

الجمهورية الجزائرية الديمقراطية الشعبية
République Algérienne démocratique et populaire

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

جامعة سعد دحلب البليدة
Université SAAD DAHLAB de BLIDA

كلية التكنولوجيا
Faculté de Technologie

قسم الإلكترونيك
Département d'Électronique



Mémoire de Master

Mention Électronique

Spécialité Traitement de l'Information et Systèmes Électroniques

présenté par

Berkat Mohamed Wafed

Etude et simulation d'une structure à base de $\text{GaSb}_{1-x}\text{N}_x$ /GaSb pour la détection

Proposé par : Mr.Aissat Abdelkader

Année Universitaire 2015-2016

Remerciements

Tout d'abord, je tiens à remercier Dieu le tous puissant qui m'a donné la volonté, la force et la patience pour mettre une fin à ce projet de fin d'étude, je te remercié vraiment.

Je remercie très sincèrement Monsieur A. AISSAT professeur à l'université de Blida, il a été un guide précieux dans l'élaboration et l'avancement de ce mémoire.

J'exprime ma profonde gratitude à Monsieur BESTAM RACHID chef de centre du TDA de Ouled fayet pour son temps, son précieux aide.

Mes remerciements les plus vifs s'adressent aussi aux membres de jury d'avoir accepté d'examiner et d'évaluer ce travail.

Je remercie infiniment mes très chères parents que dieu les protège, ainsi que mon frère et ma sœur, un sponsor totale.

Je remercie aussi ma famille mes tants, mes oncle, et bien sur tous mes amis et mes collègues.

Pour finir je remercie très sincèrement toutes les personnes qui ont participé de près ou de loin à la réalisation de ce travail et pour toute l'aide qu'elles ont pu m'apporter.

ملخص :

في هذا العمل، صبينا اهتمامنا على دراسة و محاكاة لبنية أساسها GaSbN/GaSb. هذا الخليط الثلاثي الذي هو من أشباه النواقل III-V، يمثل خصائص جد مهمة و خاصة طاقة فجوته التي تتناقص بطريقة حادة و هذا بفعل إدخال النيتروجين على GaSb، و بذلك يتم التحسين في امتصاص الأطياف التي تملك طول موجات قريبة من الأحمر.

كلمات المفتاح : ، أنصاف النواقل، نتروجين، بئر كمومي، طول الموجة.

Résumé :

Dans ce travail, nous nous sommes intéressés à l'étude et la simulation d'une structure à base de GaSbN/GaSb. Cet alliage ternaire qui est un semi-conducteur III-V présente des caractéristiques importantes notamment son énergie de gap qui diminue d'une manière drastique du à l'incorporation d'Azote dans le GaSb, d'où l'amélioration de l'absorption des photons ayant des longueurs d'ondes proche du rouge.

Mots clés : Semi-conducteur, Azote, Puits quantique, Longueur d'onde.

Abstract :

In this work, we are interested about the study and the simulation of a structure based on GaSbN/GaSb. This ternary alloy which is an III-V semiconductor present an important characteristics especially its band-gap energy who decreases with a drastic manner due to the incorporation of nitrogen on GaSb, thus the enhancement of the absorption of photons with wavelengths near to red.

Keywords : Semiconductor, Nitrogen, Quantum well, wavelength.

Liste des acronymes et abréviations

a : Paramètre de maille

a_s : Paramètre de maille du substrat

a_e : Paramètre de maille de la couche active

BC : Bande de conduction

BV : Bande de valence

ϵ : Désaccord paramétrique

$\epsilon_{//}$: Déformation biaxiale

ϵ_{\perp} : Déformation uniaxiale

h_c : Epaisseur critique

C_{ij} : Tenseur d'élasticité

γ : Coefficient de poisson

E_g : Energie de gap

BAC : Modèle d'anticroisement de bandes.

E_c : L'énergie du bas de la bande de conduction

E_v : L'énergie du haut de la bande de valence

E_N : Energie de l'atome de l'Azote

V_{MN} : est le coefficient de couplage entre les deux types d'états

hh : Bande de trou lourd

lh : Bande de trou léger

So : Bande de spin orbite

E_g^{ncont} : Energie de gap non contraint

$E_{v,\text{moy}}$: Centre de gravité de la bande de valence

E_{lh} : Energie de la bande de trou léger

E_{hh} : Energie de la bande de trou lourd

Δ_0 : Energie de spin orbite

ac : Potentiel de déformation dans la bande de conduction

av : Potentiel de déformation dans la bande de valence

b : Potentiel de déformation tétragonale

$\Delta E_{v,\text{moy}}^{\text{hy}}$: Décalages en énergie des centres de gravité de la bande de valence

ΔE_c^{hy} : Décalages en énergie des centres de gravité de la bande de conduction

$\Delta E_{hh}^{\text{sh}}$: Décalage d'énergie de la bande de trou lourd

$\Delta E_{lh}^{\text{sh}}$: Décalage d'énergie de la bande de trou léger

$\Delta E_{so}^{\text{sh}}$: Décalage d'énergie de la bande spin orbite

δE^{sh} : Décalage énergétique induit par la contrainte de cisaillement

E_g^{cont} : Energie de gap contraint

PQ : Puits quantique

L_p : Largeur de puits

ΔE_c : L'énergie du barrière de la bande de conduction

ΔE_v : L'énergie du barrière de la bande de valence

Q_c : Taux de confinement dans la bande de conduction

Q_v : Taux de confinement dans la bande de valence

h : Constante de Planck.

m* : La masse effective.

φ : La fonction d'onde.

V(x) : Fonction décrivant le potentiel pour chaque valeur de x.

E_n : L'énergie de quantification

E_{tr} : Energie de transition

λ : Longueur d'onde

N: Azote

Sb: Antimoine

Ga: Gallium

E : Energie de photon

α : Coefficient d'absorption

n: Indice de réfraction

R: Coefficient de réflexion

Table des matières

Introduction générale.....	1
Chapitre 1 : Généralités	
1.1 Introduction.....	3
1.2 Généralités sur les semi-conducteurs.....	3
1.3 Semi-conducteurs III-V.....	4
1.3.1 Définition.....	4
1.3.2 Structure cristalline.....	5
1.3.3 Structure de bandes.....	6
1.4 Hétérostructure.....	6
1.4.1 Epitaxie par jets moléculaires.....	6
1.4.2 Puits quantique.....	7
a Définition.....	7
1.5 L'étude théorique du matériau.....	8
1.5.1 Paramètre de maille.....	9
1.5.2 La contrainte.....	9
1.5.3 Epaisseur critique.....	10
1.5.4 L'énergie de la bande interdite.....	11
a Modèle proposé.....	11
b L'effet de la contrainte sur le gap.....	13
1.5.5 L'énergie des deux barrières.....	16
1.5.6 Taux de confinement.....	16
1.5.7 Quantification des niveaux.....	16
1.5.8 Puits quantique de profondeur finie.....	17
1.5.9 Energie de transition.....	19

1.5.10	Longueur d'onde.....	19
1.5.11	Propriétés optiques.....	20
a	Coefficient d'absorption.....	20
b	Indice de réfraction.....	21
c	Coefficient de réflexion.....	21
1.6	Conclusion.....	22
Chapitre 2 : Résultats & discussions		
2.1	Introduction.....	23
2.2	L'étude des paramètres électroniques.....	23
2.2.1	Calcul du paramètre de maille.....	23
2.2.2	Calcul de la contrainte.....	24
2.2.3	Calcul de l'épaisseur critique.....	25
2.2.4	Détermination de la bande interdite.....	26
a	Effet de l'Azote sur la bande de conduction.....	26
b	Le gap non contraint avec éclatement.....	26
c	Le gap contraint avec éclatement.....	27
2.3	Quantification, énergie de transition et longueur d'onde.....	28
2.3.1	L'énergie des deux barrières.....	28
2.3.2	Taux de confinement.....	28
2.3.3	Quantification d'électrons, trous lourds et trous légers.....	29
2.3.4	Energie de transition.....	31
2.3.5	Longueur d'onde.....	33
2.3.6	Longueur d'onde détectant à 0.98 & 1.3 μ m.....	35
2.4	Détermination de coefficient d'absorption, indice de réfraction & coefficient de réflexion.....	35
2.5	Conclusion.....	38
Conclusion générale.....		
		39

Liste des figures

Figure 1.1 Structure Diamant et Zinc-Blende.....	5
Figure 1.2 Structure de bandes directe et indirecte d'un semi-conducteur.....	6
Figure 1.3 Schéma d'un puits quantique simple.....	7
Figure 1.4 Puits quantique types 1 & 2.....	8
Figure 1.5 Les deux types de déformation.....	10
Figure 1.6 Couche relaxée.....	11
Figure 1.7 L'éclatement de la bande de conduction en deux sous bandes.....	12
Figure 1.8 Structure de bande d'un semi-conducteur à gap directe.....	13
Figure 1.9 Propriétés optiques.....	20
Figure 2.1 Variation du paramètre de maille du GaSbN en fonction de la concentration d'Azote.....	24
Figure 2.2 Variation du désaccord paramétrique en fonction de la concentration d'Azote.....	25
Figure 2.3 Variation de l'épaisseur critique en fonction de la concentration d'Azote.....	25
Figure 2.4 Eclatement de la bande de conduction en deux sous bandes selon le modèle BAC.....	26
Figure 2.5 L'évolution du gap non contraint avec éclatement du GaSbN en fonction de la concentration d'Azote.....	27
Figure 2.6 L'effet de la contrainte sur le gap.....	27
Figure 2.7 L'énergie des dexu barrières.....	28

Figure 2.8 Taux de confinement.....	29
Figure 2.9 Niveau d'énergie d'électrons dans la bande de conduction.....	29
Figure 2.10 Niveau d'énergie des trous lourds.....	30
Figure 2.11 Niveau d'énergie des trous légers.....	31
Figure 2.12 Energie de transition trou lourd vers bande de conduction.....	32
Figure 2.13 Energie de transition trou léger vers bande de conduction.....	33
Figure 2.14 L'évolution de la longueur d'onde du transition trou léger vers bande de conduction en fonction de la largeur du puits.....	33
Figure 2.15 L'évolution de la longueur d'onde du transition trou lourd vers bande de conduction en fonction de la largeur du puits.....	34
Figure 2.16 Longueur d'onde λ_{e-hh} détectant à 0.98 et 1.3 μ m.....	35
Figure 2.17 L'évolution du coefficient d'absorption en fonction de la longueur d'onde et la concentration d'Azote.....	36
Figure 2.18 Variation de l'indice de réfraction en fonction de la longueur d'onde.....	36
Figure 2.19 Variation de l'indice de réfraction en fonction de la longueur d'onde.....	37

Liste des tableaux

Tableau 1.1 Exemples de semi-conducteurs.....4

Tableau 1.2 Extrait de la classification périodique des éléments.....5

Introduction générale

Depuis le début du vingtième siècle, les moyens de télécommunications n'ont cessé de se diversifier et se développent constamment (Les composantes électroniques, les technologies et les applications). L'être humain cherche toujours à avoir un bon compromis dont le cout, la durabilité et qui respecte l'environnement.

En 1905 Einstein à montré que la lumière se propage sous forme d'un quantum d'énergie, ce quantum contient des particules a de l'énergie, elles s'appellent photons [1]. La photodétection repose sur l'absorption de l'énergie que possède le photon, ce phénomène est réalisé par un photodétecteur [1]. Le photodétecteur est un composant à base de semi-conducteur, il fait la transformation d'une puissance lumineuse en courant électrique [1].

La récente innovation d'Hétérostructure, en faisant croître une couche d'un matériau semi-conducteur A entre deux couches d'un matériau semi-conducteur B, conduit à créer de nouveaux matériaux semi-conducteurs dont les caractéristiques sont remarquables (Gap d'énergie, longueur d'onde, absorption, ...etc), on citera par exemple quelques composés binaires et ternaires : GaAs, InP, GaSb, GaAsN, GaSbN, ...etc. Les propriétés de ces matériaux sont très intéressantes pour les performances de ces dispositifs.

Dans ce contexte, mon travail consiste sur l'étude et la simulation d'une structure à base du nouveau matériau GaSbN pour la détection.

Ce travail de projet fin d'étude est présenté suivant deux chapitres et il est organisé comme suit :

- Dans le premier chapitre je vais présenter des notions fondamentales sur les matériaux semi-conducteurs et précisément les semi-conducteurs III-V, puis je passe à l'étude du nouveau matériau GaSbN (paramètres électroniques, propriétés optiques, ...etc.).
- Le deuxième chapitre est consacré à la représentation des résultats obtenus sur la structure proposée.

Objectif : Ce travail consiste à faire une étude sur une structure à base d'un nouveau matériau GaSbN pour avoir un photodétecteur qui fonctionne à la longueur d'onde de l'ordre de 0.98 - 1.3 μm .

Chapitre 1 Généralités

1.1 Introduction

Le photodétecteur est un composant qui absorbe l'énergie optique et la transforme en énergie électrique [1]. Il est réalisé à base de semi-conducteur, donc on est concerné de bien choisir les matériaux semi-conducteurs à fin d'obtenir un bon photodétecteur. Je vais aborder dans ce chapitre l'étude d'un nouveau matériau semi-conducteur (paramètres électriques, propriétés optiques, ...etc) dans le but de l'utiliser dans un photodétecteur. C'est un alliage ternaire formé du Gallium, Antimoine et l'Azote. Je vais donc d'abord focaliser sur les principales caractéristiques des semi-conducteurs et précisément les semi-conducteurs III-V ; par la suite on passe à l'étude théorique de ce nouveau matériau.

1.2 Généralités sur les semi-conducteurs

On appelle semi-conducteur un matériau électriquement intermédiaire entre isolant et conducteur, dont la résistivité varie de 10^{-3} à $10^4 \Omega\text{cm}$ (ou plus).

Dans les semi-conducteurs, le gap assez faible permet à des porteurs de passer dans la bande de conduction simplement grâce à leur énergie d'agitation thermique, ainsi le semi-conducteur "intrinsèque" en tant que mauvais conducteur ou mauvais isolant a une conductivité qui augmente avec la température [2].

Un semi-conducteur peut être soit intrinsèque (pur), comme le Silicium et le Germanium, soit extrinsèque (dopé) contrôlé en résistivité par l'ajout des impuretés [3].

Parmi les semi-conducteurs connus, le Silicium est le plus utilisé à cause de sa grande disponibilité, faible coût et bonne conductivité thermique, pour la réalisation

des circuits intégrés, cellules solaires. Malheureusement malgré tous ces avantages le Silicium n'est pas idéal, à cause de son gap indirect, mobilités des porteurs relativement petites [4].

Le **tableau (1.1)** donne des exemples de matériaux ou de composés semi-conducteurs en fonction des éléments qui les constituent et de la position de ces éléments dans le tableau de Mendelév.

Colonne		Semi-conducteur
IV		Ge, Si
III-V	binaire	GaAs, GaP, GaSb, InAs, Inp, InSb
	ternaire	$Al_xGa_{1-x}As, GaAs_yP_{1-y}$
	quaternaire	$Al_xGa_{1-x}As_yP_{1-y}$
II-VI	binaire	CdS, HgTe, CdTe, ZnTe, ZnS
	ternaire	$Cd_xHg_{1-x}Te$

Tableau 1.1 Exemples de semi-conducteurs [3]

1.3 Semi-conducteurs III-V

1.3.1 Définition

On appelle un semi-conducteur III-V, un matériau semi-conducteur composé d'un élément de la colonne III, et d'un autre élément de la colonne V du tableau périodique de Mendeleïev, voir **tableau (1.2)**. Ces Matériaux ont des propriétés remarquables (gap direct, forte mobilité de porteur, ...etc).

II	III	IV	V	VI
	10.811^5B	12.011^6C	14.007^7N	
	$26.982^{13}Al$	$28.086^{14}Si$	$30.974^{15}P$	$32.065^{16}S$
$65.39^{30}Zn$	$69.723^{31}Ga$	$72.64^{32}Ge$	$74.922^{33}As$	$78.96^{34}Se$
$112.41^{48}Cd$	$114.82^{49}In$	$118.71^{50}Sn$	$121.76^{51}Sb$	$127.60^{52}Te$

Tableau 1.2 Extrait de la classification périodique des éléments [5]

1.3.2 Structure cristalline

La plupart des semi-conducteurs III-V cristallisent dans la structure zinc-blende, voir **figure (1.1)**, elle ressemble à celle du diamant. Elle peut être représentée par deux sous-réseaux cubiques à faces centrées (cfc) interpénétrés et décalés d'une distance équivalente à un quart de la diagonale de la maille élémentaire, d'une quantité ($a/4$, $a/4$, $a/4$) [6].

« a » est le paramètre de maille (paramètre cristallin), il indique la distance entre les atomes dans un cristal.

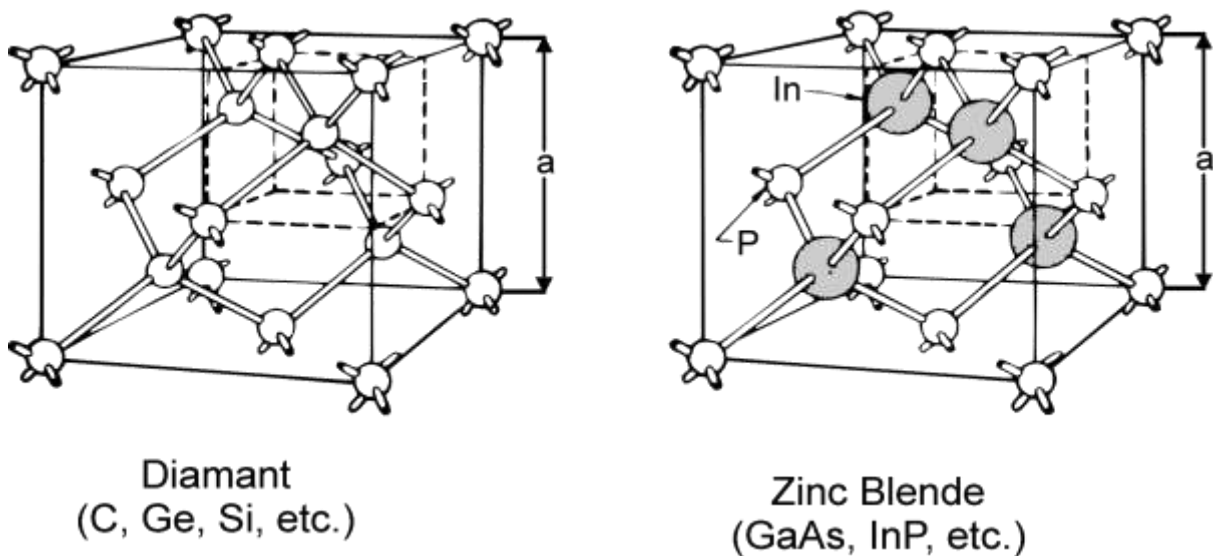


Figure 1.1 Structure Diamant et Zinc-Blende [7]

1.3.3 Structure de bande

Tous les composés III-V considérés ont la même allure générale de bande. Leur structure de bande est directe, c'est-à-dire que le minimum de la bande de conduction et le maximum de la bande de valence correspondent à la même valeur du vecteur d'onde K dans la structure de bandes [6], voir **figure (1.2)**. Cette intéressante caractéristique est nécessaire dans l'optoélectronique, pour que les transitions optiques soient efficaces.

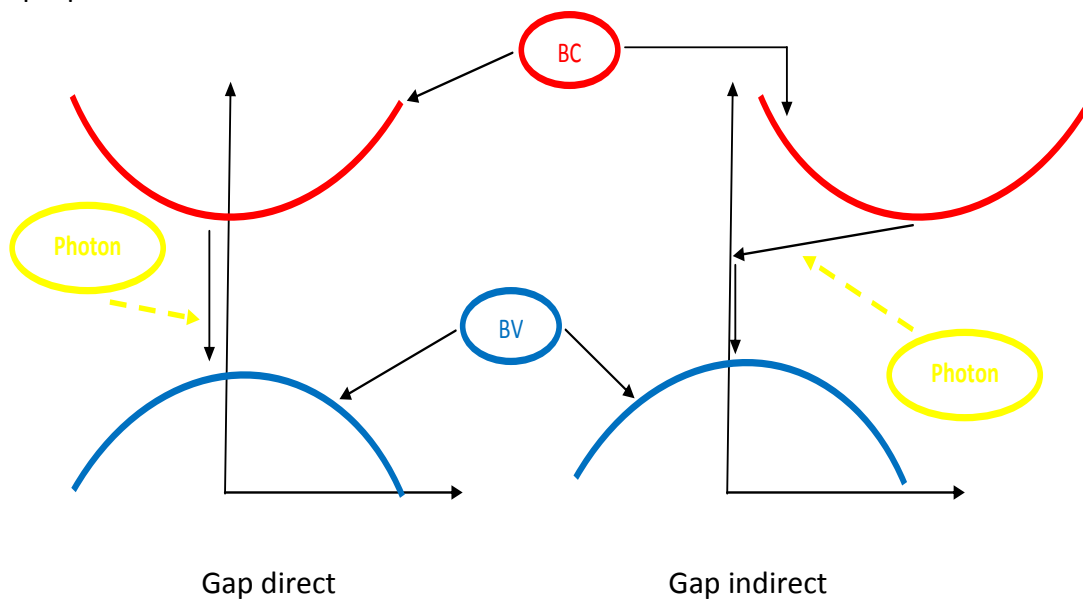


Figure 1.2 Structure de bandes directe et indirecte d'un semi-conducteur

1.4 Hétérostructure

1.4.1 Epitaxie par jets moléculaires

L'épitaxie est une technique de croissance orientée, de deux cristaux possédant la même structure cristalline (en général diamant ou zinc-blende), et des paramètres de mailles voisins [8].

Elle est utilisée pour avoir des couches minces (nanomètre d'épaisseur). Pour cela on dépose les atomes sur une surface polie d'un monocristal (substrat), cette dernière est choisie de façon à avoir des paramètres de mailles voisins de ceux du cristal qui souhaite être obtenu [8]. Ainsi on parle de croissance cohérente pour une épaisseur de couche inférieure à l'épaisseur critique [8].

Si l'épaisseur épitaxiée dépasse l'épaisseur critique, on aura un phénomène de relaxation [8].

1.4.2 Puits quantique

a Définition

On obtient un puits quantique en faisant croître une couche d'un matériau A entre deux couches d'un matériau B, la bande d'énergie du matériau A est inférieure à celle du matériau B, voir **figure (1.3)** [9]. La barrière de potentiel provoquée par la discontinuité entre les bandes d'énergie dans les deux matériaux confine les électrons et les trous dans le puits [9].

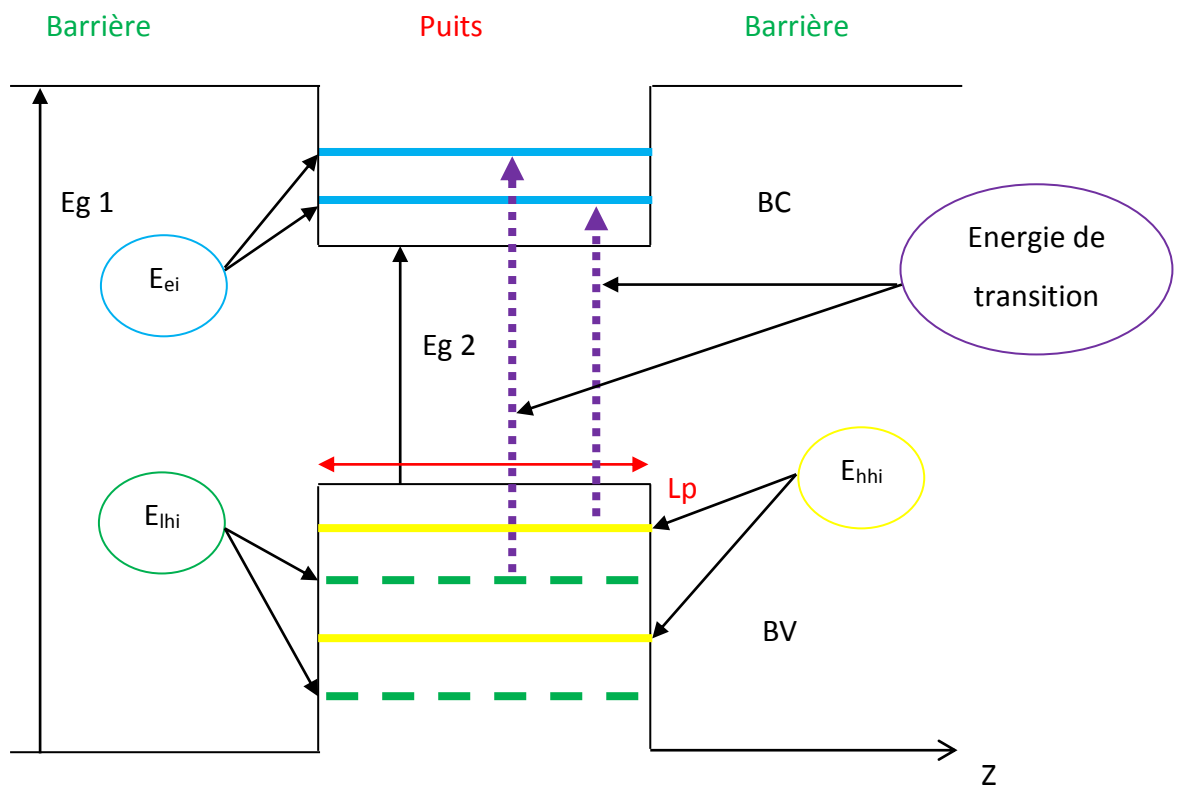


Figure 1.3 schéma d'un puits quantique simple

A partir de la discontinuité des bandes à l'interface puits-barrière, on a deux types essentiels de puits quantiques, voir **figure (1.4)** [9]:

- Puits quantique type 1 : Les électrons et les trous seront confinés dans le même matériau B. La probabilité de recombinaison sera donc élevée ($\Delta E_c > 0$ et $\Delta E_v < 0$).
- Puits quantique type 2 : Les électrons et les trous seront spatialement séparés dans les deux matériaux ($\Delta E_c > 0$ et $\Delta E_v > 0$).

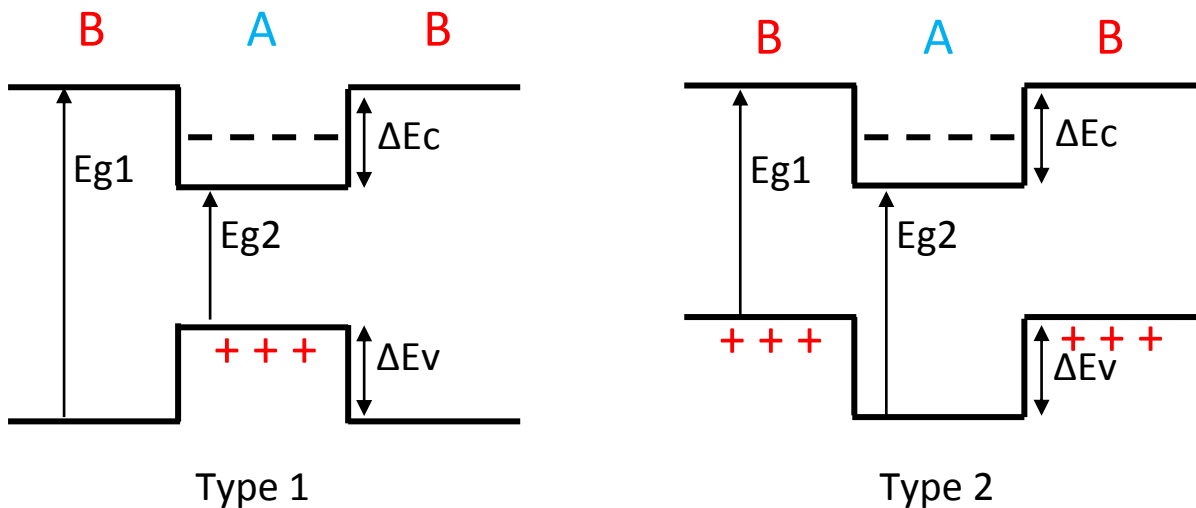


Figure 1.4 Puits quantiques types 1 et 2

1.5 L'étude théorique du matériau

L'étude d'un matériau focalise sur la détermination de ses paramètres électriques électroniques et optiques.

La loi de Vegard est considérée comme une essentielle loi pour déterminer les propriétés d'un matériau composé (gap d'énergie, paramètre de maille, constantes élastiques, ...etc) [10], elle est donnée sous la forme suivante [10]:

$$P_x = x \cdot p_{GaN} + (1-x) \cdot p_{GaSb} \quad (1.1)$$

Où $p(x)$ est le paramètre à calculer.

1.5.1 Paramètre de maille

Le paramètre de maille est une information qui indique la distance entre deux atomes dans un cristal.

Lors de la croissance du matériau GaSbN par jets moléculaires des atomes d'Azote [8], ce dernier provoque un changement de paramètre de maille, ce changement se traduit par une diminution ou une augmentation du paramètre de maille.

Le paramètre de maille de mon alliage ternaire est déterminé selon l'équation de Vegard comme suit [10]:

$$a_{GaSbN} = x \cdot a_{GaN} + (1-x) \cdot a_{GaSb} \quad (1.2)$$

Où « a » est le paramètre de maille des matériaux.

Les paramètres de maille des principaux semi-conducteurs sont donnés dans l'annexe.

1.5.2 La contrainte

Lorsqu'on met une couche épitaxiée sur un substrat, on provoque une déformation due à la différence des paramètres de maille, on appelle cette déformation une contrainte [10].

Cette contrainte (désaccord de maille <2%) peut être soit en tension ($a_s > a_e$), ou en compression ($a_s < a_e$) par des déformations biaxiales et uniaxiale, voir **figure (1.5)** [10].

Les deux déformations sont exprimées suivant les relations suivantes [10]:

- Dans le plan de la couche :

$$\varepsilon_{//} = \varepsilon_{xx}(x) = \varepsilon_{yy}(x) = \frac{a_s - a_e(x)}{a_e(x)} \quad (1.3)$$

- Dans la direction de croissance :

$$\varepsilon_{\perp} = \varepsilon_{zz}(x) = -2 \times \frac{C_{12}(x)}{C_{11}(x)} \times \varepsilon_{xx}(x) \quad (1.4)$$

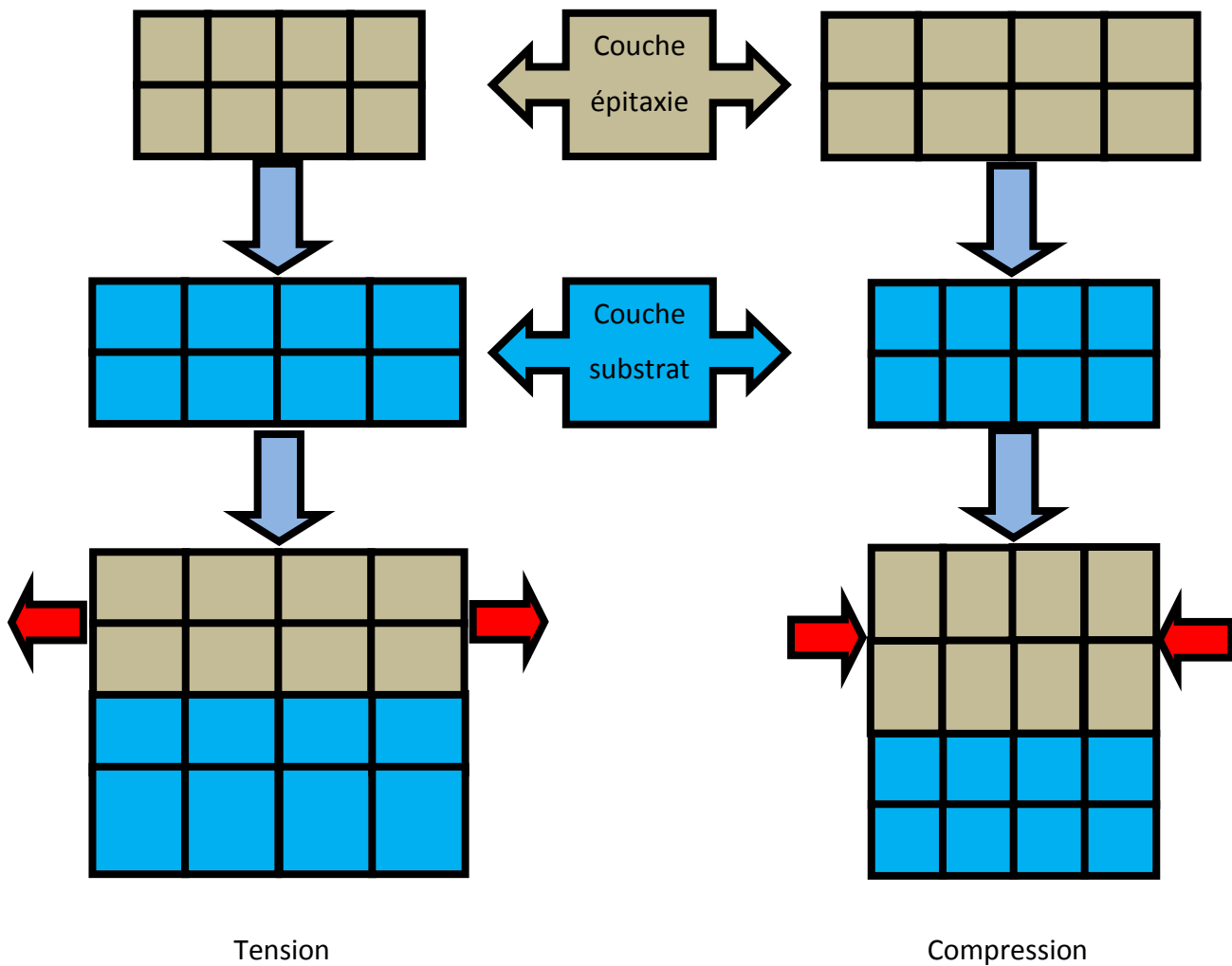


Figure 1.5 Les deux types de déformation

1.5.3 Epaisseur critique

Ce paramètre donne la possibilité de connaître l'épaisseur seuil d'épitaxie qu'il ne faut pas dépasser, si cette épaisseur n'est pas respectée, on aura des dislocations entre le substrat et la couche épitaxiée, voir **figure (1.6)** [10].

A fin de calculer ce paramètre, j'ai utilisé le modèle le plus classique, celui de K. Koksal et B. Gonul, qui traite le cas d'un matériau faiblement désaccordé par rapport au substrat (désaccord de maille <2%), il est donné par l'équation suivante [10] :

$$h_c = \frac{a_e}{\beta\sqrt{2}\pi\varepsilon} * \frac{1-0.25\gamma}{1+\gamma} * \ln\left(\frac{h_c\sqrt{2}}{a_e} + 1\right) \quad (1.5)$$

Où :

ε : est le désaccord paramétrique.

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

C_{11} et C_{12} sont les constantes élastiques obtenues par l'interpolation linéaire des binaires GaN et GaSb.

β : est un coefficient qui prend les valeurs suivantes selon le type de la structure (4 : couche unique ; 2 : puits quantique ; 1 : super réseau).

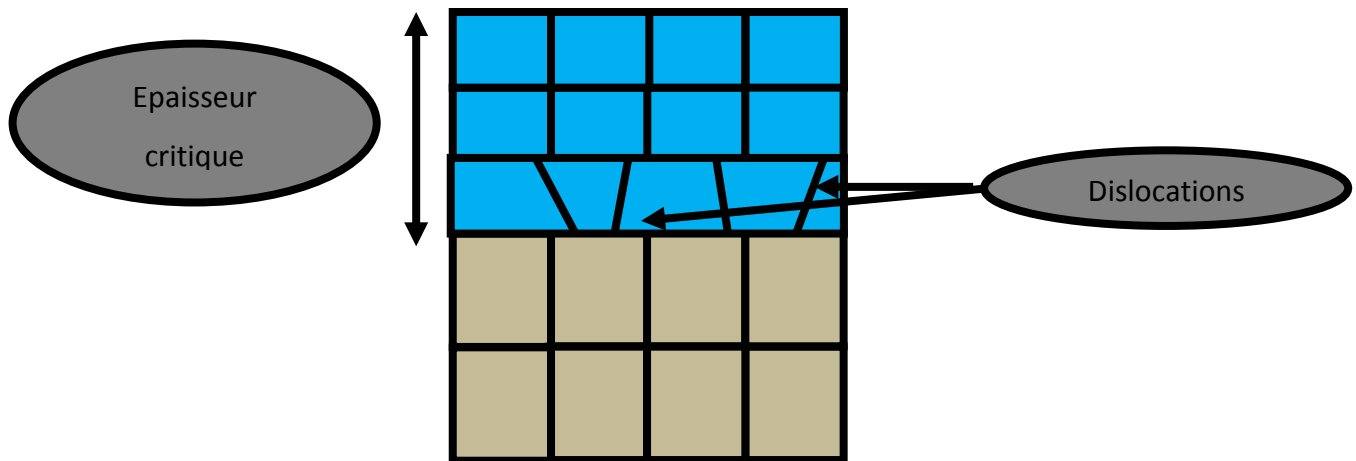


Figure 1.6 Couche relaxée

1.5.4 L'énergie de la bande interdite

a Modèle proposé

Pour déterminer la bande interdite de mon matériau j'ai utilisé le modèle d'anticroisement de bande (BAC), il décrit de manière quantitative la diminution de l'énergie de la bande interdite avec l'incorporation de l'Azote dans le ternaire GaSbN [11]. Il montre que l'Azote a pour effet d'éclater la bande de conduction en deux sous bandes, et que plus la concentration d'Azote augmente, les deux sous bandes s'éloignent l'une de l'autre [11].

Le jet de l'Azote dans le GaSb provoque un éclatement de la bande de conduction, cette dernière se divise en deux sous bandes (E_c^+ et E_c^-) voir **figure (1.7)**, l'éclatement est donné selon la formule suivante [12] :

$$E_{C\pm} = \frac{1}{2} \left| E_N + E_C(\text{GaSb}) \pm \sqrt{(E_N - E_C(\text{GaSb}))^2 + 4V_{MN}^2} \right| \quad (1.6)$$

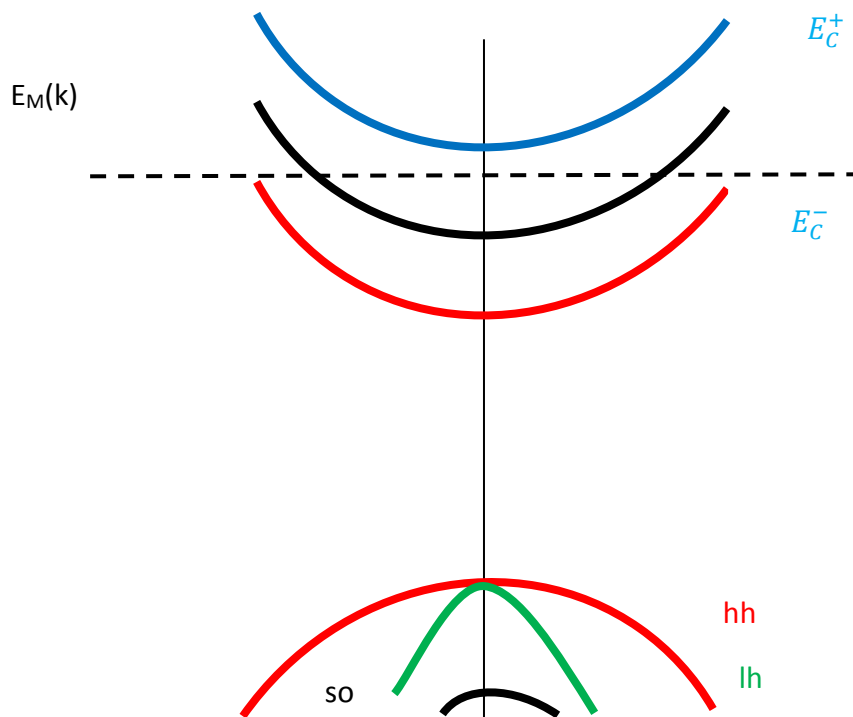


Figure 1.7 L'éclatement de la bande de conduction en deux sous bandes

Avec :

$E_N=1.65$ eV est l'énergie de l'atome d'Azote et $V_{MN}=2.7 \times \sqrt{x}$ est le coefficient de couplage entre les deux types d'états, x est la concentration d'Azote

$$Eg_{GaSbN}^{ncont} = E_c^- - Ev_{GaSb} \quad (1.7)$$

Ou Eg_{GaSbN}^{ncont} est le gap d'énergie non contraint avec éclatement.

b L'effet de la contrainte sur le gap

Pour montrer l'effet de la contrainte sur la bande interdite j'ai utilisé le modèle de Van et Walle et utilisé le formalisme de Krijin [10].

L'effet d'une contrainte sur une bande interdite d'un matériau semi-conducteur est d'éclater la bande valence en deux sous bandes (bande des trous légers et bande des trous lourds), si on a une contrainte compressive, la bande des trous lourds sera au dessus de la bande des trous légers, si non (contrainte extensive), on donc l'inverse, voir **figure (1.8)** [10].

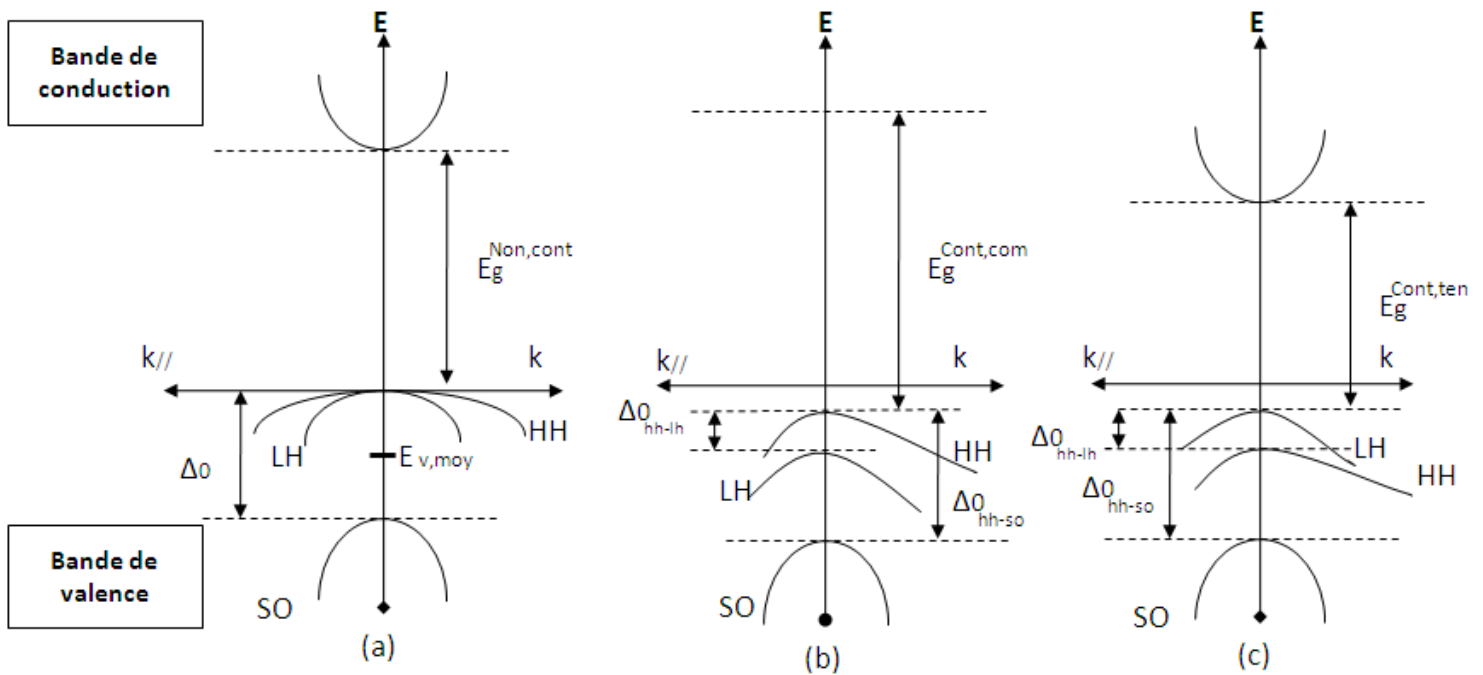


Figure 1.8 Structure de bande d'un semi-conducteur à gap directe [10]

a. Non contraint **b.** Contraint en compression **c.** Contraint en tension

Lorsqu'on n'a pas de contrainte, les bandes de trous lourds et de trous légers sont isotropes et dégénérées au centre de la zone de Brillouin, et le centre de gravité de la bande de valence d'énergie moyenne $E_{v, moy}$ est à $\frac{\Delta_0}{3}$ au dessous du haut de la bande de valence en $k=0$ [10].

$$E_{V,moy} = \frac{E_{HH} + E_{LH} + \Delta_0}{3} \quad (I.8)$$

E_{HH} : Energie de la bande de trous lourds.

E_{LH} : Energie de la bande de trous légers.

Δ_0 : Energie de décalage des bandes des trous spin-splittée.

On peut décrire autre fois l'effet de la contrainte sur les bandes de valence et de conduction par décomposition en deux parties [12]:

- La composante hydrostatique, liée à la déformation selon l'axe de croissance, elle décale le centre de gravité bandes (conduction et valence).
- La contrainte de cisaillement, qui lève la dégénérescence des états énergétiques des trous lourds et des trous légers en $k = 0$ (typiquement d'une valeur Δ_{hh-lh} de l'ordre de 60-80 meV pour un désaccord paramétrique de 1%)

Les décalages énergétiques des centres de gravité de la bande de valence et de la bande de conduction en $K=0$ induits par la contrainte hydrostatique, sont donnés selon les équations suivantes [12] :

$$\Delta E_{v,moy}^{hy} = a_v(2\varepsilon_{//} + \varepsilon_{\perp}) \quad (I.9)$$

$$\Delta E_C^{hy} = a_c(2\varepsilon_{//} + \varepsilon_{\perp}) \quad (I.10)$$

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

On donne les décalages énergétiques induits par la contrainte de cisaillement dans chacune des bandes constituant la bande de valence selon les formules suivantes [12] :

$$\Delta E_{hh}^{sh} = -\frac{1}{2}\delta E^{sh} \quad (I.11)$$

$$\Delta E_{lh}^{sh} = -\frac{1}{2}\Delta_0 + \frac{1}{4}\delta E^{sh} + \frac{1}{2}\left[\Delta_0^2 + \Delta_0\delta E^{sh} + \frac{9}{4}(\delta E^{sh})^2\right]^{1/2} \quad (I.12)$$

$$\Delta E_{so}^{sh} = -\frac{1}{2}\Delta_0 + \frac{1}{4}\delta E^{sh} - \frac{1}{2}\left[\Delta_0^2 + \Delta_0\delta E^{sh} + \frac{9}{4}(\delta E^{sh})^2\right]^{1/2} \quad (I.13)$$

Avec :

$$\delta E^{sh} = 2 * b * (\varepsilon_{\perp} - \varepsilon_{//}) \quad (I.14)$$

Où b est le potentiel de déformation tétragonale.

A partir des équations (1.7), (1.9), (1.10), (1.11), (1.12), on peut déterminer le gap contraint [10] :

$$E_g^{cont} = E_g^{ncont(GaSbN)} + \Delta E_c^{hy} - \Delta E_{v,moy}^{hy} - \max(\Delta E_{hh}^{sh}, \Delta E_{lh}^{sh}) \quad (I.15)$$

Lorsqu'on a une contrainte compressive la bande des trous lourds est au-dessus de la bande des trous légers, voir **figure (I.8.b)** et l'on a :

$$\max(\Delta E_{hh}^{cisa}, \Delta E_{lh}^{cisa}) = \Delta E_{hh}^{sh}$$

Lorsqu'on a une contrainte extensive la bande des trous lourds est au-dessous de la bande des trous légers, voir **figure (I.8.c)** et l'on a :

$$\max(\Delta E_{hh}^{cisa}, \Delta E_{lh}^{cisa}) = \Delta E_{lh}^{sh}$$

On aura donc pour une couche en compression :

$$E_g^{cont} = E_g^{ncont(GaSbN)} + \Delta E_c^{hy} - \Delta E_{v,moy}^{hy} - \Delta E_{hh}^{sh} \quad (I.16)$$

Et pour une couche en tension :

$$E_g^{cont} = E_g^{ncont(GaSbN)} + \Delta E_c^{hy} - \Delta E_{v,moy}^{hy} - \Delta E_{lh}^{sh} \quad (I.17)$$

Les constantes élastiques C_{ij} de la couche, les potentiels de déformation hydrostatique a_c et a_v , ainsi que le potentiel de déformation tétragonale b. ces paramètres sont répertoriés en ANNEXE pour les composés III-V binaires.

1.5.5 L'énergie des deux barrières

L'énergie des deux barrières est déterminée selon les équations suivantes [13] :

$$\Delta E_c = E_{cGaSb} - E_c^- \quad (I.18)$$

$$\Delta E_v = E_{gGaSb} - E_{gGaSbN} - \Delta E_c \quad (I.19)$$

1.5.6 Taux de confinement

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

$$Q_c = \frac{\Delta E_c}{\Delta E_c + \Delta E_v} \quad (I.20)$$

$$Q_v = 1 - Q_c \quad (I.21)$$

Avec Q_c et Q_v , sont respectivement la quantité des électrons dans la bande de conduction et la quantité des électrons dans la bande de valence.

1.5.7 Quantification des niveaux

Les porteurs de charge se confinent dans des niveaux différents dans un puits quantique, à fin de déterminer ces niveaux, on va utiliser l'équation de Schrödinger donnée selon la formule suivante [14] :

$$\frac{\hbar^2}{2m^*} * \frac{d^2\varphi(x)}{dx^2} + V(x)\varphi(x) = En\varphi(x) \quad (I.22)$$

Avec :

$$\hbar = \frac{h}{2\pi} \quad (I.23)$$

h : Constante de Planck.

m^* : La masse effective.

φ : La fonction d'onde.

$V(x)$: Fonction décrivant le potentiel pour chaque valeur de x .

En : L'énergie de quantification (m_e , m_{hh} , m_{lh}).

1.5.8 Puits quantique de profondeur finie

On distingue trois régions séparées par le puits quantique [15] :

- Région 1 pour $z < 0$, on a $V(z) = V_0$
- Région 2 pour $0 < z < L_1$, on a $V(z) = V_0$
- Région 3 pour $z > L$, on a $V(z) = V_0$

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

$$\begin{aligned} (d^2 \Psi_1 / dz^2) - K_2 \Psi_1 &= 0 \\ (d^2 \Psi_2 / dz^2) - K_1 \Psi_2 &= 0 \\ (d^2 \Psi_3 / dz^2) - K_2 \Psi_3 &= 0 \end{aligned} \tag{1.24}$$

Avec :

$$K_1 = \frac{-b \pm \sqrt{2m_1^* E}}{\hbar} \tag{1.25}$$

$$K_2 = \frac{\sqrt{2m_2^* (V_0 - E)}}{\hbar}$$

Où :

m_1^* : est la masse effective de semi-conducteur SC1 dans la région 2.

m_2^* : est la masse effective de semi-conducteur SC2 dans les deux régions 1 et 3.

Les solutions des équations de Schrödinger dans les trois régions sont :

$$\begin{aligned} \Psi_1 &= A_1 e^{k_2 z} + B_1 e^{-k_2 z} \\ \Psi_2 &= A_2 e^{jk_1 z} + B_2 e^{-jk_1 z} \\ \Psi_3 &= A_3 e^{k_2(z-L_1)} + B_3 e^{-k_2(z-L_1)} \end{aligned} \tag{1.26}$$

La condition aux limites

$$\Psi_1(z \rightarrow -\infty) = 0 \Rightarrow B_1 = 0$$

$$\Psi_3(z \rightarrow +\infty) = 0 \Rightarrow A_3 = 0$$

$$\begin{aligned}
\Psi_1 &= A_1 e^{k_2 z} \\
\Psi_2 &= A_2 e^{jk_1 z} + B_2 e^{-jk_1 z} \\
\Psi_3 &= A_3 e^{k_2(z-L_1)}
\end{aligned} \tag{I.27}$$

Les constantes d'intégration A_1, A_2, B_2, B_3 sont déterminées par les conditions aux limites. Ces conditions sont les continuités de la fonction d'onde Ψ et du courant de probabilités $(1/m) \cdot d\Psi(z)/dz$ aux interfaces $z=0$ et $z=L_1$.

En $z=0$

$$\begin{aligned}
\Psi_1(0) &= \Psi_2(0) \\
(1/m_1^*) \cdot d\Psi_1(0)/dz &= (1/m_2^*) \cdot d\Psi_2(0)/dz
\end{aligned} \tag{I.28}$$

On obtient

$$\begin{aligned}
A_1 - A_2 - B_2 &= 0 \\
(K_2/m_1^*) \cdot A_1 - j(K_1/m_2^*) \cdot A_2 + j(K_1/m_2^*) \cdot B_2 &= 0
\end{aligned} \tag{I.29}$$

En $z=L_1$

$$\begin{aligned}
\Psi_2(L_1) &= \Psi_3(L_1) \\
(1/m_2^*) \cdot d\Psi_2(L_1)/dz &= (1/m_1^*) \cdot d\Psi_3(L_1)/dz
\end{aligned} \tag{I.30}$$

On obtient

$$\begin{aligned}
A_2 e^{jk_1 L_1} + B_2 e^{-jk_1 L_1} - A_3 &= 0 \\
j(K_1/m_2^*) \cdot A_2 e^{jk_1 L_1} - j(K_1/m_2^*) \cdot B_2 e^{-jk_1 L_1} + (K_2/m_1^*) \cdot A_3 &= 0
\end{aligned} \tag{I.31}$$

D'où le système d'équations

$$\begin{aligned}
A_1 - A_2 - B_2 &= 0 \\
(K_2/m_1^*) \cdot A_1 - j(K_1/m_2^*) \cdot A_2 + j(K_1/m_2^*) \cdot B_2 &= 0 \\
A_2 e^{jk_1 L_1} + B_2 e^{-jk_1 L_1} - A_3 &= 0 \\
j(K_1/m_2^*) \cdot A_2 e^{jk_1 L_1} - j(K_1/m_2^*) \cdot B_2 e^{-jk_1 L_1} + (K_2/m_1^*) \cdot A_3 &= 0
\end{aligned} \tag{I.32}$$

D'où l'équation :

$$\sqrt{2 \cdot m_2^* \cdot E_n} \cdot L_1 = n \cdot \Pi + 2 \text{Arctan} \left[\sqrt{m_2^* \cdot (V_0 - E_n) m_1^* \cdot E_n} \right] \quad (1.33)$$

Toutes les valeurs de E_n correspondante à chaque entier n sont déterminées à partir de l'équation ci-dessus, appelée équation aux valeurs propres.

1.5.9 Energie de transition

Elle décrit l'énergie nécessaire pour qu'un électron puisse se déplacer de la bande de valence vers la bande de conduction, d'un niveau inférieur à un niveau supérieur, voir **figure (1.3)** [15].

Elle est déterminée par la relation suivante :

$$E_{tr_{e-hh, e-lh}} = E_g + E_{n_e} + E_{n_{hh, lh}} \quad (1.34)$$

Avec :

$E_{tr_{e-hh}}$: énergie de transition trou lourd vers bande de conduction.

$E_{tr_{e-lh}}$: énergie de transition trou léger vers bande de conduction.

E_{n_e} : Niveau d'énergie d'électron.

$E_{n_{hh}}$: Niveau d'énergie de trou lourd.

$E_{n_{lh}}$: Niveau d'énergie de trou léger.

1.5.10 Longueur d'onde

La longueur d'onde est une grandeur physique qui caractérise les rayonnements, elle définit la distance entre deux maximums voisins d'amplitude. La longueur d'onde dépend de la vitesse de propagation de l'onde dans le milieu quelle traverse. Elle est définie par la relation suivante :

$$\lambda = \frac{1.24}{E_{tr}} \quad (1.35)$$

1.5.11 Propriétés optiques

La lumière incidente sur l'interface entre deux milieux peut être réfléchiée, réfractée ou absorbée, voir **figure (1.9)**.

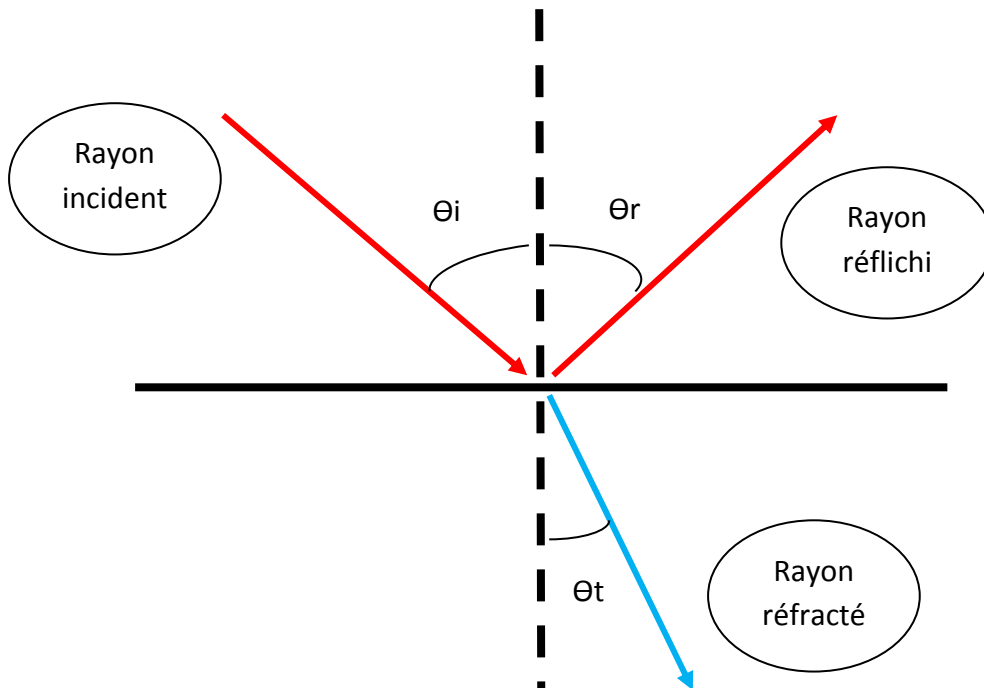


Figure 1.9 Propriétés optiques

\alpha Coefficient d'absorption

Dans l'absorption, un atome stable absorbe un photon (particule de lumière) et atteint un niveau d'énergie supérieur, il est excité. Le coefficient d'absorption $\alpha(E)$, pour une énergie du photon E supérieure à l'énergie du gap est donné par la relation suivante [4] :

$$\alpha(E) = 2.2 * 10^5 * \frac{\sqrt{E-E_g}}{E} \quad (1.36)$$

Avec :

$\alpha(E)$: coefficient d'absorption en fonction de l'énergie du photon E .

E_g : l'énergie du gap.

***b* Indice de réfraction**

Lorsque la lumière passe d'un milieu à un autre, elle change de direction par un angle Θ_t , on appelle ce phénomène la réfraction.

La variation de l'indice de réfraction n en fonction de la longueur d'onde λ a été évaluée selon la formule de Sellmeier [7] :

$$n^2(\lambda) = \left(A + \frac{B}{1 - \frac{C}{\lambda^2}} + \frac{D}{1 - \frac{E}{\lambda^2}} \right) \quad (I.37)$$

Avec λ en micromètre et A, B, C, D et E sont les coefficients de Sellmeier. Les coefficients de Sellmeier des principaux binaires III-V sont donnés dans le tableau en annexe.

L'indice de réfraction de l'alliage GaSbN est ensuite calculé à partir des indices des binaires selon la loi de Végard [7] :

$$n_{GaSbN}^2 = x \times n_{GaN}^2 + (1 - x) \times n_{GaSb}^2 \quad (I.38)$$

***c* Coefficient de réflexion**

Quand on parle de réflexion, par opposition à l'absorption et à la transmission, il s'agit de l'ensemble des rayons qui émergent de l'interface du côté d'origine des rayons.

La réflexion s'exprime par l'équation suivante [7] :

$$R = \left(\frac{n_2 - n_1}{n_2 + n_1} \right)^2 \quad (I.39)$$

Avec :

n_1 : indice de réfraction du milieu 1.

n_2 : indice de réfraction du milieu 2.

1.6 Conclusion

Ce chapitre nous a donné un aperçu sur des notions fondamentales concernant les semi-conducteurs III-V comme : l'énergie de gap, la structure cristalline, notion de la couche contrainte et de l'épaisseur critique, effet de la contrainte sur la bande interdite, l'incorporation de l'Azote dans GaSb, ...etc.

Il décrit aussi la manière de comment faire l'étude (paramètre électronique, propriétés optiques) d'un nouveau matériau à base des semi-conducteurs (GaSbN).

Nous avons vu encore le développement de l'équation de Schrödinger à fin de déterminer les niveaux d'énergies.

Le chapitre suivant est consacré aux résultats et les discussions de la simulation de la structure proposée et ses propriétés très attrayantes.

Chapitre 2 Résultats & discussions

2.1 Introduction

Ce chapitre porte sur la diminution de l'énergie de la bande interdite, de l'alliage GaSbN avec l'incorporation de l'Azote, permettant d'atteindre une longueur d'onde de détection comprise entre 0.98 et 1.3 μ m. En utilisant ce modèle (BAC) [11], nous allons étudier l'influence de l'incorporation de l'Azote sur les caractéristiques de la structure GaSbN/GaSb : le gap, les énergies de quantification, les énergies de transitions, la longueur d'onde de détection. Le modèle d'anticroisement de bande est utilisé pour décrire de manière quantitative la diminution de l'énergie de la bande interdite avec l'incorporation de l'Azote (N) dans le ternaire GaSbN.

2.2 L'étude des paramètres électroniques

2.2.1 Paramètre de maille

La **figure (2.1)** présente l'évolution du paramètre de maille en fonction de la concentration d'Azote de la structure GaSbN. On remarque que l'Azote a pour effet de diminuer le paramètre de maille, si la concentration d'Azote est égale à N=1%, la valeur du paramètre de maille vaut $a=6.8 \text{ \AA}$, si la concentration d'Azote est égale à N=3%, la valeur du paramètre de maille vaut $a=6.048 \text{ \AA}$. Les paramètres de maille des principaux semi-conducteurs sont donnés dans l'annexe.

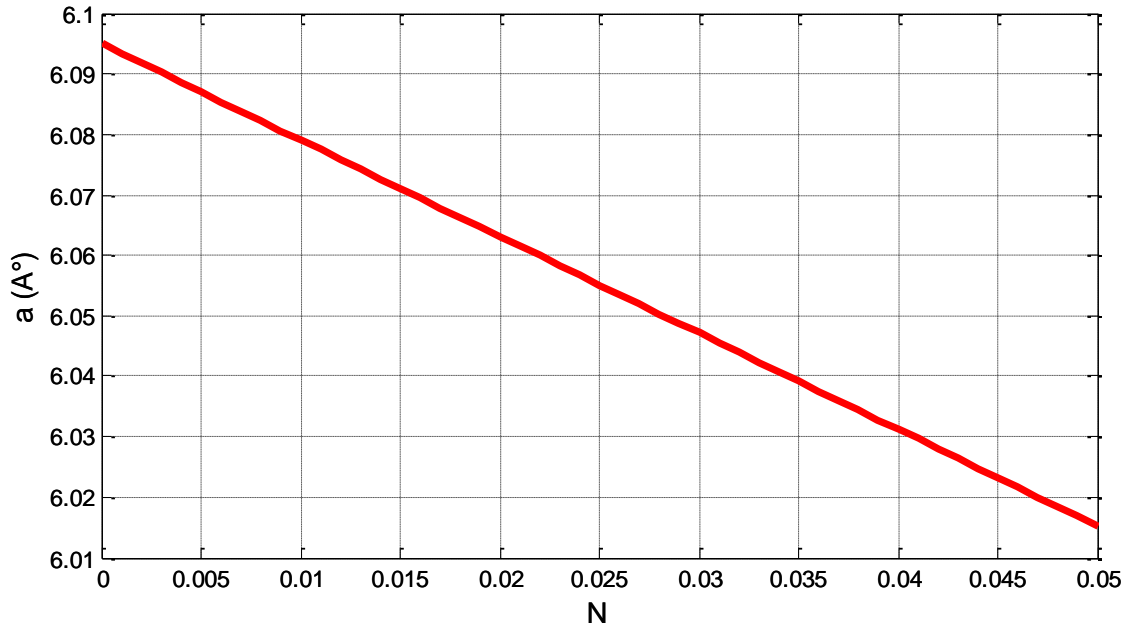


Figure 2.1 Variation du paramètre de maille du GaSbN en fonction de la concentration d'Azote

2.2.2 La contrainte

La **figure (2.2)** montre la variation de la déformation en fonction de la concentration d'Azote. On voit que la déformation biaxiale ϵ_{xx} augmente avec l'augmentation d'Azote, si la concentration d'Azote est égale à $N=2\%$, la valeur de la contrainte biaxiale $\epsilon_{xx}=0.05\%$, si la concentration d'Azote est égale à $N=4\%$, la valeur de la contrainte biaxiale $\epsilon_{xx}=1\%$. Par contre la déformation uniaxiale ϵ_{zz} diminue avec l'augmentation d'Azote, si la concentration d'Azote est égale à $N=2\%$, la valeur de la contrainte uniaxiale est $\epsilon_{zz}=-0.05\%$, si la concentration d'Azote est égale à $N=4\%$, la valeur de $\epsilon_{zz}=-1\%$. Et cela à cause de l'effet d'Azote sur le paramètre de maille sur l'épitaxie. Le point d'intersection ($\epsilon_{xx} = \epsilon_{zz} = 0$), représente l'accord de maille entre la couche épitaxiée et le substrat.

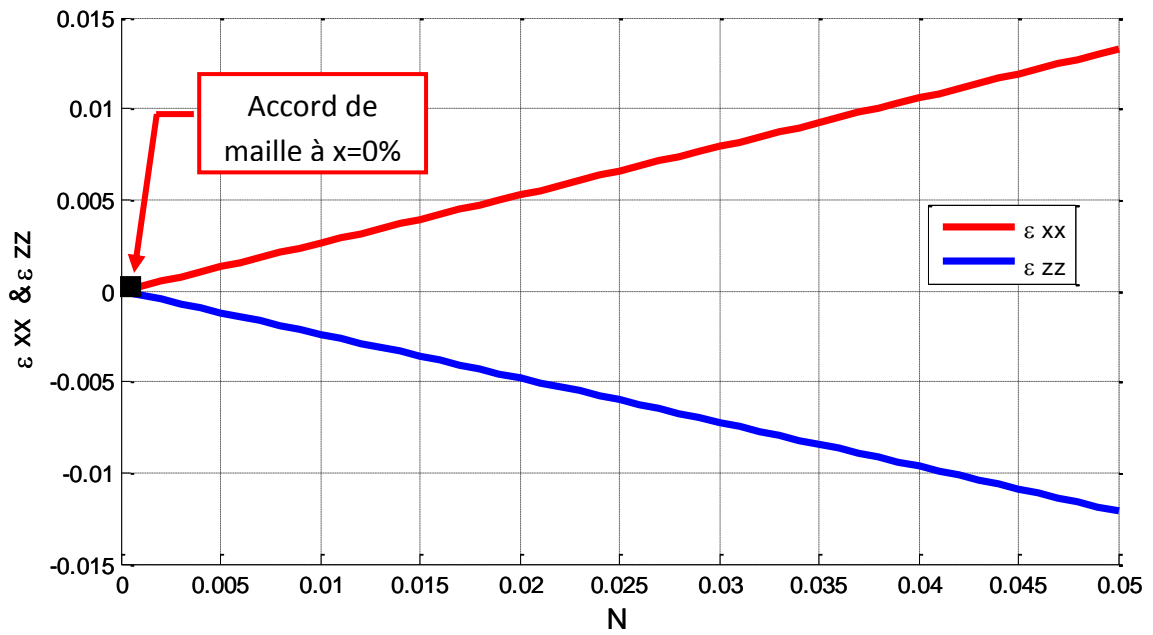


Figure 2.2 Variation du désaccord paramétrique en fonction de la concentration d'Azote

2.2.3 L'épaisseur critique

La **figure (2.3)** présente l'évolution de l'épaisseur critique en fonction de la concentration d'Azote. On remarque que l'épaisseur critique prend sa grande valeur lorsqu'on a un accord de maille entre la couche épitaxiée et le substrat, on remarque aussi que cette épaisseur diminue avec l'augmentation de la concentration d'Azote.

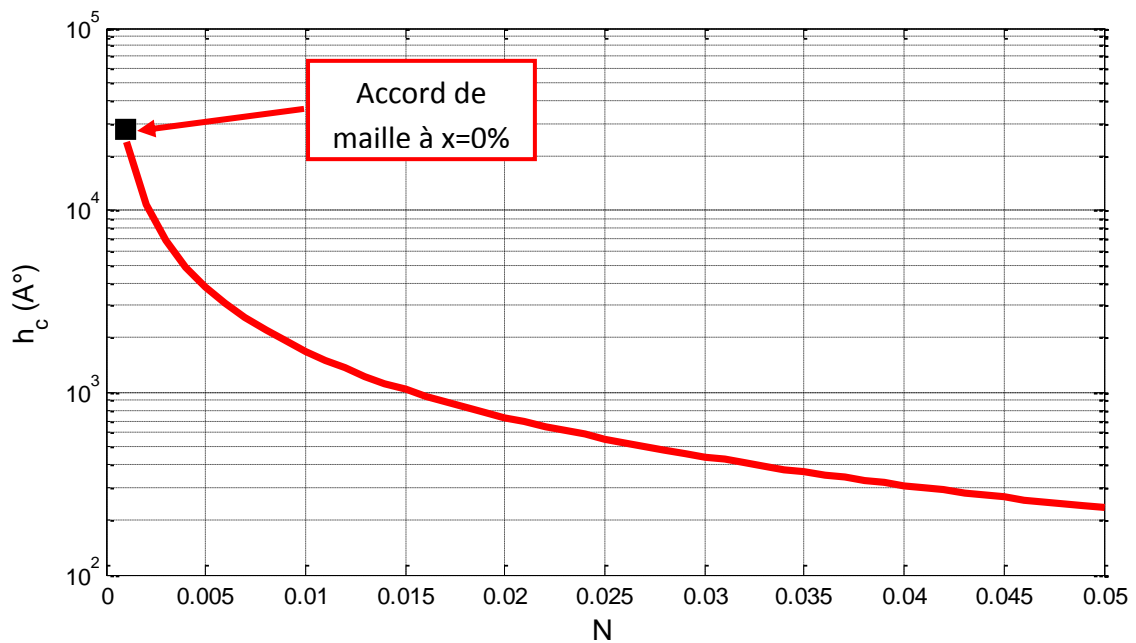


Figure 2.3 Variation de l'épaisseur critique en fonction de la concentration d'Azote

2.2.4 L'énergie de la bande interdite

a. Effet de l'Azote sur la Bande de conduction

La **figure (2.4)** montre l'éclatement de la bande de conduction en deux sous bandes en fonction de la concentration d'Azote. On remarque que plus la concentration d'Azote augmente, plus les deux sous bandes s'éloignent l'une de l'autre.

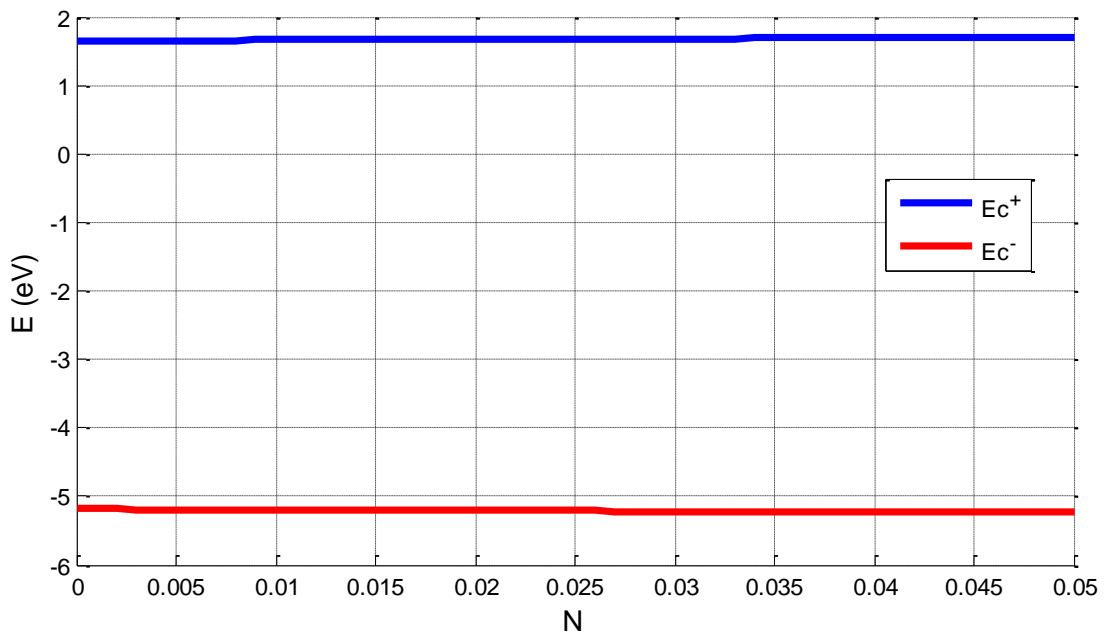


Figure 2.4 Eclatement de la bande de conduction en deux sous bandes selon le modèle BAC

b. Le gap non contraint avec éclatement

La **figure (2.5)** présente l'évolution de la bande interdite contrainte avec éclatement du GaSbN en fonction de la concentration d'Azote. On remarque que l'Azote en faible quantité a pour effet de diminuer le gap d'énergie, si la concentration d'Azote est égale à $N=1\%$, la valeur du paramètre de maille vaut $E_g=0.8$ eV, si la concentration d'Azote est égale à $N=4.5\%$, la valeur du paramètre de maille vaut $E_g=0.76$ eV.

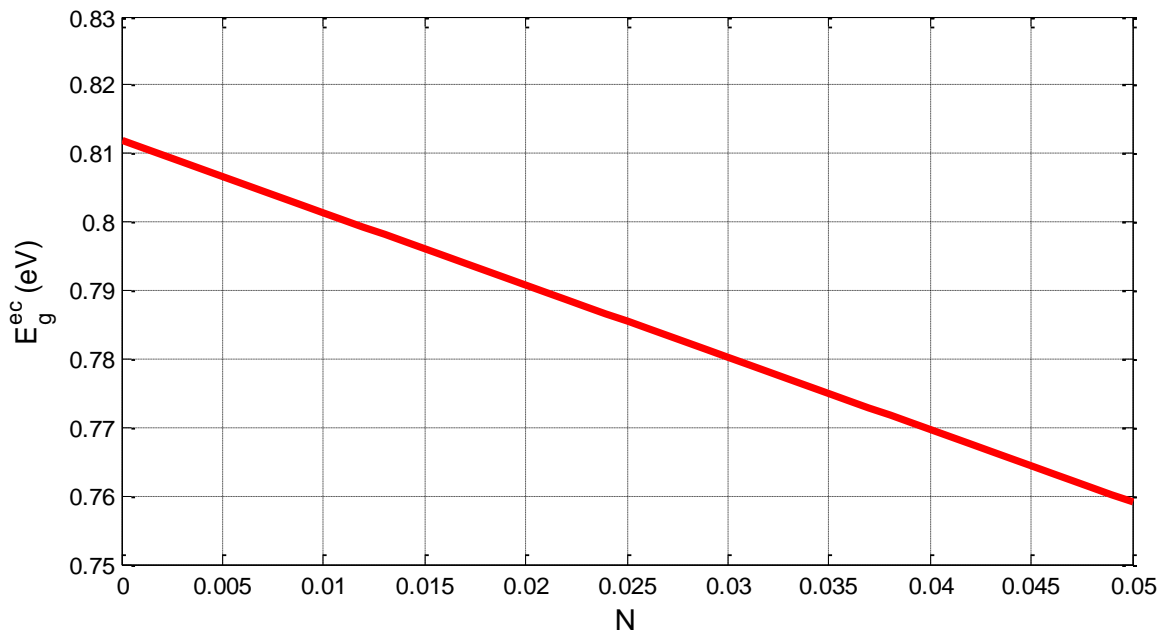


Figure 2.5 L'évolution du gap non contraint avec éclatement du GaSbN en fonction de la concentration d'Azote

c. Le gap contraint avec éclatement

La **figure (2.6)** montre l'effet de la contrainte sur le gap, on voit que les deux bandes d'énergie diminuent avec l'augmentation de l'Azote, si on prend par exemple la gap des trous lourds, on observe que si la concentration d'Azote est égale à $N=0.5\%$, la valeur du paramètre de maille vaut $E_{ghh}=0.8$ eV, si la concentration d'Azote égale $N=3\%$, la valeur du paramètre de maille vaut $E_{ghh}=0.65$ eV. On remarque aussi que pour une contrainte extensive l'énergie de bande de trou léger est grande par rapport à la bande de trou lourd, ce qui donne $Eg_{lh}^{ec} < Eg_{hh}^{ec}$.

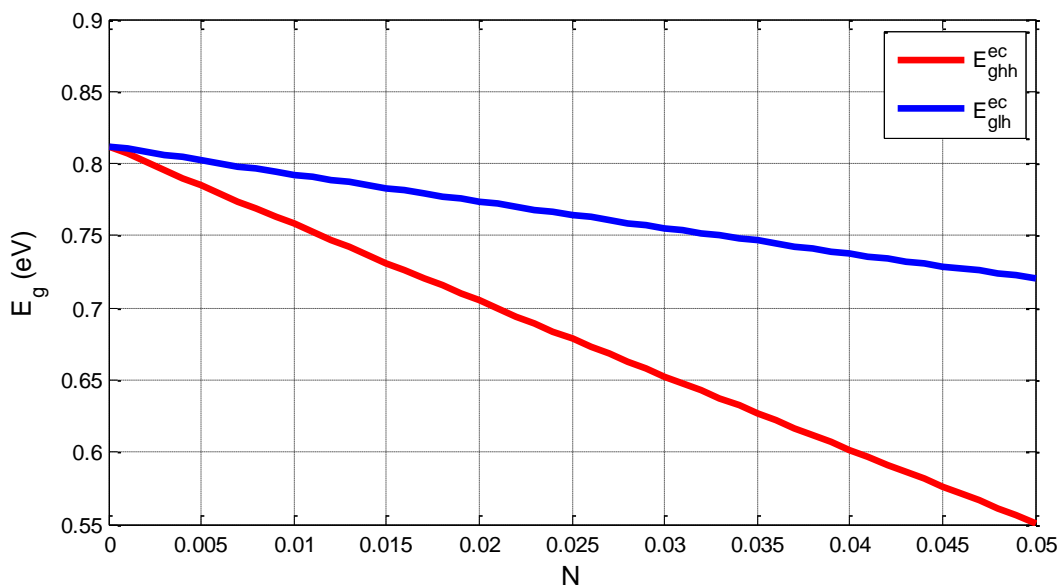


Figure 2.6 L'effet de la contrainte sur le gap

2.3 Quantification, Energie de transition et Longueur d'onde

2.3.1 L'énergie des deux barrières

La **figure(2.7)** présente l'évolution de l'énergie des deux barrières en fonction de la concentration d'Azote, on voit que l'énergie du barrière augmente avec l'augmentation d'Azote, si on prend par exemple la barrière ΔE_c , on observe que si la concentration d'Azote égale $N=1.5\%$, la valeur de la barrière ΔE_c vaut $\Delta E_c=0.05$ eV, si la concentration d'Azote égale $N=4.5\%$, la valeur de la barrière ΔE_c vaut $\Delta E_c=0.14$ eV.

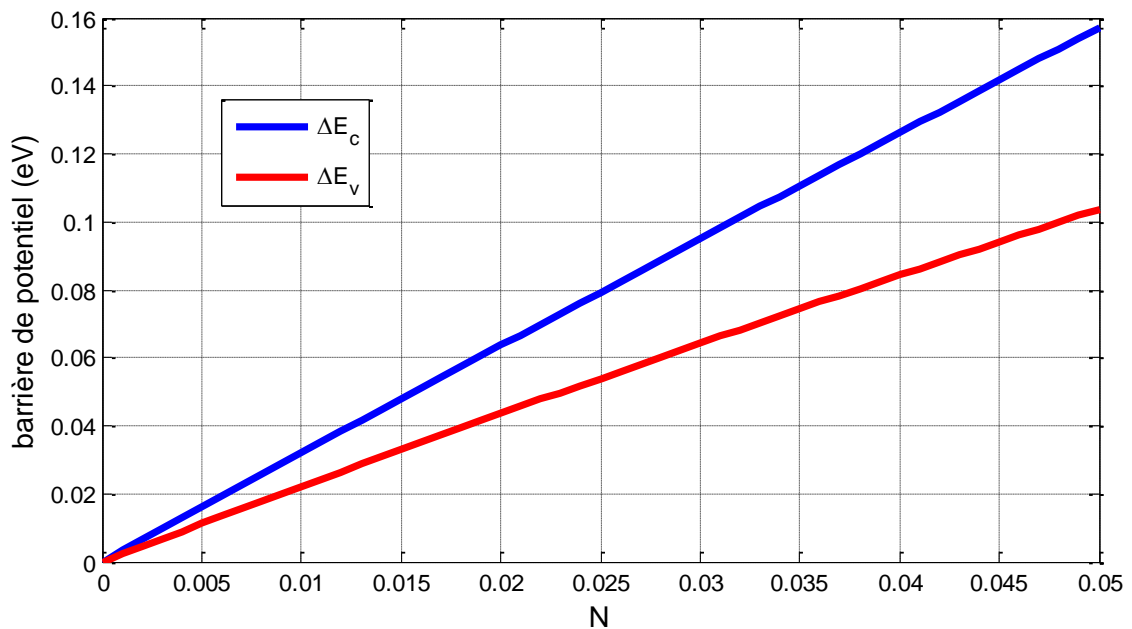


Figure 2.7 L'énergie des deux barrières

2.3.2 Taux de confinement

La **figure (2.8)** présent le taux de confinement en fonction de la concentration d'Azote, on observe que le pourcentage des électrons dans la bande de conduction arrive à 60 % pour une concentration d'Azote est égale à $N=5\%$.

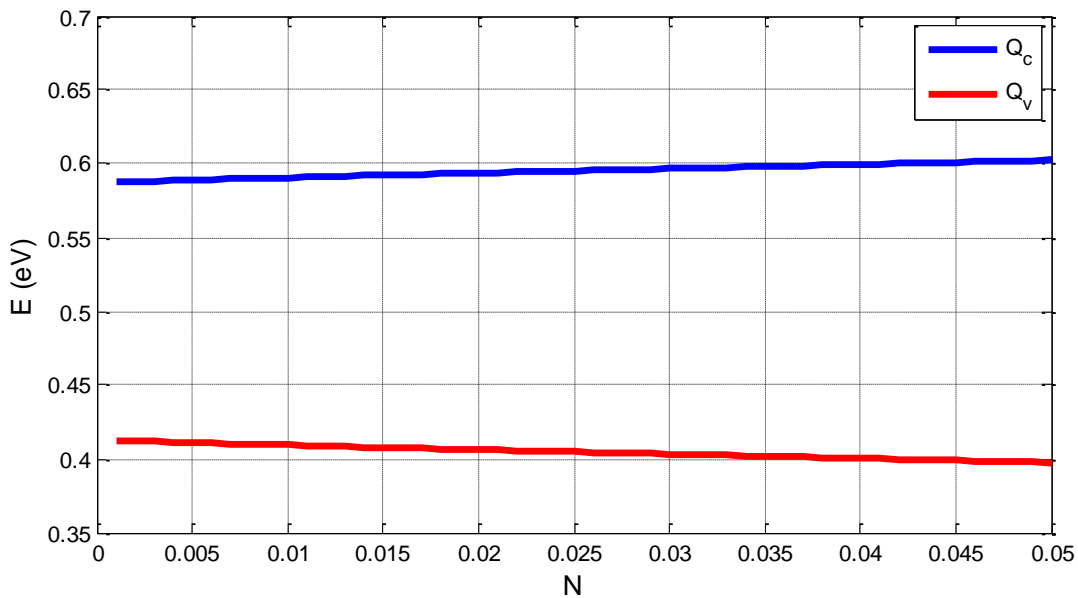


Figure 2.8 Taux de confinement

2.3.3 Quantification d'électrons, trous lourds et trous légers

La figure (2.9) illustre l'évolution de l'énergie des électrons dans la bande de conduction en fonction de la largeur du puits à base de GaSbN pour différentes concentrations d'Azote. On remarque que l'énergie diminue avec l'augmentation de la largeur du puits, ainsi que cette dernière augmente avec l'augmentation d'Azote, si on prend une concentration d'Azote égale à $N=1\%$ et une largeur de puits égale à $L=80$, la valeur d'énergie vaut $E=0.13$ eV, si on prend une concentration d'Azote égale à $N=1\%$ et une largeur de puits égale à $L=140$, la valeur d'énergie vaut $E=0.07$ eV.

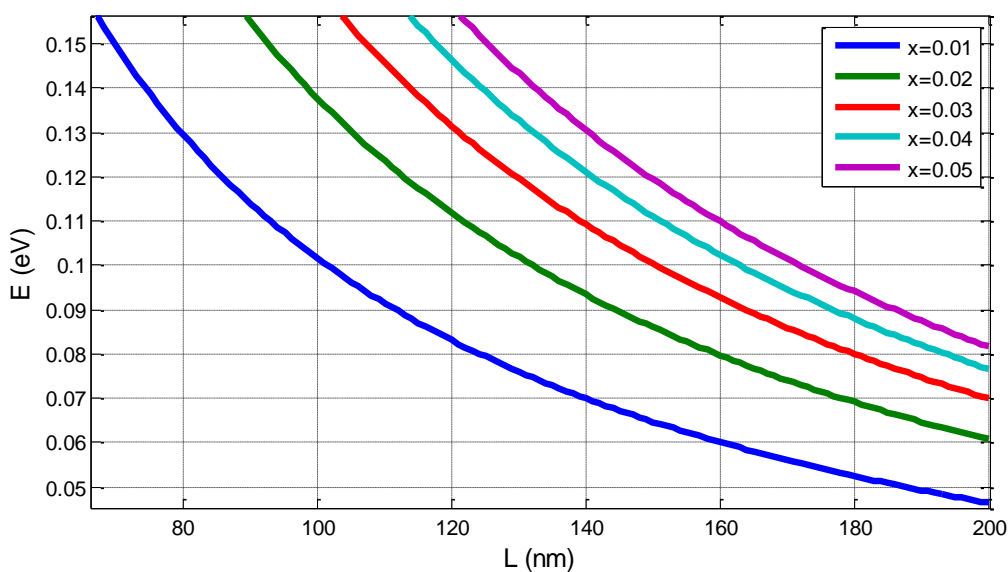


Figure 2.9 Electrons dans la bande de conduction

La **figure (2.10)** illustre l'évolution de l'énergie des trous lourds en fonction de la largeur du puits à base de GaSbN pour différentes concentrations d'Azote. On remarque que l'énergie diminue avec l'augmentation de la largeur du puits, ainsi que cette dernière augmente avec l'augmentation d'Azote, si on prend une concentration d'Azote égale à $N=1\%$ et une largeur de puits égale à $L=80$, la valeur d'énergie vaut $E=0.04$ eV, si on prend une concentration d'Azote égale à $N=1\%$ et une largeur de puits égale à $L=140$, la valeur d'énergie vaut $E=0.02$ eV.

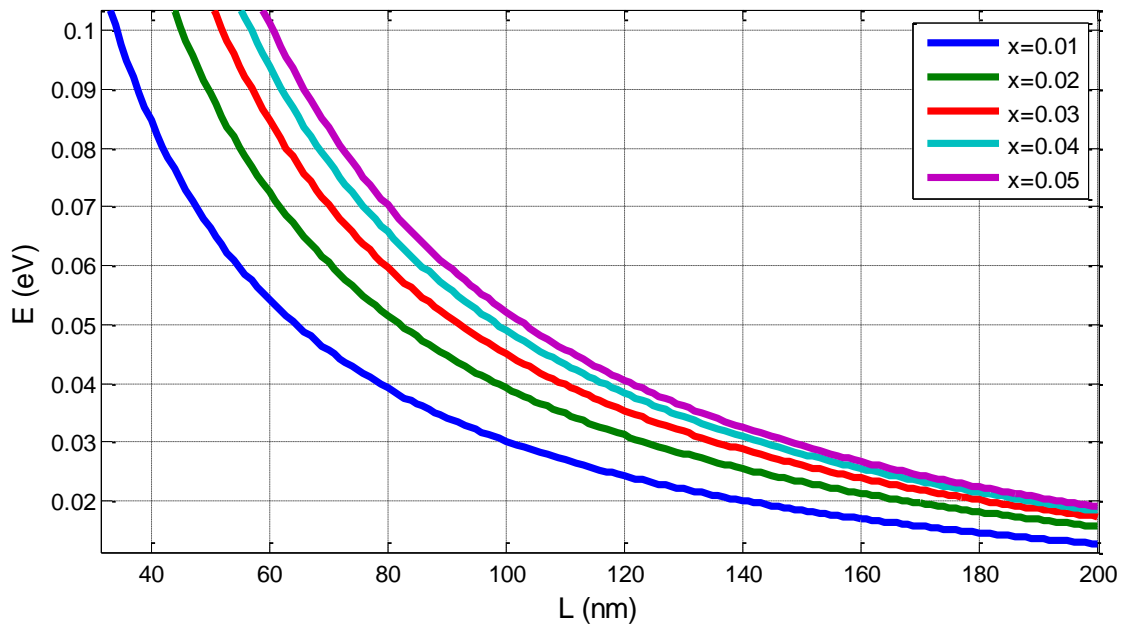


Figure 2.10 Energie des trous lourds

La **figure (2.11)** illustre l'évolution de l'énergie des trous légers en fonction de la largeur du puits à base de GaSbN pour différentes concentration d'Azote. On remarque que l'énergie diminue avec l'augmentation de la largeur du puits, ainsi que cette dernière augmente avec l'augmentation d'Azote, si on prend une concentration d'Azote égale à $N=1\%$ et une largeur de puits égale à $L=80$, la valeur d'énergie vaut $E=0.08$ eV, si on prend une concentration d'Azote égale à $N=1\%$ et une largeur de puits égale à $L=140$, la valeur d'énergie vaut $E=0.035$ eV.

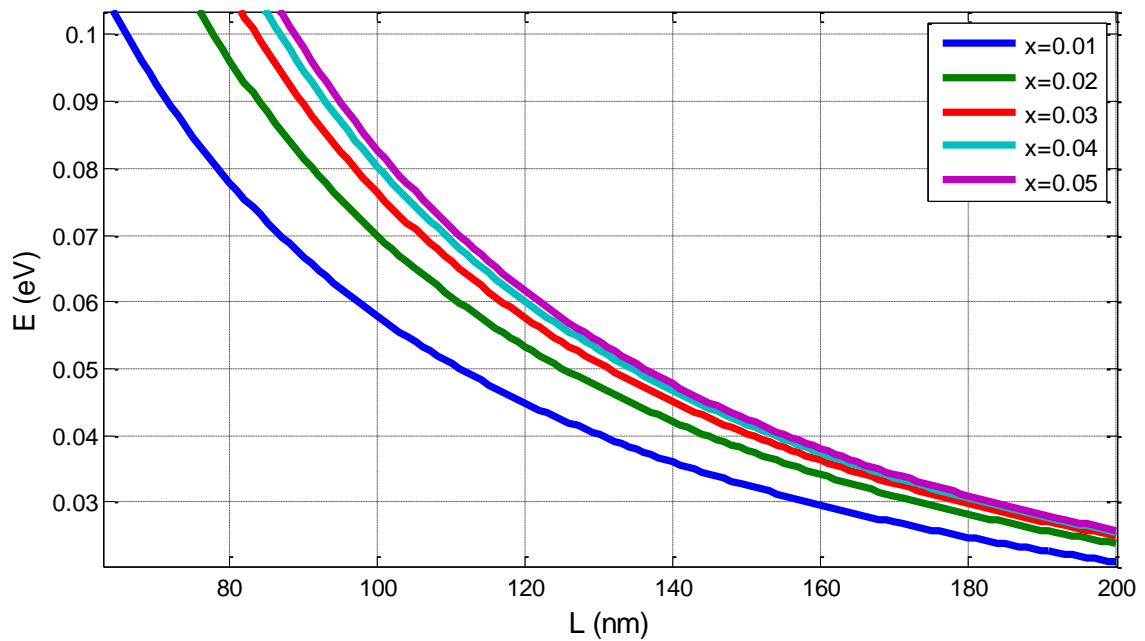


Figure 2.11 Energie des trous légers

2.3.4 Energie de transition $E_{tr-e-hh}$ et $E_{tr-e-lh}$

La **figure (2.12)** montre la variation de l'énergie de transition des trous lourds vers bande de conduction en fonction de la largeur du puits à base de GaSbN pour différentes concentrations d'Azote. On remarque que cette énergie diminue avec l'augmentation de la largeur du puits, ainsi que cette dernière augmente avec l'augmentation d'Azote, si on prend une concentration d'Azote égale à $N=1\%$ et une largeur de puits égale à $L=80$, la valeur d'énergie vaut $E_{tr-hh}=0.97$ eV, si on prend une concentration d'Azote égale à $N=1\%$ et une largeur de puits égale à $L=140$, la valeur d'énergie vaut $E_{tr-hh}=0.89$ eV. L'énergie de transition est la somme des deux niveaux d'énergie dans le puits (électron et trou) et le gap de puits, et comme ces niveaux d'énergies diminuent avec l'élargissement de puits automatiquement l'énergie de transition diminue (effet de quantification).

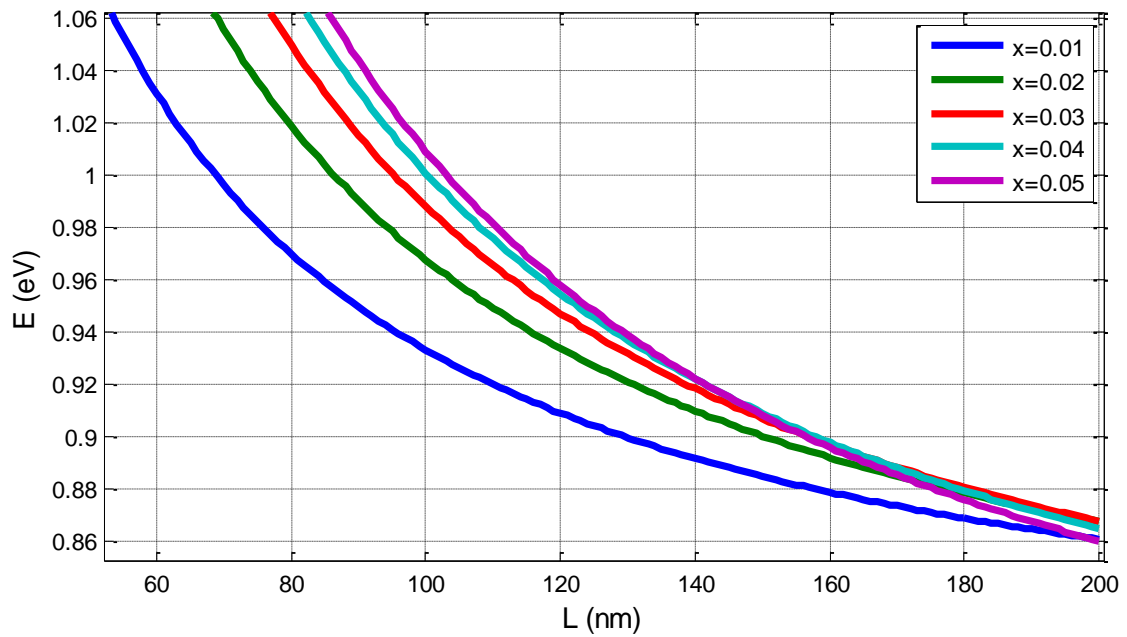


Figure 2.12 Energie de transition trous lourds vers bande de conduction

La **figure (2.13)** montre la variation de l'énergie de transition trou léger vers bande de conduction en fonction de la largeur du puits à base de GaSbN pour différentes concentration d'Azote. On remarque que cette énergie diminue avec l'augmentation de la largeur du puits, ainsi que cette dernière augmente avec l'augmentation d'Azote, si on prend une concentration d'Azote égale à $N=1\%$ et une largeur de puits égale à $L=80$, la valeur d'énergie vaut $E_{tr-lh}=1.01$ eV, si on prend une concentration d'Azote égale à $N=1\%$ et une largeur de puits égale à $L=140$, la valeur d'énergie vaut $E_{tr-lh}=0.91$ eV. L'énergie de transition est la somme des deux niveaux d'énergie dans le puits (électron et trou) et le gap de puits, et comme ces niveaux d'énergies diminuent avec l'élargissement de puits automatiquement l'énergie diminue (effet de quantification).

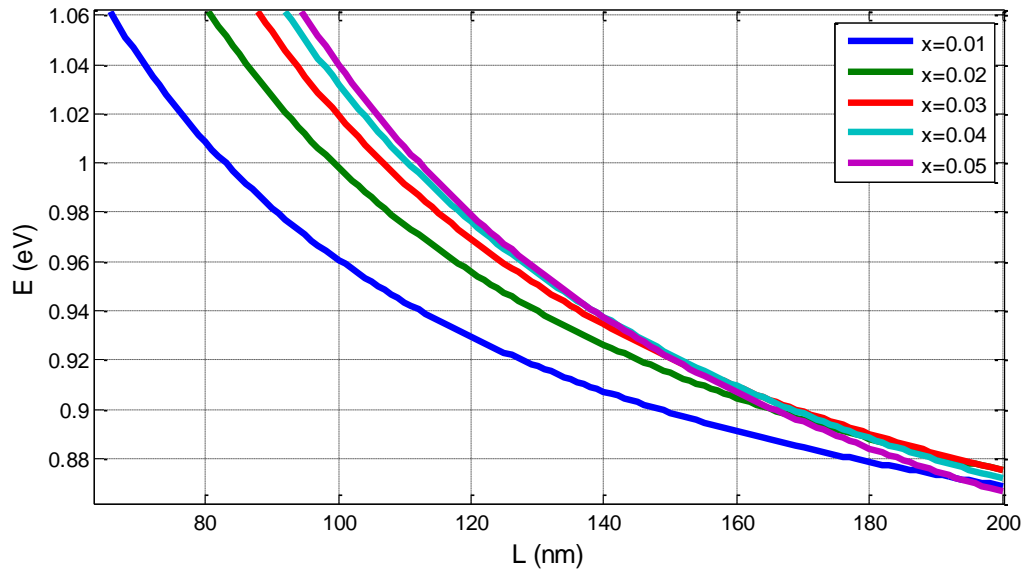


Figure 2.13 Energie de transition trous léger vers bande de conduction

2.3.5 Longueur d'onde λ_{e-hh} et λ_{e-lh}

La figure (2.14) illustre l'évolution de la longueur d'onde du transition trou léger vers bande de conduction en fonction de la largeur du puits à base de GaSbN pour différentes concentration d'Azote. On constate que la longueur d'onde croit si la largeur du puits et la concentration d'Azote augmentent.

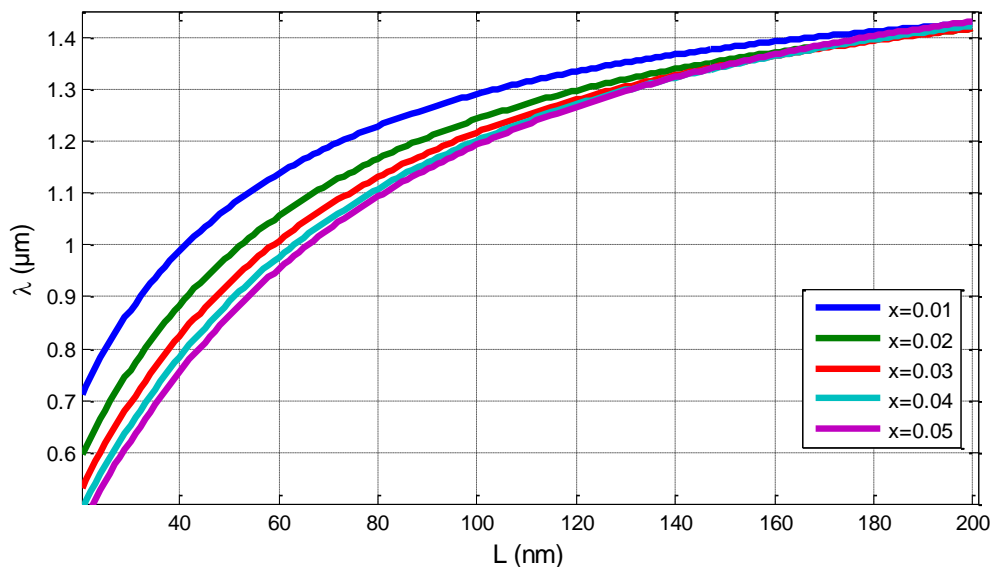


Figure 2.14 L'évolution de la longueur d'onde du transition trou léger vers bande de conduction en fonction de la largeur du puits

La **figure (2.15)** illustre l'évolution de la longueur d'onde du transition trou lourd vers bande de conduction en fonction de la largeur du puits à base de GaSbN pour différentes concentration d'Azote. On constate que la longueur d'onde croit si la largeur du puits et la concentration d'Azote augmentent, si on prend une concentration d'Azote égale à $N=1\%$ et une largeur de puits égale à $L=50$, la valeur de la longueur d'onde vaut $\lambda=1.1\mu\text{m}$, si on prend une concentration d'Azote égale à $N=1\%$ et une largeur de puits égale à $L=100$, la valeur de la longueur d'onde vaut $\lambda=1.3\mu\text{m}$.

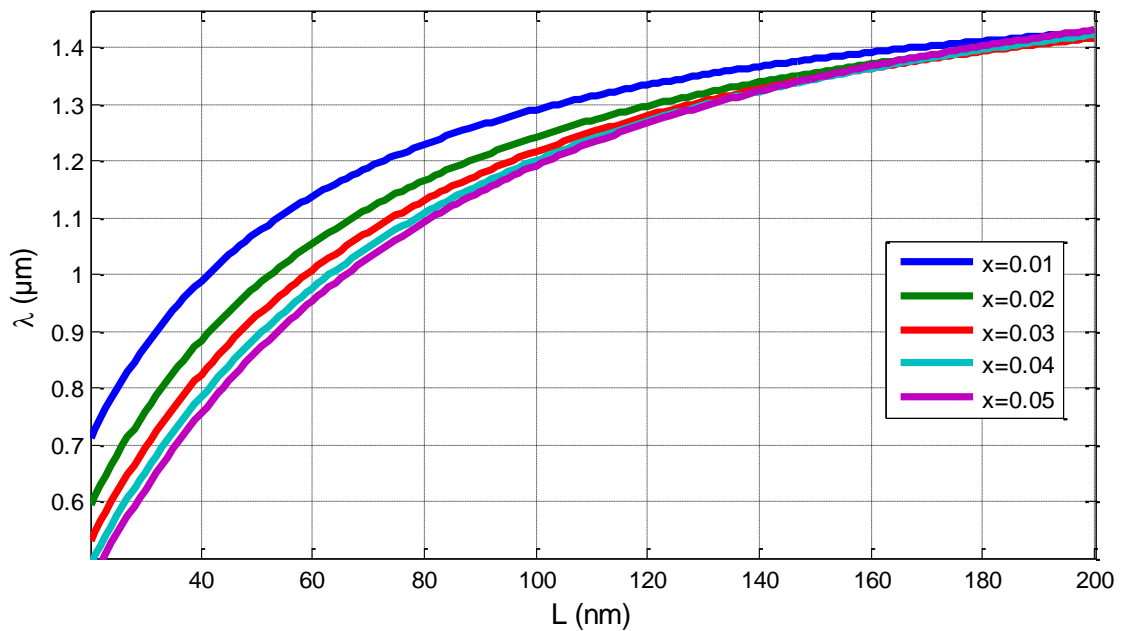


Figure 2.15 L'évolution de la longueur d'onde de transition trou lourd vers bande de conduction en fonction de la largeur du puits

2.3.6 Longueur d'onde λ_{e-hh} détectant à 0.98 et 1.3 μm

A partir du jeu des paramètres largeur de puits et taux d'Azote il est possible de déterminer la structure GaSbN/GaSb fonctionnant à 0.98 et 1.3 μm . Les couples (L_p, x) pour obtenir le fonctionnement à 0.98 et 1.3 μm sont donnés par la **figure (2.16)**.

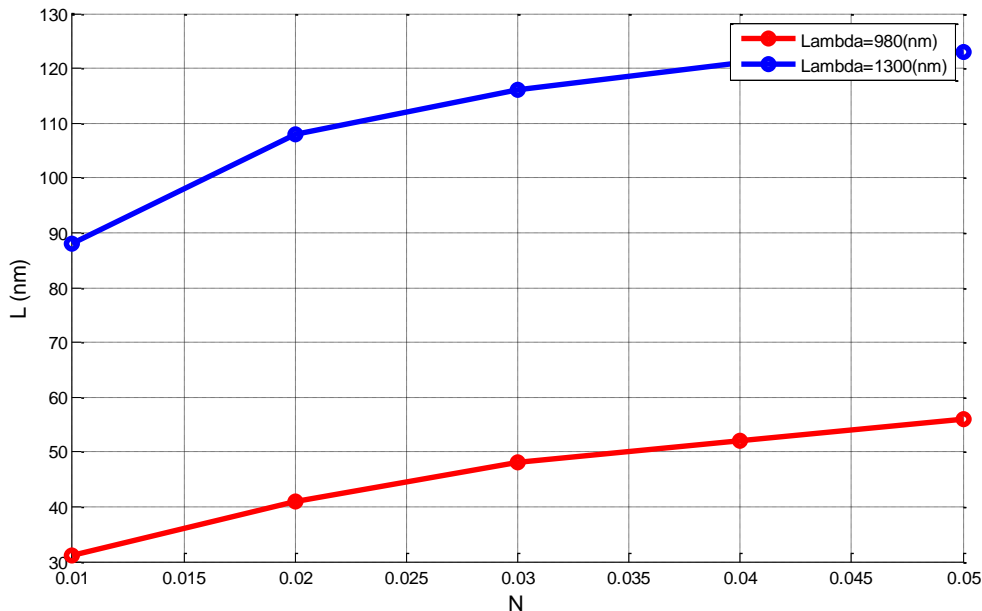


Figure 2.16 Longueur d'onde λ_{e-hh} détectant à 0.98 et 1.3 μm

2.4 Coefficient d'absorption, indice de réfraction et coefficient de réflexion

La **figure (2.17)** présente l'évolution du coefficient d'absorption en fonction de la longueur d'onde et la concentration d'Azote à base du GaSbN. On remarque que l'augmentation de la longueur d'onde et la concentration d'Azote augmentent le coefficient d'absorption. Dans le cas où la longueur d'onde dépasse 0.8 μm le coefficient d'absorption est constant et après commence à diminuer.

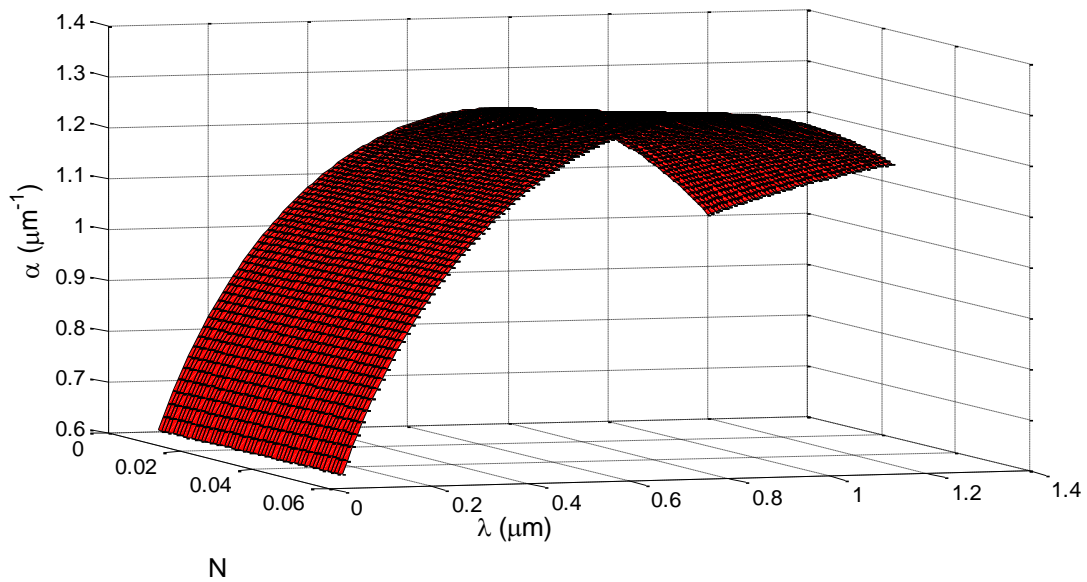


Figure 2.17 L'évolution du coefficient d'absorption en fonction de la longueur d'onde et la concentration d'Azote

La **figure (2.18)** présente la variation de l'indice de réfraction en fonction de la longueur d'onde pour différentes concentrations d'Azote. On constate que l'augmentation de la longueur d'onde diminue l'indice de réfraction.

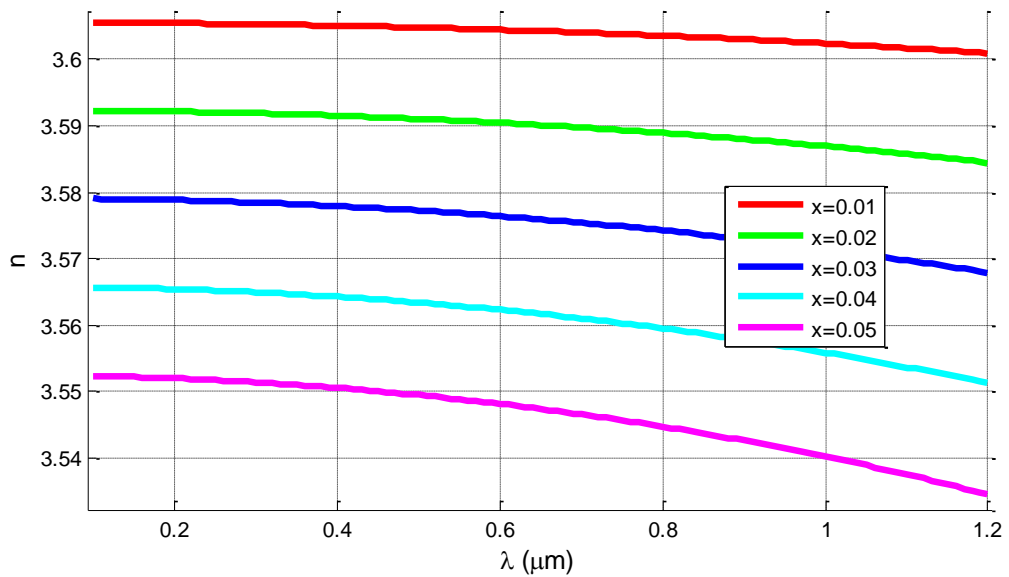


Figure 2.18 Variation de l'indice de réfraction en fonction de la longueur d'onde

La **figure (2.19)** présente la variation du coefficient de réflexion en fonction de la longueur d'onde pour différentes concentrations d'Azote. On constate que l'augmentation de la longueur d'onde diminue le coefficient de réflexion.

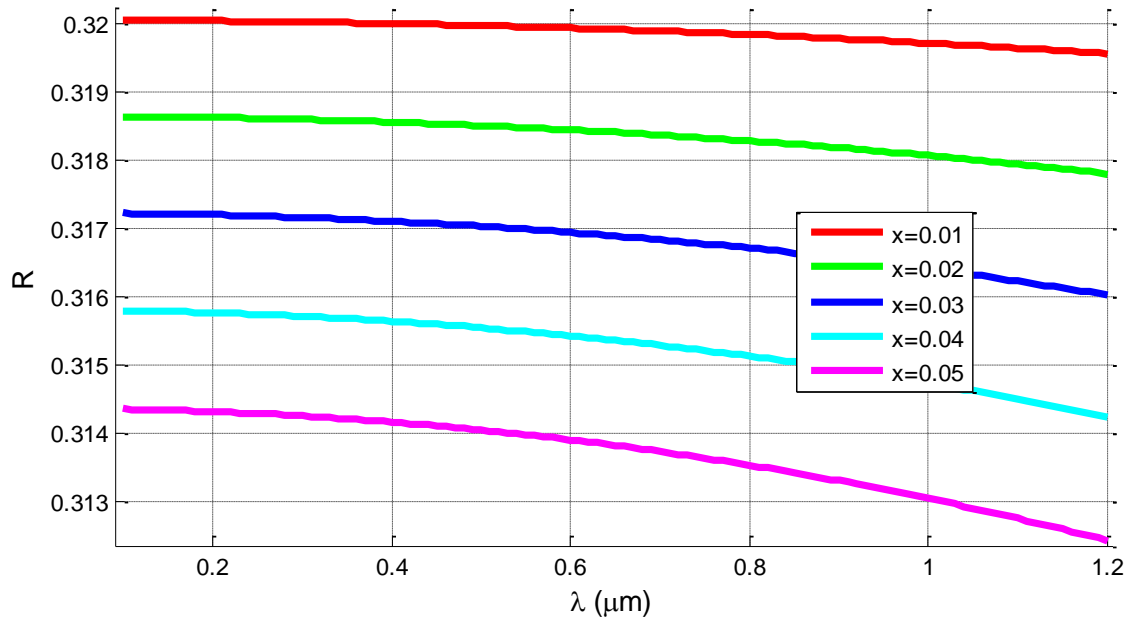


Figure 2.19 Variation de l'indice de réfraction en fonction de la longueur d'onde

2.5 Conclusion

Dans ce chapitre nous avons étudié les propriétés très particulières du matériau GaSbN. Nous avons aussi étudié l'effet de l'incorporation de l'azote sur les différents paramètres électroniques et optiques.

Nous avons remarqué que pour 5% de concentration d'Azote, l'énergie de la bande interdite diminue jusqu'à 0.55 eV, ainsi que les énergies de quantification diminuent jusqu'à 0.2 eV avec la largeur de puits et l'augmentation d'Azote, nous avons aussi les énergies de transitions qui diminuent jusqu'à 0.86 eV, en outre le coefficient d'absorption augmente et il atteint la valeur $1.2 \mu\text{m}^{-1}$, ainsi nous avons eu une longueur d'onde incluse dans l'infrarouge proche, de l'ordre de 0.98 - 1.3 μm .

Conclusion générale

Dans le cadre de ce projet de fin d'étude, mon travail porte sur l'étude et la simulation d'une structure à base du GaSbN pour la détection, à partir de différentes relations théoriques et des simulations faites sous logiciel MATLAB.

La première partie de ce mémoire présente l'ensemble des généralités sur les semi-conducteurs et spécialement les semi-conducteurs III-V (paramètres électroniques, propriétés optiques, ...etc.), ainsi la notion du puits quantique et ses caractéristique.

Dans le deuxième chapitre nous avons abordé l'étude et la simulation de la structure GaSbN/GaSb par le calcul de différentes paramètres (maille, épaisseur critique, gap contraint, absorption, longueur d'onde, ...etc.). Nous avons remarqué que pour 5% de concentration d'Azote, l'énergie de la bande interdite diminue jusqu'à 0.55 eV, ainsi que les énergies de quantification diminuent jusqu'à 0.2 eV avec la largeur de puits et l'augmentation d'Azote, nous avons aussi les énergies de transitions qui diminuent jusqu'à 0.86 eV, en outre le coefficient d'absorption augmente et il atteint la valeur $1.2 \mu\text{m}^{-1}$, ainsi nous avons eu une longueur d'onde incluse dans l'infrarouge proche, de l'ordre de 0.98 - 1.3 μm .

Les perspectives de ce travail sont nombreuses, nous pensons qu'une structure pareille vu ce qu'on a eu une énergie de gap de 0.55 eV, d'où des longueurs d'ondes l'ordre de 0.98 - 1.3 μm , peut être utilisée pour la transmission via les fibres optiques (émission laser pour $\lambda=1.3 \mu\text{m}$, pompage optique ou amplification pour $\lambda=0.98 \mu\text{m}$). En conclusion, dans la continuité de ces travaux, nous proposons d'analyser d'autres structures à base de nouveaux matériaux a fin d'avoir la longueur d'onde 1.55 μm et 2.3 μm respectivement pour la transmission en fibre optique et la détection de gaz.

Annexe

1. Tableau périodique

I											Alcalins					Halogènes					VIII
1 H											Alcalino-terreux					Gaz inertes					
	II											III	IV	V	VI	VII	2				
												5 B	6 C	7 N	8 O	9 F	10 Ne				
3 Li	4 Be											13 Al	14 Si	15 P	16 S	17 Cl	18 Ar				
11 Na	12 Mg	21 Sc	22 Ti	23 V	24 Cr	25 Mn	26 Fe	27 Co	28 Ni	29 Cu	30 Zn	31 Ga	32 Ge	33 As	34 Se	35 Br	36 Kr				
19 K	20 Ca	39 Y	40 Zr	41 Nb	42 Mo	43 Tc	44 Ru	45 Rh	46 Pd	47 Ag	48 Cd	49 In	50 Sn	51 Tl	52 Te	53 I	54 Xe				
37 Rb	38 Sr	72 Hf	73 Ta	74 W	75 Re	76 Os	77 Ir	78 Pt	79 Au	80 Hg	81 Tl	82 Pb	83 Bi	84 Po	85 At	86 Rn					
55 Cs	56 Ba	La	104 Rf	105 Db	106 Sg	107 Bh	108 Hs	109 Mt	110 Ds	111 Rg	112 Cn	113 Uut	114 Fl	115 Uup	116 Lv	117 Uus	118 Uuo				
87 Fr	88 Ra	Ac																			

57 La	58 Ce	59 Pr	60 Nd	61 Pm	62 Sm	63 Eu	64 Gd	65 Tb	66 Dy	67 Ho	68 Er	69 Tm	70 Yb	71 Lu
89 Ac	90 Th	91 Pa	92 U	93 Np	94 Pu	95 Am	96 Cm	97 Bk	98 Cf	99 Es	100 Fm	101 Md	102 No	103 Lr

Tableau A.1 Tableau périodique des éléments

2. L'Azote

L'Azote est un élément chimique, de symbole N (du latin *nitrogenium*) et de numéro atomique 7. Dans le langage courant, l'azote désigne le gaz diatomique diazote N₂, constituant majoritaire de l'atmosphère terrestre, représentant presque les 4/5^e de l'air (78,06 %, en volume). L'Azote est le 34^e élément constituant la croûte terrestre par ordre d'importance.

3. Propriétés chimiques

Numéro atomique	7
Masse atomique	14,0067 g.mol ⁻¹
Electronégativité de Pauling	3.0
Température de Fusion	-210 °C
Température d'ébullition	-195.8 °C
Rayon atomique (Van der Waals)	0,092 nm
Rayon ionique	0,171 nm (-3) ; 0,011 nm (+5) ; 0,016 nm (+3)
Isotopes	2
Configuration électronique	[He] 2d ² 2p ³
Energie de première ionisation	1402 kJ.mol ⁻¹
Energie de deuxième ionisation	2856 kJ.mol ⁻¹
Energie de troisième ionisation	4577 kJ.mol ⁻¹
Découverte :	En 1772 par Rutherford

Tableau A.2 propriétés chimiques

4. Caractéristique des matériaux massifs

Matériau	GaN	GaSb
Paramètre de maille(Å)	4.5	6.324
Eg (eV)	3.299	0.812
ac (eV)	-2.2	-7.5
av (eV)	-5.2	-0.8
Delta0 (eV)	0.017	0.76
déformation de cisaillement b (eV)	-2.2	-2
C11 (GPa)	293	884.2
C12 (GPa)	159	402.6
me (m0)	0.15	0.039
γ_1	2.67	13.4
γ_2	0.75	4.7
Nc (10^{19}cm^{-3}) à 300k	0.119	0.021
Nv (10^{19}cm^{-3}) à 300k	4.15	1.8

μ_n (cm ² .v ⁻¹ .s ⁻¹) à 300k	1000	5000
μ_p (cm ² .v ⁻¹ .s ⁻¹) à 300k	200	1000

Tableau A.3 Paramètres physiques fondamentaux des principaux binaires III-V.

5. Expression des paramètres

Pour les alliages ternaires ou quaternaires, les paramètres a , E_g , a_c , a_v , δ_0 , b , C_{11} , C_{12} , m_e , γ_1 , γ_2 , N_C , N_V , μ_n , μ_p sont déterminés à partir de la loi de Végard.

Pour déterminer les masses des trous lourds et des trous légers on utilise ces relations :

$$m_{hh} = \frac{1}{\gamma_1 - 2\gamma_2}$$

$$m_{lh} = \frac{1}{\gamma_1 + 2\gamma_2}$$

6. indice de réfraction dans le matériau massif :

Les coefficients de Sellmeier A, B, C, D et E pour les principaux binaires sont données dans le tableau ci-dessous :

Coefficients de Sellmeier	A	B	C	D	E
GaN	3.6	1.75	6.55	411	319
GaSb	13.095	0.75	16070	0.68	100

Tableau A.4 Coefficients de Sellmeier pour les principaux binaires III-V.

Bibliographie

- [1] H.Ghania : « Etude et modélisation d'un photodétecteur MSM à base de ZnO », thèse de doctorat, UNIVERSITE MENTOURI COSTANTINE.
- [2] DEPARTEMENT E.E.A : « Physique et technologie des composants de puissance », UNIVESITE DE BORDEAU 1, 2003.
- [3] A. Chovet & P. Masson : « Physique des semi-conducteurs », ECOLE POLYTECHNIQUE UNIVERSITAIRE DE MARSEILLE, 2004/2005.
- [4] Dehimi Said : « Etude de lasers à base des composés semi-conducteurs (InP, GaAs, GaP) », UNIVERSITE HAJD LAKHDER BATNA, 2011.
- [5] <http://www.polytech-lille.fr/cours-transistor-effet-champ/hemt/Hemtc1b.htm>.
- [6] Damien Bordel : « Développement de nouveaux substrats complints pour l'heteroepitaxie de semi-conducteurs », ECOLE CENTRALE DE LYON, thèse de doctorat, 2007.
- [7] Salmi Ahmed : « Etude et simulation d'une structure à base de GaNAsSb/GaAs pour le photovoltaïque », Mémoire de projet fin d'étude, UNIVERSITE DE BLIDA, 2014.
- [8] Romain Dujardin : « Epitaxie par jets moléculaires de nanostructures isolées de germanium et silicium », thèse de doctorat, UNIVERSITE DE JOSEPH FOURIER DE GRENOBELE, 11 décembre 2006.
- [9] Ali Lanacer : « Etude des propriétés optiques de puits quantiques contraints ultra-minces d'InAs/InP », UNIVERSITE DE MONTEREAL, thèse de philosophie doctorat, 2006.

[10] Bestam Rachid : « Modélisation et simulation d'une structure à base de semi-conducteur III-V pour le photovoltaïque », Mémoire de magister, UNIVERSITE DE SAAD DAHLEB DE BLIDA, 2011.

[11] A. Aissat, S. Nacer, M.El Bey, K. Ferjani : « Gain optique d'un laser a puits quantique contraint à base de GaInNAs/GaAs », LASICOM LABORATORY UNIVERSITY SAAD DAHLAB, BP270 BLIDA ALGERIA, 4th International Conference : Sciences of Electronic, Technologies of Information and Telecommunications, March 25-29, 2007 – Tunisia.

[12] A.Aissat, B.Alshehri, S. Nacer, J.P. Vilcot : « Theoretical investigation of GaAsNBi/GaAs materials for optoelectronic applications », Materials Science in Semiconductor Processing, 2015.

[13] B.Mouna : « Etude des matériaux semi-conducteurs III-V et application à la conversion photovoltaïque », mémoire de magistère, UNIVERSITE COLONEL HADJ LAKHDAR BATNA (ALGERIE), 2007.

[14] Alice Sinatra : « Introduction à la mécanique quantique », septembre 2008.

[15] A.MOKHTAROVA : « Puits quantique de composés Nitrures InGaN/GaN pour le photovoltaïque », Thèse de doctorat, physique/Nano physique, 2016, Université de Grenoble.