

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 حليب 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

LEKHAL MAHMOUD Fouzia

&

KOUACHI Wardia

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

Thème

Etude et simulation des multi-puits quantiques et super-réseaux à base de InAs/GaAs

Proposé par : Mr NACER SAID

Année Universitaire 2014-2015

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 aidée et soutenue.

Nous voudrions tous d'abord exprimer nos remerciements les plus sincères à notre encadreur, M^r NACER SAID, qui nous a beaucoup aidés dans notre 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.

Nous remercions aussi tous nos professeurs qui nous ont soutenus durant notre formation à l'université USDB

Enfin, Nous remercions également nos amis pour leurs aides et toutes les personnes qui nous ont aidées de près ou de loin à réaliser ce travail.

Merci 

Dédicace

A

Ma très chère mère

Mon très cher et regretté père

Mes chers frère et sœurs

Toute ma famille

Mon encadreur

Ma binôme

Tous mes collègues et mes amis

Tous ceux que j'aime

le. wardia

Je dédie ce modeste travail

*À Celle à qui mon cœur depuis sa naissance n'a pas pu éprouver
Qu'à amour et reconnaissance, à celle qui a donné un sens à mon
existence*

En m'offrant une éducation digne de confiance

À ma chère Mère.

*À mon père, pour son amour et son soutien moral depuis mon
enfance.*

Père merci.

À la mémoire de mes chers grands parents

À tous mes frères et mes sœurs

Ma binôme

Tous mes collègues et mes amis

À tous les membres de ma famille ...

À tous ceux qui m'aiment et que j'aime.

L. Fouzia

ملخص:

يركز هذا العمل على دراسة ومحاكاة بنية متعددة الآبار الكمومية و الشبكات الكبرى؛ على اساس GaAs/InAs/GaAs
أولا أخذنا بعين الاعتبار بئر كمومي بسيط، قمنا بتحديد الطاقة الكمومية داخل البئر بدلالة عرض البئر وعارضة
الكمون ثم أخذنا بعين الاعتبار شبكة كبرى.
النوع المستعمل في المحاكاة هو Kronig-Penney.
ثم حددنا تأثير عرض والفصل بين الآبار وكذلك عارضة الكمون على موقع وعرض الشرائط الصغيرة.
كلمات المفاتيح: بئر الكم؛ متعددة الآبار الكمومية ؛ الشبكات الكبرى، Kronig-Penney.

Résumé : Ce travail porte sur l'étude et la simulation d'une structure à multi-puits quantiques et super-réseaux à base de GaAs/InAs/GaAs. En Premier lieu, nous avons considéré un puits quantique simple. Les énergies de quantification dans le puits en fonction de la largeur du puits et de la barrière de potentiel ont été déterminées. Ensuite, nous avons considéré un super-réseau. Le modèle utilisé dans les simulations est le modèle de Kronig-Penney. L'influence de la largeur et de la séparation entre les puits ainsi que la barrière de potentiel sur la position et la largeur des mini-bandes ont été déterminée.

Mots clés : puits quantique ; multi-puits quantiques ; super-réseau ; modèle de kronig-penney.

Abstract: This work focuses on the study and simulation of a structure of multi-quantum wells and super-networks based on GaAs/InAs/GaAs. At first, we have seen a simple quantum well. The energies of quantification in the wells as a function of the width of the wells and the barrier of potential were determined. Then, we have considered a super-network. The model used in the simulations is the Kronig-Penney model. The influence of the width and the separation between the wells as well as the barrier of potential on the position and width of mini-bands was determined.

Key words: multi-quantum wells, super-network , kronig-penney

Listes des acronymes et abréviations

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.

L_1 : largeur de puits quantique.

L_2 : largeur de la barrière.

V_0 : barrière de potentiel du puits quantique.

n : nombre quantique.

E_c : bande de conduction.

E_v : bande de valence.

E : énergie de quantification.

E_g : gap d'énergie.

E_e : énergie de quantification des électrons.

E_h : énergie de quantification des trous.

E_n : Valeurs propres de l'énergie de quantification.

λ : longueur d'onde de « De Broglie ».

Table des matières

Introduction générale.....	1
Chapitre1 Généralités sur les semi-conducteurs.....	4
1.1Introduction	4
1.2 Définition d'un Semi-conducteur.....	5
1.3 Les semi-conducteur III -V	6
1.3.1 Les composés binaires.....	6
1.3.2 Les alliages.....	7
1.3.3Les structures cristallines.....	8
1.3.4 Réseau réciproque et zone de Brillouin.....	8
1.4Structure des bandes d'énergies.....	9
1.5 Gap direct et gap indirect	12
1.5.1 Semi-conducteurs à gap direct.....	12
1.5.2 Semi-conducteurs à gap indirect.....	12
1.6 Paramètre de maille	12
1.7 Caractéristiques des matériaux InAs et GaAs.....	13
1.8 Les hétérostructures à puits quantiques.....	13
1.8.1Hétérostructure type I	14
1.8.2 Hétérostructure type II.....	15
1.9 Hétérostructure simple puits, double puits,multi-puits et super-réseaux.....	16
1.9.1Hétérostructure à simple puits quantique.....	17

1.9.2 Hétérostructure à double puits quantique.....	18
1.9.3 Hétérostructure à multi-puits quantiques	19
1.9.4 Super-réseau.....	20
1.10 Les effets quantiques dans les hétérostructures InAs/GaAs.....	21
1.10.1 Confinement quantique.....	21
1.10.2 Confinement sur 0 dimension.....	21
1.10.3 Confinement sur une dimension.....	21
1.10.4 Confinement sur deux dimensions.....	22
1.10.5 Confinement sur trois dimensions	22
1.11 Les techniques de croissance des multi-puits quantiques par épitaxie.....	23
1.12 Conclusion.....	24
Chapitre 2 théories des puits quantiques.....	25
2.1 Introduction.....	25
2.2 Notion de puits quantique.....	25
2.2.1 Conditions d'obtention de l'effet quantique.....	25
2.2.2 Les puits quantiques.....	26
2.2.3 L'équation de Schrödinger dans un puits quantique.....	27
2.2.4 Puits de profondeur infinie.....	27
2.2.5 Probabilité de présence dans le puits.....	30
2.2.6 Puits quantique de profondeur fini	32
2.3 Les super-réseaux.....	34
2.4 Conclusion.....	38

Chapitre 3 résultats de simulation	39
3.2 Introduction	39
3.2 Calcul de l'énergie de quantification	40
3.3 Étude du puits quantique isolé.....	42
a-Energies de quantification dans la bande de conduction.....	42
b-Probabilité de présence dans la bande de conduction	43
3.4 Étude du super-réseau.....	45
a- Les mini-bandes d'énergie	45
b- Probabilité de présence.....	46
c- Première bande d'énergie.....	47
d- Deuxième mini-bande d'énergie.....	50
3.5 Conclusion	53
Conclusion générale.....	54

Liste des figures

Chapitre 1 Généralités sur les semi-conducteurs.....	4
<i>Figure 1.1</i> Diagrammes énergétiques pour les trois types des matériaux.....	5
<i>Figure 1.2</i> maille cristallographique de structure zinc blend.....	8
<i>Figure 1.3</i> Structure zinc blende (plan (100)).....	8
<i>Figure 1.4</i> Première zone de Brillouin de la structure zinc blende.....	9
<i>Figure 1.5.a</i> Structure de bande du GaAs.....	10
<i>Figure 1.5.b</i> Structure de bande du GaP.....	10
<i>Figure 1.5.c</i> Structure de bande de l'InP.....	10
<i>Figure 1.6</i> Diagramme des bandes d'énergie des semi-conducteurs.....	11
Figure 1.7 Structure de bande schématique d'un semi-conducteur à gap direct (a) et à gap indirect (b)	12
<i>Figure 1.8</i> Evolution du paramètre de maille cristalline et d'énergie de bande des alliages composés III-V et II-VI.	13
<i>Figure 1.9</i> Couche d'un matériau semi-conducteur A possédant un gap supérieur à celui du matériau semi-conducteur B.....	14
<i>Figure 1.10</i> Hétéro structure de type I.....	15
<i>Figure 1.11</i> Hétéro structure de type II.....	15
<i>Figure 1.12</i> hétérostructure a simple puits quantique.....	17
<i>Figure 1.13</i> hétérostructures à double puits quantique découplés (a) et couplés (b).....	18
<i>Figure 1.14</i> hétérostructure a multi-puits quantiques avec 3 puits et 4 barrières.....	19

<i>Figure 1.15</i> super-réseau montrant l'élargissement des niveaux d'énergies fondamentaux en « mini bandes »	20
<i>Figure 1.16</i> Divers types de confinements.....	22
<i>Figure 1.17</i> Schéma de l'épitaxie par jet moléculaire (MBE).....	23
Chapitre 2 théories des puits quantiques.....	25
<i>Figure 2.1</i> Puits de profondeur infinie.....	27
<i>Figure 2.2</i> fonctions d'onde dans un puits de potentiel infini.....	29
<i>Figure 2.3</i> Fonction d'onde et probabilité de présence de la particule dans l'état excité (n=2).....	31
<i>Figure 2.4</i> puits de potentiel à profondeur finie.....	32
<i>Figure 2.5</i> Maille élémentaire du super-réseau, Les épaisseurs de couche des semi-conducteurs SC ₁ et SC ₂ sont L ₁ et L ₂	35
<i>Figure 3.6</i> les bandes d'énergie.....	38
Chapitre 3 simulations et résultats.....	39
<i>Figure 3.1</i> Maille élémentaire du super-réseau.....	39
<i>Figure 3.2</i> Organigramme du calcul de l'énergie de quantification dans le puits quantique et le super-réseau.....	41
<i>Figure 3.3</i> Energie de quantification des cinq premiers niveaux des électrons en fonction de la largeur de puits.....	42
<i>Figure 3.4</i> Energie de quantification des électrons en fonction de la barrière de potentiel V ₀ , pour L ₁ =10nm, n=0.....	43
<i>Figure 3.5</i> la densité de probabilité de présence des électrons dans le puits pour le le niveau fondamental (n=1, L ₁ =10nm).....	44
<i>Figure 3.6</i> la densité de probabilité de présence relative des électrons dans le puits pour le niveau excité (n=2, L ₁ =10nm).....	44

<i>Figure 3.7</i> la densité de probabilité de présence relative des électrons dans le puits pour le niveau excité ($n=3$) ($L_1=10\text{nm}$).....	45
<i>Figure 3.8</i> Les mini-bandes d'énergie dans une structure super-réseau en fonction du vecteur d'onde pour $L_1=2\text{nm}$ et $L_2=2\text{nm}$	46
<i>Figure 3.9</i> la densité de probabilité de présence des électrons du superréseau pour $L_1=2\text{nm}$ et $L_2=2\text{nm}$	46
<i>Figure 3.10</i> Evolution de la largeur de la première mini-bande d'énergie $\Delta E_1(\text{eV})$ en fonction de la largeur du puits quantique L_1 et la largeur de barrière L_2	47
<i>Figure 3.11</i> Evolution de la position de la première bande d'énergie $E_1(\text{eV})$ en fonction de la largeur de puits et la largeur de barrière.....	48
<i>Figure 3.12</i> évolution de la largeur de la première mini-bande d'énergie, en fonction de la barrière de potentiel V_0 pour $L_1=3\text{nm}$ et $L_2=5\text{nm}$	49
<i>Figure 3.13</i> Evolution de la position de la première mini-bande d'énergie en fonction de la barrière de potentiel V_0 . $L_1=3\text{nm}$ et $L_2=5\text{nm}$	49
<i>Figure 3.14</i> Evolution de la largeur de la deuxième mini-bande d'énergie $\Delta E_2(\text{eV})$ en fonction de la largeur du puits quantique L_1 et la largeur de barrière L_2	50
<i>Figure 3.15</i> Evolution de la position de la deuxième mini-bande d'énergie $E_2(\text{eV})$ en fonction de la largeur de puits et la largeur de barrière.....	51
<i>Figure 3.16</i> évolution de la largeur de la deuxième mini- bande d'énergie, en fonction de la de la barrière de potentiel pour $L_1=3\text{nm}$ et $L_2=5\text{nm}$	52
<i>Figure 3.17</i> Evolution de la position de la deuxième mini-bande d'énergie en fonction de la barrière de potentiel V_0	53

Liste de tableaux

Tableau 1.1 Extrait de la classification périodique des éléments.....	6
Tableau 1.2 paramètres des principaux composés binaires III-V à 300 K.....	7

Introduction générale

L'électronique occupe une place prépondérante dans la société contemporaine et ses multiples usages ont un impact considérable sur la vie quotidienne. En raison des avancées technologiques impressionnantes qui sont réalisées dans les secteurs de la microélectronique et de l'optoélectronique, les performances demandées aux matériaux deviennent chaque jour plus pointues. Par nature, l'industrie microélectronique est extrêmement exigeante sur le plan de la qualité des produits élaborés, puisque le moindre défaut de fabrication peut altérer considérablement les caractéristiques et donc les propriétés des produits finaux. L'étude détaillée du lien existant entre les conditions d'élaboration et les propriétés finales des couches minces présente un intérêt scientifique et technologique considérable [1].

Au cours des vingt dernières années, les chercheurs ont appris à structurer la matière à l'échelle du nanomètre, en particulier pour les besoins de l'optoélectronique. Rappelons qu'un nanomètre, c'est un milliardième de mètre, c'est à dire cinquante mille fois plus petit que le diamètre d'un cheveu. On parle donc ici d'une échelle extrêmement petite, de l'ordre de quelques distances interatomiques au sein des molécules ou des corps solides. A l'échelle du nanomètre, les propriétés physiques sont très différentes de celles qui sont observables dans notre monde macroscopique et sont gouvernées pour l'essentiel par la mécanique quantique [2].

Les dispositifs électroniques à semi-conducteurs, de par leurs importances économiques et stratégiques pour le traitement de l'information et de la communication ont un rôle primordial pour la réalisation et le fonctionnement de biens de consommation. Le domaine des systèmes de dimensions nanométriques

prépare l'électronique du futur. En effet, l'évolution de l'industrie microélectronique rencontre des défis technologiques et physiques nouveaux lorsqu'on descend à des dimensions inférieures à la centaine de nanomètres d'épaisseur. C'est d'ailleurs, Richard Feynman qui a signé l'acte de naissance des nano sciences, il déclara en effet qu'il n'y avait aucune raison fondamentale qui empêche des manipulations de la matière contrôlées à l'échelle de l'atome et de la molécule. Vingt et une année après, est construit par Eigler le premier objet atome par atome à l'aide du microscope à effet Tunnel. Certes, le puits quantique, formé par une couche mince semi-conductrice d'épaisseur nanométrique, est très communément employé depuis plus de 20 ans pour fabriquer des composants très performants comme les multi-puits quantique et les super- réseaux [3].

Depuis deux ou trois décennies, de nouvelles méthodes de synthèse des matériaux utilisés dans les composants semi-conducteurs ont émergé. Ces techniques, qui utilisent l'épitaxie par jets moléculaires, permettent de réaliser des structures cristallines de très petite épaisseur monocouche atomique par monocouche atomique.

En 1970, Léo Esaki et Raphaël Tsu ont proposé la réalisation de super-réseaux dont la périodicité est contrôlée artificiellement au cours de l'épitaxie [4].

Les dispositifs à base de multi-puits quantiques et super-réseau 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, et d'autres appareils de communication et font partie des applications que nous rencontrons dans la vie courante.

L'objectif de ce travail est l'étude et la simulation de la structure d'un multi-puits quantique et super-réseau à base de InAs /GaAs, et ceci dans le but d'utiliser ces structures pour la réalisation des transports non-linéaires des lasers en cascade et des photo-détecteurs infrarouges.

Notre 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, en suite nous présentons les hétérostructures simples puits, double puits, multi-puits et super-réseau.

Dans le deuxième chapitre, nous étudions théoriquement une structure à multi-puits quantique. On rappelle en premier lieu les conditions nécessaires à l'apparition du phénomène de quantification d'énergie, après nous présentons un calcul théorique des niveaux d'énergie associés aux particules confinées dans le modèle du multi-puits quantique.

Dans le troisième chapitre, nous abordons la partie simulation. Les énergies de quantification, la probabilité de présence des porteurs du puits et multi-puits quantiques, seront calculées.

Enfin, nous terminons ce mémoire par une conclusion générale et perspective.

Chapitre 1 Généralités sur les semi-conducteurs

1.1 Introduction

Le monde des semi-conducteurs est dominé, en termes de marché, par le silicium. Ce dernier a été l'un des premiers matériaux utilisés (avec le germanium) pour fabriquer des composants électroniques.

Dans les années 1960, une nouvelle famille est apparue, celle des matériaux III-V comme les alliages binaires comme leGaAs, ternaires comme leInGaP, quaternaires comme leAlGaAsP.

Les composants fabriqués à partir de ces semi-conducteurs, surtout les composés binaires commeGaAs qui ont des propriétés physiques remarquables, jouent un rôle majeur dans les applications dans le domaine de l'optoélectronique et la microélectronique.

En général, les composés semi-conducteurs binaires sont considérés comme une classe importante des matériaux et cela grâce à l'ajustement de leur paramètre de réseau, du gap énergétique, des constantes optiques et diélectriques qui sont des paramètres importants et jouent un rôle important dans les composants optoélectroniques.

Une connaissance précise de la structure de bandes du matériau étudié est nécessaire pour l'évaluation de son domaine d'application .Les transitions directes (l'absorption, l'émission spontanée et l'émission stimulée d'un photon) et les transitions indirectes en fonction de la composition sont particulièrement d'une importance principale pour l'étude et la fabrication des composants optoélectronique bien désirés [5].

1.2 Définition d'un semi- conducteur

Les semi-conducteurs sont des corps solides dont la conductivité électrique se situe entre celle des métaux et celle des isolants. Ils sont isolants s'ils sont purs et au zéro absolu, et leurs conductivité électrique augmente avec la température, et elle est sensible aux impuretés ou aux différents types de défauts [2].

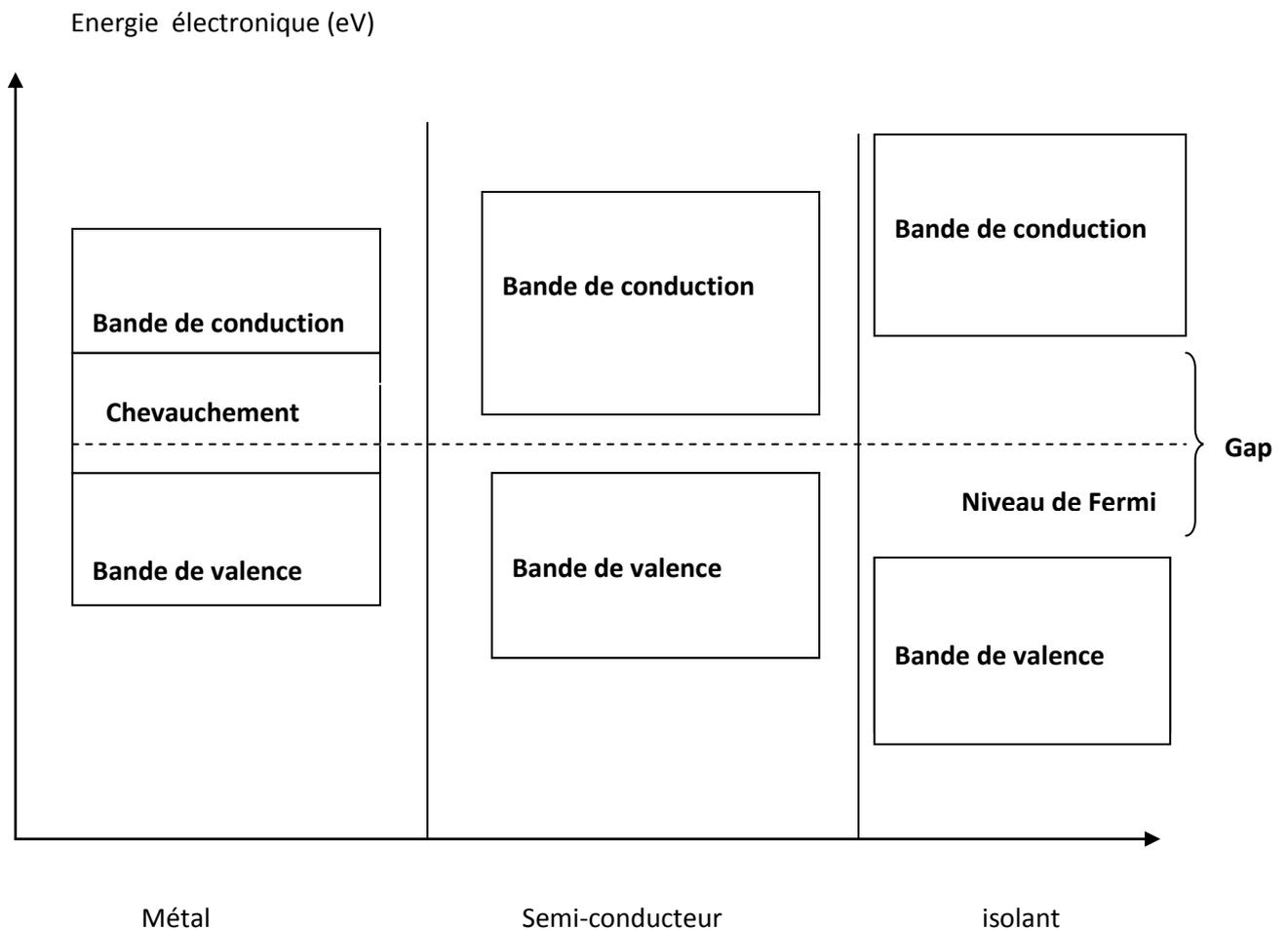


Figure1.1 Diagrammes énergétiques pour les trois types des matériaux.

1.3 Les semi-conducteurs III-V

Les matériaux semi-conducteurs III-V sont des corps composés formés à partir d'un élément de la colonne III et d'un élément de la colonne V de la classification périodique de Mendeliev. Le tableau (1.1) regroupe un extrait de cette classification (les chiffres en haut et bas représentent respectivement le nombre atomique et la masse atomique). Ainsi de nombreux composés binaires peuvent être réalisés [6].

III	IV	V
$^{10.81}_{5}\text{B}$	$^{12.01}_{6}\text{C}$	$^{14.01}_{7}\text{N}$
$^{26.98}_{13}\text{Al}$	$^{28.09}_{14}\text{Si}$	$^{30.97}_{15}\text{P}$
$^{69.74}_{31}\text{Ga}$	$^{72.59}_{32}\text{Ge}$	$^{74.92}_{33}\text{As}$
$^{114.82}_{49}\text{In}$	$^{118.69}_{50}\text{Sn}$	$^{121.75}_{51}\text{Sb}$

Tableau 1.1 Extrait de la classification périodique des éléments.

1.3.1 Les composés binaires

Parmi tous les composés binaires possibles, tous n'ont pas le même intérêt potentiel. L'étude de leurs propriétés, et en particulier de la structure de bandes montre que les éléments les plus légers donnent des composés dont lesquels la bande interdite est large et indirecte, et la masse effective des électrons est élevée.

Les composés contenant du bore, de l'aluminium ou de l'azote entrent dans cette catégorie; ils ont en général peu d'intérêt pour l'électronique rapide, qui demande des semi-conducteurs à forte mobilité de porteurs ou pour l'optoélectronique ou une structure de bande directe est nécessaire pour que les transitions optiques soient efficaces. A l'autre extrémité, les éléments lourds comme le thallium ou le bismuth donnent des composés à base de Gallium (GaAs, GaSb) ou

d'indium (InP, InAs, InSb) dont les propriétés sont les plus intéressantes. Le tableau (1.2) résume quelques paramètres pour différents matériaux de la famille III-V [7].

Composé III-V	Eg (ev)	m^*/m_0	μ (cm ² /VS)	a (Å)
GaN	3.36	0.19	380	3.189
GaP	2.26	0.82	1105	5.4512
GaAs	1.42	0.067	8500	5.6533
InP	1.35	0.077	4600	5.8686
InAs	0.36	0.023	33000	6.0584
InSb	0.17	0.0145	80000	6.4794

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

1.3.2 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 [8].

1.3.3 Les structures cristallines

La plupart des matériaux III-V se cristallisent dans la structure sphalérite dite "Zinc Blende" présentée sur la figure (1.2). Cette structure, qui s'apparente à celle du diamant, est constituée de deux sous-réseaux cubiques à faces centrées, l'un étant constitué des atomes de l'élément III, l'autre des atomes de l'élément V, Ces deux sous-réseaux sont décalés l'un par rapport à l'autre le long de la diagonale du cube, d'une quantité $(a / 4, a/4 , a/4)$, a étant le paramètre cristallin, c'est-à dire la longueur de l'arête du cube élémentaire [6].

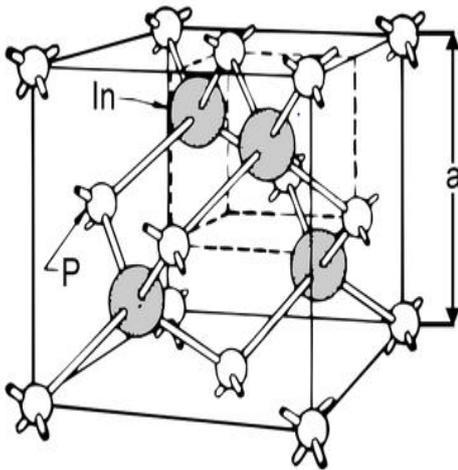


Figure 1.2 maille cristallographique de structure Zinc Blende.

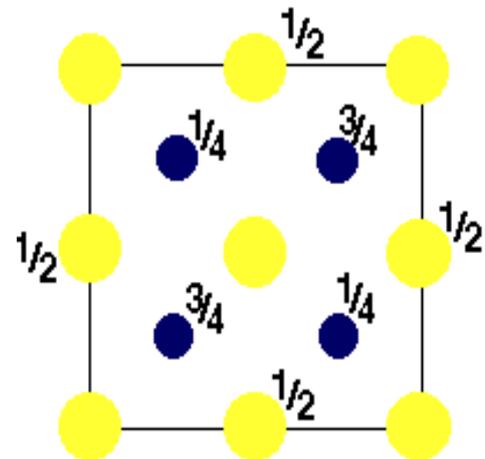


Figure 1.3 Structure zinc blende (plan (100)).

1.3.4 Réseau réciproque et zone de Brillouin

Le réseau réciproque est défini à partir du réseau cristallin direct, il est le système de coordonnées [énergie - vecteur d'onde] dans lequel on représente la variation de l'énergie des états électroniques en fonction du vecteur d'onde k caractérisant la propagation de l'onde considérée. En effet, le réseau réciproque associé à la structure cristalline de type zinc-blende est cubique centré. Sa maille

élémentaire, qui correspond à la première zone de Brillouin a la forme d'un octaèdre tronqué par les six faces d'un cube, elle est représentée sur la figure ci-dessous [9] :

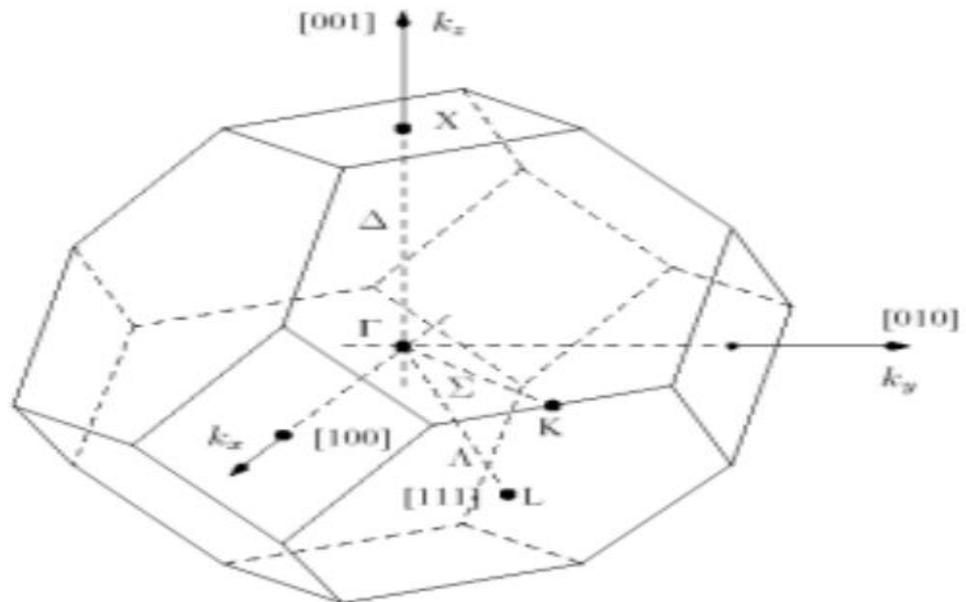


Figure 1.4 Première zone de Brillouin de la structure zinc blende.

Avec :

Point Γ : centre de zone.

Direction Δ : direction $[1\ 0\ 0]$ et équivalentes.

Direction Λ : direction $[1\ 1\ 1]$ et équivalentes.

Direction Σ : direction $[1\ 1\ 0]$ et équivalentes.

Point X : bord (limite) de la zone dans la direction $[1\ 1\ 0]$.

Point L : bord de la zone dans la direction $[1\ 1\ 1]$.

1.4 Structure des bandes d'énergies

Les bandes d'énergie donnent les états d'énergie possibles pour les électrons en fonction de leurs vecteurs d'onde k . On les représente donc dans l'espace réciproque, et pour simplifier, dans les directions de plus hautes symétries et en se limitant à la première zone de Brillouin. La structure des bandes dans les

composés III-V est représentée dans les figures (1.5.a) et (1.5.b) et (1.5.c) avec un exemple pour le GaAs, le GaP et l'InP.

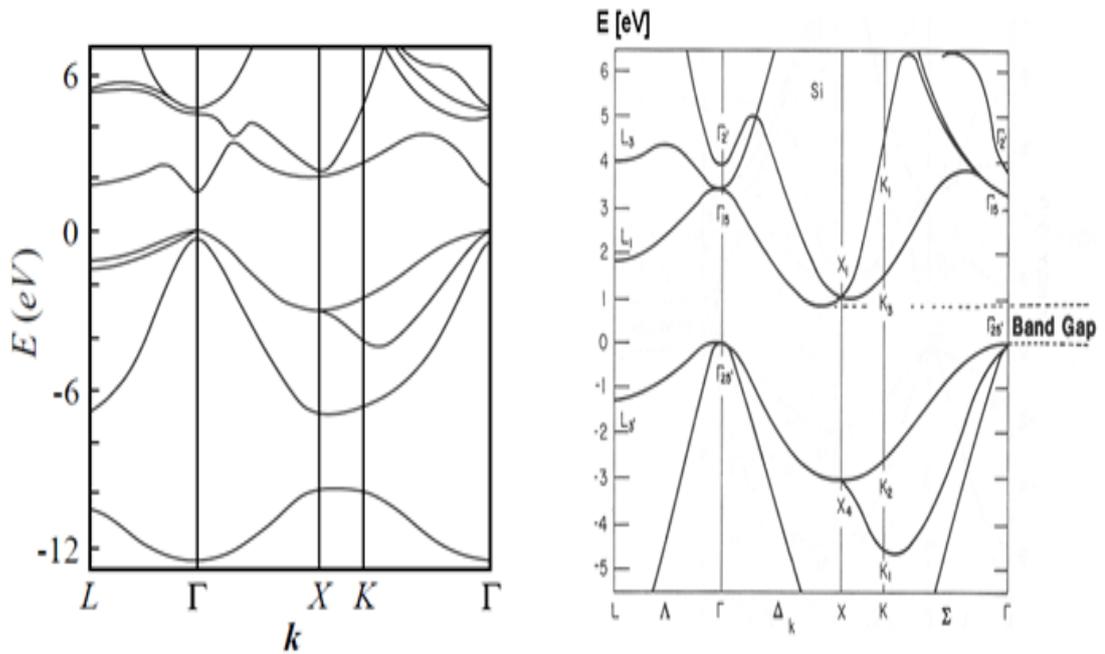


Figure 1.5.a Structure de bande du GaAs

Figure 1.5.b Structure de bande du GaP

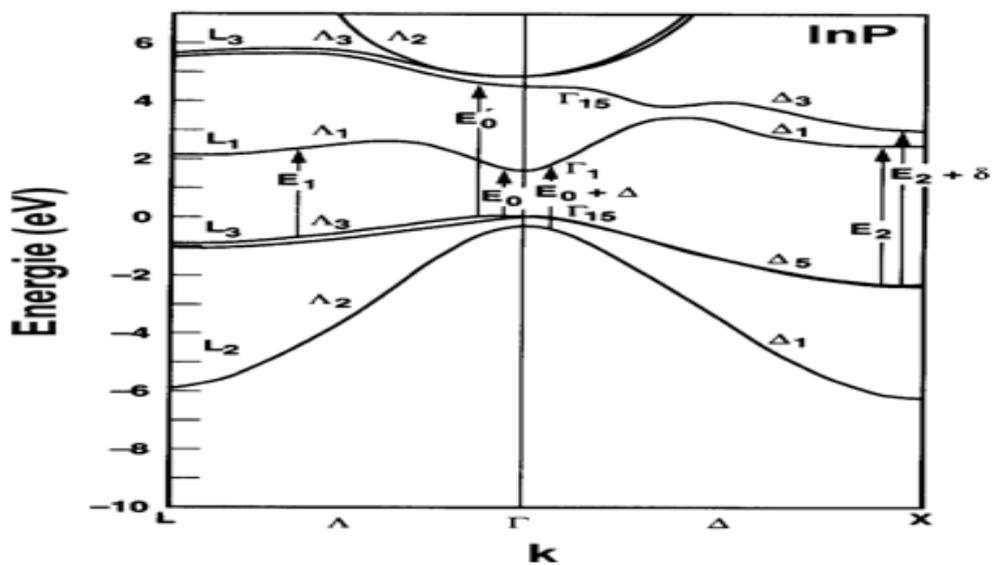


Figure 1.5.c Structure de bande de l'InP.

Dans un corps solide, deux bandes sont particulièrement importantes pour la compréhension des phénomènes de conduction : la bande de conduction et la bande de valence. La bande de conduction représente les énergies des électrons libres, dans la bande de valence se situent les électrons liés avec le réseau cristallin(Figure1.6).

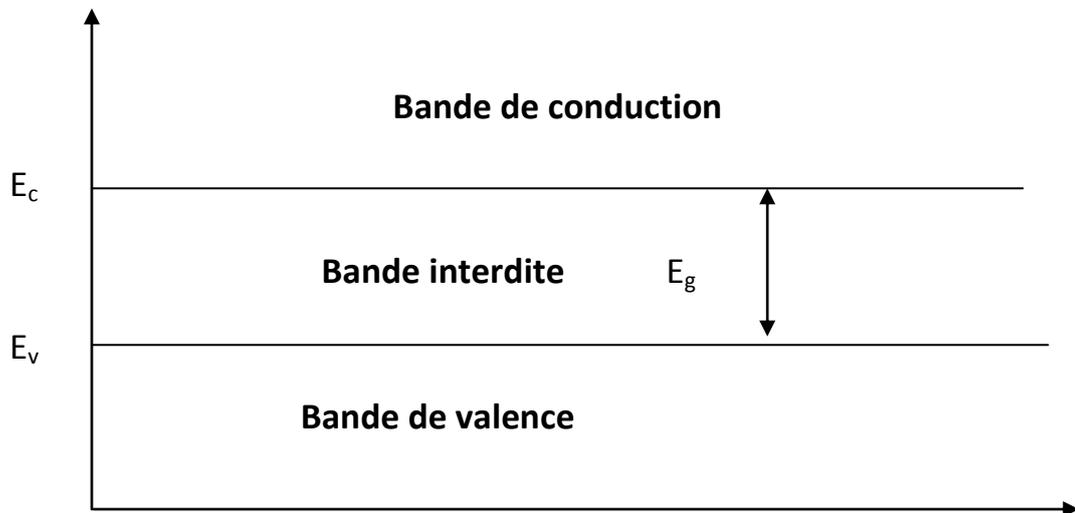


Figure1.6 Diagramme des bandes d'énergie des semi-conducteurs.

Les bandes sont séparées par une zone énergétique interdite : c'est la plage des énergies que les électrons ne peuvent pas posséder. Cette zone s'appelle gap énergétique. C'est un paramètre propre du matériau. Ainsi , les électrons peuvent passer directement de la bande de valence vers la bande de conduction, pour cela il faut qu'ils acquièrent une énergie égale au moins à la largeur du gap. Il y a différents mécanismes par lesquels les électrons peuvent recevoir de l'énergie. Le plus courant est un échauffement : plus la température d'un corps est élevée, plus d'énergie possèdent les électrons, plus ils ont de chances de franchir le gap [10].

1.5 Gap direct et gap indirect

1.5.1 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 . L'électron peut passer de la bande de conduction (BC) vers la bande de valence (BV) sans changer de vecteur k . Figure (1.7.a).

1.5.2 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 conduction vers la bande de valence en changeant le vecteur d'onde k . Figure (1.7.b) [11].

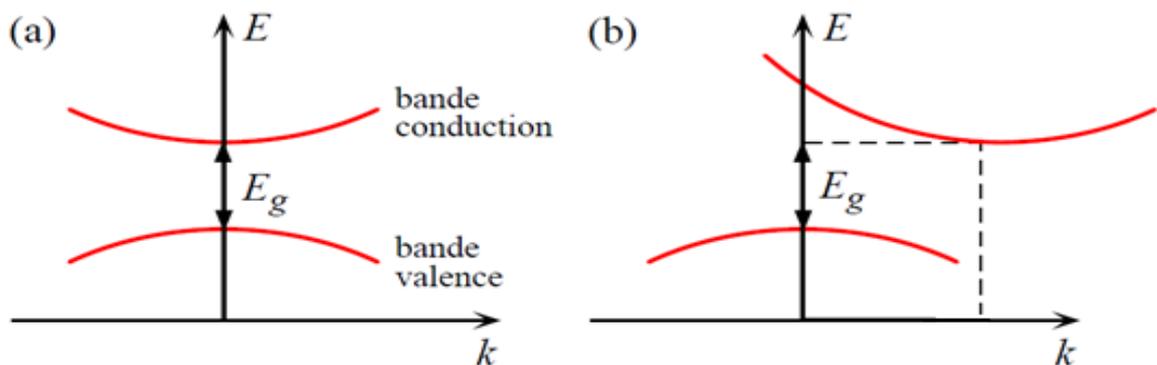


Figure 1.7 Structure de bande schématique d'un semi-conducteur à gap direct **(a)** et à gap indirect **(b)**.

1.6 Paramètre de maille

Le paramètre de maille définit la distance entre les atomes dans les réseaux cristallins. C'est un indicateur de compatibilité structurelle entre différents matériaux.

L'adaptation de la constante de maille est importante pour la croissance de couches minces d'un matériau sur l'autre. Lorsque les deux constantes sont trop différentes, la couche subira des contraintes provoquant les défauts cristallins dans les couches épitaxiales [12].

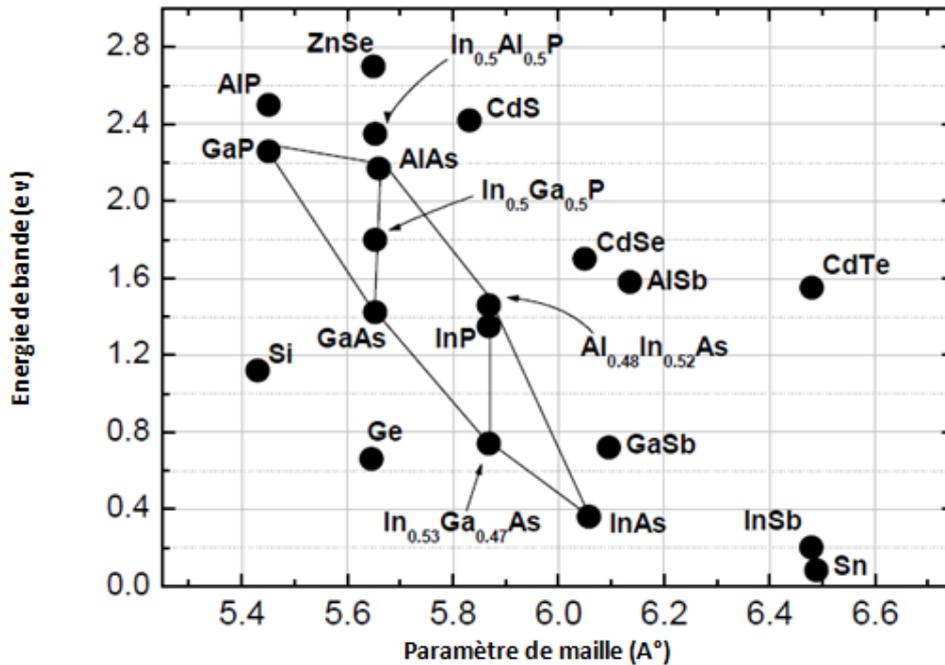


Figure 1.8 Evolution du paramètre de maille cristalline et d'énergie de bande des alliages composés III-V et II-VI.

1.7 Caractéristiques des matériaux GaAs et InAs

L'arséniure de galium et l'arséniure d'indium sont les matériaux les plus importants et les plus technologiquement étudiés en optoélectronique, ce sont des matériaux semi-conducteurs III-V à gap direct, cristallisant généralement selon la structure zinc-blende.

1.8 Hétéro structures à puits quantiques

A ce jour, la maîtrise avancée de nombreuses techniques de croissance, a permis la réalisation des structures à puits quantiques, qui découlent des hétéro structures utilisées en optoélectronique depuis les années soixante. Dans un dispositif optoélectronique à semi-conducteur, les recombinaisons radiatives ont lieu dans la région active; dans une hétéro structure cette région est formée d'un matériau qui diffère d'au moins une des deux barrières qui l'entourent. La configuration optimale

consiste à placer la région active entre deux matériaux de bande interdite plus élevée et d'indice de réfraction plus faible, ainsi la discontinuité des énergies de gap crée un piège de potentiel pour les porteurs de charges, et les confine dans cette région, tandis que la différence d'indice y confine les photons [13].

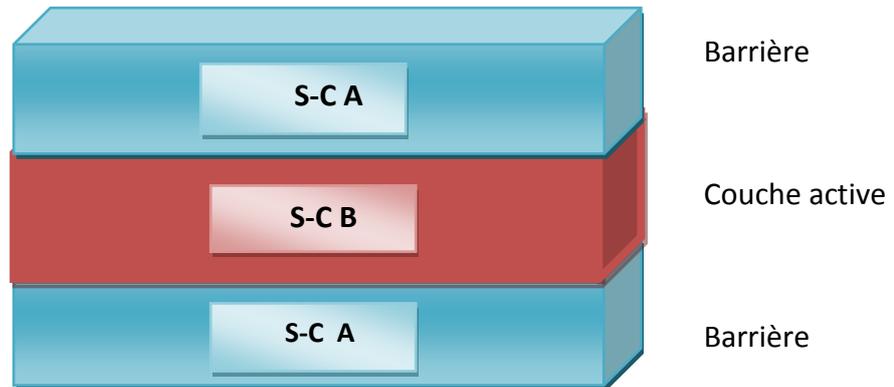


Figure 1.9 Couche d'un matériau semi-conducteur A possédant un gap supérieur à celui du matériau semi-conducteur B.

Selon la nature de la discontinuité de bandes interdites à l'interface puits-barrière, on distingue deux types d'hétéro structure : hétéro structure de type-I et hétéro structure de type-II.

1.8.1 Hétéro structure type I

Elle est représentée sur la figure (1.10) Les extrema des bandes de valence et de conduction sont situés dans la même région de l'espace. Si des porteurs sont injectés dans la structure, ces porteurs sont confinés dans le puits de potentiel que constituent ces extrema des bandes, les électrons et les trous sont piégés dans le même matériau, leurs recombinaisons sont importantes. L'énergie du photon dépend des énergies de confinement des porteurs et du gap du matériau du puits.

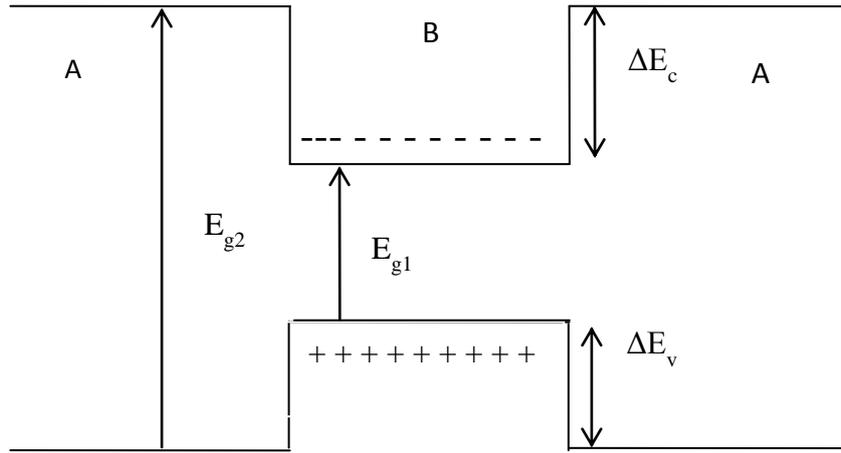


Figure 1.10 Hétéro structure de type I

1.8.2 Hétéro structures type II

Elle est représentée sur la figure (1.11) Les extrema des bandes de valence et de conduction sont spatialement séparés .L'alignement de bande appelé type II confine les électrons dans le puits et les trous dans la barrière de potentiel. Dans ce cas, l'énergie du photon est fonction des énergies de confinements des porteurs mais aussi des gaps des deux matériaux formant l'hétérostructure [3].

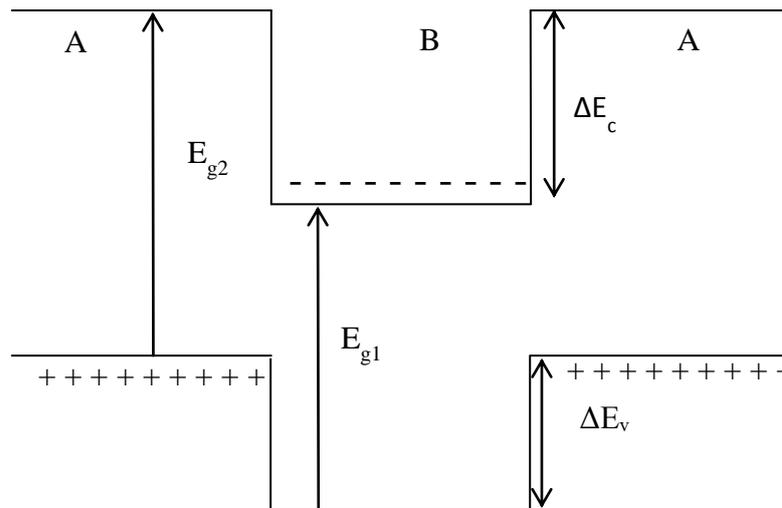


Figure 1.11 Hétéro structure de type II

1.9 Hétérostructures simple puits, double puits, multi-puits et super-réseaux

Comme nous l'avons vu au précédemment, les hétérostructures sont de 2 types différents en ce qui concerne les couches de confinement des électrons et des trous.

Les hétérostructures peuvent être également différentes par le nombre de puits et de barrières mise en jeu.

On distingue les hétéro structures les plus simples qui ne font intervenir qu'un seul puits quantique et donc deux barrières de potentiel .On les appelle hétéro structure à simple puits quantique (**SQW** pour l'anglais Single Quantum Well).

On cite également les hétérostructures qui font intervenir plusieurs puits dont la plus simple est l'hétérostructure à double puits quantiques (**DQW** pour l'anglais Double Quantum Well).

Les hétérostructures qui font intervenir 3 puits quantiques et plus sont classifiées dans le terme générique : hétérostructures a multi-puits quantiques (**MQW** pour anglais Multiple Quantum Well).

Enfin, les hétérostructures a multi-puits quantiques qui deviennent des Hétérostructures a super-réseaux lorsque de plus,elles vérifient les conditions supplémentaires suivantes :

1. Les barrières sont suffisamment fines pour permettre un fort couplage entre les différents puits et un élargissement des niveaux confinés en bandes d'énergie.
2. Les largeurs de barrières et de puits sont telles qu'elles vérifient des conditions de périodicité parfaite.

1.9.1 Hétérostructures à Simple Puits Quantique

Ces hétérostructures sont formées par un matériau qui joue le rôle du puits quantique qui confine les porteurs de charges : les électrons et les trous, et un autre matériau qui joue le rôle de barrières de part et d'autre de ce puits quantique.

En principe, une hétérostructure à simple puits quantique est plutôt de type I ; les électrons et les trous sont confinés dans le même matériau. Cependant, par abus de langage, même des hétérostructures de type II continuent à être appelées Hétérostructure à simple puits quantique, alors que les électrons et les trous ne sont pas confinés dans le même matériau.

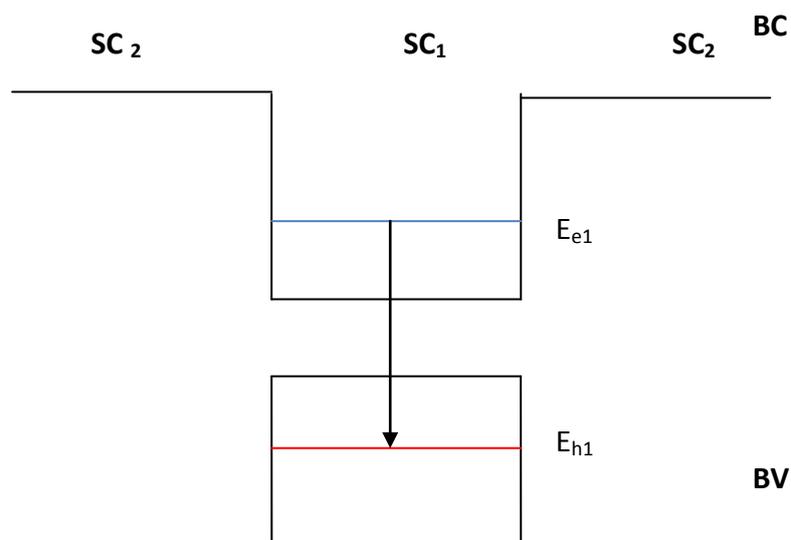


Figure 1.12 hétérostructure à simple puits quantique.

1.9.2 Hétérostructure à Double Puits Quantiques

Les hétérostructures à double puits quantiques sont formées par 2 puits et 3 barrières comme on peut le voir sur la figure (1.13).

L'intérêt de ce type d'hétérostructure réside d'abord dans la largeur de la barrière centrale L_2 Insérée entre les deux puits quantiques :

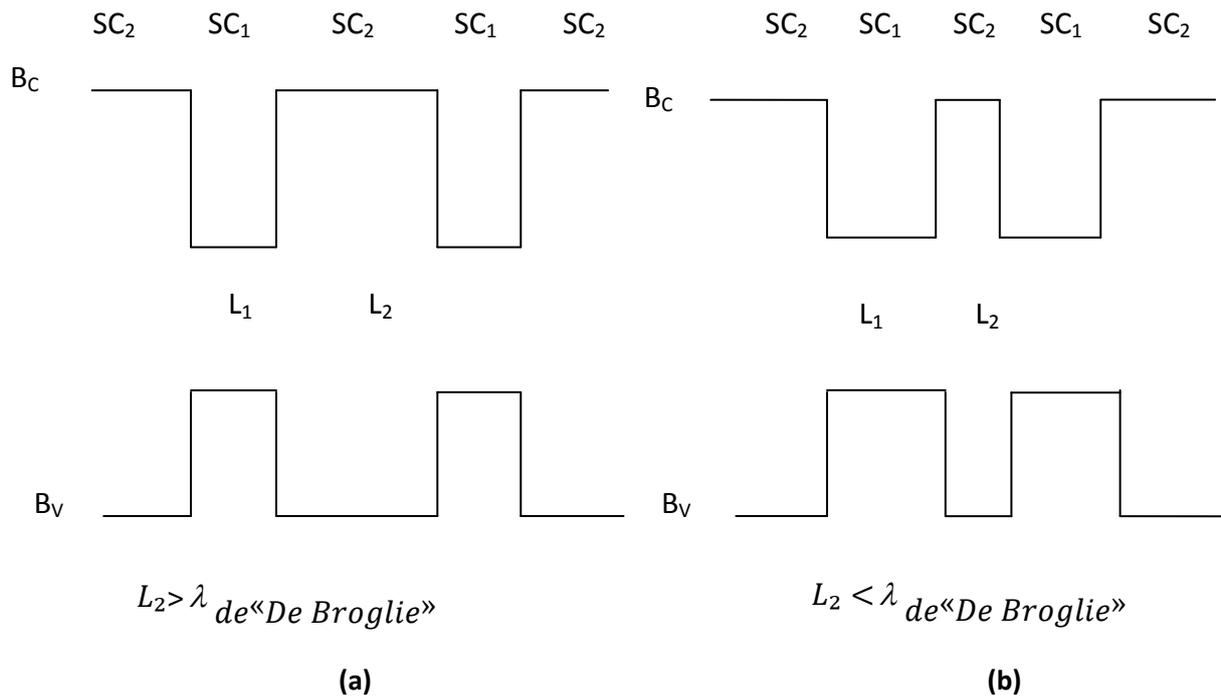


Figure 1.13 hétérostructures à double puits quantique découplés **(a)** et couplés **(b)**.

Si $L_2 > \lambda$ de « De Broglie » alors les deux puits quantiques sont complètement découplés et donc isolés l'un de l'autre. Les deux puits quantiques sont indépendants et agissent séquentiellement ou en série. Les porteurs sont entièrement confinés dans les puits et seul le transport (parallèle) est possible.

Si $L_2 < \lambda$ de « De Broglie » alors la situation est différente : les deux puits quantiques sont couplés et donc dépendant l'un de l'autre. Les porteurs ne sont pas complètement confinés dans les puits, car ils ont une probabilité non nulle de traverser la barrière. Il peut en résulter un effet tunnel résonant : un porteur confiné dans le puits de gauche peut transiter par effet tunnel via la barrière centrale vers le puits de droite et vice versa.

1.9.3 Hétérostructures à Multi-Puits Quantiques

Les hétérostructures à multi-puits quantiques sont formées par n puits quantiques séparés par $n+1$ barrières. Le cas le plus simple d'une telle hétérostructure est représenté sur la figure (1.14) avec 3 puits et 4 barrières.

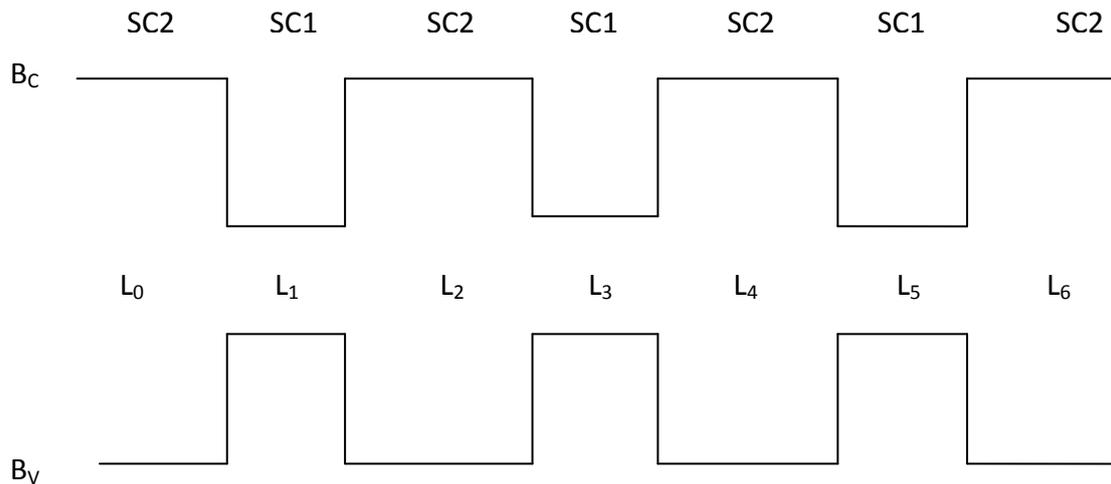


Figure 1.14 hétérostructure à multi-puits quantiques avec 3 puits et 4 barrières.

Là aussi le comportement physique de ce type d' hétérostructure dépend des largeurs des barrières insérées entre les différents puits quantiques et des largeurs de ces même puits :

Si $L_0=L_2=L_4=L_6$ et les $L_1=L_3=L_5$ on a alors affaire à une hétérostructure symétrique.

Deux cas intéressants peuvent apparaître :

Si en plus les largeurs des barrières vérifient les conditions:

$L_2 > \lambda$ de « De Broglie » et $L_4 > \lambda$ de « De Broglie », alors les 3 puits quantiques sont totalement découplés ; en d'autre terme ils sont indépendants l'un de l'autre.

Si par contre $L_2 < \lambda$ de « De Broglie » et $L_4 < \lambda$ de « De Broglie », alors les 3 puits quantiques sont couplés, en d'autre terme ils sont dépendants l'un de l'autre. Il peut

en résulter la aussi un effet tunnel résonant avec les même implications que pour l'hétérostructure à double puits quantiques.

1.9.4 Super-réseaux

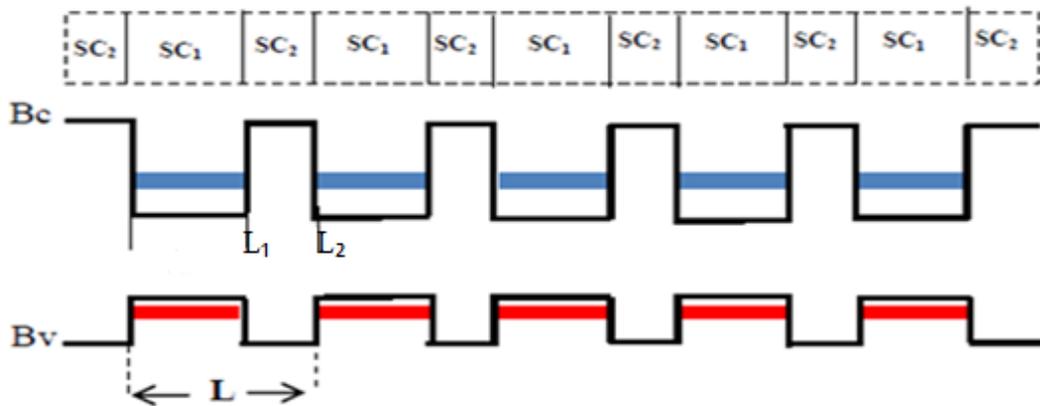


Figure 1.15 super-réseau montrant l'élargissement des niveaux d'énergies fondamentaux en « mini-bandes » : une mini-bande de conduction pour les électrons en bleu et une mini-bande de valence pour les trous en rouge.

Un super-réseaux figure(1.15) est une hétérostructure a multi-puits quantiques particulière, dans laquelle les largeurs de barrières et les largeurs de puits successifs vérifient un certain nombre de condition :

1. $L_0=L_2=L_4 \dots \dots \dots =L_n$.
2. les largeurs des barrières $< \lambda$ de « De Broglie » pour toutes les barrières, c'est -à-dire que tous les puits sont très fortement couplés.
3. $L_1=L_3=L_5 \dots \dots \dots =L_n$
4. Les largeurs des puits $< \lambda$ de « De Broglie » pour tous les puits, c'est -à-dire que tous les puits sont quantifiés.

$$4. L_0 + L_1 = L_2 + L_3 = L_n + L_{n+1} = L$$

C'est-à-dire la condition de périodicité du système ou L est la période du super-réseau.

Il en résulte une série de puits couplés avec une super-périodicité qui fait ressembler ce système à un réseau de puits couplés d'où le nom de « super-réseau ».

Alors qu'un réseau cristallin est formé par la distribution périodique des atomes dans l'espace qui se traduit par une structure de bande et en particulier une bande de conduction pour les électrons « libre » et une bande de valence pour les trous « libres ». Le Super-réseau est donc le résultat d'une succession périodique des puits quantiques fortement couplés qui formée par des niveaux quantique des particules chargées (électrons et trous) confinées dans les puits en fort couplage entre eux ce qui se traduit par leur élargissement en « mini –bandes » ; Une mini-bande de conduction pour les électrons (en bleu sur la figure) et une mini-bande de valence pour les trous (en rouge sur la figure (1.15)).

Les largeurs des mini-bandes de conduction et de valence dépendent des paramètres du super-réseau : la largeur des puits et la largeur de barrières, mais également des hauteurs de barrière (ou profondeur des puits) qui sont finalement des décalages des bandes ΔE_c et ΔE_v [14].

1.10 Les effets quantiques dans les hétérostructures InAs/GaAs

1 .10.1 Confinement quantique

Quatre cas peuvent avoir lieu, selon les dimensions de la boîte et la longueur d'onde λ de la particule.

1 .10.2 Confinement sur 0 dimensions

Dans ce cas, les trois dimensions de la boîte sont très grandes par rapport à la longueur d'onde λ . C'est le cas d'un cristal massif.

1 .10.3 Confinement sur une dimension

Ce cas se présente lorsqu'on restreint une dimension de l'espace. Les particules sont confinées dans un plan, c'est-à-dire l'une de dimensions est comparable à la longueur d'onde de la particule. Il s'agit des puits quantiques ou "quantum wells".

1 .10.4 Confinement sur deux dimensions

Dans ce cas, deux de trois dimensions sont comparables à la longueur d'onde des particules, les fils quantiques ou "quantum wires". Correspondent à une telle structure.

1 .10.5 Confinement sur trois dimensions

Dans ce cas les trois dimensions de la boîte sont comparables à celles de la longueur d'onde des particules. Il s'agit des points quantiques ou "quantum dots " [15].

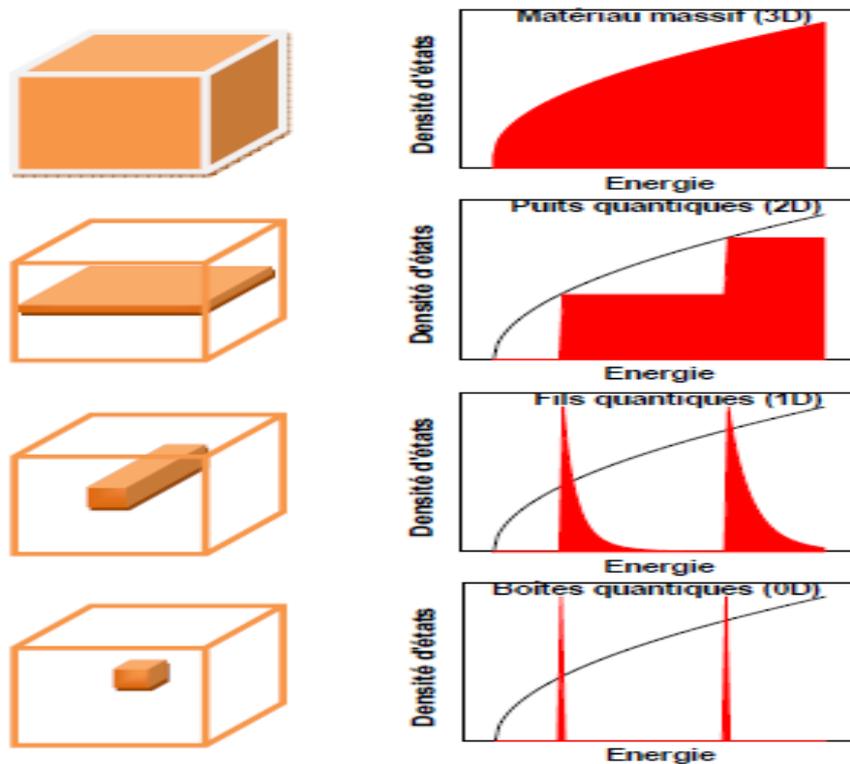


Figure 1.16 Divers types de confinements.

1.11 Les techniques de croissance des multi-puits quantiques par épitaxie

Les techniques de croissance des multi-puits quantiques sont basées sur l'épithaxie. Le procédé d'épithaxie consiste à déposer des atomes d'une espèce chimique sur un cristal préexistant dont le paramètre de maille ou paramètre cristallin est peu éloigné. On peut ainsi élaborer des couches extrêmement minces (très inférieures au micromètre). Les deux techniques les plus courantes sont l'épithaxie par jet moléculaire ou MBE (pour Molecular Beam Epitaxy) et la MOCVD (Metal-Organic Chemical Vapor Deposition), aussi appelée MOVPE (Metal-Organic Vapor Phase Epitaxy). Le procédé d'épithaxie par jet moléculaire peut se schématiser de la façon suivante (Figure 1.17) [16].

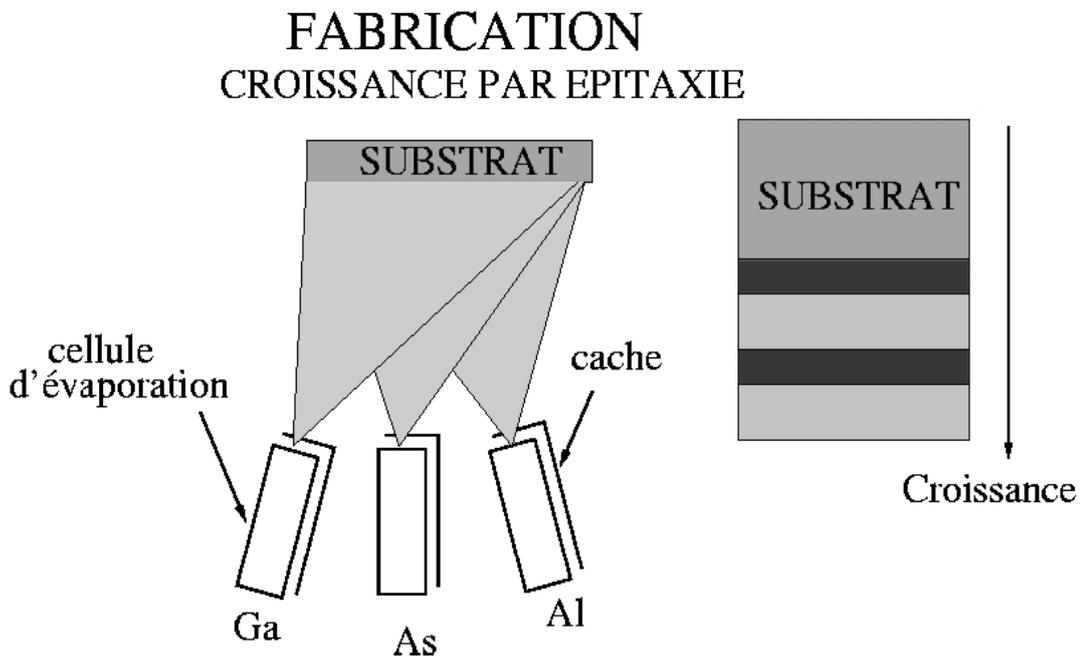


Figure 1.17 Schéma de l'épithaxie par jet moléculaire (MBE)

1.12 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, leur réseau réciproque ainsi que leur structure de bande d'énergie.

Nous avons également présenté les propriétés des hétérostructures a simple puits, double puits, multi puits quantiques et super-réseaux.

2.1 Introduction

Les structures semi-conductrices à dimensionnalité réduite tels que les puits quantiques, et les multi-puits quantiques 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 [11].

Les structures à multi-puits quantiques (MPQ) sont des semi-conducteurs artificiels obtenus par la croissance alternée de fines couches de matériaux ayant une énergie de bande interdite différente mais présentant des paramètres de maille voisins afin d'assurer une croissance sans contrainte [16].

Dans ce chapitre on décrira les conditions d'obtention de l'effet quantique et on étudiera les notions théoriques fondamentales nécessaires à la compréhension des structures à puits quantiques ,multi-puits quantiques et super réseaux.

2.2 Notion de puits quantique

2.2.1 Conditions d'obtention de l'effet quantique

Pour obtenir l'effet quantique il faut réaliser plusieurs conditions telles que:

1-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 :

$$\lambda = \frac{2 \cdot \pi \cdot \hbar}{\sqrt{2 \cdot m_e E_F}} \quad (2.1)$$

Où :

m_e : est la masse effective de l'électron.

E_F : est l'énergie de Fermi.

\hbar : constante de Planck avec $\hbar = \frac{h}{2\pi}$.

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

$$E_{n+1} - E_n > \frac{\hbar}{\tau} \quad (2.2)$$

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

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

$$E_{n+1} - E_n > KT \quad (2.3)$$

Avec : K : la constante de Boltzmann

T : la température absolue.

2.2.2 Les puits quantiques

Un puits quantique désigne une hétéro structure de semi-conducteur qui est la plus proche réalisation pratique des puits de potentiel. Le puits quantique s'obtient en réduisant la dimension du solide dans une des directions de l'espace à une valeur proche de la longueur d'onde de « De Broglie » de la particule (typiquement quelques dizaines de nanomètres). Le mouvement des électrons et des trous est alors confiné en général dans une direction de l'espace et libre dans les deux autres directions (confinement 1D). Le mouvement des porteurs dans la direction du confinement est discrétisé, donnant lieu à des bandes d'énergie [3].

2.2.3 L'équation de Schrödinger dans un puits quantique

En 1926 Schrödinger a montré que la fonction d'onde et l'énergie sont solution d'une équation au dérivés partielles du second ordre cette équation s'écrit :

$$\frac{-\hbar^2}{2m_e} \Delta \Psi(z) + V(z)\Psi(z) = E\Psi(z) \quad (2.4)$$

Où :

Δ : Laplatien.

m_e : la masse de l'électron.

V : l'énergie potentielle

E : l'énergie totale de l'électron.

Ψ : la fonction d'onde

$\hbar = h/2\pi$ Où h est la constante de Planck.

2.2.4 Puits de profondeur infinie

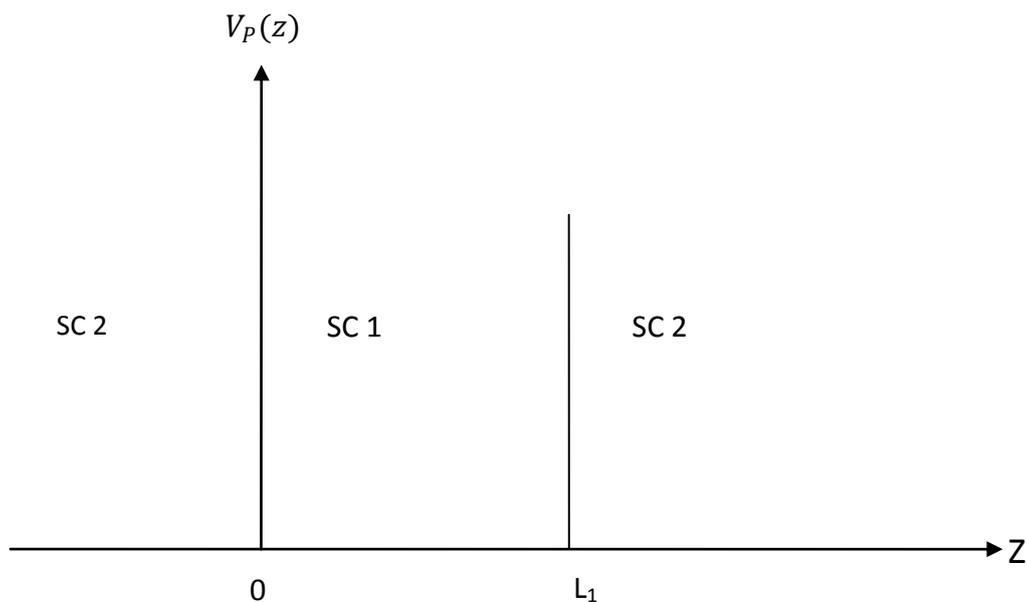


Figure 2.1 Puits de profondeur infinie.

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

Le potentiel s'écrit alors :

$$V(z) = \infty \quad \text{pour } z < 0 \text{ et } z > L_1 \quad (2.5)$$

$$V(z) = 0 \quad \text{pour } 0 < z < L_1 \quad (2.6)$$

Les conditions aux limites sont par conséquent :

$$\Psi(z = 0) = 0, \Psi(z = L_1) = 0 \quad (2.7)$$

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

$$\frac{d^2\Psi(z)}{dz^2} + \frac{2m_1E}{\hbar^2}\Psi(z) = 0 \quad (2.8)$$

m_1 : la masse effective des électrons dans le SC1.

(2.8) Est une équation différentielle de deuxième ordre dont la solution est de la forme :

$$\Psi(z) = A\sin(Kz) + B\cos(Kz) \quad (2.9)$$

Où

$$K_1 = \sqrt{\frac{2m_1E}{\hbar^2}} \quad (2.10)$$

Les conditions aux limites permettent d'écrire :

$$\Psi(z = 0) = 0 \quad \text{donc} \quad B=0 \quad (2.11)$$

$$\Psi(z = L_1) = 0 \quad \text{donc} \quad K = n\pi/L_1 \quad (2.12)$$

Par conséquent,

$$\Psi(z) = A\sin(Kz) \quad \text{et} \quad E = \frac{\hbar^2 K^2}{2m_1} = \frac{\hbar^2 n^2 \pi^2}{2m_1 L_1^2} \quad (2.13)$$

L'énergie totale des électrons dans le puits de potentiel s'écrit donc

$$E = E_c + \frac{\hbar^2 n^2 \pi^2}{2m_1 L_1^2} + \frac{\hbar^2 K^2}{2m_1} \quad (2.14)$$

Avec

k : vecteur d'onde des électrons dans la direction xy .

La fonction d'onde, après la condition de normalisation s'écrit

$$\Psi(z) = \sqrt{\frac{2}{L_1}} \sin\left(\frac{n\pi z}{L_1}\right) \quad (2.15)$$

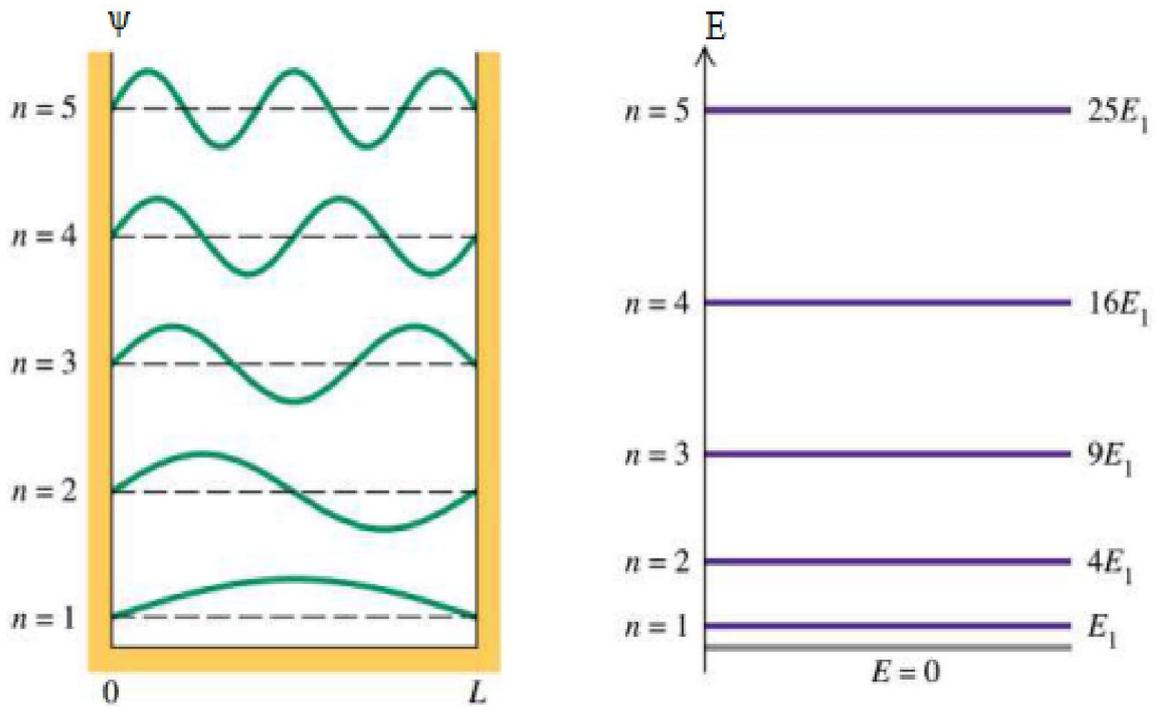


Figure 2.2 fonctions d'onde dans un puits de potentiel infini.

2.2.5 Probabilité de présence dans le puits

La fonction d'onde associée à la valeur propre E_n de l'énergie est :

$$\Psi(z) = A \sin\left(\frac{n\pi z}{L_1}\right) \quad (2.16)$$

La densité de probabilité correspondante vaut :

$$|\Psi(z)|^2 = A^2 \sin^2\left(\frac{n\pi z}{L_1}\right) \quad (2.17)$$

La valeur de (A) peut être calculée en utilisant la condition de normalisation ce qui est possible ici puisque les états sont liés

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^2(z) dz = \int_0^{L_1} \Psi^2(z) dz = 1 \quad (2.18)$$

$$A = \sqrt{2/L_1} \quad (2.19)$$

Finalement :

$$\Psi(z) = \sqrt{2/L_1} \sin\left(\frac{n\pi z}{L_1}\right) \quad (2.20)$$

$$|\Psi(z)|^2 = \frac{2}{L_1} \left[\sin^2\left(\frac{n\pi z}{L_1}\right) \right] \quad (2.21)$$

A titre d'exemple, sont représentés sur la figure (2.3) les allures des fonctions d'onde

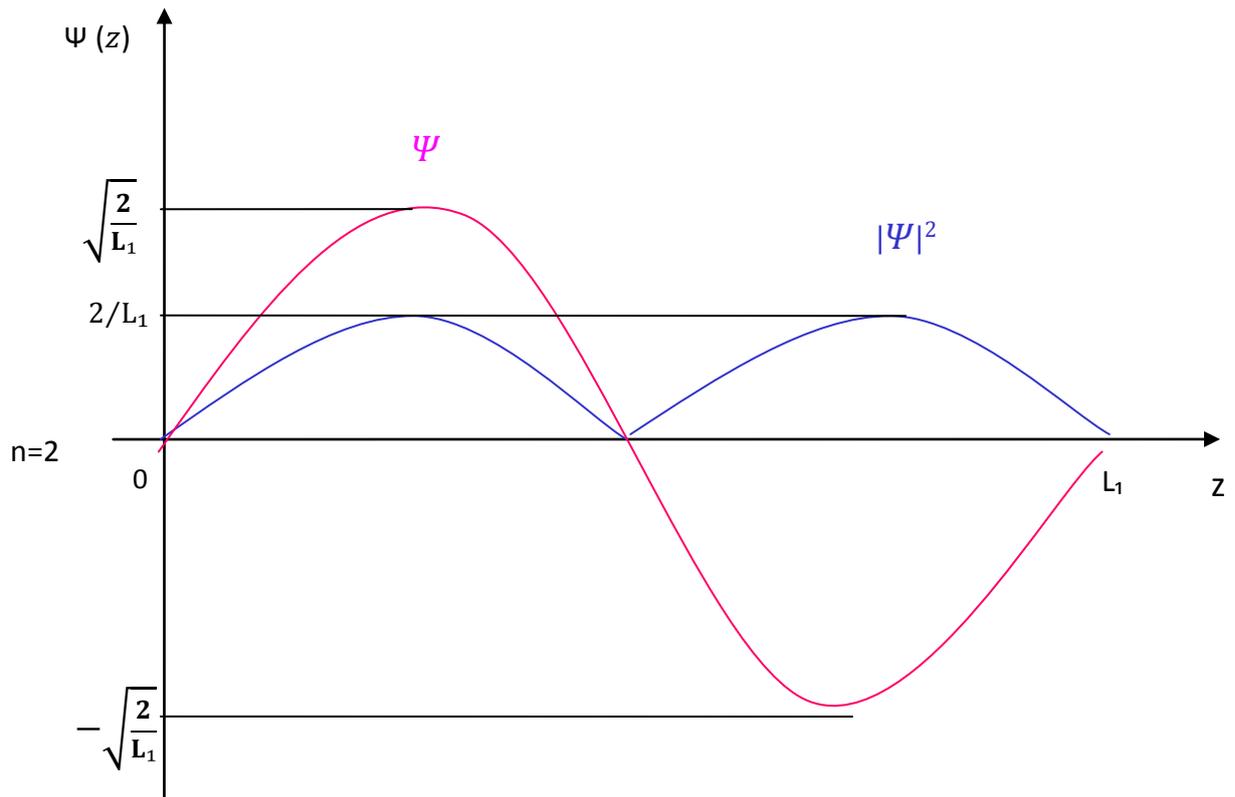


Figure 2. 3 Fonction d'onde et probabilité de présence de la particule dans l'état excité ($n=2$).

2.2.6 Puits quantique de profondeur finie :

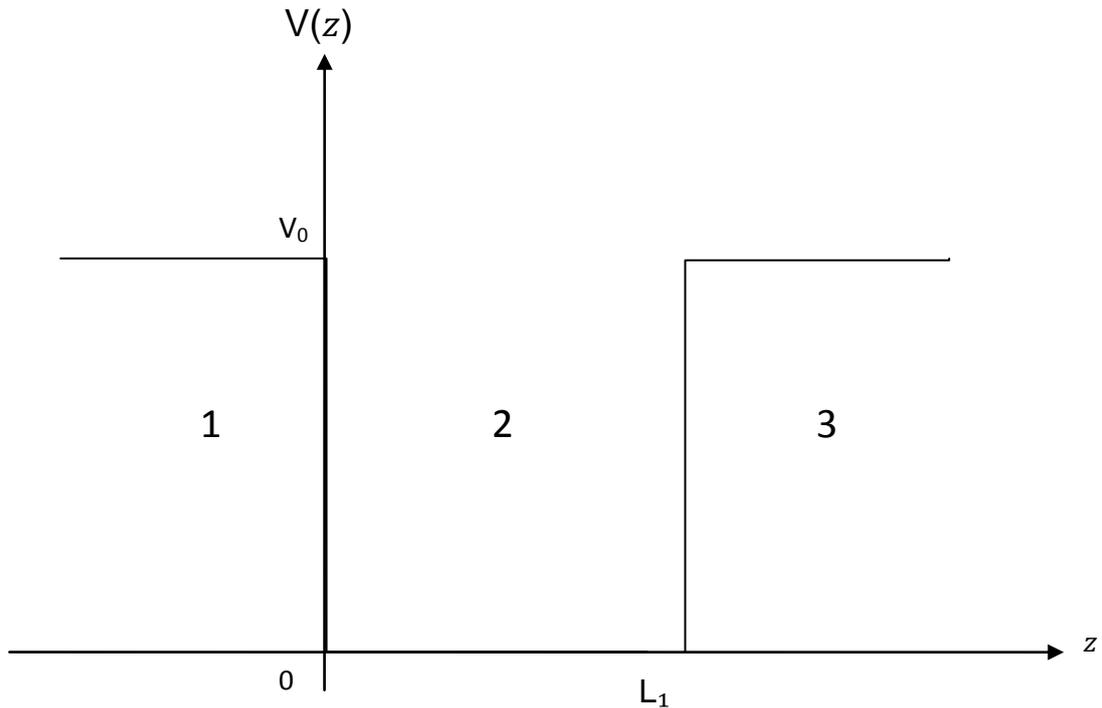


Figure 2.4 puits de potentiel à profondeur finie.

On considère un modèle unidimensionnel de direction oz dans lequel un puits de potentiel a la forme représentée sur la figure (2.4).

Intéressons-nous aux états d'énergie E associés aux particules confinées dans le puits tel que $E < V_0$. On désigne par K_1 et K_2 les scalaires réels positifs tels que :

$$\begin{cases} K_1^2 = \frac{2m_1E}{\hbar^2} \\ K_2^2 = 2m_2(V_0 - E)/\hbar^2 \end{cases} \quad (2.22)$$

Où :

m_1 : est la masse effective de la particule dans la région (2).

m_2 : est la masse effective de la particule dans la région (1) et (3).

V_0 : est la profondeur du puits et \hbar constante de Planck.

Les équations de Schrödinger relatives aux trois régions et la solution correspondante $\Psi_1(z)$, $\Psi_2(z)$, $\Psi_3(z)$ sont :

$$\begin{cases} (d^2\Psi_1/dz^2) - K_2^2\Psi_1 = 0 \\ (d^2\Psi_2/dz^2) - K_1^2\Psi_2 = 0 \\ (d^2\Psi_3/dz^2) - K_2^2\Psi_3 = 0 \end{cases} \quad (2.23)$$

Soit :

$$\begin{aligned} \Psi_1 &= A_1 e^{K_2 z} + B_1 e^{-K_2 z} \\ \Psi_2 &= A_2 e^{jK_1 z} + B_2 e^{-jK_1 z} \\ \Psi_3 &= A_3 e^{K_2(z-L_1)} + B_3 e^{-K_2(z-L_1)} \end{aligned} \quad (2.24)$$

On écrit d'abord que la fonction d'onde est partout finie :

- $\Psi_2(L_1)$ est finie sur l'intervalle $[0, L_1]$, lorsque $z \rightarrow -\infty$: $\Psi_1(z) \rightarrow +\infty$ à cause du terme $B_1 e^{-K_2 z}$, on doit donc choisir $B_1=0$
- 2-pour des raisons analogues, il faut que A_3 soit nul, donc le système d'équations (2.24) s'écrit :

$$\begin{cases} \Psi_1 = A_1 e^{K_2 z} \\ \Psi_2 = A_2 e^{jK_1 z} + B_2 e^{-jK_1 z} \\ \Psi_3 = B_3 e^{-K_2(z-L_1)} \end{cases} \quad (2.25)$$

Les conditions de continuité aux niveaux des interfaces ($z=0$) et ($z=L_1$) s'écrivent :

$z=0$

- $\Psi_1(0) = \Psi_2(0)$
- $(1/m_1) \cdot d\Psi_1(z)/dz = (1/m_2) \cdot d\Psi_2(z)/dz$

$z=L_1$

- $\Psi_2(z) = \Psi_3(z)$

- $(1/m_2) \cdot d\Psi_2(z)/dz = (1/m_1) \cdot d\Psi_3(z)/dz$

Lorsqu'on Les applique le système devient :

$$\begin{cases} A_1 - A_2 - B_2 = 0 \\ A_2 e^{jK_1 L_1} + B_2 e^{-jK_1 L_1} - B_3 = 0 \\ (K_2/m_1) \cdot A_1 - (K_1/m_2) \cdot A_2 + j(K_1/m_2) \cdot B_2 = 0 \\ j\left(\frac{K_1}{m_2}\right) \cdot A_2 e^{jK_1 L_1} - j\left(\frac{K_1}{m_2}\right) \cdot B_2 e^{-jK_1 L_1} + \left(\frac{K_2}{m_1}\right) \cdot B_2 = 0 \end{cases} \quad (2.26)$$

Ce système linéaire et homogène n'a de solution non nulle que si son déterminant est nul

$$\begin{vmatrix} 1 & -1 & 0 & -1 \\ \beta/m_1 & -jK_1/m_2 & 0 & jK_1/m_2 \\ 0 & e^{jK_1 L_1} & -1 & e^{-jK_1 L_1} \\ 0 & (K_1/m_2)e^{jK_1 L_1} & K_2/m_1 & -(K_1/m_2)e^{jK_1 L_1} \end{vmatrix} = 0 \quad (2.27)$$

Après des calculs, on obtient à l'équation :

$$\sqrt{2m_2 E_n / \hbar^2} \cdot L_1 = n \cdot \pi + 2 \text{Arc tan}[\sqrt{m_2(V_0 - E_n) / m_1 E_n}] \quad (2.28)$$

Les valeurs propres E_n correspondantes à chaque entier n sont déterminées à partir de l'équation (2.28), ainsi appelée équation aux valeurs propres.

2.3 Les super-réseaux

Les super-réseaux sont des structures formées d'un empilement périodique de couches à partir de deux matériaux différents de manières à former une succession périodique de puits et de barrières figure(2.4).

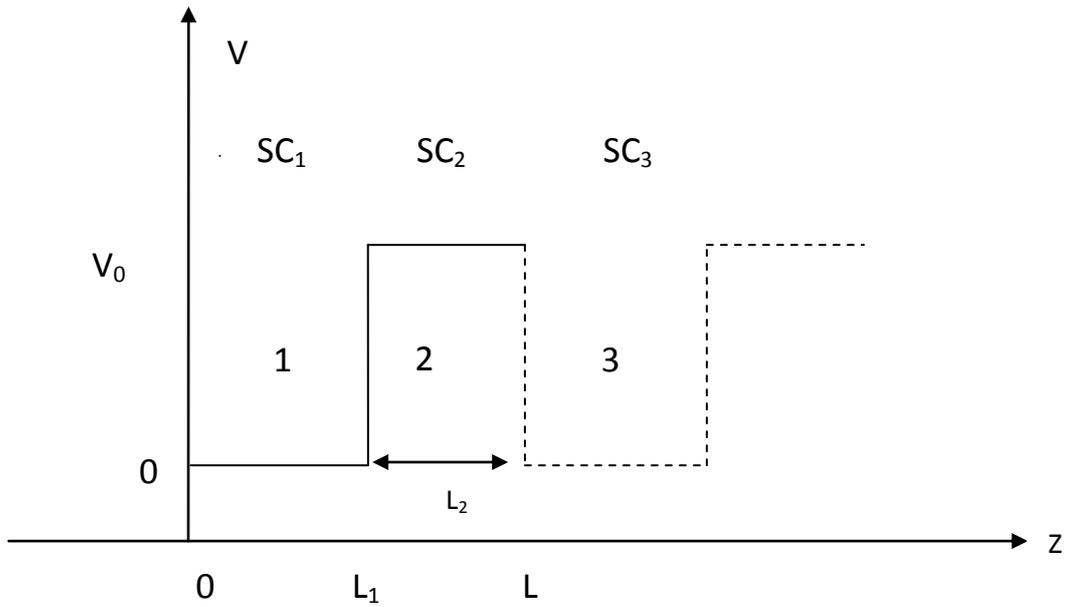


Figure 2.5 Maille élémentaire du super-réseau. Les épaisseurs de couche des semi-conducteurs SC₁ et SC₂ sont L₁ et L₂.

Considérons la maille élémentaire du super-réseau représentée sur la figure (2.5). L'équation de Schrödinger des électrons est, dans l'approximation de la masse effective de la forme :

$$\left(-\frac{\hbar^2 d^2}{2m_e dz^2} + V(z) \right) \Psi(z) = E\Psi(z) \quad (2.29)$$

Avec $V(z)=0$ et $m_e=m_1$ dans la région 1 correspondant au semi-conducteur SC₁ et $V(z)=V_0$ et $m_e=m_2$ dans la région 2 correspondant au semi-conducteur SC₂. Dans chacune des régions, l'équation (2.29) s'écrit respectivement

$$\text{Région 1} \quad \frac{d^2\Psi(z)}{dz^2} + k_1^2\Psi(z) = 0 \quad (2.30)$$

$$\text{Région 2} \quad \frac{d^2\Psi(z)}{dz^2} - K_2^2\Psi(z) = 0 \quad (2.31)$$

Avec dans la mesure où on s'intéresse qu'aux états d'énergie $E < V_0$

$$K_1 = \frac{\sqrt{2m_1 E}}{\hbar} \quad K_2 = \frac{\sqrt{2m_2 (V_0 - E)}}{\hbar}$$

Les solutions des équations (2.30 et 2.31) sont respectivement de la forme

$$\Psi_1(z) = A_1 \cos K_1 z + B_1 \sin K_1 z \quad (2.32)$$

$$\Psi_2(z) = A_2 \operatorname{ch} K_2 (z - L_1) + B_2 \operatorname{sh} K_2 (z - L_1) \quad (2.33)$$

En outre, en raison de la périodicité du super-réseau, les fonctions d'onde électroniques et leurs dérivées doivent satisfaire au théorème de Bloch. En d'autres termes, les fonctions d'onde des électrons dans la région 3 ne diffèrent des fonctions d'onde dans la région 1 que par le terme de phase e^{ikL}

$$\Psi_3(z) = e^{ikL} \Psi_1(z - L) \quad (2.34)$$

Soit

$$\Psi_3(z) = e^{ikL} (A_1 \cos K_1 (z - L) + B_1 \sin K_1 (z - L)) \quad (2.35)$$

Il en est de même pour les dérivées qui s'écrivent dans chacune des régions

$$\Psi'_1(z) = -A_1 K_1 \sin K_1 z + B_1 K_1 \cos K_1 z \quad (2.36)$$

$$\Psi'_2(z) = A_2 K_2 \operatorname{sh} K_2 (z - L_1) + B_2 K_2 \operatorname{ch} K_2 (z - L_1) \quad (2.37)$$

$$\Psi'_3(z) = e^{ikL} (-A_1 K_1 \sin K_1 (z - L) + B_1 K_1 \cos K_1 (z - L)) \quad (2.38)$$

Les conditions de continuité de la fonction d'onde Ψ et du courant de probabilité $1/m \cdot d\Psi/dz$ en $z=L_1$ et en $z=L$ s'écrivent

$$\Psi_1(z = L_1) = \Psi_2(z = L_1) \quad (2.39)$$

$$\frac{1}{m_1} \Psi'_1(z = L_1) = \frac{1}{m_2} \Psi'_2(z = L_1) \quad (2.40)$$

$$\Psi_2(z = L) = \Psi_3(z = L) \quad (2.41)$$

$$\frac{1}{m_2} \Psi'_2(z = L) = \frac{1}{m_1} \Psi'_3(z = L) \quad (2.42)$$

En explicitant Ψ et Ψ' et compte tenu de la relation $L=L_1+L_2$, ces conditions s'écrivent

$$A_1 \cos K_1 L_1 + B_1 \sin K_1 L_1 - A_2 = 0 \quad (2.43)$$

$$-A_1 \frac{K_1}{m_1} \sin K_1 L_1 + B_1 \frac{K_1}{m_1} \cos K_1 L_1 - B_2 \frac{K_2}{m_2} = 0 \quad (2.44)$$

$$e^{ikL} A_1 - A_2 \operatorname{ch} K_2 L_2 - B_2 \operatorname{sh} K_2 L_2 = 0 \quad (2.45)$$

$$e^{ikL} B_1 \frac{K_1}{m_1} - A_2 \frac{K_2}{m_2} \operatorname{sh} K_2 L_2 - B_2 \frac{K_2}{m_2} \operatorname{ch} K_2 L_2 = 0 \quad (2.46)$$

On obtient quatre équations homogènes relatives aux quatre coefficients A_1, B_1, A_2, B_2 , qui

S'écrivent sous forme matricielle,

$$\begin{pmatrix} \cos K_1 L_1 & \sin K_1 L_1 & -1 & 0 \\ -\frac{K_1}{m_1} \sin K_1 L_1 & \frac{K_1}{m_1} \cos K_1 L_1 & 0 & -\frac{K_2}{m_2} \\ e^{ikL} & 0 & -\operatorname{ch} K_2 L_2 & -\operatorname{sh} K_2 L_2 \\ 0 & e^{ikL} \frac{K_1}{m_1} & -\frac{K_2}{m_2} \operatorname{sh} K_2 L_2 & -\frac{K_2}{m_2} \operatorname{ch} K_2 L_2 \end{pmatrix} \begin{bmatrix} A_1 \\ B_1 \\ A_2 \\ B_2 \end{bmatrix} = 0$$

Les coefficients ne sont différents de zéro que si le déterminant de la matrice est nul, ce qui donne la relation

$$\cos kL = \operatorname{ch} K_2 L_2 \cdot \cos K_1 L_1 + \frac{1}{2} \left(\frac{K_2 m_1}{K_1 m_2} - \frac{K_1 m_2}{K_2 m_1} \right) \operatorname{sh} K_2 L_2 \cdot \sin K_1 L_1 \quad (2.47)$$

Compte tenu des expressions de K_1 et K_2 , l'expression (2.47) est de la forme

$$f(V_0, L_1, L_2, m_1, m_2, E) = \cos kL \quad (2.48)$$

Dans la mesure où le cosinus est toujours compris entre -1 et +1, l'expression (2.48) détermine les valeurs permises de l'énergie, par la simple condition $|f(V_0, L_1, L_2, m_1, m_2, E)| \leq 1$. Cette condition délimite les bandes permises dans lesquelles k est réel. Au contraire, les bandes d'énergie correspondant à $|f(V_0, L_1, L_2, m_1, m_2, E)| > 1$ sont des bandes interdites dans lesquelles k est imaginaire.

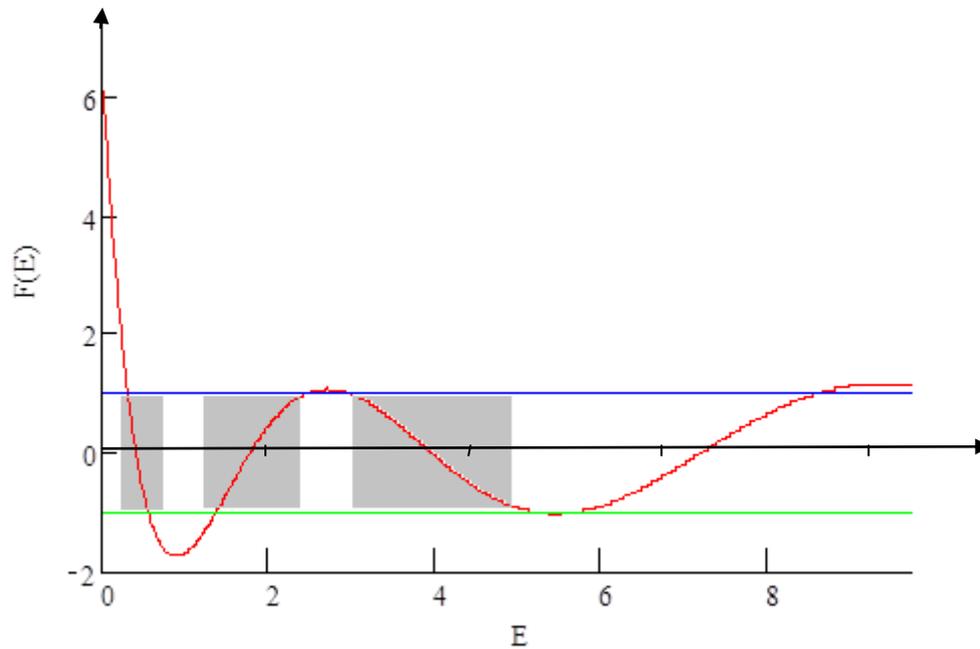


Figure 3.6 Les mini-bandes d'énergie.

2.4 Conclusion

Nous avons présenté les différentes méthodes pour calculer les états liés d'une structure à multi-puits quantiques ainsi que leurs fonctions d'onde associées. Et nous allons étudier comment varient les bandes d'énergie quand la structure évolue d'une configuration à couches épaisses à une configuration à couches minces, c'est-à-dire quand le système évolue d'une structure de multi-puits quantiques découplés (L_2 grand) à une structure de super-réseau (puits couplés, L_2 petit).

3.1 Introduction

Dans ce chapitre, on va aborder la partie de simulation en utilisant un programme développé d'une façon à nous permettre de calculer les niveaux d'énergie de quantification et la probabilité de présence d'une structure GaAs/InAs/GaAs à puits et multi-puits quantiques, et cela en faisant varier la largeur de puits et de barrière.

La structure que nous avons choisie est la suivante :

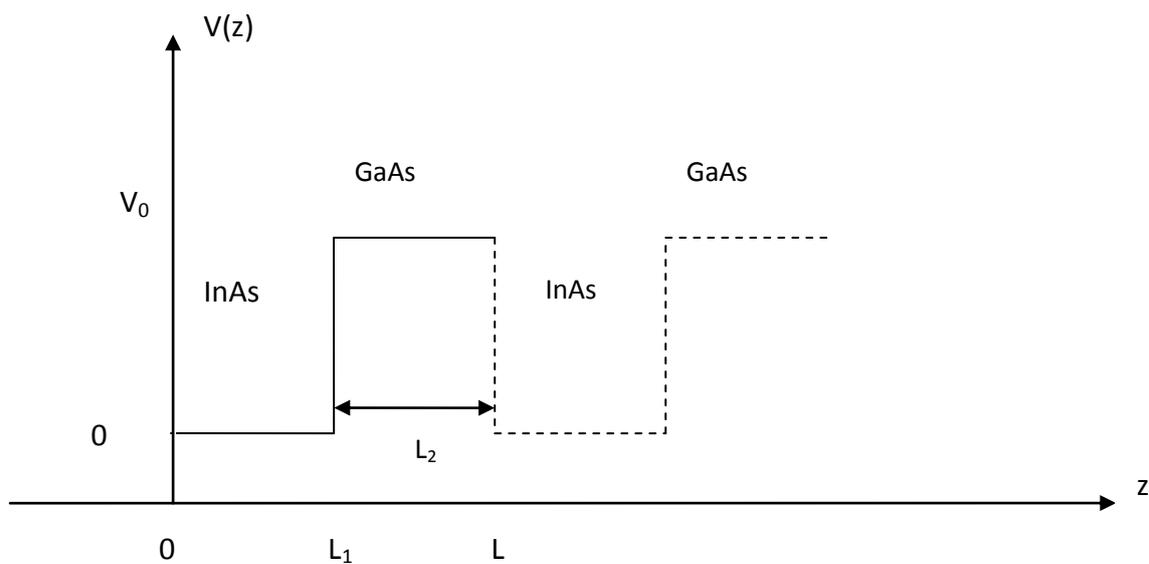


Figure 3.1 Maille élémentaire du super-réseau.

3.2 Calcul de l'énergie de quantification

Le calcul des énergies de quantification est basé sur la relation appelée « équation aux valeurs propres (équation (2.28), équation (2.47)) ».

l'organigramme de la figure(3.2) montre le processus de calcul des valeurs d'énergie quantifiée dans le puits et le superréseau, compte tenu des paramètres d'entrée tels que la largeur du puits « L_1 » la largeur de la barrière « L_2 »,et les valeurs des paramètres suivants :

$$V_0=0.697\text{eV.}$$

$$m_1 = 0.023 * m_0$$

$$m_2 = 0.067 * m_0$$

$$\text{Où : } m_0 = 9.1 * 10^{-31} \text{ kg.}$$

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

V_0 : barrière de potentiel dans la bandes de conduction.

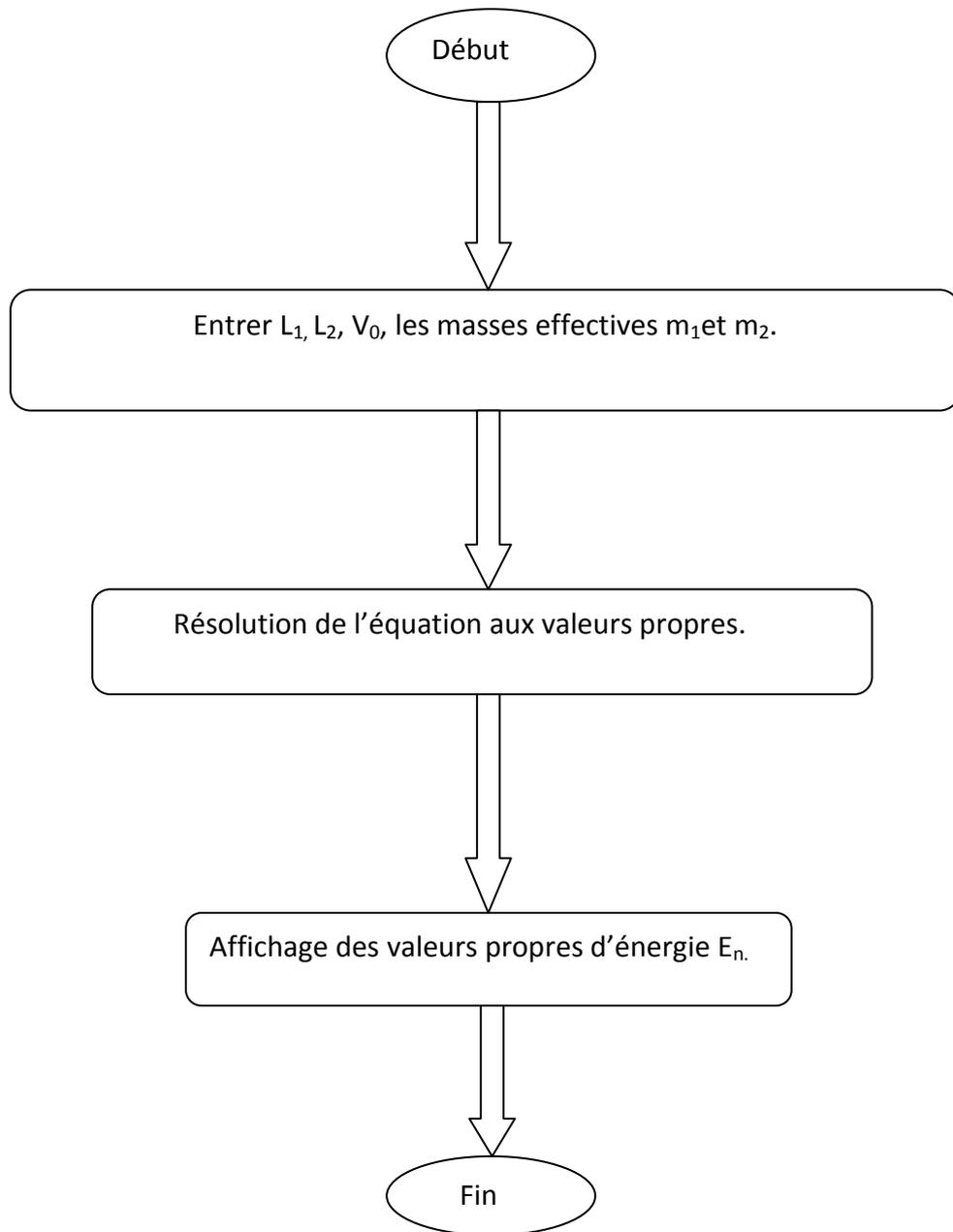


Figure 3.2 Organigramme du calcul de l'énergie de quantification dans le puits quantique et le super-réseau.

3.3 Étude du puits quantique isolé

a- Energies de quantification dans la bande de conduction

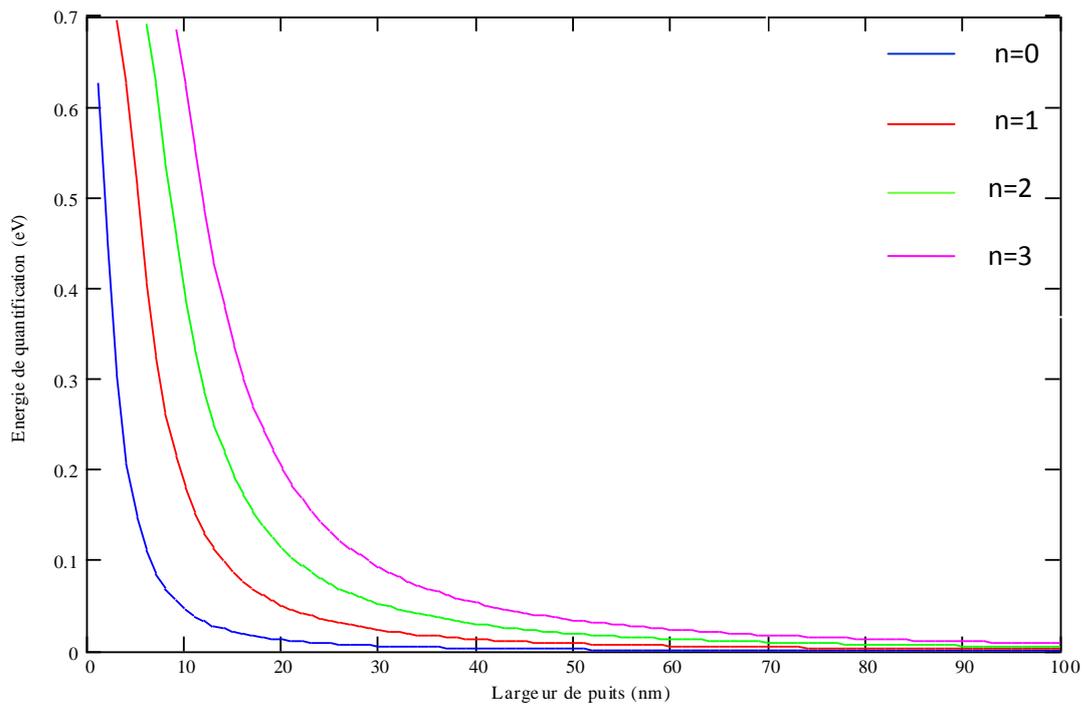


Figure 3.3 Energie de quantification des quatre premiers niveaux des électrons en fonction de la largeur de puits.

La figure (3.3) présente la variation des énergies de quantification des électrons pour les quatre premiers niveaux, en fonction de la largeur de puits. On remarque que les énergies de quantifications suivent une évolution décroissante et se rapprochent de zéro autour de 100 nm, où le matériau devient massif.

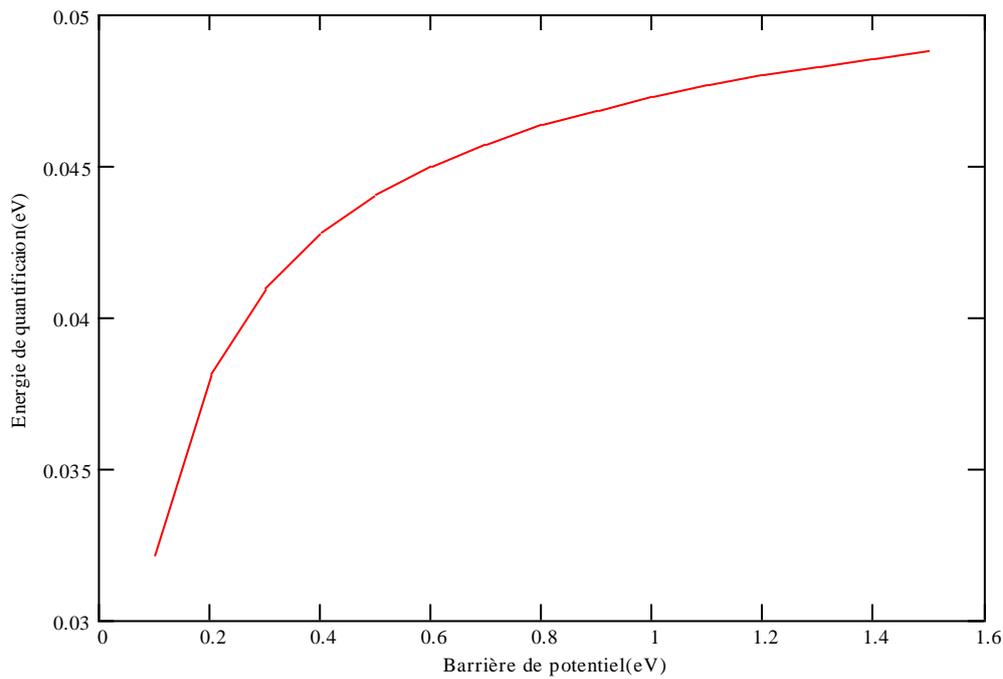


Figure 3.4 Energie de quantification des électrons en fonction de la barrière de potentiel V_0 , pour $L_1=10\text{nm}$, $n=0$.

La figure (3.4) représente la variation de l'énergie de quantification des électrons en fonction de la barrière de potentiel V_0 . On remarque que l'énergie de quantification augmente avec l'augmentation de la barrière de potentiel.

b-Probabilité de présence dans la bande de conduction

La probabilité de trouver une particule (trou ou électron) à une position est donnée par la norme au carré de la fonction d'onde ($|\Psi|^2$).

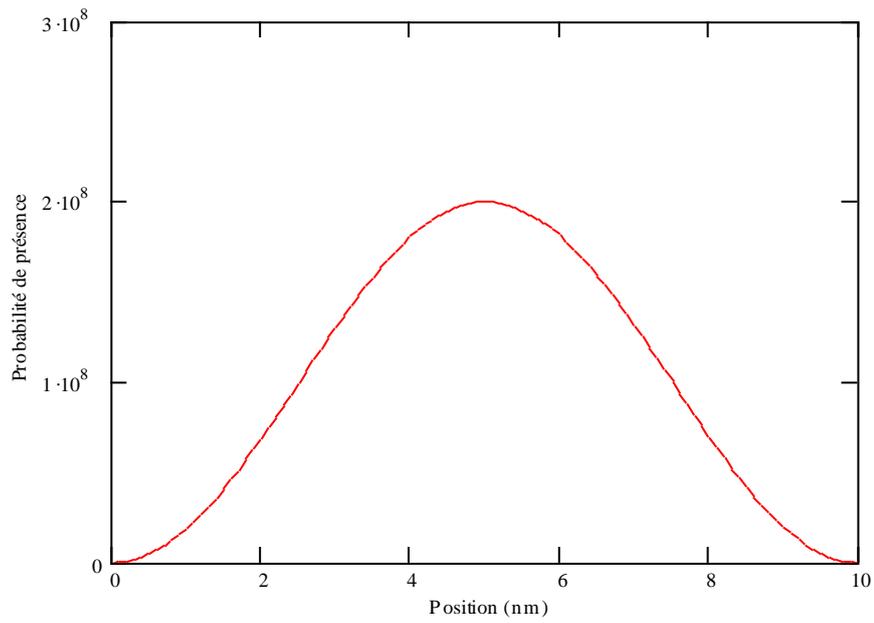


Figure 3.5 la densité de probabilité de présence des électrons dans le puits pour le niveau fondamental ($n=1, L_1=10\text{nm}$).

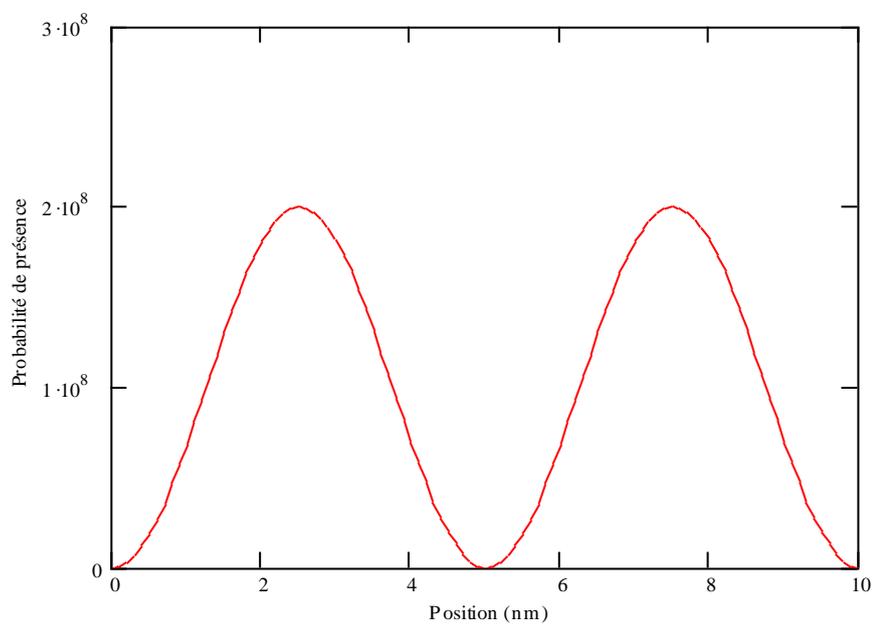


Figure 3.6 la densité de probabilité de présence des électrons dans le puits pour le niveau excité ($n=2, L_1=10\text{nm}$).

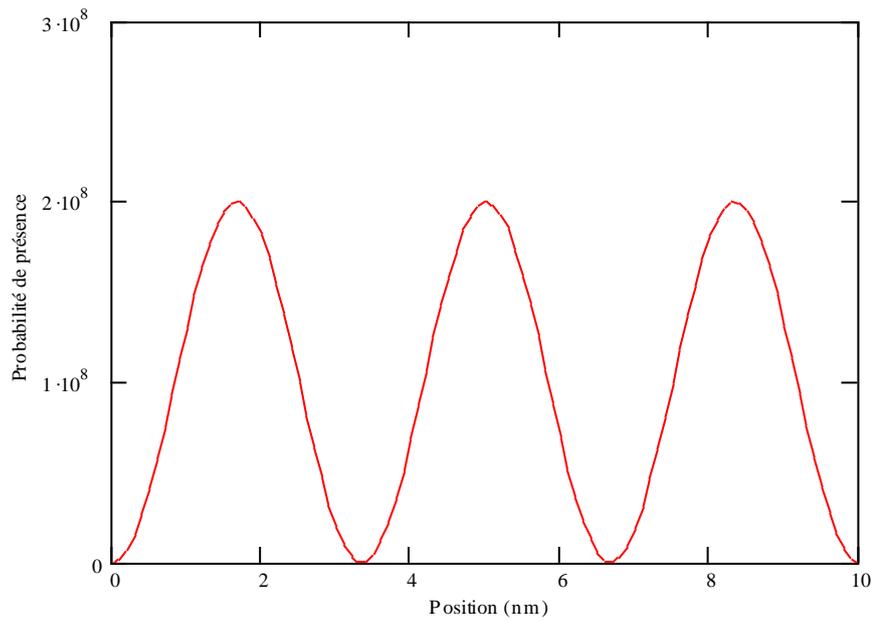


Figure 3.7 la densité de probabilité de présence des électrons dans le puits pour le niveau excité ($n=3$) ($L_1=10\text{nm}$).

Les figures (3.5), (3.6) et (3.7) montrent la probabilité de présence des électrons dans le puits. A partir de ces figures on peut remarquer que la probabilité de présence des électrons dans le niveau fondamental ($n=1$) (figure 3.5) est localisée dans le puits avec un maximum au centre du puits.

3.4 Étude du super-réseau

a- Les mini-bandes d'énergie

Nous avons utilisé l'équation aux valeurs propres (équation (2.45)). Les mini-bandes d'énergie sont représentées sur la figure (3.8).

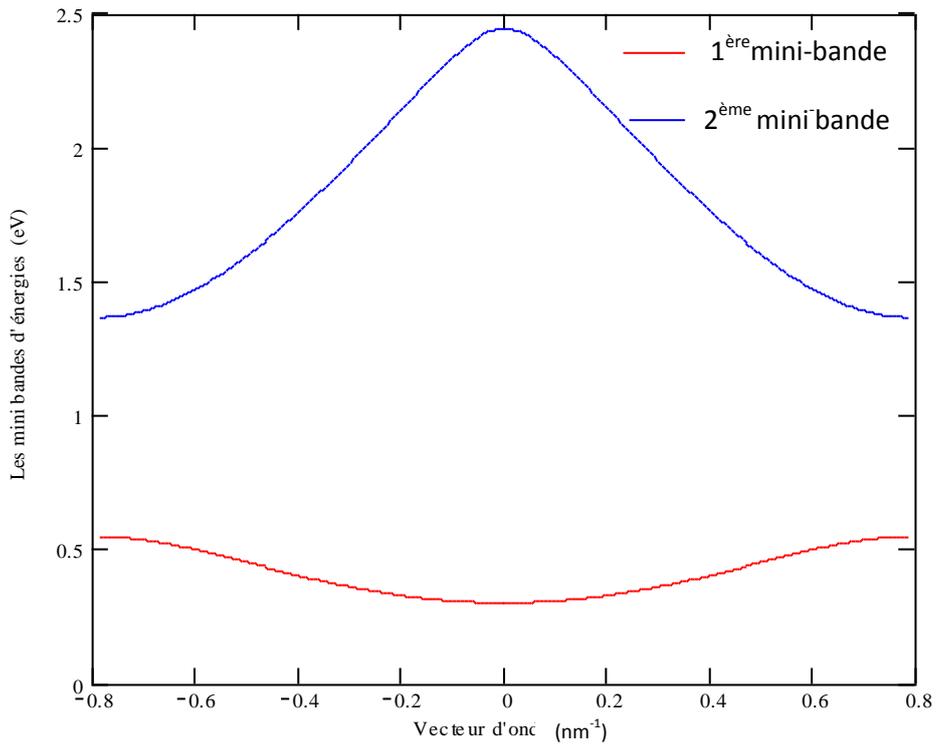


Figure 3.8 Les mini-bandes d'énergie dans une structure super-réseau en fonction du vecteur d'onde pour $L_1=2\text{nm}$ et $L_2=2\text{nm}$.

b-Probabilité de présence

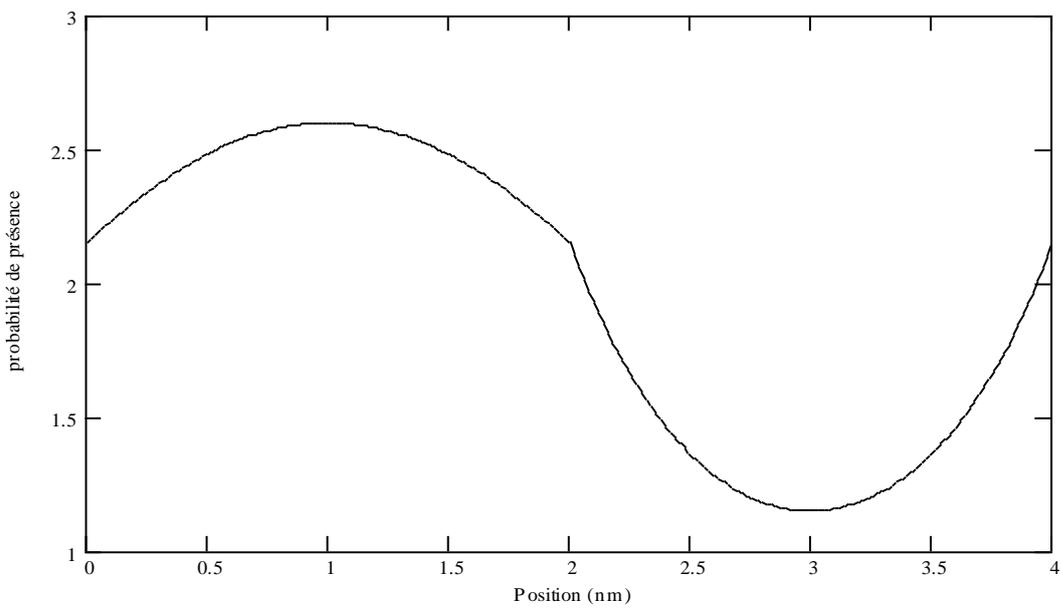


Figure 3.9 la densité de probabilité de présence des électrons du superréseau pour $L_1=2\text{nm}$ et $L_2=2\text{nm}$.

la figure (3.9) représente la probabilité de présence des électrons dans le super-réseau . On constate qu'elle n'est pas nulle dans la barrière donc l'électron n'est plus confiné dans le puits et peut se déplacer dans toute la structure, contrairement au cas du puits isolé.

c-Première mini-bande d'énergie

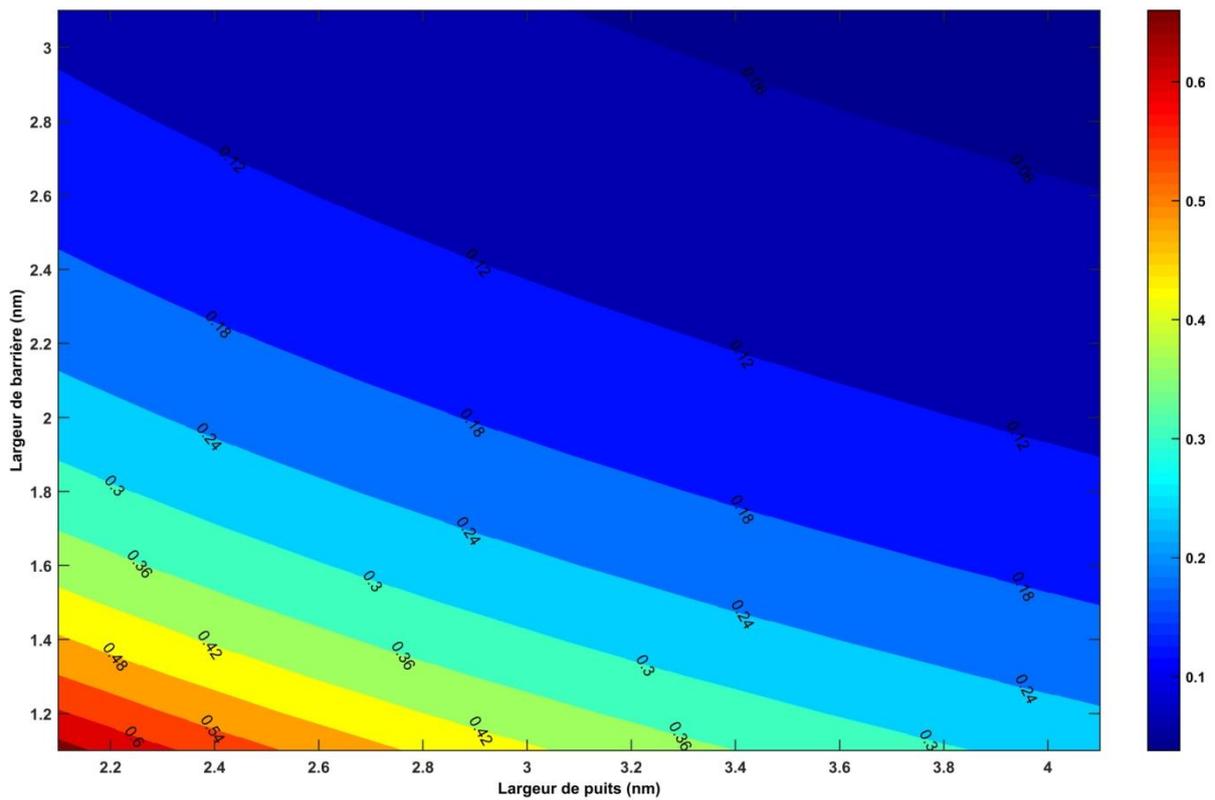


Figure 3.10 Evolution de la largeur de la première mini-bande d'énergie ΔE_1 (eV) en fonction de la largeur du puits quantique L_1 et la largeur de barrière L_2 .

La figure (3.10) représente la variation de la largeur de la première mini-bande d'énergie en fonction de la largeur de puits L_1 et de la largeur de barrière L_2 . On remarque que la largeur de la mini-bande diminue avec l'augmentation de la largeur de puits, ceci est dû à ce que lorsque la largeur du puits augmente, la quantification disparaît. On note aussi que la largeur de la première mini-bande est plus importante lorsque la distance entre puits est faible c'est à dire lorsque le couplage entre puits est fort.

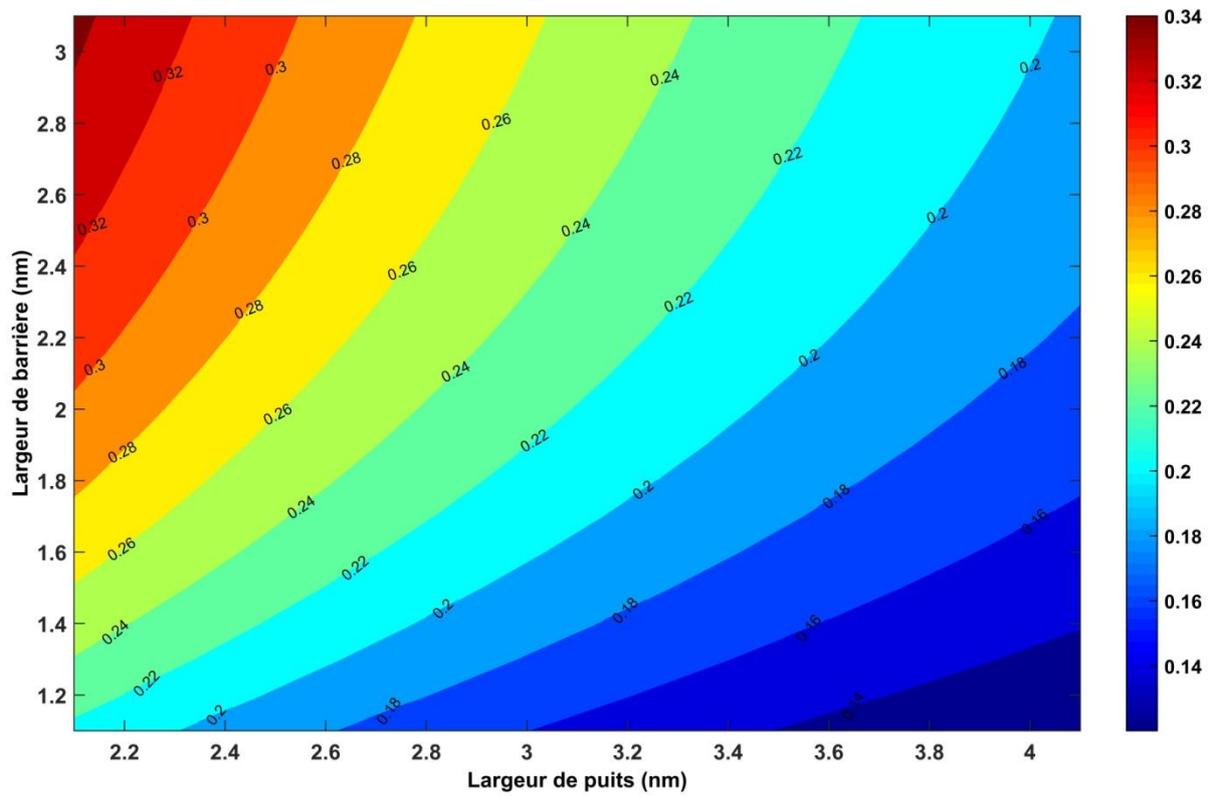


Figure 3.11 Evolution de la position de la première bande d'énergie E_1 (eV) en fonction de la largeur de puits et la largeur de barrière.

La figure (3.11) représente la variation de la position de la première mini-bande en fonction de la largeur de puits L_1 et la largeur de barrière L_2 . On remarque que lorsque L_1 augmente, la quantification diminue et l'énergie tend vers le bas de la bande de conduction (massif), et lorsque L_2 diminue, le couplage entre puits augmente et l'énergie tend vers le bas.

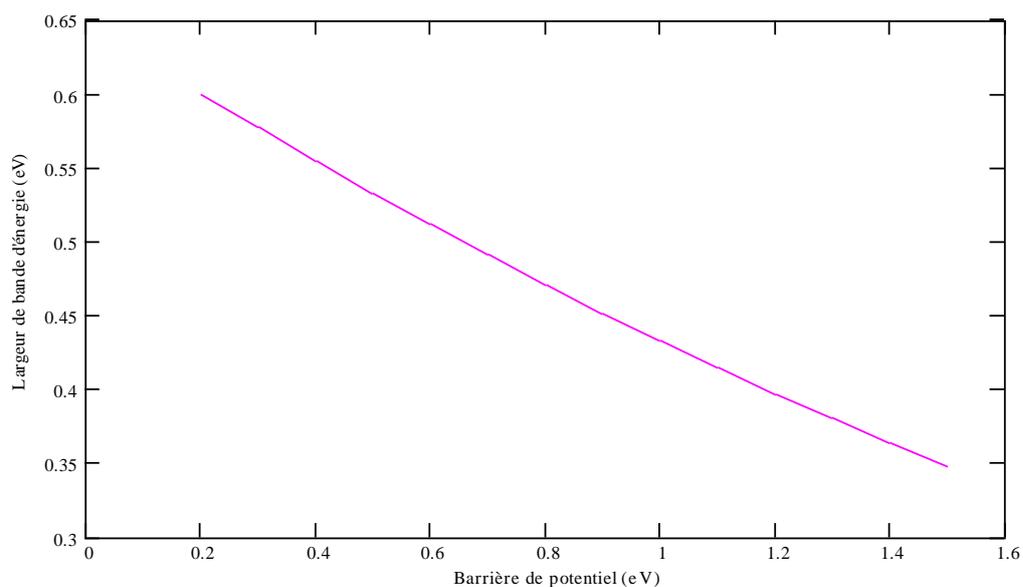


Figure 3.12 évolution de la largeur de la première mini-bande d'énergie ΔE_1 (eV), en fonction de la barrière de potentiel V_0 pour $L_1=3\text{nm}$ et $L_2=5\text{nm}$.

La figure (3.12) montre l'évolution de la largeur de la première mini-bande d'énergie en fonction de la largeur de la barrière de potentiel. On voit bien que la largeur de bande d'énergie décroît en fonction de la barrière de potentiel.

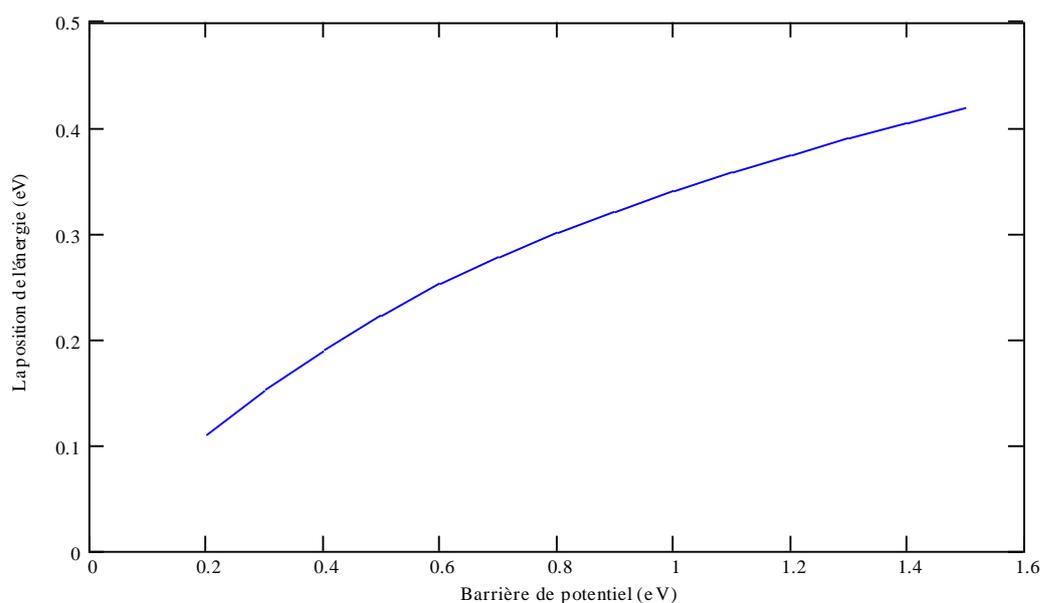


Figure 3.13 Evolution de la position de la première mini-bande d'énergie E_1 (eV), en fonction de la barrière de potentiel V_0 . $L_1=3\text{nm}$ et $L_2=5\text{nm}$.

La figure (3.13) montre la variation de la position de la première mini-bande d'énergie en fonction de la barrière de potentiel V_0 . On voit bien que la position d'énergie suit une évolution croissante en fonction de la barrière de potentiel.

d- Deuxième mini-bande d'énergie

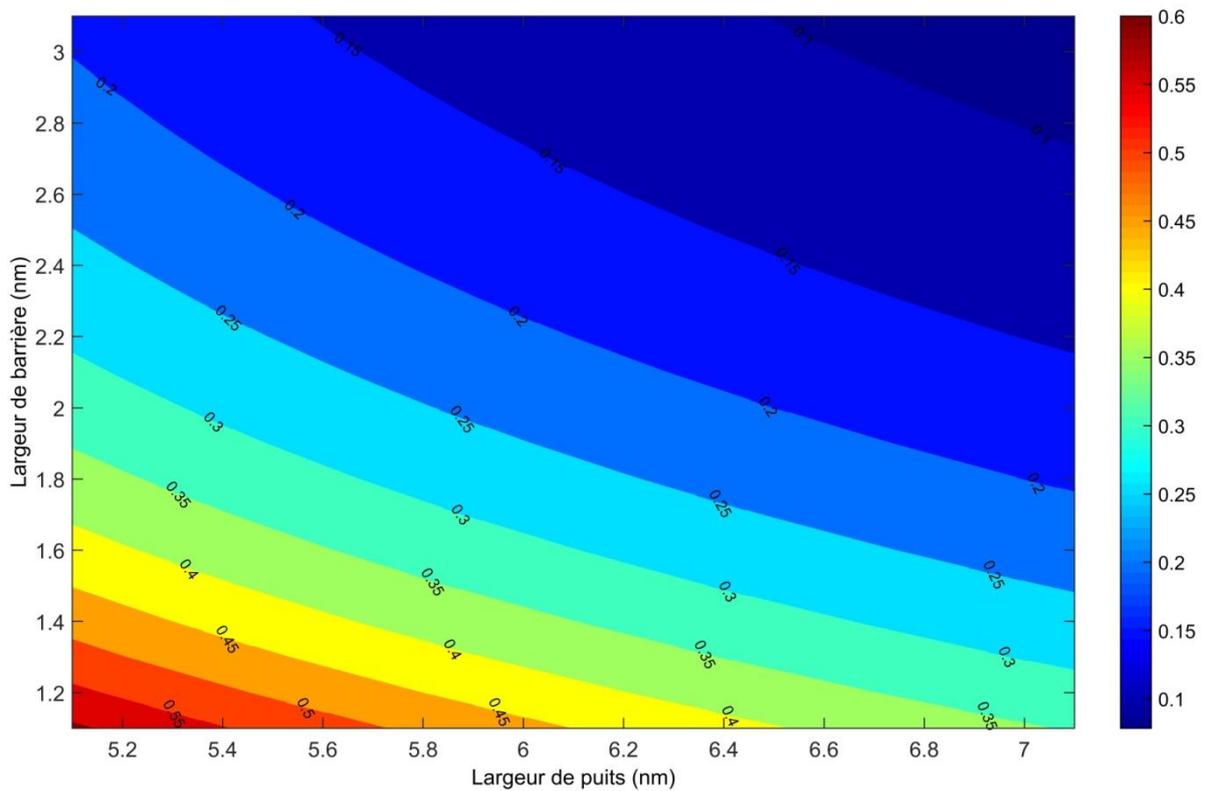


Figure 3.14 Evolution de la largeur de la deuxième mini-bande d'énergie ΔE_2 (eV) en fonction de la largeur du puits quantique L_1 et la largeur de barrière L_2 .

La figure (3.14) montre la variation de la largeur de la deuxième mini-bande d'énergie en fonction de la largeur du puits quantique L_1 et la largeur de barrière L_2 . On remarque que la largeur de la deuxième mini-bande diminue avec l'augmentation de la largeur de puits et la largeur de barrière. On remarque aussi que la largeur de la deuxième mini-bande est plus importante lorsque la distance entre puits est faible c'est à dire lorsque le couplage entre puits est fort.

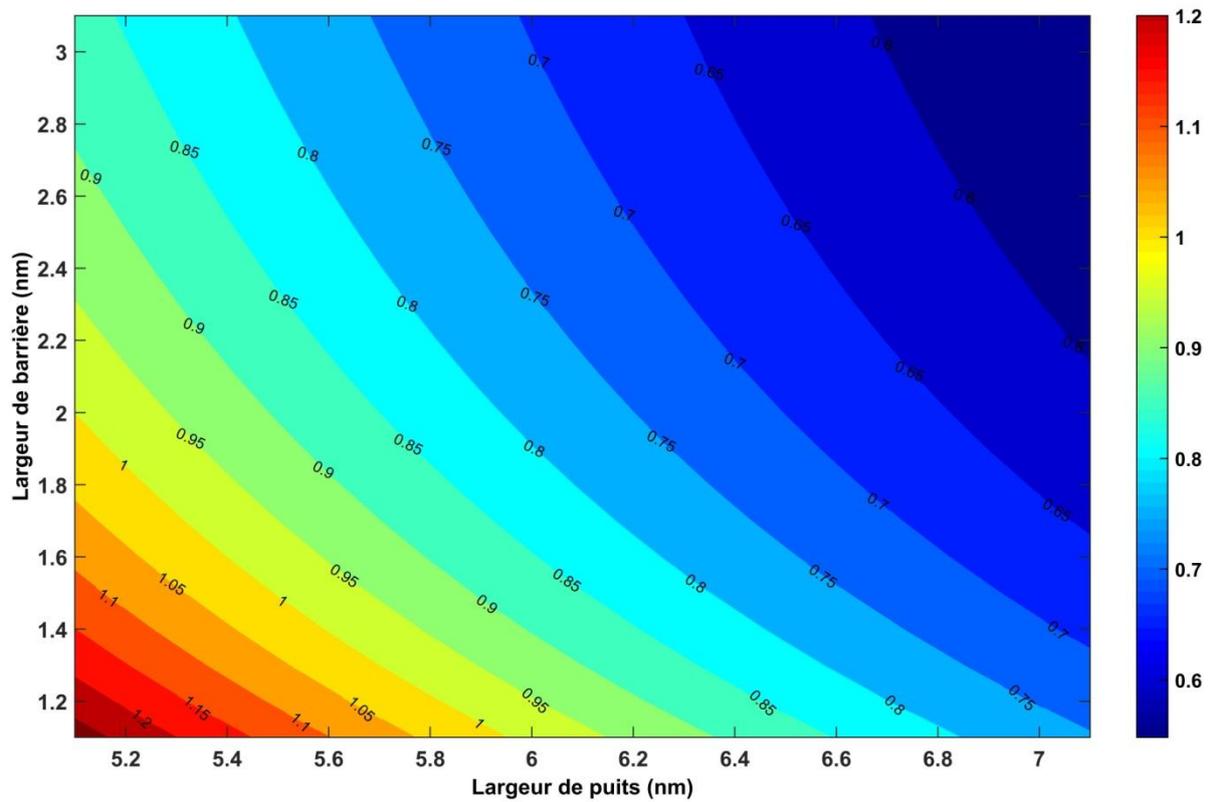


Figure 3.15 Evolution de la position de la deuxième mini-bande d'énergie E_2 (eV) en fonction de la largeur de puits et la largeur de barrière.

La figure (3.15) représente la variation de la position de la deuxième mini-bande en fonction de la largeur de puits L_1 et la largeur de barrière L_2 . On remarque que lorsque L_1 augmente, la quantification diminue et l'énergie tend vers le bas de la bande de conduction (massif), et lorsque L_2 diminue, le couplage entre puits augmente et l'énergie tend vers le bas.

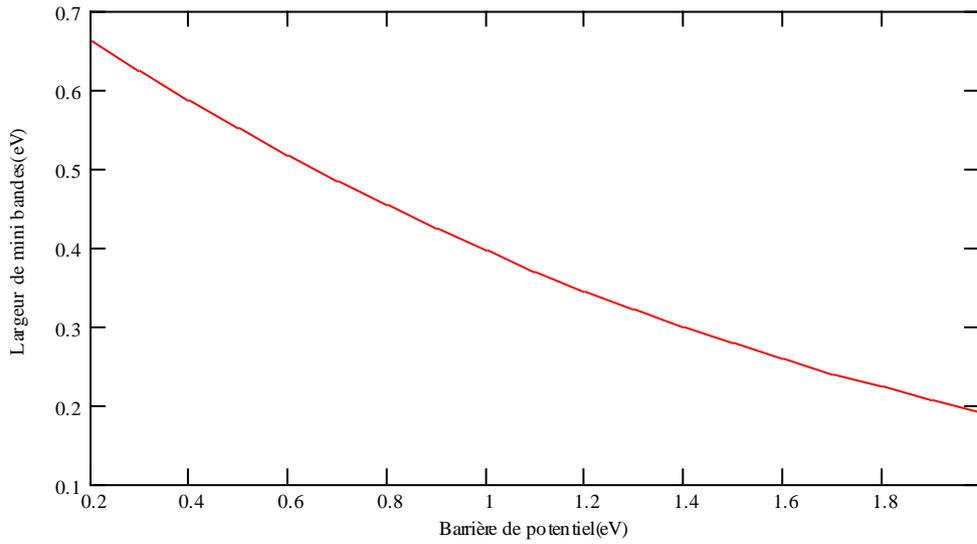


Figure 3.16 évolution de la largeur de la deuxième mini- bande d'énergie ΔE_2 (eV) en fonction de la barrière de potentiel pour $L_1=3\text{nm}$ et $L_2=5\text{nm}$.

La figure (3.16) montre l'évolution de la largeur de la deuxième mini-bande d'énergie en fonction de la barrière de potentiel. On remarque que la largeur de bande d'énergie suit une évolution décroissante en fonction de la barrière de potentiel.

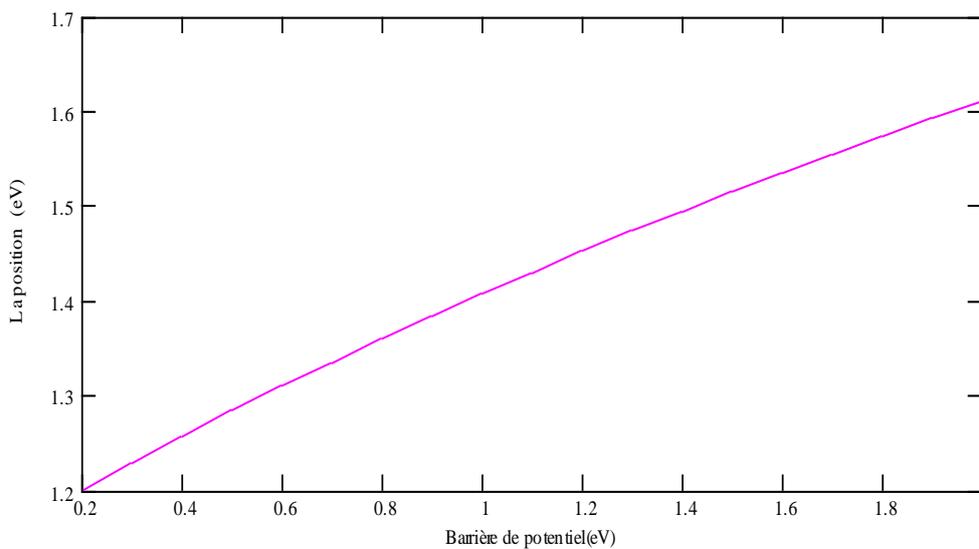


Figure 3.17 Evolution de la position de la deuxième mini-bande d'énergie E_2 (eV) en fonction de la barrière de potentiel V_0 .

La figure (3.17) montre la variation de la position de la deuxième mini-bande d'énergie en fonction de la barrière de potentiel V_0 . On remarque lorsque La barrière de potentiel augmente, La position augmente.

3.5 Conclusion

Dans ce chapitre nous avons abordé la partie simulation. On a commencé par simuler les énergies de quantification et la probabilité de présence dans les structures à puits quantiques. Puis nous avons considéré les super-réseaux pour lesquels nous avons étudié la variation de la largeur des mini-bandes et de leur position en fonction de la largeur de puits et la largeur de barrière.

Conclusion générale

Dans ce modeste travail, nous nous sommes intéressées à l'étude d'une structure à multi-puits quantiques et super-réseaux. Dans le cadre de notre étude, nous avons choisi en particulier la structure GaAs/InAs/GaAs.

Nous avons d'abord commencé par étudier un puits quantiques simple. Nous avons déterminé les énergies de quantification des électrons, et La probabilité de présence.

Ensuite nous avons considéré la structure à multi-puits quantiques et super-réseaux, dans ce cas nous avons déterminé la position et la largeur des mini-bandes.

Les résultats des simulations montrent que l'influence de la largeur et de la séparation entre les puits ainsi que la barrière de potentiel sur la position et la largeur des mini-bandes jouent un rôle très important.

De nos jours, ces structures trouvent des applications très intéressantes, en particulier dans les composants optoélectroniques et les dispositifs ultra-rapide comme :

La réalisation des transports non-linéaires, des lasers en cascade et des photo-détecteurs infrarouges....., et ont un avenir très prometteur.

La suite de ce travail peut être envisagée en généralisant ce modèle à trois dimensions et considérer les super-réseaux de boîtes quantiques qui trouvent des applications dans les lasers, les photo-détecteurs et les cellules solaires de troisième génération.

Bibliographie

- [1] K.Bouzid: « Elaboration et caractérisations des couches minces par pyrolyse-pulvérisation par ultrasons et application», thèse de doctorat, Université Kasdi Merbah de Ouargla, 2012.
- [2] Z.Makhlouf: « Etude classique et quantique de l'hétérojonction AlGaAs /GaAs», mémoire de master, université de Med Khider Biskra, 2013.
- [3] Y.Aiche: « Calcul de l'énergie de transition dans une heterostructure a puits quantiques en fonction des paramètres structuraux en vue de l'obtention d'une émission a 1.3 μm », mémoire de magister, Université de Blida, 2010.
- [4] E.Lhuillier « transport électronique dans les super-reseau : application aux détecteurs infrarouge à grandes longueur d'onde», mémoire de magister, Ecole polytechnique, 2010.
- [5] W.Bahi: « Les semi conducteurs binaires utiliser dans les composantes optoélectronique », mémoire de master, Université Kasdi Merbah de Ouargla, 2013.
- [6] M.Benaïcha:« Etude des Matériaux semi conducteur III-V application à la conversion photovoltaïque», mémoire de magister, université Colonel Hadj lakhdar Batna, 2007.
- [7] Y.Marouf :«Modélisation des cellules solaires en InGaN en utilisant Atlas Silvaco», mémoire de magister, Université de Mohamed Khider Biskra, 2013.
- [8] B. Ilham : «Contribution à la modélisation d'une structure nanométrique : application aux transistors HEMTS et pseudo morphiques », mémoire Magister, Université de Mentouri Constantine, le 27 JUIN 2009.
- [9]A.Elouchdi: « Caractérisation du phénomène de transport électronique dans Les matériaux composés ternaires: Application aux matériaux $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{Sb}$ », mémoire Magister, Université de Abou Bakr Belkaid Tlemcen, 2012.

- [10] N.Bbenahmed Benabdallah: « Propriétés physiques des semi-conducteurs (Si monocristallin et Ge) et Simulation des cellules solaires à base de Si et SiGe», these de magister, abou bekr belkaid-tlemcen, 2006.
- [11] A.Kourabacha, M.Nacry: « Etude et simulation de l'effet tunnel dans une structure à double puits quantique», mémoire de master, Université de Blida, 2013.
- [12] L. Khaled Sofiane : « Etude et simulation des structures à base de GaInAsP et AlGaInAs pour le photovoltaïque », mémoire de magister, Université de Blida, 2012.
- [13] S.Mohamed Seghir : « Modélisation et simulation d'une structure a multi-puits quantiques a base de GaInAs(N,Sb)/GaAs», mémoire de magister, Université de Blida, 2011.
- [14] M.Zenati.: « Etude des propriétés optoélectronique de nanostructures GRINCH à base d'antimoniures III-Sb et application », mémoire de magister, université d'Oran, 2010.
- [15] A.Aouina: «role du rayonnement dans l'élaboration et l'étude de nano agrégats semi conducteurs de zns », mémoire de magister, Université mentouri constantine.
- [16] Elodie e Cren: « Etude de composants absorbants saturables a semi-conducteurs à multi puits quantiques dopés au fer Pour la régénération de signaux optiques a très hauts débits d'information», thèse de doctorat Université de Rennes,2004.