

الجمهورية الجزائرية الديمقراطية الشعبية
République Algérienne démocratique et populaire

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

جامعة سعد حطاب البليدة
Université SAAD DAHLAB de BLIDA

كلية التكنولوجيا
Faculté de Technologie

قسم الإلكترونيك
Département d'Électronique



Mémoire de Projet de Fin d'Études

présenté par

Kourabacha Amina

&

Nasry Meriem

pour l'obtention du diplôme de Master en Électronique option Micro-Optoélectronique

Thème

Etude et simulation de l'effet tunnel dans une structure à double puits quantique

Proposé par : M^rFERDJANIKais

Année Universitaire 2012-2013

Remerciements

Pour m'avoir permis d'être ce que je suis devenu aujourd'hui, je voudrais remercier le SEIGNEUR des mondes par qui tout est possible : **ALLAH** pour la force qu'il me donne, et qu'il donne aux personnes qui m'ont aidées et soutenues.

En second lieu, nous tenons à remercier notre encadreur Mr : Kais FERDJANI, pour ses précieux conseils et son aide durant toute la période du travail.

Nos vifs remerciements vont également aux membres du jury pour l'intérêt qu'ils ont porté à notre recherche en acceptant d'examiner notre travail et de l'enrichir par leurs propositions.

Un grand merci à Monsieur NACER SAID, pour son aide et sa gentillesse. Merci aussi pour sa disponibilité pour discuter et répondre à nos questions.

On remercie ainsi Monsieur BOUNEMRI, pour ses conseils, son soutien et son esprit de père.

On remercie finalement tous ceux qui, de près ou de loin, nous ont permis à bien mener ce travail.

Merci 

Dédicace

À mes très chers parents qui ont toujours été là pour moi, et qui m'ont donnés un magnifique modèle de labeur et de persévérance, pour tous les sacrifices qu'ils ont consentis pour me permettre de suivre mes études dans les meilleures conditions possibles et n'avoir jamais cessé de m'encourager tout au long de mes années d'étude. J'espère qu'ils trouvent dans ce travail toute ma reconnaissance et tout mon amour.

À mon adorable frère MOUNIR, qui a été toujours à mes côtés, merci frère pour ton milky cœur.

À grand-mère en lui souhaitant une longue vie pleine de joie et de santé

*À mes cousins : KENZA, MALEK, AZIZ, DOUDOU, MIMI,
ABDARRAHMAN, AYOUYA, ZAKI et NOURHENE*

À mes oncles : MOHAMED et HAMZA pour le chocolat et la fleur rose que je ne vais jamais oublier.

À UNTI et SAKINA pour le support, les conseils, l'amour et la joie qu'elles me donnent.

À mes tantes et leurs maris.

À ma chère YASMINE et je lui souhaite un plein succès dans son examen de Baccalauréat et une vie pleine de bonheur et de joie.

Je dédie particulièrement F.ISLAM et Y.SADAM pour l'expérience et les conseils qu'ils m'ont donnés durant les années que j'ai passé avec eux.

Un dédicace spécial et parfumé plein d'amour à mes chères best freinds H.SAIDA (mybieautiful sens of humer) et N.WISSAM (my more thansister) pour le pays de merveilles que j'ai visité avec eux, pour la vie en rose que j'ai vécue avec eux et je les souhaite de tout mon cœur une très belle vie pleine de Santé, de joie et de foi.

À mon binôme N.MERIEM pour l'expérience et les moments durs qu'on a partagé ensemble, pour sa patience, sa générosité, et sa largesse.

Sans oublier mes amies de l'option R&T : B.NABILA, A.LILIA, C.SAMIA, H.GHANIA, S.AKILA, Z.CHARAEZD et H.FETHIA. De l'option ATM : R.FELLA et HAYETTE. Et à tous mes camarades de l'option MOP et surtout à mon Exe binôme K.MESSAOUDA, à K.ZAHRA, M.SARRAH, Z.SAMIR, M.MOHAMED et R.ABDOU et à toute la promo M1 MOP 2013 et surtout AMIRA, F.ZOHRA et SARAH.

Et bien sûr sans oublier de passer par le département du Génie Civile pour dédier mes chères amies : B.SELMA, KHADIDJA, NABILA, B.AMINA et sa sœur MERIEM.

*À C.MAHDI qui a passé des jours et des nuits à compiler nos programmes.
Merci beaucoup MAHDI.*

*À tous ceux qui m'enseignent le saint QUORAN : M^{er} H.ABDALKARIM,
H.ZINEB, B.KHADIJA, T.CAHIRA, H.MALIA et M.FOUZIA sans oublier*

M^{em} ZAHIA.

*À ma chère amie, copine et sœur MARWA et sa sœur RAHMA pour le
courage, la concurrence et la joie qu'on partage ensemble. Et à tous ceux
qui je rencontre chaque vendredi et samedi.*

*Je termine par dédier une personne qui me vaut cher S.MOHAMED pour
la joie et le gout qu'il a fait entrer à ma vie et pour tous les conseils qu'il
m'avait donné. Je ne l'oublierai jamais jamaisjamais.....*

*Merci ALLAH pour tous ce que tu m'as donné, merci ALLAH pour le
chemin que tu m'as fait traverser....*

S.EMY with love.....

Dédicace

Je dédie ce modeste travail à celle qui m'a donné la vie, le symbole de tendresse, qui s'est sacrifiée pour mon bonheur et ma réussite, à ma mère

À mon père, école de mon enfance, qui a été mon ombre durant toutes les années des études, et qui a veillé tout au long de ma vie à m'encourager, à me donner l'aide et à me protéger.

Que Dieu les garde et les protège.

À mes adorables sœurs AMEL, AMINA et leurs maris, HOURIA et IBTISSAM.

À mon frère unique MOHAMED pour le courage et les conseils qu'il m'avait donné, pour sa générosité, sa tendresse et sa largesse merci frère pour tout ce que tu m'as fait.

À mes nièces et neveux SERINE et AHMED

À mes chères cousines, copines et voisines HOUDA, IMEN, AMINA et SAFIA, je leurs souhaite une belle vie pleine de joie et d'amour.

Je dédie particulièrement ma meilleur amie M.SARRAH pour les bons moments, les beaux souvenirs qu'on a vécu ensemble, pour sa fidélité, ses conseils, son support et sa sincérité. Merci SARRAH à tout ce que tu m'as fait, tu resteras toujours the only one.....

à mes chères amie avec qui j'ai passé mes années d'études avec qui j'ai partagé le tout T.AMEL, K.MESSAOUDA, A.RADIA, A.ASMA, Y.MERIE M, G.AMINA, K.ZAHRA, A.KHADIJDA, H.SAIDA, N.WISSAM, L.SAMIA, M.YAMINA et L.WAFA.

À mon binôme K.AMINA qui m'a fait voir le vrai sens de la vie.

À celui qui m'a fait apprendre le courage, l'espoir et la confiance, à celui qui a fêté toutes les secondes de ma vie avec joie et bonheur, à celui qui a passé des heures et des heures en essayant de compiler mes programmes, à celui qui croit en moi, à celui qui ne cesse pas de penser à moi, à C.MEHDI. Merci DADI pour tout.....

Merci ALLAH de m'avoir donné la capacité d'écrire et de réfléchir, la force d'y croire, la patience d'aller jusqu'au bout du rêve et le bonheur de lever mes mains vers le ciel et de dire « Ya HAYOU Ya kayoum »

N.MERIE M

ملخص: يهدف هذا العمل الى دراسة و محاكاة بنية ذات بئر كمومي مزدوج بغية تسليط الضوء على شروط الربط. البنيات التي قمنا باستعمالها هي GaInAs/InP و InAsP/InP .

قمنا اولا بدراسة كل بنية على حدى و ذلك بحساب طاقة القياس و الانتقال بصفة خاصة بدلالة عرض البئر. و بعد ذلك قمنا بدراسة اثر الربط باستعمال معادلات الموجة كما قمنا ايضا بحساب الحقلا لكهربائي الخارجيا الذي يتيح لنا الحصول على ظاهرة الرنين.

كلمات المفاتيح: البئر الكمومي؛ ظاهرة النفق؛ معادلات الموجة

Résumé : Ce travail porte sur l'étude et la simulation d'une structure à double puits quantiques en vue de mettre en évidence les conditions de couplage. Les structures que nous avons pris en exemple sont GaInAs/InP et InAsP/InP . Premier lieu, nous avons étudiés séparément les deux structures en calculant en particulier les énergies de quantification et de transition en fonction de la largeur du puits. Ensuite, nous avons étudié l'effet du couplage à travers les fonctions d'onde et nous avons aussi calculé le champ électrique externe qui nous permet d'obtenir le phénomène de résonance.

Mots clés : puits quantique; Effet tunnel résonant ; Fonction d'onde.

Abstract: this work concerns the study and the simulation of a double quantum well structure in order to put in spot the conditions of coupling. The structures that we had taken in example are GaInAs/InP and InAsP/InP , we first studied separately bought structures by calculating quantification and transition energies in function of the quantum's width. Then we studied the coupling effect through the wave functions as we also calculated the external electric field which enables us to obtain the phenomenon of resonance.

Keywords : quantum well; resonant tunneling effect; wave function

Listes des acronymes et abréviations

ϵ : Constante de déformation.

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

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

a_e : Paramètre de maille de la couche épitaxie.

a_s : Paramètre de maille de substrat.

$C_{i,j}$: Constante d'élasticité.

L_p : Largeur de puits.

L_c : Epaisseur critique.

V : Potentiel du puits quantique.

m_0 : Masse de l'électron libre.

m_1 : Masse effective des porteurs dans le puits.

m_2 : Masse effective des porteurs dans la barrière.

\hbar : Constante de Planck réduite.

Ψ : Fonction d'onde.

Δ_0 : Energie de couplage spin orbite.

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

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

ΔE_c : Bande offset de la bande de conduction.

ΔE_v : Bande offset de la bande de valence.

$\Delta\Omega / \Omega$: Le changement relatif du volume.

MBE: Molecular beam epitaxy.

MOCVD: metalorganic chemical vapor deposition.

HBT: heterostructure base transistor

HEMT: high electron mobility transistor

Table des matières

Introduction générale	1
Chapitre 1 Généralités sur les semi-conducteurs	3
1.1 Introduction	3
1.2 Semi-conducteurs III-V	3
1.2.1 Structure cristalline	3
1.2.2 Les alliages.....	5
1.2.3 Les hétérostructures	5
a Hétérostructure type I	5
b Heterostructure type II	6
1.3 Structure de bande d'énergie d'un semi-conducteur.....	7
1.3.1 Notion de la théorie de bande d'énergie	7
1.3.2 Gap direct et gap indirect	8
a Semi-conducteur à gap direct	8
b Semi-conducteur à gap indirect	8
1.3.3 Bandes interdites des principaux composés semi-conducteurs	10
1.4 Effet de la contrainte	11
1.4.1 Epaisseur critique	12
1.4.2 Déformation et contrainte	15
1.5 Masse effective	16
1.5.1 Masse effective des électrons.....	16
1.5.2 Masse effective des trous	17
1.6 Détermination des paramètres.....	18
1.6.1 Loi de Vegard	18
1.7 Conclusion	20

Chapitre 2 Notions générales sur les puits quantiques	21
2.1 Introduction	21
2.2 Notion de puits quantique	21
2.2.1 Conditions d'obtention de l'effet quantique	21
2.2.2 Puits quantiques.....	22
2.2.3 Spectre d'énergie	23
a Puits de profondeur infinie	25
b Puits de profondeur finie	26
2.2.4 Multipuits quantique	31
2.2.5 Le double puits quantique couplé.....	32
2.3 Calcul de décalage de bande (band offset).....	34
2.3.1 Calcul général.....	34
2.3.2 Cas non contraint	37
2.4 L'effet tunnel, un phénomène quantique.....	37
2.5 L'effet tunnel résonnant	38
2.6 Conclusion	38
Chapitre 3 Résultats et interprétations	39
3.1 Introduction	39
3.2 Calcul du gap	40
3.3 Simulation des deux structures.....	41
3.3.1 Energies de quantification	43
a Structure InP/GaInAs/InP.....	43
b La structure InP/InAsP/InP	46
c Comparaison entre les deux structures	48

3.3.2	Energies de transition (ou de recombinaison)	48
a	Structure InP/GaInAs/InP	48
b	Structure InP/InAsP /InP	51
c	Comparaison entre les deux structures	Erreur ! Signet non défini.
3.3.3	Fonctions d'ondes	52
3.4	Conclusion	55
	Conclusion générale.....	57

Liste des figures

Chapitre 1 Généralités sur les semi-conducteurs	3
<i>Figure 1. 1.a</i> maille conventionnelle de la structure zinc blende	4
<i>Figure 1.1.b</i> Vue de dessus de la structure zinc blende (plan (100))	4
<i>Figure 1. 2</i> Première zone de Brillouin de la structure zinc-blende	4
<i>Figure 1.3.a</i> hétérostructure type I	6
<i>Figure 1.3.b</i> Hétéro structuré de type II	6
<i>Figure 1. 4</i> Schéma de bande d'énergie d'un semi-conducteur à 0° k	7
<i>Figure 1. 5. a</i> Structure de bande de GaAs	9
<i>Figure 1. 5. b</i> Structure de bande de GaP	9
<i>Figure 1. 5. c</i> Structure de bande d'InP	Erreur ! Signet non défini.
<i>Figure 1. 6</i> Structure de bande schématique d'un semi-conducteur à gap direct (a) et à gap indirect (b)	9
<i>Figure 1. 7</i> Evolution du paramètre de maille cristalline et d'énergie de bande des alliages composés III-V et II-VI	10
<i>Figure 1. 8</i> Structures non contraintes (avant dépôt)	11
<i>Figure 1. 9</i> Structures contraintes	12
<i>Figure 1. 10</i> Schéma montrant une couche contrainte en compression (a) et une couche relaxée (b)	13
<i>Figure 1. 11</i> Représentation schématique de la structure de bande d'un matériau SC (a) non contraint, (b) contrainte compressive, (c) contrainte en tension. Dans le cas compressif l'état fondamental de la bande de valence c'est celui des trous lourds et dans le cas d'une contrainte en tension c'est celui des trous légers.	14
<i>Figure 1. 12</i> Déformation du potentiel en fonction de la contrainte (cas de la compression)	15

Chapitre 2	Notions générales sur les puits quantiques.....	21
<i>Figure 2. 1</i>	Structure schématique d'un puits quantique	23
<i>Figure 2. 2</i>	puits de potentiel de profondeur finie V_0	24
<i>Figure 2. 3</i>	Structure de sous-bandes d'énergie niveaux discrets du puits suivant une dimension (direction de croissance) et courbes de dispersion dans le plan de la structure.....	26
<i>Figure 2. 4</i>	Niveau d'énergie et fonction d'ondes dans le puits quantique de profondeur finie	31
<i>Figure 2. 5</i>	Structure à multipuits quantique de type I	33
<i>Figure 2. 6</i>	Structure à double puits quantique identique.....	33
Chapitre 3	Résultats et interprétations	39
<i>Figure 3. 1</i>	Double puits asymétrique en absence de champ électrique extérieur...	39
<i>Figure 3.2</i>	Organigramme de calcul de l'énergie de quantification et de recombinaison en fonction de la largeur du puits.....	42
<i>Figure 3. 3</i>	Energie de quantification des deux premiers niveaux des électrons en fonction de la largeur de puits	43
<i>Figure 3. 4</i>	Energie de quantification des électrons en fonction de la largeur de puits	44
<i>Figure 3. 5</i>	Energie de quantification des 2 premiers niveaux des trous lourds en fonction de la largeur du puits.....	44
<i>Figure 3. 6</i>	Energie de quantification des 2 premiers niveaux des trous légers en fonction de la largeur du puits.....	45
<i>Figure 3.7</i>	Energie de quantification des électrons en fonction de la largeur du puits	46
<i>Figure 3. 8</i>	Energie de quantification des électrons en fonction de la largeur du puits	47
<i>Figure 3. 9</i>	Energie de quantification des 2 premiers niveaux des trous légers en fonction de la largeur du puits.....	47
<i>Figure 3.10</i>	Energie de transition électrons tous lourds (E_{e1hh1}) et électron trous légers (E_{e1lh1}) en fonction de la largeur du puits.....	49

<i>Figure 3.11</i> Energie de transition électrons trous lourds (E_{e1hh2}) et électron trous légers (E_{e1lh2}) en fonction de la largeur du puits.....	49
<i>Figure 3.12</i> Energie de transition électrons trous lourd (E_{e1hh1}) et électrons trous légers (E_{e1lh1}) en fonction de la largeur du puits.....	51
<i>Figure 3. 13</i> Energie de transition électrons trous lourds (E_{e1hh2}) et électrons trous légers (E_{e1lh2}) en fonction de la largeur du puits.....	51
<i>Figure 3. 14</i> Fonction d'ondes des 2 premiers niveaux d'énergie dans le puits I.....	52
<i>Figure 3. 15</i> Fonctions d'ondes du 1 ^{er} niveau d'énergies des deux puits.....	53
<i>Figure 3. 16</i> Fonction d'ondes du 1er niveau d'énergies des deux puits	53
<i>Figure 3. 17</i> Diagramme énergétique de la structure sous l'effet d'un champ externe	55

Liste des tableaux

Tableau 1. 1 paramètres de quelques semi-conducteurs simples et III-V..... 19

Tableau 3.1 Tableau comparatif de l'énergie de quantification pour les deux structures 48

Tableau 3.2 Tableau comparatif de l'énergie de transition pour les deux structures**Erreur ! Signet non défini.**

Introduction générale

Les propriétés fondamentales des matériaux semi-conducteurs et leurs différences avec les métaux et les isolants ont commencé à être appréciées seulement au moment où Bardeen, Brattain et Shockley ont fabriqués le premier transistor au germanium en 1947. Le développement fulgurant de la technologie des semi-conducteurs pendant les dernières décennies a permis la réalisation de structures fines allant jusqu'à quelques dizaines de nanomètres voire quelques nanomètres. Des modèles théoriques spécifiques ont été nécessaires pour l'explication des phénomènes régissant ces nanostructures appelées « structures quantiques » (puits, fils ou boîtes quantiques).

Parmi les techniques d'élaboration de ces structures, on peut citer l'épitaxie par jets moléculaires (MBE) qui a permis le contrôle de la monocouche atomique ou la MOCVD.

Les dispositifs à base de puits quantiques sont déjà très utilisés et sont promus à gagner considérablement en importance à l'avenir, en particulier dans les composants optoélectroniques et les dispositifs ultra-rapide comme les lasers et les détecteurs dans les lecteurs CD, les modulateurs à haute fréquence dans les téléphones mobiles et d'autres appareils de communication et font partie des applications que nous rencontrons dans la vie courante.

La fabrication de ces structures exige un contrôle précis de l'uniformité de l'épaisseur. Elle exige également une homogénéité excellente, une grande pureté et des interfaces très lisses entre les couches épitaxiées. Actuellement les techniques d'épitaxie ont évolué à un niveau où de telles exigences peuvent facilement être réalisées.

Notre manuscrit de mémoire est composé de trois chapitres. Le premier chapitre porte sur les notions théoriques fondamentales sur les semi-conducteurs et particulièrement les composés III-V.

Nous décrivons également dans ce chapitre la notion physique de la contrainte qui détermine la qualité et les propriétés des hétérostructures.

Dans le deuxième chapitre, on présentera d'abord une revue sur les puits quantiques et les conditions de leur obtention et on présentera également la théorie qui permet d'aboutir aux valeurs propres d'énergie dans ces structures quantiques. On décrira ensuite l'effet tunnel entre des puits quantiques couplés.

Le troisième chapitre porte sur notre travail de simulation qui a consisté dans le calcul du décalage des bandes dans le cas du puits quantique non contraint, et sur la détermination des énergies de quantification et de transition en fonction de la largeur du puits pour les deux structures GaInAs/InP et InAsP/InP. Il présente également une étude détaillée de l'évolution des fonctions d'onde avec le couplage de ces deux structures. Une étude de la résonance par l'effet d'un champ extérieur sera également présentée.

Chapitre 1 Généralités sur les semi-conducteurs

1.1 Introduction

La recherche de composants électroniques présentant des propriétés de transport supérieures à celles du silicium, a conduit la plupart des grands laboratoires de recherche à s'intéresser à des nouveaux matériaux en particulier les semi-conducteurs III-V. [19]

Les domaines de l'électronique rapide et de l'optoélectronique utilisent de plus en plus les semi-conducteur III-V à cause de leurs propriétés électroniques et optiques favorables (gaps d'énergie, mobilités des porteurs,...). Par conséquent, il est tout à fait utile, avant d'aborder cette étude, de préciser les principales propriétés de ces semi-conducteur et leurs alliages [1].

1.2 Semi-conducteurs III-V

1.2.1 Structure cristalline

Les semi-conducteurs III-V sont composés à partir des éléments III et V du tableau périodique de Mendeleïev.

Ils sont obtenus soit par croissance épitaxiale de couches minces sur un substrat soit par tirage à partir d'un germe monocristallin et cristallisent en général dans la cubique Zinc blende ou la structure hexagonale(Wurtzite).

Dans notre étude, c'est la structure Zinc blende représentée sur les figures(1-1) et (1-2) qui nous intéresse, elle est caractérisée par deux sous-réseaux à faces centrées décalés l'un par rapport à l'autre d'un quart d'une diagonale principale du cube de base(mailles conventionnelles).

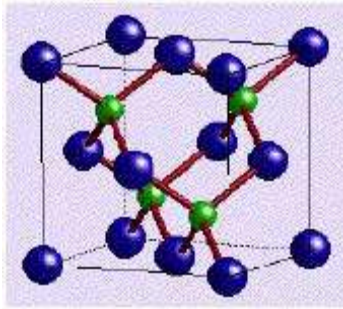


Figure 1. 1.a maille conventionnelle de la structure zinc blende

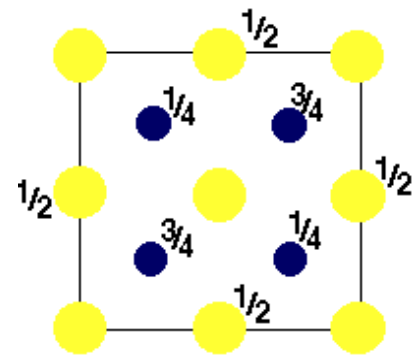


Figure 1.1.b Vue de dessus de la Structure zinc blende (plan (100))

La première zone de Brillouin du réseau réciproque la structure zinc blende, représentée sur la figure (1.2), est un octaèdre à faces tronquées dont les points de haute symétrie sont notés Γ (centre de zone), X (bord de zone dans les directions [100] et équivalentes) et L (bord de zone dans les directions [111] et équivalentes) [13].

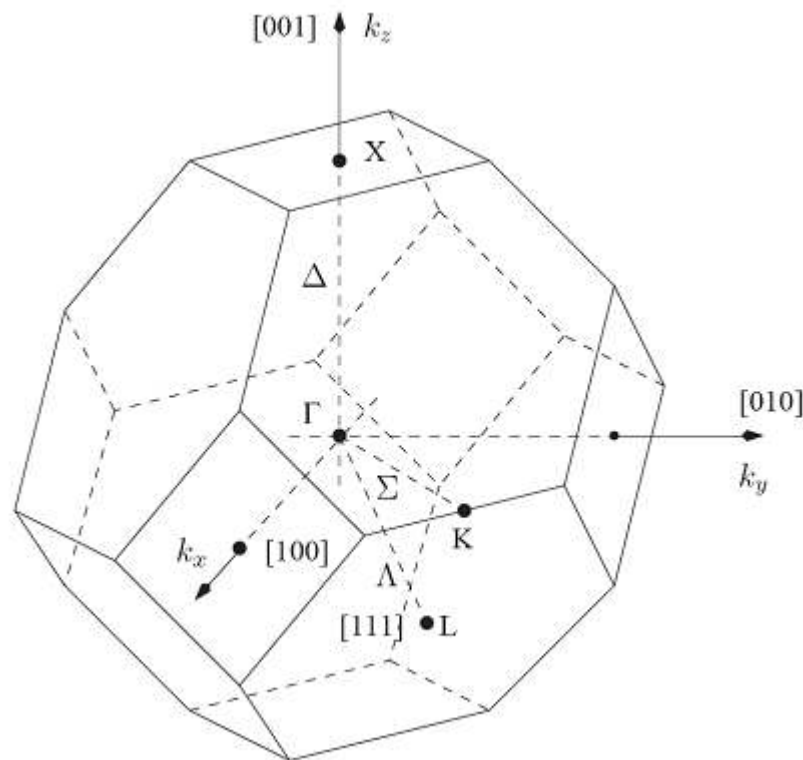


Figure 1. 2 Première zone de Brillouin de la structure zinc-blende

1.2.2 Les alliages

Il est donc possible de former un solide semi-conducteur dit ternaire ou quaternaire en mélangeant plusieurs éléments des colonnes III et V.

Cependant, la structure de cet alliage n'est pas celle d'un cristal parfait, en raison de la distribution aléatoire des atomes sur chaque site de la structure zinc-blende qui interdit en particulier la propriété d'invariance par translation.

Afin de décrire les états électroniques de l'alliage, l'approximation du cristal virtuel est souvent utilisée; dans un tel modèle, le potentiel périodique est remplacé par une moyenne. Si on considère par exemple un solide $AB_{1-x}C_x$; l'atome A prend place dans les sites du premier sous réseau cubique faces centrées (CFC) de la structure zinc-blende, et les atomes B et C occupent aléatoirement, les sites du deuxième sous réseau CFC[18].

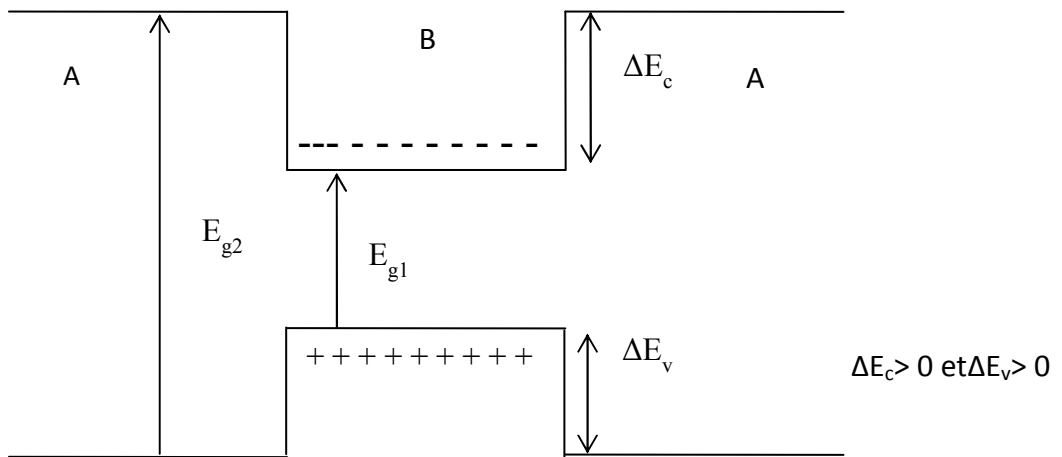
1.2.3 Les hétérostructures

L'idée des hétérostructures a été proposée dans le but d'observer les oscillations de Bloch des électrons, et par la suite d'obtenir des générateurs et amplificateurs de micro-ondes. Il a donc été suggéré d'avoir recours à des modulations de composition d'alliage ou de dopage. Grâce au développement de la croissance, il est devenu possible d'élaborer des hétérostructures très diverses (transistors HBT, HEMT, photodiodes,...).

Une hétérostructure est constituée d'un matériau semi-conducteur A pris en « sandwich » entre deux barrières d'un matériau semi-conducteur B[2].

a Hétérostructure type I

Comme présenté dans la figure (1.3.a), les extrema des bandes de conduction et de valence(énergie minimale pour les porteurs de charge)sont situés dans le même matériau, les électrons et les trous sont alors piégés dans le même semi-conducteur, les recombinaisons seront donc importantes [1-3].



∴

Figure 1.3.a Hétérostructure de type I

b Heterostructure type II

Comme présenté dans la figure (1.3.b), les extrema des bandes de conduction et de valence sont spatialement séparés, les électrons et les trous seront donc confinés séparément et leurs recombinaisons seront moins probables.[1-3]

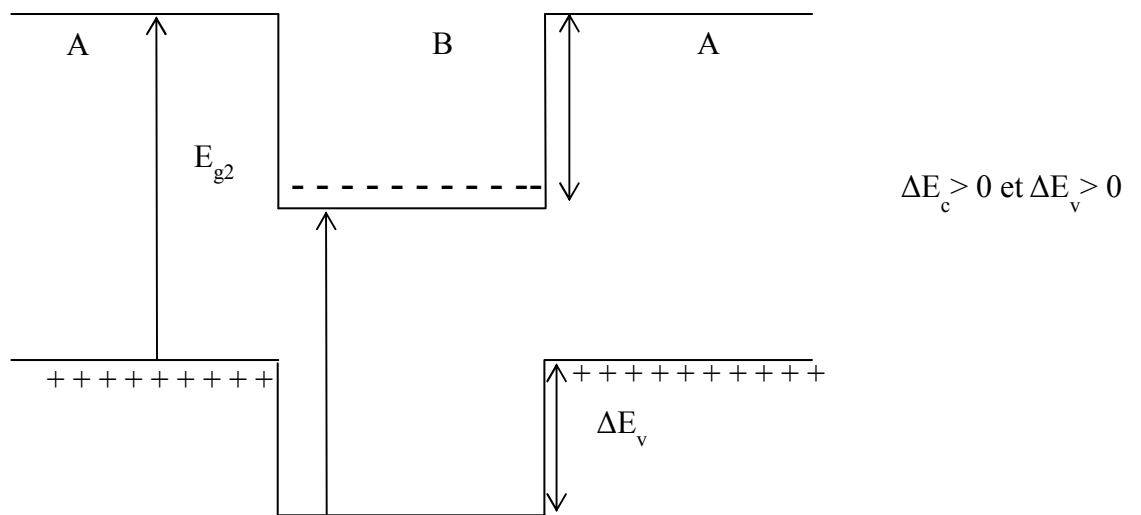


Figure 1.3.b Hétéro structuré de type II

1.3 Structure de bande d'énergie d'un semi-conducteur

1.3.1 Notion de la théorie de bande d'énergie

Quand on rapproche les atomes pour former un solide, les niveaux atomiques discrets des atomes se rapprochent pour former des bandes pseudo-continues définissant ainsi de nouveaux états d'énergie pour les électrons. Mais le nombre d'état dans une bande n'est pas infini, s'il y a N atomes formant le solide, il y aura au maximum $2N$ électrons dans chaque bande d'énergie permise.

À zéro absolu, un cristal de n'importe quel semi-conducteur serait isolant. Les propriétés caractéristiques des semi-conducteurs sont habituellement dues à l'agitation thermique, aux impuretés, aux défauts du réseau, et aux défauts stœchiométrie (écart par rapport à la composition chimique nominale) [4].

Un schéma simplifié de la structure de bande d'énergie est illustré par la figure (1.4) :

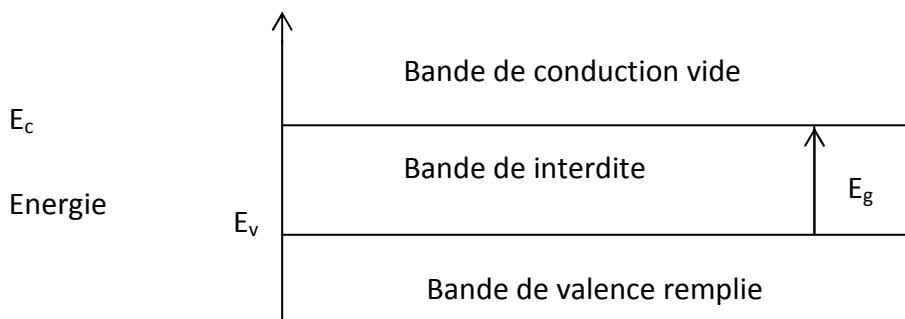


Figure 1. 4 Schéma de bande d'énergie d'un semi-conducteur à 0°k

La bande de conduction est vide au zéro absolu, elle est séparée par une bande interdite E_g de la bande de valence remplie. Sous l'action d'une excitation externe, un électron de la bande valence peut recevoir, sous certaines conditions, l'énergie nécessaire pour passer à la bande de conduction [1].

1.3.2 Gap direct et gap indirect

a Semi-conducteur à gap direct

Les extrema absolus des bandes de conduction et de valence correspondent à la même valeur du vecteur d'onde $k(k=0)$. L'électron peut passer de la bande de conduction (BC) vers la bande de valence (BV) sans changer de vecteur K . Figure (1.5.a)

b Semi-conducteur à gap indirect

Les extrema des bandes permises ne correspondent pas à la même valeur du vecteur d'onde K . l'électron passe de la bande de valence vers la bande de conduction en changeant le vecteur d'onde et donc le processus de recombinaison n'est pas radiatif. Figure (1.5.b).

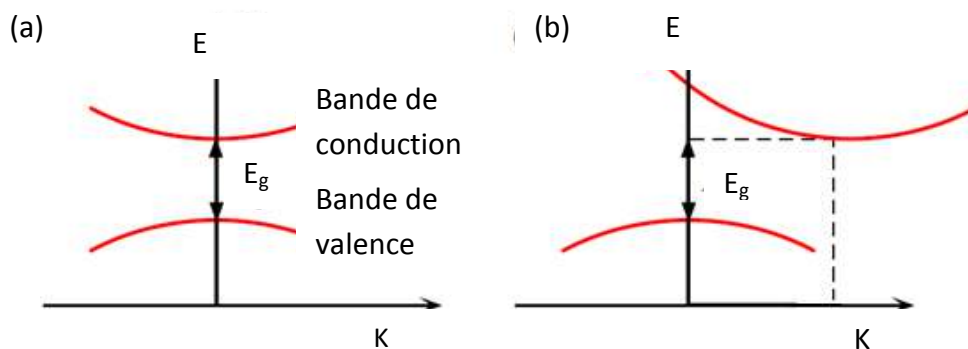


Figure 1.5 Structure de bande schématique d'un semi-conducteur à gap direct (a) et à gap indirect (b)

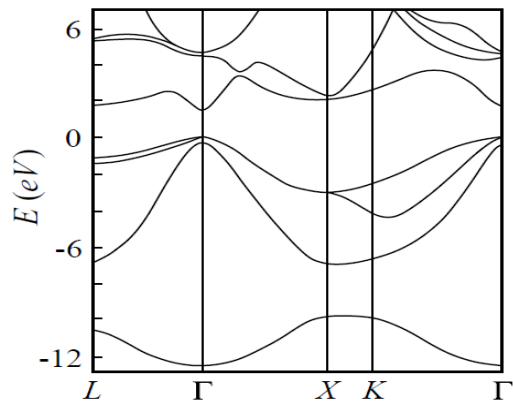


Figure1. 6. a Structure de bande de GaAs

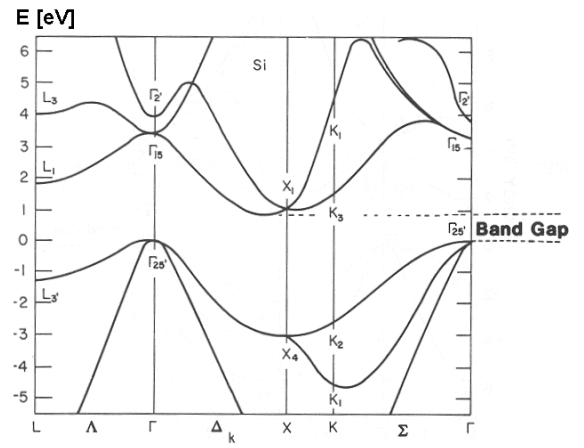


Figure1. 6. b Structure de bande de GaP

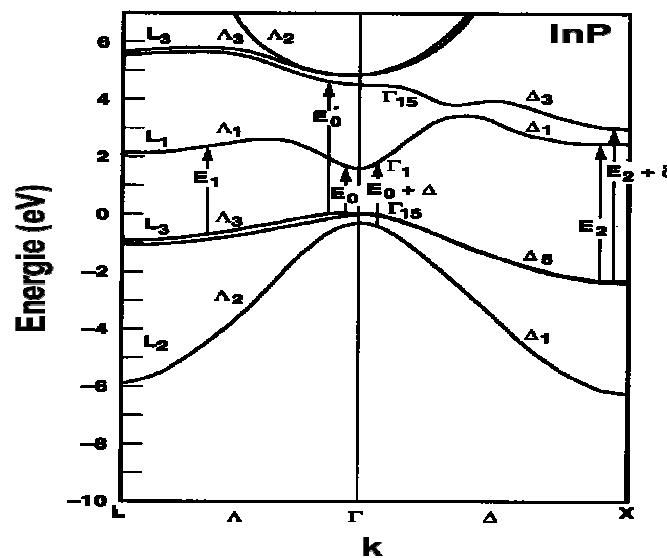


Figure1. 6. c Structure de bande de l'InP

La figure (1.6.c) montre la structure de bande de l'InP(phosphure d'indium) où l'on peut observer la nature directe du gap d'énergie (E_0) au point Γ (centre de la zone de Brillouin). Par contre, sur la figure (1.6.b) on peut observer la nature indirecte du gap du semi-conducteur GaP(phosphure de gallium). Le maximum de la bande de valence se trouve au point Γ alors que le minimum de la bande de conduction est au point X

1.3.3 Bandes interdites des principaux composés semi-conducteurs

La figure (1.7) représente le diagramme des variations de l'énergie de bande interdite en fonction du paramètre cristallin a [2].

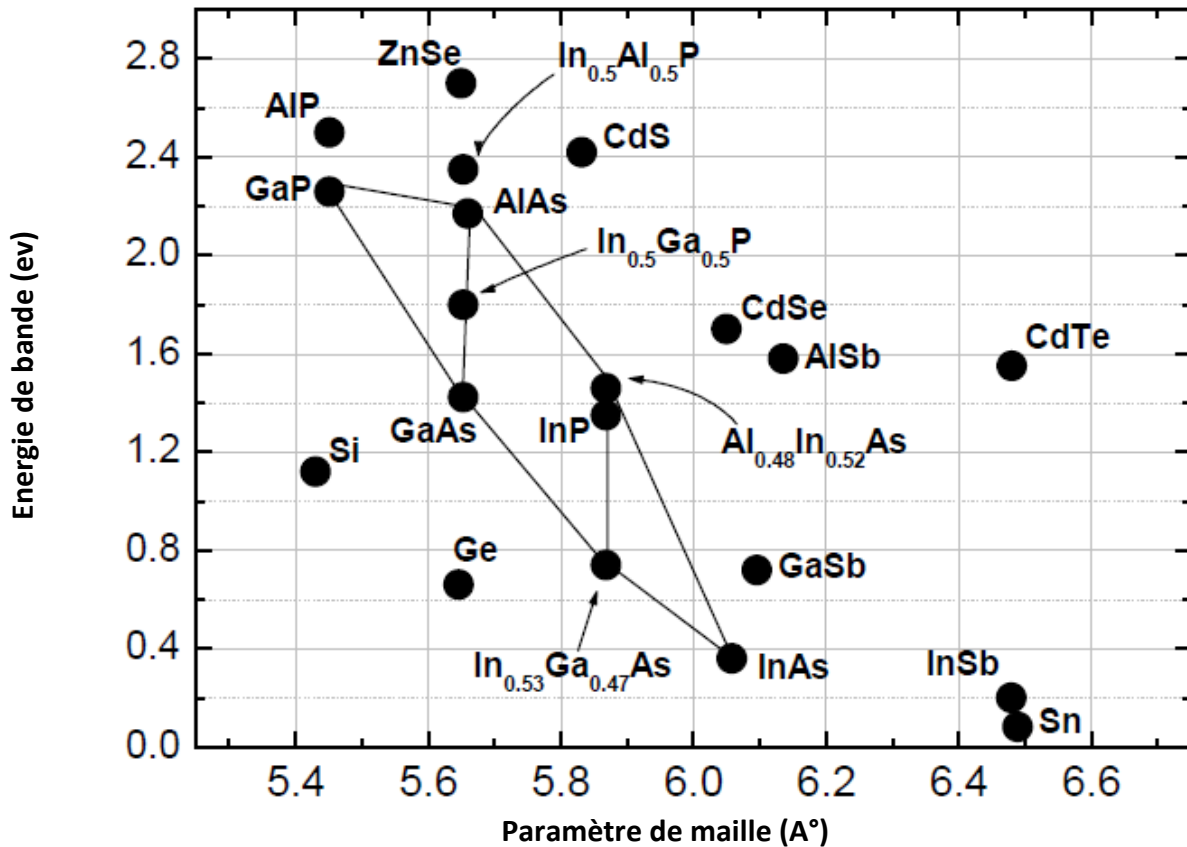


Figure 1. 7 Evolution du paramètre de maille cristalline et d'énergie de bande des alliages composés III-V et II-VI

Les points du graphe de la figure (1.7) montrent la position des composés binaires stœchiométriques, et les lignes représentent l'évolution du gap E_g et du paramètre cristallin a , en fonction de la composition des alliages ternaires. Ce diagramme est donc très important par ce qu'il permet de connaître la composition de tout alliage ternaire susceptible d'être déposée en couche mince par épitaxie sur un substrat binaire comme GaAs ou InP.

Les matériaux III-V offrent donc une grande variété de compositions permettant de modifier leurs propriétés électroniques [6].

1.4 Effet de la contrainte

La condition nécessaire à une bonne hétéro-épitaxie est évidemment que les deux matériaux aient d'une part la même structure cristalline et, d'autre part, des paramètres de mailles voisins. Lorsque les paramètres de mailles sont différents les matériaux 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 des couches.

La couche épitaxiée est déformée par le substrat (voir figures 1.8 et 1.9). On peut observer schématiquement sur ces figures la déformation de la maille de la couche mince déposée, respectivement en compression ($a_s < a_e$) et en tension ($a_s > a_e$)

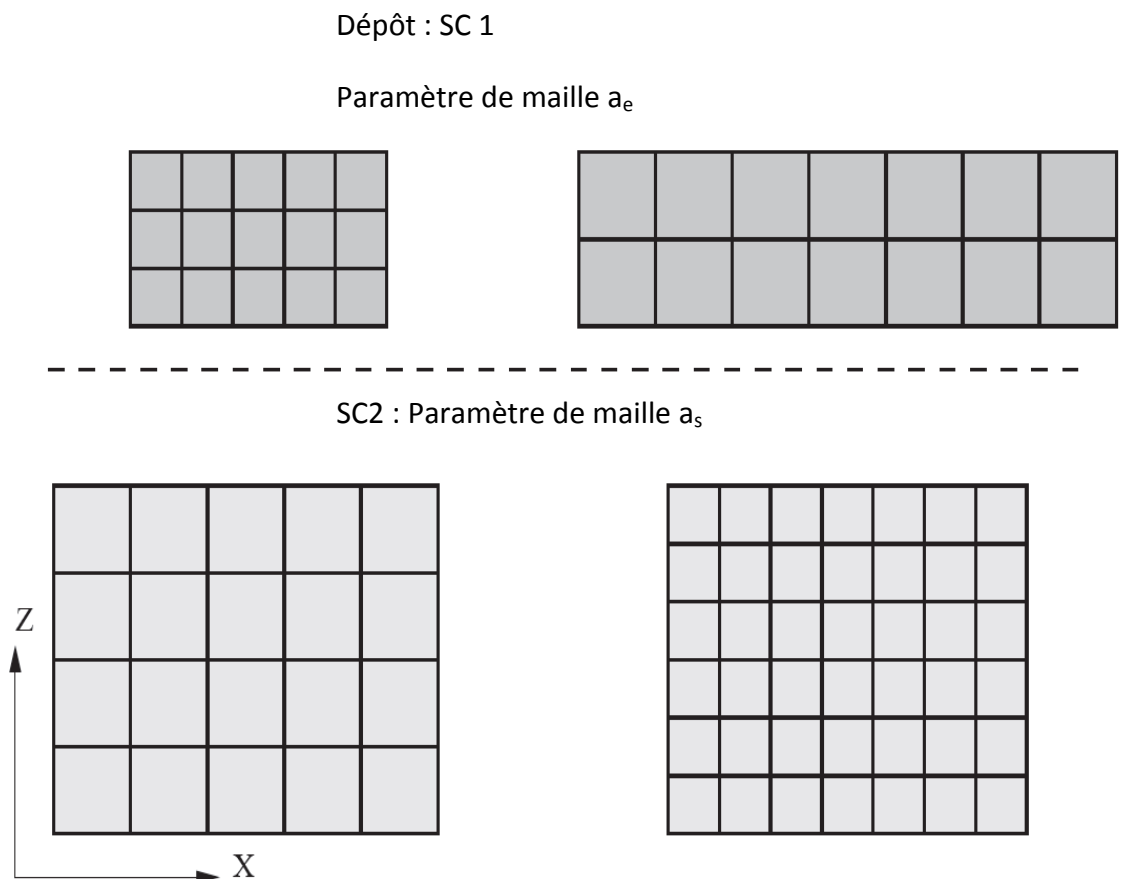


Figure 1. 8 Structures non contraintes (avant dépôt)

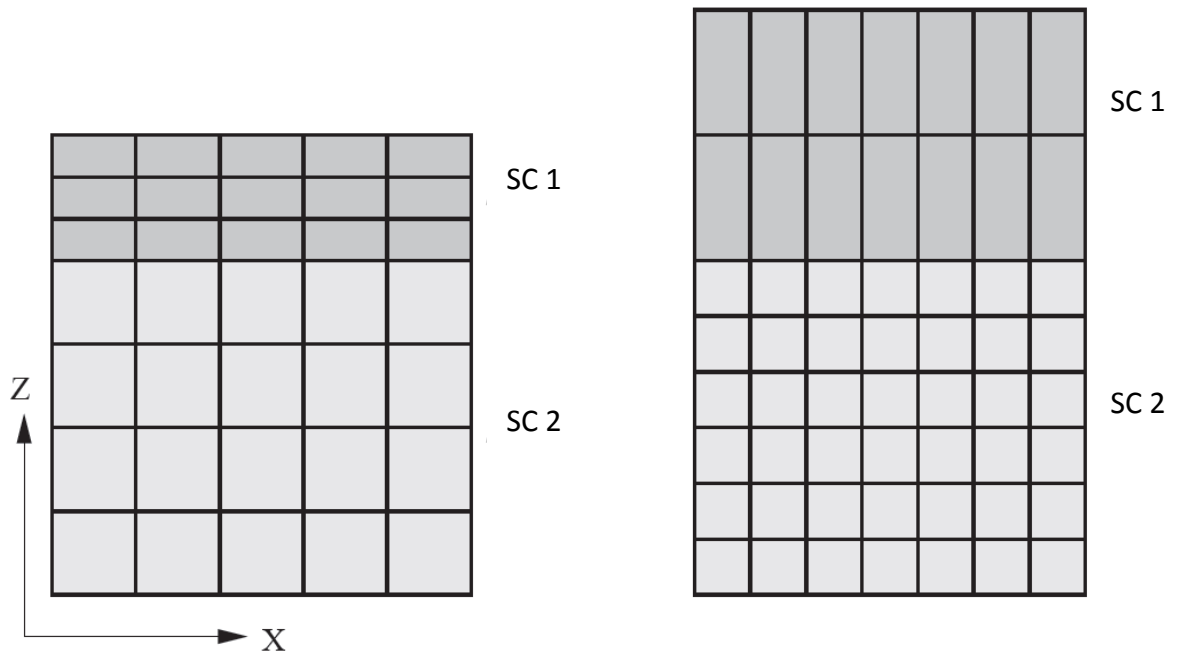


Figure 1. 9 Structures contraintes

1.4.1 Epaisseur critique

L'épaisseur critique L_c d'une couche contrainte est l'épaisseur en dessous de la quelle la couche est dans un état thermodynamiquement stable. Au-dessous de l'épaisseur L_c , la couche subit un relâchement de la contrainte, on dit qu'elle se relaxe. Il y a donc une apparition de dislocations, à partir de l'interface avec le substrat.

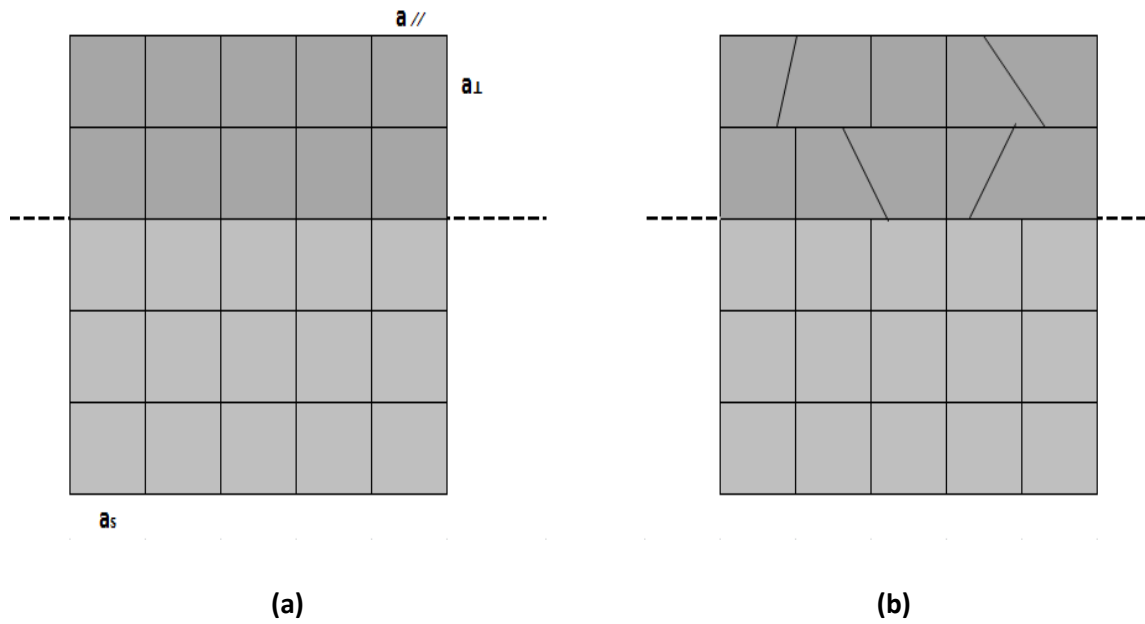


Figure 1. 10 Schéma montrant une couche contrainte en compression (a) et une couche relaxée (b)

L'épaisseur critique est calculée en utilisant par exemple le modèle proposé par Mathews et Blackeslee[16] élaboré en s'appuyant sur l'équilibre mécanique des forces agissant sur les dislocations et qui est donnée par l'expression suivante :

$$Lc = \frac{a}{\beta \cdot \sqrt{2} \cdot \pi \cdot \epsilon} \times \frac{1 - 0.25 \cdot \gamma}{1 + \gamma} \times \ln \left(\frac{Lc \cdot \sqrt{2}}{a} + 1 \right) \quad (1-1)$$

Avec :

$$\epsilon = \frac{a_e - a_s}{a_s}$$

Où :

a_e : paramètre de maille de la couche relaxée.

a_s : paramètre de maille du substrat.

ϵ : constante de déformation.

β : est un coefficient égal à 1 dans le cas d'un super-réseau ; à 2 pour un puits quantique ; 4 dans le cas d'une couche unique.

γ : coefficient de poisson donné par : $\gamma = \frac{c_{12}}{c_{11} + c_{12}}$

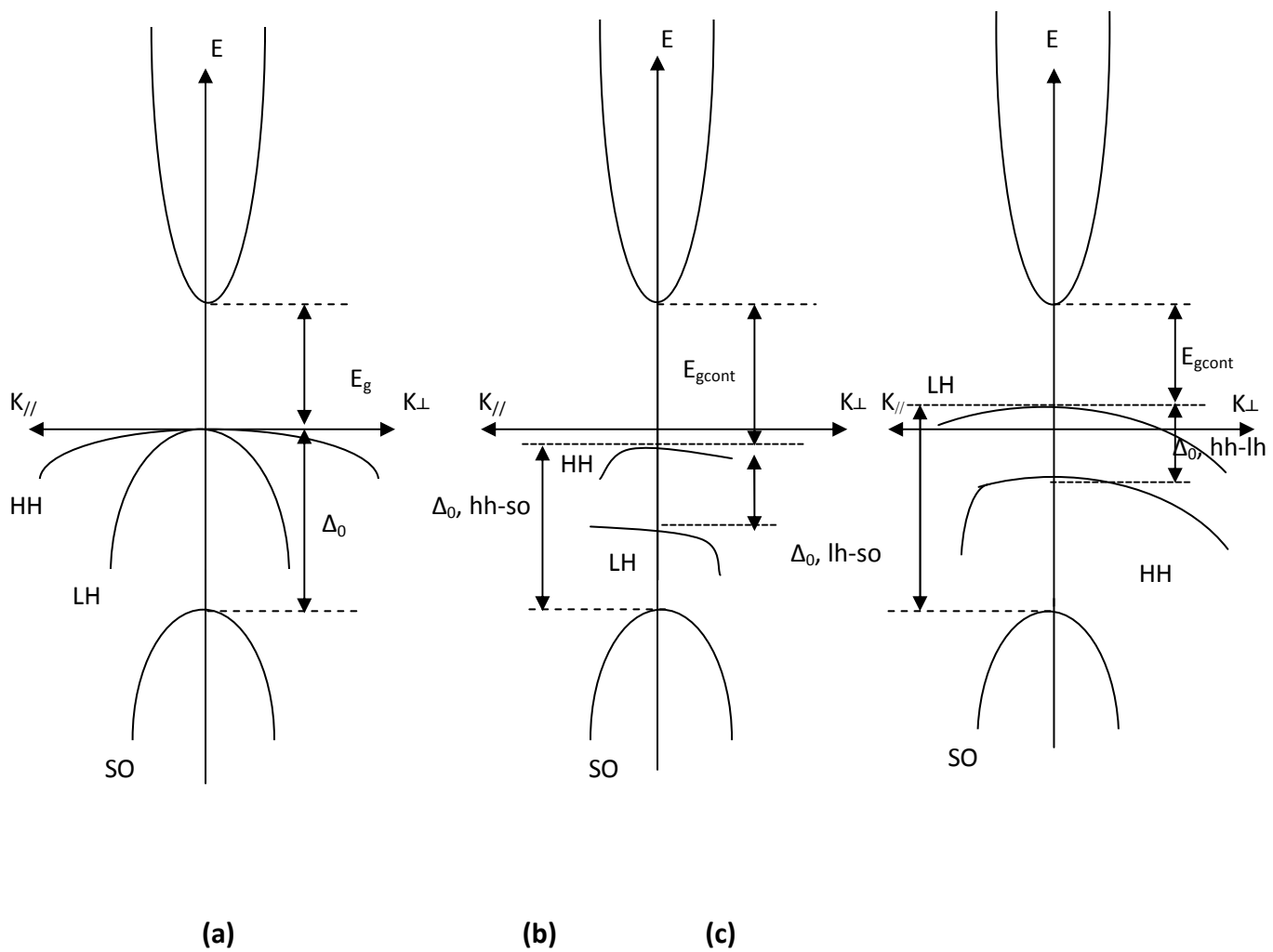


Figure 1.11 Représentation schématique de la structure de bande d'un matériau SC (a) non contraint, (b) contrainte compressive, (c) contrainte en tension.

L'effet de la contrainte sur la structure de bandes est bien illustré dans la figure ci-dessus (figure 1.11). [15] Dans le cas compressif l'état fondamental de la bande de valence c'est celui des trous lourds et dans le cas d'une contrainte en tension c'est celui des trous légers.

On observe que la contrainte entraîne une levée de la dégénérescence de la bande de valence au point Γ et l'apparition d'une anisotropie de la bande de valence, autrement dit la courbure (c'est-à-dire la masse effective) n'est plus la même suivant les directions k et $k_{//}$. Par ailleurs, le gap varie avec la contrainte, il augmente pour le cas d'une compression et diminue pour une tension.

1.4.2 Déformation et contrainte

La contrainte entraîne une variation du potentiel comme cela est montré en détails dans le cas du diagramme énergétique de la figure (1.12) correspondant à une couche contrainte en compression.

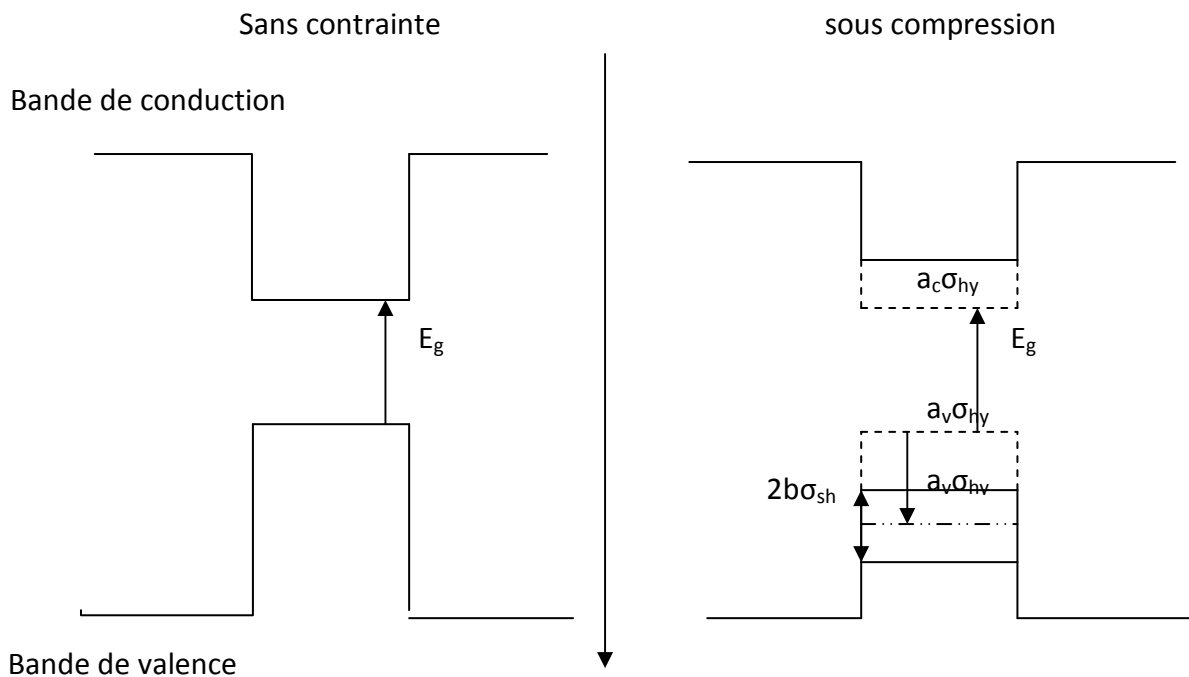


Figure 1. 12 Déformation du potentiel en fonction de la contrainte (cas de la compression)

Avec $a_c \sigma_{hy}$: Élément du tenseur de déformation hydrostatique.

$a_v \sigma_{hy}$: Élément du tenseur de déformation de cisaillement (shear deformation).

1.5 Masse effective

1.5.1 Masse effective des électrons

Un électron dans la bande de conduction est caractérisé par une fonction d'onde qui représente la somme d'ondes de Bloch d'orbitales anti liantes. En termes corpusculaires, c'est une particule dans un potentiel cristallin. On représente cette particule quasi-libre de charge e^- et de masse m_e^* qu'on appelle masse effective de l'électron.

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

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

Dans le cas d'un semi-conducteur à gap direct, la bande de conduction est univallée, centrée en $k_0=0$ et isotrope au voisinage de k_0 . Si on appelle E_c l'énergie minimum, l'expression $E(k)$ s'écrit :

$$E(k) = E_c + \frac{1}{2} \frac{d^2E(k)}{dk^2} k^2 \quad (1.3)$$

Ou, compte tenu de la définition de la masse effective (équation (1.2))

$$E(k) = E_c + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e^*} \quad (1.4)$$

Ainsi l'électron au voisinage du minimum de la bande de conduction se comporte comme un électron libre de masse m_e^* . Dans la mesure où la courbure de la bande de conduction varie peu au voisinage du minimum, la masse effective est constante et par suite l'énergie $E(K)$ varie quadratiquement en fonction du vecteur d'onde K .

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

Dans le cas d'un semi-conducteur à gap indirect, la bande de conduction est multivallée et anisotrope avec plusieurs minima équivalents situés en différents points de la zone de Brillouin. Les surfaces d'énergies constantes au voisinage des minima K_0 sont des ellipsoïdes. Les expressions des masses effectives sont données par :

$$m_l^* = \frac{\hbar^2}{d^2E/dk^2} \qquad m_t^* = \frac{\hbar^2}{d^2E/dk^2} \qquad (1.5)$$

Avec : m_l^* : masse effective de l'électron de la vallée considérée, dans son mouvement suivant l'axe de révolution de l'ellipsoïde, appelée aussi masse effective longitudinale.

m_t^* : masse effective de l'électron dans son mouvement dans le plan perpendiculaire à l'axe de révolution, appelée aussi masse effective transversal. [7]

1.5.2 Masse effective des trous

La masse effective des trous est définie comme celle des électrons, mais la bande de valence des semi-conducteurs cubique est composée de deux branches dégénérées en $K=0$.

Les énergies des trous sont comptées positivement vers le bas. La bande de plus grande courbure, bande inférieure, correspond à des trous de masse effective inférieure (bande des trous légers) et la bande de plus faible courbure, bande supérieure, correspond à celle des trous lourds.

$$m_{lh} = \frac{m_{lh}^*}{\gamma_1 + 2\gamma_2} \qquad m_{lh} = \frac{m_{lh}^*}{\gamma_1 - 2\gamma_2} \qquad (1.6)$$

γ_1 et γ_2 paramètre de Luttinger.

Les expressions (1.6) permettent de définir des masses effectives isotropes. Ils ont été calculés pour la plupart des semi-conducteurs.

1.6 Détermination des paramètres

1.6.1 Loi de Vegard

Pour calculer les paramètres d'une structure ternaire ou quaternaire il faut passer, en général, par la loi de Vegard (loi d'interpolation linéaire).

Les matériaux ternaires sont formés à partir de deux matériaux binaires AC et BC ayant un élément commun. Si x est la concentration en A, alors (1 - x) est la concentration en B. Les paramètres de matériau ternaire T varient selon une loi linéaire, fonction du paramètre A et de celui de B :

$$T(x) = xT_{AC} + (1-x)T_{BC} \quad (1-7)$$

Par exemple, pour un alliage ternaire de type $GaxIn_{1-x}As$, le paramètre de maille a_{GaInAs} s'écrira :

$$a_{GaInAs} = x \cdot a_{GaAs} + (1-x)a_{InAs} \quad (1-8)$$

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

Le tableau ci-dessous [20] représente les paramètres de quelques semi-conducteur III-V.

semi-conducteur	Nature du gap et sa valeur (ev)	paramètre de maille a_0 (Å°)	Masse effective des électrons m_e/m_0		Masse effective des trous m_t/m_0	
			m_1/m_0	m_t/m_0	m_{hh}/m_0	m_{lh}/m_0
Si	Indirect 1,12	5,431	0.916	0.191	0.53	0.16
Ge	Indirect 0,66	5,658	1.588	0.082	0.35	0.043
AlP	Indirect 2,45	5,467	—		0.63	0.20
AlAs	Indirect 2,116	5,660	0.124		0.67	0.15
AsSb	Indirect 1,60	6,136	0.161	0.23	0.94	0.14
GaP	Indirect 2,25	5,451	1.1	0.22	0.79	0.14
GaAs	Direct 1,42	5,653	0.0665		0.62	0.074
GaSb	Direct 0,68	6,096	0.043		0.49	0.046
InP	Direct 1,27	5,869	0.073		0.85	0.089
InAs	Direct 0,36	6,058	0.023		0.66	0.027
InSb	Direct 0,17	6,479	0.012		0.47	0.015

Tableau1. 1 Paramètres de quelques semi-conducteurs simples et III-V

1.7 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons présenté les principales notions relatives aux matériaux semi-conducteur et en particulier les SC III-V. Nous avons d'abord présenté quelques notions de leur cristallographie et ensuite des notions sur leurs structures de bande d'énergie.

Nous avons également présenté les propriétés des hétérostructures et la notion de contrainte qui a un impact décisif sur la qualité des composants optoélectroniques et hyperfréquences.

Chapitre 2 Notions générales sur les puits

quantiques

2.1 Introduction

Les structures semi-conductrices à dimensionnalité réduite tels que les puits quantiques (PQs), les fils quantiques (FQs) et les boîtes quantiques (BQs) constituent des systèmes très intéressants pour l'étude fondamentale des phénomènes physiques à l'échelle quantique et offrent une multitude de possibilités d'applications, notamment dans le domaine de l'optoélectronique [14].

Dans ce chapitre on décrira les différentes notions sur les structures à puits quantique en mettant l'accent sur les puits couplés qui constituent l'intérêt principal de notre travail. Le but est d'apporter les outils nécessaires à la compréhension du chapitre suivant qui constitue le cœur du thème abordé.

2.2 Notion de puits quantique

2.2.1 Conditions d'obtention de l'effet quantique

Pour obtenir l'effet quantique il faut aboutir à plusieurs conditions telles que [7] :

- L'épaisseur de la couche active dans laquelle apparait le phénomène doit être comparable à la longueur d'onde de De Broglie qui s'écrit :

$$\lambda_F = \frac{2 \cdot \pi \cdot \hbar}{\sqrt{2 \cdot m_e \cdot E_F}}$$

Où E_F est le niveau de fermi.

m: masse effective de l'électron

- Si E_n et E_{n+1} sont les états d'énergie du spectre discret nés de la quantification, il faut que :

$$E_{n+1} - E_n > \frac{\hbar}{\tau} \quad (2-1)$$

Où τ est la constante de temps prenant en compte toutes les diffusions.

- Par ailleurs il faut que l'écart soit plus grand que la distribution de Fermi due à la température, d'où la condition :

$$E_{n+1} - E_n > KT \quad (2-2)$$

Avec : K : la constante de Boltzmann

T : la température absolue

2.2.2 Puits quantiques

Un puits quantique est obtenu en faisant croître une couche d'un matériau semi-conducteur B entre deux couches d'un autre matériau A. Ce dernier a un gap d'énergie supérieur à celui du matériau B. La discontinuité entre les bandes d'énergie dans les deux matériaux crée une barrière de potentiel qui confine les porteurs (électrons, trous) dans le puits quantique [11].

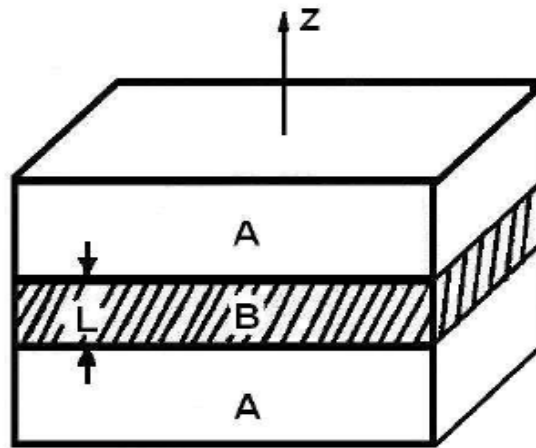


Figure 2. 1 Structure schématique d'un puits quantique

2.2.3 Spectre d'énergie

Si l'épaisseur L_1 du semi-conducteur SC_1 est faible, typiquement $L_1 < 200 \text{ \AA}$, les états électroniques ne correspondent plus au bas de la bande de conduction, mais sont quantifiés en structure de sous bandes d'énergie [12].

Le mouvement des électrons est quasi-libre dans le plan de la structure est quantifié dans la direction perpendiculaire. La fonction d'onde peut être écrite sous la forme suivante :

$$\Psi(\mathbf{r}) = \xi(z)e^{i(K_x x + K_y y)} \varphi(\mathbf{r}) \quad (2-3)$$

Où $\varphi(\mathbf{r})$ est la fonction de Bloch et $\xi(z)$ une fonction enveloppe qui décrit la quantification du mouvement suivant z . Dans l'approximation de la masse effective le mouvement suivant z est régi par l'équation de Schrödinger suivante :

$$\frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{d^2 \xi}{dz^2} + (E - V(z)) \xi(z) = 0 \quad (2-4)$$

L'énergie potentielle $V(z)$ est celle du puits carré à une dimension, définie en prenant l'origine des énergies au bas de la bande de conduction du semi-conducteur SC_1

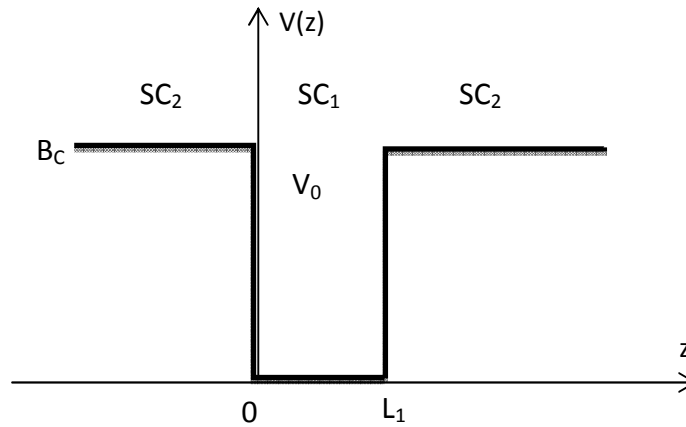


Figure 2. 1puits de potentiel de profondeur finie V_0

$$V(z) = \Delta E_c \quad \text{Pour } z < 0 \text{ et } z > L_1$$

$$V(z) = 0 \quad \text{pour } 0 < z < L_1$$

Les valeurs de l'énergie E décrivent la quantification des états électroniques dans la direction perpendiculaire à la structure.

Dans le plan de structure le mouvement des électrons n'est pas affecté. Il en résulte une structure de sous-bandes avec une quantification discrète suivant K_z et une variation pseudo-continue suivant $K_{//} = \sqrt{k_x^2 + k_y^2}$ l'énergie totale d'un électron

s'écrit :

$$\mathbf{E}(\mathbf{k}) = E_c + E_n + \frac{\hbar^2 k_{//}^2}{2m_e} \quad (2-5)$$

Les énergies E_n des minimas des différentes sous-bandes sont évidemment fonction de la profondeur V_0 et de la largeur du puits de potentiel [12].

a Puits de profondeur infinie

Si ΔE_c est très important on peut supposer en première approximation que les électrons sont confinés dans l'espace $0 < z < L_1$ par des murs de potentiel de hauteur infinie. Le potentiel s'écrit alors :

$$V(z) = \infty \text{ pour } z < 0 \text{ et } z > L_1$$

$$V(z) = 0 \text{ pour } 0 < z < L_1$$

Les conditions aux limites, définissant les constantes d'intégration de l'équation (2-4)

S'écrivent :

$$\xi(z=0) = 0 \quad \xi(z=L) = 0$$

Dans le puits de potentiel $V(z)=0$ donc, l'équation (2-4) s'écrit :

$$\frac{d^2(\xi)}{dz^2} + k^2 \xi(z) = 0 \quad (2-6)$$

Avec :

$$k = \sqrt{\frac{2m_e E}{\hbar^2}}, \text{ ou } m_e \text{ représente la masse effective des électrons dans le semi-conducteur } SC_1.$$

Les solutions de cette équation sont des sinusoides de la forme :

$$\xi(z) = A \sin(kz + \varphi) \quad (2-7)$$

Les conditions aux limites permettent d'écrire :

$$\xi(z=0) = 0 \quad \text{Donc} \quad \varphi = 0$$

$$\xi(z=L_1) = 0 \quad \text{Donc} \quad k = \frac{n\pi}{L_1}$$

Compte tenu de la définition de K, l'énergie est donné par $E = \frac{\hbar^2 K^2}{2m_e}$ soit

$$E_n = n^2 \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m_e L_1^2} \quad (2-8)$$

L'énergie totale des électrons dans le puits de potentiel s'écrit donc, compte tenu de (2-5) et (2-8) :

$$E(\mathbf{K}) = E_c + n^2 \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m_e L_1^2} + \frac{\hbar^2 K_{//}^2}{2m_e} \quad (2-9)$$

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

Les courbes de dispersion sont représentées sur la figure (2-3) :

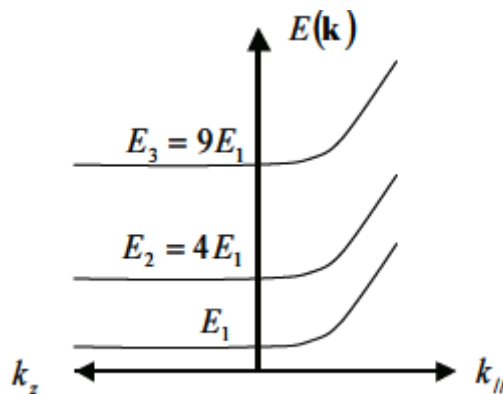


Figure 2. 2 Structure de sous-bandes d'énergie niveaux discrets du puits suivant une dimension (direction de croissance) et courbes de dispersion dans le plan de la structure

b Puits de profondeur finie

Lorsque l'énergie de confinement des électrons n'est plus négligeable devant la hauteur de la barrière de potentiel, soit par ce que ΔE_c n'est pas très important, soit par ce que L_1 est très petit, les résultats précédents sont modifiés par la prise en considération de la profondeur finie du puits de potentiel.

En posant $\Delta E_c = V_0$ pour les électrons, le potentiel s'écrit :

$$\begin{aligned} V(z) &= V & \text{pour} & & z < 0 \text{ et } z > L_1 \\ V(z) &= 0 & \text{pour} & & 0 < z < L_1 \end{aligned}$$

Le mouvement des électrons d'énergie $E < V_0$ n'est plus borné en $Z = 0$ et en $z = L_1$, c'est-à-dire que l'électron a une probabilité non nulle de se trouver à l'extérieur du puits.

Le potentiel carré délimite trois régions :

➤ Région I₁ $z < 0$ Voir (figure 2.2)

Le potentiel est égal à V_0 , l'équation de Schrödinger (2-4) s'écrit :

$$\frac{d^2\xi(z)}{dz^2} + \frac{2m_e}{\hbar^2} (E - V_0) \xi(z) = 0 \quad (2-10)$$

Où m_2 représente la masse effective des électrons dans le semi-conducteur SC₂(barrière). Dans la mesure où on étudie les états liés du puits de potentiel, l'énergie des électrons est inférieure à V_0 , de sorte que $(V_0 - E)$ est positif et l'équation s'écrit :

$$\frac{d^2\xi(z)}{dz^2} - k_2^2 \xi(z) = 0 \quad (2-11)$$

Avec :

$$k_2 = \sqrt{\frac{2m_2(V_0 - E)}{\hbar^2}}$$

Compte tenu de la condition $\xi_{I1}(z \rightarrow \infty) = 0$, correspondant à l'annulation de la fonction d'onde à l'infini, la solution de l'équation (2-11) s'écrit sous la forme :

$$\xi_{I1} = A e^{k_2 z} \quad (2-12)$$

➤ Région I $0 < z < L_1$:

Le potentiel est nul, l'équation (2-4) s'écrit :

$$\frac{d^2 \xi(z)}{dz^2} + \frac{2m_1}{\hbar^2} E \xi(z) = 0 \quad (2-13)$$

Où m_1 représente la masse effective des électrons dans la SC_1 . En posant :

$$k_1 = \frac{\sqrt{2m_1 E}}{\hbar}$$

L'équation (2-13) s'écrit :

$$\frac{d^2 \xi(z)}{dz^2} + K_1^2 \xi(z) = 0 \quad (2-14)$$

La solution de cette équation est de la forme :

$$\xi_I(z) = B \sin(k_1 z + \varphi) \quad (2-15)$$

➤ Région II $z > L_1$:

Le potentiel est à nouveau V_0 , compte tenu de la condition $\xi_{I_2}(z \rightarrow \infty) = 0$, la fonction d'onde s'écrit :

$$\xi_{I_2} = C e^{-k_2 z} \quad (2-16)$$

Les constantes d'intégration A, B, C et φ sont déterminées par les conditions aux limites. Ces conditions sont les continuités de la fonction d'onde ξ et du courant de probabilité $(1/m)(d\xi/dz)$ aux interfaces. A partir des expressions (2-12, 15 et 16) on obtient les relations :

En $z=0$, les conditions $\xi_{I_1}(0) = \xi_I(0)$ et $\frac{1}{m_2} \xi_{I_1}'(0) = \frac{1}{m_1} \xi_I'(0)$ entraînent

$$A = B \sin \varphi \quad (2.17.a)$$

$$A \frac{k_2}{m_2} = B \frac{k_1}{m_1} \cos \varphi \quad (2.17.b)$$

En $z=L_1$, les conditions $\xi_{I_1}(L_1) = \xi_{I_2}(L_1)$ et $\frac{1}{m_1} \xi_{I_1}'(L_1) = \frac{1}{m_2} \xi_{I_2}'(L_1)$ entraînent

$$B \sin(k_1 L_1 + \varphi) = C e^{-k_2 L_1} \quad (2.17.c)$$

$$B \frac{k_1}{m_1} \cos(k_1 L_1 + \varphi) = -C \frac{k_2}{m_2} e^{-k_2 L_1} \quad (2.17.d)$$

En divisant membre à membre, d'une part les équations (2-17-a et b) et d'autre part les équations (2-17-c et d), on obtient respectivement

$$\operatorname{tg} \varphi = \frac{k_1 m_2}{k_2 m_1} \quad (2.18.a)$$

$$\operatorname{tg}(k_1 L_1 + \varphi) = -\frac{k_1 m_2}{k_2 m_1} \quad (2.18.b)$$

Compte tenu de la relation $\sin^2 \alpha = \mathbf{1}/(\mathbf{1} + \mathbf{1}/\operatorname{tg}^2 \alpha)$ l'expression (2-18-a) donne :

$$\sin \varphi = \frac{k_1/m_1}{\sqrt{k_1^2/m_1^2 + k_2^2/m_2^2}} \quad (2.19)$$

D'autre part la relation $\operatorname{tg} \varphi = -\operatorname{tg}(K_1 L_1 + \varphi)$ entraîne $\varphi = -(K_1 L_1 + \varphi) + n\pi$.

Avec n : un nombre entier.

Et cette relation s'écrit sous la forme :

$$k_1 L_1 = n\pi - 2\varphi \quad (2.20)$$

Soit, en explicitant φ (équation 2.19)

$$k_1 L_1 = 2n\pi - 2 \text{Arcsin} \frac{k_1/m_1}{\sqrt{k_1^2/m_1^2 + k_2^2/m_2^2}} \quad (2.21)$$

En explicitant k_1 et k_2 à partir de leurs définitions, on obtient la relation de valeur propre qu'on va utiliser dans notre simulation :

$$\frac{\sqrt{2m_1 E_n}}{\hbar} L_1 = n\pi - 2 \text{Arcsin} \sqrt{\frac{E_n}{V_0 \left(\frac{m_1}{m_2}\right) + E_n \left(1 - \frac{m_1}{m_2}\right)}} \quad (2.22)$$

Avec :

m_1 et m_2 : masses effectives dans le matériau du puits et de la barrière respectivement.

n : le niveau de quantification (entier)

V_0 : Décalage de bandes

E_n : Valeurs propres de l'énergie (quantification)

Les niveaux d'énergie et les allures des fonctions d'onde sont représentés sur la figure (2-14) :

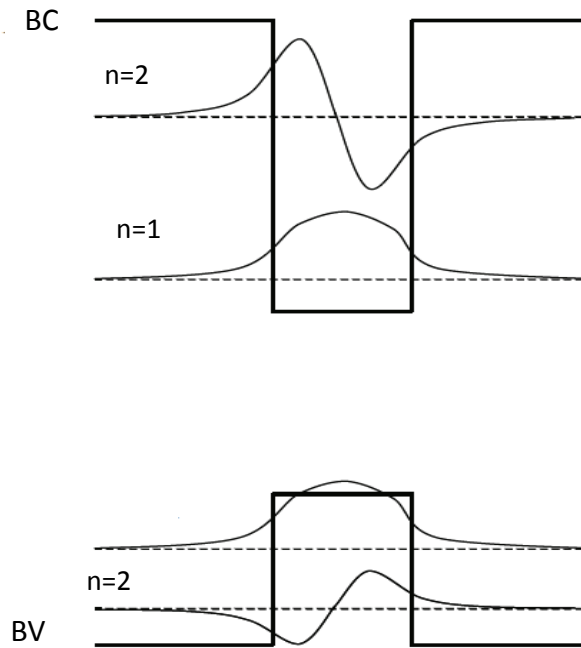


Figure 2. 3 Niveau d'énergie et fonction d'ondes dans le puits quantique de profondeur finie

On peut remarquer que les fonctions d'ondes sont étalées sur les barrières ce qui signifie que le confinement des porteurs n'est pas total dans le puits.

2.2.4 Multipuits quantique

Considérons une structure résultant de la juxtaposition d'une série de couches alternées d'un semi-conducteur SC_1 et d'un semi-conducteur SC_2 . Figure (2-5).

Si les couches de semi-conducteur SC_1 sont de faibles épaisseurs ($L_1 \sim 100 \text{Å}$) les états électroniques dans chacun des puits sont quantifiés et présentent une structure de sous-bandes d'énergie. Si en outre les couches de semi-conducteur SC_2 de gap plus élevé sont relativement épaisses ($L_2 > 200 \text{Å}$) la probabilité pour qu'un électron passe d'un puits dans l'autre par effet tunnel à travers la barrière est faible, les puits sont indépendants les uns des autres. Dans chacun des puits la structure de sous-bandes

d'énergie est analogue à celle du puits unique, le mouvement des électrons dans la structure est bidimensionnel [12].

Cette série de puits quantique indépendants porte le nom de *structure à multi-puits quantiques* non couplés. On peut, par exemple, utiliser ce type de structures dans les lasers semi-conducteur afin d'améliorer leur propriété de confinement.

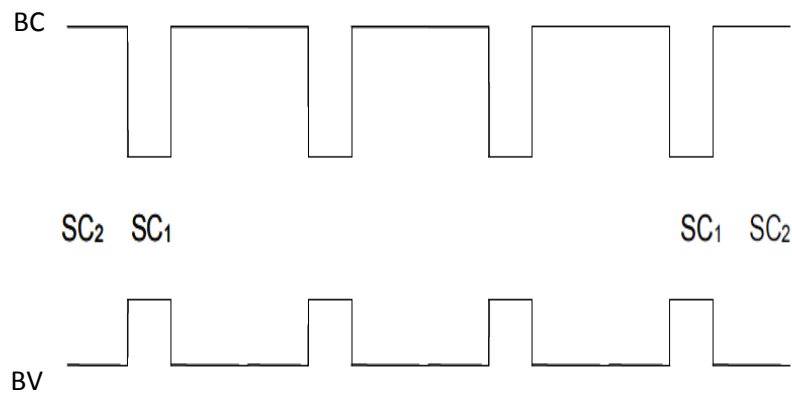


Figure 2. 4 Structure à multipuits quantique de type I

Dans le cas du couplage entre les différents puits quantiques (faible épaisseur des couches du SC2), la structure est appelée "superréseau" dans lequel on retrouve le mouvement tridimensionnel des porteurs. Ces structures se comportent comme des cristaux artificiels avec des gaps réduits d'où l'avantage de leur utilisation dans les photodétecteurs pour l'infrarouge moyen.

2.2.5 Le double puits quantique couplé

On dit que les deux puits quantiques sont couplés si un électron d'un puits peut traverser la barrière (par effet tunnel) et se trouver dans l'autre puits ($\hbar \approx 100 \text{ \AA}$).

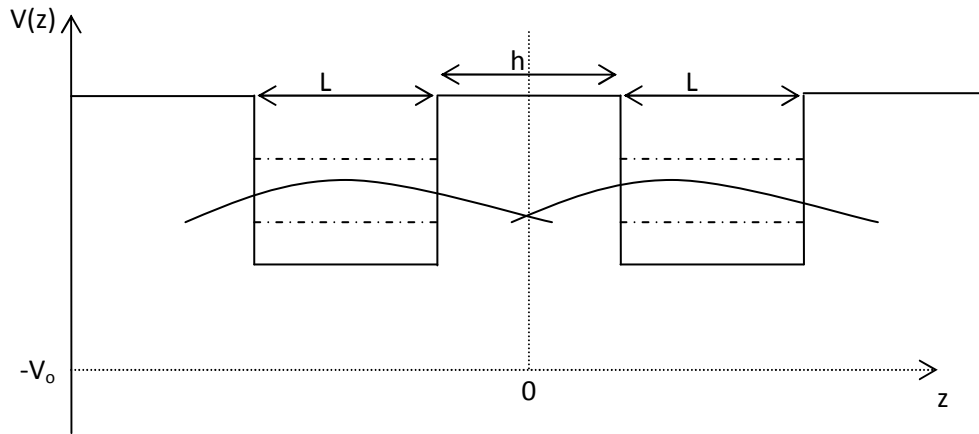


Figure 2. 5 Structure à double puits quantique identique

On pose

$$z_1 = -\frac{h}{2} - L$$

$$z_2 = \frac{h}{2} + L$$

On peut écrire :

$$H = -\frac{\hbar^2 \partial^2}{2m \partial z^2} + V_0(z - z_1) + V_0(z - z_2) \quad (2.23)$$

$$V_0(z - z_i) = 0 \quad \text{si } |z - z_i| \geq \frac{L}{2}$$

$$= -V_0 \text{ si } |z - z_i| \leq \frac{L}{2} \quad i=1,2$$

On sera ramenés à la résolution de l'équation suivante [12] pour aboutir aux valeurs propres de l'énergie

$$2 \cos kL + \left(\xi - \frac{1}{\xi} \right) \sin kL \pm \left(\xi - \frac{1}{\xi} \right) e^{-kL} \sin kL = 0$$

$$\xi = \frac{K}{k}$$

$$K = \sqrt{\frac{2m^* E}{\hbar^2}} k$$

$$k = \sqrt{\frac{2m^*(E - V_0)}{\hbar^2}}$$

On peut faire une résolution graphique ou numérique de l'équation précédente.

Pour la fonction d'onde, on aura en première approximation :

$$\Psi(z) = a_i \xi_1(z - z_1) + b_i \xi_2(z - z_2) \quad (2.24)$$

La fonction d'onde est une combinaison linéaire de celles des états des niveaux d'énergie correspondant dans chaque puits.

En absence du couplage ces fonctions d'onde sont données par les expressions (2.12, 15 et 16) que l'on écrira, suivant les régions de l'espace, sous la forme suivante : [12]

$$z < z_1 \quad \xi_1(z) = A e^{K_2(z-z_1)} \quad (2.25.a)$$

$$z_1 < z < z_1 + L_1 \quad \xi_1(z) = B \sin(k_1(z - z_1) + \varphi) \quad (2.25.b)$$

$$z_1 + L_1 < z \quad \xi_1(z) = C e^{-K_2(z-z_1)} \quad (2.25.c)$$

$$z < z_2 \quad \xi_2(z) = A e^{K_2(z-z_2)} \quad (2.26.a)$$

$$z_2 < z < z_2 + L_1 \quad \xi_2(z) = B \sin(k_1(z - z_2) + \varphi) \quad (2.26.b)$$

$$z_2 + L_1 < z \quad \xi_2(z) = C e^{-K_2(z-z_2)} \quad (2.26.c)$$

2.3 Calcul de décalage de bande (band offset)

2.3.1 Calcul général

Le calcul des décalages de bandes dans une hétérostructure est donné par la théorie du modèle solide proposé par Van De Wall et Martin, qui tient compte également de l'effet de la contrainte. Les trois plus hautes bandes de valence au point Γ ($K=0$) sont : la bande des trous légers, trous lourds et la bande spin orbite. L'énergie $E_{v,av}$ (énergie de bande de valence moyenne) est choisie comme une référence de niveau d'énergie.[10]

Les changements des énergies de $E_{v,av}$ et E_c induits par la composante de la déformation hydrostatique peuvent être exprimés comme suite :

$$dE_{v,a} = a_v \left(\frac{\Delta\Omega}{\Omega} \right) \quad (2.27)$$

$$dE_{c,a} = a_c \left(\frac{\Delta\Omega}{\Omega} \right) \quad (2.28)$$

Ou a_v et a_c sont les potentiels de déformation hydrostatiques pour la bande de valence et la bande de conduction respectivement, $\Delta\Omega/\Omega$ est le changement relatif du volume qui, pour de petites contraintes sur le substrat orienté (001), peut être approximé comme suite :

$$\frac{\Delta\Omega}{\Omega} = (\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}) = (2\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{zz}) \quad (2.29)$$

Les composantes de la contrainte (ξ_{ij}) sont définies par :

$$\text{Parallèlement à l'interface : } \varepsilon_{xx} = \varepsilon_{yy} = \left(\frac{a_s}{a_e} - 1 \right) \quad (2.30)$$

$$\text{Perpendiculairement à l'interface : } \varepsilon_{xx} = \varepsilon_{yy} = \left(\frac{a_s}{a_e} - 1 \right) \quad (2.31)$$

a_s est le paramètre de maille du substrat et a_e est le paramètre de maille de la couche épitaxiée, et C_{ij} les constantes élastiques de la couche.

La levée de la dégénérescence de la bande de valence au point Γ est causée par l'effet de la composante de la contrainte de cisaillement. Le décalage d'énergie résultant de la bande de valence $|J, m_j\rangle = |3/2, 3/2\rangle$ (ou $E_{v,2}$), la bande $|3/2, 1/2\rangle$ ($E_{v,1}$) et la bande spin orbite $|1/2, 1/2\rangle$ ($E_{v,3}$) est calculé en respectant la moyenne $E_{v,av}$, et exprimé comme suite :

$$dE_{v,2} = \frac{\Delta}{3} - \frac{\delta E_{001}}{2} \quad (2.32)$$

$$dE_{v,1} = -\frac{\Delta_0}{\epsilon} - \frac{\delta E_{001}}{4} + \frac{1}{2} \left[\Delta_0^2 + \Delta_0 \delta E_{001} + \frac{9}{4} (\delta E_{001})^2 \right]^{1/2} \quad (2.33)$$

$$dE_{v,3} = -\frac{\Delta_0}{\epsilon} + \frac{\delta E_{001}}{4} - \frac{1}{2} \left[\Delta_0^2 + \Delta_0 \delta E_{001} + \frac{9}{4} (\delta E_{001})^2 \right]^{1/2} \quad (2.34)$$

Avec :

$$\delta E_{001} = 2b (\xi_{zz} - \xi_{xx}) \quad (2.35)$$

Δ_0 : Energie de l'interaction spin-orbite (cas non contraint).

b : Potentiel de déformation de cisaillement.

$E_{v,2}$ et $E_{v,1}$ sont donc dégénérées pour le réseau accordé, la plus haute bande de valence se situe à $\Delta_0/3$ au-dessus de $E_{v,av}$.

Les bande de valence et de conduction du réseau $Ga_xIn_{1-x}As$ / InP contraint peuvent donc être exprimées comme suit :

✓ Pour le substrat (cubique) :

$$E_v(\text{sub}) = E_{v,av} + \frac{\Delta_0}{3} \quad (2.36)$$

$$E_c(\text{sub}) = E_v - E_g$$

✓ Pour la couche contraintes(tétraogonale) :

$$E_{v,i} = E_{v,av} + a_v \left(\frac{\Delta\Omega}{\Omega} \right) + dE_{v,i} \quad \text{Pour } i=1-3 \quad (2.37)$$

$$E_c = \frac{\Delta_0}{3} + E_{g,0} + a_c \left(\frac{\Delta\Omega}{\Omega} \right) \quad (2.38)$$

Les décalages de bande (band offset) de la bande de valence et de conduction sont définis comme suit :

$$\Delta E_{v,i} = E_{v,i} - E_{v,sub} \quad \text{Pour } i=1-3 \quad (2.39)$$

$$\Delta E_c = E_{c,sub} - E_c \quad (2.40)$$

2.3.2 Cas non contraint

Pour le cas non contraint, $\Delta\Omega/\Omega=0$, $\delta E_{001}=0$. Les équations (2.32) et (2.33) deviennent :

$$dE_{v,1} = dE_{v,2} = \Delta_0/3.$$

En remplaçant dans l'équation (2.37), l'énergie de sommet de la bande de valence du prend la valeur suivante :

$$E_{v,2} = E_{v,1} = E_{v,av} + \frac{\Delta_0}{3} \quad (2.41)$$

2.4 L'effet tunnel, un phénomène quantique

La physique quantique prédit des comportements inhabituels et difficiles à accepter par notre intuition immédiate, comme l'effet tunnel. Prenons le cas d'une bille devant franchir une bosse. En physique classique, si l'énergie communiquée à la bille est insuffisante, elle ne peut pas franchir la bosse et retombe vers son point de départ.

En physique quantique, une particule (proton, électron) peut franchir la bosse, même si son énergie initiale est insuffisante: elle peut passer de l'autre côté comme par un petit tunnel.

La microscopie à effet tunnel est basée sur le fait qu'il y a une probabilité non nulle qu'une particule d'énergie inférieure à la hauteur d'une barrière de potentiel (la bosse) puisse la franchir.

Les particules sont des électrons traversant l'espace séparant deux électrodes, une fine pointe métallique terminée par un atome unique et la surface métallique ou semi-conductrice de l'échantillon. La physique classique donne d'une surface l'image d'une frontière étanche, les électrons étant strictement confinés à l'intérieur du solide. Par contre, la physique quantique enseigne que chaque électron a un comportement ondulatoire: sa position est "floue". En particulier, au voisinage de la surface existe un nuage d'électrons dont la densité décroît très rapidement, de façon exponentielle, lorsque l'on s'éloigne du solide. L'électron a une certaine probabilité de se trouver "en dehors" du solide. Quand la fine pointe métallique est approchée de la surface, à une

distance inférieure au nanomètre, la fonction d'onde associée à l'électron n'est pas nulle de l'autre côté de la barrière de potentiel, et les électrons passent de la surface à la pointe, et réciproquement, par effet tunnel.

La barrière de potentiel franchie par les électrons est appelée barrière tunnel. Lorsqu'une faible tension est appliquée entre la pointe et la surface, un courant tunnel peut être détecté. La pointe et la surface étudiée forment localement une jonction tunnel. L'effet tunnel se manifeste également dans les jonctions Josephson où un courant continu peut passer à travers une étroite discontinuité entre deux éléments supraconducteurs. L'effet tunnel peut donc être observé uniquement dans une structure à double puits quantiques lorsque la barrière de potentiel séparant les deux puits est mince (typiquement inférieure à 150 \AA). [8]

2.5 L'effet tunnel résonnant

L'effet tunnel résonnant [9] apparaît lorsqu'un tel système quantique est abordé de l'extérieur avec une énergie proche, ou égale à celle du niveau quasi-lié. La probabilité de passage à travers chacune des barrières d'entrée ou de sortie seule est très faible mais la résonance avec le niveau du puits va piéger la particule quantique, pendant un temps relativement long, de l'ordre de grandeur de la durée de vie du niveau quasi-lié, mais ce piégeage va permettre à la particule de traverser l'ensemble. La transmittivité de la barrière peut approcher l'unité, même pour des barrières épaisses.

2.6 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons abordé les principales notions théoriques fondamentales nécessaires à la compréhension des structures à puits quantiques et en particulier aux puits quantiques couplés. Nous avons ainsi regroupé les outils qui vont nous permettre de simuler le couplage, à travers la représentation ondulatoire d'une structure particulière à deux puits.

Chapitre 3 Résultats et interprétations

3.1 Introduction

Dans ce chapitre, on va aborder la première partie de simulation en utilisant un programme développé d'une façon à nous permettre de calculer les niveaux d'énergie de quantification et les énergies de transition des deux structures ($\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}/\text{InP}$ et $\text{InAs}_y\text{P}_{1-y}/\text{InP}$) et cela en faisant varier la largeur du puits.

On étudiera en suite l'aspect ondulatoire du couplage entre les deux puits (à travers les fonctions d'onde) et on terminera par le calcul du champ électrique externe pour lequel on obtient le phénomène de résonance entre les deux structures (double puits quantique asymétrique) suivi d'une interprétation des résultats obtenus.

La structure que nous avons choisie est la suivante:

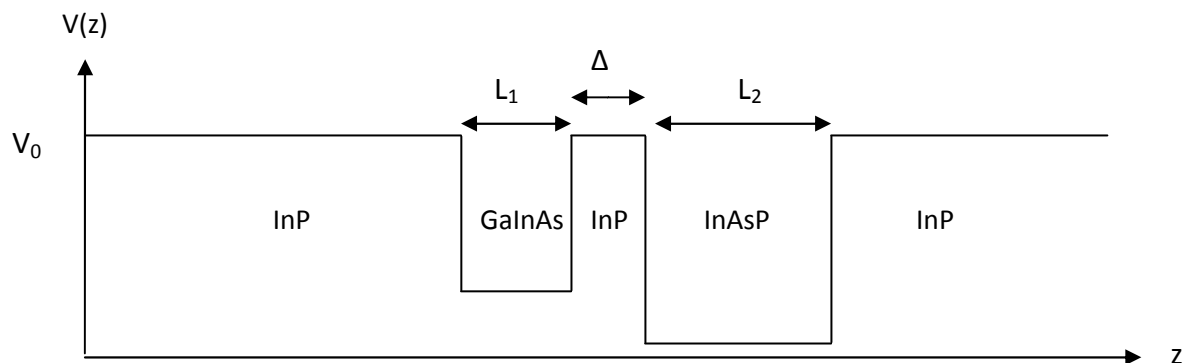


Figure 3. 1 Double puits asymétrique en absence de champ électrique extérieur

3.2 Calcul du gap

Dans le cas de l'accord de maille (non contraint) il faut fixer $\epsilon = 0$ (constante de déformation, voir chapitre 1) ce qui permet d'avoir $a_e = a_s$ et tirer le x en utilisant la loi de Vegard (1-8) comme il est indiqué ci-dessous :

➤ Pour $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}$:

$$a(\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}) = a(\text{InP})$$

$$a(\text{GaAs}) \cdot x + a(\text{InAs}) \cdot (1-x) = a(\text{InP})$$

$$a(\text{GaAs}) = 5.56, a(\text{InAs}) = 6.06 \text{ et } a(\text{InP}) = 5.86$$

$$\text{D'où } x = 0.47$$

➤ Pour $\text{InAs}_y\text{P}_{1-y}$:

$$a(\text{InAsP}) = a(\text{InP})$$

$$a(\text{InAs}) \cdot y + a(\text{InP}) \cdot (1-y) = a(\text{InP})$$

$$\text{D'où } y = 0.42$$

Après avoir déterminé la composition pour chaque ternaire qui donne l'accord de maille, on substitue ensuite dans l'expression du gap pour trouver sa valeur.

La relation du gap non contraint des ternaires $A_xC_{1-x}D$ est donné par :

$$E_G = (x) E_G(AD) + (1-x) E_G(CD) - x(1-x) B \quad (3.1)$$

Avec:

B: paramètre de Bowing

$$\text{Donc on aura: } E_g(\text{GaInAs}) = xE_g(\text{GaAs}) + (1-x) E_g(\text{InAs}) - Bx(1-x)$$

Avec:

$$B(\text{GaInAs}) = 0.47 \text{ eV [20]}$$

$$E_g(\text{GaInAs}) = 0.36 + 0.37x + 0.43x^2 \text{ (eV)}$$

$$E_g(\text{GaInAs}) = 0.74 \text{ eV}$$

De même pour InAsP:

$$E_g(\text{InAsP}) = x E_g(\text{InAs}) + (1-x) E_g(\text{InP}) - Bx(1-x)$$

Avec:

$$B(\text{InAsP}) = 0.27\text{eV}$$

$$E_g(\text{InAsP}) = 1.35 - 1.09x + 0.10x^2 \text{ (eV)}$$

$$E_g(\text{InAsP}) = 0.71 \text{ eV}$$

Remarque: Les structures choisies sont bien de type I car $\Delta E_c > 0$ et $\Delta E_v < 0$

3.3 Calcul des décalages :

On utilise les équations (2.41) et (2.42) pour calculer les énergies de sommet de la bande de valence

➤ Pour $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}$

$$E_{v,2} = E_{v,1} = E_{v,av} + \frac{\Delta_0}{3} = -6.67 + (0.38/3) = -6.54 \text{ eV} \quad \text{Pour l'InAs}$$

$$E_{v,2} = E_{v,1} = E_{v,av} + \frac{\Delta_0}{3} = -6.92 + (0.34/3) = -6.81 \text{ eV} \quad \text{Pour le GaAs}$$

➤ Pour $\text{InAs}_y\text{P}_{1-y}$:

$$E_{v,2} = E_{v,1} = E_{v,av} + \frac{\Delta_0}{3} = -6.67 + (0.38/3) = -6.54 \text{ eV} \quad \text{Pour l'InAs}$$

$$E_{v,2} = E_{v,1} = E_{v,av} + \frac{\Delta_0}{3} = -7.04 + (0.11/3) = -7.003 \text{ eV} \quad \text{Pour l'InP}$$

Les décalages de bande (band offset) de la bande de valence et de conduction sont obtenus en utilisant les équations (2-39) et (2-40), et on trouve les valeurs suivantes :

➤ Pour $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}$:

$$\Delta E_c = 0.29 \text{ eV}$$

$$\Delta E_v = -0.32 \text{ eV}$$

➤ Pour $\text{InAs}_y\text{P}_{1-y}$:

$$\Delta E_c = 0.42 \text{ eV}$$

$$\Delta E_v = -0.23 \text{ eV}$$

3.4 Simulation des deux structures

Le calcul des énergies de quantification et de transition des particules (électrons, trous lourds, trous légers) est basé sur la relation appelée « équation aux valeurs propres (équation (2-22))

Pour les besoins de la programmation, on pose:

$$A = \frac{\sqrt{2n_1 E_n}}{b} L_1, \quad B = 2 \operatorname{Arcsin} \sqrt{\frac{E_n}{V_0 \left(\frac{m_1}{m_2}\right) + E_n \left(1 - \frac{m_1}{m_2}\right)}} \quad \text{et} \quad C = n\pi$$

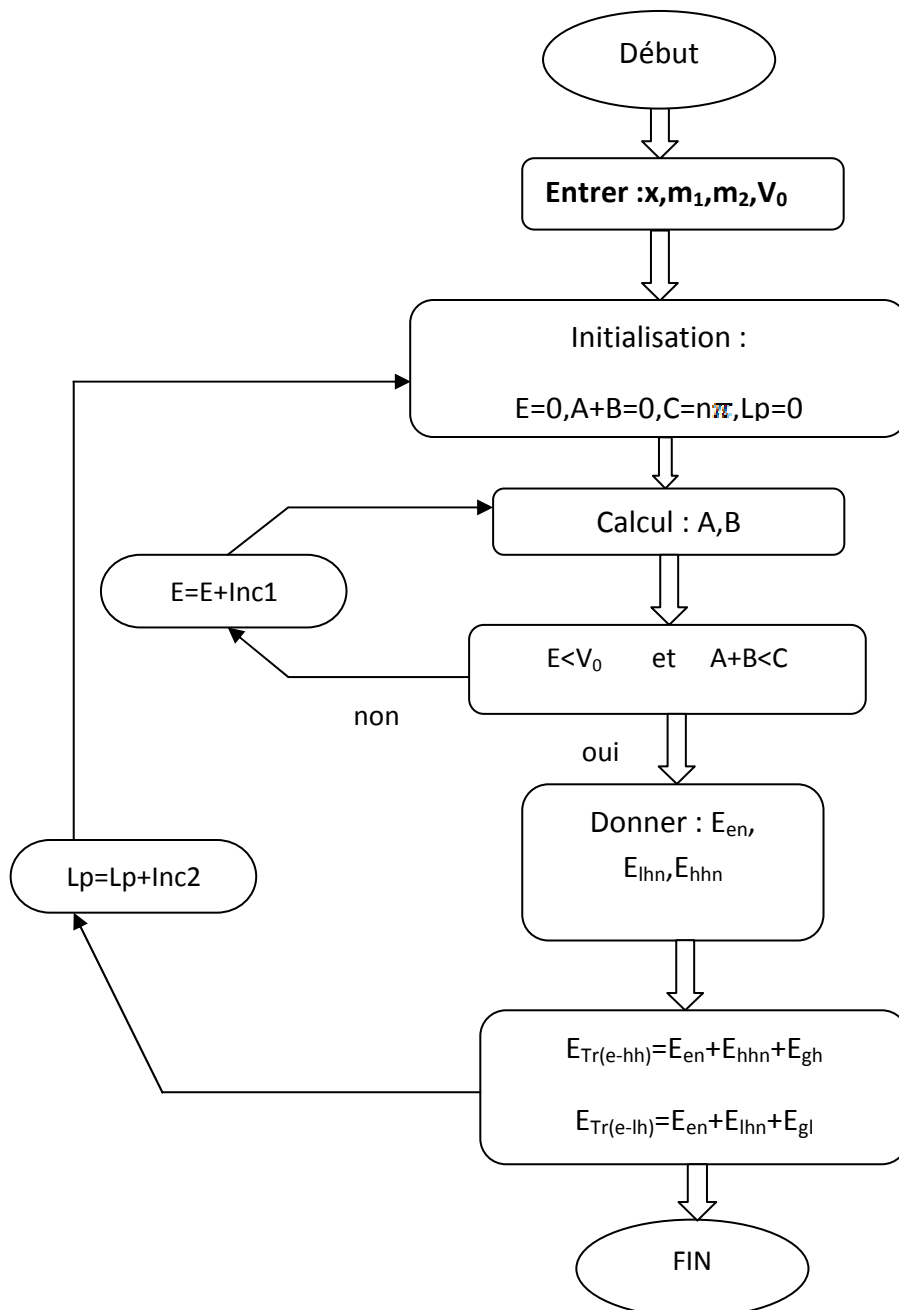


Figure 3.2 Organigramme de calcul de l'énergie de quantification et de recombinaison en fonction de la largeur du puits

3.4.1 Energies de quantification

a Structure InP/GaInAs/InP

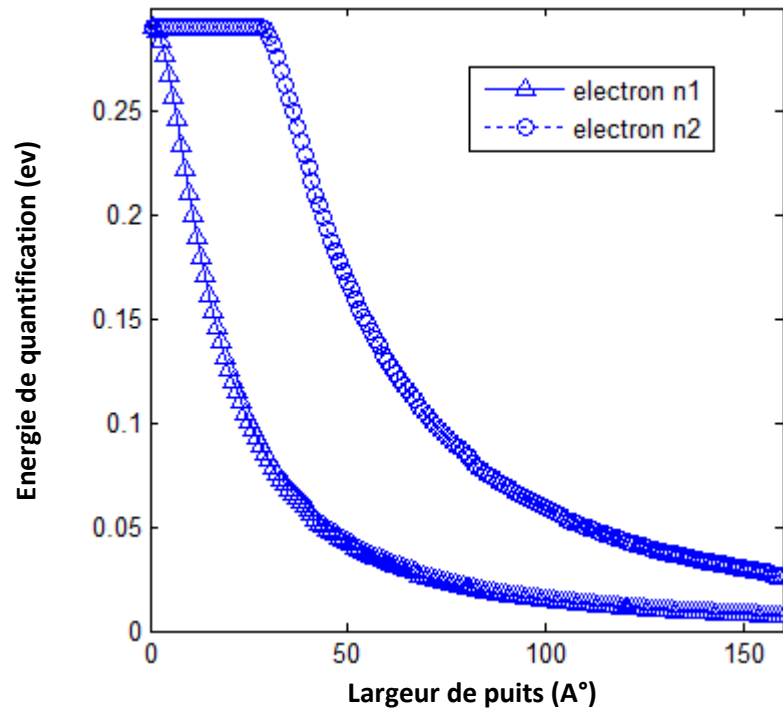


Figure 3. 3 Energie de quantification des deux premiers niveaux des électrons en fonction de la largeur de puits

On voit bien (fig. 3.3) que les énergies de quantifications des électrons suivent une évolution décroissante en fonction de la largeur et se rapprochent vers zéro autour 160 Å⁰. On remarque aussi que le deuxième niveau apparaît seulement au-delà de 30 Å⁰ environ.

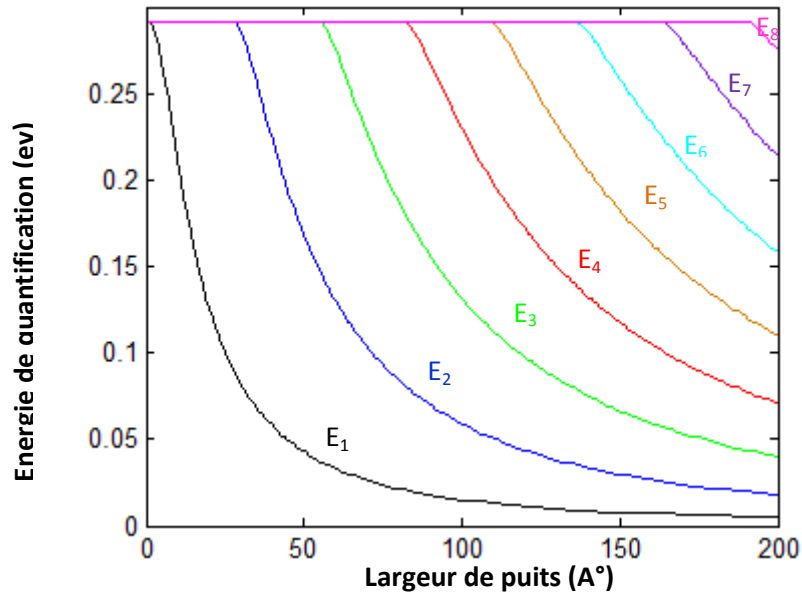


Figure 3. 4 Energie de quantification des électrons en fonction de la largeur de puits

La figure 3.4 montre tous les niveaux des électrons qui apparaissent jusqu'à 200 Å d'épaisseur

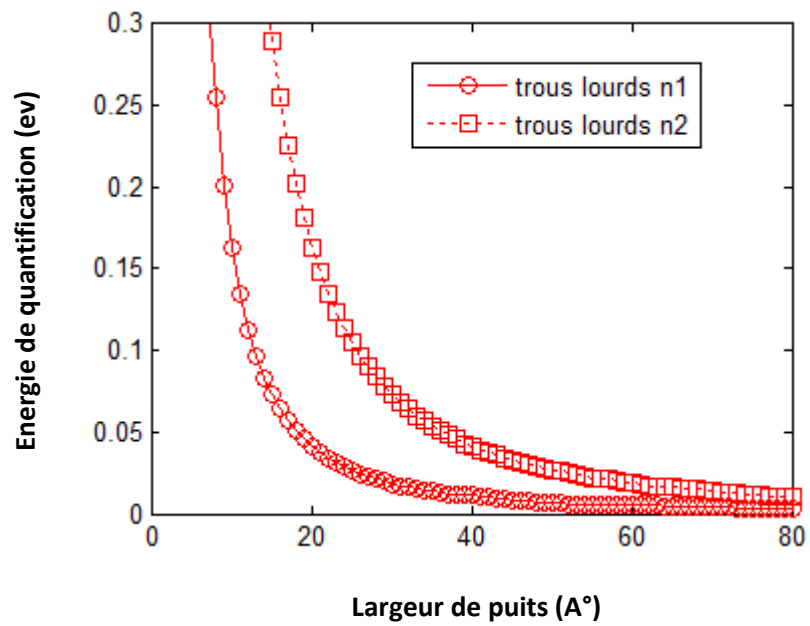


Figure 3. 5 Energie de quantification des 2 premiers niveaux des trous lourds en fonction de la largeur du puits

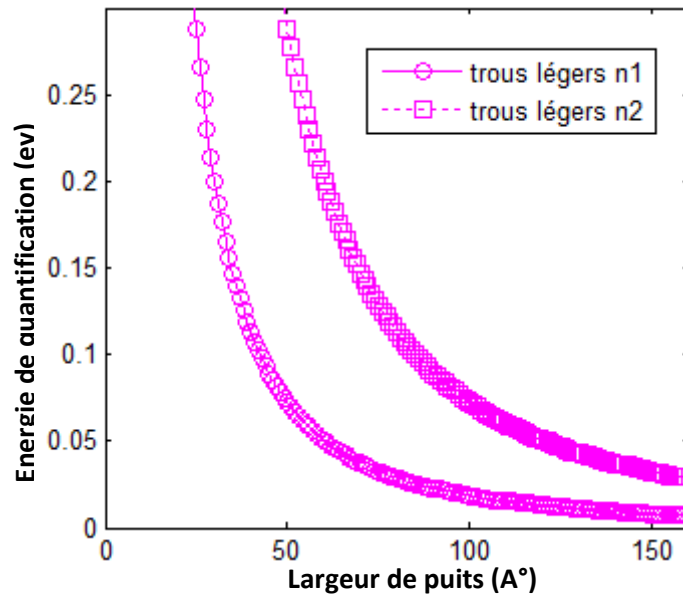


Figure 3. 6 Energie de quantification des 2 premiers niveaux des trous légers en fonction de la largeur du puits

Pour les trous, la même remarque peut se faire concernant l'évolution des énergies en fonction de l'épaisseur mais on constate que les énergies de trous lourds sont nettement plus faibles que celles de trous légers, ceci s'explique par les plus faibles masses effectives des trous légers.

On vérifie que lorsque la largeur du puits augmente l'énergie de quantification diminue et tend vers zéro. Ceci est normal puisque l'effet quantique tend naturellement à disparaître pour les fortes dimensions (au-delà de 300 Å au maximum) .Par ailleurs, l'énergie de quantification des trous lourds est faible par rapport à l'énergie des électrons, ceci est dû au fait que la masse des trous lourds est plus élevée

D'après le calcul que l'on a effectué pour la structure $\text{Ga}_{0.47}\text{In}_{0.53}\text{As}$ (non contraint) de largeur $L_p = 200\text{Å}$, on a trouvé 8 niveaux d'énergie de quantification des électrons, 2 niveaux d'énergie de quantification des trous lourds et trous légers.

Le nombre des états liés par puits est donné par [17]:

$$N = 1 + \text{Int} \left[\left(\frac{2m_A}{\hbar^2 \pi^2} V L_A^2 \right)^{1/2} \right] \quad (3.3)$$

L_A : la largeur du puits

V : le potentiel de la barrière

$\text{Int}(x)$: la partie entière de x

m_A : la masse effective dans la couche A (puits)

Nous avons essayé de comparer le nombre de niveaux trouvés par cette expression avec celui de nos calculs mais les résultats ne sont pas très concordants. Ceci pourrait s'expliquer par le fait que le calcul du décalage de bandes soit peu précis (modèle utilisé approximatif)

Nous avons trouvé : pour $L_p=100\text{\AA}$ N égale à 6 alors que normalement on devait trouver 4.

***b* La structure InP/InAsP/InP**

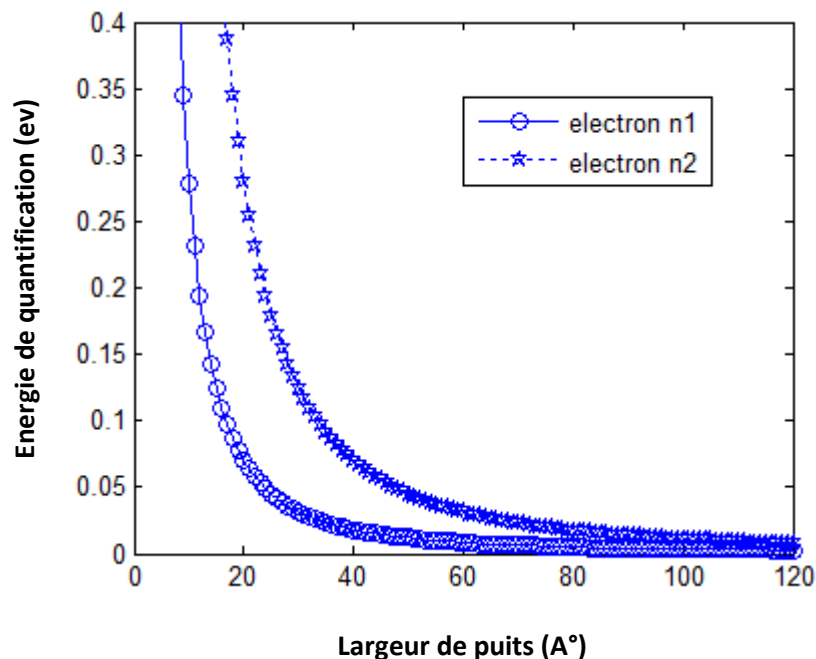


Figure 3.7 Énergie de quantification des deux premiers niveaux des électrons en fonction de la largeur du puits

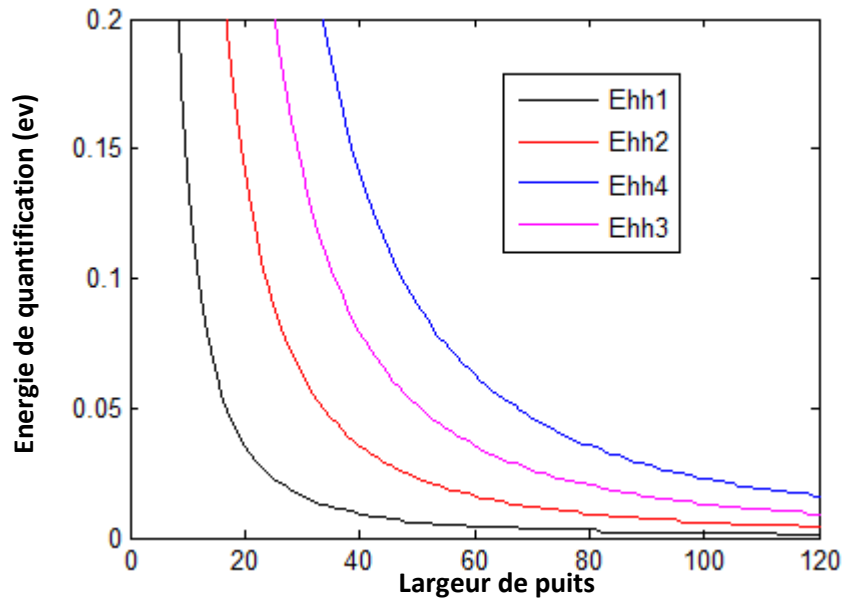


Figure 3. 8 Energie de quantification des trous lourd en fonction de la largeur du puits

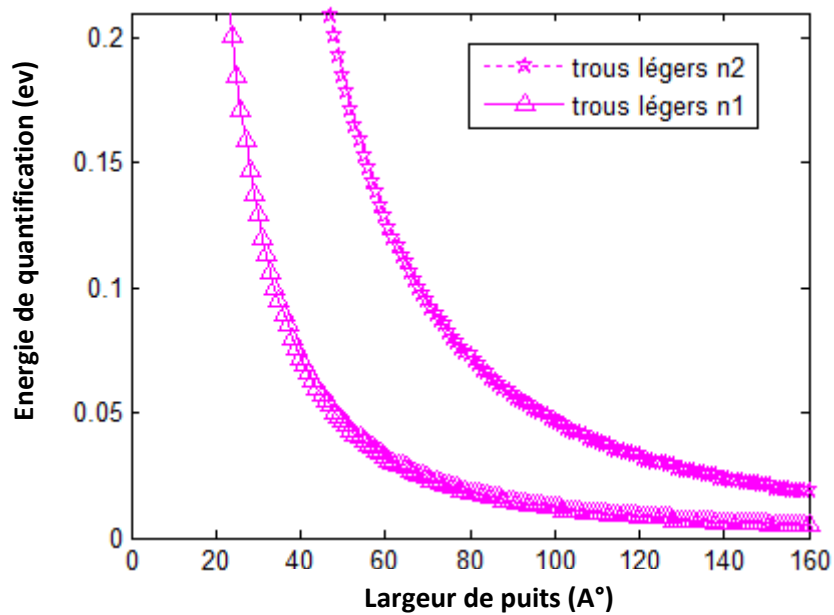


Figure 3. 9 Energie de quantification des des trous légers en fonction de la largeur du puits

D'après le calcul que l'on a effectué pour la structure $\text{InAs}_{0.42}\text{P}_{0.58}$ (non contraint) de largeur $L_p = 200\text{Å}$, on a trouvé 2 niveaux d'énergie de quantification des électrons, 4 niveaux d'énergie de quantification des trous lourds et 2 niveaux d'énergie de quantification des trous légers.

c Comparaison entre les deux structures

	Structure I Ga _x In _{1-x} As /InP						Structure II InAs _y P _{1-y} /InP					
X (%) Y(%)	47 (non contraint)						42 (non contraint)					
N	1			2			1			2		
L _p (A°)	40	60	80	40	60	80	40	60	80	40	60	80
E _e (ev)	0.058	0.033	0.021	0.22	0.13	0.084	0.018	0.028	0.005	0.07	0.032	0.018
E _{hh} (ev)	0.011	0.0051	0.003	0.041	0.019	0.011	0.0091	0.004	0.0031	0.036	0.016	0.009
E _{lh} (ev)	0.113	0.05	0.028	0.45	0.2	0.113	0.072	0.032	0.018	0.289	0.12	0.073
m _e (kg)	5.12*10 ⁻³²						3.04*10 ⁻³¹					
m _{hh} (kg)	4.73*10 ⁻³¹						6.05*10 ⁻³¹					
m _{lh} (kg)	6.12*10 ⁻³²						7.37*10 ⁻³²					

Tableau 3.1 Tableau comparatif de l'énergie de quantification pour les deux structures

On constate, d'après le tableau ci-dessus, que la structure I donne de plus grandes énergies de quantification en particulier pour les électrons. Ceci pourrait s'expliquer par les valeurs plus faibles de masses effectives pour la structure I.

3.4.2 Energies de transition (ou de recombinaison)

L'expression de l'énergie de recombinaison s'écrit comme suit :

- ✓ Pour les électrons-trous lourds :

$$E_{e_{nhh}h_1} = E_{nh} + E_{ne} + E_{gh}$$

- ✓ Pour les électrons-tous légers

$$E_{e_{nl}h_1} = E_{nl} + E_{ne} + E_{gl}$$

Avec :

E_{nh} , E_{nl} et E_{ne} : sont les énergies de confinement des trous lourds , des trous légers et des lélectrons respectivement.

E_{gh} et E_{gl} : Energies de la bande interdite des trous lourds et trous légers respectivement (elles se confondent dans le cas d'accord de maille).

a Structure InP/GaInAs/InP

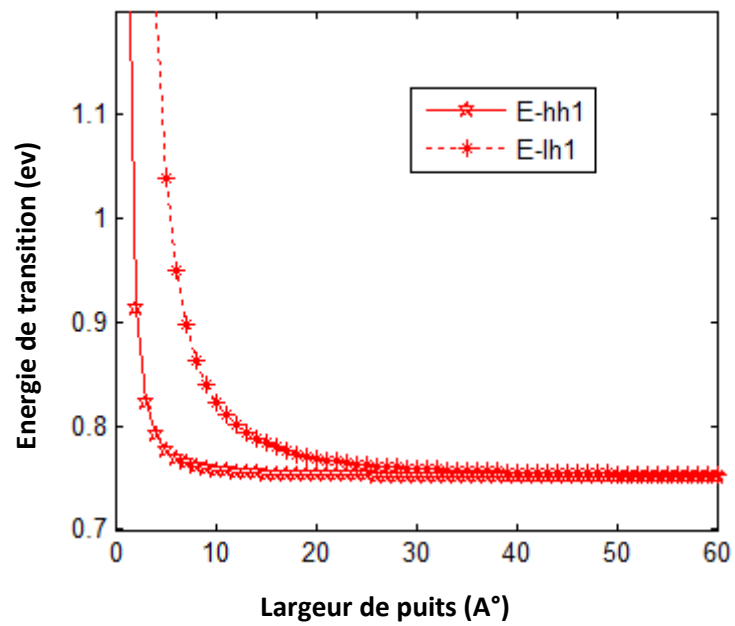


Figure 3.10 Energie de transition électrons tous lourds (E_{e1hh1}) et électron trous légers (E_{e1lh1}) en fonction de la largeur du puits

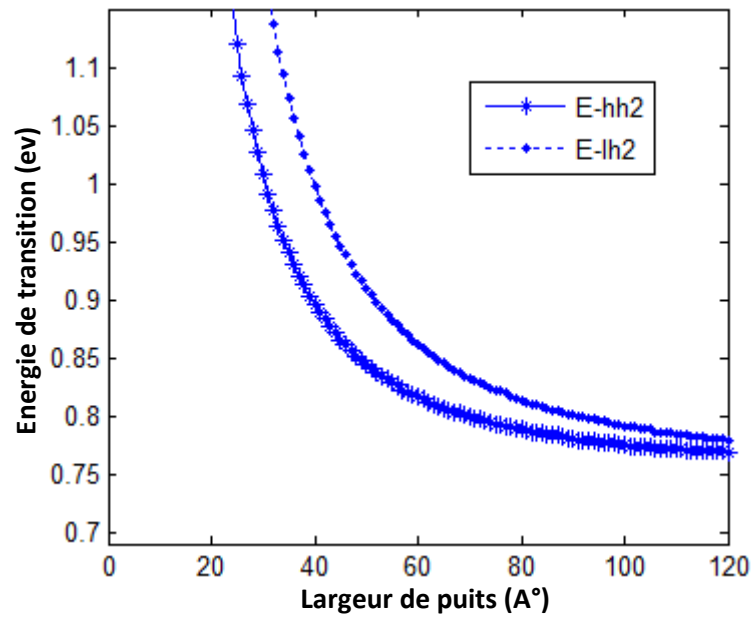


Figure 3. 11 Energie de transition électrons trous lourds(E_{e1hh2}) et électron trous légers (E_{e1lh2}) en fonction de la largeur du puits

La recombinaison se fait généralement entre le niveau 1 de la bande de conduction et le niveau 1 de la bande de valence. Dans notre cas elle correspond à celle des trous lourds.

D'après les figures (3.10) et (3.11) on constate que :

- ✓ Plus la largeur du puits augmente plus l'énergie de transition diminue.
- ✓ L'énergie de transition électrons-tous lourds est beaucoup plus faible que celle des transitions électrons-tous légers.
- ✓ Les énergies de transition tendent vers les valeurs de gap non contraint lorsque la largeur de puits augmente.

b Structure InP/InAsP /InP

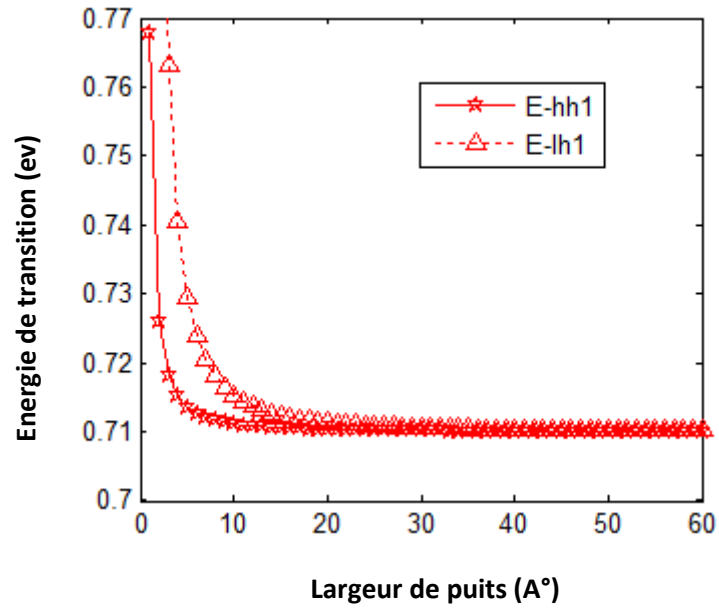


Figure 3.12 Energie de transition électrons trous lourds (E_{e1hh1}) et électrons trous légers (E_{e1lh1}) en fonction de la largeur du puits

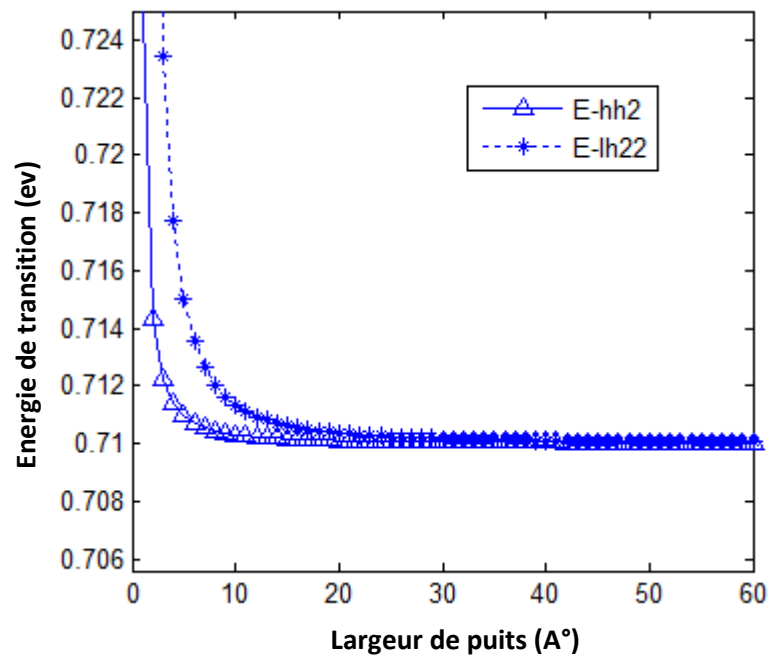


Figure 3. 13 Energie de transition électrons trous lourds (E_{e1hh2}) et électrons trous légers (E_{e1lh2}) en fonction de la largeur du puits

c Comparaison entre les deux structures

n	Structure I $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As} / \text{InP}$				Structure II $\text{InAs}_y\text{P}_{1-y} / \text{InP}$			
	1		2		1		2	
Lp (Å°)	30	50	30	50	30	50	30	50
ETre-hh (ev)	0.751	0.75	1.008	0.84	0.713	0.71	0.712	0.71
ETre-lh (ev)	0.759	0.754	1.19	0.90	0.7106	0.7103	0.715	0.71

3.4.3 Fonctions d'ondes

Dans cette partie, on va entamer la détermination des fonctions d'onde en utilisant les équations (2-12,2-15 et 2-16) et, en premier lieu, on étudiera les fonctions d'ondes sans couplage et ensuite avec couplage pour les deux cas : en absence et en présence du champ électrique externe. Les résultats obtenus sont figurés ci-dessous :

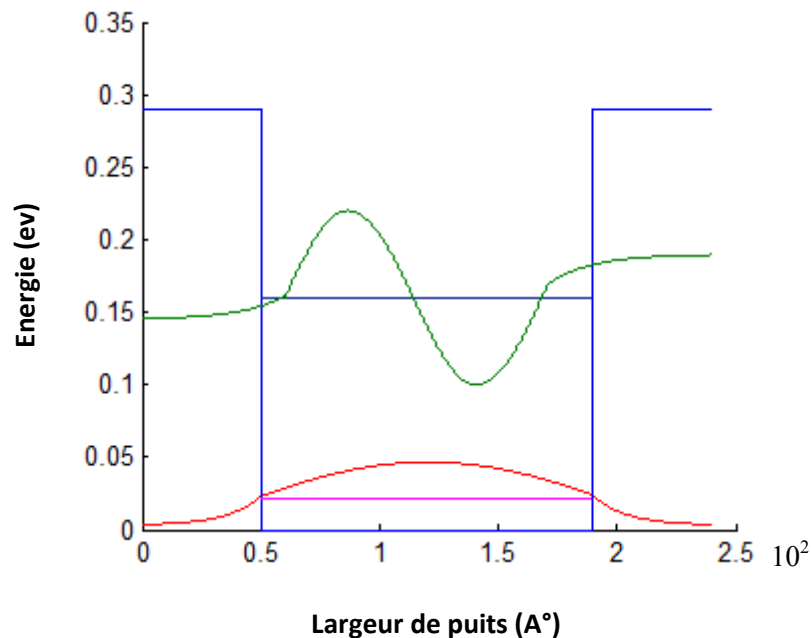


Figure 3. 14 Fonction d'ondes des 2 premiers niveaux d'énergie dans le puits I

La figure (3.14) représente les fonctions d'ondes des 2 premiers niveaux d'énergie pour le puits

➤ En absence du champ externe :

Les figures (3.15)et (3.16) représentent les fonction d'ondes en absence de couplage et ceci a été réalisé a partir des equations (2-25-a,b,c et 2-26-a,b,c).

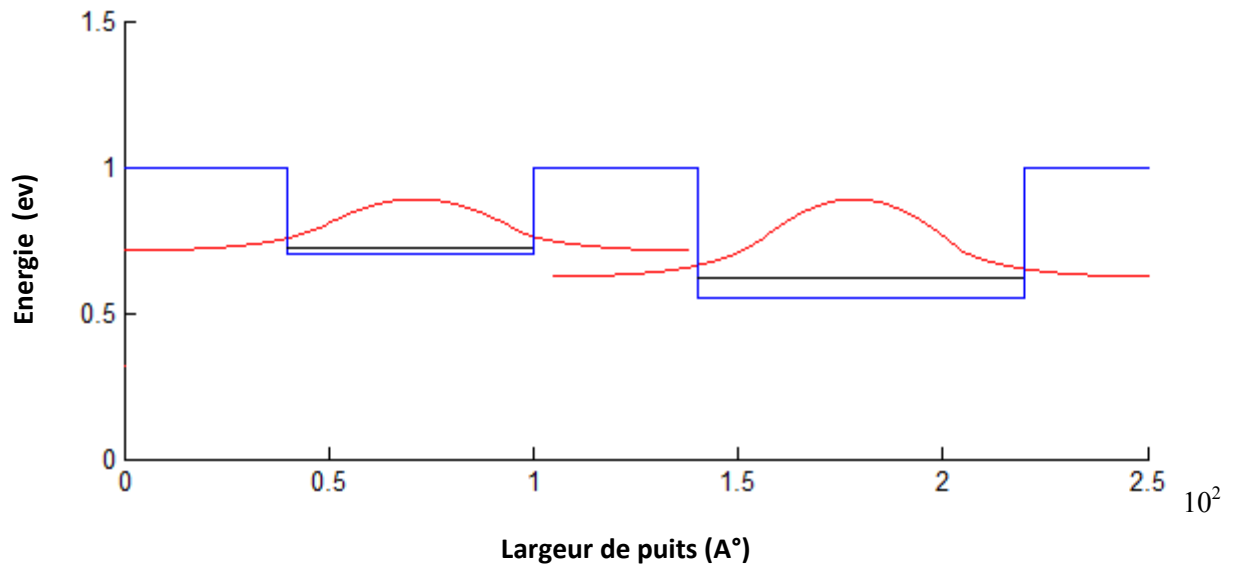


Figure 3. 15 Fonctions d'ondes du 1^{er} niveau d'énergies des deux puits

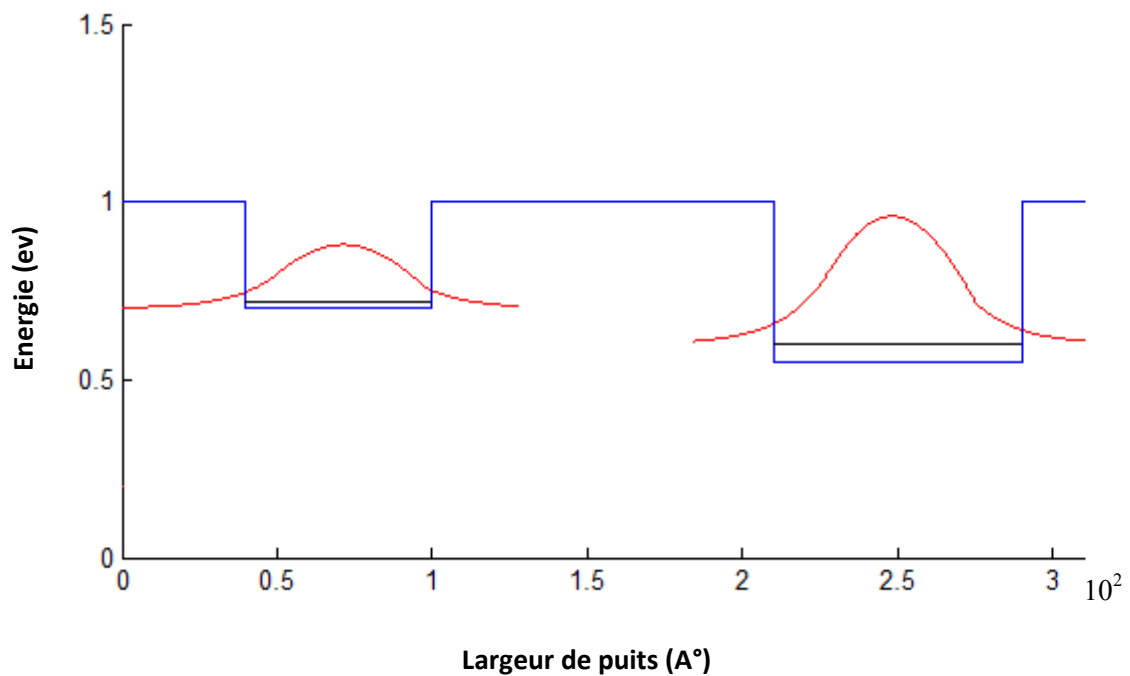


Figure 3. 16 Fonction d'ondes du 1er niveau d'énergies des deux puits

- On constate d'après les figures (3.15) et (3.16) que les fonctions d'ondes des deux puits sont découplées quand la largeur de barrière augmente. On remarque qu'à partir de $\Delta=100 \text{ \AA}$ environ, l'effet du couplage disparaît (pas de chevauchement).
- En présence du champ électrique externe :

Nous nous proposons de déterminer le champ électrique externe qui permet d'aligner les niveaux 1 de chaque puits afin d'avoir la résonance. On aura donc l'équation :

$$\Delta E = q * l * F \quad (3.4)$$

Avec : $l = \Delta + \frac{L_1}{2} + \frac{L_2}{2}$

$$\Delta E = E_1 - E_2$$

ΔE : la différence entre les deux premiers niveaux d'énergie dans chacun des deux puits.

E_1 : premier niveau d'énergies du 1^{er} puits

E_2 : premier niveau d'énergies du 2^{er} puits

q : charge d'électron

l : Distance moyenne entre les deux puits.

F : Champ électrique externe.

L_1 : largeur du 1^{er} puits.

L_2 : largeur du 2^{em} puits.

Nous avons choisi : $L_1=60 \text{ \AA}$, $L_2= 80 \text{ \AA}$ et $\Delta= 40 \text{ \AA}$ et on a trouvé le champ externe égal à **F=102 kV/cm**.

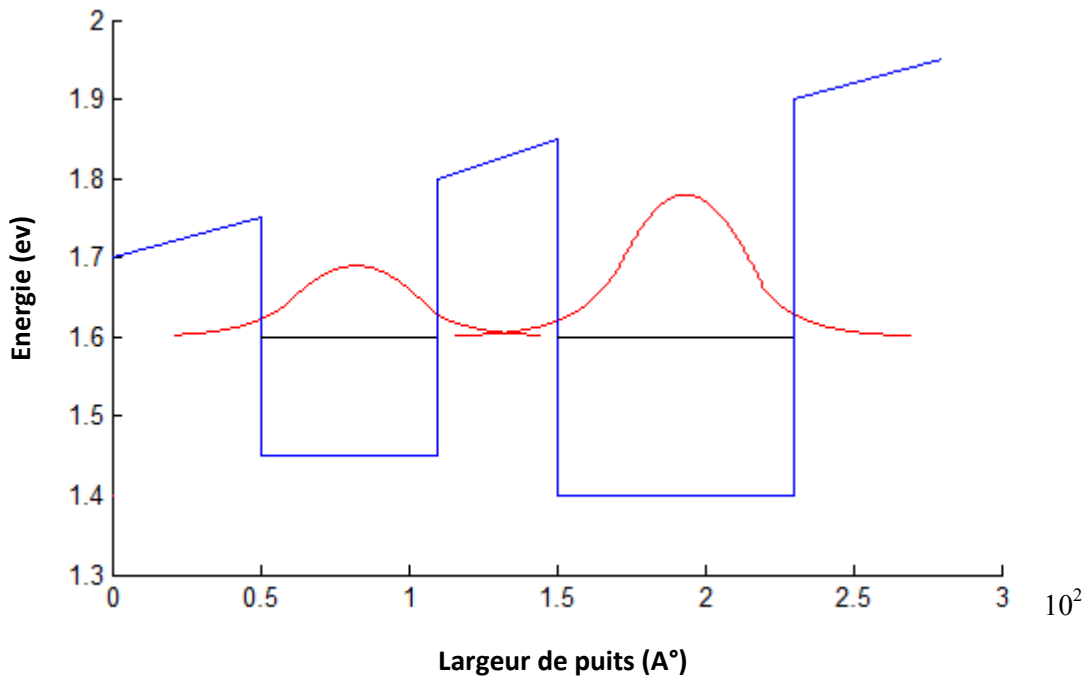


Figure 3. 17 Diagramme énergétique de la structure sous l'effet d'un champ externe

3.5 Conclusion

Dans ce chapitre nous avons abordé la partie simulation ou nous avons présenté le travail qu'on a réalisé et toutes les simulations qu'on a obtenues. On a commencé par simuler les énergies de quantification et de transition pour les deux structures et les interpréter, puis on a passé aux fonctions d'onde ou on a étudié le couplage en absence et en présence du champ électrique externe et le phénomène de résonance.

Conclusion générale

Dans ce modeste travail, nous nous sommes intéressées à l'étude des structures à double puits quantiques couplés qui peuvent constituer actuellement la partie active de divers composants électroniques et optoélectroniques (détecteurs optiques, transistors hyperfréquences,...).

Pour le cadre de notre étude, nous avons choisi en particulier les structures InP/GaInAs/ InP et InP/InAsP/InP non contraintes à cause de la relative maîtrise de leur technologie actuellement et l'abondance de la littérature les concernant.

Nous avons d'abord commencé par étudier séparément les deux structures où nous avons déterminé les énergies de quantification et de transition et leurs évolutions en fonction de l'épaisseur de chaque puits. Avant cela, il a fallu déterminer les paramètres de chaque structure (gaps d'énergie, masses effectives,...) et en particulier les décalages de bandes de conduction et de valence.

Nous nous sommes ensuite penchés sur l'aspect de la présence des porteurs de charge sur les niveaux d'énergie et cela à travers la détermination des fonctions d'ondes relatives à chaque niveau

L'étude de l'évolution des fonctions d'onde en fonction de la largeur de barrière de la structure à double puits a permis d'avoir une idée sur l'aspect de couplage entre les deux puits. Dans notre exemple, nous avons trouvé que le couplage devient pratiquement nul lorsque cette largeur dépasse 100 \AA . Cette valeur correspond bien aux valeurs moyennes utilisées en technologie.

Pour améliorer ce travail, nous proposons:

De calculer les valeurs précises des fonctions d'ondes dans le cas d'un couplage afin que les conclusions soient plus pertinentes.

D'utiliser la méthode de transfert afin de déterminer les coefficients de transmission aux interfaces pour en déduire le courant tunnel résonant lors de l'application d'un champ externe adéquat.

Bibliographie

- [1] C.Saliha ,B.Loubna : « Etude et simulation d'une structure à puits quantique à confinement séparé », mémoire fin d'étude, Université de Blida ,2001.
- [2] B. Terek : « Propriétés optique de puits quantique GaInAsN /GaAs » , Thèse doctorat,Université de Blaise Pascal, le 12 mai 2006.
- [3] M. Mansour, A.Samir :« Etude des structures à puits quantique de GaAs /GaAlAs placé dans un champ électrique», mémoire fin d'étude, Université de Blida ,2001.
- [4] M.Houssaine :«Transitions intersousbandes dans les puits quantiques GaN/AlN du proche infrarouge au THz », Thèse doctorat,Université de Paris sud, le 28 Mars 2011.
- [5] T. Nicolas : «Modélisation et simulation des composants optoélectroniques à puits quantiques », Thèse doctorat,de ROUEN U.F.R. des sciences et technologiques, le 18 novembre 2002.
- [6] G.Douadi : «Analyse des transistors à effet de champ MESFET GaAs », mémoire Magister, Université de Mentouriconstantine , 2009.
- [7] B.Hadda : « Modélisation et étude d'un puits quantique contraint à base de GaInAs/GaAs et calcul du courant de seuil », mémoire Magister, Université de Blida, juillet 2011.
- [8] V. N. Murzin, Yu. A. Mityagin, V. A. Chuenkov, and A. L. Karuzskii.«Resonant tunneling and intersubband population inversion effects in asymmetric wide quantum-well structures », Article, Moscow,Russia.
- [9] L. D. Macks, S. A. Brown, R. G. Clark, and R. P. Starrett.«Resonant tunneling in double-quantum-well triple-barrier heterostructures», Article, University of New South Wales, Sydney, Australia.

- [10] T.Y. Wang and G.B.stringfellow .J.App, vol, 67, No.I, 1January 1990, Article.
- [11] L.Ali : « Etude des propriétés optiques de puits quantiques contraints ultra-minces d'InAs/InP», Thèse doctorat, Université de Montréal, Juin 2006.
- [12] H .Mathieu :« Physique des Semiconducteurs et des Composants Electronique »,6^{eme} édition, pp (616-622) , Paris, 2009.
- [13] M. Benoît : « Conception, réalisation et caractérisation de diodes laser InGaAsN/GaAs à diaphragme d'oxyde pour les télécommunications optiques à 1,3 μ m », Thèse doctorat, université Paul Sabatier de Toulouse, le 13 décembre 2006.
- [14] B. Dorra : « Étude des rayures dans un double puits quantique en champ magnétique intense », Thèse doctorat, université Sherbrooke (Québec), Canada, mai 2002.
- [15] D.Mohamed Yacine : « Etude et simulation des structures des puits quantiques à base de GaInAsSb/GaInSb et GaInAsSb/GaInSb pour le photovoltaïque », mémoire de Master, Université de Blida, 2012.
- [16] B. Rachid : « Modélisation et simulation d'une structure à base de semi-conducteur III-V pour le photovoltaïque », mémoire Magister, université de Blida, Septembre 2011.
- [17] S. Amel : « Etude et modélisation des heterostructures à puits quantique contraint GaInAs/InP », mémoire Magister, Département de physique, Université de Blida, 2001.
- [18] B. Ilham : « Contribution à la modélisation d'une structure nanométrique : application aux transistors HEMTS et pseudomorphiques », mémoire Magister, Université de Mentouri Constantine, le 27 JUIN 2009.
- [19] B. B. Nadia : « Propriétés physiques des semi-conducteurs (Si monocristallin et Ge) et Simulation des cellules solaires à base de Si et SiGe », Thèse de Magister, Université de Abou Bekr Belkaid -Tlemcen, Juillet 2006.
- [20] L. R. Ram-Mohan, I. Vurgaftmana and J. R. Meyer: « Band parameters for III–V compound semiconductors and their alloys », Article, V 89 , N 11, 1 JUNE 2001.

