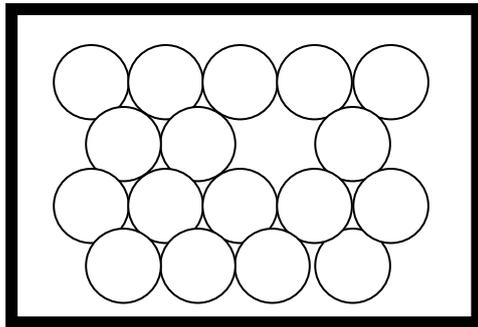
Figure .1.6. Banc d'épitaxie en phase vapeur [3].

### 1.7. Les défauts cristallins :

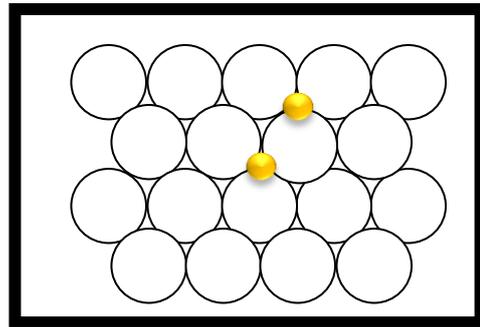
Un défaut cristallin est une interruption de la périodicité du cristal. La périodicité d'un cristal représente la répétition régulière des positions atomiques dans les trois directions de l'espace. Traditionnellement, les défauts sont répartis en quatre catégories suivant leurs dimensionnalités :

- les défauts ponctuels (0D),
- linéaires (1D),
- planaires (2D),
- volumiques (3D).

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



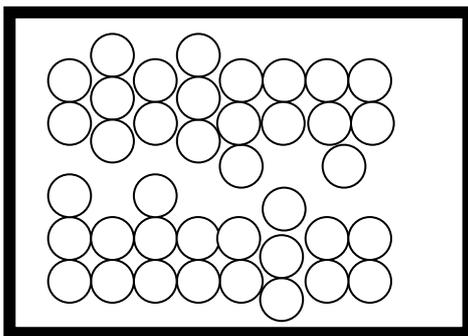
Lacune



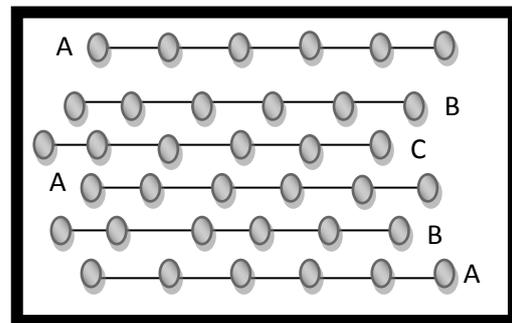
Atome interstitiel

Figure 1.7. Défauts ponctuels.

**- Défauts planaires** : surface libre (joint de grains) et défaut d'empilement (figure 1.8).



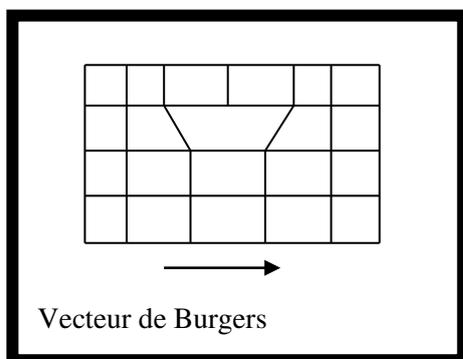
Joint de grains



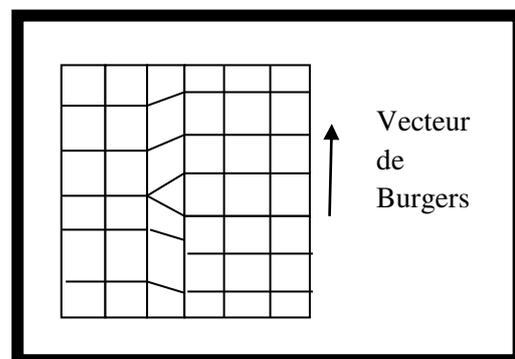
Défaut d'empilement

Figure 1.8. Défauts planaires.

**- Défauts linéaires**: Dislocation vis et coin.



Dislocation coin



Dislocation vis

Figure 1.9. Défauts linéaires.

## -Défauts volumiques :

Ils correspondent à une interruption (en trois dimensions) du réseau périodique du cristal.

### 1.8. La contrainte :

Lorsqu'on fait croître un semiconducteur sur un autre et que les deux matériaux, constituant le substrat et la couche active, ont la même structure cristalline et des paramètres de maille différents, la maille du matériau épitaxié se déforme de manière élastique dans les deux directions parallèle et perpendiculaire à la surface de croissance, et selon que le paramètre de la couche épitaxiée est plus petit ou plus grand que celui du substrat, la déformation est :

- Une elongation "couche en tension" : si le paramètre de la couche épitaxiée est plus petit que celui du substrat ( $a_e < a_s$ ), (voir figure 1.10 a).
- Un rétrécissement "couche en compression" : si le paramètre de la couche épitaxiée est plus grand que celui du substrat ( $a_e > a_s$ ), (voir figure 1.10 b).

Les deux déformations sont exprimées suivant les relations suivantes:

- Dans le plan de la couche:

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

- Dans la direction de croissance :

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

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

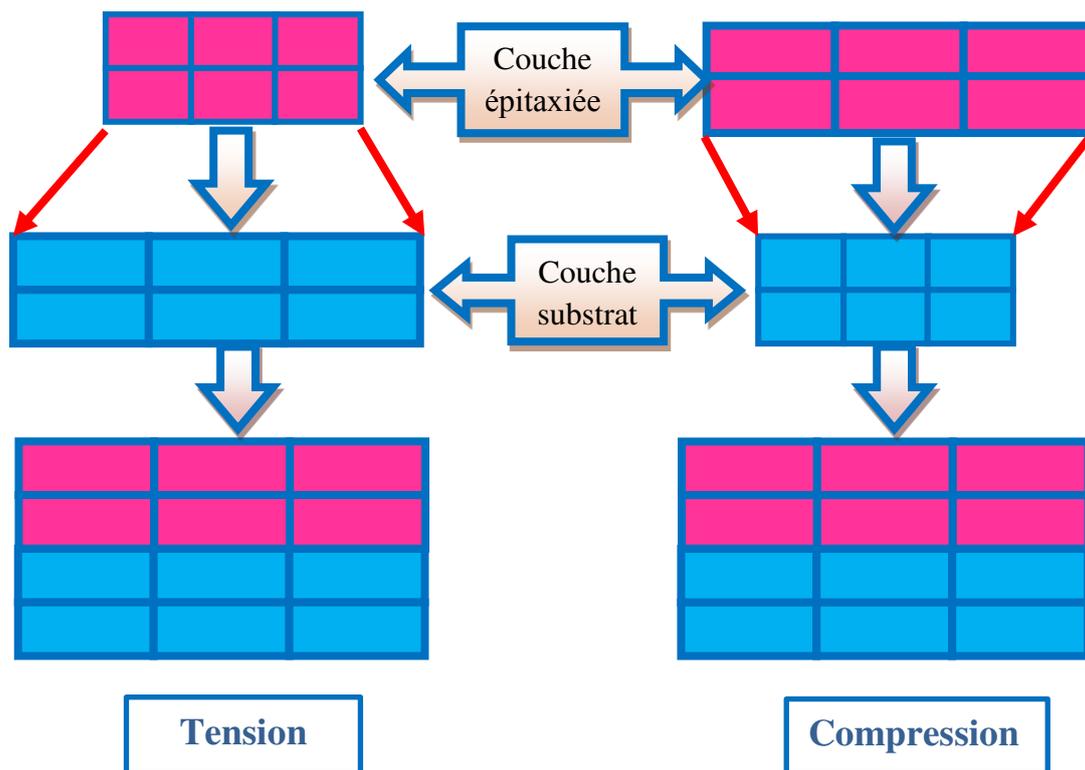


Figure 1.10 : Les deux types de déformation.

### 1.9. L'épaisseur critique :

L'épaisseur au-delà de laquelle la couche épitaxiée commence à relaxer, est appelée épaisseur critique.

Si l'épaisseur de la couche épitaxiée 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 [4].

### 1.10. Les hétérostructures:

Grâce au développement de la croissance, il est devenu possible d'élaborer des structures de types super-réseaux, cristaux photoniques et des puits quantiques.

Le principe d'une hétérostructure est constitué d'un semi-conducteur B pris en «sandwich» entre deux barrières d'un semi-conducteur A, tel que l'on peut voir sur la figure 1.11.

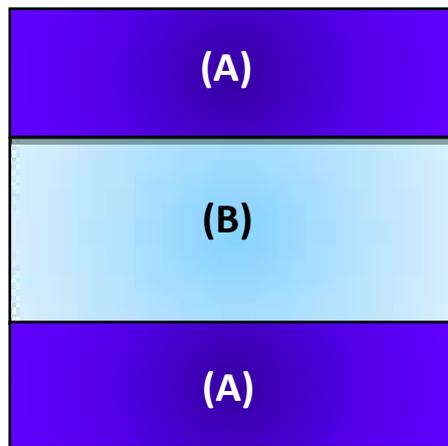


Figure 1. 11. Couche d'un matériau semi-conducteur B possédant un gap inférieur à celui du matériau semi-conducteur A.

Il existe deux types d'hétérostructures :

- **Hétérostructure de type 1 :**

Les électrons et les trous seront confinés dans le même matériau B (indiqués dans la figure 1.12). La probabilité de recombinaison sera donc élevée.

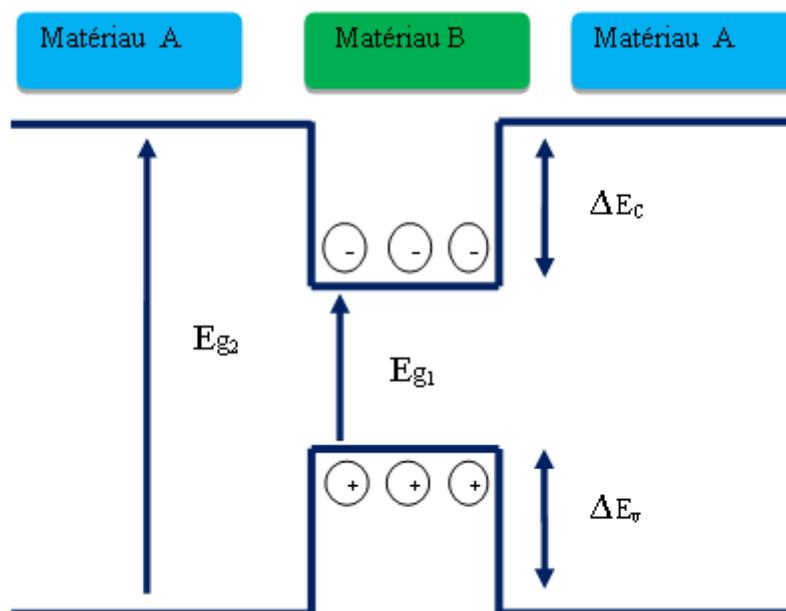


Figure 1.12. Hétérostructure de type 1.

- **Hétérostructure de type 2 :**

Les électrons et les trous sont confinés séparément (figure 1.13) et leur recombinaison sera moins probable.

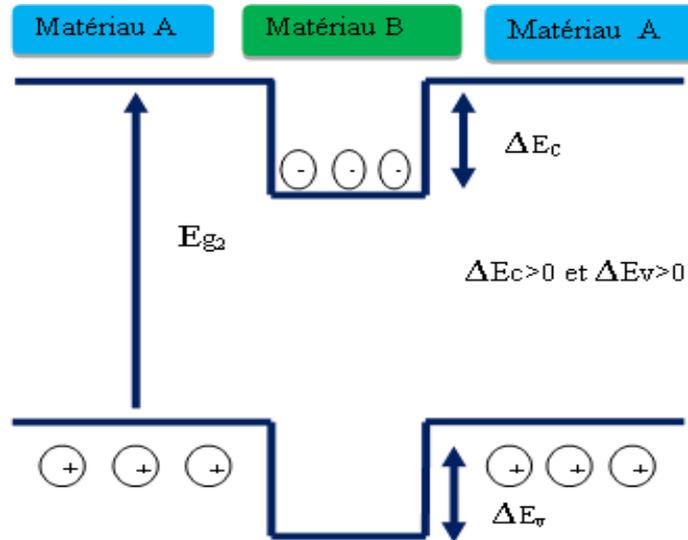


Figure 1.13. Hétérostructure de type 2.

### 1.11. Les puits quantiques :

Les puits quantiques sont des empilements de couches cristallines alternées. 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). Les matériaux (A) et (B) doivent avoir des énergies de bandes interdites différentes (figure 1.14).

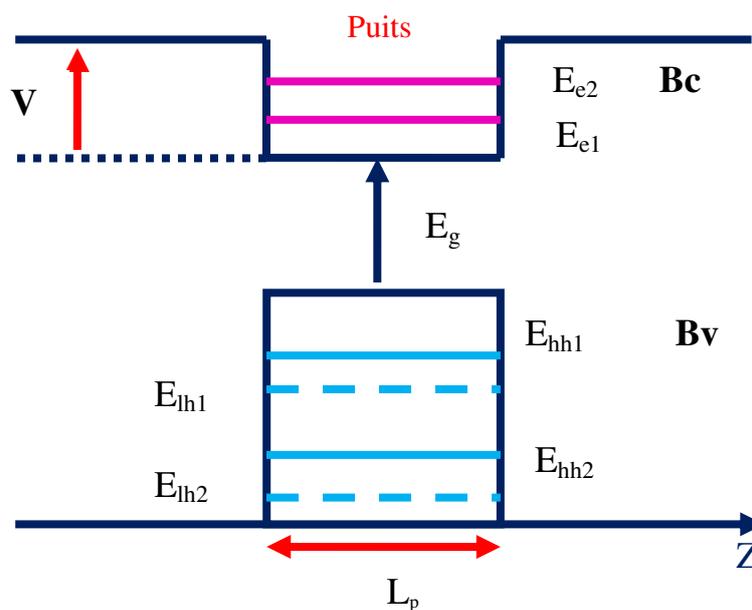


Figure 1.14. Illustration d'un puits quantique.

Où:

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

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

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

## 1.12. Décalage des bandes :

Un des paramètres importants pour l'analyse des propriétés optiques et électroniques des hétérostructures, est le décalage entre les bandes de conduction et de valence du puits et celle des barrières. Les décalages des bandes de valence et de conduction sont donnés par :

$$\Delta E_c = E_{c \text{ barrière}} - E_{c \text{ puits}} \quad (1.3)$$

$$\Delta E_v = E_{v \text{ puits}} - E_{v \text{ barrière}} \quad (1.4)$$

## 1.13. L'équation de Schrödinger dans un puits quantique :

En 1926 Schrödinger a montré que la fonction d'onde et l'énergie sont solution d'une équation aux dérivées partielles du second ordre, cette équation s'écrit [5]:

$$\frac{-\hbar^2}{2m_e^*} \Delta \Psi(z) + V(z)\Psi(z) = E\Psi(z) \quad (1.5)$$

Où:

$\Delta$ : Laplacien.

$m_e^*$ : la masse effective de l'électron.

$V$  : l'énergie potentielle.

$E$  : l'énergie totale de l'électron.

$\Psi$  : la fonction d'onde.

$\hbar = \frac{h}{2\pi}$  ou  $h$  est la constante de Planck

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

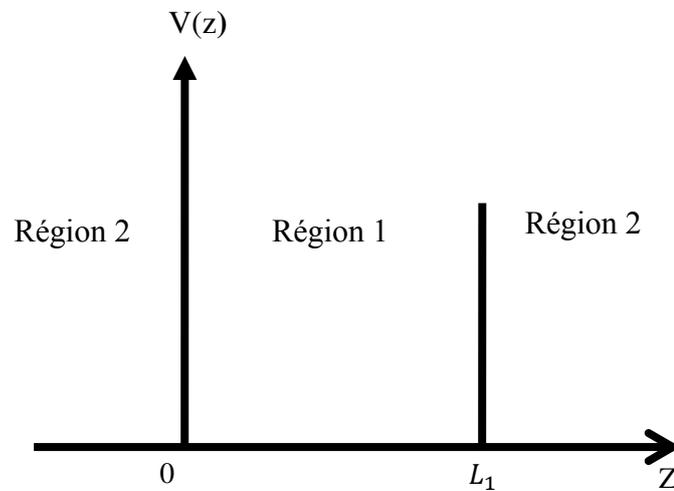


Figure 1.15. Puits de profondeur infinie

On peut supposer en première approximation que les électrons sont confinés dans l'espace  $0 < z < L_1$ , par des murs de potentiel de hauteur infinie.

Le potentiel s'écrit alors:

$$\begin{cases} V(z) = \infty & \text{pour } z < 0 \text{ et } z > L_1 \\ V(z) = 0 & \text{pour } 0 < z < L_1 \end{cases} \quad (1.6)$$

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

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

$$\frac{d^2\Psi(z)}{dz^2} = \frac{-2m_1^*E}{\hbar^2} \Psi(z) \quad (1.7)$$

$$\frac{d^2\Psi(z)}{dz^2} + \frac{2m_1^*E}{\hbar^2} \Psi(z) = 0 \quad (1.8)$$

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

L'équation (1.8) est une équation différentielle du deuxième ordre dont la solution est de la forme :

$$\Psi(z) = A \sin(K_z \cdot z) + B \cos(K_z \cdot z) \quad (1.9)$$

Où:

$$K_z = \sqrt{\frac{2m_1^* E}{\hbar^2}} \quad (1.10)$$

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

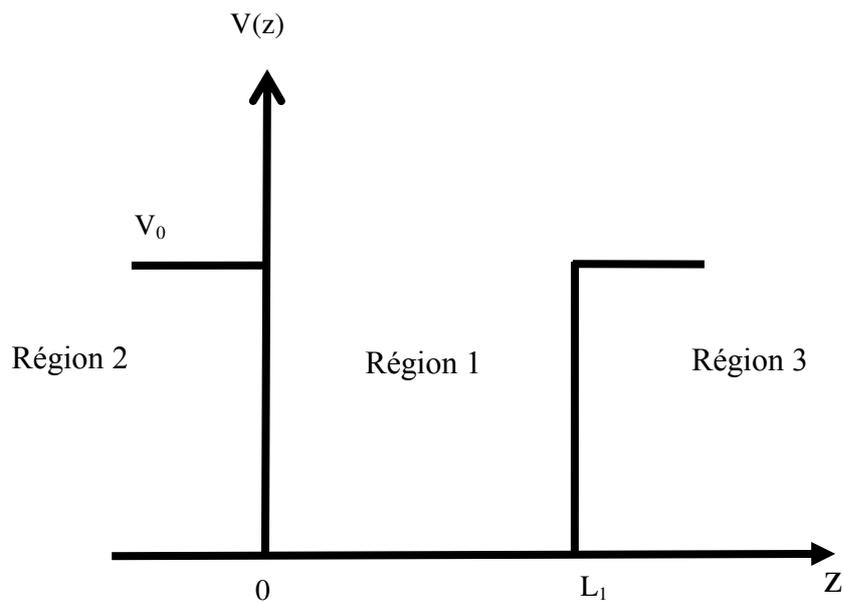


Figure 1.16. Puits de potentiel à profondeur finie.

On considère un modèle unidimensionnel dans la direction (oz) où un puits de potentiel a la forme représentée sur la figure 1.16.

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

$$\left\{ \begin{array}{l} K_1^2 = \frac{2m_1^* E}{\hbar^2} \\ K_2^2 = \frac{2m_2^* (V_0 - E)}{\hbar^2} \end{array} \right. \quad (1.11)$$

Où :

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

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

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

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

$$\begin{cases} \left(\frac{d^2 \Psi_1}{dz^2}\right) - K_2^2 \Psi_1 = 0 \\ \left(\frac{d^2 \Psi_2}{dz^2}\right) - K_1^2 \Psi_2 = 0 \\ \left(\frac{d^2 \Psi_3}{dz^2}\right) - K_2^2 \Psi_3 = 0 \end{cases} \quad (1.12)$$

Soit :

$$\begin{cases} \Psi_1 = A_1 e^{K_2 z} + B_1 e^{-K_2 z} \\ \Psi_2 = A_2 e^{jK_1 z} + B_2 e^{-jK_1 z} \\ \Psi_3 = A_3 e^{K_2(z-L_1)} + B_3 e^{-K_2(z-L_1)} \end{cases} \quad (1.13)$$

#### 1.14. Masse effective des électrons:

Un électron dans un état de bande est décrit, dans son comportement dynamique, par une masse effective  $m_e^*$ . C'est une propriété importante pour l'étude des phénomènes de transport dans les solides.

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

L'inverse de la masse effective  $\frac{1}{m_e^*}$  est donc proportionnel à la deuxième dérivée de l'énergie

$E(\vec{K})$  par rapport aux composantes du vecteur d'onde  $\vec{K}(K_x, K_y, K_z)$ , elle est de la forme [6] :

$$\frac{1}{m_e^*} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E(\vec{K})}{\partial K^2} \quad (1.14)$$

## 1.15. Taux de confinement :

Ce paramètre indique la quantité des porteurs (trous et électrons) confinés dans la bande de conduction et la bande de valence. Le taux de confinement sera déterminé dans chaque bande par les équations suivantes :

$$Q_c = \frac{\Delta E_c}{\Delta E_c + \Delta E_v} \quad (1.15)$$

$$Q_v = \frac{\Delta E_v}{\Delta E_c + \Delta E_v} \quad (1.16)$$

Avec  $\Delta E_c$  et  $\Delta E_v$  sont respectivement les décalages de bandes de la bande de conduction et la bande de valence.

## 1.16. Effet laser :

### 1.16.1. Définition du laser :

Le mot laser est l'acronyme anglais de « Light Amplification by Stimulated Emission of Radiation », soit en français, amplification de lumière par émission stimulée de radiation basée sur le phénomène de l'émission stimulée, qui a été postulée par Einstein dans les années 1910, la lumière laser est intense et cohérente.

### 1.16.2. Principe du laser :

Le laser consiste en un milieu amplificateur placé dans une cavité résonante qui fournit un rayonnement d'onde cohérente et monochromatique par émission stimulée. Le milieu actif est un milieu dans lequel les rayons lumineux sont produits, pour faire cela il faut stimuler le milieu actif à l'aide d'un système de pompage, qui va permettre de provoquer l'émission des rayons lumineux.

L'excitation du milieu permet d'obtenir l'inversion de population, occupation anormale de niveaux d'énergie élevés, qui favorise l'émission stimulée par rapport à l'émission spontanée.

Un système laser peut être schématisé selon la figure 1.17.

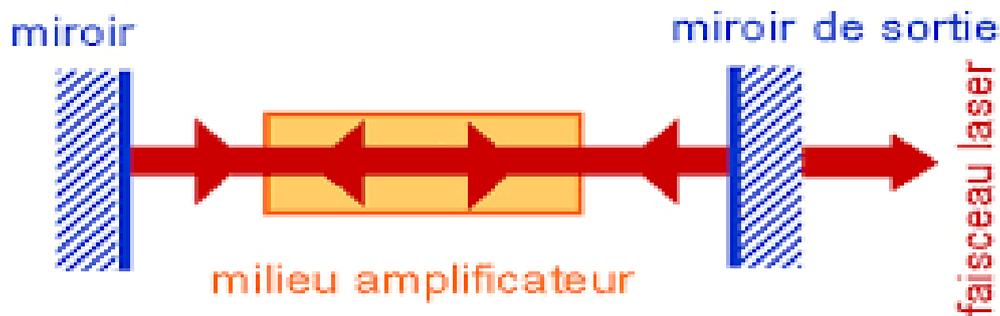


Figure 1.17. Schéma d'un système laser.

### 1.16.3. L'absorption:

Un atome stable absorbe un photon (particule de lumière) et atteint un niveau d'énergie supérieure, il sera excité.

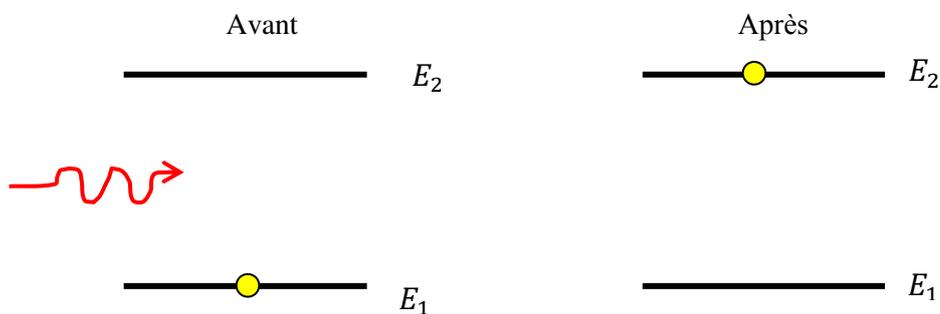


Figure 1.18. Illustration du processus d'absorption.

### 1.16.4. Emission spontanée :

C'est l'inverse de l'absorption, un atome excité retombe spontanément sur un niveau d'énergie inférieure en émettant de la lumière.

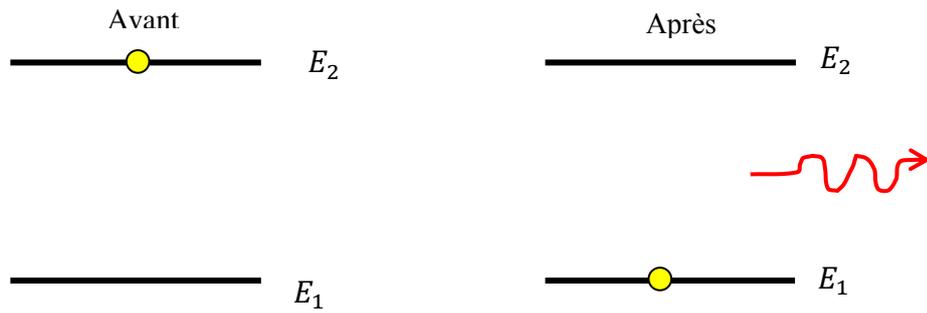


Figure 1.19. Illustration du processus d'émission spontanée.

### 1.16.5. Emission stimulée :

Dans ce cas, la présence de lumière lors de la désexcitation d'un atome provoque l'émission d'autres photons qui ont alors les mêmes caractéristiques (longueur d'onde et direction) que celui qui était déjà présent au départ.

Pour que l'émission stimulée puisse avoir lieu, il faut qu'il y ait plus d'atomes excités que d'atomes dans le niveau de base. On parle alors d'une inversion de population. Cette condition est obtenue le plus souvent par l'existence d'un niveau piège où les électrons excités peuvent s'accumuler.

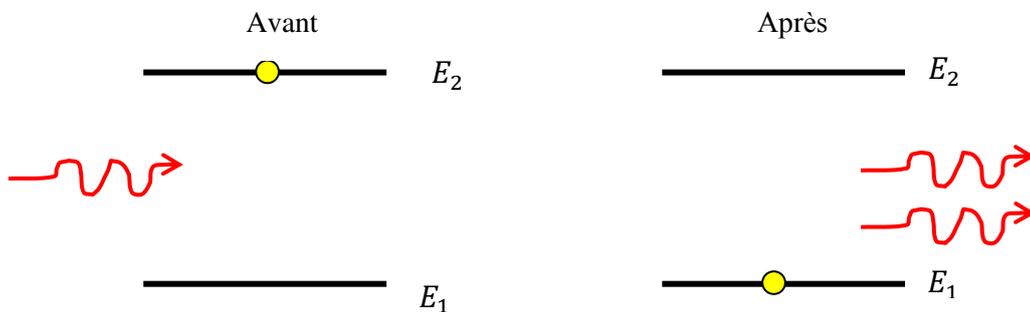


Figure 1.20. Illustration du processus d'émission stimulée.

## 1.17. Le gain optique :

Le gain optique est l'exigence la plus importante pour la réalisation d'un laser à semiconducteur car il décrit l'amplificateur optique dans le matériau semiconducteur.

Ce gain optique est dû à une émission stimulée associée à une émission lumineuse créée par la recombinaison d'électrons et de trous.

Il est défini par le taux de croissance de la densité des photons pendant leur propagation suivant une direction dans le cristal.

Le gain optique est proportionnel à la probabilité pour qu'un photon déclenche une transition d'un niveau (j) à un niveau d'énergie inférieure (i).

Le gain dans le puits quantique est donné par [7]:

$$g(w) = \frac{w}{\pi \hbar^2 L_p} \sqrt{\frac{\mu}{\varepsilon}} \frac{m_c^* m_v^*}{m_c^* + m_v^*} \times \sum_1^M \int_{E_{tr}}^{\infty} |R_{ch}^2| (f_c - f_v) L(E_{ch}) dE_{ch} \quad (1.17)$$

Où  $f_c$  et  $f_v$  sont les fonctions de distribution de Fermi Dirac, pour les bandes de conduction et de valence et s'écrivent [7] :

$$f_c = \left[ 1 + \exp\left\{\frac{E_{c1} - E_{fc}}{K_b T}\right\} \right]^{-1} \quad (1.18)$$

$$f_v = \left[ 1 + \exp\left\{\frac{E_{v1} - E_{fv}}{K_b T}\right\} \right]^{-1} \quad (1.19)$$

Pour les semiconducteurs III-V, et pour les premiers états quantiques, l'élément de la matrice optique pour les ondes de type TE, est donnée par :

$$R_{ch} \approx \frac{3}{4} \left( 1 + \frac{E_{ch}}{E_{cn}} \right) (R_{ch}^2)_{conv} \quad E > E_{ch} \quad (1.20)$$

$$R_{ch} \approx \frac{3}{2} (R_{ch}^2)_{conv} \quad E \leq E_{ch} \quad (1.21)$$

$$(R_{ch}^2)_{conv} = \frac{e^2 \hbar^2}{2E_{ch}} \frac{E_g(E_g + \Delta_{so})}{E_g + \frac{2}{3}\Delta_{so}} \frac{1}{m_e^*} \quad (1.22)$$

$(R_{ch}^2)$  étant la matrice optique des matériaux conventionnels (massifs).

Où  $e$  est la charge de l'électron,  $\Delta_{so}$  est l'énergie de spin orbite,  $L(E_{ch})$  est le Lorentzien de largeur caractéristique  $\frac{\hbar}{\tau_{in}}$ .

$$L(E_{ch}) = \frac{1}{\pi} \frac{\hbar/\tau_{in}}{(E_{ch} - \hbar\omega)^2 + (\hbar/\tau_{in})^2} \quad (1.23)$$

## 1.18. Conclusion :

Dans ce chapitre, nous avons présenté les principales notions relatives aux matériaux semiconducteurs et en particulier les semiconducteurs III-V.

Nous avons d'abord présenté quelques notions de leur cristallographie et leur structure de bande d'énergie, nous avons présenté par la suite les différents types des défauts cristallins, la contrainte ainsi que les propriétés des hétérostructures. Après, nous avons présenté la méthode de résolution de l'équation de Schrödinger dans un puits quantique.

Dans le chapitre qui suit nous allons simuler la structure GaNAsP/GaP afin de pouvoir déterminer les propriétés optoélectroniques de cette structure, ce qui nous donnera la possibilité de voir les potentialités de cette dernière.

# Chapitre 2

## Chapitre 2 : Résultats et discussions

### 2.1. Introduction :

Ce chapitre porte sur l'étude des propriétés optoélectroniques de la structure GaNAsP/GaP. Nous allons simuler tout d'abord l'influence de l'incorporation de l'azote ainsi que l'arsenic sur les caractéristiques de la structure  $GaN_xAs_yP_{(1-x-y)}/GaP$  tels que: le paramètre de maille, la contrainte, l'énergie de la bande interdite, etc. Ensuite, nous allons voir les propriétés du gain optique de cette structure. Enfin, on termine par une conclusion.

### 2.2. Paramètre de maille :

Le paramètre de maille est un paramètre très important à étudier. Lors de la réalisation des alliages semiconducteurs avec différents matériaux, le paramètre de maille de ces alliages peut être considéré comme une évolution suivant la loi de Végard qui est une loi empirique [8].

- La loi de Végard pour les matériaux ternaires ( $A_xB_{1-x}C$ ) :

$$a_{A_xB_{1-x}C} = x \cdot a_{AC} + (1 - x) \cdot a_{AB} \quad (2.1)$$

- La loi de Végard pour les matériaux quaternaires (3+1)  $AB_xC_yD_{(1-x-y)}$  :

$$a_{AB_xC_yD_{(1-x-y)}} = x \cdot a_{AB} + y \cdot a_{AC} + (1 - x - y) \cdot a_{AD} \quad (2.2)$$

- La loi de Végard pour les matériaux quaternaires (2+2)  $A_xB_{(1-x)}C_yD_{(1-y)}$  :

$$a_{A_xB_{(1-x)}C_yD_{(1-y)}} = x \cdot y \cdot a_{AC} + y \cdot (1 - x) \cdot a_{BC} + (1 - y) \cdot (1 - x) \cdot a_{BD} + x \cdot (1 - y) \cdot a_{AD} \quad (2.3)$$

Les différents paramètres de maille des différents matériaux binaires constituant l'alliage de notre structure GaNAsP/GaAs, sont indiqués dans le tableau 2.1:

Tableau 2.1. Paramètres de maille des matériaux binaires à T=300K [8].

Matériaux binaires	GaP	GaAs	GaN
Paramètre de maille a (Å)	5.45	5.63	4.5

Pour notre structure  $GaN_xAs_yP_{(1-x-y)}/GaP$ , nous avons utilisé la relation (2.2) pour le calcul du paramètre de maille, qui sera comme suit :

$$a_{GaN_xAs_yP_{(1-x-y)}} = x \cdot a_{GaN} + y \cdot a_{GaAs} + (1 - x - y) \cdot a_{GaP} \quad (2.4)$$

La figure (2.1) représente l'évolution du paramètre de maille en fonction de la concentration d'azote et d'arsenic de la structure GaNAsP/GaP.

On remarque que l'azote a pour effet de diminuer le paramètre de maille, à titre d'exemple : pour une valeur d'azote de N= 1%, la valeur du paramètre de maille sera égale à 5.44 Å, alors que pour la valeur de N= 5%, la valeur du paramètre de maille est  $a=5,40$  Å. L'ajout de l'arsenic a pour effet d'augmenter le paramètre de maille, pour une concentration d'arsenic égal à As=20%, la valeur de  $a$  est  $a=5.4$  Å et si la concentration d'arsenic est égal à As=30%, la valeur du paramètre de maille sera égale à  $a=5.5$  Å.

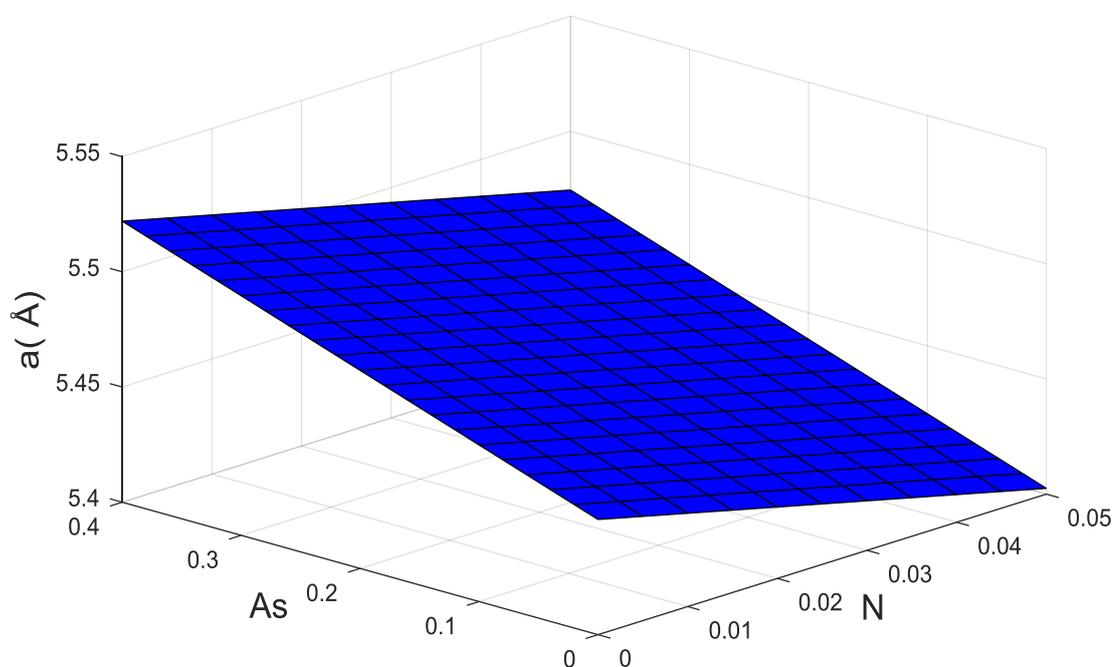


Figure 2.1. Variation du paramètre de maille de  $GaN_xAs_yP_{(1-x-y)}$  en fonction de la concentration de l'azote et de l'arsenic.

### 2.3. La contrainte :

À partir de l'équation de la loi de Vegard (2.4) et les équations (1.1) et (1.2), nous avons calculé le désaccord de maille de notre structure  $GaN_xAs_yP_{(1-x-y)}/GaP$  en fonction de la variation de concentration de l'azote et d'arsenic.

Les paramètres  $C_{11}(x,y)$  et  $C_{12}(x,y)$  indiqués dans le tableau 2.2 sont les coefficients d'élasticité des matériaux binaires.

Tableau 2.2. Les coefficients d'élasticité pour les matériaux binaires à T=300K [8].

Les matériaux binaires	GaP	GaAs	GaN
$C_{11}$ ( $10^{11} \text{dyn/cm}^2$ )	14.05	11.88	29.1
$C_{12}$ ( $10^{11} \text{dyn/cm}^2$ )	6.20	5.38	14.8

La figure 2.2 montre la variation de la contrainte (tension) en fonction de la concentration d'azote et d'arsenic, on remarque que la déformation biaxiale  $\epsilon_{xx}$  augmente avec l'augmentation d'azote alors qu'elle diminue avec l'augmentation de la concentration d'arsenic et la déformation uniaxiale  $\epsilon_{zz}$  diminue avec l'augmentation d'azote et augmente avec l'augmentation d'arsenic.

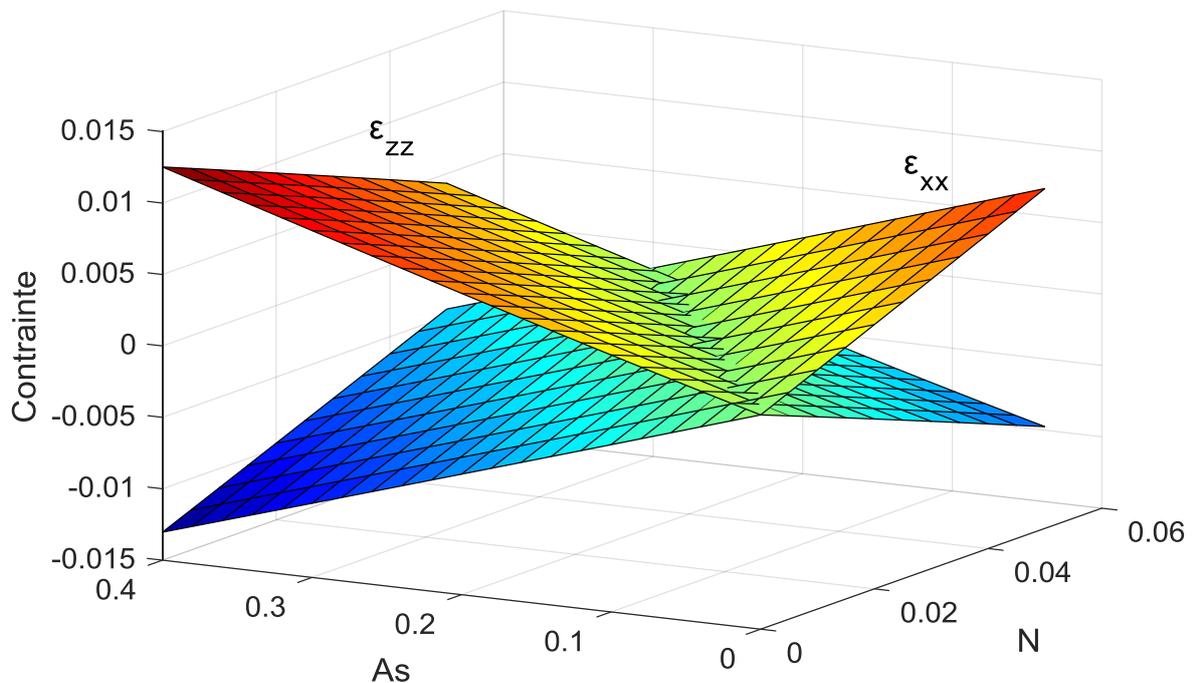


Figure 2.2. Variation de la contrainte de la structure  $GaN_xAs_yP_{(1-x-y)}/GaP$ .

## 2.4. L'effet de l'azote sur la structure de bande:

La modélisation de la structure de bande de l'alliage  $GaN_xAs_yP_{(1-x-y)}$  est différente à celle des semiconducteurs III-V standard en raison de la présence des atomes d'azote (N), le caractère très électronégatif de l'atome N introduit un niveau accepteur, c'est-à-dire un piège (puits potentiel) local pour les électrons, ce niveau est appelé niveau isoélectronique car la valence de l'atome d'azote est identique à celle de l'atome de phosphore dans le GaP.

L'ajout d'une toute petite quantité d'azote dans des alliages de composés III-V provoque la génération de sous-bandes non paraboliques  $E_{c-}$  et  $E_{c+}$  dans la bande de conduction [9].

## 2.5. Le modèle anti-croisement (BAC) :

Le modèle BAC est un outil prédictif pour décrire la structure de bandes, il explique les dépendances de composition du semiconducteur III-N-V et l'éclatement de la bande de conduction.

Afin de traiter le problème des alliages III-N-V, on suppose que les atomes d'azote se substituent à l'élément V d'une manière aléatoire dans le réseau cristallin et seront couplés par la suite avec les états étendus.

C'est ainsi que le modèle d'anticroisement de bande (BAC) explique le couplage entre l'état de l'azote d'énergie  $E_N$  et les états étendus de la bande de conduction de GaAsP d'énergie  $E_M(k)$  est sera traduit par l'équation aux valeurs propres suivante :

$$\begin{vmatrix} E_M(k) - E & V_{NM} \\ V_{NM} & E_N - E \end{vmatrix} = 0 \quad (2.5)$$

La résolution de l'équation aux valeurs propres fournit les solutions suivantes [10] :

$$E_{\pm} = \frac{1}{2} \left( E_N + E_M(k) \pm \sqrt{(E_N - E_M(k))^2 + 4V_{MN}^2} \right) \quad (2.6)$$

Il est évident qu'à partir de l'équation (2.6), la réduction de l'énergie de bande interdite par l'incorporation de l'azote dépend du paramètre de couplage mais aussi de la différence d'énergie  $E_N - E_M$ .

Par conséquent, une bonne précision du placement du niveau d'azote par rapport à la bande de conduction est essentielle pour évaluer l'effet de l'azote sur la réduction de bande interdite du matériau.

## 2.6. L'énergie de bande interdite et éclatement de la bande de conduction :

L'énergie de la bande interdite sera donc calculée à partir de l'équation suivante :

$$E_{g\pm} = \frac{1}{2} \left( E_N + E_C \pm \sqrt{(E_N - E_C)^2 + 4V_{MN}^2} \right) \quad (2.7)$$

Où :

$E_N$  : L'énergie du niveau de l'atome d'azote isolé et égale à 1.65 eV.

$V_{MN}$  : Coefficient de couplage entre le niveau d'azote et les sous bandes lointaines de la bande de conduction [10].

$$V_{MN} = 2.7\sqrt{x} \quad (2.8)$$

$x$  : est la concentration d'azote.

On constate que pour de très faibles pourcentage d'azote, la bande interdite s'éclate en deux bandes et que plus la concentration de l'azote augmente plus l'éclatement devient important comme on peut le voir sur la figure 2.3.

La figure 2.3 montre la variation des bandes  $E_{g-}$  et  $E_{g+}$  en fonction des concentrations des atomes d'azote et de l'arsenic. On remarque que l'énergie des deux bandes dépend de la concentration ( $x$ ) d'azote, plus la concentration d'azote augmente plus ces deux bandes se repoussent et donc plus le minimum de la bande de conduction de l'alliage formé diminue. Cette dernière sera considérée la bande interdite du matériau GaNAsP.

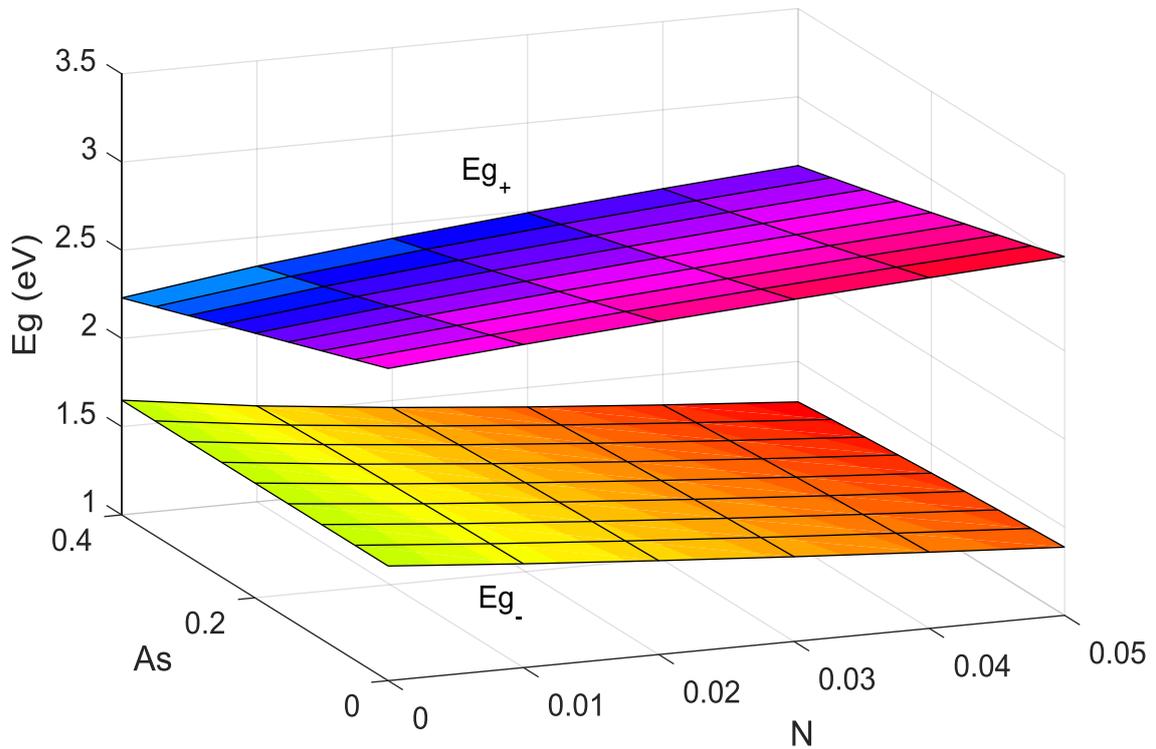


Figure 2.3. Variation des bandes  $E_{g-}$  et  $E_{g+}$  et fonction d'azote et d'arsenic.

La figure 2.4 nous montre la variation de l'énergie de la bande interdite en fonction de la concentration d'azote pour différentes valeurs d'arsenic ce qui montre clairement que l'azote a pour effet de diminuer la valeur de l'énergie de bande interdite.

Sur la figure 2.5, nous avons présenté la variation de l'énergie de bande interdite en fonction de la variation de la concentration des atomes d'arsenic pour différentes valeurs d'azote. On remarque que l'énergie de la bande interdite diminue en augmentant la concentration d'arsenic.

On constate que les deux atomes jouent un rôle très important dans la diminution de la valeur de l'énergie de la bande interdite dans la structure GaNAsP/GaP.

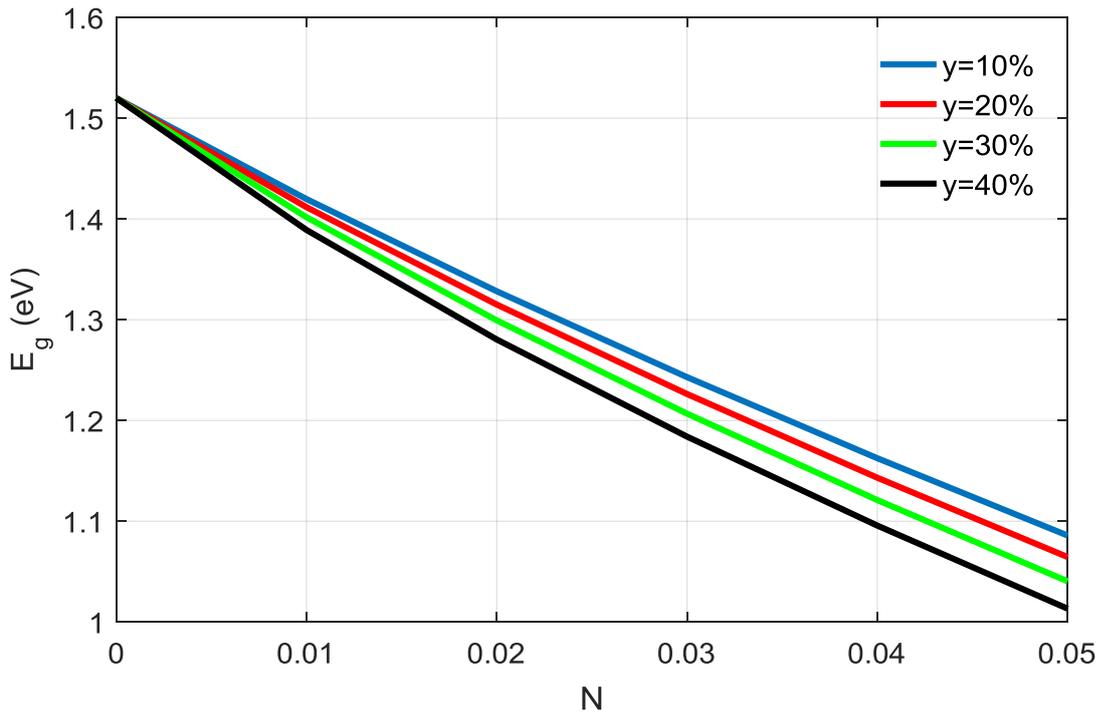


Figure 2.4. Variation de l'énergie de bande interdite en fonction de la concentration des atomes d'azote pour différentes valeurs d'arsenic.

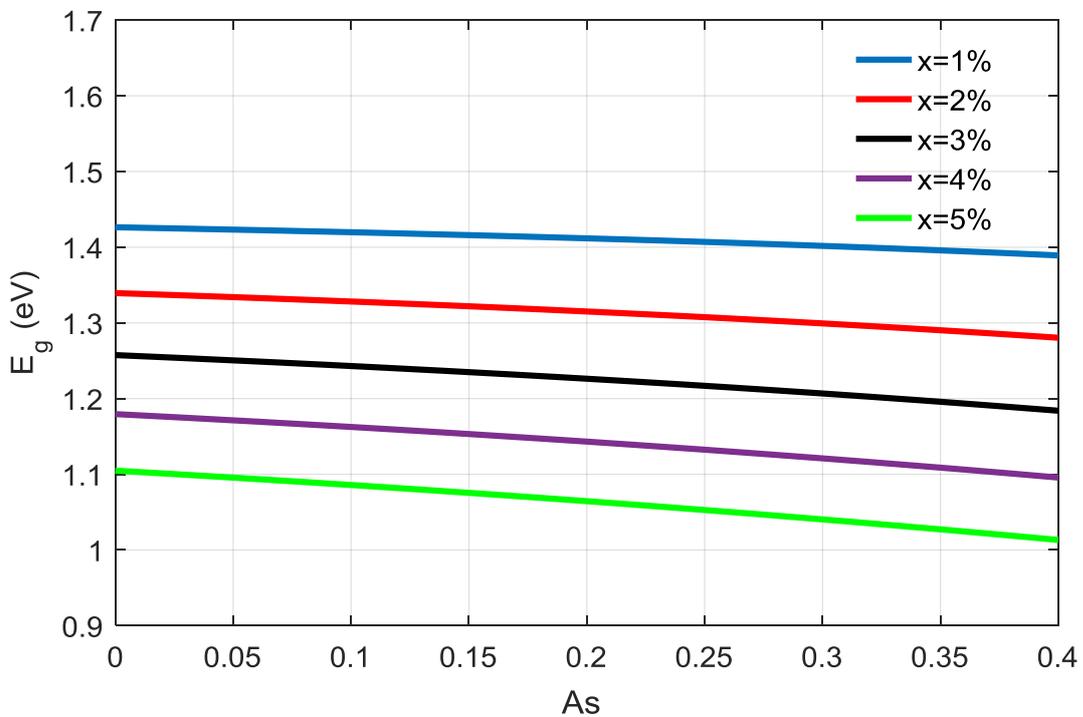


Figure 2.5. Variation de l'énergie de bande interdite en fonction de la concentration des atomes d'arsenic pour différentes valeurs d'azote.

## 2.7. La masse effective :

La masse effective d'électron changera également en fonction de la concentration d'azote, et il est avantageux d'utiliser le modèle BAC car il fournit des expressions analytiques simples en ce qui concerne la bande de conduction. La masse effective sera calculée à partir de l'équation suivante [7]:

$$m_e^*(\text{GaN}_x\text{As}_y\text{P}_{1-x-y}) = 2 \cdot \frac{m_e^*(\text{GaAs}_y\text{P}_{1-y})}{\left[ 1 - \frac{E_c - E_N}{\sqrt{(E_c - E_N)^2 + 4 \cdot V_{MN} \cdot x}} \right]} \quad (2.10)$$

Et pour la détermination de la masse effective  $m_e^*(\text{GaAsP})$ , nous utilisons l'interpolation linéaire selon la loi de Végard:

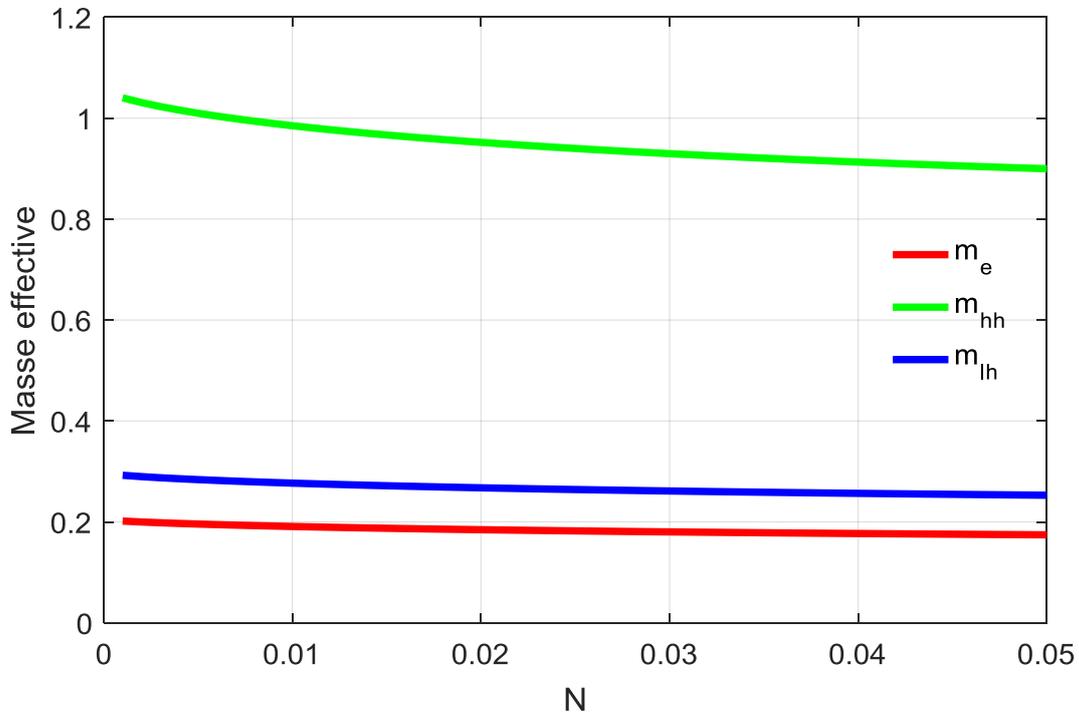
$$m_e^*(\text{GaAs}_y\text{P}_{1-y}) = (1 - y) \cdot m_e^*(\text{GaP}) + y \cdot m_e^*(\text{GaAs}) \quad (2.11)$$

Le tableau 2.3 résume les différentes valeurs des masses effectives des matériaux binaires constituant l'alliage de notre structure.

Tableau 2.3. Valeurs des masses effectives des matériaux binaires [8].

Les matériaux binaires	GaN	GaAs	GaP
$m_e^*/m_0$	0.21	0.067	0.114
$m_{hh}^*/m_0$	1.27	0.55	0.52
$m_{lh}^*/m_0$	0.21	0.083	0.17

La figure 2.6 montre la variation des masses effectives des porteurs en fonction de la concentration des atomes de l'azote pour une concentration de l'arsenic  $y=25\%$ , On remarque que la masse effective des porteurs diminue avec l'augmentation d'azote.



2.6. Variation de la masse effective des électrons, trous lourds et trous légers en fonction de la concentration d'azote ( $y=25\%$ ).

## 2.8. L'énergie spin-orbite :

L'énergie spin-orbite du GaNAsP varie linéairement en fonction de la composition d'azote et de l'arsenic suivant la relation:

$$\Delta_0 = x \cdot \Delta_0(\text{GaN}) + y \cdot \Delta_0(\text{GaAs}) + (1 - x - y) \cdot \Delta_0(\text{GaP}) \quad (2.12)$$

Le tableau 2.4 montre les paramètres d'énergie spin-orbite des matériaux binaires constituant l'alliage de notre structure.

Tableau 2.4. Les paramètres d'énergie spin-orbite des matériaux binaires [8].

Matériaux binaires	GaN	GaAs	GaP
$\Delta_0$ (eV)	0.017	0.341	0.08

La figure 2.7 montre la variation de l'énergie spin-orbite en fonction des concentrations d'azote et d'arsenic. On peut remarquer que le décalage spin-orbite augmente avec l'augmentation d'azote et diminue avec l'ajout de l'arsenic.

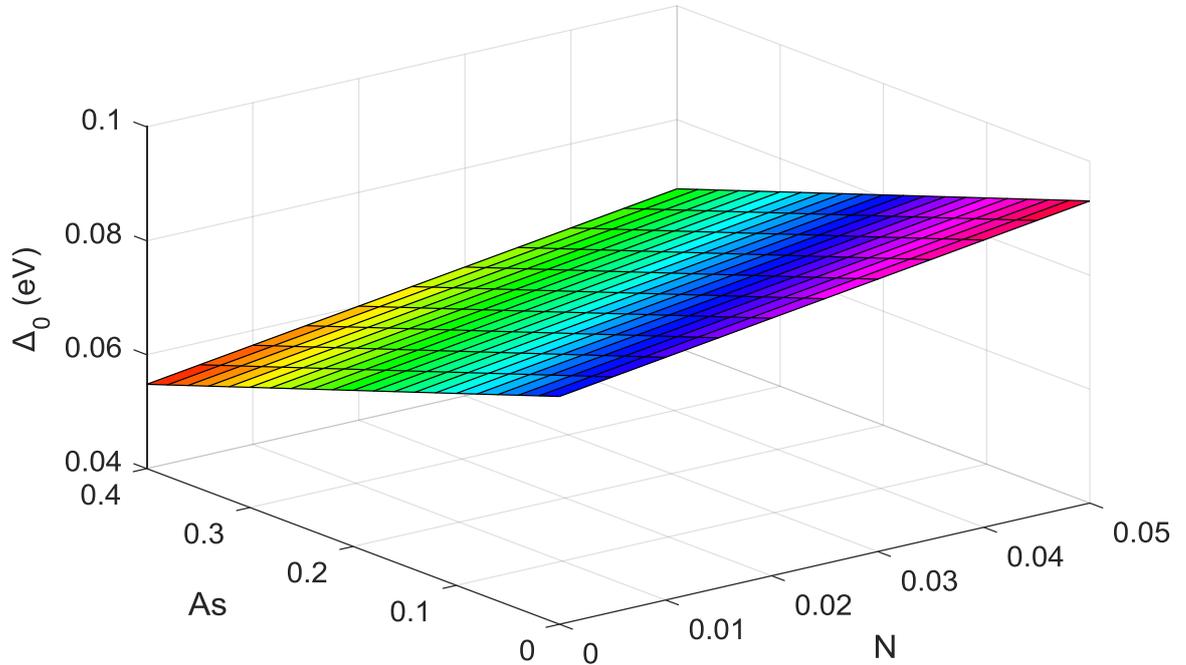


Figure 2.7. Variation du décalage spin-orbite en fonction de l'azote et d'arsenic.

## 2.9. Décalage des bandes :

Ce sont les décalages  $\Delta E_c$  et  $\Delta E_v$  entre les bandes de conduction et de valence, des deux matériaux constituant la barrière et le puits, comme illustré sur le schéma suivant:

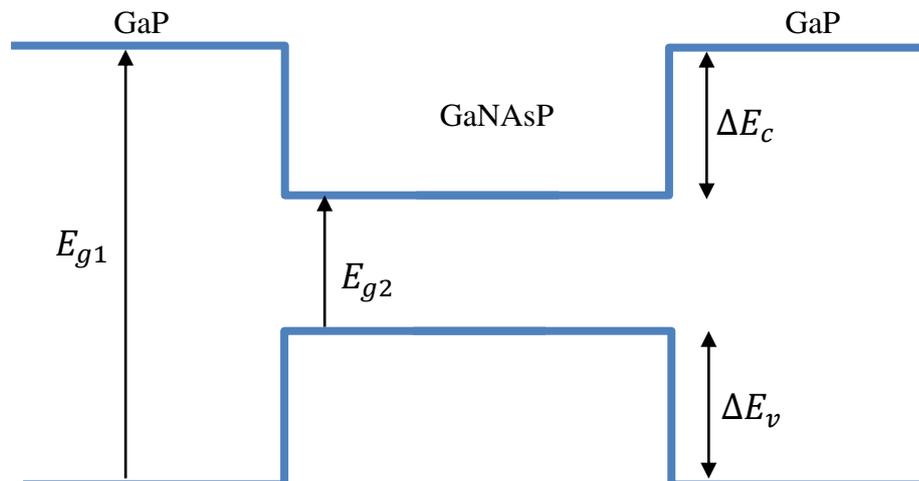


Figure 2.8. Schématisation des décalages des bandes.

Ces décalages de bandes permettront d'avoir deux autres paramètres qui sont eux aussi importants et qui sont les taux de confinement  $Q_c$  et  $Q_v$ , des porteurs donnés par les équations:

$$Q_c = \frac{\Delta E_c}{\Delta E_c + \Delta E_v^{hh}} \quad (2.13)$$

$$Q_v = \frac{\Delta E_v^{hh}}{\Delta E_c + \Delta E_v^{hh}} \quad (2.14)$$

Sur la figure 2.9, nous avons simulé la variation des paramètres  $Q_c$  et  $Q_v$  en fonction de la composition d'arsenic et d'azote, Quand on ajoute de l'azote et de l'arsenic ça va diminuer le  $Q_c$  et cela va avoir l'effet contraire sur le paramètre  $Q_v$ .

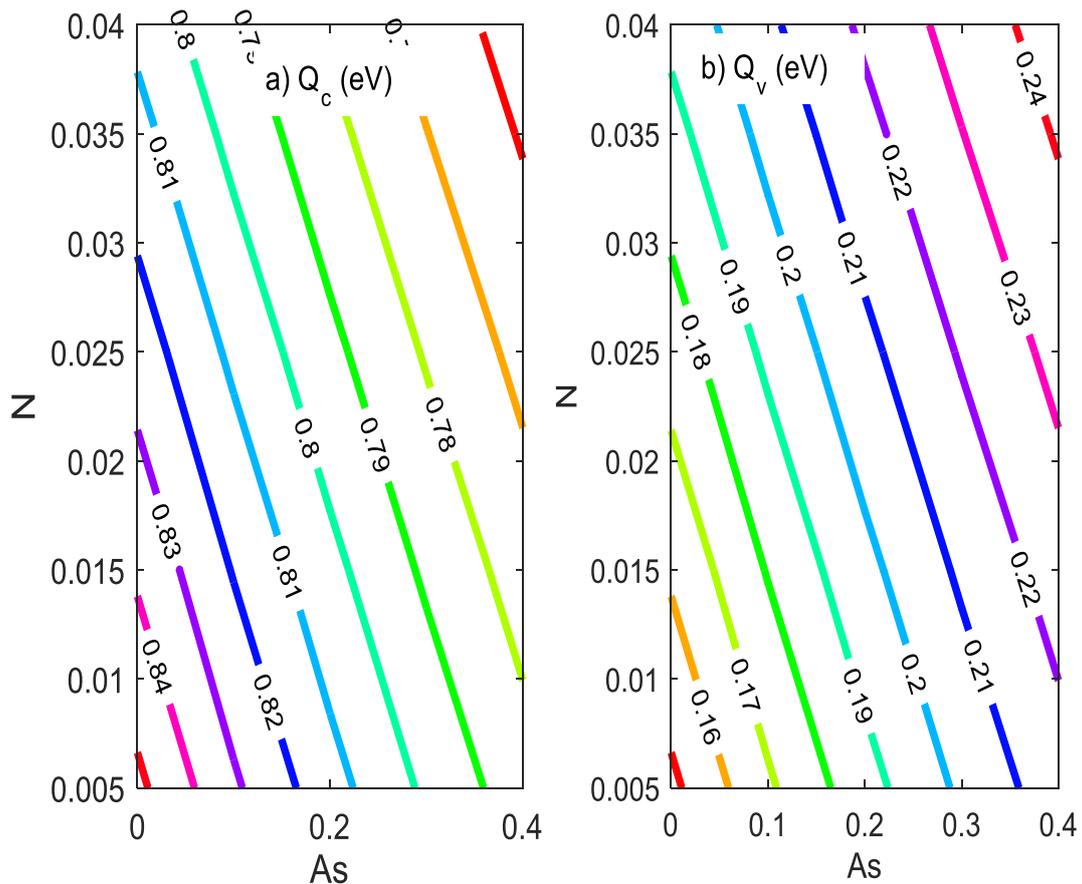


Figure 2.9. Variation du taux de confinement  $Q_c$  et  $Q_v$  en fonction de l'azote et de l'arsenic.

## 2.10. La variation des niveaux des électrons :

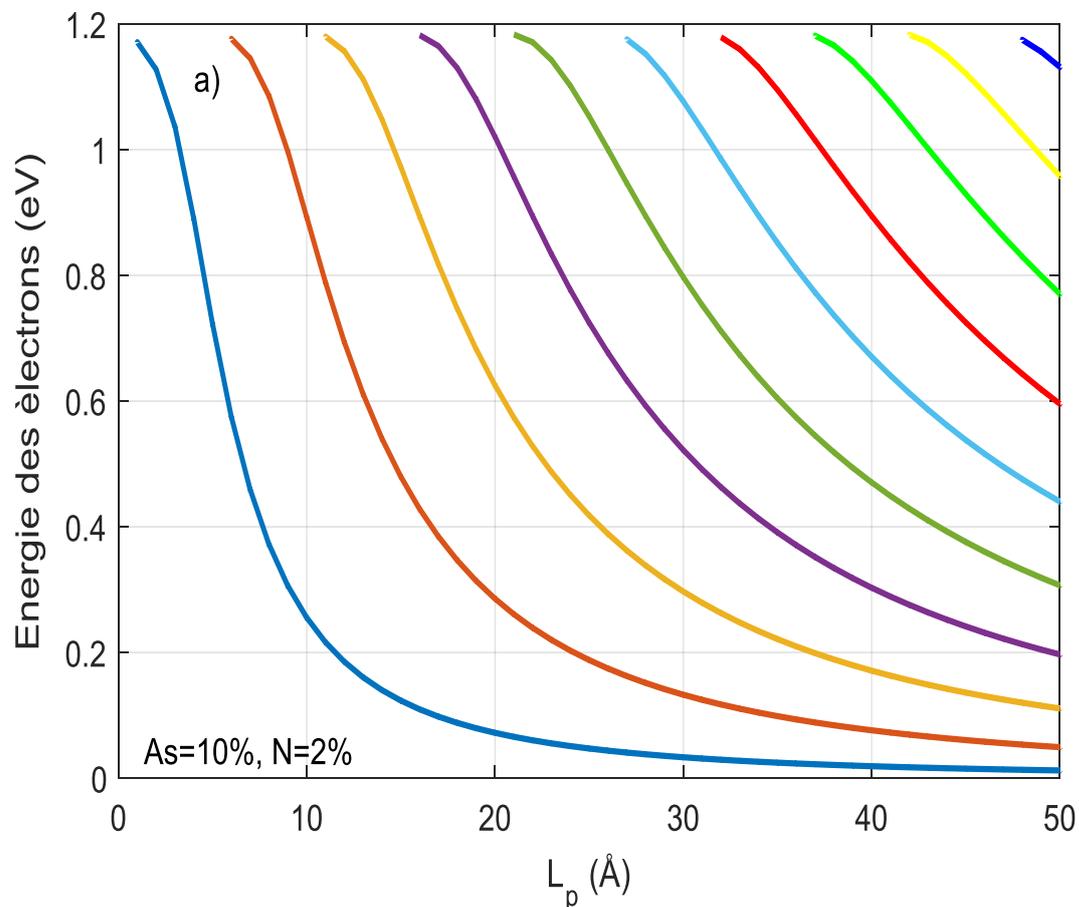
La figure 2.10 (a, b, c) représente la variation de l'énergie de confinement des électrons en fonction de la largeur du puits.

On remarque que l'énergie des électrons ainsi que l'espacement entre les niveaux diminuent avec l'augmentation de la largeur du puits.

Pour une largeur de puits de  $50\text{\AA}$ , par exemple et:

- Pour  $N=2\%$  et  $As=10\%$ , on a l'apparition de 10 niveaux d'électron.
- Pour  $N=2\%$  et  $As=20\%$ , on a l'apparition de 8 niveaux d'électron.
- Pour  $N=0.5\%$  et  $As=20\%$ , on a l'apparition de 13 niveaux d'électron.

On constate que le nombre des niveaux diminue avec l'augmentation de l'arsenic alors qu'il augmente avec la diminution d'azote.



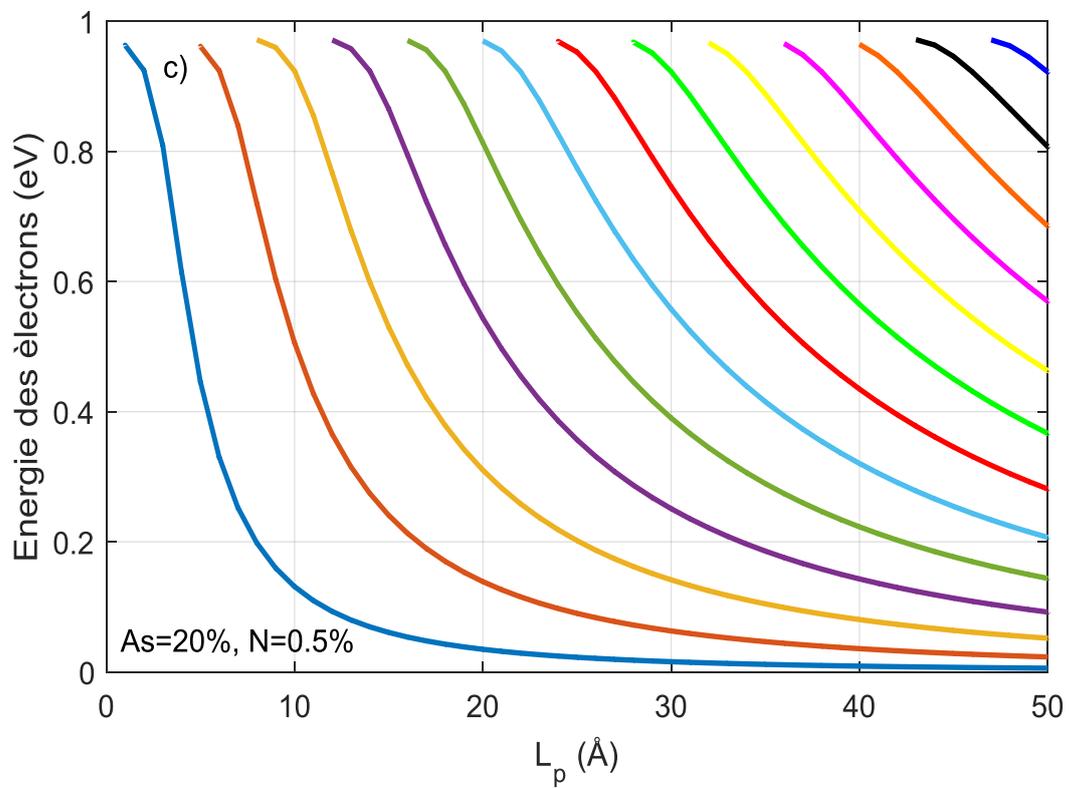
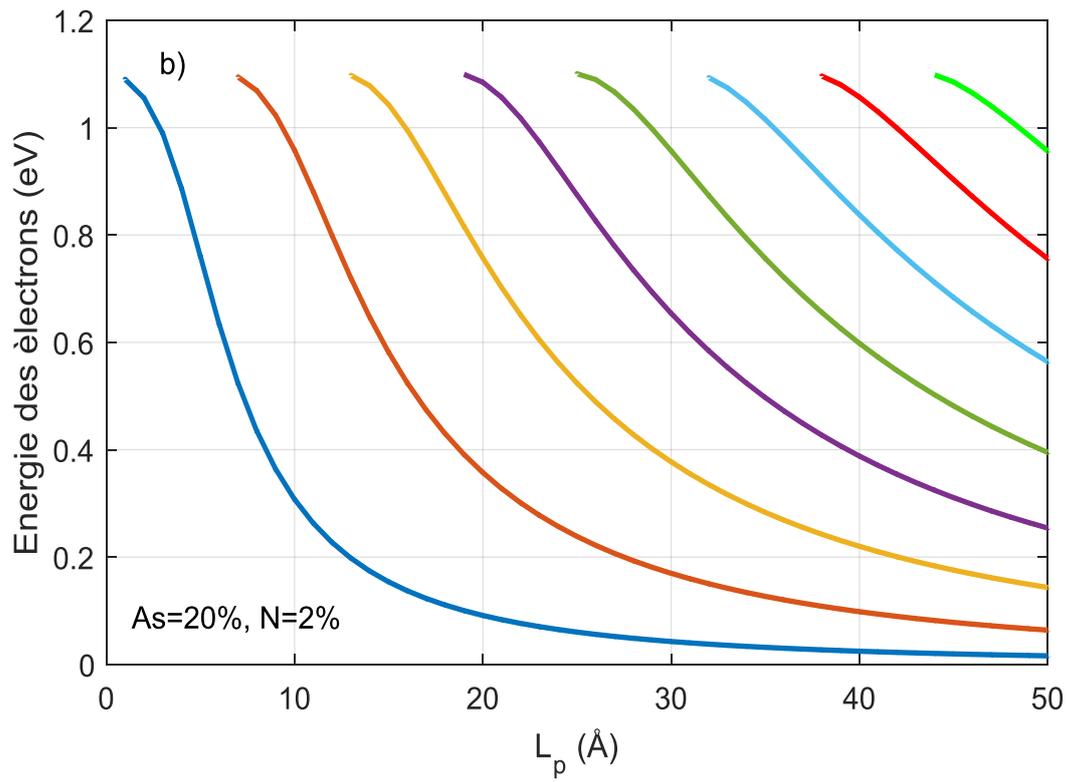


Figure 2.10. Variation de l'énergie de quantification des électrons en fonction d'azote et d'arsenic

## 2.11. La Variation des niveaux des trous hh :

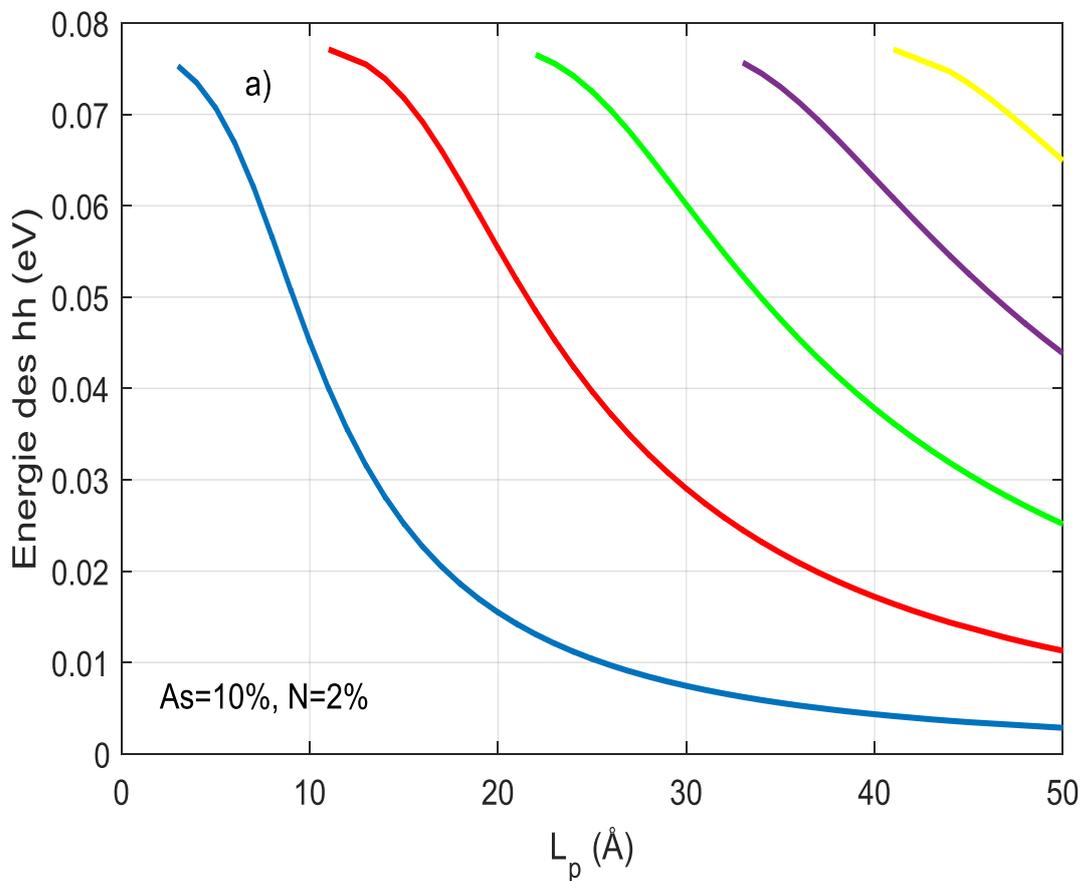
La figure 2.11 (a, b, c) représente la variation de l'énergie de confinement des trous lourds en fonction de la largeur du puits.

On remarque que l'énergie des trous lourds et l'espacement entre les niveaux diminuent avec l'augmentation de la largeur du puits.

Pour une largeur de puits de 50Å, par exemple et:

- Pour N=2 % et As= 10 %, on a l'apparition de 5 niveaux des trous hh.
- Pour N=2 % et As= 20 %, on a l'apparition de 7 niveaux des trous hh.
- Pour N=0.5 % et As= 20 %, on a l'apparition de 12 niveaux des trous hh.

On constate que le nombre des niveaux des trous hh augmente avec l'augmentation de As et augmente avec la diminution d'azote N.



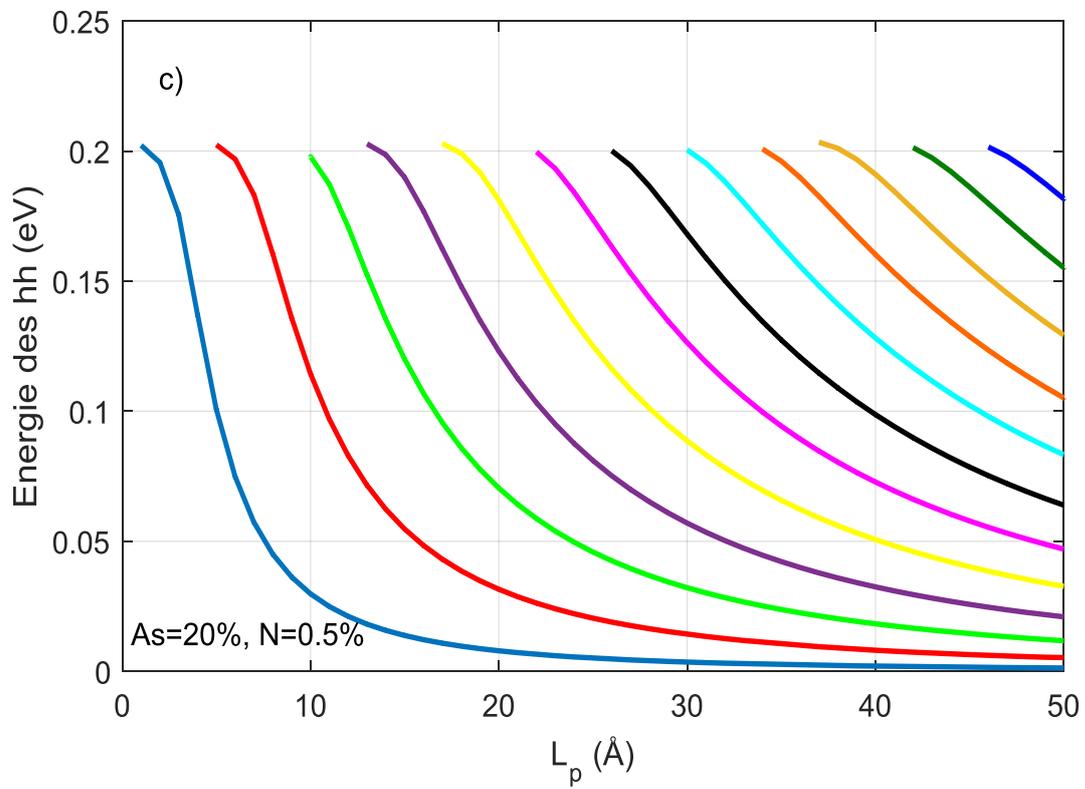
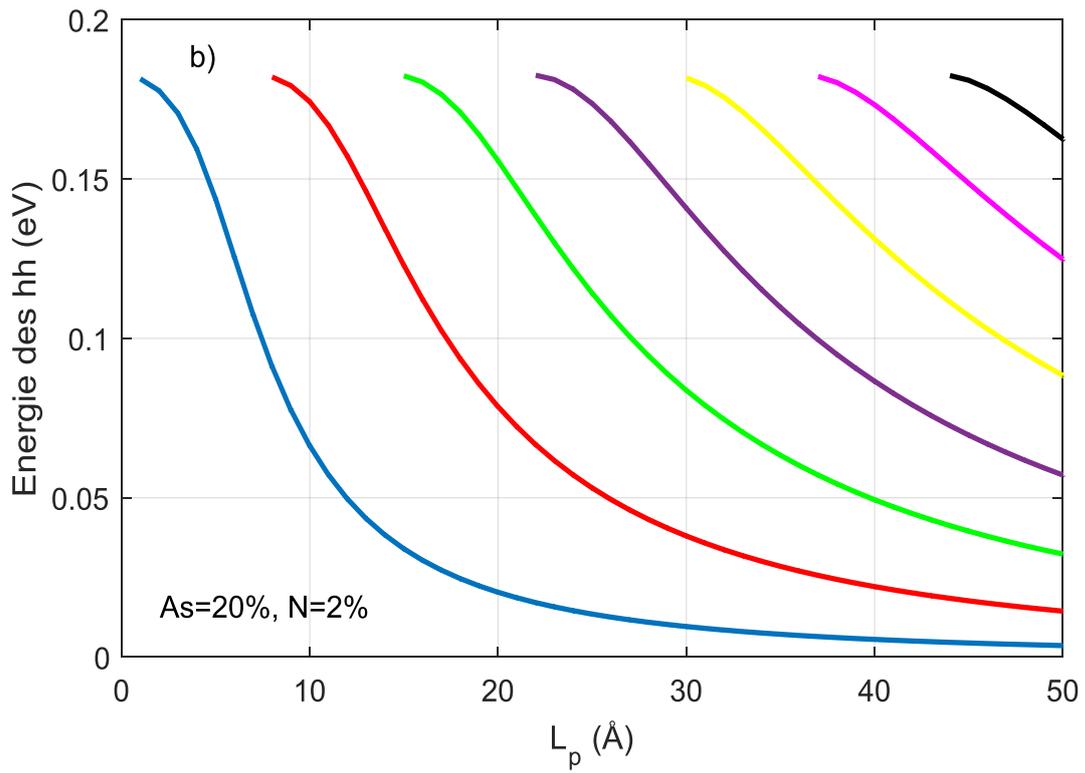


Figure 2.11. Variation des niveaux des trous hh en fonction d'azote et d'arsenic.

## 2.12. L'énergie de transition :

L'énergie de transition est l'énergie nécessaire pour qu'un électron passe de la bande de valence vers la bande de conduction. Dans un puits quantique où les niveaux énergétiques sont quantifiés [11], l'énergie de transition est donnée par la relation suivante :

$$E_{tr} = E_g + E_{ni} + E_{hj} \quad (2.13)$$

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

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

Les figures 2.12.a et 2.12.b représentent la variation d'énergie de transition en fonction de la largeur du puits pour plusieurs concentrations d'arsenic et des concentrations d'azote fixées à 1% et 2%, respectivement.

On remarque que l'énergie de transition diminue avec l'élargissement du puits. L'ajout de l'arsenic et de l'azote diminue l'énergie de transition.

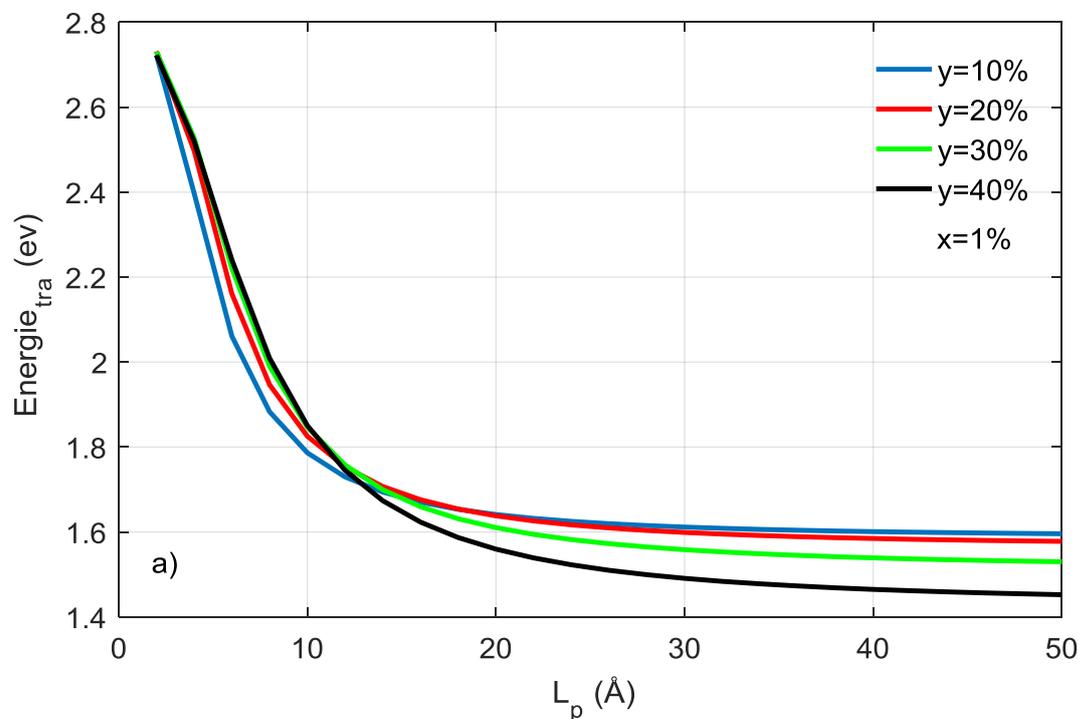


Figure 2.12.a. Variation de l'énergie de transition en fonction de la largeur du puits pour plusieurs concentrations d'arsenic et pour  $x=1\%$ .

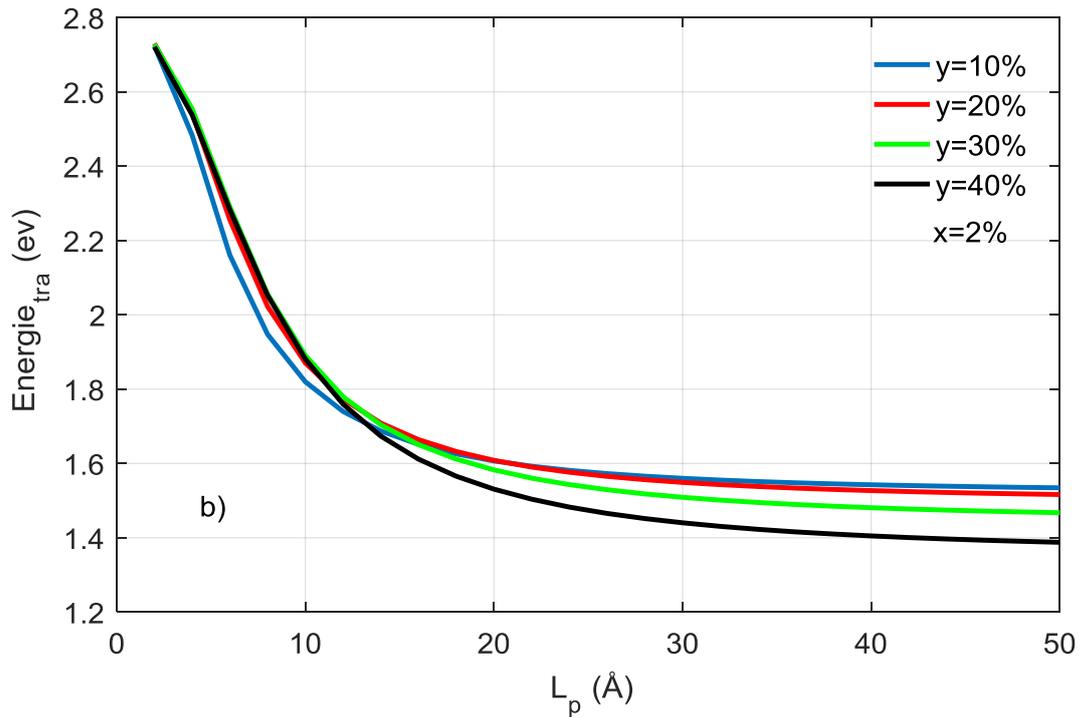


Figure 2.12.b. Variation de l'énergie de transition en fonction de la largeur de puits pour plusieurs concentrations d'arsenic et pour  $x=2\%$ .

### 2.13. La longueur d'onde :

La longueur d'onde dépend de la vitesse de propagation de l'onde dans le milieu qu'elle traverse. Elle est définie par la relation suivante :

$$\lambda = \frac{1.24}{E_{tr}} \quad (2.14)$$

Les figures 2.13.a et 2.13.b représentent la variation de la longueur d'onde en fonction de la largeur du puits pour plusieurs concentrations d'arsenic et des concentrations d'azote de valeurs 1% et 2%, respectivement.

On remarque que la longueur d'onde augmente avec l'élargissement de puits ainsi qu'avec l'augmentation des concentrations de l'arsenic et de l'azote.

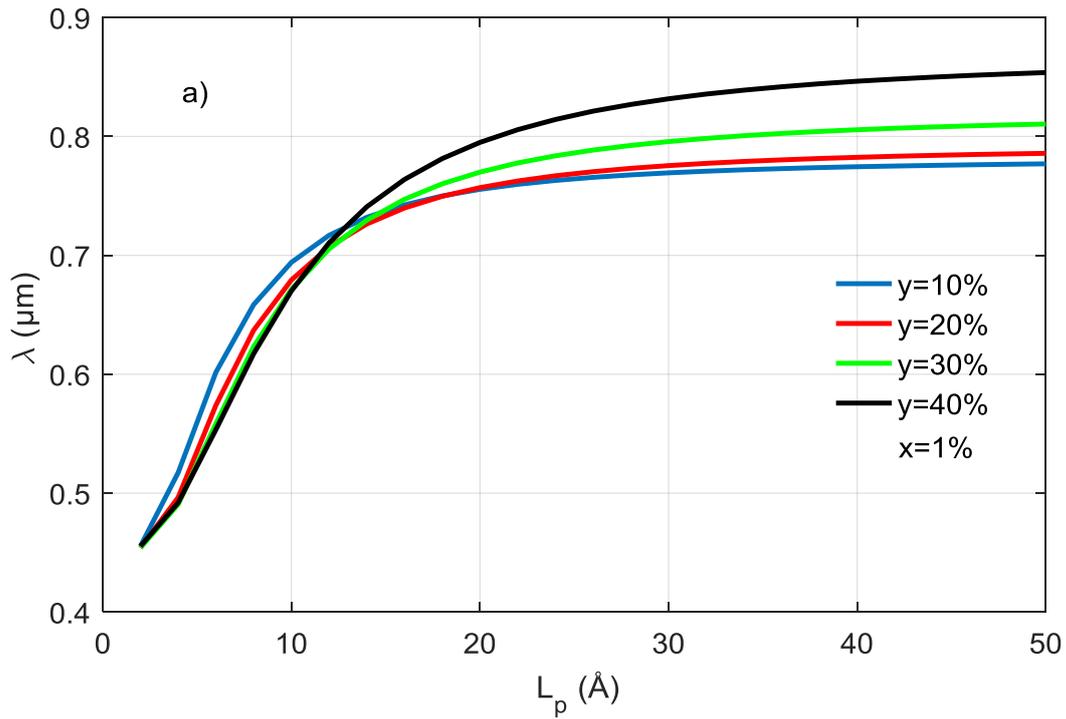


Figure 2.13.a. Variation de la longueur d'onde en fonction de la largeur du puits pour plusieurs concentrations d'arsenic et pour  $x = 1\%$ .

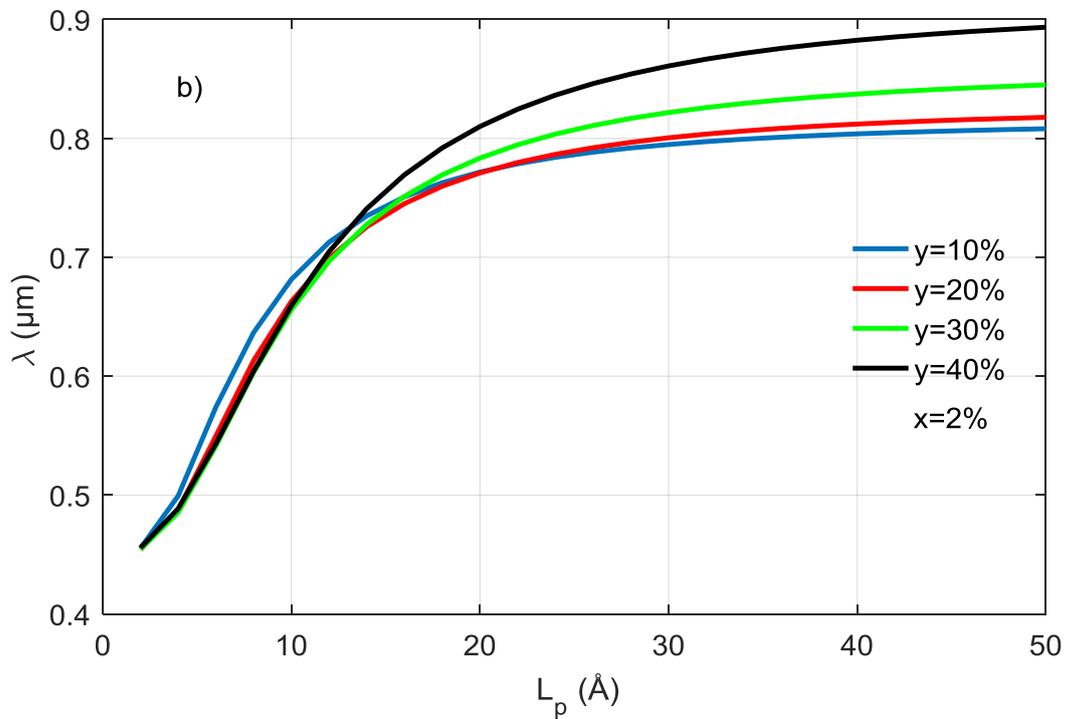


Figure 2.13.b. Variation de la longueur d'onde en fonction de la largeur du puits pour plusieurs concentrations d'arsenic et pour  $x = 2\%$ .

## 2.14. Le gain optique :

La figure 2.14 nous montre la variation du gain optique en fonction de la longueur d'onde d'émission  $\lambda$  pour plusieurs valeurs d'arsenic.

D'après la figure 2.14 on remarque un élargissement, une augmentation du gain maximum et un décalage du gain optique vers les grandes longueurs d'onde en augmentant la valeur de l'arsenic, la valeur d'azote est fixée à  $x=2\%$ .

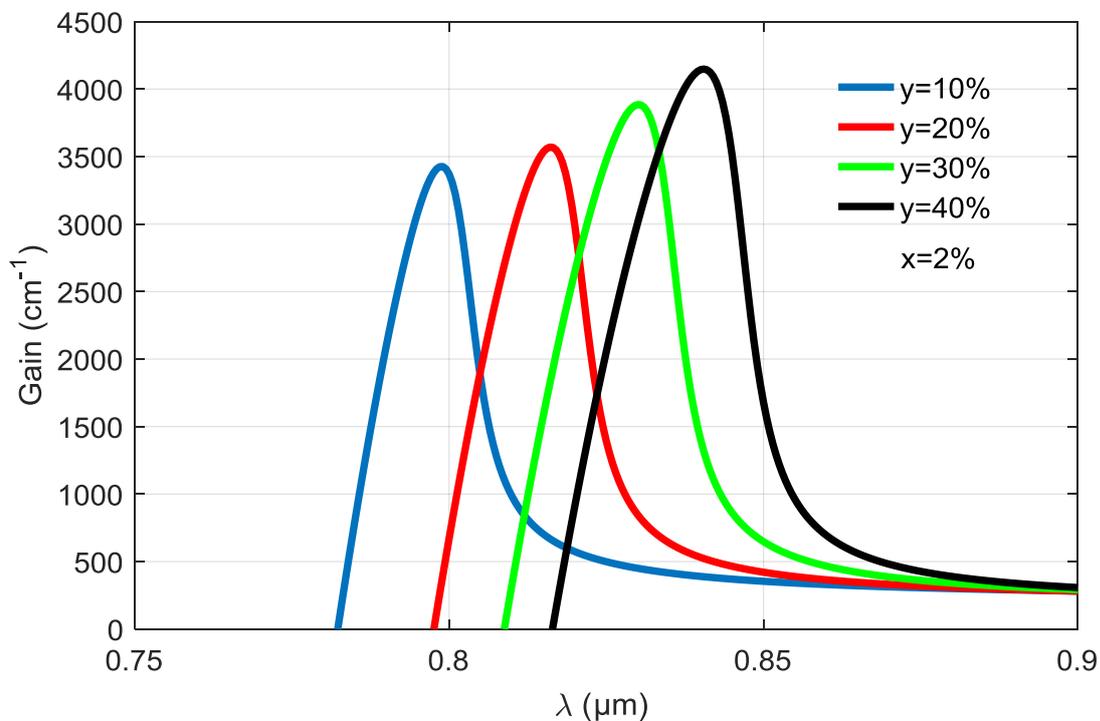


Figure 2.14. Variation du gain optique en fonction de la longueur d'onde d'émission  $\lambda$  pour plusieurs valeurs d'arsenic ( $x=2\%$ ).

La figure 2.15 montre la variation du gain optique en fonction de la longueur d'onde d'émission  $\lambda$  pour plusieurs valeurs d'azote et une valeur d'arsenic fixée à  $y=25\%$ .

On remarque un décalage du gain optique vers les grandes longueurs d'onde en augmentant la valeur de la concentration de l'azote.

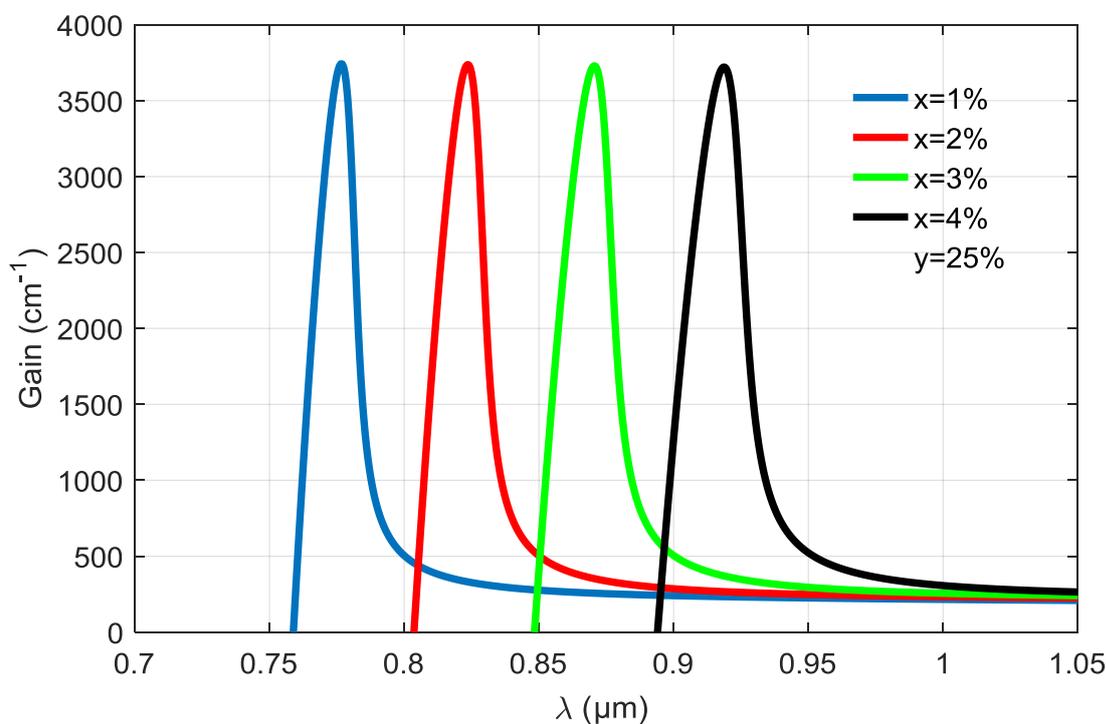


Figure 2.15. Variation du gain optique en fonction de la longueur d'onde d'émission  $\lambda$  pour plusieurs valeurs d'azote ( $y=25\%$ ).

## 2.19. Conclusion :

Dans ce chapitre nous avons étudié des propriétés très particulières de la structure à base de GaNAsP/GaP.

Dans la première partie de ce chapitre nous avons vérifié l'effet de l'incorporation d'une faible concentration d'azote et d'arsenic dans la structure à puits quantique GaNAsP/GaP sur les propriétés structurales tels que le paramètre de maille, la contrainte, l'énergie de la bande interdite, la masse effective, ...etc. Nous avons utilisé le modèle BAC qui explique bien la réduction de la bande interdite.

Dans la deuxième partie de ce chapitre nous avons vérifié l'effet de cette incorporation sur l'énergie de transition, la longueur d'onde d'émission et le gain optique.

## Conclusion générale

Notre travail porte sur l'étude des propriétés optoélectroniques des structures à puits quantique à base de GaNAsP/GaP, afin de pouvoir montrer le potentiel d'application de ce type de structures.

L'incorporation de l'azote et de l'arsenic dans l'alliage permet d'avoir des propriétés très particulières, la plus importante étant la diminution de l'énergie de la bande interdite due à l'éclatement de la bande de conduction en deux sous bandes  $E_+$  et  $E_-$ .

Le premier chapitre de ce mémoire a été consacré pour avoir une idée générale sur les semiconducteurs, puis les semiconducteurs III-V, d'une façon particulière.

Dans le deuxième chapitre, nous avons abordé l'étude et la simulation de la structure GaNAsP/GaP et cela en simulant les différents paramètres tels que : le paramètre de maille, la contrainte, l'énergie de gap. Ensuite, nous avons calculé les énergies de confinement des électrons et des trous dans ce type de puits quantique afin de déterminer l'énergie de transition et la longueur d'onde par la suite. Nous avons vérifié à la fin l'effet de l'incorporation de l'azote et de l'arsenic sur le gain optique.

L'arsenic cause une augmentation du gain maximum et un décalage du gain optique vers les grandes longueurs d'onde, et l'azote aussi mène à un décalage du gain optique vers les grandes longueurs d'onde.

Cette étude nous a permis une meilleure compréhension des propriétés de cet alliage. Cette structure nous donne la possibilité d'avoir des longueurs d'ondes d'émission dans le domaine de l'infrarouge proche ce qui offre des possibilités d'utiliser cette structure pour des applications telles que la spectroscopie dans les domaines de la chimie (polymères, pétrochimie, industrie pharmaceutique), de l'alimentation ainsi que l'agriculture.

## Les références

- [1] F. El Haj Hassan, A. Breidia, S. Ghemid, B. Amrani, H. Meradji, O. Pagès, “First-principles study of the ternary semiconductor alloys (Ga,Al)(As,Sb)”, *Journal of Alloys and Compounds*, V 499, 80–89, 2010.
- [2] G. Tourbot, « Croissance par épitaxie par jets moléculaires et détermination des propriétés structurales et optiques de nanofils InGaN/GaN », Thèse de doctorat, Université Grenoble, France, 2012.
- [3] S. Amirat, Chapitre V « Epitaxie », Master Chimie physique & Electrochimie, Université Badji Mokhtar, Annaba, 2020.
- [4] J.M Bethoux, “Relaxation des contraintes dans les hétérostructures épaisses (Al,Ga)N : une piste originale pour la réalisation de diodes électroluminescentes à cavité résonante”, Thèse de doctorat, Université de Nice Sophia-Antipolis, France, 2004.
- [5] N. K. Dutta, G.P.Agrawal, “Semi-conductor lasers”, Springer US, p 616, 1993
- [6] F.Lévy, « physique et technologie des semiconducteurs », volume 18, Presses polytechnique, 1995.
- [7] S. T. Ng, W. J. Fan, Y. X. Dang, and S. F. Yoon, “Comparison of electronic band structure and optical transparency conditions of  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_{1-y}\text{N}_y/\text{GaAs}$  quantum wells calculated by 10-band, 8-band, and 6-band  $k \cdot p$  models”, *Physical review B* 72, 11534 (2005).
- [8] S. Adachi, « III-V Ternary and Quaternary Compounds », *Springer Handbook of Electronic and Photonic Materials*, 725-741, 2017.
- [9] K.Alberi, O.D Dubon, W.Walukiewicz, K.M.Yu, K.Bertulis, and A.Krotkus, «Valence band anticrossing in  $\text{GaBi}_x\text{As}_{1-x}$ », *Appl. Phy. Lett*, V.91, 051909, 2007.
- [10] W. Shan, W. Walukiewicz, K.M. Yu, J.W. Ager III, E.E. Haller, J.F. Geisz, D.J. Friedman, J.M. Olson, S.R. Kurtz, H.P. Xin, C.W. Tu, "Band Anticrossing in III–N–V Alloys", V 223, 75–85, 2001.
- [11] A.Mokhtarova, « Puits quantique de composés Nitrures InGaN/GaN pour le photovoltaïque », Thèse de doctorat, physique/Nano physique, Université de Grenoble, France, 2016.