الجمهورية الجزائرية الديمقراطية الشعبية République Algérienne démocratique et populaire

وزارة التعليم السعسالي و البحث العسلمسي Ministère de l'enseignement supérieur et de la recherche scientifique

> جسامعة سعد دحلب البليدة Université SAAD DAHLAB de BLIDA

> > كلية التكنولوجيا Faculté de Technologie

قسم الإلكترونيڭ Département d'Électronique

Mémoire de Master

Filière ELECTRONIQUE OPTION : MICROELECTRONIQUE

présenté par

ZEREG TAREK

Etude et simulation de nanostructures à base de GaAs_xSb_{1-x}/GaSb pour des applications optoélectroniques (transitions intersousbandes)

Promotrice:

M^{me}. Chenini Lynda

Co-promoteur :

M^r . Aissat Abdelkader



2021-2022

Résumé

Le but de ce travail est de mener une étude sur les transitions intersousbandes ainsi que le coefficient d'absorption des structures à puits quantiques a base du ternaire GaAsSb/GaSb. On s'est intéressé en premier lieu à étudier les principales propriétés optoélectroniques qui caractérisent cette structure. Puis, nous avons vérifié qu'elle effet ça va avoir d'introduire de l'arsenic sur les transitions intersousbandes, la longueur d'onde correspondante et le coefficient de l'absorption intersousbandes.

Mots clés :

GaAs_xSb_{1-x}/GaSb, optoélectronique, absorption, intrabande.

Summary

The purpose of this work is to conduct a study on the intersubband transitions as well as the absorption coefficient of quantum well structures based on the GaAsSb/GaSb ternary. We were initially interested in studying the main optoelectronic properties that characterize this structure. Then, we checked what effect it will have to introduce arsenic on the intersubband transitions, the corresponding wavelength and the coefficient of the intersubband absorption.

Key words:

GaAs_xSb_{1-x}/GaSb, optoelectronic, absorption, intraband.

ملخص

الغرض من هذا العمل هو إجراء دراسة حول الإنتقالات بين المستويات الداخلية وكذلك معامل الامتصاص الموافق لهياكل الآبار الكمومية على أساس الثلاثي GaAsSb/GaSb. كنا مهتمين في البداية بدراسة الخصائص الرئيسية للإلكترونيات الضوئية التي تميز هذا الهيكل. بعد ذلك ، قمنا بفحص التأثير الذي سيتعين عليه إدخال الزرنيخ على الإنتقالات بين المستويات الداخلية ، طول الموجة المقابل ومعامل الامتصاص.

> الكلمات الدالة: GaAs_xSb_{1-x}/GaSb ، الكتروضوئي ، امتصاص

Remerciements

Je tiens tout d'abord à remercier Dieu le tout puissant et miséricordieux, qui m'a donné la force et la patience d'accomplir ce modeste travail.

J'exprime toute ma reconnaissance et mes particuliers remerciements à ma promotrice, M^{me} Chenini Lynda ainsi que mon Co-promoteur M^{er} Aissat Abdelkader, qui m'ont permis de réaliser ce travail, pour leur suivi permanent, leurs conseils et leurs lectures attentives. Les échanges que nous avons pu avoir ensemble ont été très enrichissants.

J'adresse mes sincères remerciements à tous les professeurs, tout au long de mon parcours universitaire, et également toutes les personnes qui par leurs paroles, leurs écrits, leurs conseils et leurs critiques ont guidé notre réflexion.

Je remercie sincèrement les membres du jury qui ont accepté d'examiner ce travail.

Dédicace

Je dédie ce manuscrit:

A mes chers parents qui m'ont soutenu et encouragé durant ces années d'études, qu'ils trouvent ici le témoignage de ma profonde reconnaissance.

A mon amie Bouhada Ahlem qui m'a donné confiance et m'a beaucoup encouragé. Je lui souhaite tout le bonheur du monde.

A mon frère de sang Zereg Abdeljaber et mon frère d'amitié si Ahmed Ahmed

A mes amis qui ont partagé avec moi tous les moments d'émotion lors de la réalisation de ce travail, surtout : Driouech Fares, Keddouri Mohamed Amine et Ati Sid Ali. Je leur souhaite une belle et longue vie.

Table des matières

Résumé
Remerciements
Dédicaces
Table des matières
Liste des figures
Liste des tableaux
Introduction générale1
Chapitre I : Bref aperçu sur les semi-conducteurs
I.1. Introduction
I.2. Les paramètres caractéristiques d'un semi-conducteur
I.2.3. Semi-conducteur
I.2.4. Bandes d'énergie4
I.2.5. La bande de la conduction et la bande de valence5
I.2.6 La bande interdite ou gap5
I.2.7. Types de recombinaisons7
I.3. Les matériaux semi-conducteurs
I.3.1. Semi-conducteurs intrinsèques (purs)7
I.3.2 Les semi-conducteurs extrinsèques
I.3. 3. Les semi-conducteurs III-V
I.4. Etude théorique11
I.4.1 Définition de la loi de Végard11
I.4.2. Paramètre de maille11
I.4.3. Epaisseur critique12
I.4.4. L'épitaxie
I.4.5. La contrainte
I.5. La structure des puits quantiques14
1.6. Equation de Schrödinger dans un puits quantique15
1.7. Transitions intersousbandes16
1.8. Conclusion

Chapitre II : Etude	d'une	structure	à	puits	quantique	à	base	de	GaAsSb/GaSb	
(transitions intersoush	andes).	•								

2.1. Introduction	17
2.2. Propriétés optoélectroniques	17
2.2.1. Paramètre de maille	18
2.2.2. La contrainte	19
2.2.3. L'énergie de la bande interdite	19
2.2.4. La masse effective	21
2.2.5. Les alignements des bandes	22
2.2.6. Energie de quantification	25
2.2.7. Energie de transition et longueur d'onde	26
2.2.8. L'absorption intersousbandes	27
2.3. Conclusion	28
Conclusion générale	29
Liste des abréviations	

Références

Liste des figures

Figure 1.1. Les bandes d'énergie dans isolant, semi-conducteur et conducteur
Figure 1.2. Schéma de principe d'énergie de gap6
Figure 1.3. Schéma de principe d'un semi-conducteur à gap direct et indirect6
Figure 1.4. Structure cristalline du Silicium pur8
Figure 1.5. Structure Zinc Blende10
Figure 1.6. Structure Wurtzite11
Figure 1.7. Exemple d'une épitaxie n ⁻ sur un substrat de type n ⁺ 13
Figure 1.8 Diagramme de puits quantiques en 3D14
Figure 1. 9. Schéma d'une structure à puits quantique15
Figure 2.1. Schéma de la structure à puits quantique GaAsSb/GaSb 17
Figure 2.2: Variation du paramètre de maille de l'alliage GaAs _x Sb _{1-x} en fonction de la
concentration d'As
Figure 2.3 : Variation de la contrainte en fonction de la concentration d'As de la structure
GaAs _x Sb _{1-x} /GaSb19
Figure 2.4: Evolution des bandes d'énergie E_g^{Γ} , E_g^{X} et E_g^{L} à T=300K21
Figure 2.5: Variation de la masse effective en fonction des concentrations d'As des
différents porteurs é, hh, lh et SO22
Figure 2. 6 : Schéma du décalage des bandes ΔE_c et ΔE_v dans la structure à puits quantique
GaAs _x Sb _{1-x} /GaSb22
Figure 2.7: Variation de ΔE_c et ΔE_v en fonction de la concentration d'As23
Figure 2.8: Variation de l'énergie de quantification en fonction de la largeur du puits pour la
structure GaAs _{0.05} Sb _{0.95} /GaSb24
Figure 2.9: Variation de l'énergie de quantification en fonction de la largeur du puits pour la
structure GaAs _{0.1} Sb _{0.9} /GaSb25
Figure 2.10: Variation de l'énergie de quantification en fonction de la largeur du puits pour la
structure GaAs _{0.2} Sb _{0.8} /GaSb25
Figure 2.11: Variation de E_{12} en fonction de L_p (<i>x</i> =0.05, 0.1 et 0.2)26
Figure 2.12: Variation de de λ_{12} en fonction de L _p (<i>x</i> =0.05, 0.1 et 0.2)26
Figure 2.13: Variation du coefficient d'absorption intersousbandes en fonction de λ (<i>x</i> =0.15,
0.20 et 0.25)

Liste des tableaux

Tableau 1.1. Extrait de la classification périodique des éléments chimiques	9
Tableau 1.2. Propriétés de quelques composés binaires des semi-conducteurs III-V	9
Tableau 2.1 : Paramètre de maille des matériaux binaires GaAs et GaSb	18
Tableau 2.2 : Energie de gap des matériaux binaires GaAs et GaSb	20
Tableau 2.3 : Paramètre de Bowing	20

Introduction générale

Dans les semi-conducteurs, un puits quantique peut être obtenu par l'empilement d'un matériau de petit gap (E_{g1}) entouré de chaque côté d'un matériau de gap (E_{g2}) plus grand. Dans le cas des puits quantique de type I, $(E_{g1} < E_{g2})$, la bande de conduction et la bande de valence du matériau central vont se trouver à l'intérieur du gap du matériau de plus grand gap.

Ainsi les bandes de conduction et de valence vont présenter un profil de puits quantique. Cela va mener à l'apparition des niveaux confinés dans la direction perpendiculaire au plan des couches. Ces niveaux sont les sous-bandes. Ils existent plusieurs types de sous-bandes, celles de la bande de valence et celle de la bande de conduction.

Une transition intersousbande est une transition entre deux sous-bandes dans la même bande. C'est-à-dire dans la bande de conduction, ou deux sous-bandes de la bande de valence. Ces transitions sont aussi appelées unipolaires car elles ne mettent en jeu qu'un seul type de charge, soit des électrons uniquement, soit des trous seulement. Ils existent aussi des transitions intersousbandes dans les fils quantiques ainsi que les boîtes quantiques.

Les transitions intersousbandes sont donc en opposition avec les transitions interbandes qui auront lieu entre des électrons et des trous dans un semiconducteur et qui constituent le cas de fonctionnement de la plus grande majorité des DELs (diodes electro-luminescentes) et des lasers semiconducteurs.

Le but de ce travail est de mener une étude sur l'étude des transitions intersousbandes ainsi que le coefficient d'absorption des structures à puits quantiques a base du ternaire GaAsSb/GaSb.

Nous avons divisé notre mémoire en deux chapitres entourés d'une brève introduction et d'une conclusion générale.

Le premier chapitre est consacré à l'étude des principales propriétés des matériaux semi-conducteurs III-V, tout en commençant par une présentation générale de ces derniers, ensuite on définit leur réseau cristallin, ainsi que leur structure de bande d'énergie. On donne aussi les expressions nécessaires permettant de mener notre simulation : tel que le calcul de la contrainte ainsi de suite.

Dans le chapitre 2, on explore la structure GaAsSb/GaSb en détaillant les propriétés optoélectroniques principales. Par conséquent, il sera très intéressant de voir qu'elle effet ça va avoir l'introduction de l'arsenic sur les propriétés de ce matériau et surtout sur le coefficient de l'absorption intersousbandes.

Pour en finir, on termine par une conclusion générale résumant les principaux résultats du travail.

Chapitre I : Bref aperçu sur les semi-conducteurs

I.1 Introduction :

La recherche sur les matériaux semi-conducteurs a commencée au début du 19^{ème} siècle. Au fil des années, de nombreux semi-conducteurs ont été étudiés. Parmi les semi-conducteurs les plus célèbres, nous trouvons le silicium (Si) et le germanium (Ge) de la colonne IV du tableau périodique. Ces deux semi-conducteurs sont composés d'atomes identiques, mais d'autres, comme l'arséniure de gallium GaAs (III-V) sont composés d'atome d'éléments différents : Ga (III) et As (V). La composition des semi-conducteurs permet d'accéder à de nouvelles propriétés électriques et optiques

Dans ce chapitre, nous allons voir quelques notions importantes sur les semi-conducteurs tel que : la structure de bandes (bande de conduction et bande de valence), l'énergie de gap,... etc. Puis, nous allons voir le concept des matériaux III-V et leurs propriétés. Aussi, nous allons voir les puits quantiques et quelques équations mathématiques nécessaires dans notre étude, En fin, nous allons voir un bref aperçu sur les transitions intersousbandes.

I.2 Les paramètres caractéristiques d'un semi-conducteur :

Les matériaux solides peuvent être classés en trois groupes qui sont : les isolants, les conducteurs et les semi-conducteurs.

I.2.1 Les isolants :

Sont Les matériaux dont la bande de conduction supérieure est totalement remplie, avec une bande interdite dont la largeur est supérieure à 9 eV (voir figure 1.1)

I.2.2 Les Conducteurs :

Sont les corps, dont la bande supérieure est partiellement remplie (ex : Li, Na, K, Rb, Cs....). La bande de valence et la bande de conduction se chevauchent, il n y a pas de bande interdite. Il existe donc, à toute température des électrons libres dans la bande de conduction.

I.2.3 Semi-conducteur :

Un semi-conducteur est un matériau qui présente une conductivité intermédiaire entre celle des conducteurs et des isolants. La spécificité d'un semi-conducteur par rapport aux autres

matériaux réside dans les propriétés suivantes : la conductivité, la photoconduction et le redressement.

I.2.3.1 Conductivité :

Pour un métal, la conductivité décroît lentement avec la température, ce qui est de même pour un isolant. Par contre, elle croît très rapidement avec la température pour un semiconducteur. Dans un métal, la conduction est assurée par un seul type de porteurs qui sont les électrons.

I.2.3.2 Photoconduction :

Un semi-conducteur éclairé voit sa résistivité diminuer. Cette propriété est absente chez les conducteurs et les isolants.

I.2.3.3 Redressement :

Dans un semi-conducteur, le passage du courant est dans un seul sens. Cette propriété est très utilisée pour le redressement de courant alternatif.

I.2.4 Bandes d'énergie :

La structure de bande des semi-conducteurs est analogue à celle des isolants avec une zone interdite séparant la bande de valence de celle de conduction plus faible. Elle est par exemple de 1.17 eV pour le silicium.

À T= 0K, la bande permise occupée (la plus haute) est complètement remplis : c'est la bande de valence. La bande permise vide (la plus basse) est la bande de conduction. Lorsque la température augmente, l'énergie d'agitation thermique excite un certain nombre d'électrons de la bande de valence vers la bande de conduction.

A cette conduction d'origine électronique, s'ajoute celle des trous qui sont les places vacantes laissées par les électrons dans la bande de valence. Pour un semi-conducteur, la conductivité est d'autant plus grande que le nombre d'électrons dans la bande de conduction est élevé [1].



Figure 1.1. Les bandes d'énergie dans isolant, semi-conducteur et conducteur [2].

I.2.5 La bande de la conduction et la bande de valence :

La bande de valence et la bande de conduction sont les bandes les plus proches du niveau de Fermi et déterminent ainsi la conductivité électrique du solide. Dans les isolants et les semiconducteurs, la bande de conduction est la plage la plus basse d'états électroniques vacants.

Sur un graphique de la structure de la bande électronique d'un matériau, la bande de valence est située en dessous du niveau de Fermi, tandis que la bande de conduction est située au-dessus. Dans les semi-conducteurs, les électrons peuvent atteindre la bande de conduction, lorsqu'ils sont excités.

I.2.6 La bande interdite ou gap :

Les semi-conducteurs sont caractérisés par un écart en énergie entre la bande de conduction et la bande de valence, appelée bande interdite ou gap. Le gap (E_g) est la largeur de la bande interdite, c'est-à-dire la différence d'énergie entre le minimum absolu de la bande de conduction E_c et le maximum absolu de la bande de valence E_v (figure I.2).

Ce gap correspond à l'énergie nécessaire au système pour faire passer un électron de la bande de valence à la bande de conduction.



Figure 1.2. Schéma de principe d'énergie de gap.

I.2.6.1. Gap direct et gap indirect :

La notion de gap direct et indirect est liée à la représentation de la dispersion énergétique d'un semi-conducteur : diagramme E (Energie) - k (Vecteur d'onde). Ce diagramme permet de définir spatialement les extrema des bandes de conduction et de valence. On parle de semi-conducteur à gap direct, pour un semi-conducteur dont le maximum de la bande de valence et le minimum de la bande de conduction se situent à valeur voisine du vecteur d'onde k sur le diagramme E(k). On parle de semi-conducteur à gap indirect, pour un semi-conducteur dont le maximum de bande de valence et le minimum de la bande de conduction se situe à des valeurs distinctes du vecteur d'onde k sur le diagramme E(k), voir figure 1.3.



Figure 1.3. Schéma de principe d'un semi-conducteur à gap direct et indirect.

I.2.7. Types de recombinaisons :

Les électrons en excès, créés dans le semi-conducteur par une excitation extérieure telle qu'uneinjection électronique ou un faisceau de lumière, ont tendance à revenir à l'équilibre en traversant le gap avec une certaine cinétique : c'est le processus de recombinaison de la paire électron-trou. Ce mécanisme de recombinaison peut se faire de façons différentes. On distingue alors deux types de recombinaisons [3] :

I.2.7.1 Recombinaisons radiatives :

L'énergie de cette recombinaison est libérée sous forme de photon. Les plus importantes recombinaisons radiatives sont [3] :

- la recombinaison bande à bande entre un électron de la bande de conduction et un trou de la bande de valence. C'est la recombinaison radiative la plus dominante.
- la recombinaison à travers des niveaux donneurs et accepteurs.

I.2.7.2 Recombinaisons non radiatives :

Dans ce type de recombinaison, on distingue [3] :

La recombinaison de type Auger :

Elle se fait par transition directe bande à bande ou par l'intermédiaire d'un centre recombinant. L'énergie résiduelle est cédée à une troisième particule (électron ou trou) qui est excitée à un état d'énergie supérieur puis transférée de façon non radiative au réseau.

La recombination de type Shockley-Read -Hall (SRH):

C'est le mécanisme dominant dans la plupart des semi-conducteurs. La recombinaison se fait en deux étapes, par l'intermédiaire d'un centre recombinant qui est un défaut ou une impureté qui introduit un niveau profond dans la bande interdite.

I.3 Les matériaux semi-conducteurs :

I.3.1. Semi-conducteurs intrinsèques (purs) :

Il est impossible de créer des semi-conducteurs intrinsèques totalement purs parce que les impuretés à un certain point pendant le processus de croissance contaminent le matériau [4]. Si un lien de semi-conducteur intrinsèque est cassé, un électron libre et un trou sont créés simultanément, de même, si un électron est excité de la bande de valence à vers la bande de conduction alors, un trou sera simultanément créé dans la bande de valence [5]. La structure cristalline du silicium pur est présentée dans la figure 1.4.



Figure 1.4. Structure cristalline du Silicium pur.

I.3.2 Les semi-conducteurs extrinsèques :

Les semi-conducteurs extrinsèques sont créés en ajoutant des atomes d'impuretés dans les matériaux intrinsèques. Ajouter des impuretés dans un matériel peut être bénéfique aux performances du semi-conducteur. L'ajout des impuretés dans la substance avec l'intention de contrôler ses caractéristiques de fonctionnement est connu sous le nom de dopage [6], ce processus peut engendrer des changements des propriétés électriques.

Le dopage est employé pour contrôler le nombre d'électrons ou de trous dans un matériel par l'addition d'une quantité déterminée d'impuretés, avec résultats des matériaux de type-p ou de type-n en concordance avec le nombre des trous ou des électrons libres. Le dopage d'un cristal intrinsèque consiste à substituer des atomes de semi-conducteurs du réseau par des atomes étrangers.

I.3. 3. Les semi-conducteurs III-V :

Les semi-conducteurs III-V, sont des matériaux composés d'un ou plusieurs éléments chimiques de la colonne III et la colonne V de la classification périodique de Mendeleïev. Le tableau I.1 regroupe l'ensemble de cette classification.

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

Tableau 1.1. Extrait de la classification périodique des éléments chimiques.

I.3.3.1. Les alliages des semi-conducteurs III-V :

Il existe également des semi-conducteurs composites: binaires, ternaires, quaternaires, voire quinaires, respectivement constitués de deux, trois, quatre ou cinq espèces chimiques différentes

• . Les composés binaires :

Les semi-conducteurs binaires de la classe (III-V) sont composés d'un élément de la colonne III et d'un autre élément de la colonne Vde la classification périodique, donc deux atomes dont la somme d'électrons de valence égale à huit par exemple : les composés à base aluminium (AlP, AlAs, AlSb), ou les composés à base gallium (GaAs, GaSb), d'indium (InN, InP, InAs, InSb), ...etc.

Le tableau 1.2 montre les propriétés de quelques composés binaires des semi-conducteurs III-V, d'où E_g l'énergie de gap et « *a* » le paramètre de maille [7].

Composés binaires III-V	E _g (eV)	a (Å)	Structure debande
AIAs	2.16	5.6622	Indirecte
AIsb	1.58	6.1335	Indirecte
GaP	2.26	5.4512	Indirecte
GaAs	1.43	5.6532	Directe
GaSb	0.73	6.0959	Directe
InP	1.35	5 .8688	Directe

Tableau 1.2. Propriétés de quelques composés binaires des semi-conducteurs III-V.

Les composés ternaires :

Pour obtenir un alliage ternaire, on prend un élément ou plus de la colonne III ou la colonne V et on les distribue aléatoirement sur les éléments de la colonne III ou V. La notation la plus connue utilisée pour l'alliage ternaire est : $III_xIII_{1-x}V$ ou III V_yV_{1-y} , avec x et y des coefficients stœchiométrique qui varient entre 0 et 1, par exemple : $Al_xGa_{1-x}As$, InP_yAs_{1-y} [8].

Les composés quaternaires :

Ce type d'alliage fait intervenir quatre composés binaires AC, AD, BC et BD, ces alliages ont la forme : $A_xB_{1-x}C_yD_{1-y}$, par exemple : $Al_xGa_{1-x}In_yP_{1-y}$, $In_xGa_{1-x}As_yP_{1-y}$ [9].

I.3.3.2 Les structure cristalline du semi-conducteur III-V :

Seuls les éléments nécessaires à l'étude des semi-conducteurs usuels seront présentés. Les systèmes les plus importants pour les semi-conducteurs (dérivés des systèmes cubiques, cubiques centrés et cubiques faces centrées) sont :

- ✓ La structure Zinc-blende
- ✓ La Structure Wurtzite.

La plupart des semi-conducteurs cristallisent en ces réseaux cristallins. La majorité des semiconducteurs du groupe III-V ont une structure cristalline de type Zinc-blende comme l'arséniure de Gallium (GaAs) ou (InSb) par exemple, voir figure 1. 5.



Figure 1.5. Structure Zinc Blende.

Les semi-conducteurs existent sous forme de structure zinc blende, mais croissent généralement sous la forme d'une autre structure appelée structure Wurtzite formée par deux réseaux de Bravais hexagonaux tel que l'on peut voir sur la figure 1.6.



Figure 1.6. Structure Wurtzite [10].

I.4. Etude théorique:

Pour la détermination des paramètres électroniques et optiques des matériaux semiconducteurs, on utilise la loi de Végard.

I.4.1 Définition de la loi de Végard :

La loi de Végard est considérée comme une loi essentielle pour déterminer les propriétés d'un matériau composé tel que : l'énergie du gap, le paramètre de maille, les constantes élastiques, ...etc [11].

I.4.2. Paramètre de maille:

Les paramètres cristallins, aussi appelés paramètres de maille, sont des grandeurs utilisées pour décrire la maille d'un cristal, comme le cas d'une structure ternaire $GaAs_xSb_{1-x}$. On considère cette variation comme quasi-linéaire et, est donnée par la loi de Végard :

$$a_{GaAsSb} = x. a_{GaAs} + (1 - x). a_{GaSb}$$

$$(1.1)$$

I.4.3. Epaisseur critique :

Ce paramètre donne la possibilité de connaitre l'épaisseur seuil d'épitaxie qu'il ne faut pas dépasser. Si on dépasse cette épaisseur on aura des dislocations entre le substrat et la couche épitaxiée

Le modèle le plus utilisé pour calculer l'épaisseur critique est celui de K. Koksal et B. Gonul [12], qui traite le cas d'un matériau faiblement désaccordé par rapport au substrat (désaccord de maille $\Delta a < 2\%$), il est donné par l'équation suivante :

$$h_{c} = \frac{a_{e}}{\beta\sqrt{2}\pi\beta} \cdot \frac{1 - (0.25.\gamma)}{(1+\gamma)} \cdot \ln\left(\frac{h_{c}\sqrt{2}}{a_{e}} + 1\right)$$
(1.2)

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} : les constantes élastiques obtenues par l'interpolation linéaire des binaires constituants le matériau

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

I.4.4. L'épitaxie :

L'épitaxie est une étape technologique consistant à faire croître du cristal sur du cristal. Etymologiquement, "épi" signifie "sur" et "taxis", "arrangement".

La technique consiste donc à utiliser le substrat comme germe cristallin de croissance et à faire croître la couche par un apport d'éléments constituant la nouvelle couche. La couche épitaxiée peut être dopée ou non dopée.

On parlera, dans le cas où :

 ✓ Les matériaux sont identiques, d'homoépitaxie ; par exemple, épitaxie d'une couche n⁻ sur une couche n⁺ (figure 1.7).



Figure 1.7. Exemple d'une épitaxie n⁻ sur un substrat de type n⁺.

✓ Les matériaux sont différents, d'hétéro épitaxie ; par exemple croissance d'une couche de Ga_xAl_{1-x}As sur une couche de GaAs ; cet assemblage permet la fabrication de superréseaux ou de couches à forte mobilité destinées aux transistors HEMT (High Electron Mobility Transistor).

Dans ce dernier cas, la croissance ne sera possible que s'il y a accord de maille, c'est-àdire même réseau cristallin et paramètres de maille très voisins 1 à 2 % au maximum d'écart). Il existe principalement-trois méthodes expérimentales : épitaxie par jet moléculaire, EJM ou MBE (Molecular Beam Epitaxy), épitaxie en phase liquide ou LPE (Liquid Phase Epitaxy) et épitaxie en phase vapeur ou VPE (Vapor Phase Epitaxy). Pour chacune de ces techniques, des appareillages spécifiques sont mis en œuvre.

I.4.5. 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 [11].

Le substrat du paramètre de maille a_s , différent de celui de la couche épitaxiée a_e , impose sa maille à cette dernière. Cette différence de maille provoque une contrainte, soit en tension ou en compression qui se traduit par:

• Dans le plan de la couche, on aura une contrainte biaxiale :

$$\varepsilon_{xx} = \varepsilon_{yy} = \frac{a_s - a_e}{a_e} \tag{1.3}$$

Et, dans la direction de croissance, on aura une contrainte uniaxiale :

$$\varepsilon_{zz} = -2.\frac{c_{11}}{c_{12}}\varepsilon_{xx}$$
 (1.4)

Avec :

 a_{e} : le paramètre de maille de la couche épitaxiée

 a_{s} : le paramètre de maille de la couche substrat.

 C_{11} , C_{12} : les constantes élastiques obtenues par interpolation linéaire des binaires qui composent le matériau semi-conducteur.

On distingue deux types de contraintes:

- ✓ Contrainte en tension si $a_e < a_{s.}$
- ✓ Contrainte en compression si $a_e > a_s$.

I.5. La structure des puits quantiques:

Un puits quantique est une structure cristalline qui désigne une hétéro structure de semiconducteurs. Il est obtenu en faisant croître une couche d'un matériau semi- conducteur A entre deux couches d'un autre matériau semi-conducteur B. Ce dernier à un gap d'énergie supérieur à celui du matériau A. La discontinuité entre les bandes d'énergie dans les deux matériaux crée une barrière de potentiel qui confine les porteurs (électron et trou) dans le puits quantique.

La dénomination quantique intervient quand il y a confinement des porteurs, c'est-à-dire pour des épaisseurs de puits inférieures typiquement à 300 Å. La figure 1.9 montre un diagramme de puits en 3D.



Figure 1.8 Diagramme de puits quantiques en 3D.

Dans un puits quantique, il y a trois paramètres principaux qui peuvent modifier l'énergie de confinement :

- \checkmark La largeur de puits quantique L_p.
- ✓ L'énergie de la bande de conduction ΔE_c .
- ✓ L'énergie de la bande de valence ΔE_v .

Considérons une hétérostructure constituée d'une couche de semi-conducteur SC₁ d'épaisseur L₁ en sandwich entre deux couches de semi-conducteurs SC₂ tel que $E_{g1} < E_{g2}$. La différence de gap ΔE_G est distribuée entre les bandes de conduction et de valence. ΔE_c et ΔE_v sont les profondeurs du puits quantique (discontinuités des bandes) qui sont indiqués sur la figure 1.10



Figure 1. 9. Schéma d'une structure à puits quantique.

1.6. Equation de Schrödinger dans un puits quantique :

Dans un puits quantique, les porteurs de charge son confinés à des niveaux énergétiques différents, pour définir ces valeurs propres d'énergie, on étudie le comportement d'une particule confinée dans un puits de potentiel unidimensionnel et d'une largeur L_p .Ces valeurs propres peuvent être obtenues on résolvant l'équation de Schrödinger indépendante du temps et qui peut être écrite comme suit [13] :

$$\frac{-h^2}{2m^*}\frac{d^2}{dz^2}\psi(z) + V(z)\psi(z) = E\psi(z)$$
(1.5)

Avec :

- \hbar : constante de Planck réduite.
- *m**: masse effective de la particule.
- $\psi(z)$: fonction d'onde.
- *V*(*z*): fonction décrivant le potentiel.
- *E* : l'énergie de quantification.

1.7. Transitions intersousbandes :

Lorsqu'on fait croître une couche nanométrique d'un semiconducteur de gap A prise en sandwich entre deux couches d'un autre semiconducteur de gap B plus grand, on obtient un puits quantique. La différence d'énergie de bande interdite des deux matériaux se répartit entre la bande de valence et la bande de conduction formant ainsi un puits de potentiel pour les électrons ou les trous (voir figure 1.9). Lorsque l'épaisseur du matériau constituant le puits est suffisamment faible pour que l'effet de taille quantique se manifeste, le mouvement des électrons (ou des trous) dans le puits est quantifié dans la direction perpendiculaire au plan des couches tout en restant libre dans le plan des couches [14]. Cette quantification unidimensionnelle de l'énergie des porteurs donne lieu à la formation de sousbandes dans la bande de conduction ou de valence (figure 1.9). La particularité des transitions intersousbandes est remarquable. Ce type de transitions mène à de nombreux effets physiques nouveaux et donc à un large domaine d'application.

1.8. Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons présenté les propriétés physiques des matériaux III-V, ainsi que les structures cristallines, les bandes d'énergies, et les hétérostructures. L'utilisation des matériaux composés apporte de nombreux avantages en termes de propriétés des matériaux. En effet, le but de leur fabrication est de profiter des bonnes propriétés de chaque matériau afin d'en former un qui sera mieux adapté à certaines applications.

La combinaison de deux matériaux ou plus, permet donc d'améliorer les propriétés d'un matériau, est cela a fait l'objet de plusieurs étude et l'intérêt de plusieurs chercheurs. Le chapitre deux sera consacré à la discussion des résultats obtenus par la simulation de la structure proposée.

Chapitre 2 : Etude d'une structure à puits quantique à base de GaAsSb/GaSb (transitions intersousbandes).

2.1. Introduction :

Depuis les années 90, les dispositifs optoélectroniques utilisant les transitions intersousbandes ont largement démontré la puissance et la versatilité des concepts d'ingénierie quantique. Les composants reposent sur l'émission radiative des électrons entre les niveaux confinés de structures à puits quantiques. Dans l'ensemble de ce chapitre nous allons effectuer une étude théorique sur les propriétés optoélectroniques de la structure à puits quantique GaAsSb/GaSb en se basant sur les transitions intersousbandes dans la bande de conduction.

Dans la première partie, nous allons vérifier l'effet de la composition de l'arsenic (As) sur le paramètre de maille, la bande interdite (gap) ainsi que les alignements des bandes et les masses effectives. Dans une deuxième partie, nous allons voir cet effet sur les transitions intersousbandes ainsi que le coefficient d'absorption intersousbandes.

2.2. Propriétés optoélectroniques:

La figure 2.1 nous montre la structure dont on va étudier.



Figure 2.1: Schéma de la structure à puits quantique GaAsSb/GaSb.

2.2.1. Paramètre de maille :

Le paramètre de maille de l'alliage $GaAs_xSb_{1-x}$ comme nous l'avons vu au chapitre 1, évolue linéairement en fonction de la composition de l'arsenic suivant la loi de Végard. Il sera défini par l'expression suivante :

$$a = x.a(GaAs) + (1 - x).a(GaSb).$$
 (2.1)

Le tableau 2.1 donne le paramètre de maille des binaires des semi-conducteurs III-V : GaAs et GaSb utilisés dans ce travail.

Tableau 2.1 : Paramètre de maille des matériaux binaires GaAs et GaSb [15]

<u>,</u>	GaAs	GaSb
a (Å)	5 .653	6 .059

La figure (2.2) illustre la variation du paramètre de maille de l'alliage ternaire $GaAs_xSb_{1-x}$ en fonction des concentrations de l'arsenic. Le paramètre de maille décroit en augmentant la concentration de l'arsenic (As).



Figure 2.2 : Variation du paramètre de maille de l'alliage GaAs_xSb_{1-x} en fonction de la concentration d'As.

2.2.2. La contrainte :

La différence des valeurs des paramètres de mailles du matériau épitaxié $GaAs_xSb_{1-x}$ sur un substrat GaSb, provoque l'apparition de la contrainte. La figure 2.3 représente l'évolution de la contrainte en fonction des concentrations de l'arsenic. L'ajout de l'arsenic mène à une croissance de la valeur de la contrainte qui est de type tension.



Figure 2. 3 : Variation de la contrainte en fonction de la concentration d'As de la structure $GaAs_xSb_{1-x}/GaSb$.

2.2.3. L'énergie de la bande interdite :

L'incorporation des atomes de l'arsenic dans le GaSb peut se modélisé en utilisant la loi de Végard tout en ajoutant le facteur de Bowing C.

Les énergies des bandes interdites selon les trois vallées Γ , X et L sont données par l'équation (2.2) :

$$E_g(GaAsSb) = x \cdot E_g(GaAs) + (1 - x) \cdot E_g(GaSb) - x \cdot (1 - x) \cdot C$$
(2.2)

Les tableaux 2.2 et 2.3 résument, respectivement, les valeurs des bandes interdites des binaires GaAs et GaSb ainsi que le paramètre de Bowing pour le ternaire GaAsSb dans les trois vallées Γ , X et L, utilisés dans le calcul.

	E_g^{Γ}	E_g^{X}	$E_g^{ m L}$
GaAs	1.43 eV	1.91 eV	1.72 eV
GaSb	0.72 eV	1.05 eV	0.76 eV

Tableau 2.2 : Energie de gap des matériaux binaires GaAs et GaSb [15].

Tableau 2.3 : Paramètre de Bowing [15]

	E_g^{Γ}	E_g^{X}	$E_g^{ m L}$
C (GaAsSb)	1.25 eV	1.2 eV	1.2 eV

La figure 2.4 montre la variation de l'énergie de la bande interdite du ternaire GaAsSb dans les trois vallées Γ , X et L (Γ , X et L sont les points de plus haute symétrie dans la zone de Brillouin) en fonction des concentrations de l'arsenic. L'ajout de l'arsenic mène à une diminution du gap E_g^{Γ} mais au-delà de $x \approx 0.25$, le gap augmente et subit une forte courbure. Le gap est de type direct quel que soit la concentration d'arsenic introduite.



Figure 2.4: Evolution des bandes d'énergie $E_g{}^{\Gamma}$, $E_g{}^{X}$ et $E_g{}^{L}$ à T=300K.

2.2.4. La masse effective :

La masse effective est un paramètre très important en physique du solide pour l'étude du transport des électrons. La masse effective peut-être supérieure ou inférieure à la masse réelle de l'électron.

La masse effective des porteurs : électrons (é), trous lourds (hh), trous légers (lh) et spin-orbite (SO) est inversement proportionnelle à la dérivée seconde de la courbe de dispersion de l'énergie dans l'espace k, elle peut être exprimée par les équations suivantes :

$$m_{hh} = \frac{m_0}{\gamma_1 - 2\gamma_2}, \ m_{lh} = \frac{m_0}{\gamma_1 + 2\gamma_2}, \ m_{SO} = \frac{m_0}{\gamma_1}$$
 (2.3)

 γ_1 , γ_1 sont les paramètres de Luttinger [15].

D'après la figure (2.5), on remarque que l'incorporation de l'arsenic mène à l'augmentation de la valeur de la masse effective de tous les porteurs.



Figure 2.5: Variation de la masse effective en fonction des concentrations d'As des différents porteurs é, hh, lh et SO.

2.2.5. Les alignements des bandes :

Les deux structures de bandes des deux matériaux, épitaxié GaAsSb et substrat GaSb, sont positionnées de façon discontinue les unes des autres tel que nous avons schématisé sur la figure 2.6. ΔE_c et ΔE_v sont, respectivement, les discontinuités de la bande de conduction la bande de valence.



Figure 2. 6 : Schéma du décalage des bandes ΔE_c et ΔE_v dans la structure à puits quantique GaAs_xSb_{1-x}/GaSb.

Le calcul des décalages des bandes se fait selon le modèle de la théorie du solide de Van De Walle [16] :

$$\Delta Ec = Ec(GaSb) - Ec(GaAsSb)$$
(2.4)

$$\Delta Ev = Ev(GaAsSb) - Ev(GaSb)$$
(2.5)

La figure (2.7) nous révèle l'évolution des décalages de bande ΔE_c et ΔE_v entre le puits GaAsSb et la barrière GaSb en fonction de la concentration de l'arsenic.

On peut constater de la figure (2.7) que le décalage de bande de la bande de conduction ΔE_c augmente rapidement avec l'incorporation de l'arsenic ce qui est bénéfique pour les transitions intersousbandes.

La figure (2.7), nous montre que le décalage de bande de la bande de valence ΔE_v augmente progressivement avec l'incorporation l'arsenic.



Figure 2.7: Variation de ΔE_c et ΔE_v en fonction de la concentration d'As.

2.2.6. Energie de quantification

Les figures (2.8), (2.9) et (2.10) montrent la variation de l'énergie de quantification, respectivement, des structures GaAs_{0.05}Sb_{0.95}/GaSb, GaAs_{0.1}Sb_{0.9}/GaSb et GaAs_{0.2}Sb_{0.8}/GaSb.

L'ajout de l'arsenic mène à la création de nouveaux niveaux énergétiques dans la bande de conduction. On remarque que pour une structure GaAs_{0.05}Sb_{0.95}/GaSb de puits de largeur 100 Å, il y a un seul niveau d'énergie, alors que pour la structure GaAs_{0.1}Sb_{0.9}/GaSb, on aura deux niveaux et qui seront trois pour la structure GaAs_{0.2}Sb_{0.8}/GaSb.

Aussi, l'augmentation de la concentration d'As mènera à l'augmentation de la valeur de l'énergie de quantification. Pour la structure GaAs_{0.05}Sb_{0.95}/GaSb de puits de largeur 50 Å, l'énergie du premier niveau sera de 58 meV, alors que pour la structure GaAs_{0.1}Sb_{0.9}/GaSb, la valeur est de 85 meV et qui sera 116.3 meV pour la structure GaAs_{0.2}Sb_{0.8}/GaSb.



Figure 2.8: Variation de l'énergie de quantification en fonction de la largeur du puits pour la structure GaAs_{0.05}Sb_{0.95}/GaSb.



Figure 2.9: Variation de l'énergie de quantification en fonction de la largeur du puits pour la structure GaAs_{0.1}Sb_{0.9}/GaSb.



Figure 2.10: Variation de l'énergie de quantification en fonction de la largeur du puits pour la structure GaAs_{0.2}Sb_{0.8}/GaSb.

2.2.7. Energie de transition et longueur d'onde

Les figures 2.11 et 2.12 représentent, respectivement, la variation de l'énergie de transition (E_{12}) en fonction de la largeur du puits pour différentes valeurs de concentration d'arsenic et la longueur d'onde correspondante. Les transitions se font entre les deux premiers niveaux énergétiques 1 et 2. L'ajout de l'arsenic diminue la valeur de la longueur d'onde correspondante.



Figure 2.11: Variation de E_{12} en fonction de L_p (*x*=0.05, 0.1 et 0.2).



Figure 2.12: Variation de de λ_{12} en fonction de L_p (*x*=0.05, 0.1 et 0.2).

2.2.8. L'absorption intersousbandes :

Le coefficient d'absorption α est défini comme étant le rapport entre l'énergie absorbée par unité de volume et par unité de temps, et l'énergie incidente. Pour une transition entre les sousbandes *i* et *f*, il est donné par [14]:

$$\alpha = \frac{\pi e^2 (E_i - E_f)}{2m_0 L_p \omega n c \varepsilon_0} f_{12} \frac{(\sin \theta)^2}{\cos \theta} \left(n_i^s - n_f^s \right) g \left(E_f - E_i - \hbar \omega \right)$$
(2.6)

e : la charge de l'électron; m₀: la masse de l'électron; \hbar : la constante réduite de Planck; ϵ_0 : la permittivité du vide; L_p : la largeur du puits quantique ; c : célérité de la lumière; n : L'indice de réfraction relatif du matériau.

 f_{12} : la force d'oscillateur décrivant la force de couplage quantique entre les sousbandes *i* et *f*.

 $n_i^s - n_f^s$: la différence de population entre les sousbandes i et f par unité de volume.

g(E): correspond à une fonction de type Lorentzien, elle est donnée par :

$$g(E) = \frac{\hbar\Gamma}{\pi} \frac{1}{\left(E_f - E_i - \hbar\omega\right)^2 + (\hbar\Gamma)^2}$$
(2.7)

La figure 2.13 montre la dépendance du coefficient d'absorption intersousbande à la concentration de l'arsenic dans le puits quantique GaAsSb/GaSb de largeur 70 Å. L'augmentation de la concentration d'arsenic mène à la diminution de la valeur du coefficient d'absorption et décale la longueur d'onde correspondante vers le bleu. Donc, l'augmentation du coefficient d'absorption nécessite désormais la réduction de la valeur de la concentration d'arsenic.



Figure 2.13: Variation du coefficient d'absorption intersousbandes en fonction de λ (*x*=0.15, 0.20 et 0.25).

2.3. Conclusion

Nous avons présenté une étude théorique des transitions intersousbandes dans la bande de conduction des puits quantiques GaAsSb/GaSb. Les paramètres régissant le confinement quantique dépendent de plusieurs facteurs tels que la masse effective et la discontinuité de potentiel en bande de conduction ΔE_c . Nous avons vu aussi que l'introduction de l'arsenic en petite quantité joue un rôle majeur dans l'augmentation de la valeur du coefficient d'absorption intersousbandes et que la longueur d'onde correspondante peut être ajustée selon le domaine d'application désirée.

Conclusion générale

Dans le domaine des matériaux qui est la base de tous les dispositifs fabriqués, on est tout le temps en train d'explorer et à la recherche d'autres classes de matériaux afin de faciliter notre vie quotidienne. L'emploi des semi-conducteurs s'est avéré très fructueux et divers dispositifs ont prouvé leurs importances. L'exploit d'autres classes de matériaux ouvre un grand éventail de recherches de matériaux magiques, petits et rapides.

L'objectif de ce travail est d'étudier les propriétés optoélectroniques de la structure à puits quantiques contraints à base de GaAsSb/GaSb tout en se basant sur les transitions intersousbandes dans la bande de conduction.

Nous avons vu que cette structure cristallise dans une structure zinc blende. L'ajout de l'arsenic augmente la contrainte, la masse effective de tous les porteurs ainsi que les décalages des bandes. Alors que l'augmentation de la concentration de ce facteur diminue le paramètre de maille, l'énergie de la bande interdite pour les valeurs retenues de l'arsenic $0 \le x \le 0.25$.

L'augmentation de la concentration d'As mènera à l'augmentation de la valeur de l'énergie de quantification.

L'ajout de l'arsenic diminue la valeur de la longueur d'onde λ_{12} correspondante à la transition intersousbande E₁₂.

Nous avons vu aussi que l'introduction de l'arsenic en petite quantité joue un rôle majeur dans l'augmentation de la valeur du coefficient d'absorption intersousbandes et que la longueur d'onde correspondante peut être ajustée selon le domaine d'application désiré.

Les perspectives de ce travail sont nombreuses. Nous pouvons par exemple citer la poursuite de l'étude visant à réaliser des détecteurs fonctionnant dans le moyen infrarouge.

Listes des acronymes et abréviations

- *a* : Paramètre de maille.
- a_e : Le paramètre de maille de la couche épitaxie.
- a_c : Potentiels hydrostatiques de déformation pour la bande de conduction.
- a_v : Potentiels hydrostatiques de déformation pour la bande de valence.
- a_s : Le paramètre de maille du substrat.

Al : Aluminium

- *b*: le potentiel de déformation tétragonale.
- BC: Bande de conduction.
- BV : Bande de valence.
- C_{ij}: Les coefficients d'élasticité.
- E_c : Energie de la bande conduction.
- E_g : Énergie de la bande interdite.
- E_n : Energie de quantification.
- E_{tr} : Energie de transition.
- E_v : Energie de la bande valence.

 $E_{v moy}$: L'énergie moyenne de la bande de valence.

Ga: Gallium.

In: Indium.

- *hh*: Trou lourd (Heavy hole).
- k: Constante de Boltzmann
- h_c : L'épaisseur critique.
- *lh* : Trou léger (Light hole).

- *L* : Largeur du puits quantique.
- m_0 : La masse effective de l'électron.
- Sb : Antimoine.
- *T*: Temperature
- *x* : Concentration d'Aluminium.
- ΔE_{hh} : Décalage d'énergie de la bande de trous lourds.
- ΔE_{lh} : Décalage d'énergie de la bande de trous légers.
- λ : Longueur d'onde.
- ε : La déformation ou le désaccord de maille.
- α : Coefficient d'absorption.

Références

- [1] C.Ngô, H. Ngô, " physique des semi-conducteurs ", 4^{ème} éditions, Dunod, Paris, 1998.
- [2] Francis Levy, "Physique et technologie des semi-conducteurs", Presses polytechniques et universitaires Romandes, 1995.
- [3] Rebiai-Benahmed, composants optoélectroniques, Polycopié de cours, Université de Saida, Algérie.
- [4] M. Amara, "Propriétés Electroniques des Conducteurs et des SemiConducteurs", rappels théoriques Plate-forme Matière Condensée et Cristallographie (MCC) C.E.S.I.R.E. Université J.Fourier Grenoble, France.
- [5] J. Lavery, "Quantum tunneling model of a P-N junction in silvaco", Thesis Naval post graduate school Monterey California, USA, 2008.
- [6] Henry Mathieu, « Physique des semi-conducteurs et des composants électroniques », Masson, 1987.
- [7] A. Bechir, « Effets du désordre et du substrat sur la structure électronique dans les alliages semi-conducteurs III-V », thèse de doctorat, Université Mentouri-Constantine, Algerie, 2006.
- [8] M. Razeghi, «The MOCVD challenge: Asurvey of GaInAsP-InP and GaInAsP/GaAs for photonic and electronic applications», Université de Northwesten Illinois, USA, 2001.
- [9] A. Aouitli, « Etude de lasers à base d'hétérostructures de semi-conducteurs III-V», mémoire de master, Université El hadj Kader-Batna, Algerie, 2008.
- [10] D. K. Bhol, « Study of Zinc Blende and Wurtzite Zns », International journal of Research in all subjects in Multi Languages, Vol.5, pp 1-3, 2017.
- [11] R. Bestam « Modélisation et simulation d'une structure à base de semiconducteur III-V pour le photovoltaïque », Mémoire de magister, Université Saad Dahleb Blida, Algerie, 2011.
- [12] K, Koksal and B. Gonul, «critical Layer Thickness of Galn(n)As(sb) qws on GaAs and Inp substrates for (001) and (111) orientations ».the European physical journal,211-218,2009.
- [13] C. Bencheikh, F. Nezelfar, « Etude et simulation de la structurer InGaAsBi/GaAs a puits Quantique pour l'emission proshe et moyen infrarouge », mémoire de master, Saad Dahleb Blida, 2016.

- [14] H. Machahadani, « Transitions intersousbandes dans les puits quantiques GaN/AlN du proche infrarouge au THz », Thèse de doctorat, université Paris-sud 11, France, 2011.
- [15] Sadao Adachi, « Ternary and quaternary compounds », S. Kasap, P. Capper (Eds.), Springer Handbook of Electronic and Photonic Materials, 725-741, 2017.
- [16] C. Van De Walle, "Band lineups and deformation potentials in the model-solid theory", Phy. Rev. B, V 39, 1871-1883, 1989.