

République Algérienne Démocratique et Populaire
Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche scientifique



Université SAAD DAHLEB Blida-1-

Institut d'Aéronautique et des Etudes Spatiales
IAES

Département de Navigation Aérienne
Option CNS/ATM

Mémoire de fin d'étude
Pour l'obtention du diplôme
Master en Aéronautique

Thème :

**Étude et simulation d'une structure à base
de semi-conducteurs III-V pour l'émission
dans l'infrarouge**

Présenté par :

Fethallah Sarah

Proposé par :

Pr. Aissat Abdelkader

Année universitaire : 2020-2021

المخلص

من أجل تحسين أداء مكون إلكتروني لزيادة معدلات المعلومات وتقليل عوامل الخسارة، قمنا بدراسة ومحاكاة ثلاثة هياكل تعتمد على انصاف النواقل III-V InGaAs/GaAs, InGaAs/InP et GaAsP/GaP. درسنا أولاً تأثير دمج الإنديوم والفسفور على المعلمات الشبكية للهيكليين النشطيين، كما قمنا بمحاكاة الإجهاد أحادي المحور وثنائي المحور للمواد الثلاثة. قمنا بتحسين تأثير درجة الحرارة وطاقة الشريط الممنوع على مختلف المعلمات البصرية والإلكترونية مثل الامتصاص ثلاثي الأبعاد، طاقة الشريط الممنوع، الحاجز المحتمل، وتظهر جميع نتائجهم أنه بالنسبة لتركيزات الإنديوم والفسفور المثالية، يمكن لهياكلنا الوصول إلى أطوال موجية قابلة للاستخدام في الاتصالات.

الكلمات المفتاحية: أنصاف النواقل III-V، ركيزة، ليزر، البئر الكمومية

Abstract

In order to improve the performance of an electronic component to increase information rates and decrease their loss factors, three III-V semiconductor structures have been studied and simulated, InGaAs/GaAs, InGaAs/InP and GaAsP/GaP. First, the effect of indium and phosphore incorporation on the lattice parameters of the two active structures was studied, and the uniaxial and biaxial lattice mismatches of the three materials was simulated. The impact of temperature and gap energy on the different optical and electronic parameters such as 3D absorption, gap and potential barrier has been optimized. All their results show that for optimal indium and phosphore concentrations, our structures can reach wavelengths exploitable in telecommunication.

Key words : Semiconductors III-V, substrate, epitaxy, quantum wells, laser

Résumé

Afin d'améliorer la performance d'un composant électronique pour augmenter les débits d'information et diminuer leurs facteurs de pertes, on a étudié et simulé trois structures à base de semi-conducteurs III-V, InGaAs/GaAs, InGaAs/InP et GaAsP/GaP. D'abord on a étudié l'effet de l'incorporation de l'indium et le phosphore sur les paramètres de maille des deux structures actives, on a aussi simulé la contrainte uniaxiale et biaxiale des trois matériaux. On a optimisé l'impact de la température et de l'énergie de gap sur les différents paramètres optiques et électroniques tels que l'absorption en 3D, le gap, la barrière de potentiel, tous leurs résultats montrent que pour des concentrations d'indium et de phosphore optimales, nos structures peuvent atteindre des longueurs d'onde exploitables en télécommunication.

Mots clés : semi-conducteurs III-V, substrat, épitaxie, Puits quantiques, laser

Remerciements

Au terme de ce travail, je tiens à exprimer ma profonde gratitude à notre cher professeur M. Aissat Abdelkader pour son suivi et pour son énorme soutien, qu'il n'a cessé de nous prodiguer tout au long de la période du projet.

Je tiens à remercier également mon co-promoteur M. Amraoui Rachid pour le temps qu'il a consacré et pour les précieuses informations qu'il m'a prodiguées avec intérêt et compréhension.

J'adresse aussi mes vifs remerciements aux membres des jurys pour avoir bien voulu examiner et juger ce travail.

Mes remerciements vont à toute l'équipe des doctorants que j'ai contacté durant la préparation de mon projet de fin d'étude au sein du laboratoire d'électronique, auprès desquelles j'ai trouvé l'accueil chaleureux, l'aide et l'assistance dont j'ai besoin.

Je ne laisserai pas cette occasion passer sans remercier M. Benhaya Directeur de laboratoire d'électronique avancée à l'Université de Batna 2 et M. Zakir M. Docteur à l'Université de Punjab pour leurs aides et leurs conseils judicieux.

Dédicace

Avec l'expression de ma reconnaissance, je dédie ce modeste travail à ceux qui, quels que soient les termes embrassés, je n'arriverais jamais à leur exprimer mon amour sincère.

À ma très chère mère

Quoi que je fasse ou que je dise, je ne saurai point te remercier comme il se doit. Ton affection me couvre, ta bienveillance me guide et ta présence à mes côtés a toujours été ma source pour affronter les différents obstacles.

À mon très cher père

Tu as toujours été à mes côtés pour me soutenir et m'encourager. Que ce travail traduit ma gratitude et mon affection.

À mon très cher frère Abderrahmane pour ses conseils précieux tout au long de mes études

À ma très chère amie Badra

Ton amitié est une véritable chance, je te remercie de m'avoir aidé durant les moments difficiles

À mes chères copines Chiraz, Ikram et Ghania pour leurs soutiens et leurs patiences infinies

Fethallah Sarah,

Listes des acronymes et Abréviations :

Ga : Gallium.

In : Indium.

As : Arsenic.

P : Phosphore.

x : Concentration d'indium ou de phosphore.

E_g : Énergie de la bande interdite.

lh : Trous Lourds.

hh : Heavy holes.

E_v : Énergie de valence.

E_c : Énergie de conduction.

a : Paramètre de maille.

ΔE_{hh} : Décalage d'énergie de la bande des trous lourds.

ΔE_{lh} : Décalage d'énergie de la bande des trous légers.

λ : Longueur d'onde.

λ_{hh} : Longueur d'onde des trous lourds.

λ_{lh} : Longueur d'onde des trous légers.

α et β : Paramètres empiriques de Varshni.

ε_{\parallel} (ε_{xx} et ε_{yy}) : Déformation biaxiale.

ε_{\perp} (ε_{zz}) : Déformation uniaxiale.

E_{hh} : Énergie de la bande des trous lourds.

E_{lh} : Énergie de la bande des trous légers.

T : Température.

Q_v : Décalage relatif de la bande de valence.

Q_c : Décalage relatif de la bande de conduction.

n : Indice de réfraction.

α : Coefficient d'absorption.

a_c : Potentiel hydrostatique de déformation pour la bande de conduction.

a_v : Potentiel hydrostatique de déformation pour la bande de valence.

$d\Omega/\Omega$: Changement de volume fractionnaire.

b_v : Potentiel de déformation.

m_e : La masse effective des électrons.
 m_{hh} : La masse effective des trous lourds.
 m_{lh} : La masse effective des trous légers.
 m_{so} : La masse effective de la bande spin-orbit.
 L_c : Épaisseur critique.
 Δ_{so} : L'énergie spin-orbit.
BQ : Boîte quantique.
 C_{ij} : Les coefficients d'élasticité.
 k : Vecteur d'onde.
 λ_F : La longueur d'onde de De Broglie.
 \hbar : Constante de Planck réduite.
 a_B et θ_B : La force de l'interaction électron-phonon.
 D_f : Degré de liberté.
 D_c : Nombre de directions de confinement.

Liste des Figures

Figure 1.1 Structure Zinc-Blende [6].	5
Figure 1.2 La structure Wurtzite [6].	5
Figure 1.3 Structure de bande d'un semi-conducteur à gap directe [8].	6
Figure 1.4 La première zone de Brillouin pour une structure Zinc Blende [28].	7
Figure 1.5 Structure de bande schématique d'un semi-conducteur à gap directe et à gap indirecte [29].	7
Figure 1.6 Schéma de l'enceinte sous ultravide d'une MBE [13].	10
Figure 1.7 . Dispositif de chauffage de substrat [14].	11
Figure 1.8 (a,b) Géométrie d'une structure d'un puits quantique.	12
Figure 1.9.a Représentation schématique d'un puits quantique de type I.	13
Figure 1.9.b Schéma d'une structure quantique de type II.	13
Figure 1.10 Schéma généralisé d'une boîte quantique [18].	15
Figure 1.11 Image de Microscopie électronique à balayage en transmission à résolution atomique d'une boîte quantique d'arséniure d'indium-gallium dans de l'arséniure de gallium [19].	16
Figure 1.12 Représentation schématique d'un puits quantique, fil quantique et boîte quantique [20].	16
Figure 1.13.a Schéma montrant une couche contrainte en tension	18
Figure 1.13.b Schéma montrant une couche contrainte en compression	18
Figure 1.14 Structure de bande d'une hétérostructure à gap direct dans les trois cas : (a) non-contrainte, (b) contrainte en compression, (c) contrainte en tension.	20
Figure 2.1 La variation de paramètre de maille de l'alliage InGaAs en fonction de la concentration d'indium (In).	24
Figure 2.2.a Variation de la déformation biaxiale et uniaxiale de l'hétérostructure InGaAs/GaAs en fonction de concentration d'indium.	25
Figure 2.2.b Variation de la contrainte uniaxiale et biaxiale de l'hétérostructure InGaAs/InP en fonction de la concentration d'indium.	27
Figure 2.3 Variation de l'énergie de gap en fonction de la température en K de InAs, GaAs et InP. ...	26
Figure 2.4 L'énergie de gap de l'InGaAs en fonction de la température et de la concentration de l'indium (In).	27
Figure 2.5 Variation de la longueur d'onde de l'alliage InGaAs en fonction de la température et la concentration de l'indium.	28
Figure 2.6.a La variation de l'absorption en fonction de l'énergie et de la concentration d'indium....	29
Figure 2.6.b La variation de l'absorption de la couche active InGaAs en fonction de l'énergie et de la température.	29
Figure 2.7 La variation de l'indice de réfraction de la couche active InGaAs en fonction de la longueur d'onde et de la concentration d'indium.	30
Figure 2.8.a La variation de l'épaisseur critique de la structure InGaAs/GaAs en fonction de la concentration d'indium.	31
Figure 2.8.b L'évolution de l'épaisseur critique d'InGaAs/InP en fonction de la concentration d'indium à 300 K.	33
Figure 2.9.a La variation d'énergie de gap des trous lourds en fonction de la concentration d'indium pour InGaAs/GaAs à T=300K.	32

Figure 2.9.b La variation d'énergie de gap des trous lourds et légers en fonction de la concentration d'indium pour InGaAs/InP à 300K.	34
Figure 2.10.a La variation de la longueur d'onde d'émission des trous lourds et trous légers de l'InGaAs/GaAs en fonction de la concentration d'indium (In).	33
Figure 2.10.b L'effet de la concentration d'indium sur la longueur d'onde de l'InGaAs/InP à T=300K.	36
Figure 2.11.a L'effet de la concentration d'indium sur la bande de conduction, de valence et la bande spin-orbit de l'hétérostructure InGaAs/GaAs.....	34
Figure 2.11.b L'effet de la concentration d'indium sur la bande de conduction, de valence et la bande spin-orbit de l'hétérostructure InGaAs/InP.	37
Figure 2.12.a la variation de décalage de bandes de GaInAs/GaAs en fonction de la concentration d'indium à T=300 K.....	35
Figure 2.12.b La variation de décalage de bandes de GaInAs/InP en fonction de la concentration d'indium à T=300K.	38
Figure 2.13.a La variation de taux de confinement de bande de valence et de conduction des trous lourds et légers de l'InGaAs/GaAs en fonction de la concentration d'indium à T=300K.	36
Figure 2.13.b La variation du taux de confinement de bande de valence et de bande de conduction de l'InGaAs/InP à T=300K.	39
Figure 3.1 L'évolution du paramètre de maille en fonction de la concentration de phosphore.....	38
Figure 3.2 L'évolution des déformations en fonction de la concentration de phosphore.	39
Figure 3.3 .a l'effet de la concentration de phosphore et l'énergie de gap sur l'absorption de GaAsP.	40
Figure 3.4 L'influence de la concentration de phosphore sur l'épaisseur critique.....	41
Figure 3.5 L'influence de la température et de la concentration de phosphore sur l'énergie de gap.	42
Figure 3.6 L'influence de la température et la concentration de phosphore sur la longueur d'onde.	42
Figure 3.7 L'énergie de bandes en fonction de la concentration de phosphore.	43
Figure 3.8 L'énergie de la bande interdite des trous lourds et des trous légers en fonction de la concentration de phosphore.....	44
Figure 3.9 L'influence de la concentration de phosphore sur la longueur d'onde seuil.....	44
Figure 3.10 Variation de décalages de bandes en fonction de la concentration de phosphore.	45
Figure 3.11 Variation de taux de confinement en fonction de la concentration de phosphore	45
Figure 3.12 La Variation de Paramètre de maille en fonction de la concentration d'Indium et de Phosphore.	46
Figure 3.13 La variation de l'énergie de la bande interdite de InGaAs et GaAsP en fonction de la concentration d'indium et de Phosphore.	47
Figure 3.14 La variation de la longueur d'onde en fonction de la concentration d'indium.	47

Liste des tableaux

Tableau 1.1 quelques paramètres caractéristiques pour les différentes familles des matériaux semi-conducteurs III-V binaires (T=300K).	4
Tableau 1.2 Caractéristiques des principaux composés binaires III-V à 300 K.	4
Tableau 1.3 Les paramètres de Varshni et les valeurs de l'énergie de gap des principaux semi-conducteurs à T=0 K au voisinage du point Γ [4].....	9
Tableau 2.1 Illustre les valeurs des pics de l'indice de réfraction du matériau InGaAs.....	30
Tableau A.1 Tableau périodique de Mendeliev.....	56

Table des matières

Liste des acronymes et Abréviations

Liste des figures

Liste des tableaux

Introduction générale.....	1
Chapitre 1 Généralité sur les semi conducteurs III-V	3
1.1 Introduction.....	3
1.2 Les semi-conducteurs III-V	3
1.2.1 Propriétés des semi-conducteurs III-V à composés binaires.....	4
1.3 Propriétés structurales des semi-conducteurs III-V	4
1.3.1 Structure blende.....	5
1.3.2 Structure Wurtzite :.....	5
1.4 Propriétés électroniques des semi-conducteurs.....	6
1.4.1 Notion de gap direct et gap indirect	6
1.5 Les composés ternaires et quaternaires	8
1.5.1 Etude des caractéristiques des semi-conducteurs ternaires.	8
1.5.1.1 Étude du paramètre de maille	8
1.5.1.2 Étude et calcul de la bande interdite (gap) :.....	8
1.5.1.3 Masse effective.....	8
1.5.1.4 L'énergie spin-orbit.....	8
1.5.2 Dépendance en température de l'énergie de bande interdite	9
1.6 Hétérostructure bidimensionnelle	10
1.6.1 Techniques d'élaboration des hétérostructures bidimensionnelles.....	10
1.6.1.1 Épitaxie par jet moléculaire (MBE).....	10
1.6.1.2 Le dépôt en phase vapeur organométallique	10
1.6.1.3 Caractéristique de ces deux techniques de dépôt.....	11
1.6.1.4 Contraintes de réalisation de couches de qualité	11
1.6.1.5 Effets indésirables	11
1.7 Nanostructures.....	12
1.7.1 Notion d'un puits quantique.....	12
1.7.1.1 Types de puits quantique	12
1.7.2 Fils quantique	14
1.7.3 Boîtes quantiques.....	14
1.7.4 Effets de la contrainte sur les structures à puits quantique	16
1.7.5 L'épaisseur critique	19
1.7.6 Calcul des décalages de bandes d'énergie	21
1.8 Conclusion :	23

Chapitre II : Résultat et discussion des simulation.....	24
2.1 Introduction.....	24
2.2 Paramètre de maille	24
2.3 La contrainte.....	Error! Bookmark not defined.
2.4 L'effet de la température sur l'énergie de la bande interdite et la longueur d'onde.....	26
2.4.1 L'effet de la température des binaires InAs, GaAs et InP.....	26
2.4.2 L'effet de la température sur l'énergie de gap de l'alliage $In_xGa_{1-x}As$:	27
2.4.3 L'effet de la température sur la longueur d'onde de l'alliage $In_xGa_{1-x}As$:	27
2.5 L'absorption.....	28
2.6 L'indice de réfraction.....	30
2.7 L'épaisseur critique	31
2.8 L'énergie de bande interdite contrainte et non contrainte	31
2.9 La longueur d'onde seuil	33
2.10 L'énergie de valence et de conduction	33
2.11 Barrière de potentiel	35
2.12 Taux de confinement.....	35
2.13 Conclusion	36
Chapitre 3 Résultats et discussions des simulations.....	38
3.1 Introduction.....	38
3.2 Etude des paramètres physiques, électroniques et optiques du matériau GaAsP/GaP	38
3.2.1 Paramètre de maille	38
3.2.2 Le désaccord de maille	39
3.2.3 L'absorption	39
3.2.4 L'épaisseur critique de la structure GaAsP/GaP	41
3.2.5 L'effet de la température	41
3.2.6 L'énergie de bande de conduction et de bande de valence	43
3.2.7 L'énergie de la bande interdite	43
3.2.8 La Longueur d'onde seuil.....	44
3.2.9 Décalages de bandes	45
3.2.10 Taux de confinement.....	45
3.3 Comparaison entre les deux matériaux InGaAs et GaAsP.....	46
3.3.1 Le paramètre de maille	46
3.3.2 La bande Interdite	46
3.3.3 La Longueur d'onde seuil.....	47
3.4 Conclusion	48
Conclusion Générale	49
Annexe A	50
Bibliographie	51

Introduction générale

Les technologies en télécommunications ont connu un essor important alors que le développement et les changements technologiques sont de plus en plus rapides au cours des dernières années. Les systèmes de communications sont devenus plus versatiles et plus puissants avec la croissance rapide et la sophistication de la technologie numérique, les ordinateurs ainsi que les instruments de vols.

La croissance exponentielle de la vitesse d'opération de ces dispositifs électronique exige la conception de système de communications capables d'opérer à des vitesses compatibles. Pour augmenter la vitesse et implicitement la capacité des systèmes de communications optiques il est nécessaire d'utiliser une porteuse à grande fréquence et un lien de transmission adéquat. Le développement des systèmes de communication optique durant les 30 dernières années est une réponse logique aux exigences présentées ci-dessus. Les communications optiques offrent deux avantages importants sur celles par câbles conventionnels et sur les systèmes sans fil. Le premier est la fréquence de la lumière qui est dans la région des THz (10^{14} Hz) et le deuxième est la possibilité d'utiliser un grand nombre de canaux que pour les ondes radio et les micro-ondes. La réalisation pratique de ces deux avantages a été faite grâce au développement des guides d'onde optiques. Les guides d'ondes optiques ont des qualités extraordinaires en comparaison aux autres liens de transmission : une large bande passante, des faibles pertes de transmission, une faible distorsion du signal, l'utilisation d'une petite puissance optique, le petit espace occupé, l'immunité aux interférences électromagnétiques et la versatilité permettant des mises à niveau faciles [1].

Les besoins accrus en rapidité, efficacité et faible consommation d'énergie avec des coûts réduits, dans le domaine de télécommunications et des nouvelles technologies, a révolutionné le monde des semi-conducteurs en motivant la recherche afin de développer et d'améliorer les dispositifs existants. Les semi-conducteurs constituent une classe bien définie, avec des propriétés physique et optique particulières qui sont sources d'intérêt au plan de la connaissance fondamentale et d'applications. Ces deux facteurs indissociables font l'importance de ces matériaux, malgré le nombre limité d'éléments et de composés semi-conducteurs. Un des matériaux le plus couramment utilisé est le silicium (qui appartient au groupe IV), il est le plus utilisé grâce à son faible coût, sa grande disponibilité et sa bonne conductivité thermique. La majorité des composants électroniques base sur le silicium, cependant ses propriétés sont insuffisantes (mobilités des porteurs relativement petites et transitions électroniques indirectes

au seuil d'absorption optique) [2]. Les matériaux III-V sont préférables car ils sont dotés d'une forte mobilité électronique et une bande interdite directe permettant l'émission de la lumière. On citera par exemple quelques composés binaires et ternaires. *GaAs*, *InP*, *InAs*, *InGaAs*, *GaAsP*. Les propriétés de ces matériaux sont très intéressantes pour les performances de ces dispositifs.

Le premier chapitre est dédié à la présentation des caractéristiques et les notions fondamentales des semi-conducteurs III-V, nous décrivons les propriétés physiques, structurales et optiques des semi-conducteurs III-V, leurs techniques de réalisation, des notions sur les puits quantiques, les fils et les boîtes quantiques et quelques équations mathématiques qui présentent l'effet de la contrainte sur l'interface.

Le deuxième chapitre représente les résultats des simulations avec leurs interprétations, nous avons étudié les caractéristiques du matériau InGaAs sur deux substrats différents GaAs et InP en utilisant le logiciel de simulation Matlab.

Enfin, dans le troisième chapitre nous présentons les résultats et discussions de la structure GaAsP/GaP ainsi qu'une comparaison entre les deux matériaux actifs $In_xGa_{1-x}As$ et $GaAs_{1-x}P_x$ pour des applications en télécommunications

Chapitre 1 Généralité sur les semi-conducteurs III-V

1.1 Introduction

Un semi-conducteur est une structure cristalline dont les propriétés de conductibilité électrique sont intermédiaires entre celle des métaux et celle des isolants.

Du point de vue conduction, les propriétés d'un semi-conducteur sont les suivantes :

- A très basses températures ils se comportent comme des isolants parfaits.
- Pour une température ambiante, ils conduisent le courant électrique. Ils présentent ainsi une résistivité intermédiaire entre celle des isolants et celle des conducteurs. [3]

Il y a plusieurs familles de semi-conducteurs, la plus répandue est celle des éléments de la colonne V comme le Silicium, le Germanium, la famille II-VI (un atome de la colonne II se liant avec un de la colonne VI) comme le CdTe et les semi-conducteurs III-V que nous allons l'étudier dans ce manuscrit.

1.2 Les semi-conducteurs III-V

Les matériaux semi-conducteurs III-V ont été réalisés à partir des atomes de la colonne III et la colonne V du tableau périodique des éléments. (Voir annexe A)

Les semi-conducteurs III-V sont presque tous à gap direct et sont les champions des dispositifs optoélectroniques. L'arséniure de Gallium GaAs est le représentant le plus connu, de gap 1,42 eV. 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 semi-conducteurs. [4]

Les semi-conducteurs III-V présentent un grand intérêt en raison de leurs propriétés [4]:

- Ils sont robustes.
- Ils possèdent une conductivité thermique élevée.
- Leurs points de fusions sont élevés.
- Ils ont une bande interdite directe ou indirecte.

1.2.1 Propriétés des semi-conducteurs III-V à composés binaires

Les composants	Gap (eV)	Direct/Indirect	Paramètre de maille (Å)	Structure cristalline
AlN	6,28 [31]	Direct [31]	3,111 [31]	Wurtzite [31]
GaP	2,35 [31]	indirect [31]	5,45 [31]	zinc blende [31]
GaN	3,44 [4]	direct [31]	3,189[31]	Wurtzite [31]
GaAs	1,42 [4]	direct [31]	5,653 [31]	zinc blende [31]
GaSb	0,72 [4]	direct [31]	6,478 [31]	zinc blende [31]
InSb	0,18 [31]	direct [31]	6,478 [31]	zinc blende [31]
InAs	0,418 [31]	direct [31]	6,058 [31]	zinc blende [31]
BN	7,5 [31]	Indirect [31]	3,6155 [31]	zinc blende [31]

Tableau 1.1 Quelques paramètres caractéristiques pour les différentes familles des matériaux semi-conducteurs III-V binaires (T=300 K).

Matériau	GaAs	InAs	InP	GaP
Δ_{so} (eV)	0.34 [26]	0.4 [26]	0.108 [26]	0.08 [4]
$C_{11}(10^{11}\text{dyn/cm}^2)$	11.88 [26]	8.329 [26]	10.22 [26]	14.05 [4]
$C_{12}(10^{11}\text{dyn/cm}^2)$	5.38 [4]	4.526 [26]	5.76 [26]	6.203 [30]
a_v (eV)	2.7 [4]	2.5 [26]	-0.6 [26]	-1.7 [30]
b_v (eV)	-1.7 [4]	-1.8 [4]	-2.0 [26]	-1.6 [30]
$m_e(m_0)$	0.067 [4]	0.023 [4]	0.0795 [26]	0.25 [30]
$m_{hh}(m_0)$	0.45 [4]	0.4 [4]	0.41 [4]	0.67 [30]
$m_{lh}(m_0)$	0.082 [4]	0.026 [4]	0.12 [4]	0.15 [4]
$m_{so}(m_0)$	0.0154 [4]	0.014 [4]	0.21 [4]	0.13 [4]

Tableau 1.2 Caractéristiques des principaux composés binaires III-V à 300 K.

1.3 Propriétés structurales des semi-conducteurs III-V

Les composés III-V massifs cristallisent généralement dans une structure zinc-blende ou un arrangement hexagonal (Wurtzite)

1.3.1 Structure blende

Appelée aussi sphalérite, cette structure est composée de deux sous-réseaux cubiques à face centrées interpénétrés où a est la longueur du côté du cube, composée de deux espèces atomiques différentes, l'un étant formé par les éléments III et l'autre par les éléments V [5].

- Les coordonnées de ces atomes :

Ces atomes occupent des positions bien déterminées, définies par les coordonnées suivantes: Les positions des quatre atomes du groupe III : $(0, 0, 0)$; $(0, 1/2, 1/2)$; $(1/2, 0, 1/2)$ et $(1/2, 1/2, 0)$. Les positions des quatre atomes du groupe V : $(1/4, 1/4, 1/4)$; $(1/4, 3/4, 3/4)$; $(3/4, 1/4, 3/4)$ et $(3/4, 3/4, 1/4)$ [5] (figure 1.1).

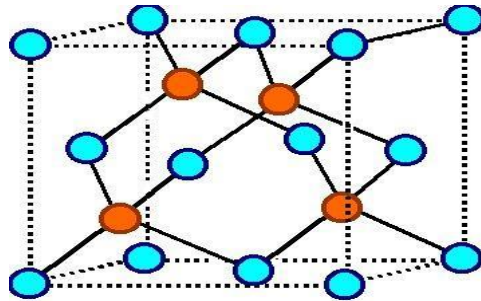


Figure 1.1 Structure Zinc-Blende [6].

1.3.2 Structure Wurtzite

Appelée aussi Hexagonale, Dans cette structure ; les deux atomes du groupe III occupent les positions $(2/3, 1/3, 1/8)$ et $(0, 0, 5/8)$; et les deux atomes du groupe V occupent les positions $(0, 0, 0)$ et $(2/3, 1/3, 1/2)$ (figure 1.2).

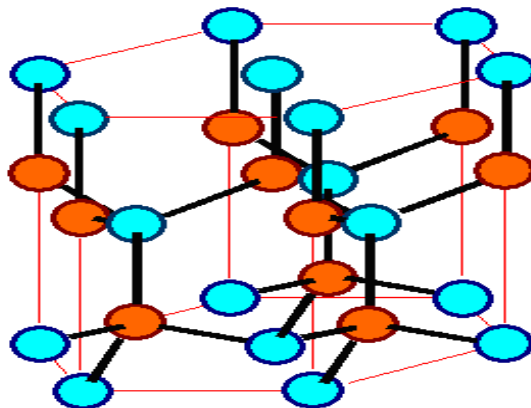


Figure 1.2 La structure Wurtzite [6].

1.4 Propriétés électroniques des semi-conducteurs

Les semi-conducteurs III-V ont une bande de conduction (BC) et une bande de valence (BV), La bande de valence est la plus basse, la bande de conduction est la plus haute et la bande interdite sépare ces deux bandes, la largeur de la bande interdite s'appelle le gap, Le gap est par définition le minimum absolu de la bande de conduction et le maximum absolu de la bande de valence [7], comme montré dans la figure (1.3).

La bande de valence se compose de trois courbures différentes :

- Bande de trous lourds (hh pour heavy holes) ;
- Bande de trous légers (lh pour light holes) ;
- Bande spin-orbite (Δ_{so}).

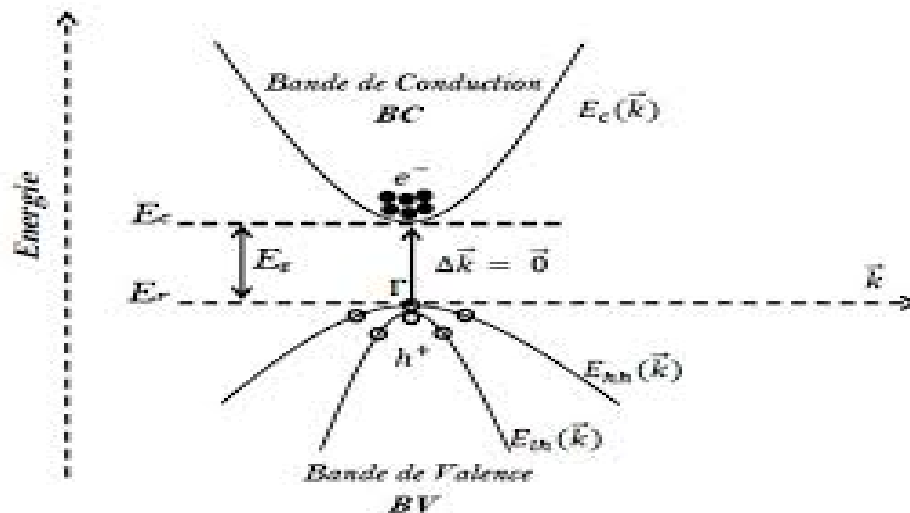


Figure 1.3 Structure de bande d'un semi-conducteur à gap direct [8].

1.4.1 Notion de gap direct et gap indirect

La notion de gap direct et indirect est liée à la représentation de la dispersion énergétique d'un semi-conducteur c'est-à-dire du diagramme $E = f(k)$. Ce diagramme définit spatialement les extrêmes des bandes de conduction et de valence. Ces derniers représentent les domaines énergétiques dans un semi-conducteur à l'équilibre.

Le semi-conducteur à gap direct est un semi-conducteur dont le maximum de la bande de valence et le minimum de la bande de conduction se situent à des valeurs voisines du vecteur

d'onde \vec{k} sur le diagramme $E(k)$, Cela signifie que les énergies des deux bandes sont localisées au centre de la zone de Brillouin (figure 1.4).

Le semi-conducteur à gap indirect est un semi-conducteur dont le maximum de bande de valence et le minimum de la bande de conduction se situent à des valeurs différentes du vecteur d'onde \vec{k} sur le diagramme $E(k)$.

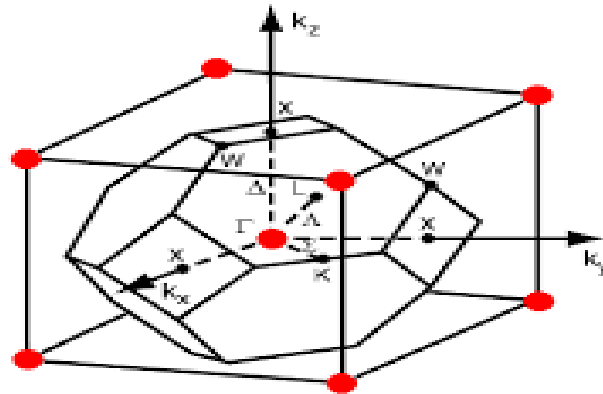


Figure 1.4 La première zone de Brillouin pour une structure Zinc Blende [28].

Point Γ : le centre de la zone

Direction Δ : les directions 100

Direction Σ : les directions 110

Direction Λ : les directions 111

Point X : le bord de zone suivant la direction 100

Point K : le bord de zone suivant la direction 110

Point L : le bord de zone suivant la direction 111 (figure 1.5).

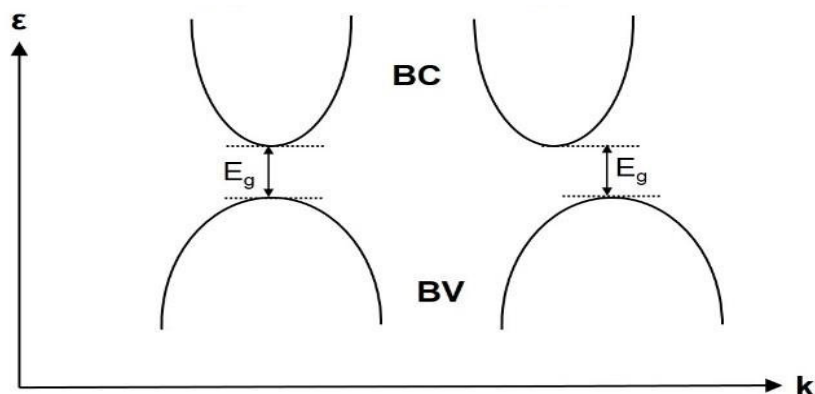


Figure 1.5 Structure de bande schématisée d'un semi-conducteur à gap direct et à gap indirect [29].

1.5 Les composés ternaires et quaternaires

L'utilité pratique des semi-conducteurs III-V est encore considérablement renforcée par la possibilité de réaliser des alliages par l'introduction partielle de l'un des éléments par un autre élément de la même colonne. On peut obtenir des structures ternaires du type $A_x B_{1-x}C$ ou quaternaire comme $A_x B_{1-x}C_{1-y}D$, où x et y est le pourcentage de la concentration des éléments dans la couche active.

1.5.1 Etude des caractéristiques des semi-conducteurs ternaires.

1.5.1.1 Étude du paramètre de maille

Le paramètre de maille de cet alliage peut être représenté par une simple interpolation linéaire des propriétés de ces constituants binaires. Le paramètre de maille varie linéairement suivant la loi de Végard comme suit [9] :

$$a_{A_x B_{1-x} C} = a_{AC}x + a_{BC}(1 - x) \quad (1.1)$$

1.5.1.2 Étude et calcul de la bande interdite (gap)

La bande interdite est une propriété très importante, c'est l'une des caractéristiques fondamentales pour pouvoir étudier un matériau semi-conducteur afin de l'utiliser dans des différentes applications. L'énergie de gap est obtenue par interpolation linéaire avec un faible paramètre de courbure « Bowing parameter » [9]

$$E_{g_{A_x B_{1-x} C}} = E_{g_{AC}}x + E_{g_{BC}}(1 - x) + Cx(1 - x) \quad (1.2)$$

1.5.1.3 Masse effective

Les masses effectives varient linéairement en fonction de la composition x de l'indium suivant les relations : [7]

$$m_e = m_{e_{AC}}x + m_{e_{AB}}(1 - x) \quad (1.3)$$

$$m_{hh} = m_{hh_{AC}}x + m_{hh_{BC}}(1 - x) \quad (1.4)$$

1.5.1.4 L'énergie spin-orbit

L'énergie spin-orbit de cet alliage varie également en fonction de la concentration de l'indium suivant la relation : [7]

$$\Delta_{so} = \Delta_{so(AC)}x + \Delta_{so(BC)}(1 - x) \quad (1.5)$$

1.5.2 Dépendance en température de l'énergie de bande interdite

L'étude expérimentale montre que l'énergie de la bande interdite varie avec la température, ceci est expliqué par changement de paramètre de maille.

Plusieurs équations analytiques ont été utilisées pour ajuster les données expérimentales de l'évolution de l'énergie de gap en fonction de la température. Celles-ci sont données ci-dessous [10],[11] :

$$E_g(T) = E_g(0) - \frac{\alpha T^2}{\beta + T} \quad (1.6)$$

$$E_g(T) = E_g(0) - 2 \frac{a_B}{e^{\frac{\theta_B}{T}} - 1} \quad (1.7)$$

L'équation (1.6), la plus utilisée, est une relation empirique obtenue par le modèle de Varshni. Avec $E_g(0)$ est la valeur du gap à 0 K, T est la température en Kelvin, α et β sont deux constantes dépendantes du matériau. Le tableau (I-4) donne ces valeurs pour la direction Γ pour quelques semi-conducteurs III-V. L'équation (1.7) est la loi de Bose-Einstein. Cette loi est applicable à des basses températures où le comportement du gap n'est pas linéaire. Avec, a_B et θ_B sont la force de l'interaction électron-phonon et la température de Debye correspondante à la fréquence moyenne des phonons.

Paramètres	α (meV/K)	β (K)	$E_g(0)$ (eV)
Si	0.391	125	1.12
Ge	0.6842	398	0.66
GaAs	0.5405	204	1.51
InP	0.363	162	1.42
AlAs	0.885	530	2.23
GaSb	0.417	140	0.81
AlSb	0.42	140	2.386
InAs	0.276	93	0.42
AlP	0.5771	372	3.63

Tableau 1.3 Les paramètres de Varshni et les valeurs de l'énergie de gap des principaux semi-conducteurs à T=0 K au voisinage du point Γ [4].

1.6 Hétérostructure bidimensionnelle

1.6.1 Techniques d'élaboration des hétérostructures bidimensionnelles

Pour réaliser des couches monocristallines, sur un substrat convenablement choisi, l'épitaxie des matériaux III-V se fait généralement par plusieurs techniques physiques et chimiques avec une maîtrise exceptionnelle des qualités cristallographiques, tels que l'épitaxie par jet moléculaire, le dépôt en phase vapeur organométalliques [12].

1.6.1.1 Épitaxie par jet moléculaire (MBE)

Différentes sources sont présentes dans l'enceinte sous vide. Des obturateurs rapides sont placés devant chaque source et des équipements de caractérisation sont en général ajoutés pour contrôler les dépôts, le procédé est assez long (un micron par heure environ) et est principalement utilisé dans les laboratoires de recherche. Des systèmes chauffants ou des canons à électrons peuvent être utilisés pour réaliser les dépôts. La figure (1.6) symbolise cette technique [12].

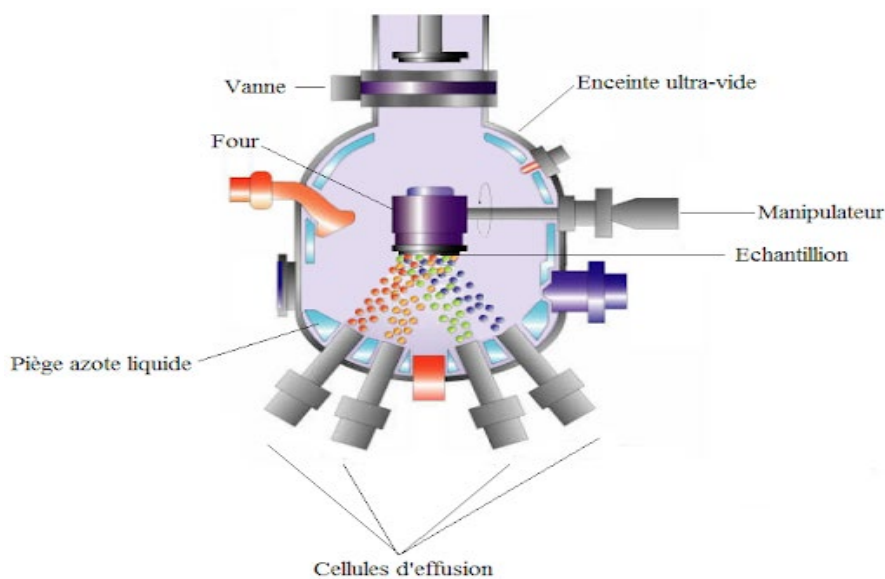


Figure 1.6 Schéma de l'enceinte sous ultravide d'une MBE [13].

1.6.1.2 Le dépôt en phase vapeur organométallique

Le principe est de faire croître sur un substrat une couche relativement mince à partir de composants en phase vapeur appelés précurseurs. Le substrat est chauffé dans un dispositif de chauffage comme montré dans la figure (1.7).

Les précurseurs contiennent le métal à déposer et des composés organiques. Cette technique permet en particulier de déposer les matériaux à haute permittivité nécessaires à la fabrication des mémoires vives dynamiques (DRAMs) [12].

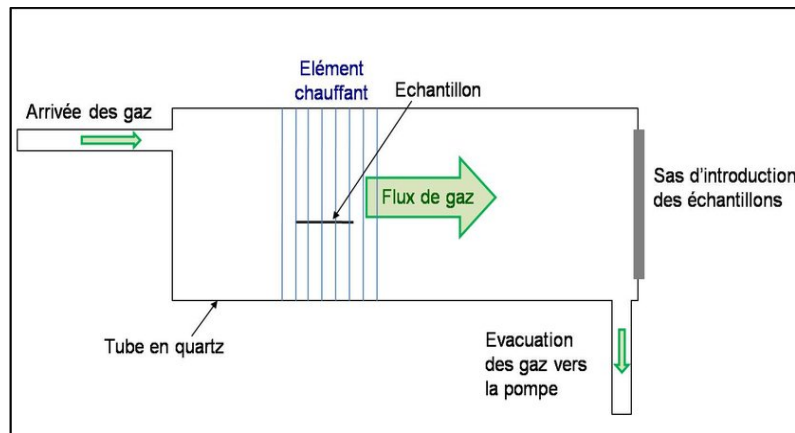


Figure 1.7 . Dispositif de chauffage de substrat [14].

1.6.1.3 Caractéristique de ces deux techniques de dépôt

- Très faible vitesse de dépôt, pratiquement couche atomique par couche atomique ;
- Réalisation de couches de matériaux différents et/ou différemment dopés, avec des profils de composition et/ou de dopage extrêmement abrupt.
- La discontinuité d'une couche à l'autre s'étend typiquement de l'ordre de la monocouche atomique.

1.6.1.4 Contraintes de réalisation de couches de qualité

La condition nécessaire à la réalisation d'une bonne hétéro-épitaxie d'un semi-conducteur 1 sur un semi-conducteur 2 est que les matériaux aient :

- Même structure cristalline ;
- Des paramètres de maille voisins.

1.6.1.5 Effets indésirables

- Si les structures cristallines sont différentes, le dépôt est généralement amorphe ou dans le meilleur des cas polycristallin ;
- Si les paramètres de maille sont différents, le matériau constituant la couche de plus grande épaisseur impose sa maille à l'autre, au moins au voisinage de l'interface. Ceci entraîne l'existence, dans le matériau de faible épaisseur, d'une contrainte biaxiale dans le plan de la couche.

1.7 Nanostructures

1.7.1 Notion d'un puits quantique

Un puits quantique de semi-conducteur est un matériau artificiel composé d'un semi-conducteur de faible énergie de bande interdite, pris en sandwich entre deux couches semi-conductrices de même paramètre de maille et d'énergie de bande interdite plus grande, donc un puits quantique peut s'obtenir par l'empilement successif de couches planes de différents matériaux. La barrière de potentiel créée par la différence d'énergie de gap entre ses deux semi-conducteurs permet de confiner les porteurs de charge dans le puits sur des niveaux d'énergie discrets. Le paramètre clé est l'effet du confinement sur la densité d'états qui se produit lorsque l'épaisseur de la zone active est du même ordre que la longueur d'onde de De Broglie λ_B de l'électron donnée par [15]:

$$\lambda_F = \frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2m_e^*E_F}} \quad (1.8)$$

E_F : Niveau de Fermi

\hbar : Constante de Planck réduite

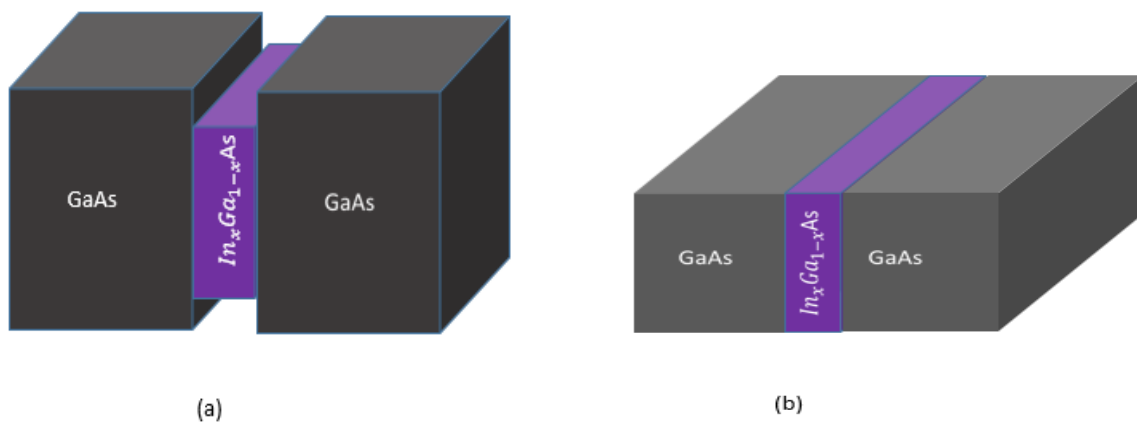


Figure 1.8 (a,b) Géométrie d'une structure d'un puits quantique.

1.7.1.1 Types de puits quantique

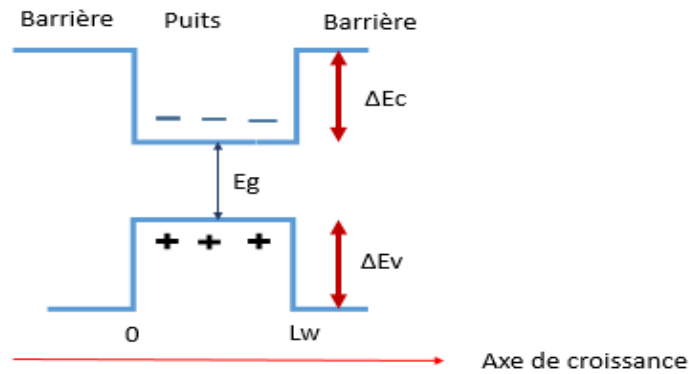
Selon la nature de confinement des porteurs à l'interface puits-barrière, il existe plusieurs types de structures quantiques, on distingue les deux principales configurations : Puits quantique de type I et puits quantique de type II.

➤ Puits quantique de type I

Dans le cas d'un puits quantique de type I, les électrons et les trous sont confinés dans le même semi-conducteur constituant le puits (Figure 1.9.a).

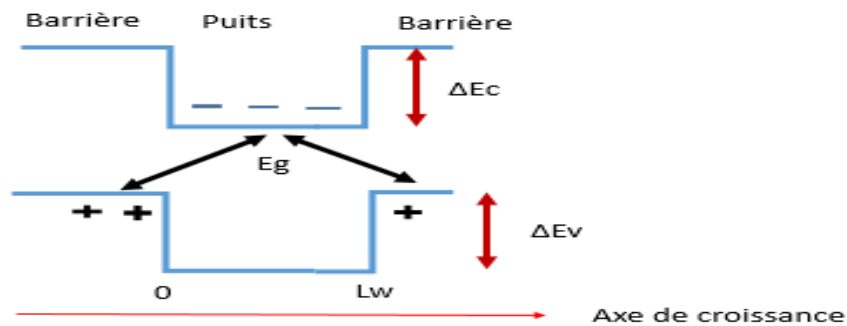
➤ Puits quantique de type II

Dans la configuration de type II, les électrons sont confinés dans le matériau constituant le puits et les trous sont confinés dans le semi-conducteur constituant la barrière (Figure 1.9.b).



(a)

Figure 1.9.a Représentation schématique d'un puits quantique de type I.



(b)

Figure 1.9.b Schéma d'une structure quantique de type II.

Dans les systèmes à puits quantiques le mouvement de l'électron est libre dans le plan de la couche mais n'est pas possible suivant la direction de croissance. On parle ainsi d'une structure bidimensionnelle. En raison de faible épaisseur des puits, les niveaux d'énergie des porteurs sont quantifiés suivant la direction de croissance. Lorsque le confinement se fait suivant deux directions, on parle dans ce cas de fils quantiques, l'électron garde donc un seul degré de liberté. Enfin si le confinement a lieu dans les trois directions de l'espace, on parle de boîtes quantiques;

Les progrès des techniques de croissance cristalline ont permis la réalisation et le contrôle de telles structures au niveau de la monocouche atomique.

1.7.2 Fils quantique

Les fils quantique ou nanofils présentent un très grand intérêt dans de nombreux champs technologique, et sont considérés pour jouer un rôle important dans la course à la miniaturisation de futurs composants électroniques, ces applications vont concerner pratiquement tous les domaines de la science.

Naturellement, la dimensionnalité se rapporte au nombre de degrés de liberté dans la dynamique d'électron ; en fait, dans un fil quantique, l'électron est confiné à travers deux directions, plutôt que juste une dans un puits quantique, et, ainsi, par conséquent, réduire les degrés de liberté à un. Dans un point quantique, l'électron est confiné dans les trois-dimensions, de ce fait ramenant les degrés de liberté à zéro. Si le nombre de degrés de liberté sont marqués comme D_f et le nombre de directions de confinement sont marqués comme D_c , on a : [16]

$$D_f + D_c = 3 \quad (1.9)$$

1.7.3 Boîtes quantiques

Les boîtes quantiques aussi appelées « points quantiques » ou « quantum dots » en anglais, ont récemment fait l'objet d'une grande attention en raison de leur grande stabilité photochimique et de leurs propriétés optiques dépendant de la taille, qui résultent de l'effet de confinement quantique.

Ce sont des nanostructures de semi-conducteurs composées de 10^2 à 10^5 atomes, leur taille (~15- 20 nm) de diamètre est supérieure de plusieurs ordres de leur épaisseur (2-4 nm), mais suffisamment petite pour assurer le confinement quantique des électrons et des trous dans les trois dimensions spatiales. Le confinement spatial discrétise alors les niveaux d'énergie dans la boîte quantique ; par conséquent, on les appelle aussi des atomes artificiels. Une propriété unique de boîtes quantiques de semi-conducteurs est que les énergies et les fonctions d'onde des états confinés quantiques peuvent être adaptées en contrôlant leur taille, leur forme et leur composition.

Les boîtes quantiques de semi-conducteurs sont généralement fabriquées soit par synthèse chimique, soit par croissance épitaxiale. Les méthodes de fabrication chimique ont l'avantage d'être peu coûteuses, mais les points quantiques épitaxiés présentent plusieurs avantages

importants, notamment la possibilité d'une intégration directe dans une matrice cristalline de haute qualité, qui offre une qualité optique élevée et permet la fabrication de dispositifs optiques et électriques exploitant la technologie des hétérostructures épitaxiées. Le type le plus largement exploré de boîtes quantiques de semi-conducteurs épitaxiaux est celui des BQs d'InAs épitaxiaux déformés de façon cohérente, obtenus par croissance sur des surfaces de GaAs. Un seul point quantique InAs/GaAs s'est avéré être un système modèle bénéfique pour un large domaine de la mécanique quantique expérimentale, y compris les études de l'interaction lumière-matière et de l'électrodynamique quantique en cavité ainsi que les expériences de contrôle cohérent.

Du point de vue des applications, des efforts importants ont été consacrés au développement de sources efficaces de lumière non classique basées sur des boîtes quantiques uniques pour produire des photons uniques, intriqués ou indiscernables à la demande pour des applications en communication et cryptographie quantiques. Ces applications nécessitent généralement l'intégration de BQs dans des microcavités optiques ou d'autres structures photoniques à petite échelle afin d'obtenir une haute luminosité et une extraction efficace des photons. Cela nécessite un positionnement précis du BQs par rapport aux structures photoniques afin de permettre une interaction avec les champs fortement localisés des modes de la microcavité. À cette fin, l'épitaxie contrôlée par site est apparue comme une approche de fabrication favorable permettant un contrôle déterministe des sites de nucléation des BQs et offrant des possibilités supplémentaires de réglage des propriétés des BQ [17].

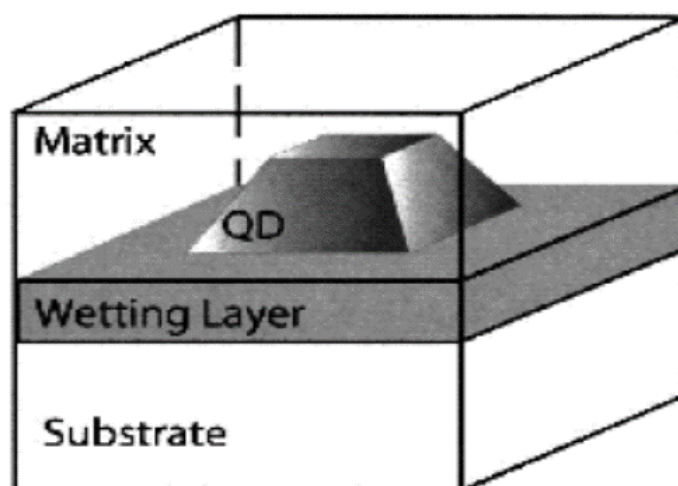


Figure 1.10 Schéma généralisé d'une boîte quantique [18].

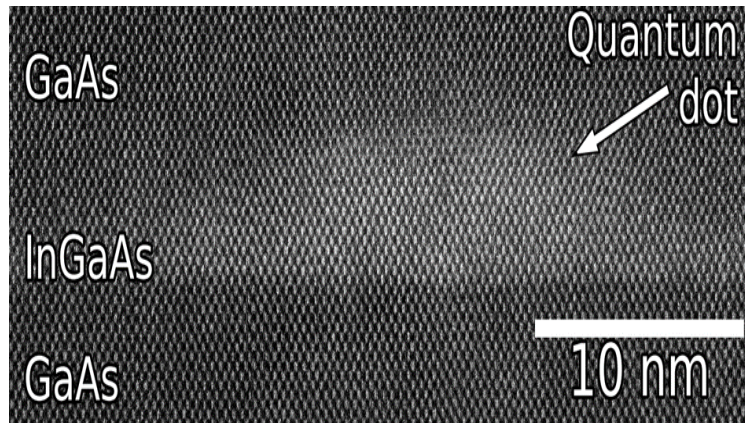


Figure 1.11 Image de Microscopie électronique à balayage en transmission à résolution atomique d'une boîte quantique d'arséniure d'indium-gallium dans de l'arséniure de gallium [19].

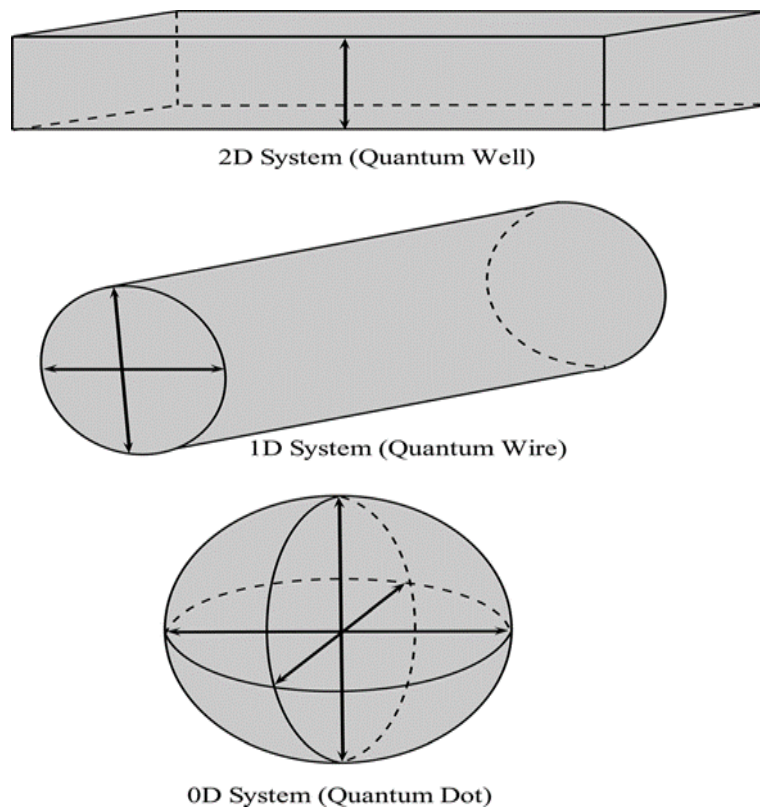


Figure 1.12 Représentation schématique d'un puits quantique, fil quantique et boîte quantique [20].

1.7.4 Effets de la contrainte sur les structures à puits quantique

Lors de l'épitaxie d'un matériau sur un substrat de paramètre de maille différent, les deux mailles peuvent s'adapter pour accorder leurs paramètres cristallographiques dans le plan de croissance : c'est ce que l'on appelle une croissance pseudomorphique. Il apparaît une

contrainte de compression ou de dilatation biaxiale dans la couche épitaxiée, qui s'accompagne d'une accumulation d'énergie élastique.

- Calcul de la contrainte biaxiale et uniaxiale :

Pour un système dans lequel h_1 et h_2 sont les épaisseurs respectives des couches (non contraintes) du semi-conducteur 1 et 2, on obtient les résultats suivants [21]:

$$a_{\parallel} = \frac{a_1 G_1 h_1 + a_2 G_2 h_2}{G_1 h_1 + G_2 h_2} \quad (1.10)$$

$$\varepsilon_{i\parallel} = \frac{a_{\parallel}}{a_i} - 1 \quad (1.11)$$

$$a_{i\perp} = a_i [1 - D_i (a_{\parallel}/a_i - 1)] \quad (1.12)$$

$$\varepsilon_{i\perp} = \frac{a_{i\perp}}{a_i} - 1 \quad (1.13)$$

Où « i » désigne le matériau (1 ou 2), « a » désigne les constantes de maille à l'équilibre, et G, est le module de cisaillement.

Les indices \parallel et \perp sont utilisées pour indiquer les quantités parallèles et perpendiculaires par rapport au plan de l'interface. [21]

$$G_i = 2(C_{11}^i + 2C_{12}^i)(1 - D_i/2) \quad (1.14)$$

La constante D_i dépend des constantes élastiques C_{11} et C_{12} et C_{44} des matériaux et de l'orientation des matériaux

$$D^{001} = 2 \frac{C_{12}}{C_{11}} \quad (1.15)$$

$$D^{110} = \frac{C_{11} + 3C_{12} - 2C_{44}}{C_{11} + C_{12} + 2C_{44}} \quad (1.16)$$

$$D^{111} = 2 \frac{C_{11} + 2C_{12} - 2C_{44}}{C_{11} + 2C_{12} + 4C_{44}} \quad (1.17)$$

Pour les orientations autres que la (001), a_{\parallel} et a_{\perp} ne représentent pas la constante de maille réelle dans le plan cristallographique, mais expriment simplement la façon dont les dimensions de la cellule unitaire changent sous l'effet de la déformation, comme donné par les équations (1.11) et (1.13). En général, si une couche fine est cultivée sur un substrat, la valeur de a_{\parallel} est déterminée par le substrat et peut être modifiée en utilisant différents substrats. Cependant, pour les super-réseaux indépendants, a_{\parallel} doit être déterminé en utilisant les équations (1.10) et (1.11). Une fois que a_{\parallel} est connu, a_{\perp} peut être obtenu en utilisant les équations (1.11) et (1.13).

Les composantes de déformation peuvent-être obtenues en simplifiant les équations générales (1.11) et (1.15) de la manière suivante [21] :

- Biaxiale dans le plan de croissance :

$$\varepsilon_{\parallel} = \varepsilon_{xx} = \varepsilon_{yy} = \frac{a_s}{a(x)} - 1 \quad (1.18)$$

a_s est le paramètre de maille de la barrière

- Uniaxiale dans le plan de croissance :

$$\varepsilon_{\perp} = \varepsilon_{zz} = -2 \frac{C_{12}(x)}{C_{11}(x)} \varepsilon_{xx} \quad (1.19)$$

Où $C_{11}(x)$ et $C_{12}(x)$ sont les constantes élastiques et sont obtenues par interpolation linéaire des constantes des binaires.

Lors de la croissance d'une couche semi-conductrice de paramètre de maille a_c différent de celui du substrat (plus épais) a_s , c'est le matériau support qui impose son paramètre de maille dans le plan de la couche. Par conséquent, la couche épitaxiale devient le siège de contraintes en compression si ($a_c > a_s$) ou en tension si ($a_c < a_s$), entraînant ainsi une déformation tétraogonale de sa maille, comme montré dans la Figure (1.10).

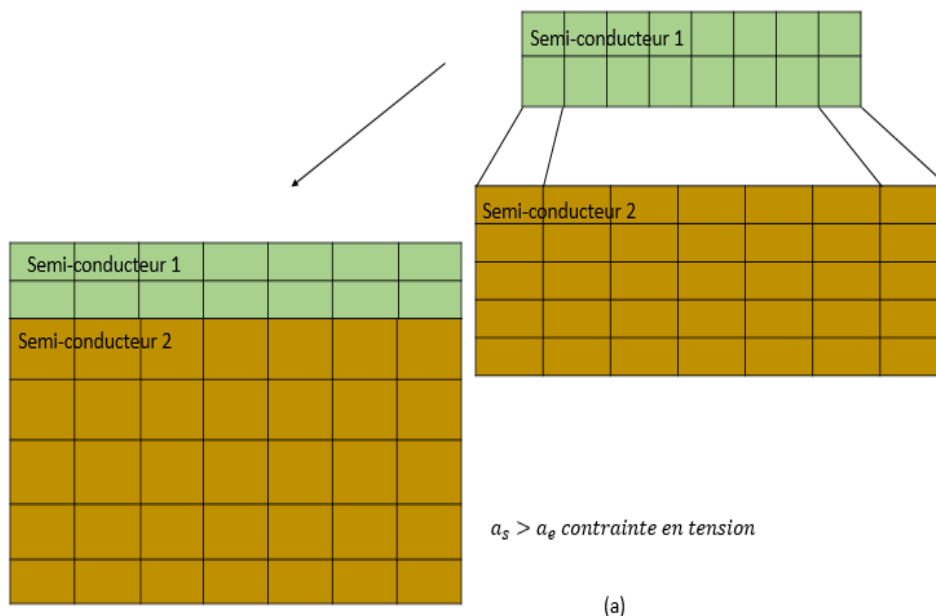


Figure 1.13.a Schéma montrant une couche contrainte en tension

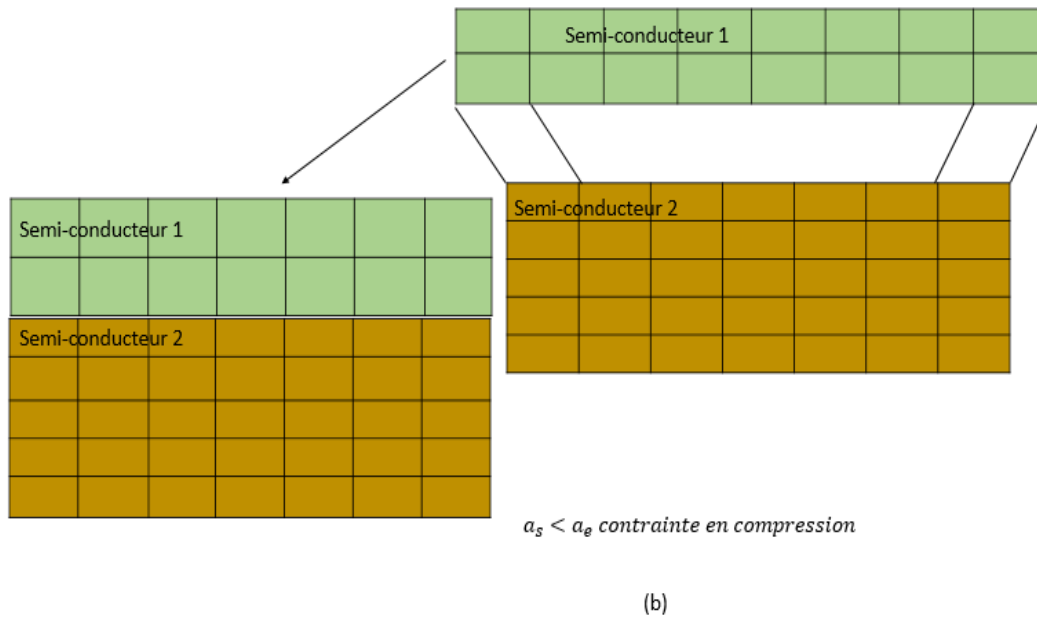


Figure 1.13.b Schéma montrant une couche contrainte en compression.

1.7.5 L'épaisseur critique

La croissance pratique d'une telle structure n'est possible que pour les couches qui ne dépassent pas une certaine épaisseur critique L_c ; au-delà de cette épaisseur, l'énergie élastique emmagasinée devient suffisante pour générer des défauts structuraux donnant naissance à des dislocations ou à des fautes d'empilement. De plus, la différence de coefficients de dilatation thermique entre substrat et couche épitaxie provoque la propagation de ces dislocations.

- Les dislocations (discontinuité dans la structure cristalline) proviennent généralement de la relaxation du matériau ;
- Les défauts d'empilement (la séquence d'empilement des atomes n'est plus respectée), ces défauts correspondent à une erreur dans la séquence d'empilement des atomes dans le matériau. L'erreur est ensuite conservée et répercutée sur les couches suivantes.
- Les inclusions (précipité ou changement de phase cristalline dans une zone du réseau).
- Frontière entre deux cristaux possédant des orientations différentes (les joints de grain). Ce type de défaut est très peu probable dans les couches déposées par épitaxie [22].

L'épaisseur critique dépend directement du degré de désaccord de maille entre le substrat et la couche épitaxie.

Pour des épaisseurs du puits Inférieures à l'épaisseur critique L_c , il se produit dans la structure un désaccord de maille provoquant des contraintes mécaniques.

Nous avons calculé l'épaisseur critique $L_c(x)$ selon de deux modèles.

➤ Modèle de People et Bean [23] :

$$L_c(x) = \left(\frac{a}{32\pi\sqrt{2}\varepsilon_{xx}^2} \right) \left(\frac{1-\gamma}{1+\gamma} \right) \left[\text{Ln} \left(\frac{L_c\sqrt{2}}{a} \right) \right] \quad (1.20)$$

➤ Modèle de Matthews and Blakeslee [24] :

$$L_c(x) = \left(\frac{a}{\pi\sqrt{2}|\varepsilon_{xx}|} \right) \left(\frac{1-0.25\gamma}{1+\gamma} \right) \left[\text{Ln} \left(\frac{L_c\sqrt{2}}{a} \right) + 1 \right] \quad (1.21)$$

Où, γ est le coefficient de Poisson qui est égal à $\frac{C_{11}}{C_{11}+C_{12}}$, a est le paramètre de maille de la couche active.

L'effet de la contrainte biaxiale sur la structure de bandes de la couche épitaxie est schématisé dans la figure (1.11).

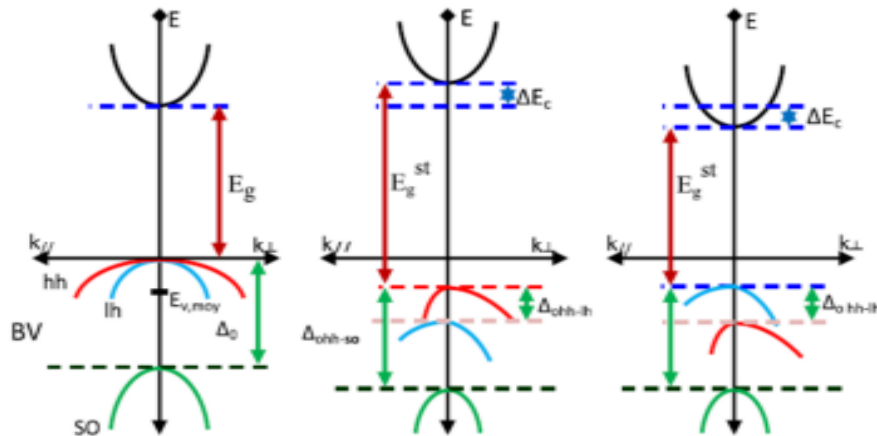


Figure 1.14 Structure de bande d'une hétérostructure à gap direct dans les trois cas : (a) non-contrainte, (b) contrainte en compression, (c) contrainte en tension.

Dans le cas non contraint ($a_e = a_s$), les bandes de trous lourds et trous légers sont isotropes et proches au centre de la zone de Brillouin $\Gamma=0$, les directions sont choisies de telle sorte que k_{\parallel} se trouve dans le plan de croissance et le k_{\perp} le long de la direction de croissance. La bande spin-orbit split-off étant située à une énergie Δ_0 en dessous du maximum de la bande de valence.

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

1. La composante hydrostatique, liée à la déformation selon l'axe de croissance, qui provoque un décalage du centre de gravité de la bande de valence ainsi que du centre de gravité de la bande de conduction ;

2- La contrainte de cisaillement, qui lève la dégénérescence des états énergétiques des trous lourds et des trous légers en $K = 0$. Pour une couche soumise à une contrainte biaxiale de compression la composante hydrostatique augmente le gap moyen entre les bandes de conduction et de valence, alors que la composante de cisaillement rend les bandes de valence fortement anisotropes : la bande de plus haute énergie (appelée bande HH) devient 'lourde' selon K_{\perp} et « légère » selon K_{\parallel} . La bande d'énergie inférieure (improprement appelée bande LH) devient « légère » selon k_{\perp} , et « lourde » selon k_{\parallel} . [25]

1.7.6 Calcul des décalages de bandes d'énergie

Les effets de la contrainte sur les bandes d'énergie sont calculés de manière simple sur la base de la théorie du « modèle solide » proposée par Van De Walle et Martin. La moyenne des trois bandes de valence supérieures (les bandes des trous légers et des trous lourds et la bande spin-orbite split-off) est choisie comme niveau d'énergie de référence, désignée par $E_{v moy}$.

$$\text{Avec } E_{v moy} = \frac{E_{hh} + E_{lh} + \Delta_0}{3} \quad (1.22)$$

E_{hh} : L'énergie de la bande des trous lourds.

E_{lh} : L'énergie de la bande des trous légers.

Δ_0 : L'énergie de décalage des bandes des trous spin-splitte.

Les décalages d'énergie de $E_{v moy}$ et E_c induits par la composante de déformation hydrostatique peuvent être exprimés par les équations suivantes :

$$\delta E_{v moy} = a_v \left(\frac{\Delta\Omega}{\Omega} \right) \quad (1.23)$$

$$\delta E_c = a_c \left(\frac{\Delta\Omega}{\Omega} \right) \quad (1.24)$$

Où a_v et a_c sont les potentiels de déformation hydrostatique pour la bande de valence et de conduction, respectivement. $\Delta\Omega/\Omega$ est le changement de volume fractionnel qui, pour la direction (001), peut être approximé par l'équation suivante : [26]

$$\frac{\Delta\Omega}{\Omega} = \varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz} \approx 2 * \varepsilon_{xx} + \varepsilon_{zz} \quad (1.25)$$

Où les composantes de la déformation sont définies par les équations (1.18) et (1.19).

Les semi-conducteurs sont dégénérés au centre de la zone de Brouillin Γ , La dégénérescence de la bande de valence à Γ est levée par la contrainte de cisaillement.

Les décalages d'énergie résultants sont calculés par rapport à leur moyenne pondérée comme suit : [27]

$$\delta E_{v,2}(x) = \frac{\Delta_0(x)}{3} - \frac{\delta E_{001}(x)}{2}; \quad (1.26)$$

$$\delta E_{v,1}(x) = -\frac{\Delta_0(x)}{6} + \frac{\delta E_{001}(x)}{4} + \frac{1}{2} \sqrt{\Delta_0^2(x) + \Delta_0(x)\delta E_{001}(x) + \frac{9}{4}(\delta E_{001}(x))^2} \quad (1.27)$$

$$\delta E_{v,3}(x) = -\frac{\Delta_0(x)}{6} + \frac{\delta E_{001}(x)}{4} - \frac{1}{2} \sqrt{\Delta_0^2(x) + \Delta_0(x)\delta E_{001}(x) + \frac{9}{4}(\delta E_{001}(x))^2} \quad (1.28)$$

Où Δ_0 est l'énergie spin-orbite splittée dans un matériau non-contraint, et δE_{001} est donnée par :

$$\delta E_{001}(x) = 2b(x)(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{zz}) \quad (1.29)$$

Où b représente le potentiel de déformation de cisaillement de la bande de valence. Les valeurs de b, Δ_0, a_v, a_c et $E_{v moy}$ en fonction de x sont obtenus par interpolation linéaire.

Pour le cas non-contraint, $\delta E_{001} = 0$. Il résulte des équations (1.26), (1.27) et (1.28) que :

$$\delta E_{v,1} = \delta E_{v,2} = \frac{\Delta_0}{3} \quad , \quad \delta E_{v,3} = -\frac{2\Delta_0}{3} \quad (1.30)$$

$E_{v,hh}$ et $E_{v,th}$ sont donc dégénérées pour l'interface en accord de maille, et la bande de valence la plus élevée se situe à $\Delta_0/3$ au-dessus de la bande $E_{v moy}$. $E_{v,hh}$ sera toujours la bande de valence la plus élevée. [26]

- Les énergies de bandes peuvent donc être exprimées comme suit : [26]

$$E_{vi} = E_{v moy} + a_v \left(\frac{\Delta\Omega}{\Omega} \right) + \delta E_{vi} \quad \text{Avec } i=1-3 \quad (1.31)$$

E_{v1} représente l'énergie de bande de valence des trous légers ($E_{v,th}$)

E_{v2} représente l'énergie de bande de valence des trous lourds ($E_{v,hh}$)

E_{v3} représente l'énergie de la bande spin-orbite (Δ_{so})

$$E_c = E_{v\ moy} + \frac{\Delta_0}{3} + E_{g,0} + a_c \left(\frac{\Delta\Omega}{\Omega} \right) \quad (1.32)$$

Où, $E_{g,0}$ est l'énergie de gap non contraint.

$$E_{g,i} = E_c - E_{vi} \quad \text{Avec } i = 1 - 2 \quad (1.33)$$

$E_{g,1}$ représente $E_{g,lh}$ l'énergie de gap des trous légers.

$E_{g,2}$ représente $E_{g,hh}$ l'énergie de gap des trous lourds.

Les décalages de bandes peuvent être exprimés comme suit :

$$\Delta E_{vi} = E_{vi} - E_{v\text{substrat}} \quad , \quad i=1-3 \quad (1.34)$$

$$\Delta E_c = E_{c\text{substrat}} - E_c \quad (1.35)$$

La distribution de la discontinuité de la bande interdite entre la bande de valence et la bande de conduction, peut être exprimée comme suit : [26]

$$Q_{v,i} = \frac{\Delta E_{vi}}{\Delta E_{vi} + \Delta E_c} = \frac{\Delta E_{vi}}{\Delta E_{gi}} = \frac{\Delta E_{vi}}{E_{g\text{substrat}} - E_{g,i}} \quad (1.36)$$

$$Q_{c,i} = \frac{\Delta E_c}{\Delta E_{vi} + \Delta E_c} = \frac{\Delta E_c}{\Delta E_{gi}} = \frac{\Delta E_c}{E_{g\text{substrat}} - E_{g,i}} \quad (1.37)$$

Le décalage de la bande interdite d'une couche épitaxie en raison de la contrainte biaxiale peut être exprimé comme suit :

$$\Delta E_{gc-i} = E_{g,i} - E_{g,0} \quad (1.38)$$

$$\Delta E_{gc-1} = \Delta E_{gc-lh} \quad (\text{pour une couche en compression})$$

$$\Delta E_{gc-2} = \Delta E_{gc-hh} \quad (\text{pour une couche en tension})$$

1.8 Conclusion

Dans ce premier chapitre, on a regroupé quelques propriétés générales des semi-conducteurs III-V (propriétés physiques et propriétés électroniques), les techniques de l'élaboration de ces matériaux, les puits quantiques ont été également mentionné, tous cela est fait pour bien comprendre la théorie afin de passer à la partie simulation. Dans le chapitre suivant on étudiera les résultats de la simulation des deux matériaux InGaAs/GaAs et InGaAs/InP.

Chapitre II : Résultat et discussion des simulations des structures InGaAs/GaAs et InGaAs/InP

2.1 Introduction

Le but de ce chapitre est de présenter et interpréter les résultats obtenus par simulation des structures à puits quantique InGaAs/GaAs et InGaAs/InP pour déterminer les concentrations d'indium optimales qui résulte des longueurs d'onde d'émission exploitables dans des plusieurs applications comme la fibre optique. Pour cela des simulations ont été faites à fin d'étudier l'influence de la contrainte et la concentration d'indium sur les différents paramètres comme l'énergie de la bande interdite, l'énergie des bandes, les décalages de bandes et le taux de confinement des porteurs.

2.2 Paramètre de maille

La figure (2.1) montre l'évolution du paramètre de maille de la couche active *InGaAs* en fonction de la concentration d'Indium (In). Nous observons que l'augmentation de la concentration de l'indium x induit une augmentation linéaire selon la loi de Végard du paramètre de maille. Par exemple pour $x = 0.20$ on a $a_{InGaAs} = 5.73 \text{ \AA}$, si on varie la concentration de 0.20 à 0.90 le paramètre de maille atteint la valeur 6.01 \AA , c'est-à-dire on a une augmentation de $\Delta a = 0.28 \text{ \AA}$. Cette étude nous permet d'éviter l'instabilité de la structure à puits quantique en optimisant la couche active.

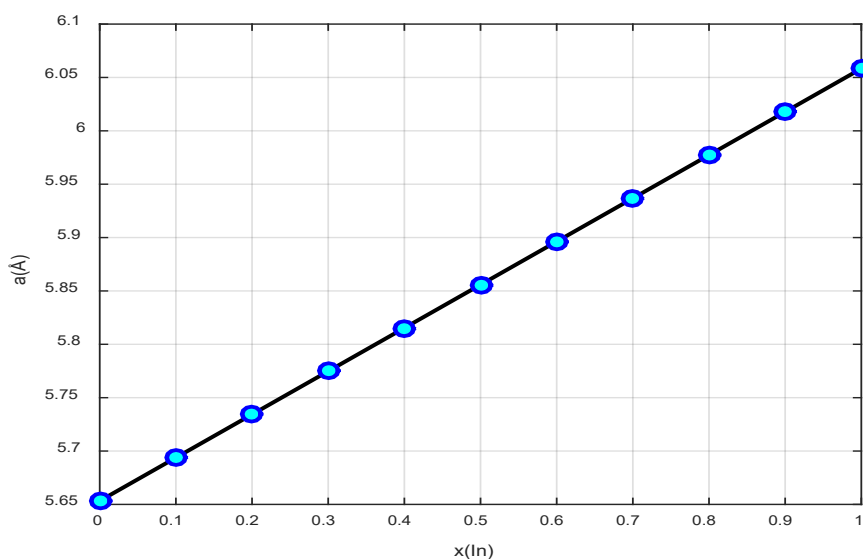


Figure 2.1 La variation de paramètre de maille de l'alliage InGaAs en fonction de la concentration d'indium (In).

Lorsqu'on a un désaccord de maille entre la couche active et le substrat, cela génère une déformation de la structure que ce soit par compression lorsqu'on a $a_s < a_e$, ou bien l'extension dans le cas inverse.

2.3 La Contrainte

Les figures (2.2) (a et b) représentent la variation de la déformation biaxiale ϵ_{xx} et uniaxiale ϵ_{zz} de l'hétérostructure *InGaAs/GaAs* et *InGaAs/InP* en fonction de la concentration d'indium à 300 K. On observe qu'il y a une relation proportionnelle et linéaire entre les deux contraintes ϵ et la concentration d'indium. Pour l'hétérostructure *InGaAs/GaAs* (Figure 2.2.a), les valeurs de la contrainte biaxiale ϵ_{xx} sont négatives pour n'importe quelle valeur de la concentration d'indium, cela signifie qu'il y a une contrainte compressive, par exemple lorsque la composition d'indium égale à 30% on a une déformation biaxiale de 2%. Pour *InGaAs/InP* (Figure 2.2.b), On remarque également que la contrainte biaxiale décroît en augmentant la concentration d'indium, dans cette structure on a également une contrainte compressive car le paramètre de maille de la couche active *InGaAs* est supérieur au paramètre de maille du substrat. Dans notre étude on voudrait que les structures soient stables et fiables, pour cela, On peut fixer la concentration x pour avoir une déformation minimale afin d'augmenter la performance de la structure.

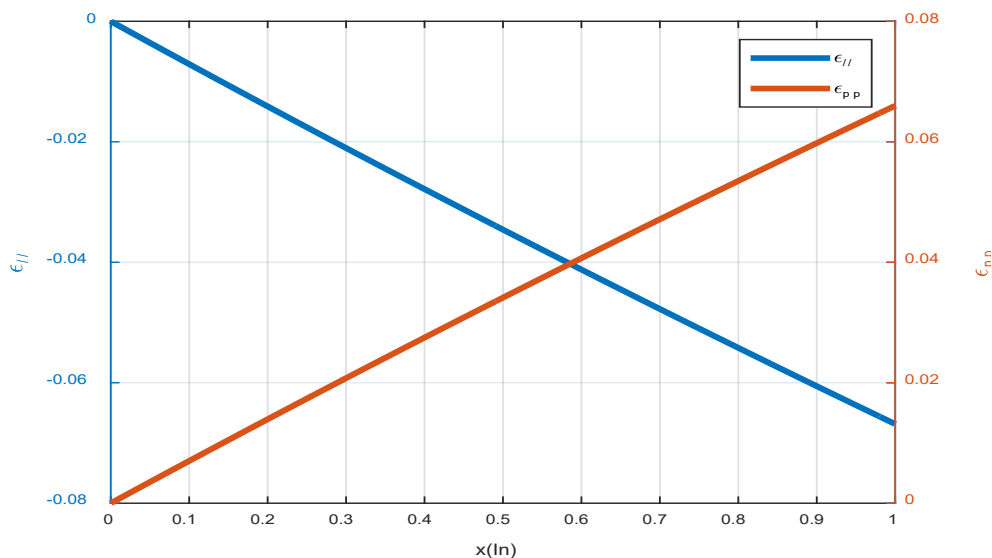


Figure 2.2.a Variation de la déformation biaxiale et uniaxiale de l'hétérostructure *InGaAs/GaAs* en fonction de concentration d'indium.

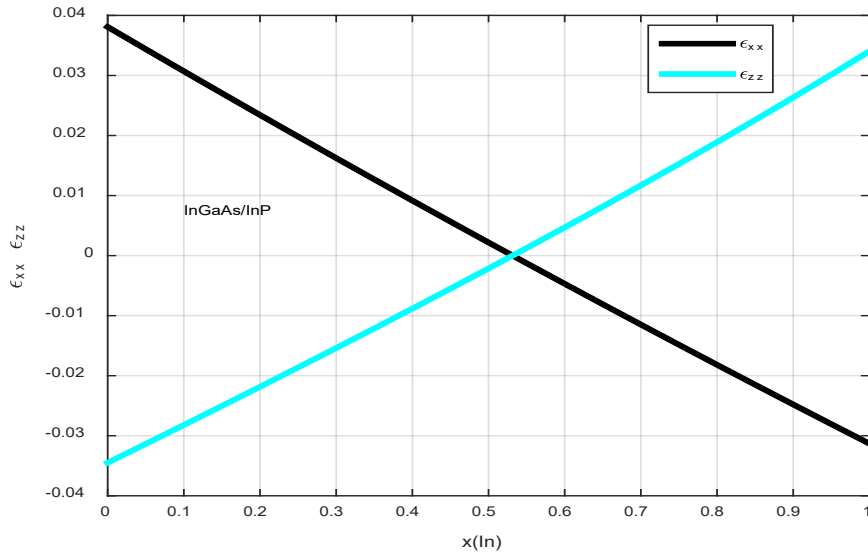


Figure 2.2. b Variation de la contrainte uniaxiale et biaxiale de l'hétérostructure InGaAs/InP en fonction de la concentration d'indium.

2.4 L'effet de la température sur l'énergie de la bande interdite et la longueur d'onde

2.4.1 L'effet de la température des binaires InAs, GaAs et InP

La figure (2.3) montre l'effet de la température sur l'énergie de gap des semi-conducteurs binaires *InAs*, *GaAs* et *InP*. On note que l'augmentation de la température induit une diminution de l'énergie de gap en (eV).

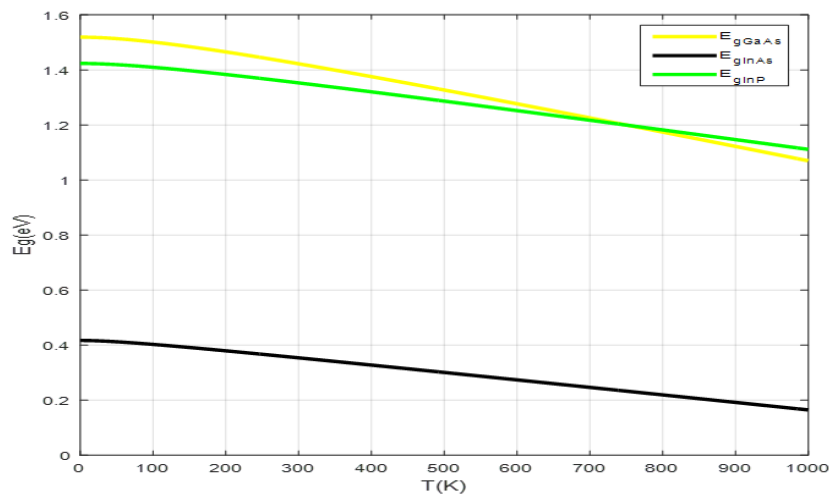


Figure 2.3 Variation de l'énergie de gap en fonction de la température de InAs, GaAs et InP.

Par exemple, pour une valeur de $T = 100\text{ K}$ l'énergie de gap de $GaAs$ égale à $E_g(GaAs) = 1.50\text{ eV}$ et l'énergie de gap de $InAs$ égale à $E_g(InAs) = 0.40\text{ eV}$, si on varie la température à $T = 400\text{ K}$ l'énergie de gap de des deux binaires devient $E_g(GaAs) = 1.37\text{ eV}$ et $E_g(InAs) = 0.33\text{ eV}$. Cette étude permet de choisir la température optimale pour une valeur d'énergie de gap désiré.

2.4.2 L'effet de la température sur l'énergie de gap de l'alliage $In_xGa_{1-x}As$

La figure (2.4) montre l'influence de la température et la concentration d'indium sur l'énergie de gap de la couche active $In_xGa_{1-x}As$. Dans cette simulation, l'augmentation de la concentration d'indium et la température induisent une diminution de l'énergie de gap de l'alliage. Par exemple, si on fixe x à 0.1 et on varie T de 300 à 400 K l'énergie de la bande interdite diminue de 1.277 eV à 1.232 eV donc $\Delta E_g = -0.045\text{ eV}$.

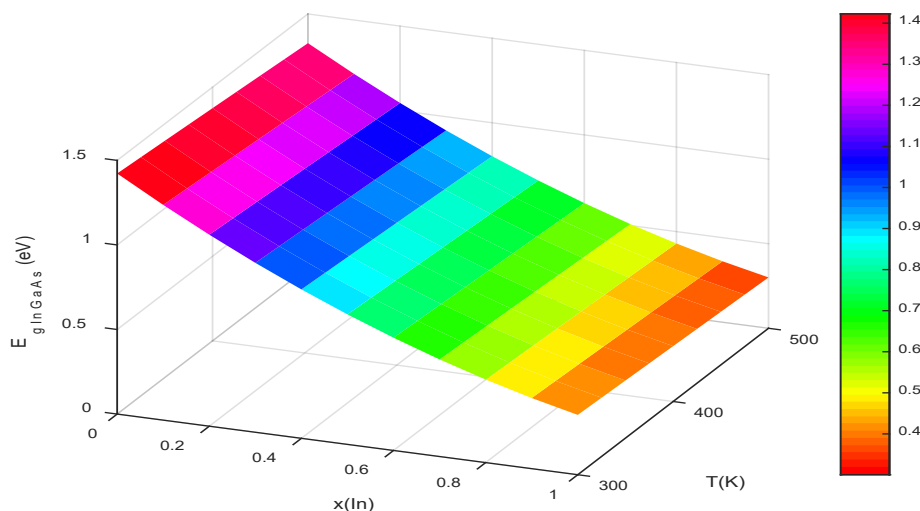


Figure 2.4 L'énergie de gap de l' $InGaAs$ en fonction de la température et de la concentration de l'indium (In).

2.4.3 L'effet de la température sur la longueur d'onde de l'alliage $In_xGa_{1-x}As$

La figure (2.5) montre la variation de la longueur d'onde en fonction de la température en Kelvin et la concentration d'indium. Cette étude nous permet de choisir la concentration d'indium et la température optimales pour une énergie de gap et une longueur d'onde désirées pour une structure fiable. Dans cette simulation, l'augmentation de la concentration d'indium et la température induisent une augmentation de la longueur d'onde de la couche active

$In_xGa_{1-x}As$. Pour $x=10\%$ et $x=20\%$, $T=300K$, $\lambda = 0.9743 \mu m$ et $\lambda = 1.095 \mu m$ respectivement, et pour $x=10\%$, $T=400K$ et $T=500K$, $\lambda = 1.01 \mu m$ et $\lambda = 1.05 \mu m$ respectivement. Donc on note une légère augmentation en variant la température.

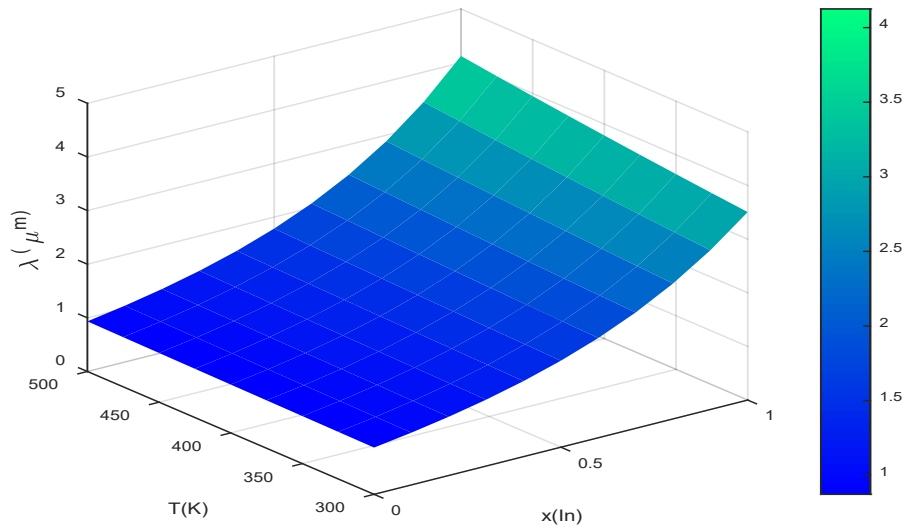


Figure 2.5 variation de la longueur d'onde en fonction de la concentration d'Indium et la température

2.5 L'absorption

Les figures (2.6) (a et b) étudient l'absorption du matériau $In_xGa_{1-x}As$ en fonction l'énergie de gap et la concentration d'indium et en fonction de l'énergie de gap et la température. On observe que l'absorption augmente avec l'augmentation de l'énergie de gap et de la concentration d'indium et augmente également avec la variation de la température et de l'énergie, donc pour des applications en électronique il faut tenir en compte le coefficient d'absorption de la couche active, par exemple pour des applications laser, on veut avoir une absorption faible, donc on va travailler sur des concentrations d'indium et des températures précises

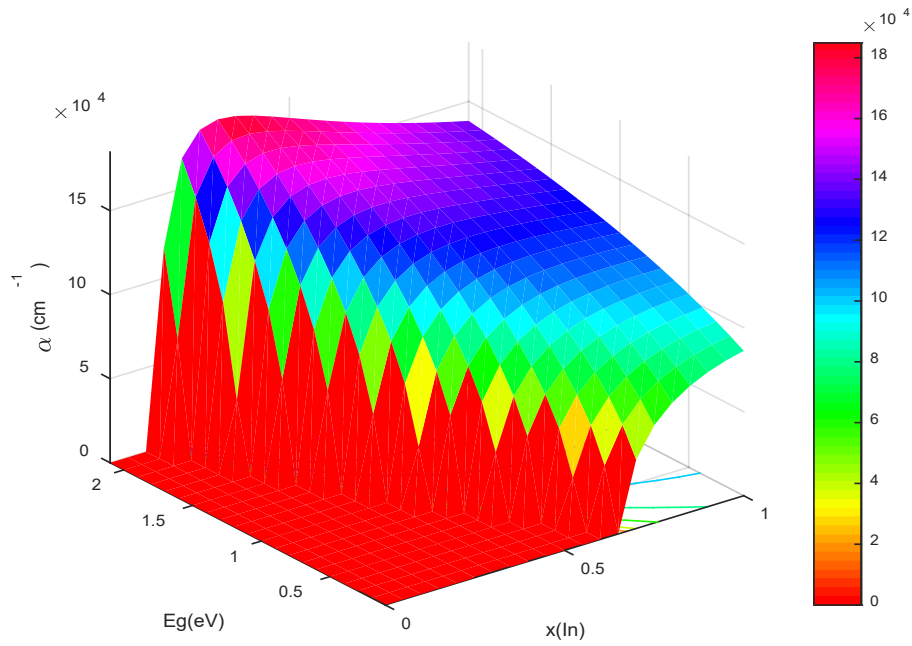


Figure 2.6.a La variation de l'absorption en fonction de l'énergie et de la concentration d'indium

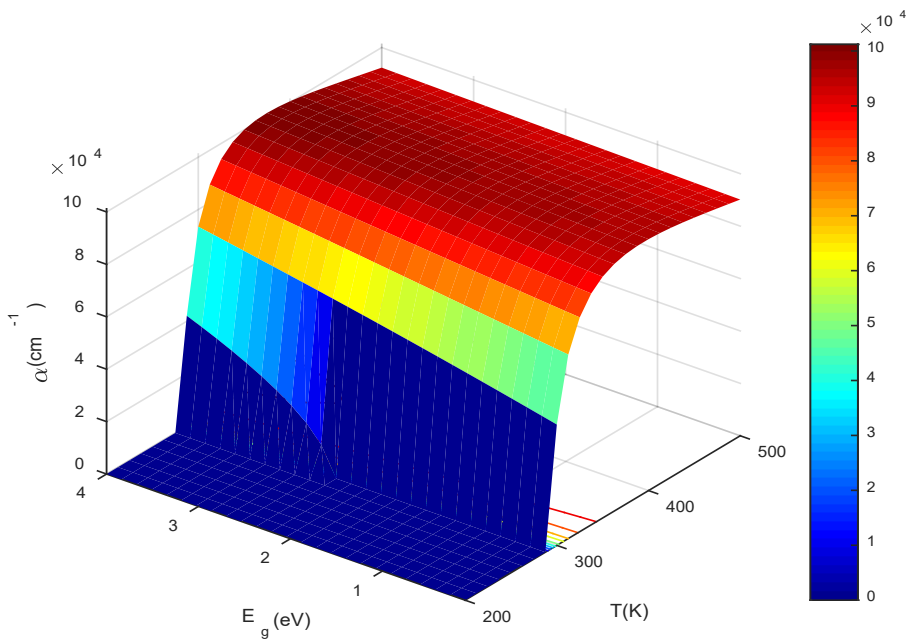


Figure 2.6.b La variation de l'absorption de la couche active InGaAs en fonction de l'énergie et de la température.

2.6 L'indice de réfraction

La Figure (2.7) illustre l'influence de la longueur d'onde et la concentration d'indium sur l'indice de réfraction. L'indice de réfraction varie de 2.8 à 3.6, Ce dernier diminue en augmentant la longueur d'onde et la concentration d'indium. Nous remarquons également que nous avons des valeurs importantes représentées par des pics sur le graphe. Le Tableau 2.1 illustre quelques exemples. À l'accord de maille du matériau InGaAs/GaAs c'est-à-dire à $x(\text{In}) = 0\%$, l'indice de réfraction vaut 3.238 et à $x(\text{In})=53\%$ qui est le point de l'accord de maille du matériau InGaAs/InP, La valeur de l'indice de réfraction vaut 3.4. Cette étude permet d'optimiser la transmission et la réflexion du matériau étudié

La longueur d'onde $\lambda(\mu\text{m})$	0.75	4	5
La concentration d'indium	20%	50%	70%
L'indice de réfraction	3.594	3.626	3.646

Tableau 2.1 Illustre les valeurs des pics de l'indice de réfraction du matériau $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$.

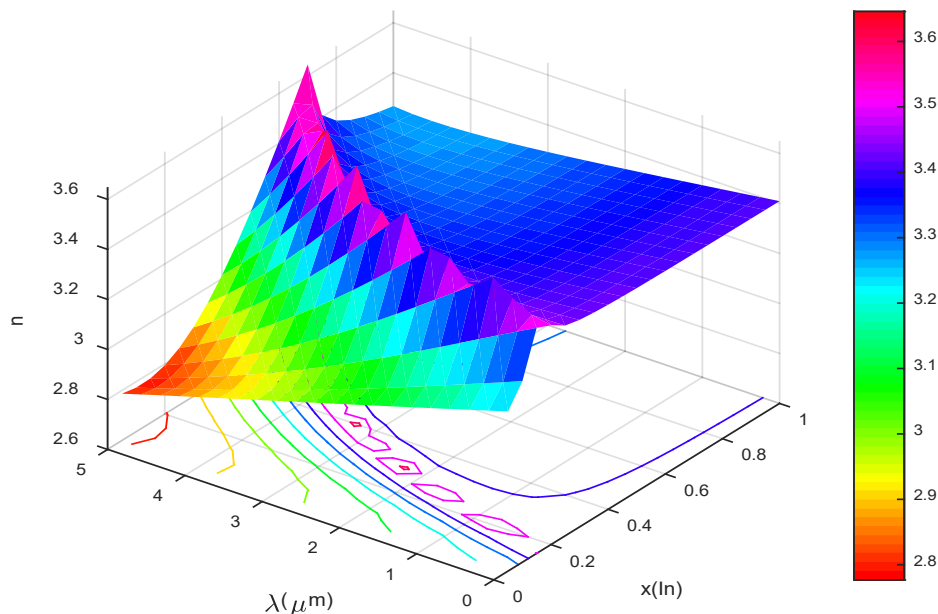


Figure 2.7 La variation de l'indice de réfraction de la couche active $\text{In}_x\text{Ga}_x\text{As}$ en fonction de la longueur d'onde et de la concentration d'indium.

2.7 L'épaisseur critique

Les figures (2.8) (a et b) représentent l'épaisseur critique L_c des hétérostructures $In_xGa_{1-x}As/GaAs$ et $In_xGa_{1-x}As/InP$ en fonction de la concentration d'indium (In) à $T=300K$. Dans cette simulation, nous avons tracés l'épaisseur critique estimés à partir de deux modèles de « People et Bean » et « Matthew et Blackslee » en utilisant la méthode de Dichotomie. On note que l'épaisseur critique diminue de façon semi-log avec l'augmentation de la concentration de l'indium (In) pour le matériau $In_xGa_{1-x}As/GaAs$. Pour le matériau $In_xGa_{1-x}As/InP$, l'épaisseur critique augmente jusqu'à atteindre le Point de l'accord de maille $x(In) = 53\%$ après il diminue en fonction de la concentration d'indium. Pour le choix de l'épaisseur de la couche active on doit réaliser la condition $L_w < L_c$ afin de minimiser la dislocation de la structure.

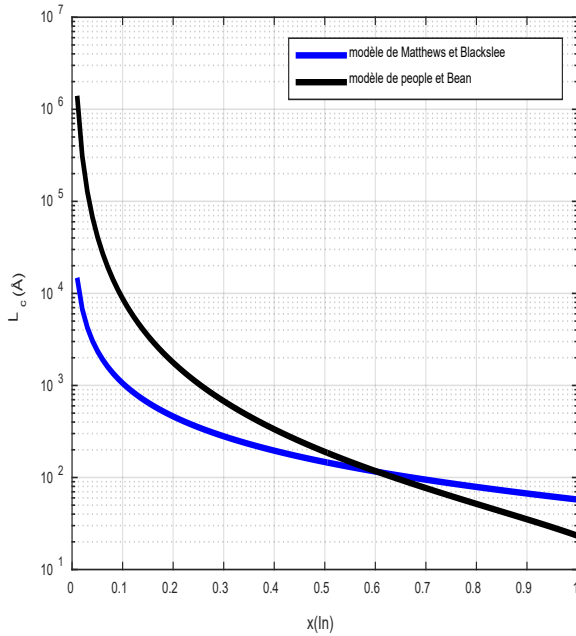


Figure 2.8.a La variation de l'épaisseur critique de la structure $InGaAs/GaAs$ en fonction de la concentration d'indium.

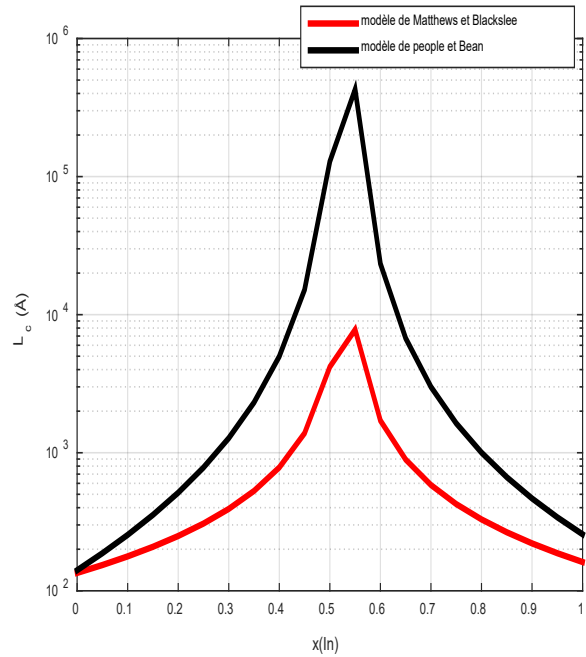


Figure 2.8.b L'évolution de l'épaisseur critique d' $InGaAs/InP$ en fonction de la concentration d'indium à 300 K.

2.8 L'énergie de bande interdite contrainte et non contrainte

Les figures (2.9.a) et (2.9.b) illustrent la variation d'énergie de la bande interdite (gap) des trous lourds et des trous légers en fonction de la concentration d'indium à $T = 300 K$, respectivement. Pour l'hétérostructure $InGaAs/GaAs$, Les énergies de bande interdite diminuent en fonction de la concentration d'indium et ils sont supérieurs à l'énergie de gap sans contrainte, l'énergie de gap des trous légers est inférieure à celle des trous lourds $E_{glh} < E_{ghh}$.

Pour *InGaAs/InP*, les énergies de gap diminuent également en fonction de la concentration d'indium, l'accord de maille entre la couche active et le substrat se situe à $x = 0.53$, les énergies de gap des trous lourds et des trous légers sont inférieures à l'énergie E_g sans contrainte à $x < 0.53$ et sont supérieures à cette dernière à $x > 0.53$. Nous avons simulé l'effet de la concentration d'indium sur l'énergie de la bande interdite pour optimiser le phénomène de transition des porteurs (électrons, trous) entre les deux bandes de conduction et de valence.

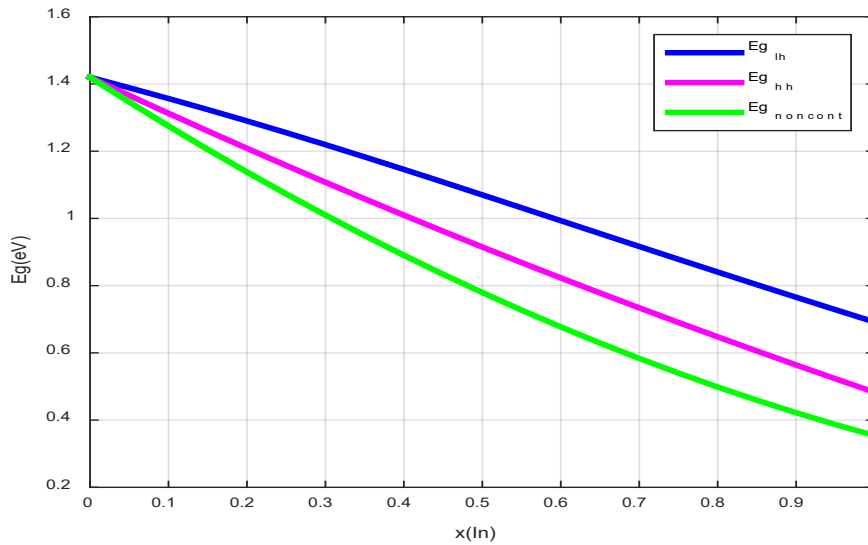


Figure 2.9.a La variation d'énergie de gap des trous lourds en fonction de la concentration d'indium pour InGaAs/GaAs à T=300K.

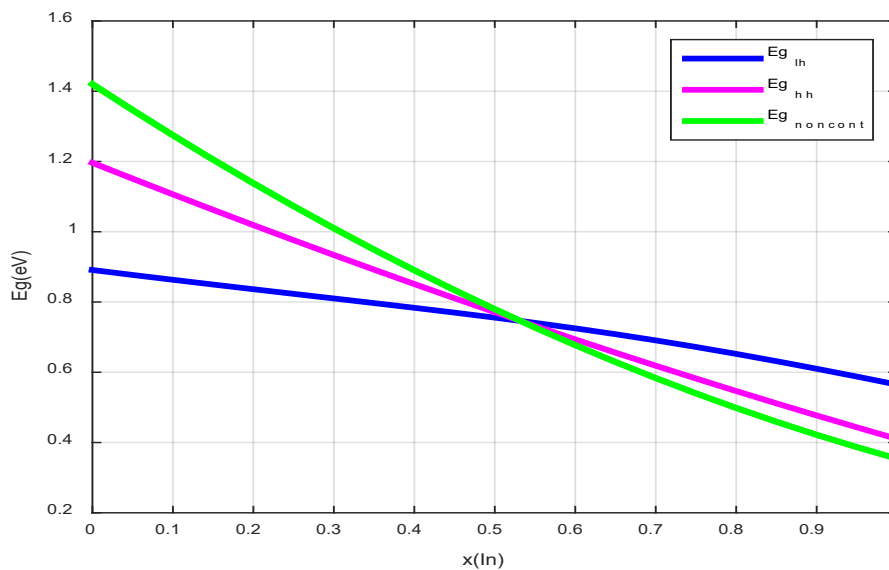


Figure 2.9.b La variation d'énergie de gap des trous lourds et légers en fonction de la concentration d'indium pour InGaAs/InP à 300K.

2.9 La longueur d'onde seuil

Les figures (2.10) (a et b) représentent la variation de la longueur d'onde d'émission des trous lourds et des trous légers en fonction de la concentration d'indium. Pour *InGaAs/GaAs* (figure 2.10.a), On observe que la longueur d'onde dans les 3 cas augmente avec la concentration de l'indium, la longueur d'onde des trous lourds augmente de 0.8732 à 2.569 μm . Pour *InGaAs/InP* (figure 2.10.b), On observe également que la longueur d'onde des trous lourds et des trous légers augmente avec l'augmentation de la concentration d'indium, $\lambda_{sans\ contrainte} < \lambda_{hh} < \lambda_{lh}$ à $x < 0.53$ et $\lambda_{lh} < \lambda_{hh} < \lambda_{sans\ contrainte}$ à $x > 0.53$, la longueur d'onde des trous lourds varie de 1 à 3 μm , alors on peut avoir la gamme proche infrarouge (SWIR) et le moyen infrarouge (MWIR).

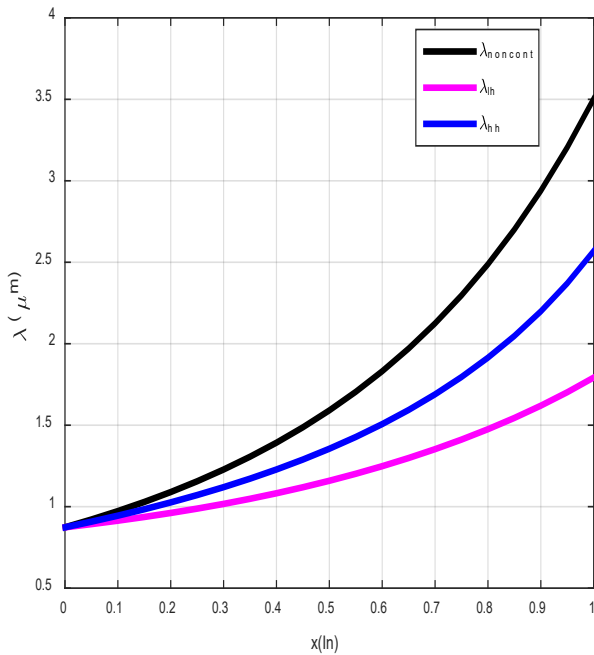


Figure 2.10.a La variation de la longueur d'onde d'émission des trous lourds et trous légers de l'*InGaAs/GaAs* en fonction de la concentration d'indium (In).

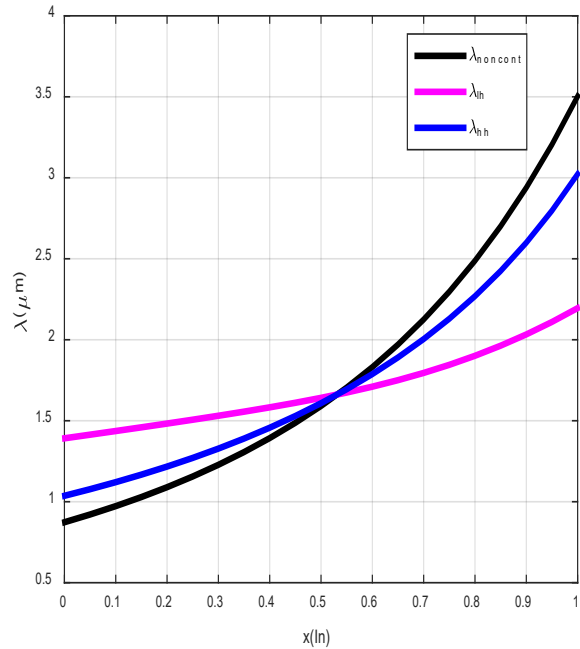


Figure 2.10.b L'effet de la concentration d'indium sur la longueur d'onde de l'*InGaAs/InP* à T=300K

2.10L'énergie de valence et de conduction

Les figures (2.11) (a et b) illustrent la variation d'énergie de conduction et l'énergie des trous lourds, trous légers et l'énergie de la bande spin-orbit des hétérostructures *In_xGa_{1-x}As/GaAs* et *In_xGa_{1-x}As/InP* en fonction de la concentration d'indium. La bande de conduction diminue avec l'augmentation de la concentration d'indium contrairement aux bandes de valence des trous lourds et trous légers, celles-ci augmentent avec l'augmentation de la concentration

d'indium. L'énergie de bande spin-orbit diminue en augmentant la concentration d'indium et est inférieure à l'énergie de bande des trous lourds et des trous légers. Pour *InGaAs/InP* (figure 2.11.b), les deux courbes de l'énergie de valence des trous lourds et des trous légers partagent le même point d'intersection $x = 53\%$.

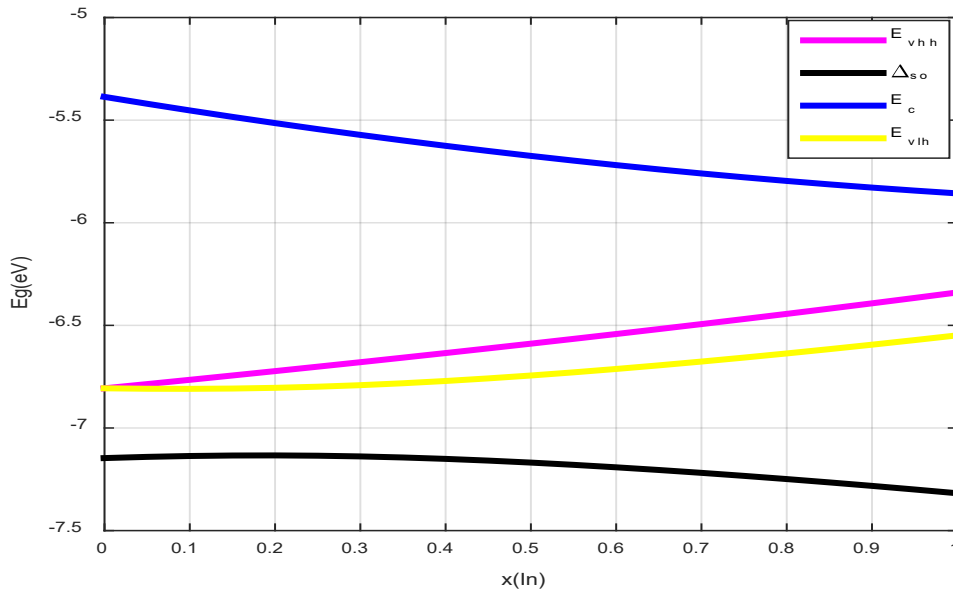


Figure 2.11.a L'effet de la concentration d'indium sur la bande de conduction, de valence et la bande spin-orbit de l'hétérostructure InGaAs/GaAs.

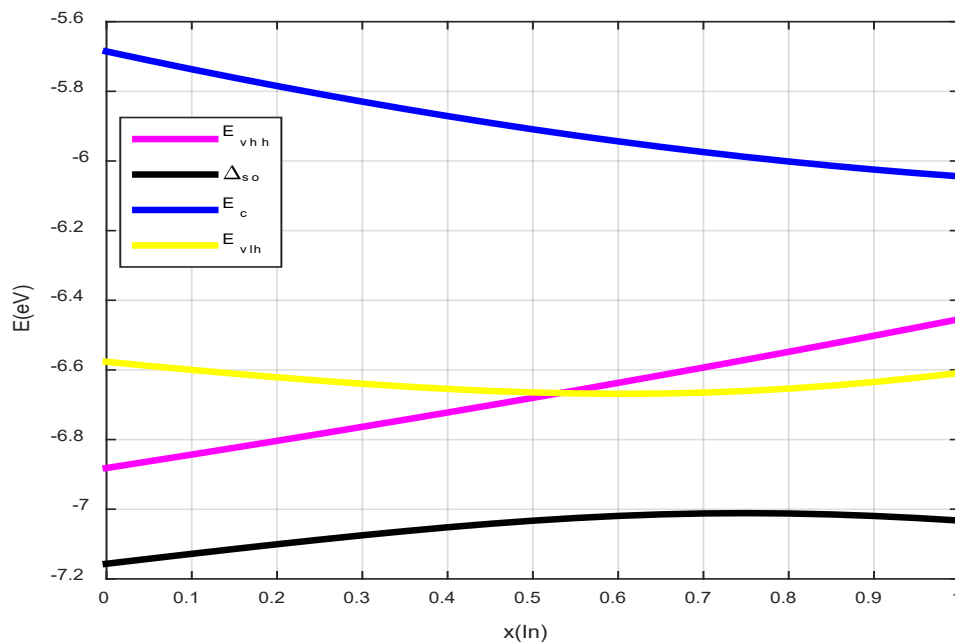


Figure 2.11.b L'effet de la concentration d'indium sur la bande de conduction, de valence et la bande spin-orbit de l'hétérostructure InGaAs/InP.

2.11 Barrière de potentiel

Les figures (2.12) (a et b) illustrent l'effet de la concentration d'indium sur le décalage de bande de conduction et de valence des trous lourds et trous légers pour les matériaux *InGaAs/GaAs* et *InGaAs/InP* à $T = 300\text{ K}$. On note que pour *InGaAs/GaAs* l'augmentation de l'indium induit une augmentation de décalage de bande de conduction ainsi que les décalages de bandes de valence des trous lourds et trous légers ce qui implique un puits quantique de type I (les porteurs sont confinés dans le puits). La sous-bande de valence supérieure ΔE_{vh} de l'hétérostructure *GaInAs/GaAs* est plus grande que ΔE_{vl} . Pour *InGaAs/InP*, le décalage de bande de conduction et le décalage de bande de valence des trous lourds augmentent tandis que le décalage de la bande de valence des trous légers diminue avec l'augmentation de la concentration d'indium. Cette simulation a pour but d'étudier et calculer la profondeur du puits ΔE_c et ΔE_v afin d'optimiser la structure à puits quantique.

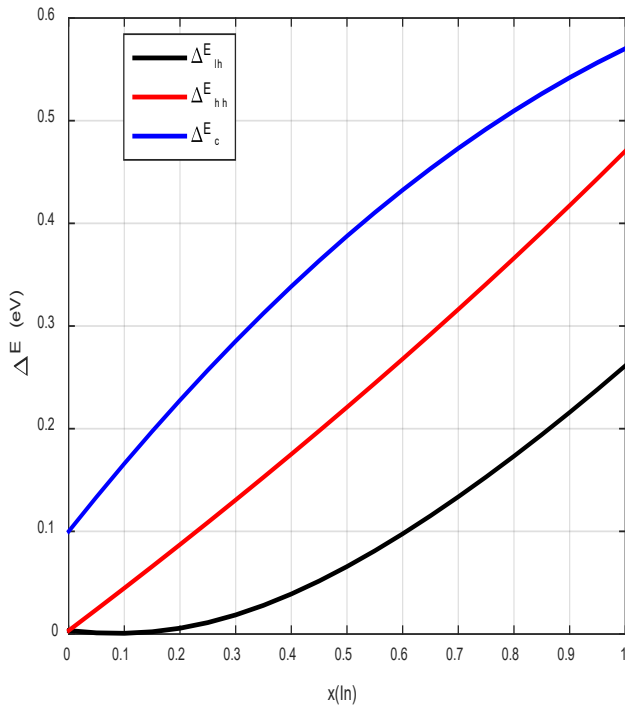


Figure 2.12.a La variation de décalage de bandes de GaInAs/GaAs en fonction de la concentration d'indium à $T=300\text{ K}$.

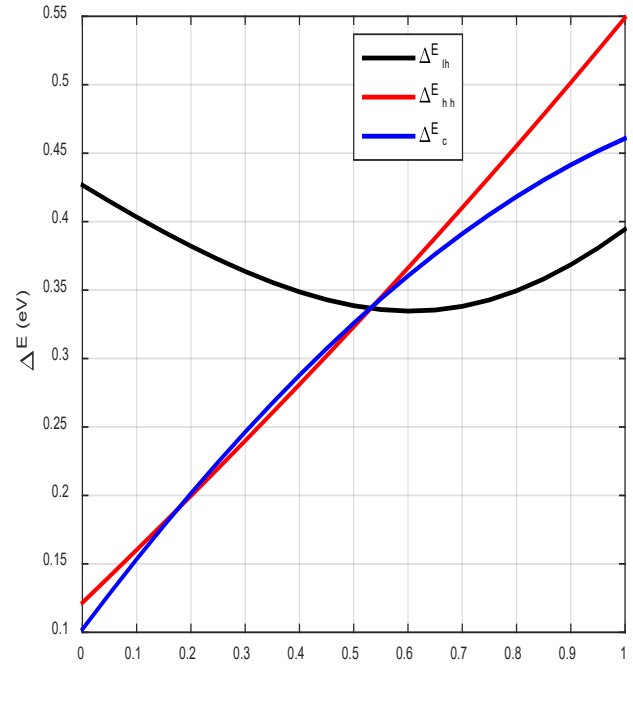


Figure 2.12.b La variation de décalage de bandes de GaInAs/InP en fonction de la concentration d'indium à $T=300\text{ K}$.

2.12 Taux de confinement

Les figures (2.13) (a et b) représentent l'effet de la concentration d'indium sur le taux de confinement quantique. Dans notre étude, on voudrait que les porteurs de charge soient confinés

dans le puits pour avoir des phénomènes désirés par exemple l'émission stimulée. Pour *InGaAs/GaAs* (figure 2.13.a), on remarque qu'il y a une symétrie entre le confinement des sous-bandes. Avec l'augmentation de la concentration d'indium, le taux de confinement de la bande de conduction Q_c diminue contrairement au taux de confinement de la bande de valence Q_v qui augmente en fonction de la concentration d'indium. Par exemple pour $x = 0.3$ $Q_{vhh} = 31\%$ et $Q_{chh} = 69\%$. Pour *InGaAs/InP* (figure 2.13.b), on observe également qu'il y a une symétrie entre le confinement des sous-bandes, le point d'intersection entre les bandes Q_c et Q_v égale à $x = 0.53$, le taux de confinement des sous-bandes HH et LH augmente rapidement pour $x < 0.53$ et devient presque constant pour $x > 0.53$. Ces résultats montrent que la contrainte a un effet très important sur les décalages de bandes.

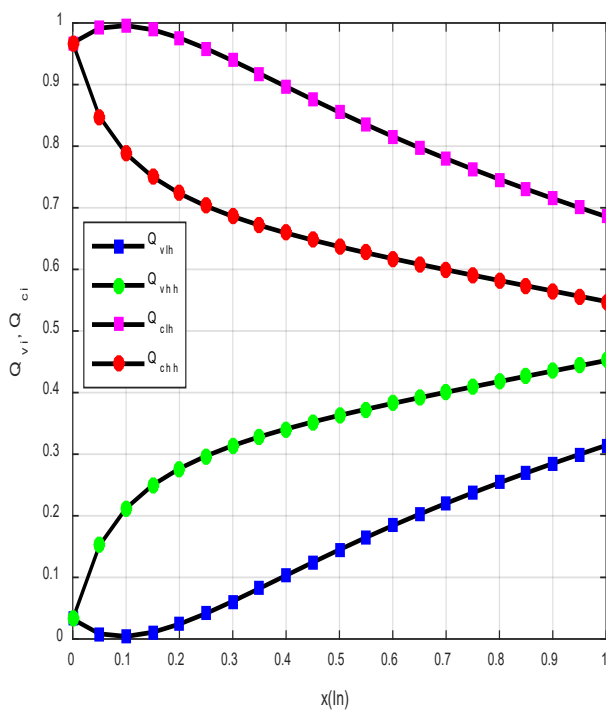


Figure 2.13.a La variation de taux de confinement de bande de valence et de conduction des trous lourds et légers de l'*InGaAs/GaAs* en fonction de la concentration d'indium à $T=300K$.

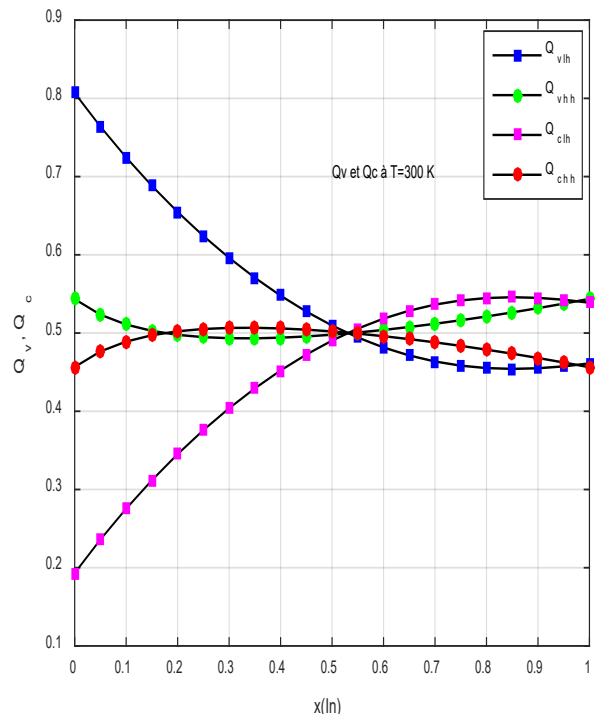


Figure 2.13.b La variation du taux de confinement de bande de valence et de bande de conduction de l'*InGaAs/InP* à $T=300K$

2.13 Conclusion

Dans ce deuxième chapitre, on s'est intéressé à l'optimisation des concentrations de l'indium afin d'avoir des longueurs d'onde exploitables pour la télécommunication optique. On a étudié l'effet de l'insertion de l'indium sur les propriétés physiques et optiques de la structure active *InGaAs* tels que le paramètre de maille et l'énergie de la bande interdite, on a également étudié

l'effet de la température et la concentration d'indium parallèlement sur l'énergie de la bande interdite, la longueur d'onde seuil ainsi que l'absorption et l'indice de réfraction. On s'est intéressé sur l'étude de la contrainte de ce matériau entre les substrats GaAs et InP et l'épaisseur critique en fonction de la concentration d'indium. Enfin on a étudié l'influence de l'incorporation de l'indium sur l'énergie de gap des trous lourds et des trous légers, l'énergie des bandes de valence et de conduction ainsi que le taux de confinement des deux structures *InGaAs/GaAs* et *InGaAs/InP*, ceux-ci montrent le degré de confinement des porteurs et donc un puits quantique.

Chapitre 3 Résultats et discussions des simulations

3.1 Introduction

Ce chapitre sera un enchaînement de simulations avec leurs interprétations appliquées sur le matériau à puits quantique GaAsP/GaP, ces simulations ont été faites afin d'étudier l'effet de l'incorporation de phosphore sur les différents paramètres optiques et physiques ainsi que l'effet de la contrainte sur les bandes d'énergie. Ensuite, on va comparer la structure InGaAs et GaAsP.

3.2 Etude des paramètres physiques, électroniques et optiques du matériau GaAsP/GaP

3.2.1 Paramètre de maille

La figure (3.1) illustre la variation du paramètre de maille en fonction de la concentration de phosphore, on observe que le paramètre de maille diminue avec l'augmentation de la concentration de phosphore, la concentration de phosphore (x) varie a un effet important, pour $x = 0.1$ et $x=0.7$ on a $a_{GaAsP} = 5.63 \text{ \AA}$ et $a_{GaAsP} = 5.51 \text{ \AA}$ respectivement. Donc, on a une réduction de $\Delta a = -0.12 \text{ \AA}$

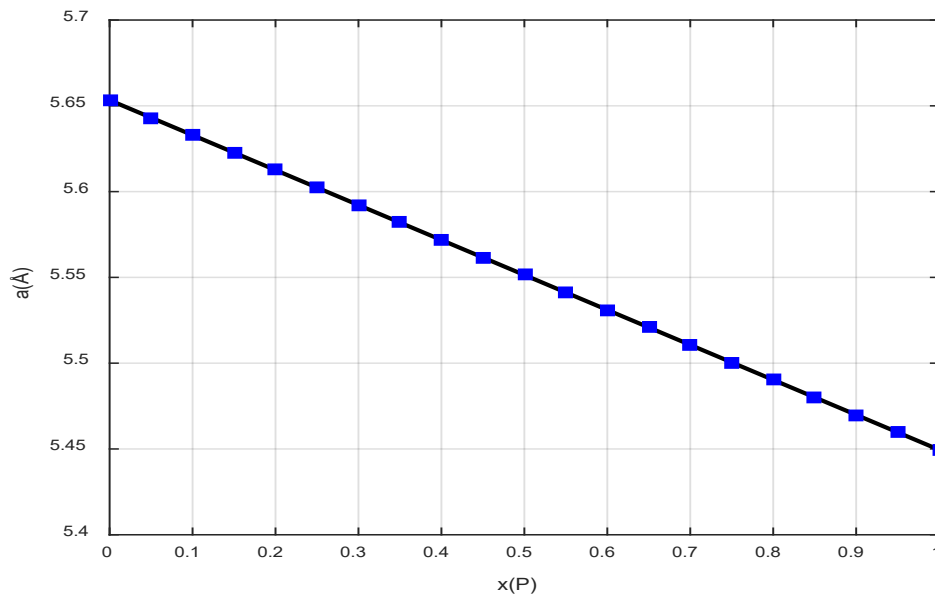


Figure 3.1 L'évolution du paramètre de maille en fonction de la concentration de phosphore.

3.2.2 Le désaccord de maille

La figure (3.2) représente l'effet de la concentration de phosphore sur la contrainte d'interface ϵ_{xx} et perpendiculaire ϵ_{zz} , les déformations ϵ varient linéairement selon la loi de Végard en fonction de la concentration de phosphore, cette simulation nous permet de fixer la valeur de la déformation pour avoir une structure à puit quantique fiable et stable. On constate que les valeurs de la contrainte biaxiale ϵ_{xx} sont négatives et augmentent avec l'augmentation de la concentration du phosphore x jusqu'à atteindre le 0 à $x = 1$, alors que la contrainte uniaxiale ϵ_{zz} les valeurs sont positives pour n'importe quelle valeur de la concentration de phosphore cela signifie qu'il y a une contrainte en compression, par exemple pour $x = 0.1$ et $x = 0.6$ on a une déformation de $\epsilon = 3\%$ et $\epsilon = 1\%$.

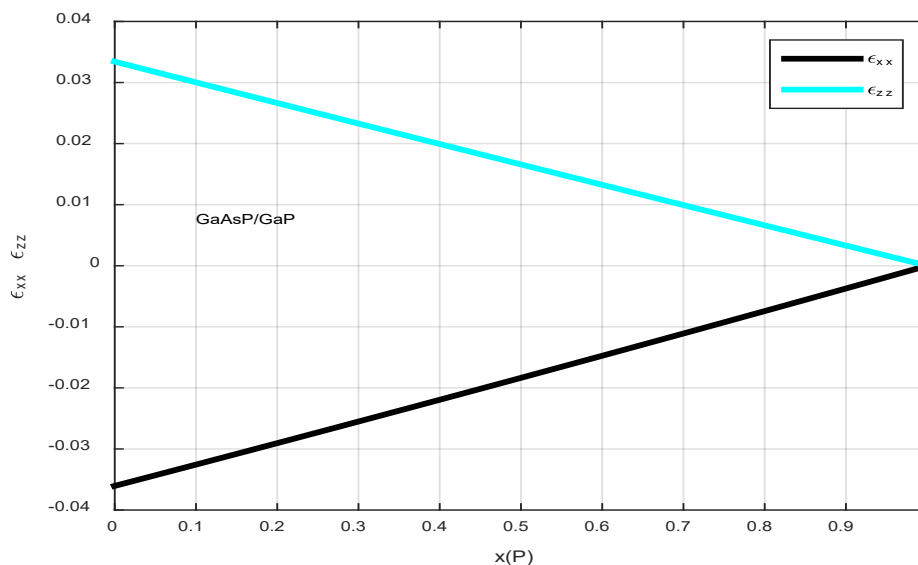


Figure 3.2 L'évolution des déformations en fonction de la concentration de phosphore.

3.2.3 L'absorption

Les figures (3.3) (a et b) montrent l'absorption du matériau *GaAsP* en fonction de l'énergie de gap et de la concentration de phosphore et en fonction de l'énergie et de la température. Cette simulation nous permet de fixer la température et la concentration de phosphore selon les applications optoélectronique. Pour la figure 3.3.a, on note que l'absorption réduit avec la variation de la concentration de phosphore x et l'énergie E . Pour la figure 3.3.b on observe qu'il y a une augmentation de l'absorption avec l'augmentation de la température et de la concentration du phosphore.

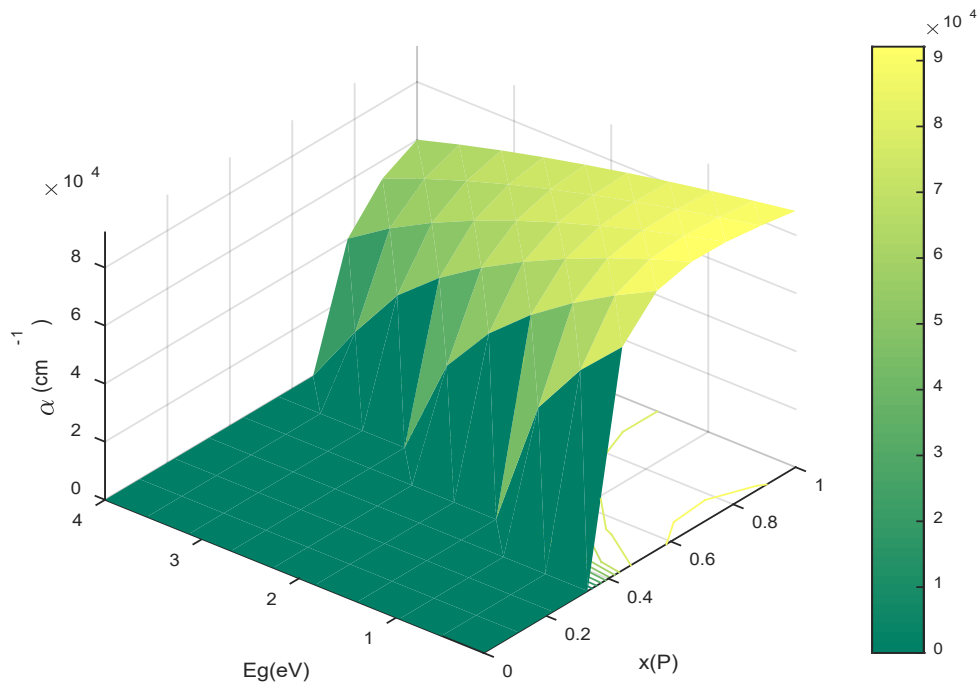


Figure 3.3.a L'effet de la concentration de phosphore et l'énergie de gap sur l'absorption de GaAsP.

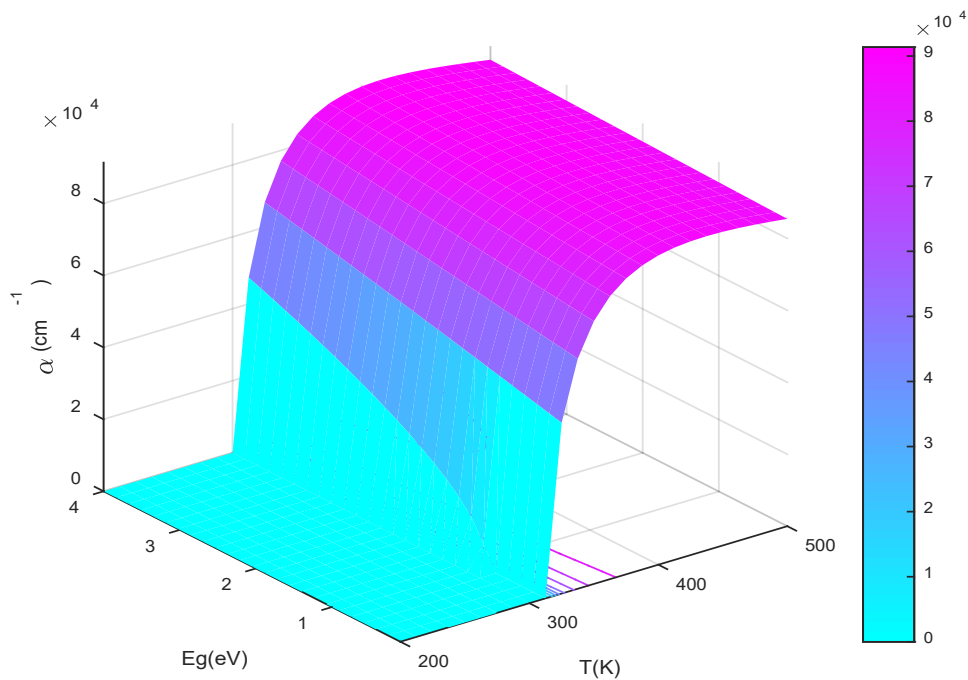


Figure 3.3.b L'effet de la température et l'énergie de gap sur l'absorption de GaAsP.

3.2.4 L'épaisseur critique de la structure GaAsP/GaP

La Figure (3.4) montre l'effet de la concentration de Phosphore P sur l'épaisseur critique L_c . Dans cette simulation, Nous avons tracé l'épaisseur critique en basant sur deux modèles « Matthews et Blacklee » et « People et Bean ». Nous observons que l'épaisseur critique augmente avec l'augmentation de la concentration de Phosphore. On peut fixer la concentration de Phosphore à fin d'éviter l'instabilité du matériau, alors on détermine la gamme de l'épaisseur critique du milieu actif pour une structure à puits quantique contrainte adéquate.

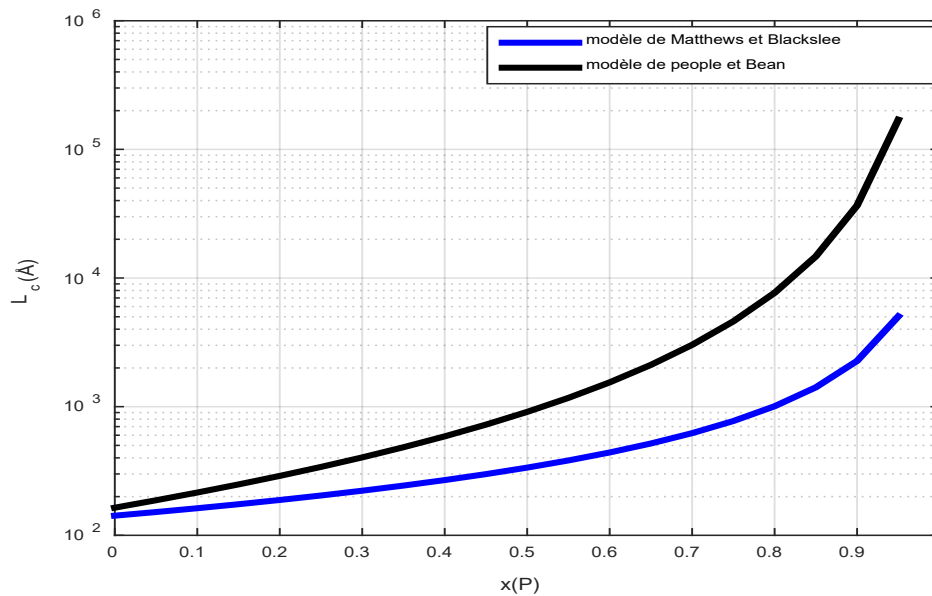


Figure 3.4 L'influence de la concentration de phosphore sur l'épaisseur critique.

3.2.5 L'effet de la température

La figure (3.5) illustre l'influence de la température et la concentration de phosphore sur l'énergie de gap de la structure $GaAsP$. L'énergie de gap augmente en augmentant la concentration de phosphore x et diminue avec l'augmentation de la température, par exemple pour $x = 20\%$ et $T = 300 K$ $E_g = 1.669 eV$ si on varie T à $450 K$, $E_g = 1.6 eV$ et pour $x = 60\%$, $T = 300 K$ et $T = 450 K$, $E_g = 2.21 eV$ et $E_g = 2.14 eV$, respectivement.

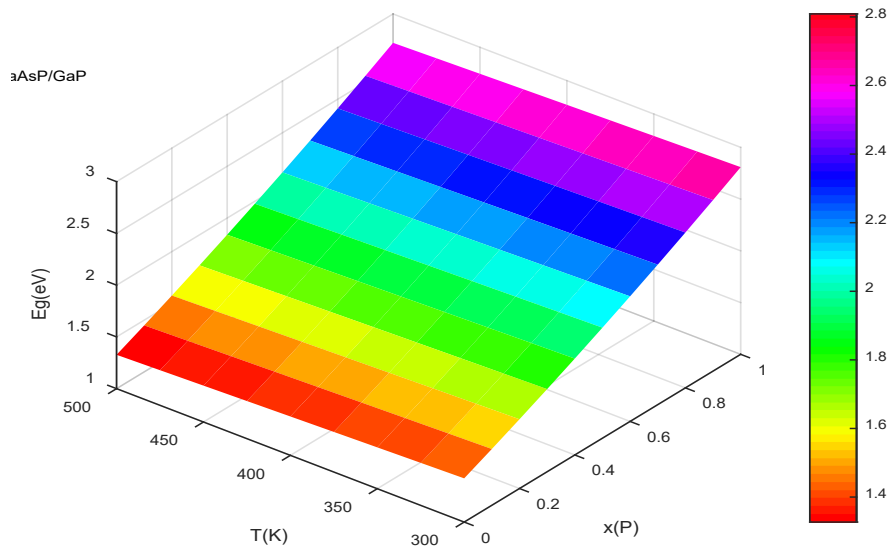


Figure 3.5 L'influence de la température et de la concentration de phosphore sur l'énergie de gap.

3.1.5 La longueur d'onde seuil

La figure (3.6) représente la longueur d'onde en fonction de la température et la concentration de phosphore. La longueur d'onde augmente avec la variation de la température et réduit avec l'augmentation de la concentration de phosphore. La longueur d'onde varie de $0.4 \mu m$ jusqu'à $0.9 \mu m$. Alors on peut avoir la gamme Infrarouge.

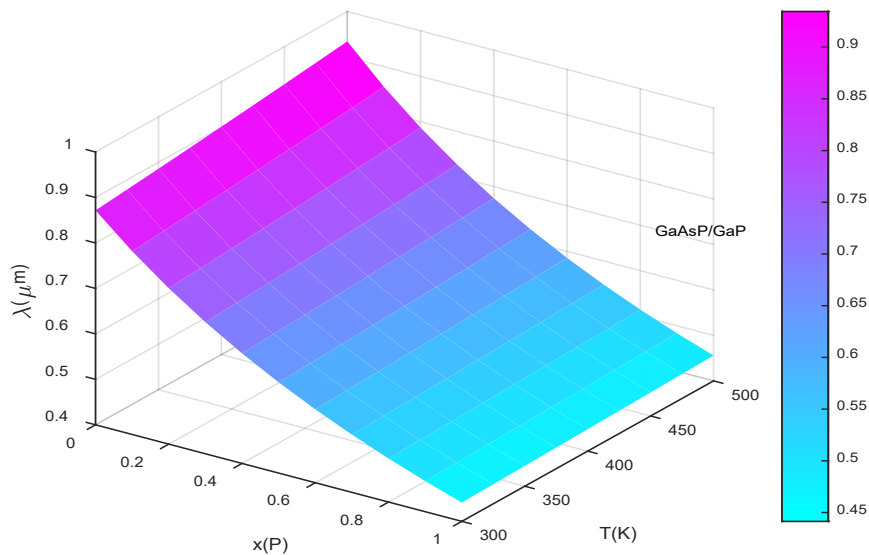


Figure 3.6 L'influence de la température et la concentration de phosphore sur la longueur d'onde.

3.2.6 L'énergie de bande de conduction et de bande de valence

La figure (3.7) montre les énergies des sous-bandes LH, HH et spin-orbit SO et la bande de conduction en fonction de la concentration de phosphore. On observe une augmentation de l'énergie de bande de conduction avec la variation de la concentration de phosphore, on note aussi que l'augmentation de la concentration de phosphore induit une diminution des énergies de bande de valence, l'énergie des sous-bandes diminuent jusqu'à atteindre une énergie commune à $x = 1$

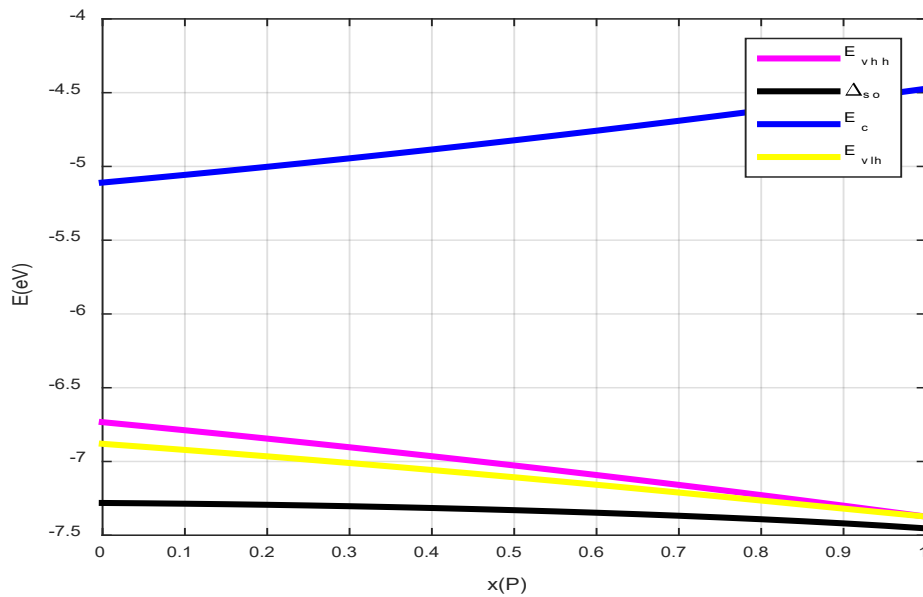


Figure 3.7 L'énergie de bandes en fonction de la concentration de phosphore.

3.2.7 L'énergie de la bande interdite

La Figure (3.8) exprime la variation de l'énergie de la bande interdite des trous lourds et des trous légers ainsi que la variation de la bande interdite sans contrainte en fonction de la concentration de Phosphore (P) à $T = 300K$. On note que les énergies augmentent en fonction de la concentration de Phosphore (P). L'énergie de la bande interdite des trous lourds et des trous légers est supérieure à l'énergie de gap contraint, l'énergie des trous lourds est inférieure à l'énergie des trous légers $E_{gnon\ constraint} < E_{ghh} < E_{glh}$

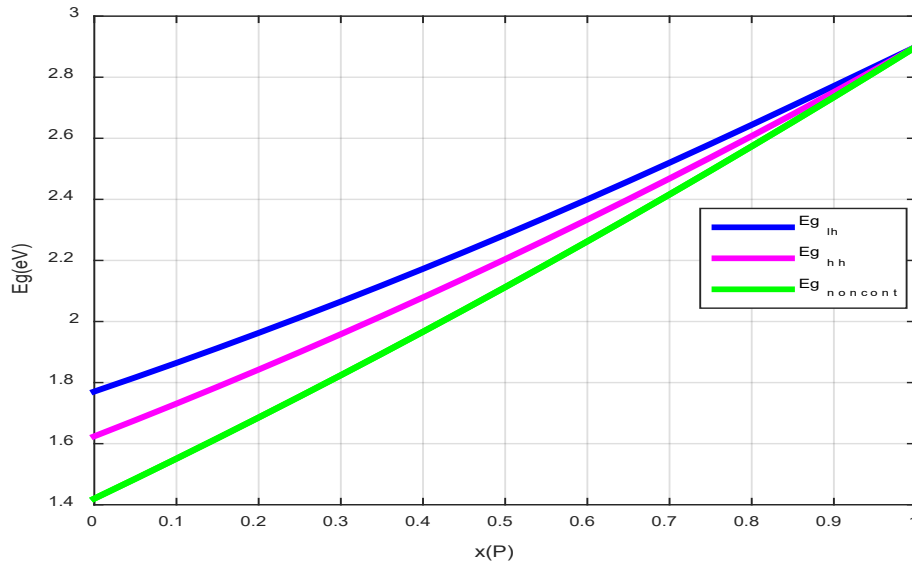


Figure 3.8 L'énergie de la bande interdite des trous lourds et des trous légers en fonction de la concentration de phosphore.

3.2.8 La Longueur d'onde seuil

La Figure (3.9) montre l'effet de la concentration de Phosphore sur la longueur d'onde des trous lourds et des trous légers ainsi que la longueur d'onde non contraint $\lambda_{lh} < \lambda_{hh} < \lambda_{noncont}$. La longueur d'onde des trous lourds varie de $0.76 \mu m$ à $0.4276 \mu m$.

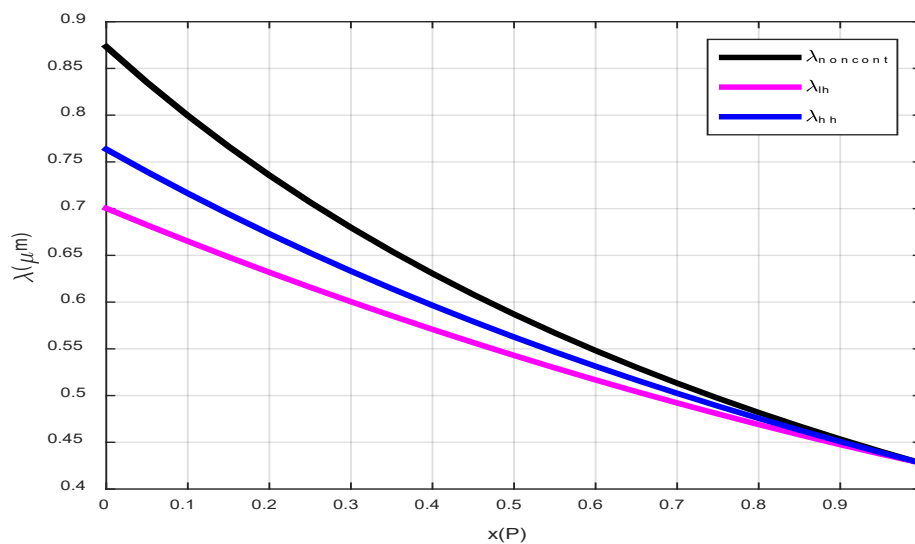


Figure 3.9 L'influence de la concentration de phosphore sur la longueur d'onde seuil.

3.2.9 Décalages de bandes

Dans la figure (3.10) montre l'évolution des décalages des bandes ΔE_c et ΔE_v en fonction de la concentration de phosphore $x(\text{In})$. On observe que les décalages de bandes diminuent et convergent jusqu'à atteindre 0 au point de l'accord de maille $x(P) = 1$, l'énergie de décalage de la bande de conduction et de la bande de valence des trous lourds sont superposés.

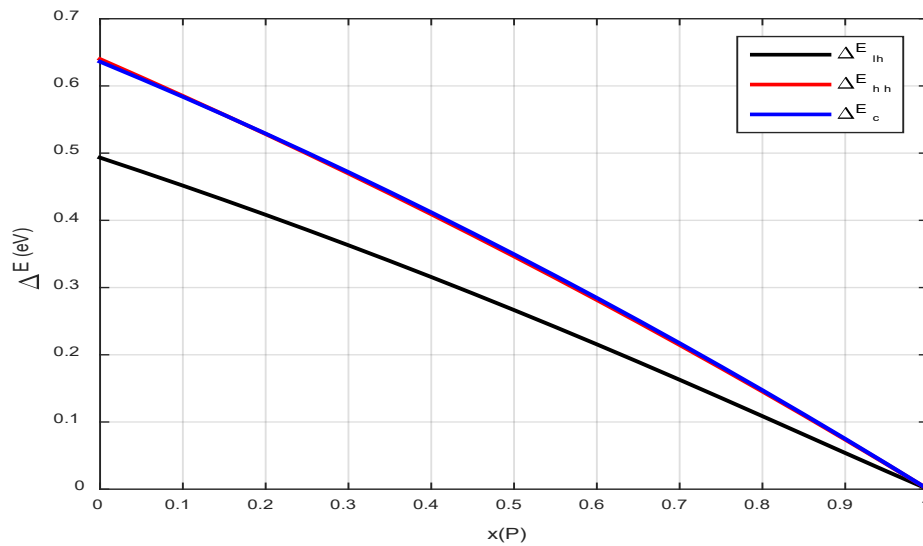


Figure 3.10 Variation de décalages de bandes en fonction de la concentration de phosphore.

3.2.10 Taux de confinement :

La figure (3.11) représente la variation du taux de confinement des bandes de valence et de conduction.

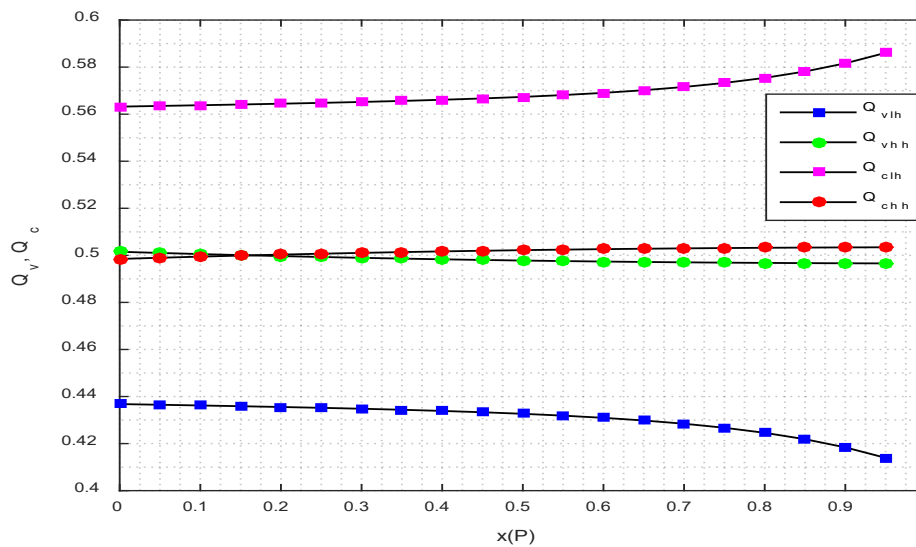


Figure 3.11 Variation de taux de confinement en fonction de la concentration de phosphore

On constate qu'il y a une relation inverse entre le confinement de bande de valence et de conduction, le confinement des trous lourds varie de manière constante par rapport à la concentration de phosphore.

3.3 Comparaison entre les deux matériaux InGaAs et GaAsP

3.3.1 Le paramètre de maille

La figure (3.12) Présente la variation du Paramètre de maille en fonction de l'alliage des deux structures *InGaAs* et *GaAsP*. Cette étude nous permet de choisir la structure la plus performante pour des applications en optoélectronique, Par exemple pour une concentration de In/P de 10% on a le Paramètre de maille $a_{InGaAs} = 5.69\text{\AA}$ et $a_{GaAsP} = 5.63\text{\AA}$ et pour une concentration de In/P de 70% on le paramètre de maille $a_{InGaAs} = 5.94\text{\AA}$ et $a_{GaAsP} = 5.51\text{\AA}$.

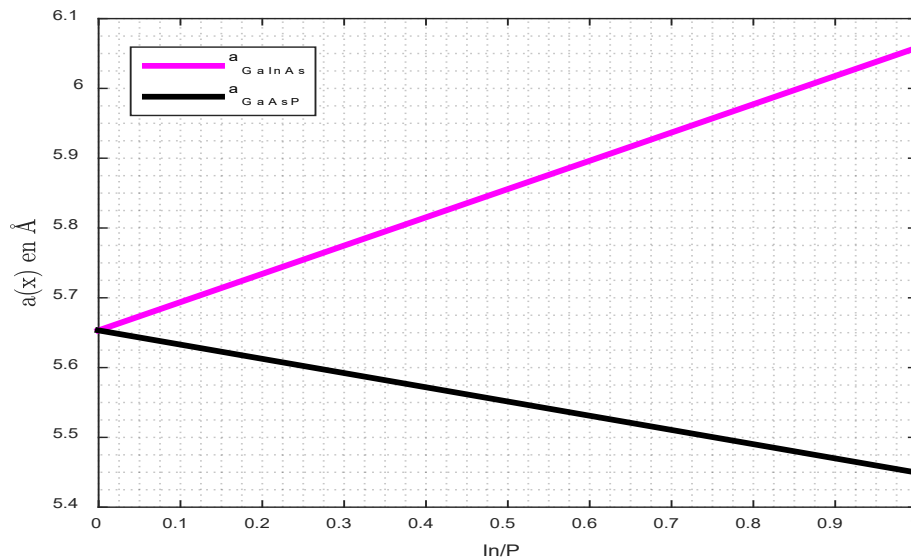


Figure 3.12 La Variation de Paramètre de maille en fonction de la concentration d'Indium et de Phosphore.

3.3.2 La bande Interdite

La figure (3.13) (a et b) Illustrent la variation de l'énergie de la bande interdite des structures *InGaAs* et *GaAsP* en fonction de la concentration d'Indium et de Phosphore (In et P). Cette simulation permet de choisir les matériaux rapides qui ont une bande interdite directe et inférieure à 1.35 eV pour des applications en télécommunications.

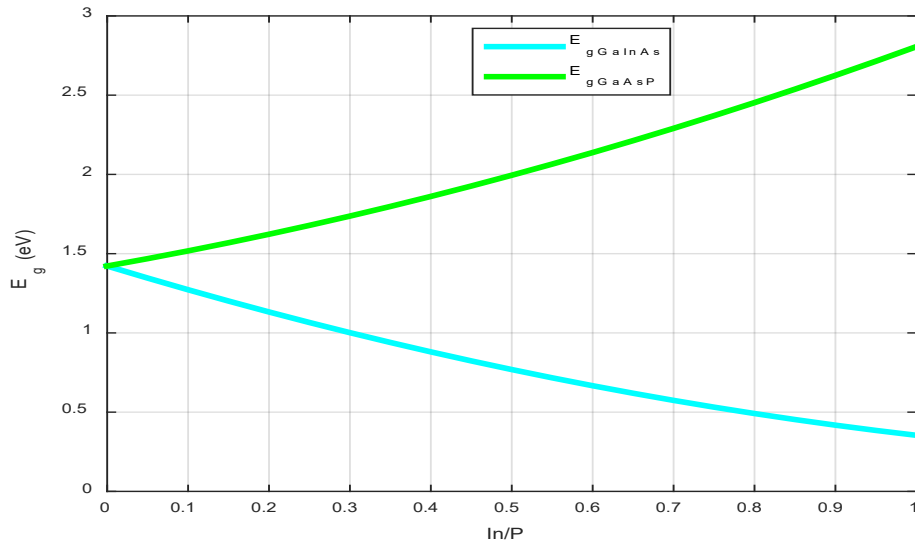


Figure 3.13 La variation de l'énergie de la bande interdite de InGaAs et GaAsP en fonction de la concentration d'indium et de Phosphore.

3.3.3 La Longueur d'onde seuil

La figure (3.14) montre l'influence de la concentration d'Indium et de Phosphore sur la longueur d'onde seuil de l'*InGaAs* et *GaAsP*. La longueur d'onde du matériau *InGaAs* augmente de $\lambda = 0.872 \mu\text{m}$ à $\lambda = 3,5 \mu\text{m}$ et diminue de $\lambda = 0.872 \mu\text{m}$ à $\lambda = 0.44 \mu\text{m}$ pour GaAsP en variant la concentration x de 0 à 1. Donc à partir de cette étude nous pouvons choisir le matériau qui convient aux applications optoélectronique par exemple le laser et les LEDs.

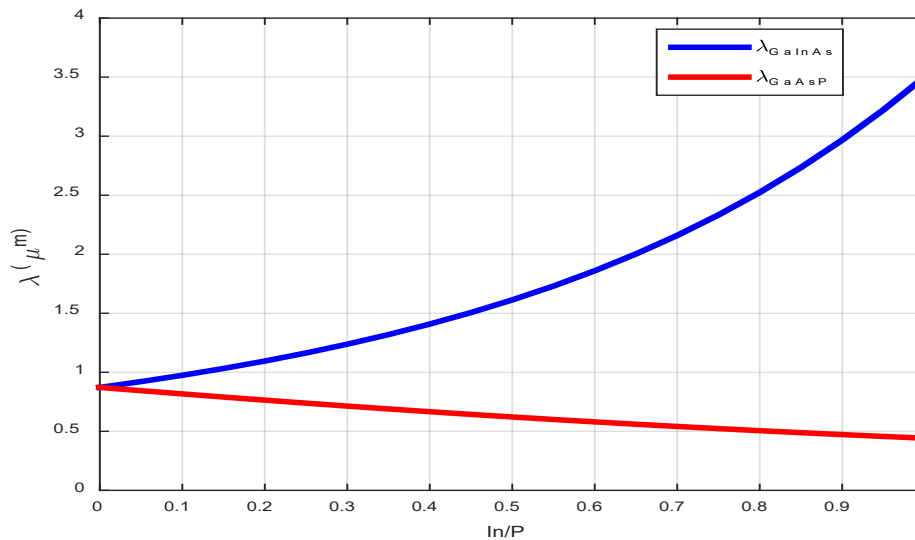


Figure 3.14 La variation de la longueur d'onde en fonction de la concentration d'indium.

3.4 Conclusion

Dans ce troisième chapitre, on a étudié les résultats de simulation du matériau GaAsP/GaP. Ainsi qu'une petite comparaison des résultats obtenus entre la structure active InGaAs et la deuxième structure GaAsP. Enfin, nos résultats ont pour but de trouver l'énergie de la bande interdite afin de détecter les longueurs d'ondes exploitables dans des plusieurs applications.

Conclusion Générale

Dans le cadre de ce travail, nous nous sommes concentrés sur trois structures à puits quantique faisant partie des semi-conducteurs III-V afin de concevoir des diodes laser performants, économiques et rapides appliquées aux systèmes de télécommunication, cette étude a été faite en différentes parties.

La première partie de notre travail, nous avons abordés des notions et des généralités sur les semi-conducteurs et plus précisément les semi-conducteurs III-V, leurs caractéristiques et leurs propriétés structurelles et électroniques, Ensuite nous avons détaillé quelques notions de nanostructures telles que les puits, les fils et les boîtes quantiques.

La deuxième partie traite les interprétations des simulations Matlab des hétérostructures bidimensionnelles InGaAs/GaAs et InGaAs/InP à savoir le paramètre de maille, celui du désaccord de maille, l'épaisseur critique en basant sur deux modèles, Nous avons également l'énergie de gap, l'absorption, l'indice de réfraction, le taux de confinement, l'influence de la température sur l'énergie de la bande interdite, l'énergie des bandes de valence et de conduction, la barrière de potentiel, tout cela en fonction de la concentration d'indium.

Enfin, le troisième chapitre montre les résultats de simulations de l'hétérostructure GaAsP/GaP pour les différents paramètres pour étudier la stabilité et la fiabilité de ce matériau et la longueur d'onde seuil pour détecter les longueurs d'ondes d'émission de ce matériau, la dernière partie de ce chapitre présente une petite comparaison entre le matériau actif InGaAs et GaAsP.

Les perspectives de ce travail sont nombreuses, Nous recommandons de continuer la simulation de l'énergie de quantification, de Faire une optimisation afin de trouver le compromis ente l'énergie de transition et la largeur de puits, la longueur d'onde seuil, le gain seuil et la puissance rayonnée, qui peuvent faire l'objet d'un autre projet, afin de finaliser le travail.

Nous pouvons continuer ce travail en utilisant d'autres matériaux ternaires ou quaternaires afin d'améliorer les propriétés physiques, optiques et électroniques pour réaliser des composants optoélectroniques performantes et de haut rendement.

Annexe A

Tableau périodique de Mendeleïv

TABLEAU PÉRIODIQUE DES ÉLÉMENTS

Masse atomique → 55.845 26 ← Numéro atomique (nombre de protons dans le noyau)

Symbole chimique → **Fe**

Nom → fer

1																	18				
1	H hydrogène 1.00794																	He hélium 4.002602			
2	Li lithium 6.941	Be béryllium 9.012182														B bore 10.811	C carbone 12.0107	N azote 14.0067	O oxygène 15.9994	F fluor 18.998403	Ne néon 20.1797
3	Na sodium 22.98976	Mg magnésium 24.3050											Al aluminium 26.98153	Si silicium 28.0855	P phosphore 30.97396	S soufre 32.065	Cl chlore 35.453	Ar argon 39.948			
4	K potassium 39.0983	Ca calcium 40.078	Sc scandium 44.95591	Ti titane 47.867	V vanadium 50.9415	Cr chrome 51.9962	Mn manganèse 54.93804	Fe fer 55.845	Co cobalt 58.93319	Ni nickel 58.6934	Cu cuivre 63.546	Zn zinc 65.38	Ga gallium 69.723	Ge germanium 72.64	As arsenic 74.92160	Se sélénium 78.96	Br brome 79.904	Kr krypton 83.798			
5	Rb rubidium 85.4678	Sr strontium 87.62	Y yttrium 88.90585	Zr zirconium 91.224	Nb niobium 92.90638	Mo molybdène 95.96	Tc technétium 98	Ru ruthénium 101.07	Rh rhodium 106.42	Pd palladium 106.9055	Ag argent 107.8682	Cd cadmium 112.411	In indium 114.818	Sn étain 118.710	Sb antimoine 121.760	Te tellure 127.60	I iode 126.9044	Xe xénon 131.293			
6	Cs césium 132.9054	Ba barium 137.327	lanthanides 57-71	Hf hafnium 178.49	Ta tantalum 180.9478	W tungstène 183.84	Re rénium 186.207	Os osmium 190.23	Ir iridium 192.22	Pt platine 195.084	Au or 196.9665	Hg mercure 200.59	Tl thallium 204.3833	Pb plomb 207.2	Bi bismuth 208.9804	Po polonium 210	At astate 210	Rn radon 222			
7	Fr francium 223	Ra radium 226	actinides 89-103	Rf rutherfordium 261	Db dubnium 262	Sg seaborgium 266	Bh bohrium 264	Hs hassium 277	Mt meitnérium 268	Ds darmstadtium 271	Rg roentgenium 272	Cn copernicium 285	Uut ununtrium 284	Fl flérovium 289	Uup ununpentium 288	Lv livermorium 292	Uus ununseptium 282	Uuo ununoctium 284			
			La lanthane 138.9054	Ce cérium 140.116	Pr praseodyme 140.9076	Nd néodyme 144.242	Pm prométhium 145	Sm samarium 150.36	Eu europium 151.964	Gd gadolinium 157.25	Tb terbium 158.9253	Dy dysprosium 162.500	Ho holmium 164.9303	Er erbium 167.259	Tm thulium 168.9342	Yb ytterbium 173.054	Lu lutécium 174.9668				
			Ac actinium 227	Th thorium 232.0380	Pa protactinium 231.0368	U uranium 238.0289	Np néptunium 237	Pu plutonium 244	Am américium 243	Cm curium 247	Bk berkélium 247	Cf californium 251	Es einsteinium 252	Fm fermium 257	Md mendélévium 258	No nobélium 259	Lr lawrencium 262				

métaux alcalins
 alcalino-terreux
 métaux pauvres
 métaux de transition
 métalloïdes
 non-métaux
 halogènes
 gaz rares

Sources : IUPAC, Wikimedia Commons

Tableau A.1 Tableau Périodique des éléments.

Bibliographie

- [1] Rodica M, Étude sur le gain optique dans les amplificateurs optiques à semi-conducteurs à multiples puits quantiques C3T3 (trois puits en compression et trois puits en tension), Thèse de doctorat, École polytechnique de Montréal, 2006.
- [2] Laid A, Étude des niveaux d'énergie dans la structure de la diode laser GaInP/AlGaInP par la méthode du pseudo potentiel, mémoire de magister, Université Sidi-Bel-Abbas, 2009.
- [3] Sdaq A, Généralités sur les semi-conducteurs, Faculté Ibn Zohr Agadir Maroc, 2014.
- [4] I.Vurgaftman, J.R Meyer et L.R. Ram-Mohan, Band parameters for III-V compound semiconductors and their alloys, Appl. Phys. Volume 89, 5815, 2001.
- [5] Haichour A, Étude de Nanostructures laser à Base de ZnS / ZnSe/ ZnTe / CdZnSe /CdTe, mémoire de magister université d'Oran 2012.
- [6] [Zinc Blende and Wurtzite \(uni-kiel.de\)](#), 24 Mai 2020.
- [7] Dehimi S, Étude et Simulation des propriétés optoélectroniques des lasers à puits quantiques, Thèse de doctorat université de Biskra 2018.
- [8] <https://www.cu-elbayadh.dz>, 7 juillet 2020.
- [9] Wilson P.D, Birkmire R.W, Shafarman W. N, Optical Characterization of CuIn_{1-x}Ga_xSe₂ alloy thin films by spectroscopic ellipsometry, Journal of Applied Physics, 94(2), 879-888, 2003
- [10] Piprek J, Semiconductors : optoelectronic devices, introduction to physics and simulation, ACADEMIC PRESS, Elsevier, 2003.
- [11] W.Walukiewicz, W.Shan, J.Wu, K.M.Yu and J.W AgerIII. Band Anti-crossing and Related Electronic structure in III-N-V Alloys. Dilute Nitride semiconductors, M.Henini: Elsevier, pp 325-359, 2005.
- [12] Henry M, Hervé F, Physique des semi-conducteurs et des composants électroniques, Dunod, 6^{ème} édition, Université Montpellier II France, 2009.
- [13] [NOTIONS SEMICONDUCTEURS \(unice.fr\)](#), 9 Août 2020.
- [14] <https://microelectronique.univ-rennes1.fr/fr/ch4c.htm#epl>, 2 Septembre 2020

- [15] H. Y. Fan, Temperature Dependence of the Energy Gap in Semiconductors, Phys. Rev., vol. 82, p. 900, 1951.
- [16] Bleuse J, Bouchiat V, Nanofils semi-conducteurs et Nanotubes de carbone : une approche commune, 2004.
- [17] Pankratov A, Propriétés des boîtes quantiques GaAs/AlGaAs obtenues par remplissage des nanotrous, 2017.
- [18] Romanov, A.E, Beltz, G.E, Fischer, W.T, Petroff P.M., Speck J.S J, Journal of Applied physics 89, 4523, 1996
- [19] [File:Gaas inas quantum dot.jpg - Wikimedia Commons](#), 12 Août 2020.
- [20] Barbagioanni E. G, Lockwood D. J, Goncharova L. V, Quantum confinement in Si and Ge nanostructures : Theory and experiment, App. Phys Reviews, 1, 011302, 2014.
- [21] Chris G, Van De Walle, Band lineups and deformation potentials in the model-solid theory, Physical Review B, Volume 39 Number 3, Watson research center, 1988.
- [22] Daveau G, Interaction dislocations – joints de grains en déformation plastique monotone : Étude expérimentale et modélisations numériques, Thèse de doctorat, École centrale Paris, 2012
- [23] People R. and Bean J. C, Appl. Phys. Lett. 47, 322, 1985 ; 49, 229, 1986.
- [24] J. W. Matthews and A. E. Blakeslee, J. Cryst. Growth 27, 118, 1974.
- [25] Cuminal Y, Réalisation et étude de diodes lasers à base de GaSb émettant vers 2.3 μm pour application à l'analyse des gaz, thèse de Doctorat, Université de Montpellier II, 1997
- [26] Strain effects on Ga x In 1-x As/InP single quantum wells grown by organometallic vapor phase epitaxy with $0 \leq x \leq 1$, Journal of applied physics 67, 344, 1990.
- [27] Peressi M, Binggeli N. and A Baldereschi, Bande engineering at interfaces : theory and numerical experiments, Journal of applied physics 31, 1273–1299, 1998.
- [28] Benchamekh R, Fonctions d'onde locales dans le formalisme des liaisons fortes, Thèse de doctorat Université de Paris VI, 2012.
- [29] Hérissan A, Étude par Time Resolved Microwave Conductivity de photocatalyseurs pour la dépollution de l'eau, Thèse de doctorat Université de Paris-Saclay, 2015.

[30] Zhang Y, Yongqiang N, Zhang L, Jinsheng Zhang, Jianwei Zhang, Zhenfu Wang, Jian Zhang, Yugang Zeng, and Lijun Wang, Design and comparison of GaAs, GaAsP and InGaAlAs quantum-well active regions for 808-nm VCSELs, Optics Express, Vol. 19, Numéro 13, 2011.

[31] BAHI O, les semi-conducteurs binaires utilisés dans les composants optoélectronique. Mémoire Mémoire de Master. Université de Ouargla, 2014.