

République Algérienne Démocratique et Populaire

وزارة التعليم العالي والبحث العلمي

Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique

جامعة البليدة 1

Université 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 GaAsP/GaP

Par

Chouihi Atika

Devant le jury composé de :

M^{me} S. OUIR

MCB

U. Blida1

Président

M^r S. AMMI

MAA

U. Blida1

Examineur

M^{me} L. CHENINI

MAA

U. Blida 1

Encadreur

Blida, 2020

Remerciements

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

Mes remerciements particuliers à ma promotrice, M^{me} Chenini Lynda. Merci pour votre confiance et votre patience. Le soutien et les conseils qu'elle m'a prodigué tout au long de ce travail, m'ont permis de réaliser ce mémoire dans des conditions favorables à l'approfondissement de la pensée. Travailler avec elle est une expérience passionnante. C'est une femme que j'estime pour son honnêteté et son humanisme.

Je remercie tous mes enseignants que j'ai connu tout le long de mon parcours scolaire.

Dédicaces

*Je dédie ce travail à mes très chers
parents, pour l'éducation, pour leur
patience et leurs sacrifices.*

A mes chers frères et sœurs

A tous mes ami(e)s;

A tous ceux que j'aime.

Résumé

Dans ce travail, nous nous sommes intéressés à l'étude et la simulation d'une structure à base d'un puits quantique $\text{GaAs}_x\text{P}_{1-x}/\text{GaP}$. Cette structure présente des caractéristiques très importantes. Nous avons d'abord étudié le paramètre de maille ainsi que d'autres paramètres importants tels que la contrainte, l'énergie de gap qui diminue d'une manière drastique du à l'incorporation d'arsenic. Nous avons aussi vérifié l'effet de la température sur ce gap. Après cela, nous avons vérifié l'effet d'ajout de l'arsenic sur le gain optique et la longueur d'onde d'émission correspondante.

Mots clés : Puits quantiques, Paramètre de maille, gain optique, longueur d'onde.

Abstract

In this work, we are interested in the study and simulation of a structure based on a $\text{GaAs}_x\text{P}_{1-x}/\text{GaP}$ quantum well. This structure has very important characteristics. We first studied the lattice parameter as well as other important parameters such as strain, gap energy which decreases drastically due to the incorporation of arsenic. We have also verified the effect of temperature on this gap. After that, we have studied the effect of adding arsenic on optical gain and the corresponding emission wavelength.

Key words: Quantum well, Lattice parameter, optical gain, transmission wavelength.

ملخص

في هذا العمل، نحن مهتمون بدراسة ومحاكاة بنية قائمة على البئر الكمومي $\text{GaAs}_x\text{P}_{1-x}/\text{GaP}$. هذا الهيكل له خصائص مهمة جدا. درسنا أولا ثابت الشبكة بالإضافة إلى العوامل المهمة الأخرى مثل الإجهاد، فجوة الطاقة التي تتناقص بشكل كبير بسبب دمج الزرنيخ. لقد تحققنا أيضا من تأثير درجة الحرارة على هذه الفجوة. بعد ذلك درسنا تأثير إضافة الزرنيخ على الكسب البصري وطول موجة الانبعاث المقابلة.

الكلمات المفتاحية: البئر الكموني، الشبكة المعلمة، الريح البصري، طول موجات الاتصال.

Liste des acronymes et abréviations

- a : Paramètre de maille.
- a_s : Paramètre de maille du substrat.
- a_e : Paramètre de maille de la couche active.
- a_c : Potentiel de déformation dans la bande de conduction.
- a_v : Potentiel de déformation dans la bande de valence.
- As : Arsenic.
- b : Paramètre de courbure.
- BC: Bande de conduction.
- BV: Bande de valence.
- c : Vitesse de la lumière dans le vide.
- C_{ij} : Coefficients d'élasticité.
- dN_p : Densité des photons.
- E_c : Energie de la bande de conduction.
- E_g : Energie de gap.
- E_{hh} :Energie de la bande des trous lourds.
- E_{lh} : Energie de la bande des trous légers.
- E_{tr} : Energie de transition.
- E_v : Energie de la bande de valence.
- E_{vMoy} :Centre de gravité de la bande de valence.
- Ga : Gallium.
- h : Constante de Planck.
- h_c : Epaisseur critique.
- Δa : Désaccord paramétrique.
- γ : Coefficient de Poisson.
- HH : Trou lourd.
- LH : Trou léger.
- L_p :Largeur du puits.
- m_0 : Masse de l'électron dans le vide
- m_p^* : Masse effective des porteurs.
- m_e^* :Masse effective des électrons
- m_{hh} :Masse effective des trous lourds.

m_{lh} :Masse effective des trous légers.

N_p : Nombre de photons par unité de volume.

P : Phosphore.

PQ :Puits quantique.

p_j^{pq} :Densités d'états .

Q_c : Taux de confinement dans la bande de conduction.

Q_v : Taux de confinement dans la bande de valence

ψ : Fonction d'onde.

ΔE_c :Décalage de la bande de conduction.

ΔE_v :Décalage de la bande de valence.

Δ_0 :Energie de spin orbite.

R_{Est} : Taux d'émission stimulée.

R_{spo} : Taux d'émission spontanée.

u_g : Vitesse de propagation.

ε : Contrainte.

$\varepsilon_{//}$:Déformation biaxiale.

ε_{\perp} : Déformation uniaxiale.

ε_0 : Permittivité du vide.

λ : Longueur d'onde.

α, β : Paramètres semi empiriques de Varshni.

Table des matières

Introduction générale.....	1
----------------------------	---

Chapitre 1 : Notions fondamentales

1.1. Introduction	3
1.2. Les semi-conducteurs III-V	4
1.2.1. Les matériaux binaires	4
1.2.2. Les alliages	5
1.2.3. Structure cristalline	6
1.2.4. Réseau réciproque et Zone de Brillouin.....	7
1.2.5. Structure de bandes	8
1.3. Technique de croissance des matériaux III-V	9
1.3.1. Différentes méthodes d'épitaxie :.....	9
1.4. Puits quantiques :.....	12
1.4.1. Puits quantiques de type I.....	12
1.4.2. Puits quantiques de type II.....	13
1.4.3. Puits quantiques de type III	13
1.5. Les décalages de bandes ΔE_C et ΔE_V	14
1.6. Taux de confinement	14
1.7. Equation de Schrödinger dans le puits quantique.....	15
1.8. Masse effective dans le vide.....	16
1.8.1. Masse effective des électrons.....	16
1.8. 2.Masse effective des trous.....	17
1.9. Contrainte	17
1.10. Energie de gap	19
1.11. Effet de la contrainte sur le gap d'énergie.....	19
1.12. Epaisseur critique h_c	20
1.13. Interaction rayonnement lumineux-Semi-conducteur.....	22
1.13.1. L'absorption	22
1.13.2. L'émission Spontanée.....	22
1.13.3. L'émission stimulée:.....	23
1.13.4. Le gain optique.....	24
1.14. Conclusion	24

Chapitre 2 : résultat et discussion.

2.1. Introduction.....	25
2.2. Paramètre de maille.....	25
2.3. Contrainte.....	26
2.4. L'épaisseur critique.....	27
2.5. Énergie de la bande interdite	28
2.6. Effet de la température sur l'énergie de gap.....	29
2.7. La masse effective des porteurs	30
2.8. Les alignements de bandes ΔE_c et ΔE_v	31
2.9. Energie de confinement.....	33
2.10. Energie de transition et longueur d'onde.....	35
2.11. Gain optique.....	37
2.12. Conclusion.....	39
Conclusion générale	40

Liste des figures

Figure 1.1. Structure de bande des trois catégories des matériaux.....	2
Figure 1.2. Tableau périodique des éléments.....	3
Figure 1.3. a) Structure zinc-blende, b) Structure würtzite.....	6
Figure 1.4. Première zone de Brillouin de la structure zinc-blende.....	7
Figure 1.5. Structure de bande d'énergie du : a) gap direct et b) gap indirect.....	8
Figure 1.6. Dispositif d'épitaxie en phase liquide.....	9
Figure 1.7. Banc d'épitaxie en phase vapeur.....	10
Figure 1.8. Bâti d'épitaxie par jet moléculaire.....	11
Figure 1.9. Illustration d'un puits quantique.....	12
Figure.1.10. Les différents types de puits quantiques.....	13
Figure1.11. Décalage de bande ΔE_c et ΔE_v	14
Figure1.12. Illustration de deux types de déformation, couche en tension et couche en compression.....	18
Figure1.13. Évolution de l'énergie de la bande interdite en fonction de l'état de contrainte d'une couche déposée sur un substrat.....	20
Figure 1.14. Schéma montrant une couche contrainte(a) en compression (b) et une autre couche contrainte relaxée.....	21

Figure1.15. Illustration du processus d'absorption.....	22
Figure1.16. Illustration du processus d'émission spontanée.....	23
Figure1.17. Illustration du processus d'émission stimulée.....	23
Figure 2.1.Variation du paramètre de maille de la structure $\text{GaAs}_x\text{P}_{1-x}/\text{GaP}$ en fonction de la concentration de l'arsenic.....	26
Figure 2.2. Variation de la contrainte en fonction de la concentration de l'arsenic.....	27
Figure 2.3. Variation de l'épaisseur critique de la structure $\text{GaAs}_x\text{P}_{1-x}/\text{GaP}$ en fonction de la concentration d'arsenic.....	28
Figure 2.4. Variation de l'énergie de gap du $\text{GaAs}_x\text{P}_{1-x}$ en fonction de la concentration de l'arsenic.....	29
Figure 2.5. Variation de l'énergie de gap $\text{GaAs}_x\text{P}_{1-x}$ en fonction de la température.....	30
Figure 2.6.Variation de la masse effective en fonction de la concentration d'arsenic du GaAsP	31
Figure 2.7. Décalage de la bande de conduction et de la bande de valence du GaAsP/GaP en fonction de la concentration d'arsenic.....	33
Figure 2.8. Evolution de l'énergie des électrons dans un puits quantique $\text{GaAs}_{0.15}\text{P}_{0.85}/\text{GaP}$ en fonction de la largeur du puits.....	34
Figure 2.9. Evolution de l'énergie des électrons dans un puits quantique $\text{GaAs}_{0.35}\text{P}_{0.65}/\text{GaP}$ en fonction de la largeur du puits.....	34
Figure 2.10.Evolution de l'énergie des trous lourds dans un puits quantique $\text{GaAs}_{0.15}\text{P}_{0.85}/\text{GaP}$ en fonction de la largeur du puits.....	35
Figure 2.11. Evolution de l'énergie des trous lourds dans un puits quantique $\text{GaAs}_{0.35}\text{P}_{0.65}/\text{GaP}$ en fonction de la largeur du puits.....	35
Figure 2.12. Evolution de l'énergie de transition dans un puits quantique GaAsP/GaP en fonction de la largeur du puits pour différentes valeurs d'arsenic.....	36
Figure 2.13. Evolution de l'énergie de transition dans un puits quantique GaAsP/GaP en fonction de la largeur du puits pour différentes valeurs d'arsenic.....	37
Figure 2.14. Evolution du gain optique pour différentes concentrations d'As en fonction de la longueur d'onde d'émission ($L_p=50\text{\AA}$, $T=300\text{K}$).....	37
Figure 2.15. Evolution du gain optique pour différentes concentrations largeurs du puits ($T=300\text{K}$, $x=25\%$).....	38
Figure 2.16. Evolution du gain optique pour différentes températures ($L_p=50\text{\AA}$, $x=25\%$).....	38

Liste des tableaux

Tableau 1.1. Paramètre des principaux composés binaires III-V à 300K.....	4
Tableau 1.2. Les alliages ternaires et quaternaires.....	5
Tableau 1.3. Les valeurs de β pour différent types de puits quantique.....	22
Tableau 2.1. Paramètre de maille des différents binaires.....	26
Tableau 2.2. Masse effective des porteurs pour les binaires GaP et GaAs.....	30
Tableau 2.3. Potentiels de déformation pour GaAs et GaP.....	32

Introduction générale

Les composants optoélectroniques sont les éléments clés des réseaux de télécommunication qui font désormais partie de notre quotidien. Les réseaux terrestres sont pour la plupart des réseaux optiques à très haut débit (on arrive à des débits d'environ 10Tbits/s en utilisant la méthode du multiplexage en longueur d'onde). Pour assurer le transfert des informations d'un bout à l'autre d'un réseau optique, des interfaces optoélectroniques sont nécessaires [1].

La technologie des semi-conducteurs est d'un très grand intérêt en raison de leurs caractéristiques exceptionnelles, et il est également possible de modifier les propriétés électroniques de ces semi-conducteurs par plusieurs procédés à l'échelle nanométrique plus particulièrement, les semi-conducteurs III-V, comme par exemple le GaAs et le GaP, caractérisés par un gap direct et une mobilité électronique importante en insérant des atomes de même valence appartenant à une autre colonne [2].

Les semi-conducteurs III-V sont presque tous à gap direct. L'arséniure de gallium GaAs est le représentant le plus connu, de gap 1,42 eV, l'InP en est un autre, de gap 1,35 eV. Leur grande force réside dans le nombre quasi illimité d'alliages possibles entre Ga, As, Al, In et P. Cette particularité essentielle a donné aux semi-conducteurs III-V la première place pour l'optoélectronique et notamment pour les lasers à semi-conducteurs.

La réalisation de ces composants, qui comprend l'épitaxie et la technologie auxquelles il faut ajouter la caractérisation pour évaluer leurs performances, s'étend sur environ six mois. Le coût de fabrication de ces composants étant, par ailleurs, très élevé, il est donc préférable de pouvoir évaluer au mieux leurs performances avant de commencer le cycle de fabrication. C'est dans cet objectif que s'inscrit la modélisation et la simulation des composants.

Dans ce travail, nous nous sommes intéressés à l'étude théorique et la simulation d'une structure à base d'un puits quantique $\text{GaAs}_x\text{P}_{1-x}/\text{GaP}$. Cette structure présente des caractéristiques très importantes. L'étude présentée permet d'analyser l'influence des divers paramètres (composition, largeur du puits, température) sur les différentes caractéristiques : énergie de quantification, énergie de transition, longueur d'onde d'émission ainsi que le gain optique.

Ce mémoire de master est organisé comme suit :

On commence tout d'abord par une introduction générale, on passe ensuite au premier chapitre où nous allons présenter les notions fondamentales sur les matériaux semi-conducteurs et précisément les semi-conducteurs III-V, tels que : la contrainte, l'énergie de la bande interdite, l'épaisseur critique, le gain optique, afin de pouvoir entamer la simulation de la structure GaAsP/GaP.

Le deuxième chapitre regroupe les différents résultats de notre simulation de la structure proposée à base de GaAsP/GaP.

En fin de ce mémoire, une conclusion générale sera présentée sur l'ensemble des résultats obtenus d'après l'étude faite sur ce type de structure.

Chapitre 1 : Notions fondamentales

1.1. Introduction:

Les semi-conducteurs sont des matériaux dont les propriétés de conductibilité électrique sont intermédiaires entre celle des métaux et celle des isolants tels que l'on peut voir sur la figure 1.

La figure 1.1 montre les structures de bande de trois types des matériaux : isolants, métaux, et semi-conducteurs. On voit sur cette figure que la différence réside au niveau de l'éloignement des bandes de valence et de conduction. Dans les isolants, cette différence est assez importante, de l'ordre d'une dizaine d'eV. Chez les métaux par contre, elle est inexistante, les bandes de valence et de conduction se chevauchent, permettant un passage aisé des électrons, dont la circulation induit un courant électrique. Chez les semi-conducteurs, ce passage d'électrons entre les bandes de valence et de conduction n'est possible que si l'on fournit une certaine quantité d'énergie, par exemple sous forme de photons, pour franchir la bande interdite, aussi appelée gap, dont la largeur va de 0,6 à 4 eV, selon le matériau.

Un semi-conducteur serait isolant à une température de zéro Kelvin (zéro absolu), contrairement à un métal.

Les semi-conducteurs sont largement utilisés en électronique pour réaliser des composants tels que des diodes, des transistors, des circuits intégrés ainsi que les lasers à semi-conducteur [3].

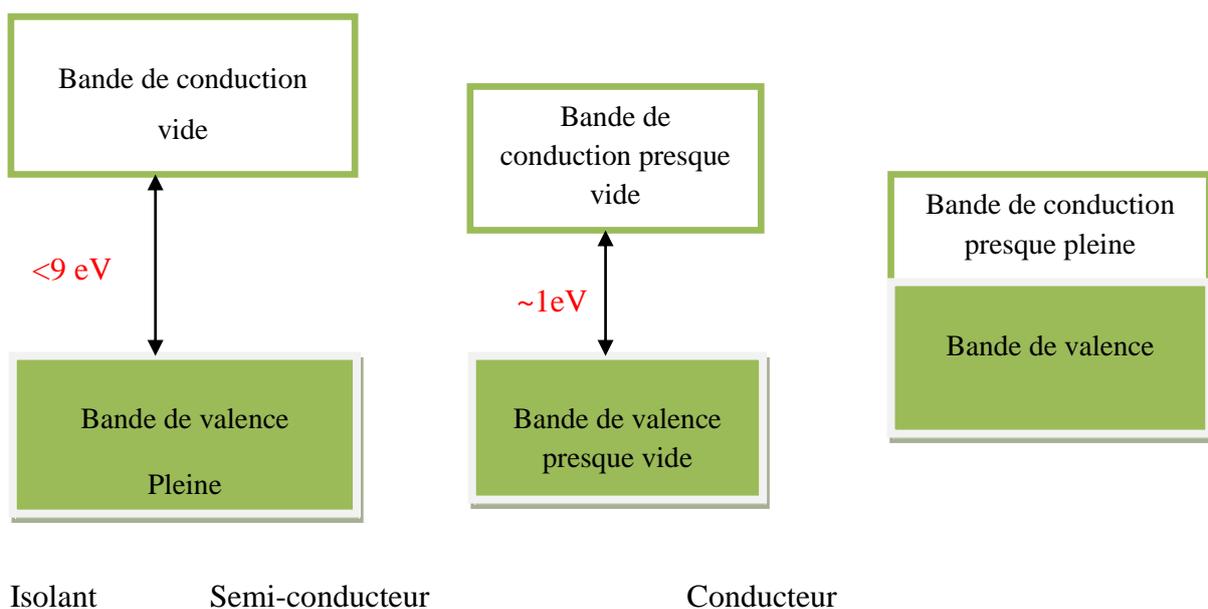


Figure 1.1. Structure de bande des trois catégories des matériaux

1.2. Les semi-conducteurs III-V :

Les semi-conducteurs III-V sont composés à partir des éléments des colonnes III (bore, gallium, aluminium, indium, etc.) et V (arsenic, antimoine, phosphore, etc.) du tableau périodique de Mendeleïev (figure 1.2). Ils sont obtenus, soit par tirage de monocristaux massifs, soit par croissance épitaxiale de couches minces.

Les semi-conducteurs III-V présentent un grand intérêt en raison de leurs propriétés:

- ils sont robustes.
- ils possèdent une conductivité thermique élevée.
- leur point de fusion est élevé.
- La plupart ont une bande interdite directe.

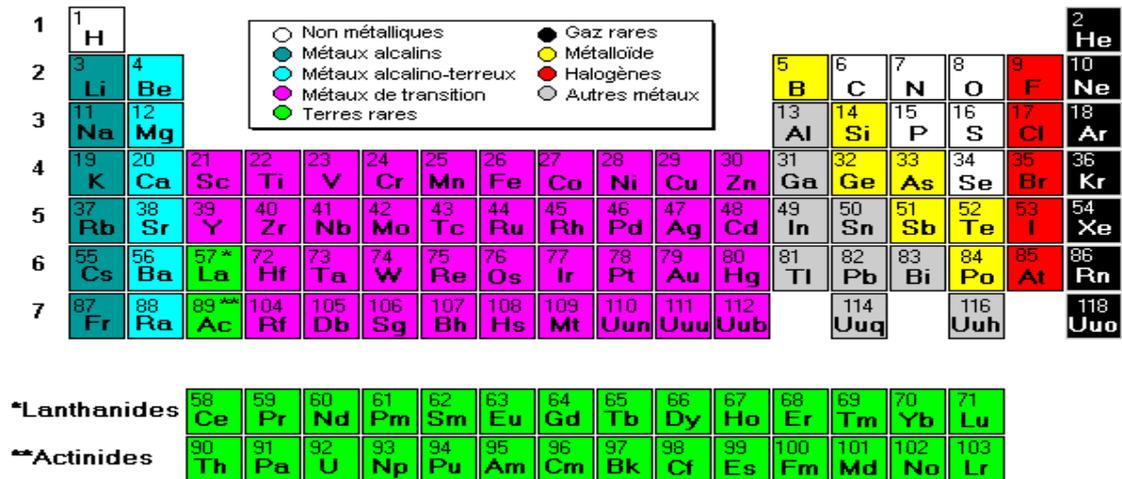


Figure 1.2. Tableau périodique des éléments.

1.2.1. Les matériaux binaires :

L'étude de propriétés des composés binaires, et en particulier de la structure de bandes montre que les éléments les plus légers donnent des composés dont laquelle la bande interdite est large et indirecte, et dans laquelle la masse effective des électrons est élevée. Les composés contenant du bore, de l'aluminium ou de l'azote entrent dans cette catégorie. Ils sont en général peu d'intérêt pour l'électronique rapide, qui demande des semi-conducteurs à forte mobilité de porteurs ou pour l'optoélectronique, où une structure de bande directe est nécessaire pour quels transitions optiques soient efficaces. A l'autre extrémité, les éléments

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

Tableau 1.1. Paramètres des principaux composés binaires III-V à 300K [4,5].

Composé III-V	E_g (eV)	m^*/m_0	μ_n ($cm^2/V.s$)	μ_p ($cm^2/V.s$)	a (Å)
<i>GaAs</i>	1.42	0.067	8500	400	5.6533
<i>InAs</i>	0.36	0.023	33000	500	6.0584
<i>GaP</i>	2.26	0.82	1105	-	5.4512
<i>GaN</i>	3.36	0.19	1800	200	3.189
<i>InP</i>	1.35	0.077	4600	100	5.8686

1.2.2. Les alliages :

Cette technique nous permettra d'extraire de nouveaux semi-conducteurs de structures ternaire et quaternaire ou même plus, par mélange homogène de deux ou plusieurs éléments de la même colonne avec d'autres éléments d'une autre colonne afin d'améliorer les qualités des dispositifs.

Par exemple, On pourrait obtenir les alliages $Al_xGa_{(1-x)}As$ ou $In_xGa_{(1-x)}As$, pour ajuster certaines fonctionnalités telles que la largeur de la bande interdite (pour les applications optoélectroniques) et la mobilité des porteurs (pour les applications électroniques) [1].

Tableau 1.2. Les alliages ternaires et quaternaires

Alliage	Structure	Forme Structure	Exemple
Ternaires	2 atomes sur l'un des mêmes colonnes	$BA_xA'_{(1-x)}$	$GaAs_xP_{(1-x)}$
Quaternaires 1+3	3 atomes de la même colonne et un de l'autre	$A_xA'_yA''_{(1-x-y)}B$	$Ga_xIn_yAl_{(1-x-y)}As$
Quaternaires 2+2	2 atomes de deux colonnes différentes	$A_xA'_{(1-x)}B_yB'_{(1-y)}$	$Ga_xIn_{(1-x)}As_yP_{(1-y)}$

Où x et y sont des coefficients stœchiométriques qui varient entre 0 et 1 et qui représentent les concentrations des composés des éléments dans les différents alliages.

Un alliage ternaire est composé de deux binaires, les différents paramètres (noté Q dans l'équation 1.1) de ce matériau sont obtenus à partir de l'interpolation linéaire de la loi de Végard.

$$Q(A_xB_{1-x}C) = x \cdot Q(AC) + (1 - x) \cdot Q(BC) \quad (1.1)$$

x est la concentration de l'atome injecté.

1.2.3. Structure cristalline :

Les semi-conducteurs III-V se cristallisent sous deux formes de structures: le zinc blende et la structure würtzite.

La structure cristalline zinc-blende (figure 1.3 a), est une structure qui s'apparente à celle du diamant et elle est constituée de deux sous réseaux cubiques à faces centrées imbriqués, l'un étant formé par les éléments III et l'autre par les éléments V.

Ces deux réseaux sont décalés l'un par rapport à l'autre, le long de la diagonale du cube d'un vecteur $\sqrt{3}$ ($a/4, a/4, a/4$), a étant le paramètre maille, c'est-à-dire la longueur de l'arête du cube élémentaire [6].

La structure würtzite (figure 1.3 b), est formée par deux réseaux de Bravais hexagonaux.

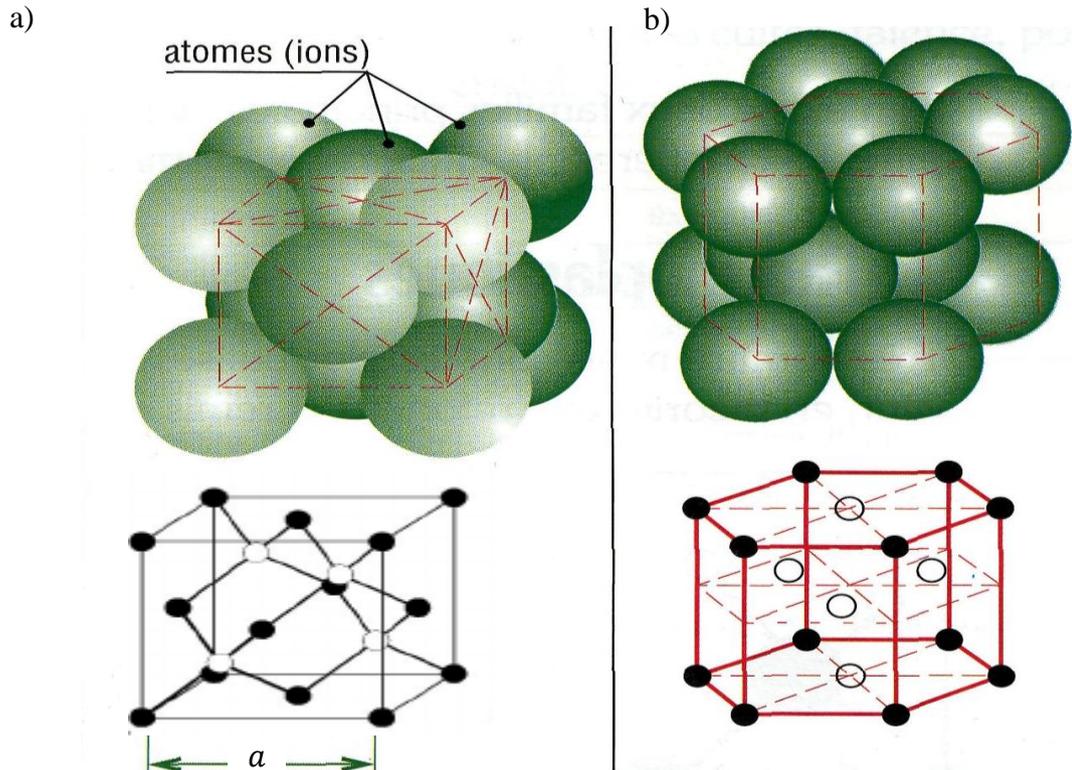


Figure 1.3. a) Structure zinc-blende, b) Structure wurtzite.

1.2.4. Réseau réciproque et zone de Brillouin:

Dans ce travail on s'intéresse au phospho-arséniure de gallium (GaAsP) qui est un composé chimique d'arsenic, de gallium et de phosphore. C'est un matériau semi-conducteur utilisé en particulier pour réaliser des composants optoélectroniques, des diodes électroluminescentes dans la lumière visible, et des photodétecteurs. Il se cristallise dans une structure zinc blende.

La première zone de Brillouin du réseau réciproque, représentée sur la figure 1.4, est un octaèdre à faces tronquées dont les points de haute symétrie sont notés Γ (centre de zone), X (bord de zone dans les directions (100) et équivalentes) et L (bord de zone dans les directions (111) et équivalentes) [7].

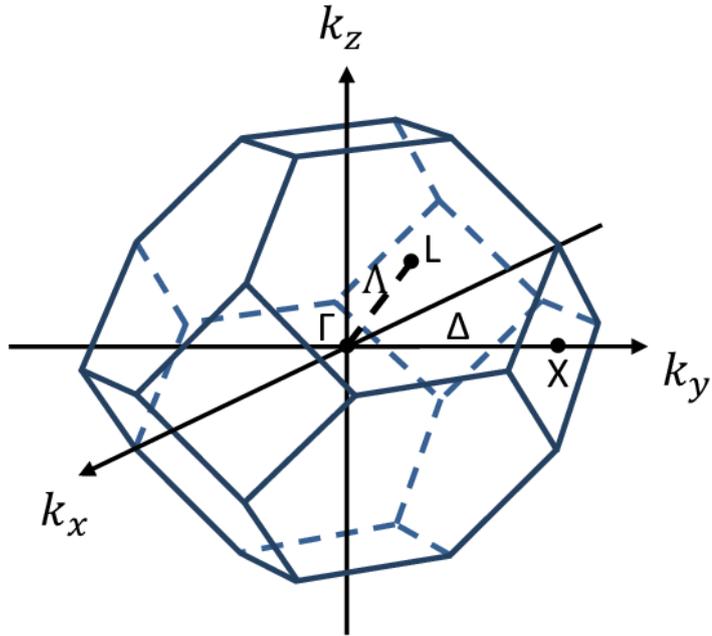


Figure 1.4: Première zone de Brillouin de la structure zinc-blende.

1.2.5. Structure de bandes :

Les semi-conducteurs ont des liaisons en partie covalentes avec la mise en commun d'électrons entre l'atome « élément III » et l'atome « élément V ». La périodicité dans le cristal conduit à une distribution des états énergétiques sous la forme de bandes définies par la résolution de l'équation de Schrödinger.

Le gap est par définition la largeur de la bande interdite, c'est à dire la différence d'énergie entre le minimum de la bande de conduction et le maximum de la bande de valence. Les structures de bande représentées sur la figure 1.5 font apparaître deux cas fondamentaux de semi-conducteurs. Les semi-conducteurs à gap indirect, dont lesquels le minimum de la bande de conduction et le maximum de la bande de valence sont situés en des points différents de l'espace des k et les semi-conducteurs à gap direct pour lesquels ces extrema sont situés au même point de l'espace des k (au centre de la zone de Brillouin, en $k=0$). Dans les semi-conducteurs à gap directe, le minimum central de la bande de conduction correspond à des électrons de faible masse effective, donc très mobiles. Par contre ceux qui ont un gap indirect, leur bande de conduction correspond à des électrons de grande masse effective, donc ayant une faible mobilité.

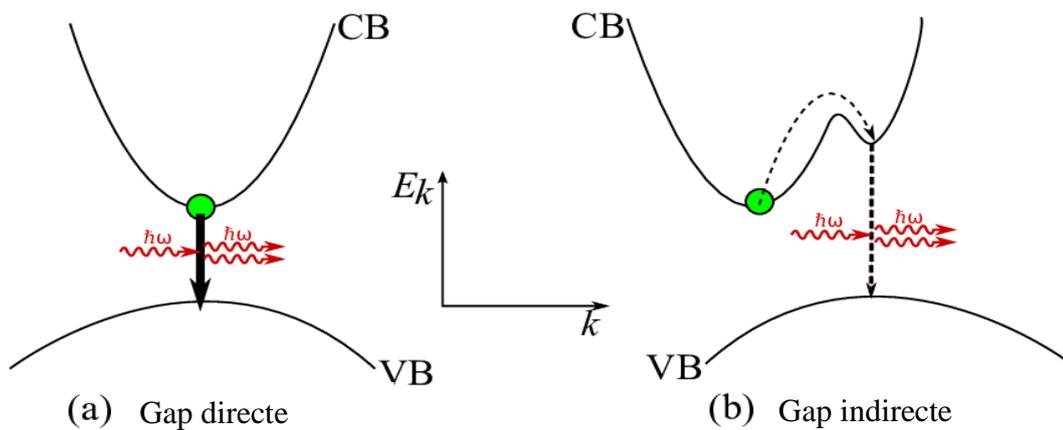


Figure 1.5. Structure de bande d'énergie du : a) gap direct et b) gap indirect.

1.3. Technique de croissance des matériaux III-V :

L'épitaxie est une technique de croissance cristalline qui a connu un grand développement avec la mise au point des techniques de croissances sous vide (cas de l'épitaxie par jet moléculaire).

L'épitaxie est utilisée pour faire croître des couches minces (quelques nanomètres d'épaisseur). On parle d'homo-épitaxie lorsque ces cristaux sont de nature chimique identique et hétéro-épitaxie dans le cas contraire.

1.3.1. Différentes méthodes d'épitaxie :

Il existe principalement 3 types de méthodes expérimentales :

✚ L'épitaxie en phase liquide, ou LPE (Liquid Phase Epitaxy), [8] :

Cette technique (voir figure 1.6) consiste à faire croître le cristal par la mise en contact du 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, la vitesse de croissance peut être de l'ordre du micron par minute.

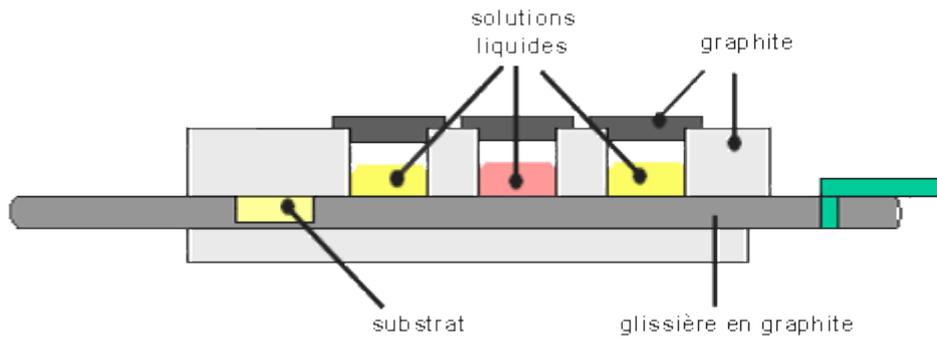


Figure 1.6: Dispositif d'épitaxie en phase liquide.

✚ L'épitaxie en phase vapeur ou VPE (Vapor Phase Epitaxy), [9]:

Cette opération consiste à faire croître le cristal à partir de sources de gaz contenant les éléments dopants. Dans le réacteur, les gaz se dissocient pour fournir par exemple le silicium qui se dépose à la surface des plaquettes. Pour assurer une bonne croissance, ces dernières sont chauffées. Il faudra aussi contrôler les équilibres chimiques par injections de gaz résultant de la décomposition de la source. Le

banc de cette épitaxie est représenté sur la figure 1.7.

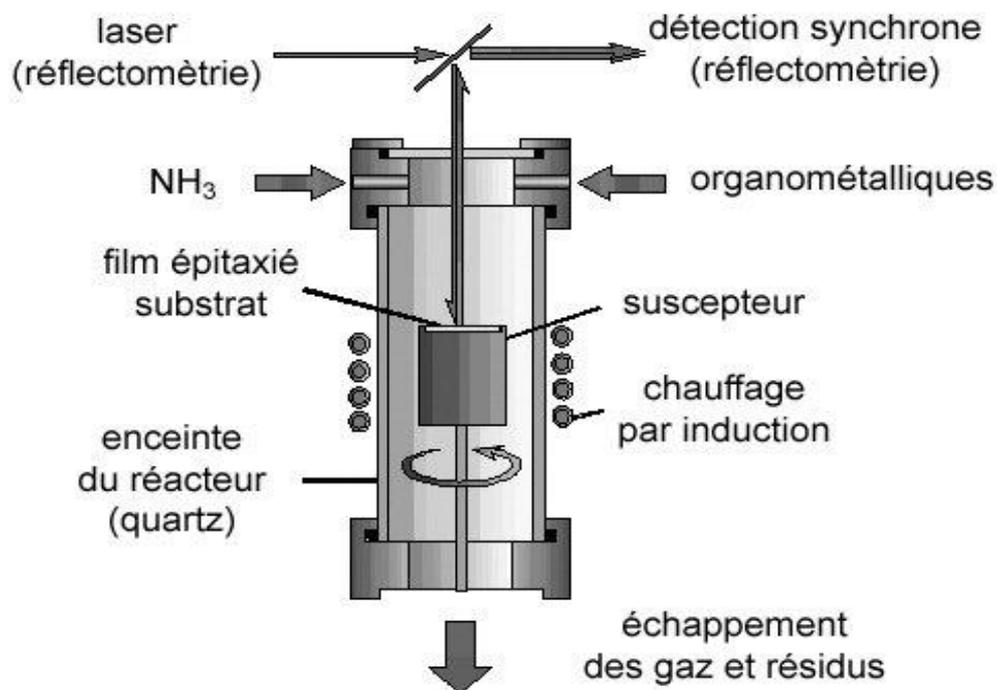


Figure 1.7: Banc d'épitaxie en phase vapeur.

✚ L'épitaxie par jet moléculaire, EJM ou MBE (Molecular Beam Epitaxy), [10]:

Cette technique consiste à envoyer des molécules à la surface d'un substrat dans un vide très poussé afin d'éviter tout choc ou contamination sur le parcours. Le principe de la source est l'évaporation sous vide (cellule de Knudsen) par chauffage.

Les sources d'évaporation peuvent être de nature et de dopage différents; pour chaque élément évaporé, il faut adapter la puissance de chauffe de cellules mais aussi du porte-substrat. Par le contrôle des cellules d'évaporation, on crée un jet de molécules en direction du substrat; on peut ainsi réaliser couche par couche des structures très complexes telles que les super réseaux, les diodes laser, les transistors à forte mobilité d'électron (HEMT).

On obtient ainsi une très grande précision de croissance, des jonctions très abruptes, mais cette opération est très lente et ne concerne qu'un seul substrat à la fois. La vitesse de croissance est de l'ordre de 1nm par minute. Cette technique est donc très coûteuse et ne concerne que des dispositifs à très forte valeur ajoutée (voir figure 1.8).

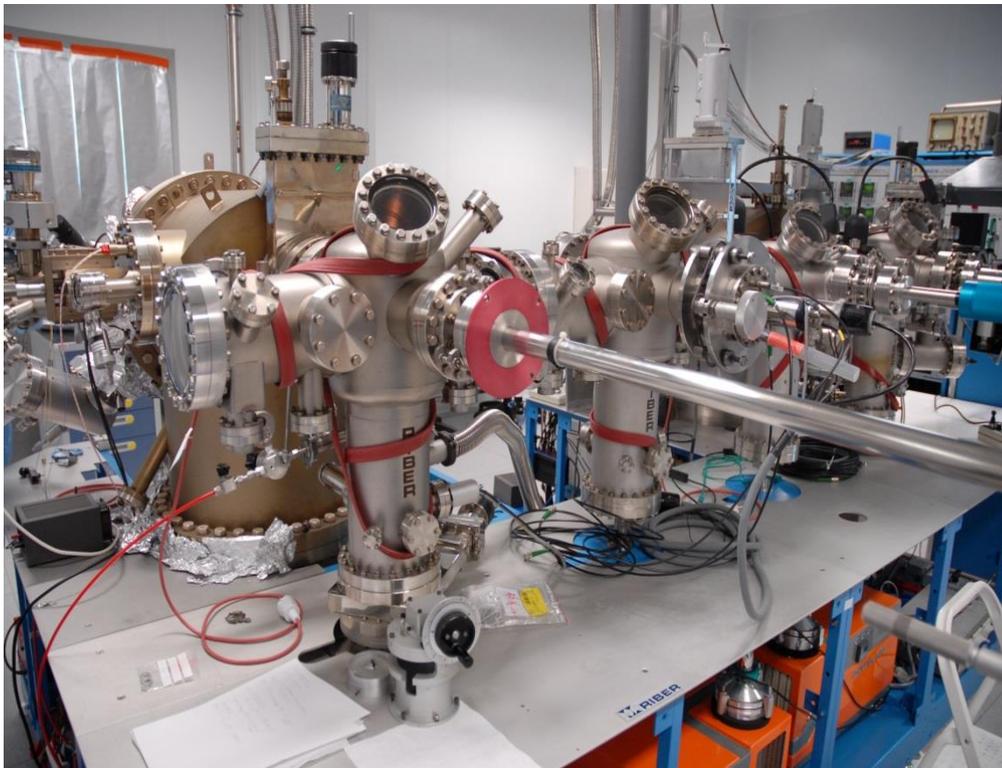


Figure 1.8 : Bâti d'épitaxie par jet moléculaire.

1.4. Puits quantiques :

Pour réaliser un puits quantique, on utilise deux matériaux (A) et (B), la méthode consiste à croître le 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 bande interdite différentes.

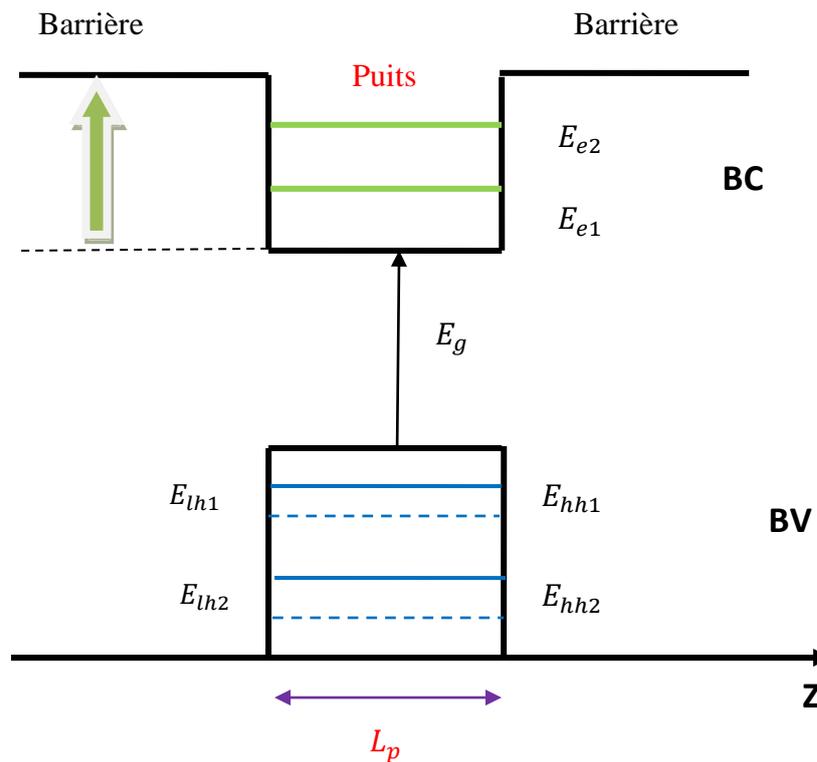


Figure 1.9: Illustration d'un puits quantique.

Où :

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

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

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

La définition du puits quantique implique l'existence de trois types de puits.

1.4.1. Puits quantiques de type I :

Dans les puits quantiques de type-I, les électrons et les trous sont confinés dans le même matériau constituant le puits. L'énergie du photon dépend des énergies de confinement des porteurs et du gap du matériau puits. La structure GaAsP/GaP est de type I.

1.4.2. Puits quantiques de type II :

Dans les puits quantiques de type II, les porteurs sont confinés dans les deux matériaux adjacents. Dans ce cas, l'énergie du photon est fonction des énergies de confinement des porteurs mais aussi des gaps des deux matériaux formant l'hétérostructure.

1.4.3. Puits quantiques de type III :

La configuration dite de type-III est un cas particulier du type-II dans lequel le bas de la bande de conduction se trouve en dessous du haut de la bande de valence. Cette situation appelé aussi configuration semi-métallique, offre une grande souplesse dans le choix de la longueur d'onde d'émission puisque l'énergie du photon émis n'est alors fonction que des énergies de confinement des électrons et des trous, donc des épaisseurs des couches, voir la figure 1.10 ci-dessous:

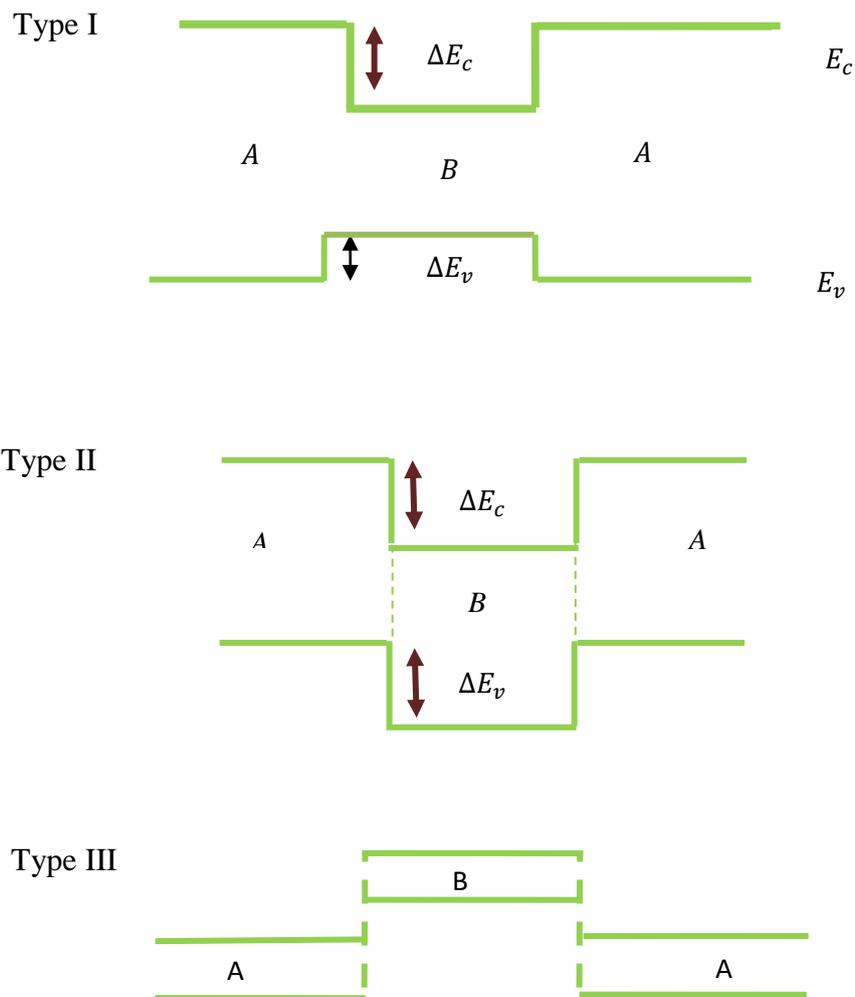


Figure.1.10.Les différents types de puits quantiques

1.5. Les décalages de bandes ΔE_C et ΔE_V :

Le décalage des bandes dans un puits quantique (voir figure 1.10) est donné par les équations (1.2) et (1.3).

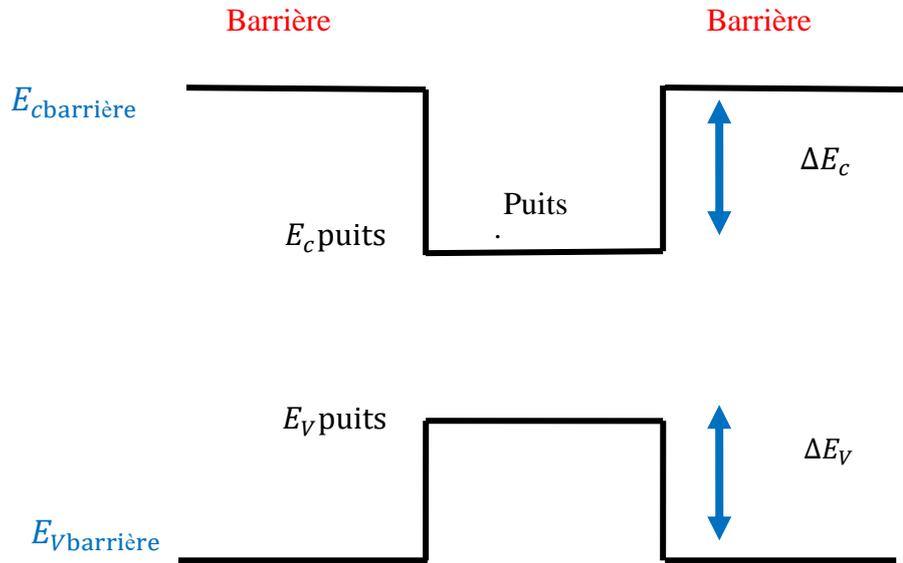


Figure 1.11. Décalage de bande ΔE_C et ΔE_V .

$$\Delta E_C = E_{cbarrière} - E_{cpuits} \quad (1.2)$$

$$\Delta E_V = E_{Vbarrière} - E_{Vpuits} \quad (1.3)$$

1.6. Taux de confinement :

Ce paramètre indique la quantité des porteurs (trous et électrons) confinés dans la bande de conduction et la bande de valence, respectivement. Il est déterminé par les équations suivantes:

$$Q_c = \frac{\Delta E_C}{\Delta E_C + \Delta E_V} \quad (1.4)$$

$$Q_V = \frac{\Delta E_V}{\Delta E_C + \Delta E_V} \quad (1.5)$$

1.7. Equation de Schrödinger dans le puits quantique:

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

$$\frac{-\hbar^2}{2m^*} \psi(z) + V(z)\psi(z) = E\psi(z) \quad (1.6)$$

Où :

m^* : La masse effective des porteurs.

V : L'énergie potentielle.

E : L'énergie totale de l'électron.

ψ : La fonction d'onde et $\hbar = h/2\pi$, où h la constante de Planck.

Les fonctions d'ondes correspondant à ces énergies se composent d'une sinusoïde dans le puits associée à une exponentielle décroissante dans les barrières. De l'écriture des conditions de raccordement des fonctions d'ondes et de leurs dérivées ($1/m^*$) $d\psi/dz$ qui doivent être continues aux interfaces $z=0$ et $z=L_p$, on aboutit dans le cas de puits finis à la forme suivante de la fonction enveloppe des états liés [11] :

$$\psi = \begin{cases} A \exp(k_1 z) & (z \leq 0) \\ B \exp(k_2 z + \delta) & (0 \leq z \leq L_p) \text{ avec} \\ C \exp(-k_1 z) & (z \geq L_p) \end{cases} \quad \begin{cases} k_1 = \left[\frac{2m^* (V - E_n)}{\eta^2} \right]^{1/2} \\ k_2 = \left[\frac{2m^* E_n}{\eta^2} \right]^{1/2} \end{cases} \quad (1.7)$$

où A , B , C et δ sont des constantes.

et à l'équation aux valeurs propres donnée par l'expression [11]:

$$\begin{cases} \tan \\ -\cot \end{cases} \left[\frac{L_p \sqrt{2m_w E_n}}{2\eta} \right] = \frac{m_b}{m_w} \sqrt{\frac{V - E_n}{E_n}}, \quad \begin{cases} n, \text{ paire} \\ n, \text{ impaire} \end{cases} \quad (1.8)$$

Où L_p la largeur de la zone active, m_w et m_b 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 :

$$V = Q.\Delta E_g \text{ avec } \Delta E_g = E_{gbar} - E_g \quad (1.9)$$

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

1.8. Masse effective dans le vide:

1.8.1. Masse effective des électrons:

Dans la bande de conduction un électron est caractérisé par une fonction d'onde qui représente la somme d'ondes de Bloch d'orbitale anti liante. En terme corpusculaire, c'est une particule dans un potentiel cristallin. On représente cette particule quasi-libre de charge (e^-) et de masse m_e^* par la notion masse effective de l'électron.

La masse effective des électrons est inversement proportionnelle à la dérivée seconde de la courbe de dispersion de l'énergie dans l'espace k :

$$\frac{1}{m_e^*} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E(\vec{k})}{\partial K^2} \quad (1.10)$$

Dans le cas d'un semi-conducteur à gap direct, la bande de conduction est uni vallée, centrée en $k=0$ et isotrope au voisinage de $k=0$. Si on appelle E_c l'énergie minimum, l'expression $E(k)$ s'écrit :

$$E(k) = E_c + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e^*} \quad (1.11)$$

Ainsi l'électron au voisinage du minimum de la bande de conduction se comporte comme un électron libre de masse m_e^* .

Dans la mesure où la courbure de la bande de conduction varie peu au voisinage du minimum, la masse effective est constante et par suite l'énergie $E(k)$ varie quadratiquement en fonction du vecteur d'onde k .

Cette loi de variation constitue ce que l'on appelle l'approximation des bandes paraboliques. Lorsque l'énergie cinétique des électrons devient très importante, l'électron s'éloigne de E_c dans l'espace des énergies, sa masse varie et l'approximation parabolique

n'est plus justifiée. Dans le cas d'un semi-conducteur à gap indirect, la bande de conduction est multi vallée et anisotrope avec plusieurs minima équivalents situés en différents points de la zone de Brillouin. Les surfaces d'énergies constantes au voisinage du minimum $k=0$, sont des ellipsoïdes.

1.8. 2.Masse effective des trous:

La masse effective des trous est définie comme celle des électrons, cependant 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.

Pour les trous lourds :

$$m_{hh} = \frac{m_0}{\gamma_1 + 2\gamma_2} \quad (1.12)$$

Pour les trous légers :

$$m_{lh} = \frac{m_0}{\gamma_1 - 2\gamma_2} \quad (1.13)$$

γ_1 et γ_2 sont les paramètres de Luttinger.

1.9. Contrainte :

Lorsque l'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, évidemment ces deux matériaux doivent avoir la même structure cristalline ainsi que des paramètres de maille voisins, 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. La déformation est soit un allongement "couches en tension", soit un rétrécissement "couche en compression. Dans le cas d'une couche épitaxiée plus épaisse, la déformation de la maille du matériau va se rattrapé par la génération de dislocations à l'interface de la croissance.

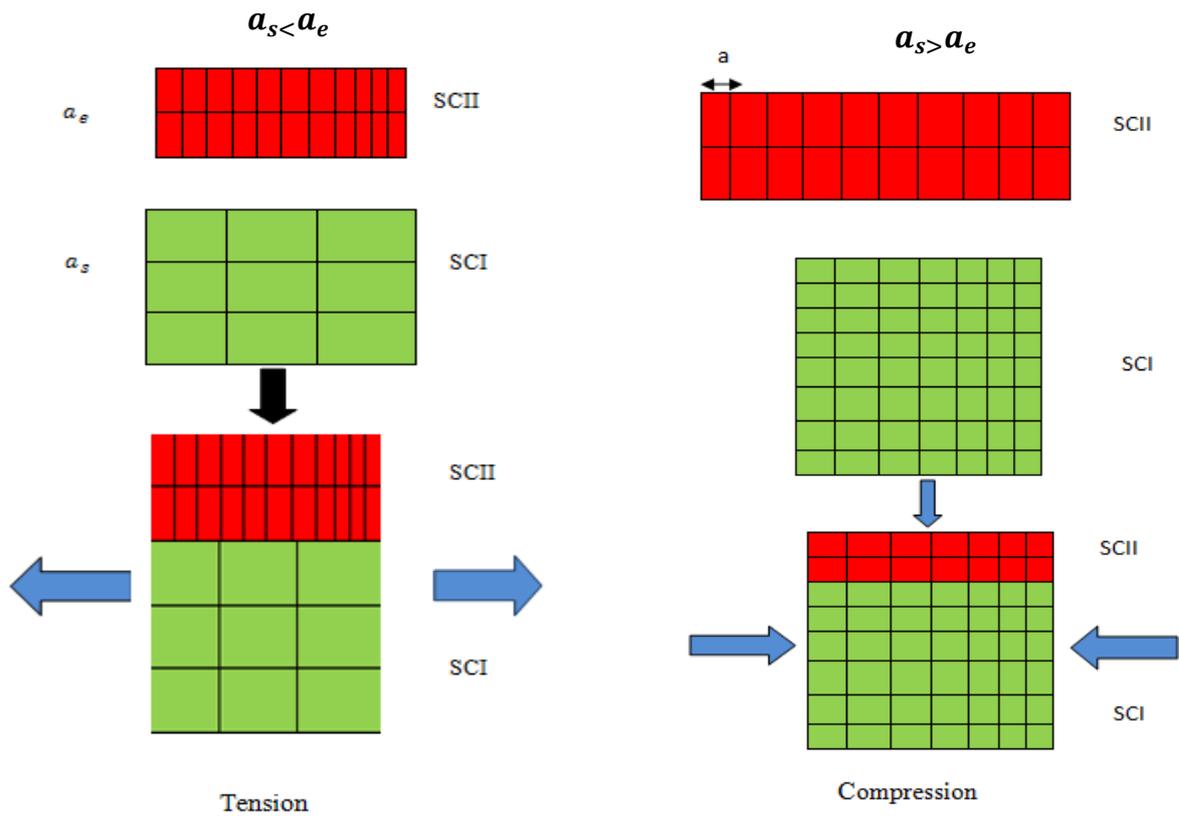


Figure 1.12. Illustration de deux types de déformation, couche en tension et couche en compression.

Cette différence de maille provoque une déformation de la couche épitaxiée, soit en extension, ou en compression (voir figure 1.12) par des déformations biaxiales (ϵ_{xx} et ϵ_{yy}) et uniaxiales (ϵ_{zz}).

- Biaxiale dans le plan de croissance:

$$\epsilon_{//} = \epsilon_{xx}(x) = \epsilon_{yy}(x) = \frac{a_s - a_e(x)}{a_e(x)} \quad (1.14)$$

- Uni-axiale dans la direction de croissance:

$$\epsilon_{\perp} = \epsilon_{zz}(x) = -2 \frac{c_{12}(x)}{c_{11}(x)} \epsilon_{xx}(x) \quad (1.15)$$

a_s : le paramètre de maille du substrat.

a_e : le paramètre de maille de la couche épitaxiée.

C_{ij} : les coefficients d'élasticité.

1.10. Energie de gap :

L'énergie de gap E_g est la quantité d'énergie nécessaire à un électron pour passer de la bande de valence à la bande de conduction lorsque celui-ci est soumis à une excitation. Le gap énergétique pour la plupart des alliages ternaires est approximativement donné sous la forme d'une fonction quadratique, tel que sera le cas pour notre structure:

$$E_g(GaAs_xP_{(1-x)}) = x.E_g(GaAs) + (1-x)E_g(GaP) - C.x.(1-x) \quad (1.16)$$

C : le paramètre de courbure (paramètre de Bowing).

L'énergie de bande interdite varie avec la température, selon une loi empirique (la loi de Varshni), dont l'expression est la suivante [12]:

$$E_g(T) = E_g(0K) - \frac{\alpha T^2}{\beta + T} \quad (1.17)$$

α et β sont les paramètres semi empiriques de Varshni.

1.11. Effet de la contrainte sur le gap d'énergie:

L'effet de la contrainte sur les bandes de valence et de conduction peut être décomposé en deux composantes :

- ❖ Une composante hydrostatique, qui diminue l'énergie de la bande interdite.
- ❖ Une composante de cisaillement qui a pour effet de lever la dégénérescence trous lourds, trous légers du haut de la bande de valence figure 1.13, [11].

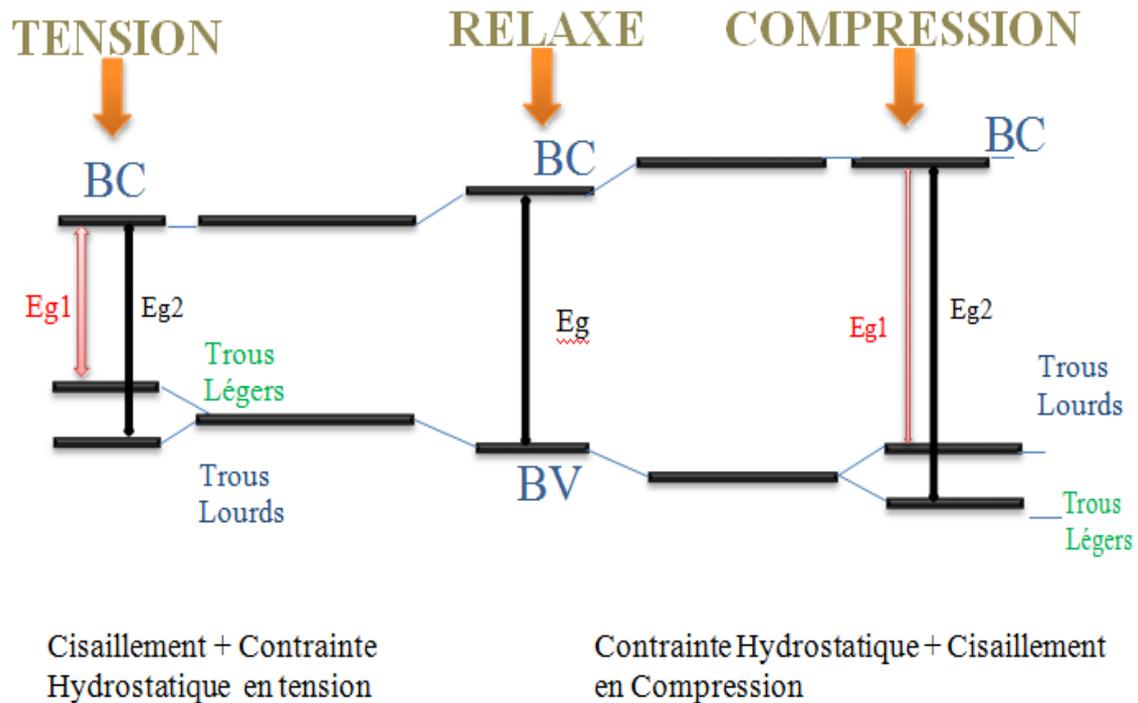


Figure 1.13. Évolution de l'énergie de la bande interdite en fonction de l'état de contrainte d'une couche déposée sur un substrat [11].

1.12. Epaisseur critique h_c :

L'épaisseur au-delà de laquelle la couche épitaxiée 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 épitaxiée est supérieure à 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.

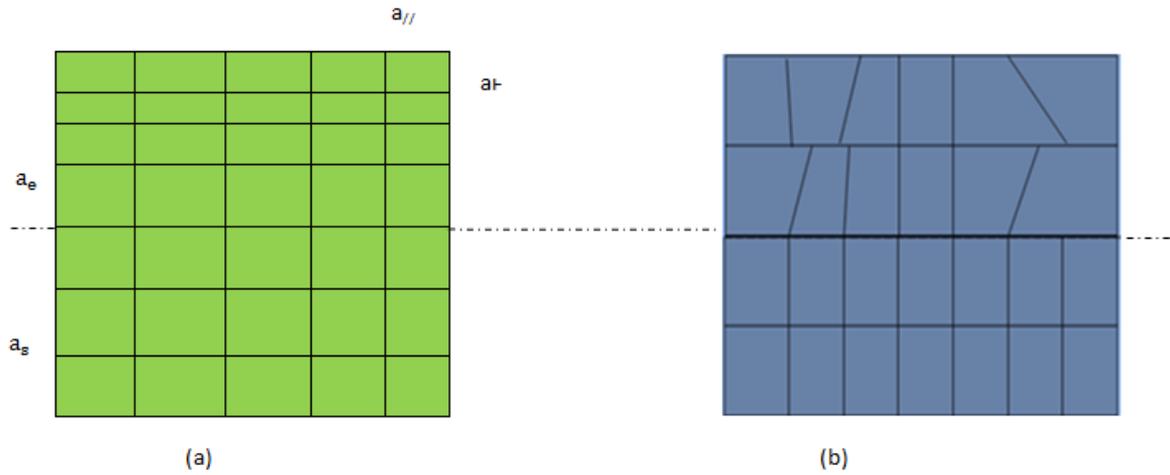


Figure 1.14. Schéma montrant une couche contrainte(a) en compression (b) et une autre couche contrainte relaxée.

Dans notre calcul, nous avons utilisé le modèle le plus classique, celui de *Matthew-Blakeslee*, qui traite le cas d'un matériau faiblement désaccordé par rapport au substrat (désaccord de maille <2%). La valeur de l'épaisseur critique h_c qui en résulte dans le cas d'un matériau de la structure zinc blende épitaxié sur la surface donnée par l'équation suivante:

$$h_c = \frac{a_e}{\beta \cdot \sqrt{2} \cdot 2\pi \cdot \Delta a} \times \frac{1 - (0.25 \cdot \gamma)}{1 + \gamma} \ln \frac{h_c \cdot \sqrt{2}}{a_e} + 1 \quad (1.18)$$

Δa : Le désaccord paramétrique qui est donné par :

$$\Delta a = \frac{a_e - a_s}{a_s} \quad (1.19)$$

γ : Le coefficient de Poisson qui est donné par :

$$\gamma = \frac{C_{12}}{C_{11} + C_{12}} \quad (1.20)$$

Où, C_{11} et C_{12} sont les constantes d'élasticité obtenues par interpolation linéaire.

a_e : Paramètre de maille de la couche relaxée.

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

Tableau 1.3. Les valeurs de β pour différent types de puits quantique.

Structure	Puits quantiques	Super réseaux
Valeur de β	2	1

1.13. Interaction rayonnement lumineux-Semi-conducteur:

Les trois processus d'interaction entre le rayonnement et le semi-conducteur d'énergie de la bande interdite E_g (gap) étant:

1.13.1. L'absorption :

Un atome stable absorbe un photon (particule de lumière) et atteint un niveau d'énergie supérieur (voir figure 1.15),il est alors excité.

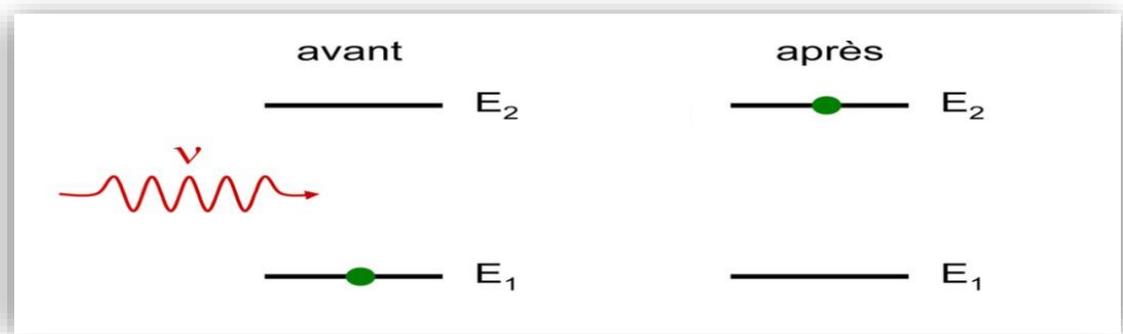


Figure1.15:Illustration du processus d'absorption.

1.13.2. L'émission Spontanée :

C'est la situation inverse par rapport au premier cas un atome excité retombe spontanément sur un niveau d'énergie inférieur en émettant de la lumière (voir figure 1.16).

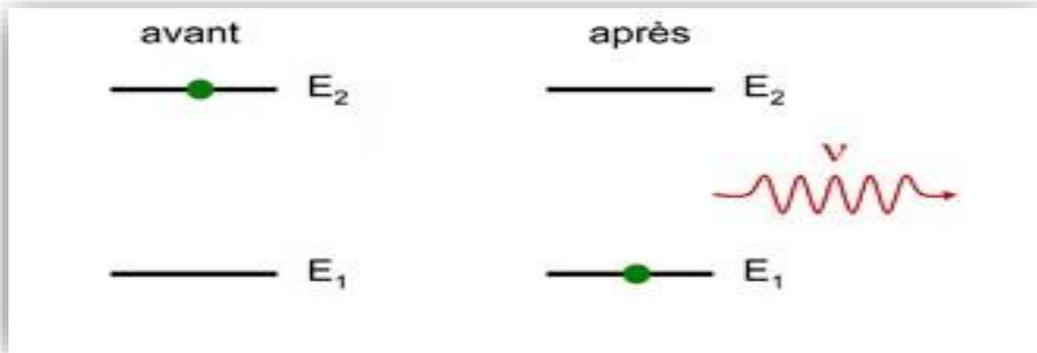


Figure1.16.Illustration du processus d'émission spontanée.

1.13.3. L'émission stimulée:

Dans ce cas et sous certaines conditions, 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 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 1.17).

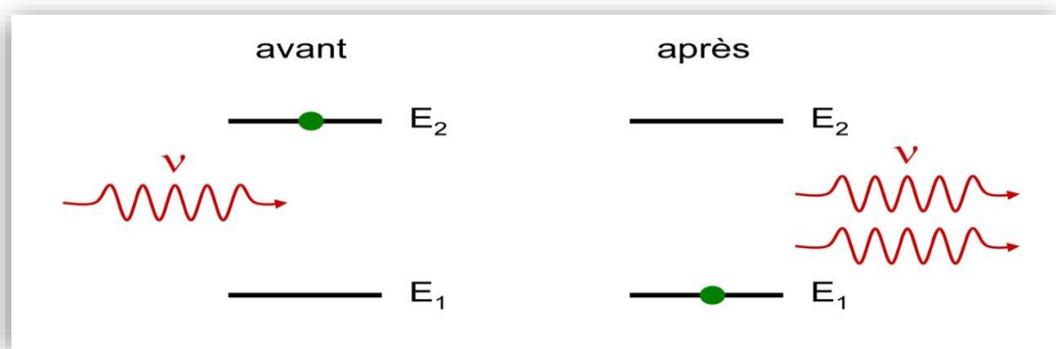


Figure1.17: Illustration du processus d'émission stimulée.

1.13.4. Le gain optique:

Le gain d'un matériau par unité de longueur est défini par le taux décroissance de la densité des photons pendant leurs propagations suivant une direction dans le cristal.

$$g(h\nu) = \sum_n \sum_m \left(\frac{q^2 h}{2m_0^2 \varepsilon_0 n_r} \right) \left(\frac{1}{h\nu} \right) |M(E_{i,j})|^2 D_r(E_{i,j}) (f_j - f_i) \quad (1.21)$$

ε_0 : La permittivité du vide.

m_0 : La masse effective de l'électron dans le vide.

n_r : Indice de réfraction.

f_j et f_i : Sont les fonctions de fermi des Fermi Dirac pour les bandes de conduction et de valence

M : L'élément de la matrice optique du dipôle.

$D_r(E_{i,j})$: Une fonction exprimant l'élargissement de transition.

1.14. Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons présenté les principales notions relatives aux matériaux semi-conducteurs et en particulier les semi-conducteurs III-V. Nous avons d'abord présenté quelques notions, concernant la structure de bande d'énergie. Nous avons également présenté la contrainte, les différents types des puits quantiques, ainsi que l'équation de Schrödinger. Tout cela nous mènera à bien comprendre la théorie avant de passer à la partie simulation. Dans le chapitre suivant, nous allons simuler la structure à puits quantique GaAsP/GaP afin de pouvoir étudier les propriétés optoélectroniques de ces structures.

Chapitre 2 : résultats et discussion

2.1. Introduction:

Dans ce chapitre nous allons aborder de près l'étude de notre structure à puits quantique GaAsP/GaP. A l'aide d'une simulation numérique nous allons, nous intéresser à ses caractéristiques tant que propriétés optoélectroniques et les nombreux avantages qu'elles présentent.

Nous allons présenter l'effet de la contrainte créée entre le substrat et la couche active ainsi que l'ajout de l'arsenic sur les différents paramètres structuraux comme le paramètre de maille, l'épaisseur critique, l'énergie de gap, etc...

Dans la deuxième partie, on s'intéresse à un paramètre très important qui sera le gain optique.

2.2. Paramètre de maille:

Pour déterminer l'effet de l'arsenic sur le paramètre de maille de la structure GaAs_xP_{1-x}/GaP, nous avons varié la concentration de l'arsenic entre les deux valeurs 0 et 0.4. La figure (2.1) représente la variation du paramètre de maille de la structure GaAsP/GaP en fonction des concentrations de l'Arsenic.

Le paramètre de maille du ternaire GaAsP est obtenu par la loi de Végard et cela en utilisant les paramètres de maille des binaires GaAs et GaP comme l'indique l'équation (2.1):

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

On constate que le paramètre de maille du GaAsP augmente en augmentant la concentration de l'arsenic.

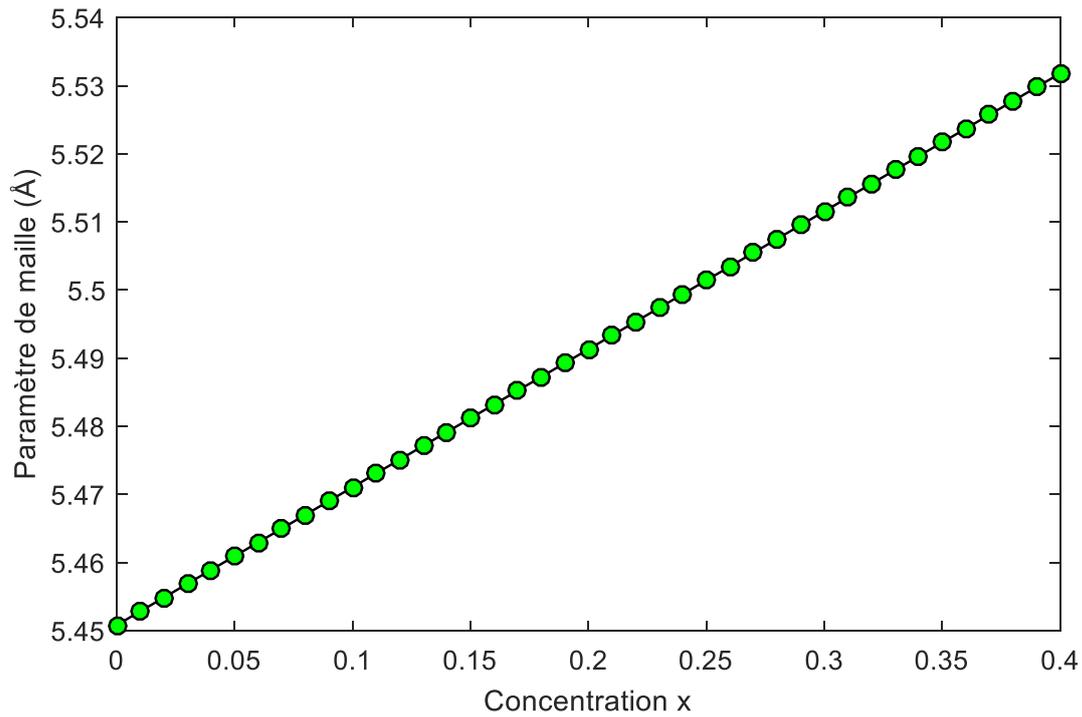


Figure 2.1. Variation du paramètre de maille de la structure $\text{GaAs}_x\text{P}_{1-x}/\text{GaP}$ en fonction de la concentration de l'arsenic.

On présente dans le tableau 2.1, les valeurs des paramètres de maille des binaires de l'alliage GaAsP.

Tableau 2.1. Paramètre de maille des différents binaires [13].

Binaire	GaAs	GaP
Paramètre de maille $a(\text{Å})$	5.6533	5.4505

2.3. Contrainte:

La figure (2.2) montre la variation de la déformation en fonction de la concentration de l'arsenic. On voit que la déformation uniaxiale ϵ_{zz} croît avec l'augmentation de l'arsenic. Par

exemple, si la concentration de l'arsenic est égale à $As=0.15$, la valeur de la contrainte uniaxiale sera $\epsilon_{zz}=0.5\%$. Alors que si la concentration d'arsenic est égale à $As=0.4$, la valeur de la contrainte uniaxiale est de $\epsilon_{zz} = 1.25\%$. Par contre, l'augmentation de la concentration d'arsenic aura un effet contraire sur la déformation biaxiale ϵ_{xx} comme on peut le voir sur la figure (2.2). La contrainte est de type compression.

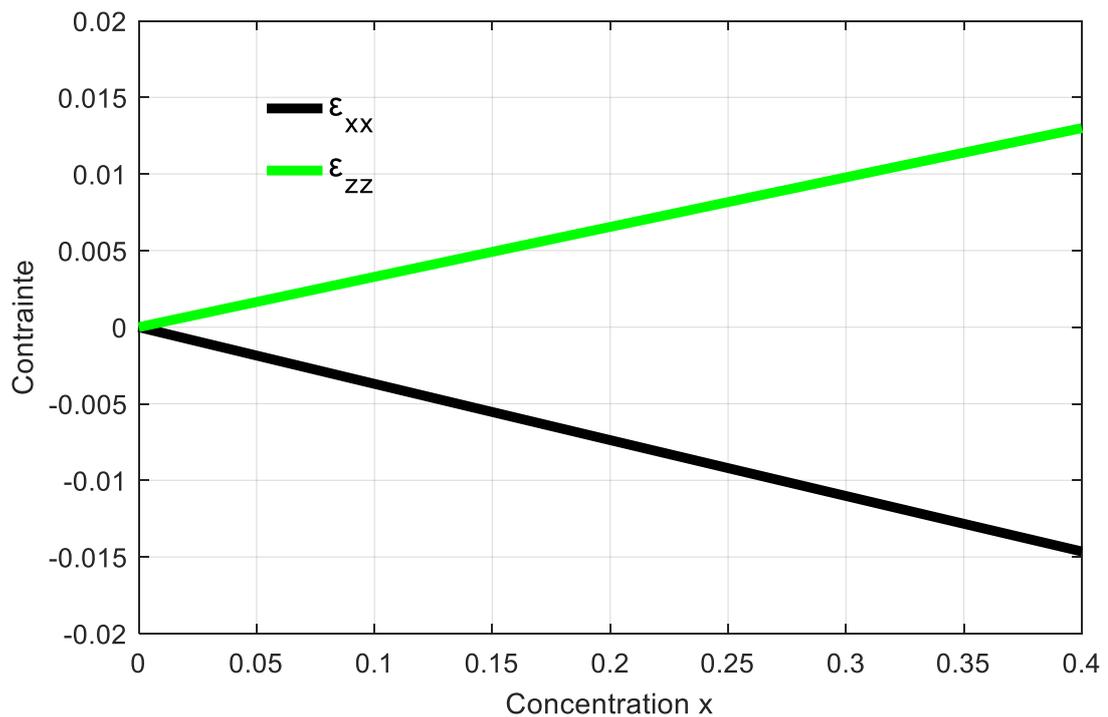


Figure 2.2. Variation de la contrainte en fonction de la concentration de l'Arsenic.

2.4. L'épaisseur critique:

Pour calculer l'épaisseur critique h_c de la couche active $GaAs_xP_{1-x}$ épitaxié sur un substrat de GaP, on utilise le modèle de Matthews et Blackeslee.

La figure (2.3) décrit la variation de l'épaisseur critique de l'alliage GaAsP en fonction des concentrations de l'Arsenic.

On constate que si on augmente la concentration de l'arsenic l'épaisseur critique subira une diminution.

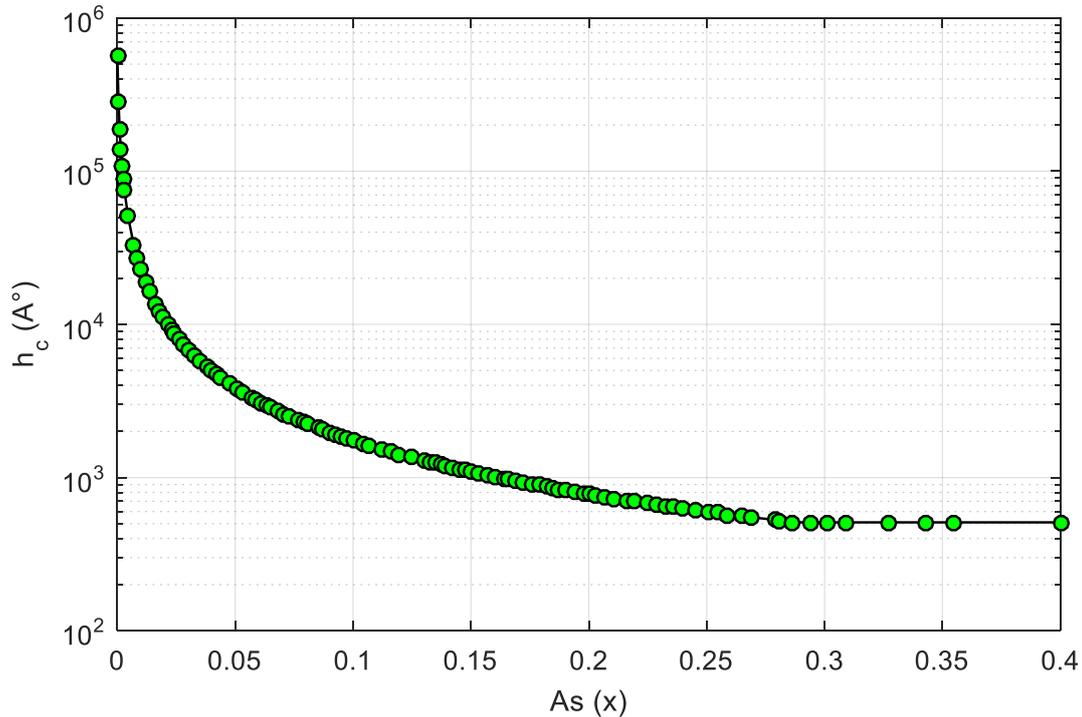


Figure 2.3. Variation de l'épaisseur critique de la structure $\text{GaAs}_x\text{P}_{1-x}/\text{GaP}$ en fonction de la concentration d'arsenic.

2.5.Énergie de la bande interdite :

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 (2.4) 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.

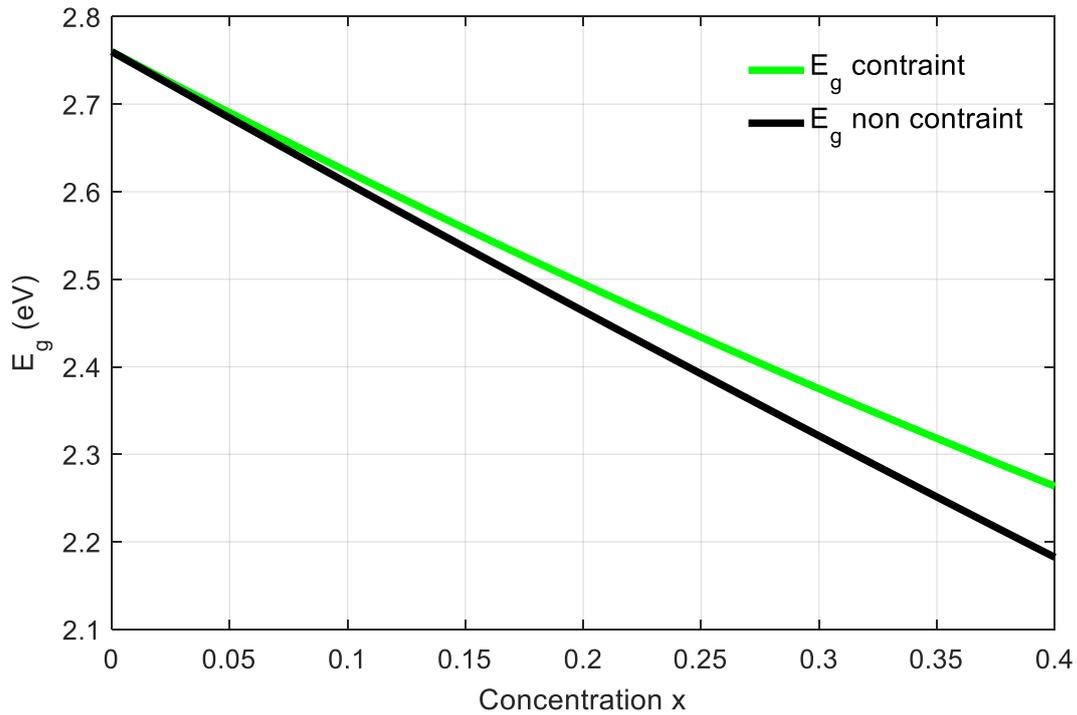


Figure 2.4. Variation de l'énergie de gap du $\text{GaAs}_x\text{P}_{1-x}$ en fonction de la concentration du l'arsenic.

2.6. Effet de la température sur l'énergie de gap:

Pour déterminer l'effet de la température sur l'énergie de gap de la structure $\text{GaAs}_x\text{P}_{1-x}/\text{GaP}$, nous avons utilisé la loi empirique de Varshni.

Nous avons acquis la courbe représentative dans la figure 2.5, qui montre l'évolution de l'énergie de gap en fonction de la température à base de $\text{GaAs}_x\text{P}_{1-x}$ pour différentes concentrations d'arsenic.

On remarque que l'énergie de gap diminue avec l'augmentation de la température et la concentration d'arsenic. Si on prend une concentration d'arsenic égale à As=5% pour une température égale à $T=50\text{K}$, la valeur d'énergie de gap sera $E_g=2.702\text{ eV}$. Alors, que si on prend une valeur d'arsenic égale à As=25% pour la même température, l'énergie de gap $E_g=2.4\text{ eV}$. Pour les mêmes concentrations d'arsenic mais pour une température de $T=300\text{ K}$, la valeur de l'énergie de la bande interdite sera, respectivement, de 2.627 eV et 2.323 eV .

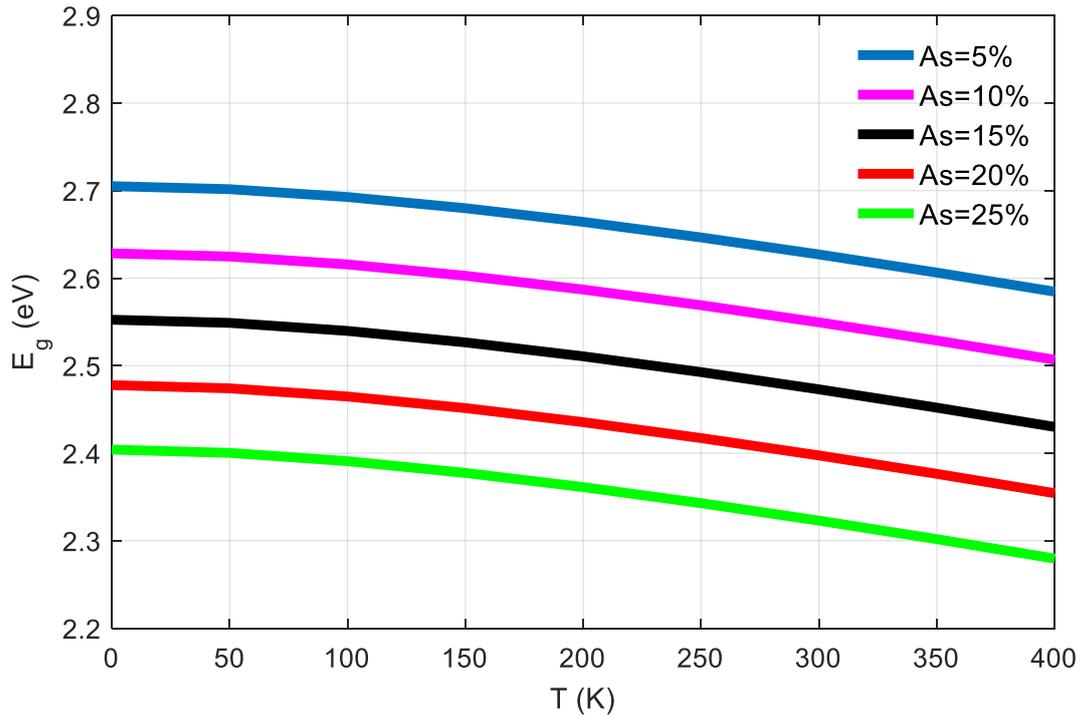


Figure 2.5. Variation de l'énergie de gap $\text{GaAs}_x\text{P}_{1-x}$ en fonction de la température.

2.7. La masse effective des porteurs :

La masse effective des porteurs m_p^* du ternaire GaAsP est obtenue par la loi de Végard et cela en utilisant les masses effectives des binaires GaAs et GaP comme l'indique l'équation (2.3):

$$m_p^* \text{GaAsP} = x \cdot m_p^* (\text{GaAs}) + (1 - x) \cdot m_p^* (\text{GaP}) \quad (2.3)$$

L'indice p désigne les notations suivantes e , HH et LH, ce qui reflète, respectivement, les électrons, les trous lourds et les trous légers.

Tableau 2.2. Masse effective des porteurs pour les binaires GaP et GaAs [13].

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

La figure (2.6) illustre la variation des masses effectives des porteurs en fonction de la concentration de l'arsenic. 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.

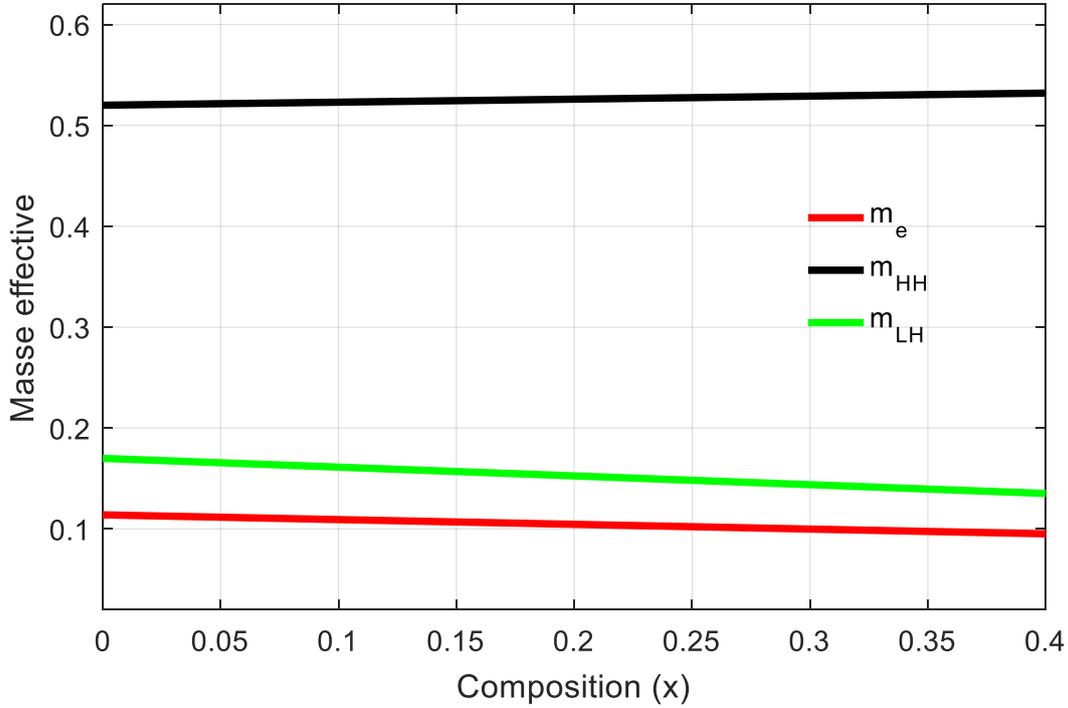


Figure 2.6. Variation de la masse effective en fonction de la concentration d'arsenic du GaAsP.

2.8. Les alignements de bandes ΔE_c et ΔE_v :

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 BC et de la BV varient proportionnellement à la contrainte.

$$\Delta E_{vmoy}^{hyd} = a_v (2\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{zz}) \quad (2.4)$$

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

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

Tableau 2.3. Potentiels de déformation pour GaAs et GaP [13].

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

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

$$\Delta E_{hh}^{Sh} = -\frac{1}{2}\delta E^{Sh} \quad (2.6)$$

$$\Delta E_{lh}^{Sh} = -\frac{1}{2}\Delta + \frac{1}{4}\delta E^{Sh} + \frac{1}{2}\left[\Delta^2 + \Delta \cdot \delta E^{Sh} + \frac{9}{4}(\delta E^{Sh})^2\right]^{1/2} \quad (2.7)$$

$$\delta E^{Sh} = 2b(\varepsilon_{zz} - \varepsilon_{xx}) \quad (2.8)$$

L'énergie E_v de la bande de valence est (Δ_0 et le décalage spin – orbite):

$$E_v = E_{vmoy} + \frac{\Delta_0}{3} + E_g + \Delta E_{vmoy}^{hyd} + \max(\Delta E_{lh}^{Sh}, \Delta E_{hh}^{Sh}) \quad (2.9)$$

L'énergie E_c de la bande de conduction est:

$$E_c = E_{vmoy} + \frac{\Delta_0}{3} + E_g + \Delta E_{vmoy}^{hyd} + \Delta E_c^{hyd} \quad (2.10)$$

Les décalages de bandes seront donc:

$$\Delta E_c = E_{cb} - E_{cp} \quad (2.11)$$

$$\Delta E_v = E_{vb} - E_{vp} \quad (2.12)$$

La figure (2.7) nous montre les décalages de la bande de conduction ΔE_c et 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.

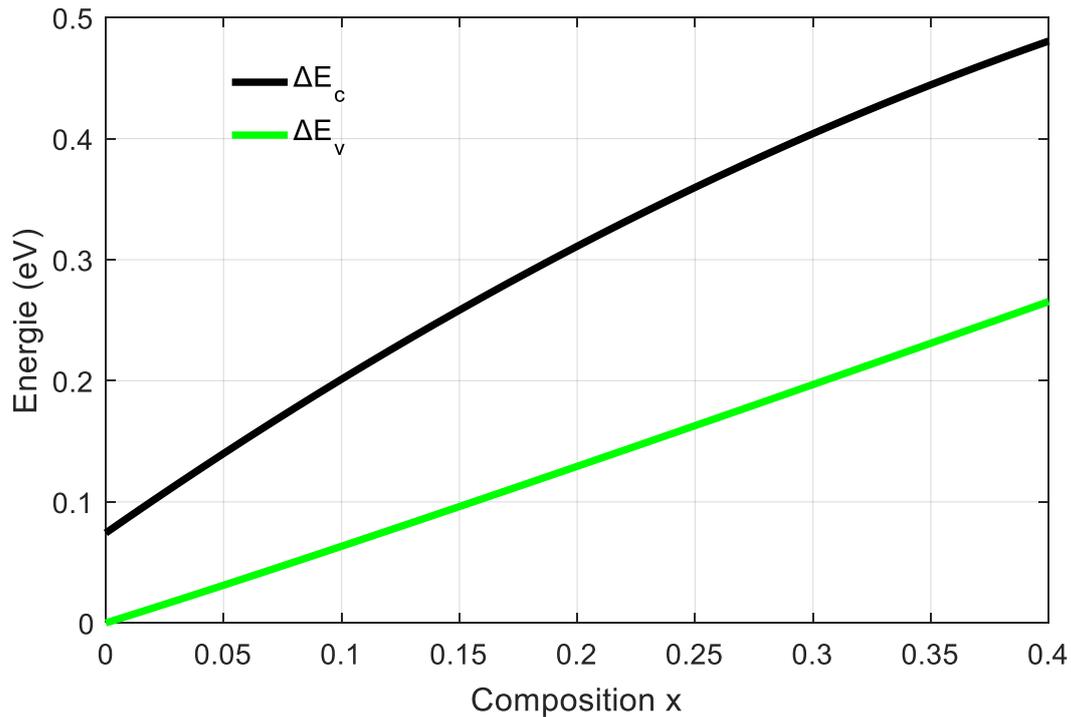


Figure 2.7. Décalage de la bande de conduction et de la bande de valence du GaAsP/GaP en fonction de la concentration d'arsenic.

2.9. Energie de confinement:

La résolution de l'équation de Schrödinger tel qu'on a vu dans le chapitre 1, nous donne les énergies de quantification des électrons. Cette évolution pour deux valeurs d'arsenic ($x = 0.15$ et $x = 0.35$).

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

Sur les figures 2.8 et 2.9, on peut voir que l'augmentation des fractions d'arsenic augmente l'énergie de quantification dans le puits, ainsi que le nombre de niveaux des électrons qui est de 4 pour 15% d'arsenic et 5 niveaux pour 35% d'arsenic.

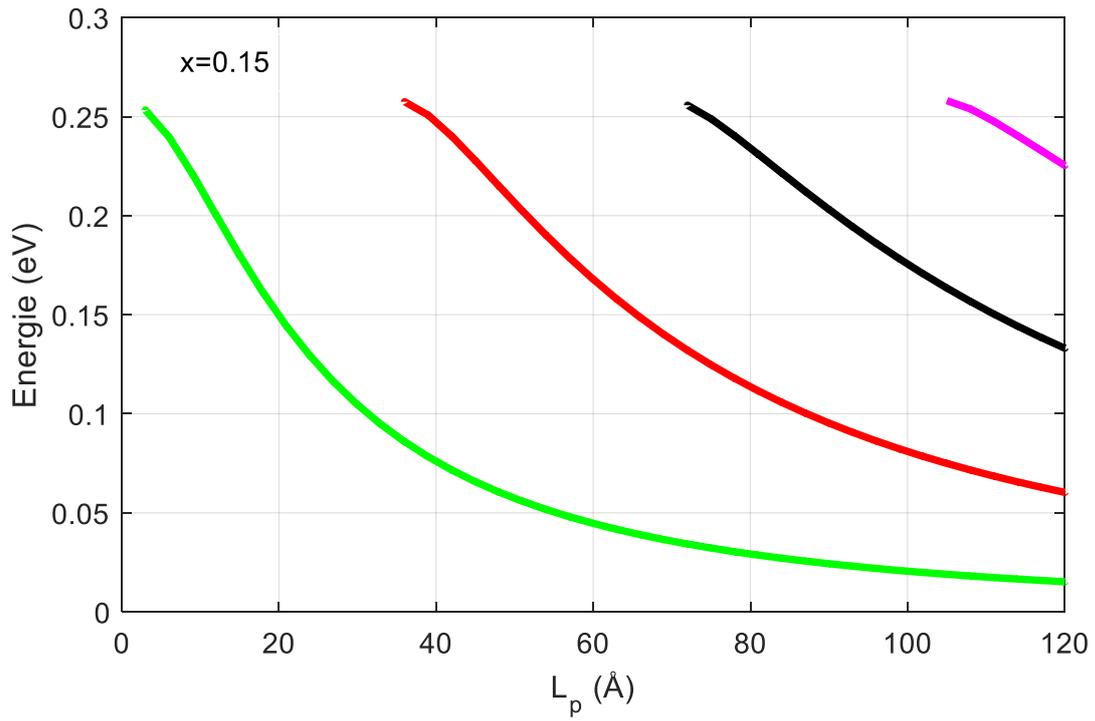


Figure 2.8. Evolution de l'énergie des électrons dans un puits quantique GaAs_{0.15}P_{0.85}/GaP en fonction de la largeur du puits

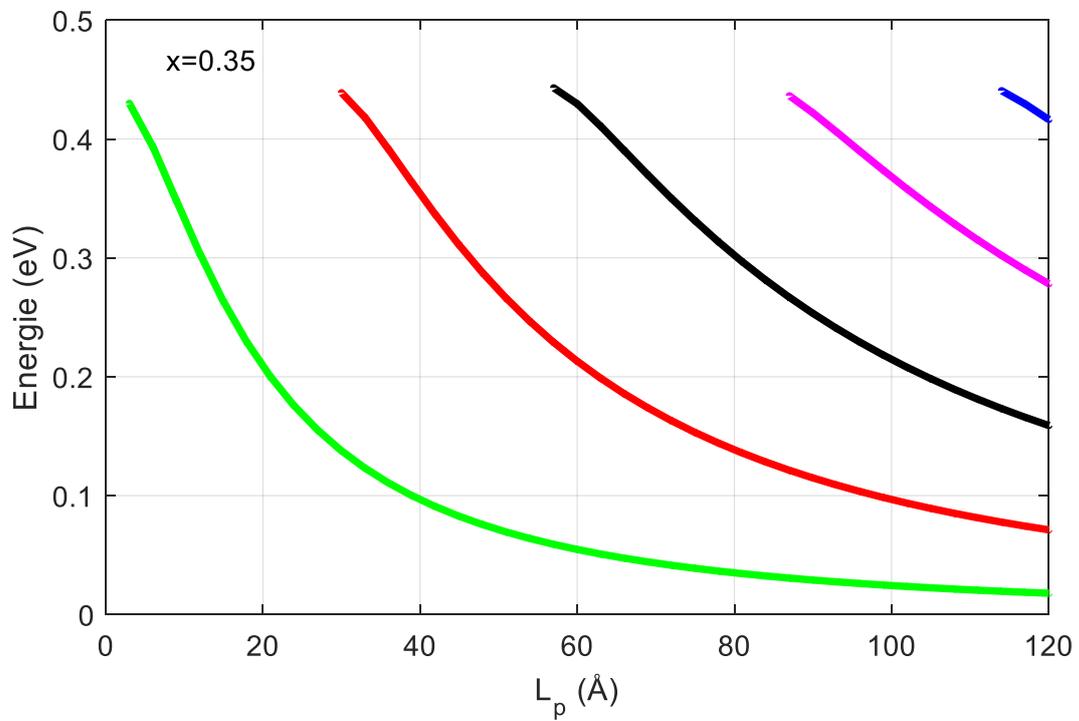


Figure 2.9. Evolution de l'énergie des électrons dans un puits quantique GaAs_{0.35}P_{0.65}/GaP en fonction de la largeur du puits

De même, nous avons fait pour les trous lourds et on pourra voir sur les figures 2.10 et 2.11 que l'augmentation du pourcentage d'arsenic accroît l'énergie de quantification des trous lourds.

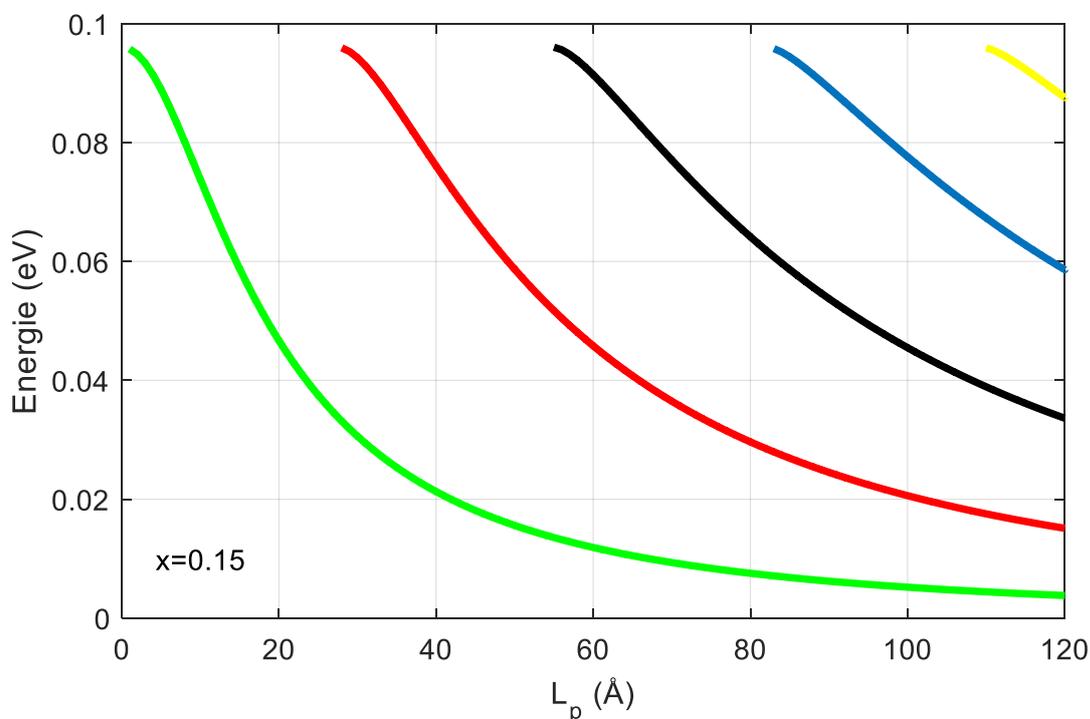


Figure 2.10. Evolution de l'énergie des trous lourds dans un puits quantique GaAs_{0.15}P_{0.85}/GaP en fonction de la largeur du puits.

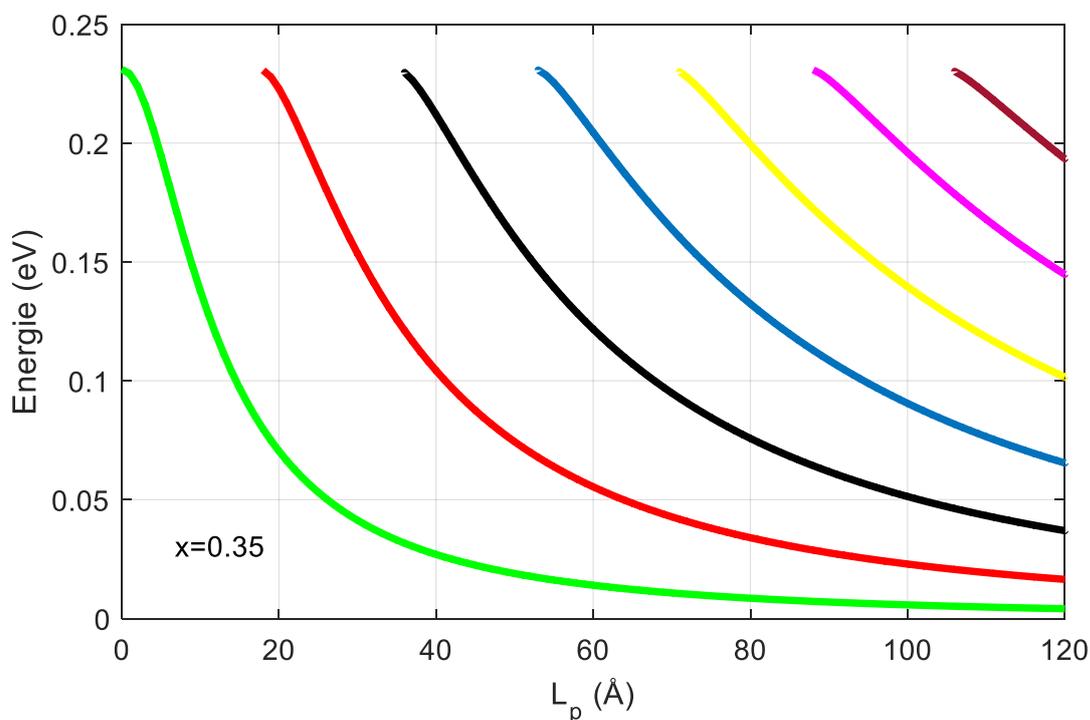


Figure 2.11. Evolution de l'énergie des trous lourds dans un puits quantique GaAs_{0.35}P_{0.65}/GaP en fonction de la largeur du puits.

2.10. Energie de transition et longueur d'onde:

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

$$E_{tr} = E_g^{cont} + E_{ne} + E_{hhn} \quad (2.13)$$

La longueur d'onde correspondante est:

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

Sur la figure 2.12, nous avons représenté l'énergie de transition entre le premier niveau des électrons et celui des trous lourds pour plusieurs valeurs d'arsenic.

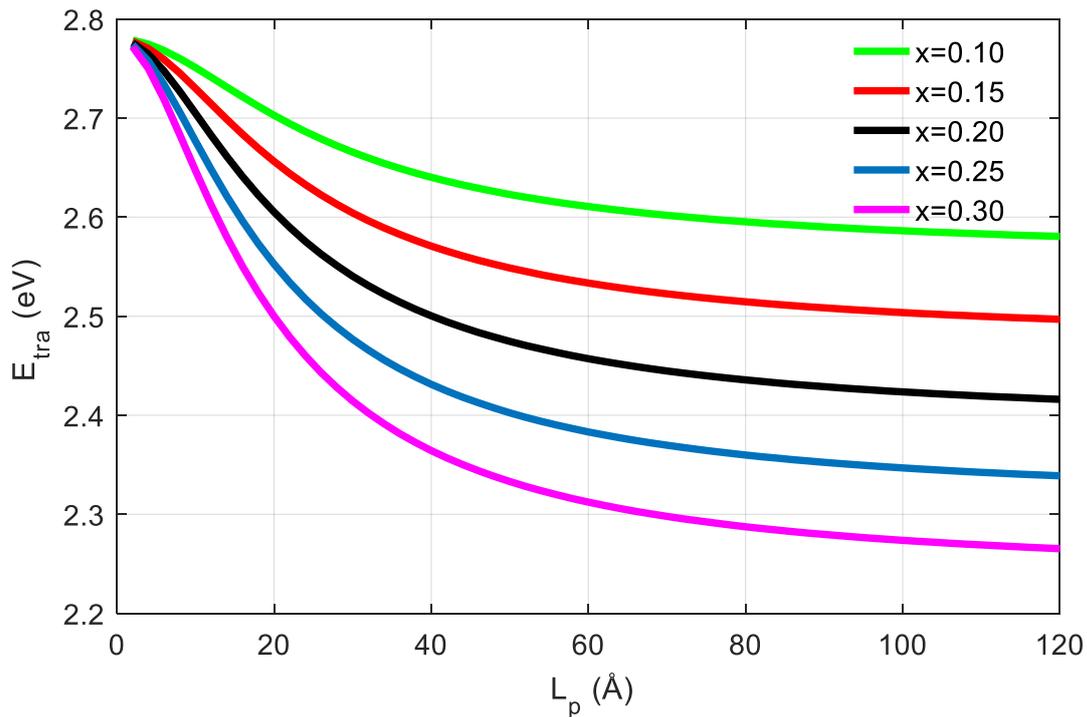


Figure 2.12. Evolution de l'énergie de transition dans un puits quantique GaAsP/GaP en fonction de la largeur du puits pour différentes valeurs d'arsenic.

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 sur la figure 2.13.

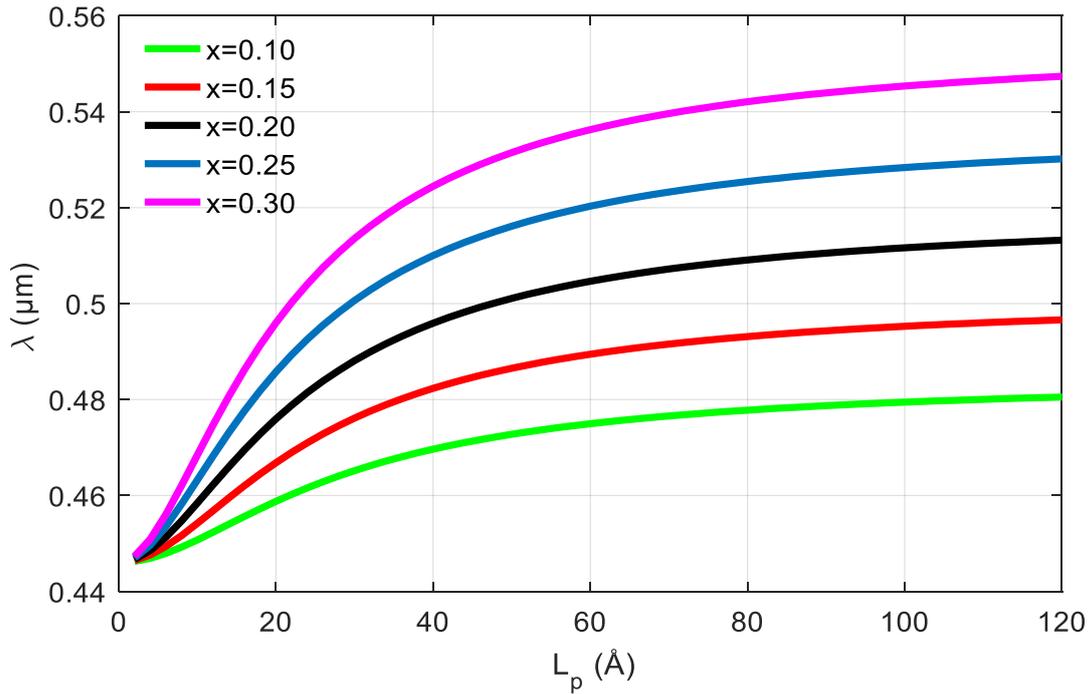


Figure 2.13. Evolution de l'énergie de transition dans un puits quantique GaAsP/GaP en fonction de la largeur du puits pour différentes valeurs d'arsenic.

2.11. Gain optique:

Sur la figure 2.14, on montre l'évolution du gain en fonction de la longueur d'onde pour différentes valeurs de l'arsenic, on remarque que le gain maximum augmente puis devient stationnaire et le spectre décale vers les grandes longueurs d'ondes.

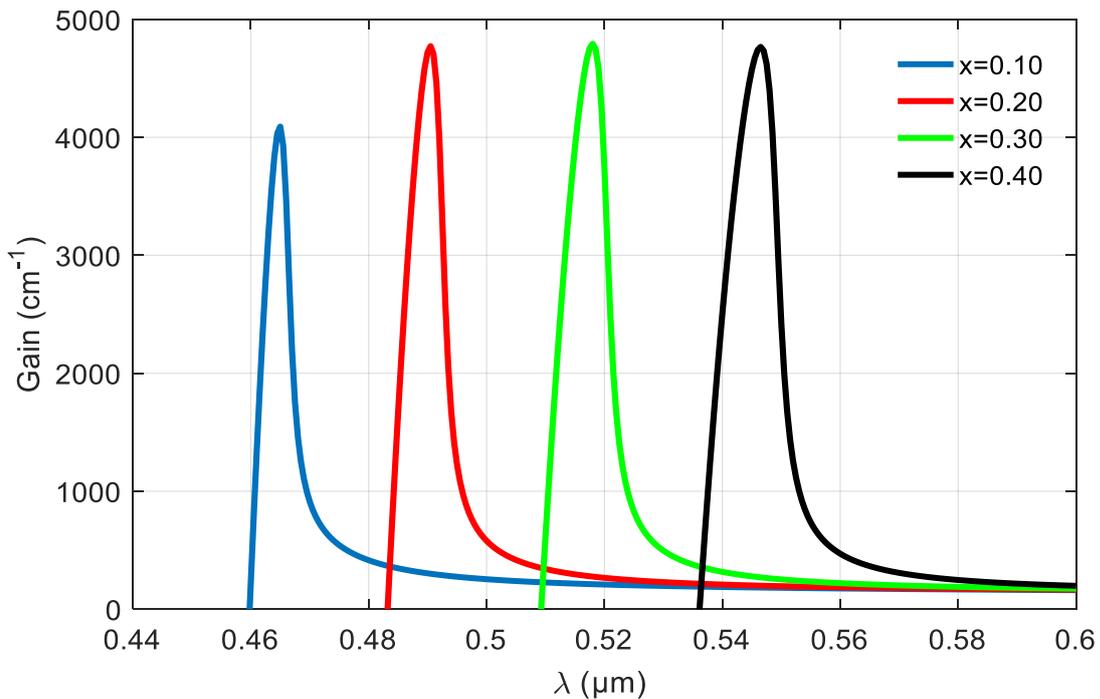


Figure 2.14. Evolution du gain optique pour différentes concentrations d'As en fonction de la longueur d'onde d'émission ($L_p=50\text{\AA}$, $T=300\text{K}$).

Sur les figures 2.15 et 2.16, on montre, respectivement, l'évolution du gain en fonction de la longueur d'onde pour différentes largeurs du puits et différentes températures.

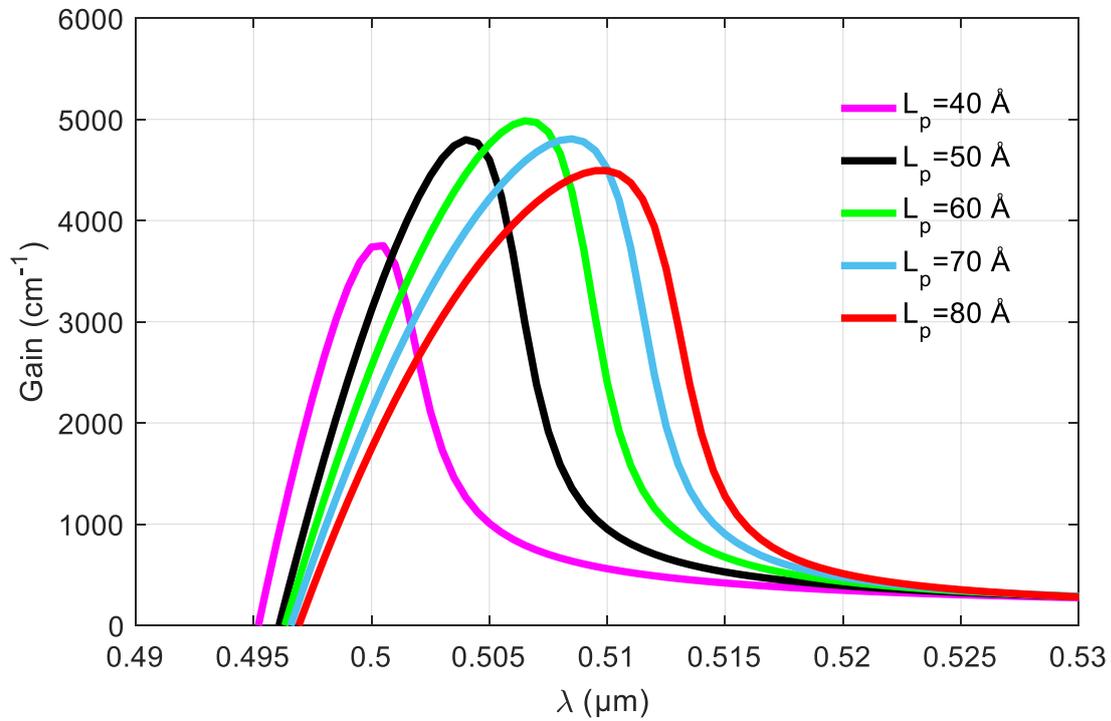


Figure 2.15. Evolution du gain optique pour différentes concentrations largeur du puits ($T=300\text{K}$, $x=25\%$).

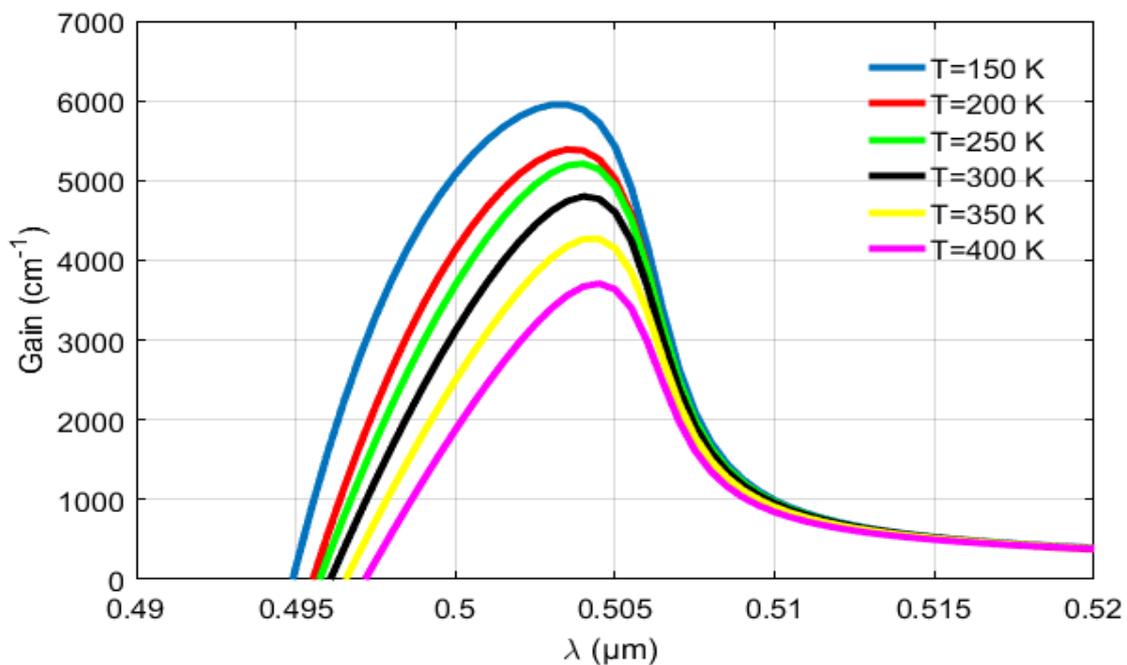


Figure 2.16. Evolution du gain optique pour différentes températures ($L_p=50\text{\AA}$, $x=25\%$).

2.12. 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 domaine de l'infrarouge proche.

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 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 matériaux ouvre un grand éventail de recherches de matériaux magiques, petits et rapides.

L'objectif de ce travail est d'étudier et de simuler les propriétés optoélectroniques d'une structure à puits quantiques contraint basé sur une structure à puits quantique GaAsP/GaP.

Cette structure se cristallise dans une structure zinc blende. L'ajout de l'arsenic augmente le paramètre de maille, la masse effective des trous lourds ainsi que les décalages des bandes. Alors que l'augmentation de la concentration de ce paramètre diminue la contrainte, la masse effective des électrons ainsi que les trous légers, l'énergie de la bande interdite.

Concernant l'énergie de confinement, l'addition de l'arsenic influe sur le nombre des niveaux énergétiques des différents porteurs. Nous avons aussi vérifié l'énergie de transition et nous avons constaté que l'arsenic mène à une diminution de l'énergie de transition ce qui mène à son tour à une augmentation de la longueur d'onde d'émission.

Le gain optique est affecté par la variation des différents paramètres tels que la concentration de l'arsenic, la largeur du puits quantique ainsi que la température.

L'utilisation de laser à base de puits quantique GaAsP/GaP émettant dans le proche infrarouge est largement répandue dans plusieurs domaines. On peut citer parmi ces applications surtout : la spectroscopie infrarouge, les applications pharmaceutiques, dans l'agronomie ainsi que les applications militaires.

Références

- [1] P. Lecoy, « Communications sur fibres optiques », 4 édition, Lavoisier, Paris, 2015.
- [2] R. Benahmad, « Composants optoélectroniques », e-Science, pp 1-17, Saida.
- [3] B. Khaled, « Etude de lasers à base de semi-conducteurs III-V », Thèse de Magister, Université Elhadj Lakhdar, Batna, 2011.
- [4] C. Kittel, « Introduction a la physique de l'état solide », Dunod, 1972.
- [5] G. Bastard, « Wave mechanics applied to semiconductor heterostructures », Les éditions de physique, 1988.
- [6] J.S. Blakemore, "Semiconducting and other major properties of gallium arsenide", J. Appl. Phys, V.53, R123-R186, October 1982.
- [7] T. Bouragba, « Propriétés optiques de puits quantiques GaInAsN/GaAs », Thèse de doctorat, université Blaise Pascal, Clermont-Ferrand II, France, 2006.
- [8] F. Karouta, H. Mani, J. Bhan, F. J. Hua et A. Joullie, « Croissance par épitaxie en phase liquide et caractérisation d'alliages $Ga_{1-x}In_xAs_ySb_{1-y}$ à paramètre de maille accordé sur celui de GaSb », Rev. Phys. Appl, V. 22, 1459-1467, Novembre 1987.
- [9] J. Martin, « Etude par épitaxie en phase vapeur aux organométalliques de la croissance sélective de nano-hétéro-structures de matériaux à base de GaN », Thèse de doctorat, Université Paul Verlaine - Metz, France, 2009
- [10] G. Tourbot, « Croissance par épitaxie par jets moléculaires et détermination des propriétés structurales et optiques de nanofils InGaN/GaN », Thèse de doctorat, Université de Grenoble, 2012.
- [11] A. Aissat, "Modélisation et Simulation du gain optique et du courant de seuil d'un laser à puits quantique contraint à base de $Ga_xIn_{1-x}N_yAs_{1-y}/GaAs$ », Thèse de doctorat, Université de Blida, 2007.
- [12] Y.P. Varshni, « Temperature dependence of the energy gap in semiconductors », Physica, V. 34, Issue 1, 1967, Pages 149-154
- [13] S. Adachi, « Three and ternary compounds » In: S. Kasap, P. Capper, (eds) Springer handbook of electronic and photonic materials. Springer, 2017.