

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 دحلب البليدة  
Université SAAD DAHLAB de BLIDA

كلية التكنولوجيا  
Faculté de Technologie

قسم الإلكترونيك  
Département d'Électronique



## Mémoire de Master

Mention Électronique  
Spécialité Micro-optoélectronique

présenté par

BELHADJAR MERIEM

&

HENDI IBTISSEME

# Etude et simulation des super- réseaux 2D et 3D à base de InAs/GaAs

Proposé par : Mr. Nacer Saïd

Année Universitaire 2015-2016

## Remerciements

---

*Nous remercions ALLAH le Tout-puissant de nous avoir donné le courage, la volonté et la patience de mener à terme ce présent travail.*

*En second lieu, nous tenons à remercier notre encadreur Mr : Nacer Saïd, pour son aide et sa gentillesse et ses précieux conseils durant toute la période du travail.*

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

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

*Sans oublier la contribution de nos collègues et nos amis de département d'électronique et surtout à tous nos camarades de l'option MOP promo M2 2016. De nous avoir encouragé et de nous soutenir moralement durant toute la période de la préparation de notre travail sans oublier les personnes du corps administratif du département de d'électronique.*

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

*Merci* 

---

## ملخص:

يركز هذا العمل على دراسة ومحاكاة بنية متعددة الآبار الكمومية و الشبكات الكبرى؛ البنية التي درسنا Ga As/InAs/GaAs

أولا درسنا بئر كم بسيط فحسبنا طاقة التكميم بدلالة عرض البئر وعارضة الكمون و احتمال الوجود؛ ثم رأينا بنية ذات شبكات كبرى؛ حيث قمنا باستعمال نموذج كرونغ بوني وطريقة العناصر المنتهية؛ تأثير العرض والفصل بين الآبارو كذلك عارضة الكمون على موضع و عرض الطاقة لبنية أحادية الأبعاد؛ ثنائية الأبعاد و ثلاثية الأبعاد بينت نتائج المحاكاة أن هذه الأبعاد تلعب دور مهم جدا

**كلمات المفاتيح:** بئر الكم؛ متعددة الآبار الكمومية ؛ الشبكات الكبرى؛ نموذج كرونغ بوني؛ طريقة العناصر المنتهية.

---

**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 et la méthode utilisée est la méthode des éléments finis. 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. Notre étude a porté sur des structures à une dimension, à deux dimensions et à trois dimensions.

**Mots clés :** puits quantique ; multi-puits quantiques ; super-réseau ; modèle de kronig-Penney; méthode des éléments finis.

---

**Abstract:** This work focuses on the study and simulation of a structure of multi-quantum wells and super-lattice 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-lattice one dimension, two dimensions and three dimensions. The model used in the simulations is the Kronig-Penney model and finite elements method. The influence of the width and the separation between the wells and the barrier of potential on the position and width of mini-bands was determined.

**Key words:** quantum wells, multi-quantum wells, super-lattice , kronig-Penney, finite elements method

---



# *Dédicace*

*À mes très chers parents*

*pour tous leurs sacrifices qu'ils ont consentis pour me  
permettre de suivre mes études dans les meilleures  
conditions possibles. J'espère qu'ils trouvent dans ce travail  
toute ma reconnaissance et tout mon amour.*

*À mon frère unique Lyes, mes adorables sœurs Nachida et  
leurs maris, Kenza, Zahra et Nawel, je leurs souhaite une  
belle vie pleine de joie et d'amour.*

*À mes oncles et mes tantes et toute ma famille.*

*Je dédie particulièrement ma meilleur amie B. Meriem pour  
les bons moments, les beaux souvenirs qu'on a vécu  
ensembles, pour sa fidélité, son support et sa sincérité.*

*À mes chères amies Werda, Meriem, Zineb et Hakima.*

*Hendî Ibtisseme*

## *Dédicace*

*Je dédie ce mémoire :*

*A mes très chers parents pour leurs dévouements, leurs amours, leurs sacrifices et leurs encouragements et sans eux je ne serais pas là aujourd'hui. Ce travail soit, pour eux, un faible témoignage de ma profonde affection et tendresse.*

*Je dédie aussi cette modeste réalisation à :*

*Mes très chers frères : Abd errazak, Abe elghani, Ahmed et sa femme .*

*Mes chères sœurs: Aya, Hadjer, khadidja, Sarah, Asma.*

*Mes chers amies particulièrement ma meilleur amie Warda, Meriem, ainsi mon binôme Ibtisseme pour les bons moments et les beaux souvenirs,*

*Ainsi que pour tous mes amis et mes collègues.*

*A toute ma famille.*

*Belhadjar Meriem*

## Remerciements

---

*Nous remercions ALLAH le Tout-puissant de nous avoir donné le courage, la volonté et la patience de mener à terme ce présent travail.*

*En second lieu, nous tenons à remercier notre encadreur Mr : Nacer Saïd, pour son aide et sa gentillesse et ses précieux conseils durant toute la période du travail.*

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

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

*Sans oublier la contribution de nos collègues et nos amis de département d'électronique et surtout à tous nos camarades de l'option MOP promo M2 2016. De nous avoir encouragé et de nous soutenir moralement durant toute la période de la préparation de notre travail sans oublier les personnes du corps administratif du département de d'électronique.*

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

*Merci* 

# Table des matières

Liste des figures.....	
Liste des tableaux.....	
Introduction générale .....	01
<b>Chapitre1 Généralités sur les semi-conducteurs .....</b>	
1.1 Introduction.....	04
1.2 Définition d'un semi conducteur.....	05
1.3 Les semi-conducteur III-V.....	06
1.3.1 Les matériaux binaires.....	06
1.3.2 Les alliages.....	07
1.3.3 Les structures cristallines.....	08
1.3.4 Structure cristalline du semi conducteur GaAs.....	08
1.3.5 Structure cristalline du semi conducteur InAs.....	09
1.3.6 Réseau réciproque et zone de Brillouin.....	10
1.4 Structure des bandes d'énergies.....	11
1.5 Bande de conduction-Bande de valence.....	12
1.6 Bande interdite (gap) .....	13
1.6.1 Semi conducteur à Gap direct.....	13
1.6.2 Semi conducteur à Gap indirect .....	14
1.7 Paramètre de maille .....	14
1.8 Propriétés électroniques du GaAs et InAs.....	15
1.9 Les hétéro structures à puits quantiques .....	16
1.9.1 Hétérostructure de type I .....	16
1.9.2 Hétérostructure de type II.....	17
1.9.3 Hétérostructure à simple puits quantiques.....	18
1.9.4 Hétérostructure à double puits quantiques.....	18
1.9.5 Hétérostructure multi-puits quantiques.....	19
1.9.6 Super-réseau.....	21
1.10 Modélisation de l'effet quantique dans les hétérostructures InAs /GaAs.....	22
1.10.1 Confinements quantiques.....	22



1.10.2 Confinement sur 0 dimension.....	22
1.10.3 Confinement sur une dimension.....	22
1.10 .4 Confinement sur deux dimensions.....	23
1.10.5 Confinement sur trois dimensions.....	23
1.11 Les techniques de croissance des multi-puits quantiques par épitaxie .....	24
1.12 Conclusion.....	25
<b>Chapitre 2 Théories des puits quantiques.....</b>	
2.1 Introduction.....	26
2.2 Notion de puits quantique.....	26
2.2.1 Conditions d'obtention de l'effet quantique.....	26
2.2.2 Les puits quantiques.....	27
2.2.3 L'équation de Schrödinger dans un puits quantique.....	28
2.2.4 Puits de profondeur infinie.....	28
2.2.5 Probabilité de présence dans le puits.....	31
2.2.6 Puits quantique de profondeur fini .....	33
2.3 Les super-réseaux.....	35
2.3.1 Modèle de Kronig-Penney (KP).....	36
2.3.2 La méthode des éléments finis (MEF ou FEM : Finite Element Method).....	40
2.3.3 Super-réseaux à une dimension.....	40
2.3.4 Super-réseaux à deux dimensions.....	41
2.3.5 Super-réseaux à trois dimensions.....	42
2.4 Conclusion.....	43
<b>Chapitre 3 résultats de simulation.....</b>	
3.1 Introduction.....	44
3.2 Calcul de l'énergie de quantification.....	45
3.3 Etude du puits quantique isolé.....	47
a-Energie de quantification dans la bande de conduction.....	47
b-Probabilité de présence dans la bande de conduction.....	48
3.4 Etude du super-réseau.....	50
3.4.1 Etude du super-réseau pour 1 dimension.....	50
a- Les bandes d'énergie.....	50

b-Probabilité de présence.....	51
c-Première bande d'énergie.....	52
d- deuxième mini-bande d'énergie.....	56
3.4.2 Etude du super-réseau pour deux dimensions.....	58
a-Probabilité de présence.....	58
b-première bande d'énergie.....	59
3.4.3 Etude du super-réseau pour trois dimensions.....	60
a-Probabilité de présence.....	60
b-première bande d'énergie.....	61
3.5 Conclusion .....	62
Conclusion générale.....	63
Bibliographie.....	64

## Liste des tableaux

<b>Tableau 1.1.</b> Tableau périodique partiel.....	06
<b>Tableau 1.2.</b> paramètres des principaux composés binaires III-V à 300K.....	07
<b>Tableau 1.3.</b> Les propriétés de GaAs et InAs à 300 K.....	15
<b>Tableau 3.1.</b> Les paramètres d'entrée de la simulation.....	45

## Liste des figures

<b>Chapitre1 Généralités sur les semi-conducteurs</b> .....	
<b>Figure1.1.</b> Diagrammes énergétiques pour les trois types des matériaux.....	05
<b>Figure1.2.</b> maille cristallographique de structure Zinc Blende.....	08
<b>Figure1.3.</b> Structure zinc blende (plan (100)).....	08
<b>Figure 1.4.</b> Structure cristalline du semi-conducteur GaAs.....	09
<b>Figure 1.5.</b> Structure cristalline du semi-conducteur InAs.....	10
<b>Figure 1.6.</b> Première zone de Brillouin de la structure zinc blende.....	10
<b>Figure 1.7.a.</b> Structure de bande de l'InAs.....	11
<b>Figure 1.7.b.</b> Structure de bande du GaAs.....	12
<b>Figure1.8.</b> Diagramme des bandes d'énergie des semi-conducteurs.....	13
<b>Figure1.9.</b> Structure de bande schématique d'un semi-conducteur à gap direct <b>(a)</b> et à gap indirect <b>(b)</b> .....	14
<b>Figure1.10.</b> Evolution du paramètre de maille cristalline et d'énergie de bande des alliages composés III-V et II-VI.....	15
<b>Figure 1.11.</b> Hétérostructures à puits quantiques.....	16
<b>Figure1.12.</b> Hétéro structure de type I.....	17
<b>Figure 1.13.</b> Hétéro structure de type II.....	17
<b>Figure 1.14.</b> Hétérostructure à simple puits quantique.....	18
<b>Figure1.15.</b> hétérostructures à double puits quantique découplés <b>(a)</b> et couplés <b>(b)</b> .....	19
<b>Figure1.16.</b> Hétérostructure a multi-puits quantiques avec 3 puits et 4 barrières.....	20
<b>Figure1.17.</b> 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 jaune.....	21
<b>Figure1.18.</b> Description schématique de l'effet de confinement des porteurs, sur la densité d'état et la structure électronique des bandes dans : (a) un matériau massif 3D, (b) un puits quantiques 1D, (c) un fil quantique 1D, (d) une boîte quantique.....	23
<b>Figure 1.19.</b> Exemple du bâti EJM.....	24
<b>Chapitre 2 théories des puits quantiques</b> .....	
<b>Figure 2.1.</b> Structure schématique d'un puits quantique.....	28

<b>Figure 2.2.</b> Puits de profondeur infinie.....	29
<b>Figure 2.3.</b> Energie totale dans un puits de potentiel infini.....	31
<b>Figure 2.4.</b> Fonction d'onde et probabilité de présence de la particule dans l'état excité (n=2).....	32
<b>Figure 2.5.</b> Puits quantiques isolé résultant de la configuration des bandes d'une Structure $SC_2$ - $SC_1$ - $SC_2$ .....	33
<b>Figure 2.6.</b> Maille élémentaire du Super-réseau formé de couches minces alternées de $SC_1$ - $SC_2$ d'épaisseurs $L_1, L_2$ .....	36
<b>Figure 2.7.</b> Les mini-bandes d'énergie dans le puits quantique, et la barrière.....	40
<b>Figure 2.8.</b> Maille élémentaire du Super-réseau à deux dimensions.....	41
<b>Figure 2.9.</b> Maille élémentaire du Super-réseau à trois dimensions.....	42
<b>Chapitre 3 résultats de simulation</b> .....	
<b>Figure 3.1.</b> Maille élémentaire du super-réseau.....	45
<b>Figure 3.2.</b> Organigramme du calcul de l'énergie de quantification dans le puits quantiques et le super réseau.....	46
<b>Figure 3.3.</b> Energies de quantification des six premiers niveaux des électrons en fonction de la largeur de puits.....	47
<b>Figure 3.4.</b> Energie de quantification des électrons en fonction de la barrière de potentiel $V_0$ , pour $L_1=20nm$ , $n=2$ .....	48
<b>Figure 3.5.</b> la densité de probabilité de présence des électrons dans le puits pour le le niveau fondamental ( $n=1$ , $L_1=10nm$ ).....	49
<b>Figure 3.6.</b> la densité de probabilité de présence relative des électrons dans le puits pour le niveau excité ( $n=2$ , $L_1=10nm$ ).....	49
<b>Figure 3.7.</b> la densité de probabilité de présence relative des électrons dans le puits pour le niveau excité ( $n=3$ , $L_1=10nm$ ).....	50
<b>Figure 3.8.</b> Les mini-bandes d'énergie dans une structure super-réseau en fonction du vecteur d'onde pour $L_1=2nm$ et $L_2=2nm$ .....	51
<b>Figure 3.9.</b> La densité de probabilité de présence des électrons du super-réseau pour $L_1=2nm$ et $L_2=2nm$ .....	51
<b>Figure 3.10</b> Évolution de la position de la première bande d'énergie $E_1$ (eV) en fonction	

de la largeur de puits et la largeur de barrière.....	52
<b>Figure 3.11.</b> Évolution de la largeur de la première mini-bande d'énergie $\Delta E_1$ (eV) en fonction de la largeur du puits quantique $L_1$ et la largeur de barrière $L_2$ .....	53
<b>Figure 3.12.</b> Évolution de la largeur de la première mini-bande d'énergie $\Delta E_1$ (eV), en fonction de la barrière de potentiel $V_0$ pour $L_1=1\text{nm}$ et $L_2=2\text{nm}$ .....	54
<b>Figure 3.13.</b> Évolution de la position de la première mini-bande d'énergie $E_1$ (eV), en fonction de la barrière de potentiel $V_0$ . $L_1=1\text{nm}$ et $L_2=2\text{nm}$ .....	54
<b>Figure 3.14.</b> Évolution de la largeur de première mini-bande d'énergie $\Delta E_1$ (eV), en fonction de la largeur de puits $L_1$ , pour $L_2=2\text{nm}$ et $L_2=4\text{nm}$ .....	55
<b>Figure 3.15.</b> 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.....	56
<b>Figure 3.16.</b> Evolution de la largeur de la deuxième mini-bande d'énergie $\Delta E_2$ (eV) en fonction de la largeur du puits quantique $L_1$ et la largeur de barrière $L_2$ .....	57
<b>Figure 3.17.</b> Densité de probabilité de présence des électrons du super-réseau pour $L_1=2\text{nm}$ et $L_2=2\text{nm}$ .....	58
<b>Figure 3.18.</b> Évolution de la largeur de première mini-bande d'énergie $\Delta E_1$ (eV), en fonction de la largeur de puits $L_1$ et la largeur de barrière $L_2$ .....	59
<b>Figure 3.19.</b> Densité de probabilité de présence des électrons du super-réseau pour $L_1=2\text{nm}$ et $L_2=2\text{nm}$ .....	60
<b>Figure 3.20.</b> Evolution de la largeur de première mini-bande d'énergie $\Delta E_1$ (eV), en fonction de la largeur de puits $L_1$ et la largeur de barrière $L_2$ .....	61

## Liste 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.

$m_e$  : masse effective de l'électron.

$\hbar$  : constante de Planck réduite.

$T$  : température absolue.

$\Psi$  : fonction d'onde.

$L_1$  : largeur de puits quantique.

$L_2$  : largeur de la barrière.

$V_0$  : Potentiel du puits quantique.

$V_c$  : barrière de potentiel dans la bande de conduction.

$n$  : nombre quantique.

$E_c$  : bande de conduction.

$E_v$  : bande de valence.

$E$  : énergie de quantification.

$E_t$  : énergie totale des électrons dans la bande de conduction.

$E_g$  : gap d'énergie.

$E_e$  : énergie de quantification des électrons.

$E_h$  : énergie de quantification des trous.

$E_F$  : Énergie de Fermi.

$\lambda$  : longueur d'onde de « De Broglie ».

**MOCVD**: Metal-Organic Chemical Vapor Deposition.

**MBE**: Molecular Beam Epitaxy.

**MOVPE**: Metal-Organic Vapor Phase Epitaxy.

**KP**: Modèle de Kronig-Penny.

**MEF**: Méthode des éléments finis .





## 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 quantique simple. Nous avons déterminé les énergies de quantification des électrons, et La probabilité de présence.

Ensuite nous avons considéré la structure à puits quantiques et super-réseaux 1D, 2D et 3D 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. D'autre part, les résultats obtenus par le modèle de Kroning-Penny et la méthode des éléments finis sont très concordants.

De nos jours, ces structures trouvent des applications très intéressantes, en particulier dans les composants optoélectroniques et les dispositifs ultra-rapides comme la réalisation des transports non-linéaires, des lasers en cascade, des photo-détecteurs infrarouges..., et ont un avenir très prometteur.

Ce travail peut être poursuivi en considérant d'autres structures: circulaires (2D) et sphériques (3D)

# Chapitre1 Généralités sur les semi-conducteurs

---

## 1.1 Introduction

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

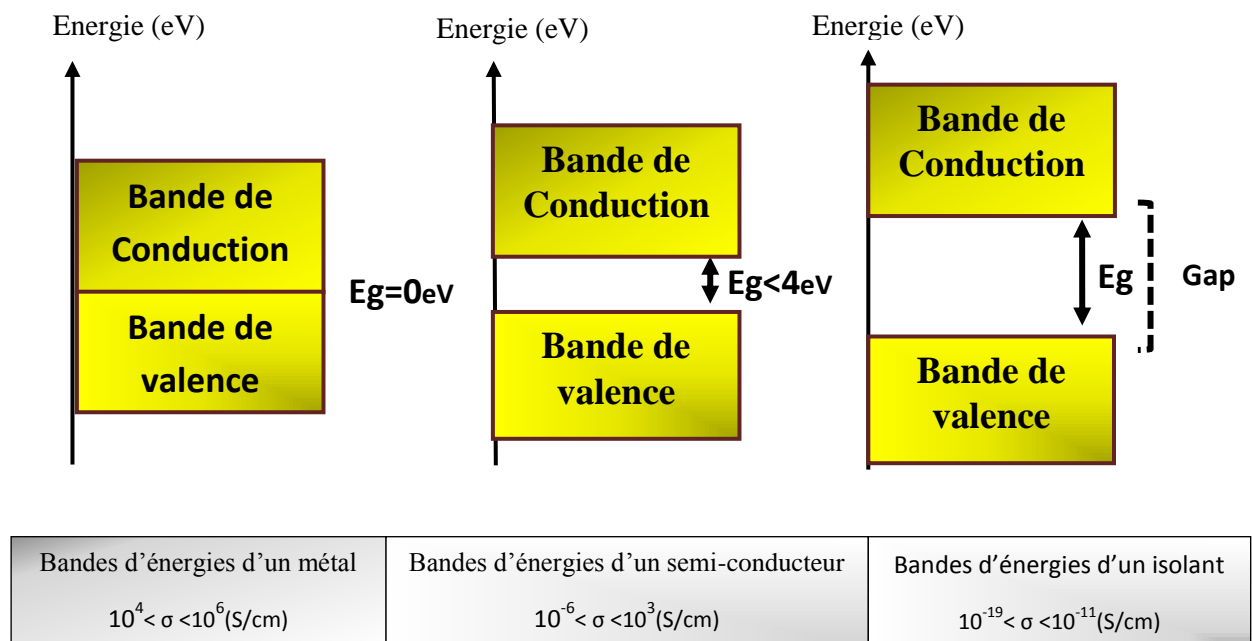
Les domaines de l'électronique rapide et de l'optoélectronique utilisent de plus en plus les semi-conducteur III-V à cause de leurs propriétés électroniques et optiques favorables (gaps d'énergie, mobilités des porteurs,...). Par conséquent, il est tout à fait utile, avant d'aborder cette étude, de préciser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

Dans l'ensemble des matériaux, les semi-conducteurs constituent une classe bien définie, avec des propriétés physiques particulières qui sont sources d'intérêt au plan de la connaissance fondamentale et à celui des applications. Ces deux facteurs indissociables font l'importance de ces matériaux, malgré le nombre limité d'élément et de composés semi-conducteurs. Principalement remarquables par leurs propriétés électroniques, les semi-conducteurs interviennent dans presque tous les équipements électroniques et optiques. La plus grande partie des composants (transistors, diodes, et ce qu'on appelle puce en générale) sont réalisés en silicium qui joue un rôle prépondérant, sa technologie et sa connaissance théorique ont atteint des niveaux inégalés. En électronique rapide et en optoélectronique, les propriétés du silicium sont insuffisantes (mobilités des porteurs relativement petites et transitions électroniques indirectes au seuil d'absorption optique). Dans de telles applications, les composés semi-conducteurs III-V sont préférables. Les propriétés de ces matériaux sont très intéressantes [3].

## 1.2 Définition d'un semi-conducteur

On différencie trois types des matériaux : les isolants, les conducteurs et les semi-conducteurs. Ceux-ci sont intermédiaires entre les métaux et les isolants : à  $T = 0\text{ K}$  un semi-conducteur se comporte comme un isolant. Néanmoins, il conduit l'électricité dès que la température augmente. La résistivité des semi-conducteurs varie entre  $10^{-3}\ \Omega\text{cm}$  et  $10^9\ \Omega\text{cm}$ , alors que celle des métaux est de l'ordre de  $10^{-6}\ \Omega\text{cm}$  et celle des isolants peut atteindre  $10^{22}\ \Omega\text{cm}$  [4].

Les niveaux d'énergie des électrons de valence et le niveau d'énergie d'ionisation génèrent ainsi deux bandes d'énergies permises particulièrement intéressantes, la bande de valence et la bande de conduction, séparées par une bande dépourvue de niveaux permis, nommée bande interdite (Figure 1.1).



**Figure 1.1.** Diagrammes énergétiques pour les trois types des matériaux.

### 1.3 Les semi-conducteur 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 du tableau de la classification périodique de Mendeleïev (tableau 1.1). Ainsi de nombreux composés binaires, ternaires et quaternaires peuvent être réalisés.

	III	IV	V	VI
	5 B Bore	6 C Carbone	7 N Azote	8 O Oxygène
	13 Al Aluminium	14 Si Silicium	15 P Phosphore	16 S Soufre
30 Zn Zinc	31 Ga Gallium	32 Ge Germanium	33 As Arsenic	34 Se Sélénium
48 Cd Cadmium	49 In Indium	50 Sn Étain	51 Sb Antimoine	52 Te Tellure
80 Hg Mercure	81 Tl Thallium	82 Pb Plomb	83 Bi Bismuth	84 Po Polonium

Tableau 1.1. Tableau périodique partiel.

#### 1.3.1 Les matériaux 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 où 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 Galium (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 [4].

Composé III-V	$E_g$ (eV)	$m^*/m_0$	$\mu_n$ (cm <sup>2</sup> /VS)	$\mu_p$ (cm <sup>2</sup> /VS)	$a$ (Å)
GaN	3.36	0.19	1800	200	3.189
GaP	2.26	0.82	1105	–	5.4512
GaAs	1.42	0.067	8500	400	5.6533
InP	1.35	0.077	4600	100	5.8686
InAs	0.36	0.023	33000	500	6.0584
InSb	0.17	0.0145	78000	800	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 [5].

### 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 [3].

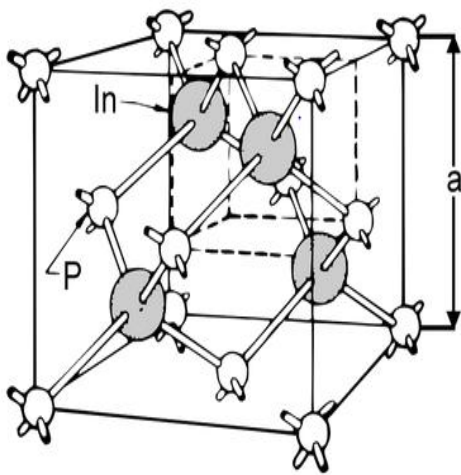


Figure 1.2. Maille cristallographique de structure

Zinc Blende.

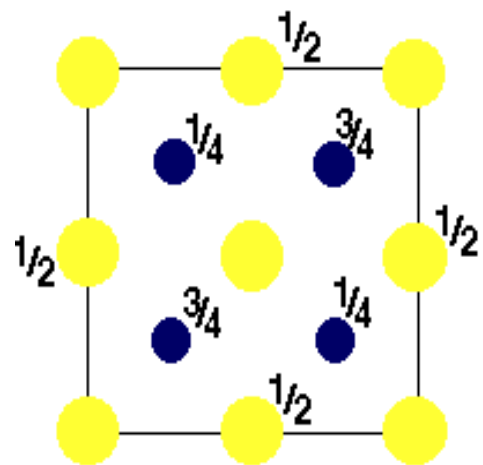


Figure 1.3. Structure zinc blende (plan (100)).

### 1.3.4 Structure cristalline du semi conducteur GaAs

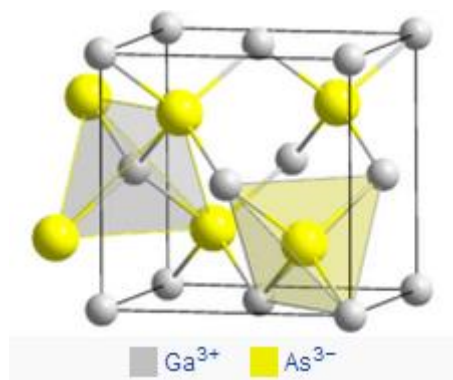
L'arséniure de gallium GaAs est un semi-conducteur III-V. C'est un matériau utilisé notamment pour réaliser des composants micro-ondes, des composants optoélectroniques, des diodes électroluminescentes dans l'infrarouge ou des cellules photovoltaïques. Le GaAs est dit « III-V » car le gallium et l'arsenic se trouvent respectivement dans les colonnes III et V du tableau périodique des éléments, et présentent donc trois et cinq électrons de valence.

L'arséniure de gallium possède une structure cristalline de type *blende*. Si l'on considère que les atomes de gallium suivent une structure de type cubique à faces centrées (CFC), les

atomes d'arsenic occupent quant à eux 4 des 8 sites tétraédriques de cette maille (et vice-versa).

GaAs est le plus important et le plus utilisé des alliages parmi les semi-conducteurs. Plusieurs paramètres structuraux sont connus avec une plus grande précision que les autres semi-conducteurs. Il possède un gap direct de 1.42 eV à la température ambiante. [6]

Le choix d'un matériau permettant d'obtenir de hautes performances en circuits intégrés ne dépend pas uniquement de ses propriétés électriques. Il résulte d'un compromis entre différents critères tels que ses propriétés métallurgiques (tenue aux divers processus technologiques par exemple), la diversité de composants élémentaires réalisables, et la tenue en fiabilité. Pour la réalisation des circuits intégrés numériques très rapides, l'arséniure de gallium (et ses dérivés ternaires) présente de nombreux avantages [7].

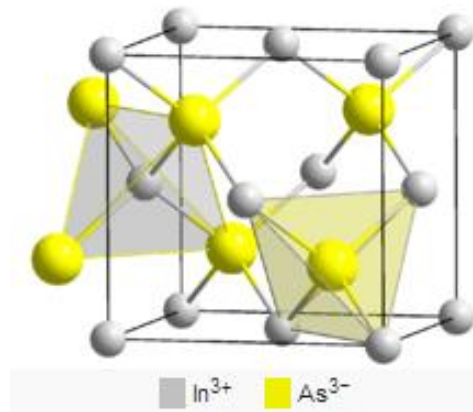


**Figure 1.4.** Structure cristalline du semi-conducteur GaAs [6].

### 1.3.5 Structure cristalline du semi conducteur InAs

L'arséniure d'indium InAs, est un semi-conducteur composite binaire de type III-V, composé d'arsenic et d'indium. Il à l'apparence d'un cristal cubique. L'arséniure d'indium est assez similaire à l'arséniure de gallium(GaAs), ses propriétés en sont assez proches, et comme lui, il possède un gap direct et l'une des plus importantes mobilités d'électron parmi les semi-conducteurs.

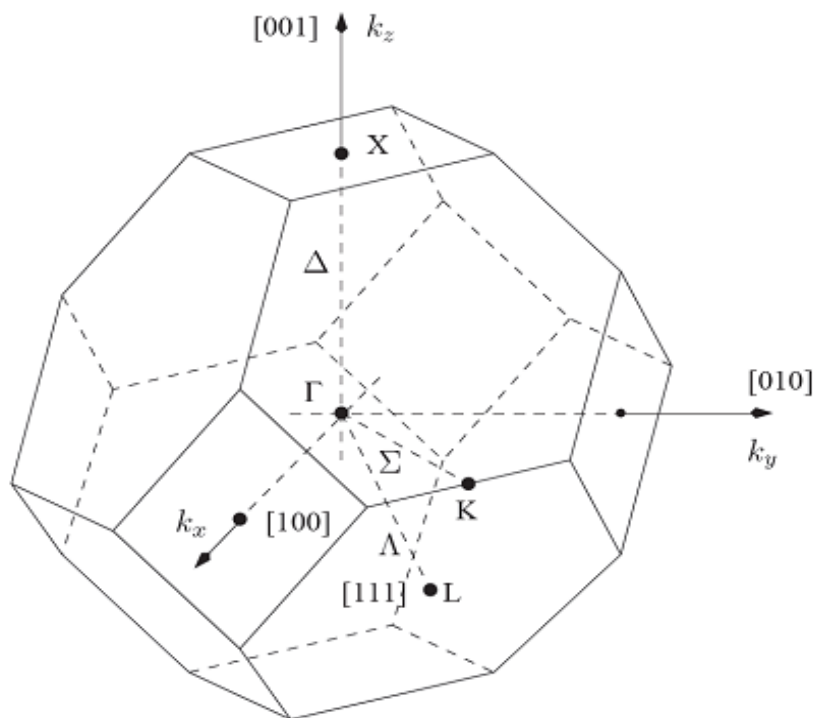
Vu l'importance croissante de InAs ces dernières années comme matériau de puits quantiques, il sert surtout pour la longueur d'onde 1.55 $\mu$ m. A la température ordinaire, il a un gap direct (0.36 eV) [8].



**Figure 1.5.** Structure cristalline du semi-conducteur InAs [6].

### 1.3.6 Réseau réciproque et zone de Brillouin

Le réseau réciproque est défini à partir du réseau cristallin direct, dans lequel on représente la variation de l'énergie des états électroniques en fonction du vecteur d'onde  $\vec{K}$  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 1.6.** Première zone de Brillouin de la structure zinc blende.



Avec :

Point  $\Gamma$  : centre de zone.

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

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

Direction  $\Sigma$  : 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  $\vec{k}$ . 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. On prend comme exemple La structure de bande d'InAs représentée dans la figure (1.7.a).

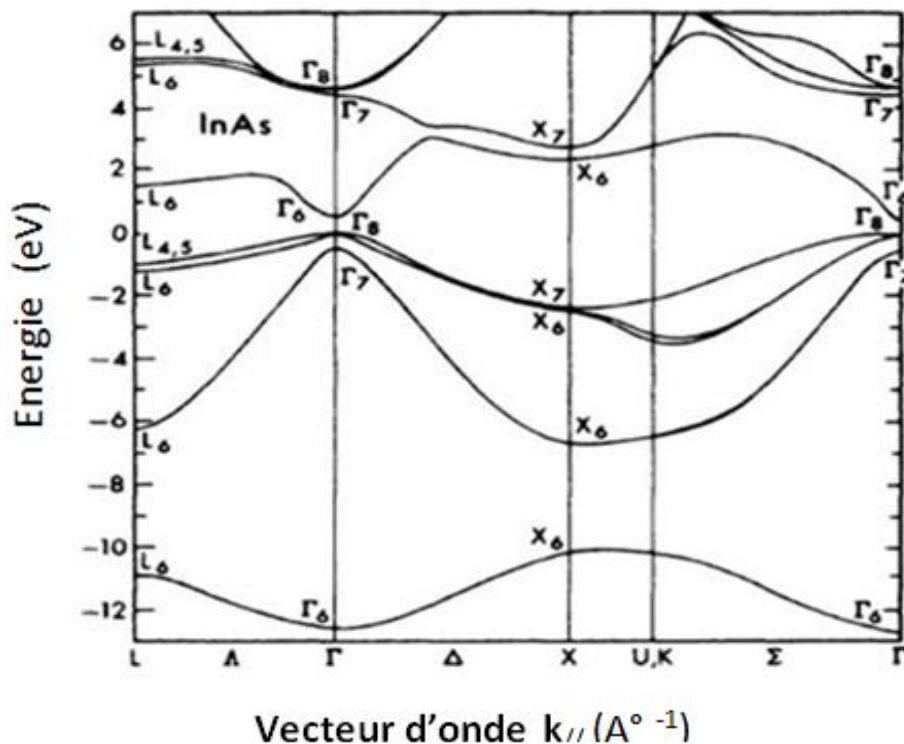
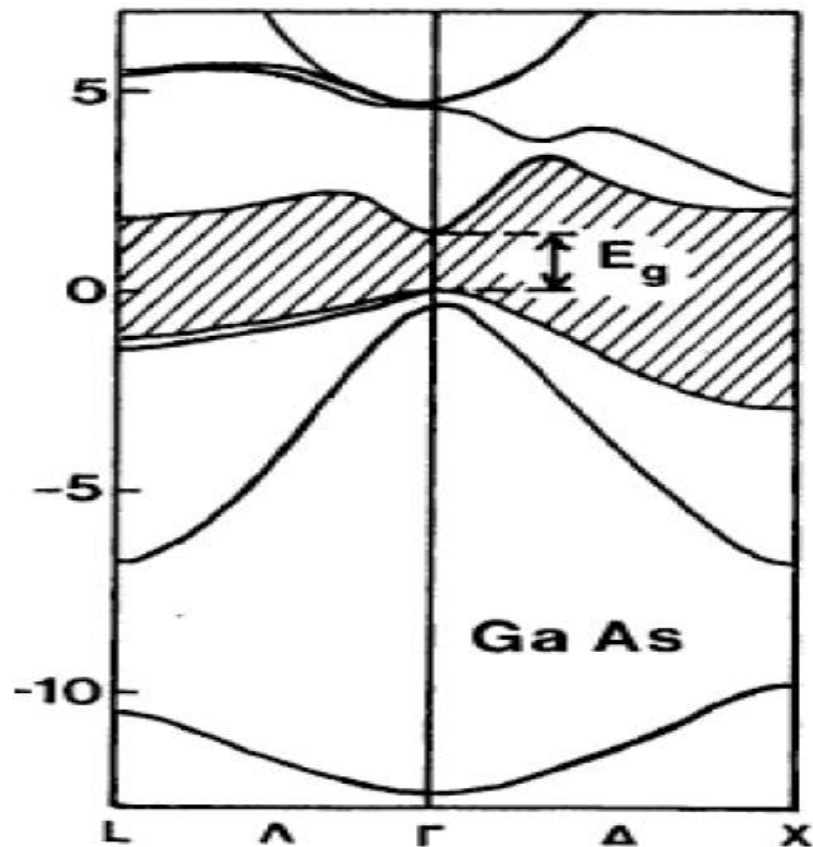


Figure 1.7.a. Structure de bande de l'InAs.

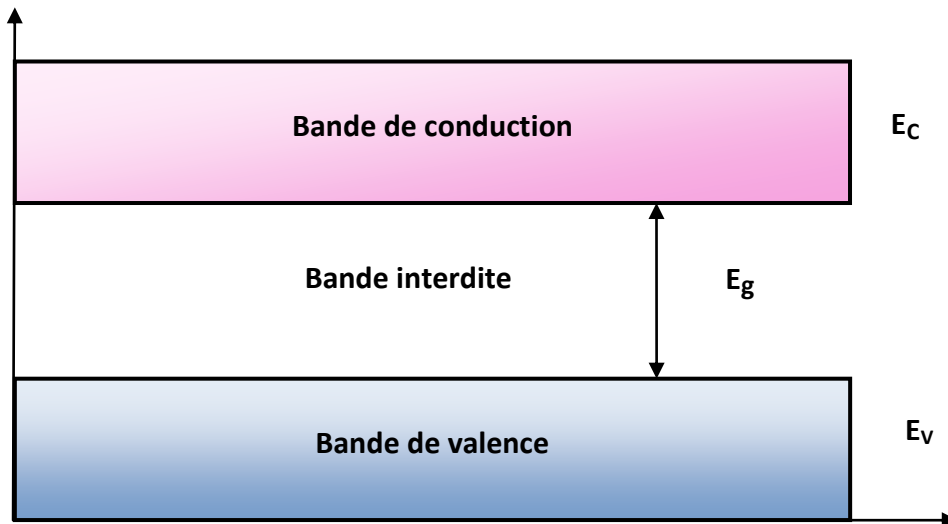
Le GaAs comprend 8 électrons par cellule unité (3 provenant du Ga et 5 d'As). Sa structure a un nombre égal de Ga et As distribués sur un réseau de type diamant. Il possède donc, comme le Si et le Ge, 8 bandes dérivées des orbitales SP 3, dont 4 sont entièrement remplies. Sa structure de bande est donnée dans la figure (1.7.b). On remarque que dans ce cas le minimum de la bande de conduction est situé au centre de la zone de Brillouin. C'est un semi-conducteur à gap direct situé au point  $\Gamma$  [7].



*Figure 1.7.b.* Structure de bande du GaAs.

## 1 .5 Bande de conduction-Bande de valence

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).



**Figure 1.8.** 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].

## 1.6 Bande interdite (gap)

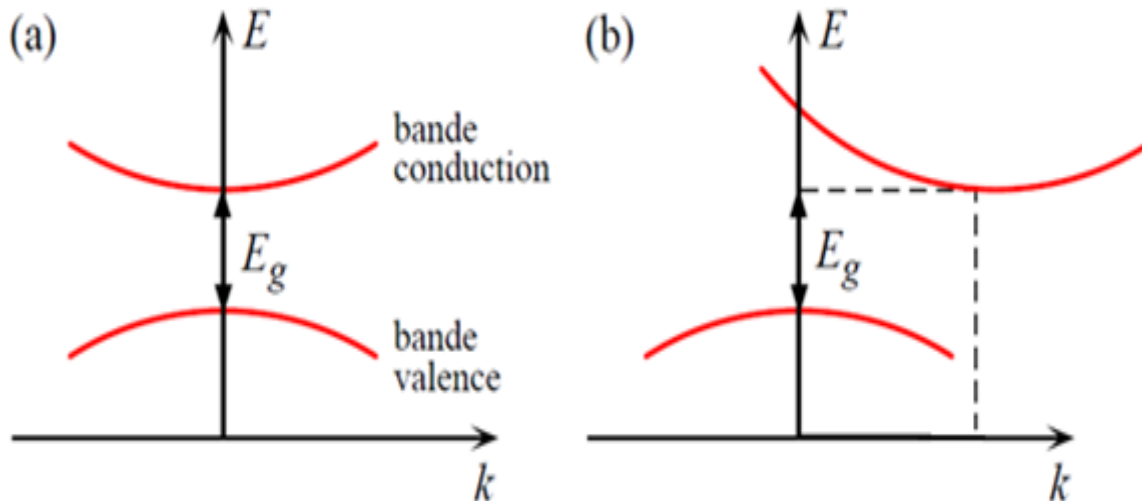
La bande interdite est la mesure de la quantité d'énergie nécessaire à un électron pour passer de la bande de valence à la bande de conduction lorsque celui-ci est soumis à une excitation. Le matériau est appelé semi-conducteur si le gap ou la distance énergétique entre le bas de la bande de conduction et le sommet de la bande de valence, est inférieur à 2 eV [7].

### 1.6.1 Semi-conducteur à gap direct

Les extrema absolus des bandes de conduction et de valence correspondent à la même valeur du vecteur d'onde  $\vec{K}$ . L'électron peut passer de la bande de valence (Bv) vers la bande de conduction (Bc) sans changer de vecteur  $\vec{K}$  Figure (1.9.a).

### 1.6.2 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 (1.9.b) [12].

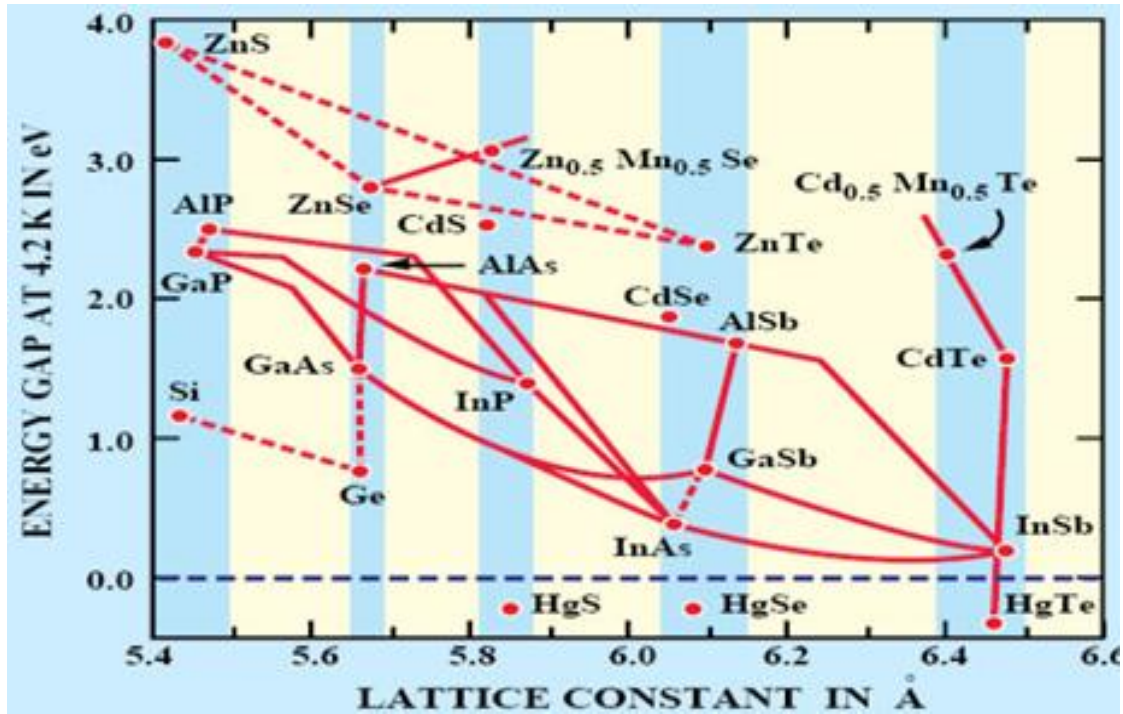


**Figure 1.9.** Structure de bande schématique d'un semi-conducteur à gap direct (a) et à gap indirect(b).

### 1.7 Paramètre de maille

Le paramètre de maille définit la distance entre les atomes dans les réseaux cristallins. C'est un indicateur de compatibilité structurale 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 des défauts cristallins dans les couches épitaxées [13].



**Figure 1.10.** Evolution du paramètre de maille cristalline et d'énergie de bande des alliages composés III-V et II-VI [15].

## 1.8 Propriétés électroniques du GaAs et InAs

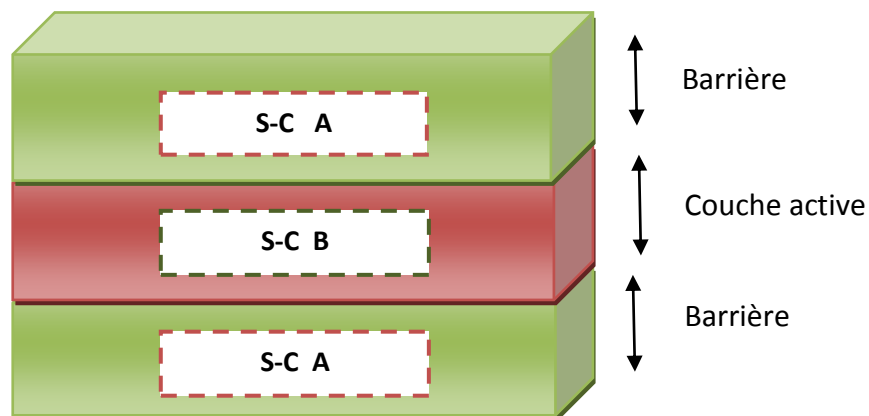
L'arséniure de gallium et l'arséniure d'indium sont les matériaux les plus importants et les plus technologiquement étudiés en optoélectronique, ce sont des matériaux semi-conducteurs III-V à gap direct, cristallisant généralement selon la structure zinc-blende, le tableau (1.3) résume quelques paramètres pour le GaAs et l'InAs.

Nom	Symbole	Unités	GaAs	InAs
Structure cristalline	–	–	Zinc Blende	Zinc Blende
Structure de bande (gap)	–	–	directe	Directe
Paramètre cristallin	a	Å	5,63	6,058
Hauteur de la Bande Interdite	$E_g$	eV	1,42	0,36
Densité effective d'états dans la Bande de conduction	$N_c$	$\text{cm}^{-3}$	$4,7 \cdot 10^{17}$	$8,7 \cdot 10^{16}$
Densité effective d'états dans la Bande de valence	$N_v$	$\text{cm}^{-3}$	$7,0 \cdot 10^{18}$	$6,6 \cdot 10^{16}$
Masse effective d'électron	$m_e/m_0$	–	0,067	0,023
Masse effective du trou léger	$m_{hh}/m_0$	–	0,45	0,41
Masse effective du trou lourd	$m_{lh}/m_0$	–	0,082	0,025
Mobilité des électrons	$\mu_n$	$\text{cm}^2 \cdot \text{v}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$	$8,5 \cdot 10^3$	$33 \cdot 10^3$
Mobilité des trous	$\mu_p$	$\text{cm}^2 \cdot \text{v}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$	400	500

**Tableau 1.3.** Les propriétés de GaAs et InAs à 300 K.

## 1.9 Les hétérostructures 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 hétérostructures 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 hétérostructure 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  $\gamma$  confine les photons [17].



**Figure 1.11.** Hétérostructures à puits quantiques.

Il ya deux types d'hétérostructures; hétérostructure de type- I et hétérostructure de type- II.

### 1.9.1 Hétérostructure de type I

Elle est représentée sur la figure (1.12). 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.

$$\Delta E_c > 0 \text{ et } \Delta E_v < 0$$

$$\Delta E_g = E_{g2} - E_{g1} = \Delta E_c + \Delta E_v$$

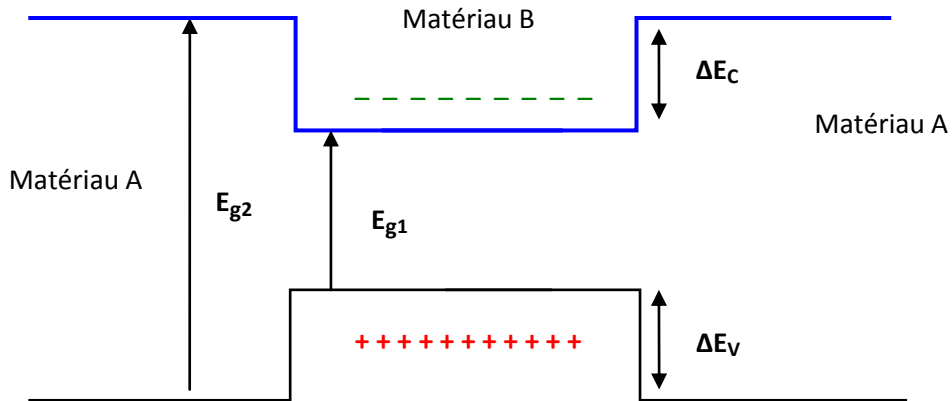


Figure 1.12. Hétéro structure de type I.

### 1.9.2 Hétérostructures type II

Elle est représentée sur la figure (1.13). 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 [8].

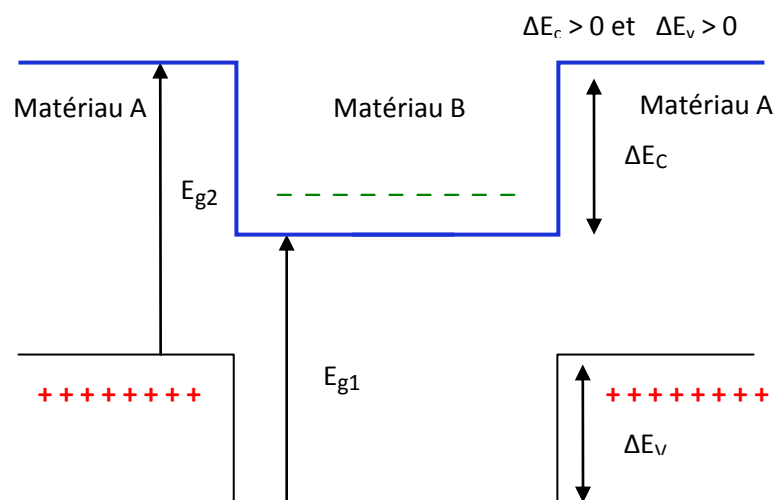
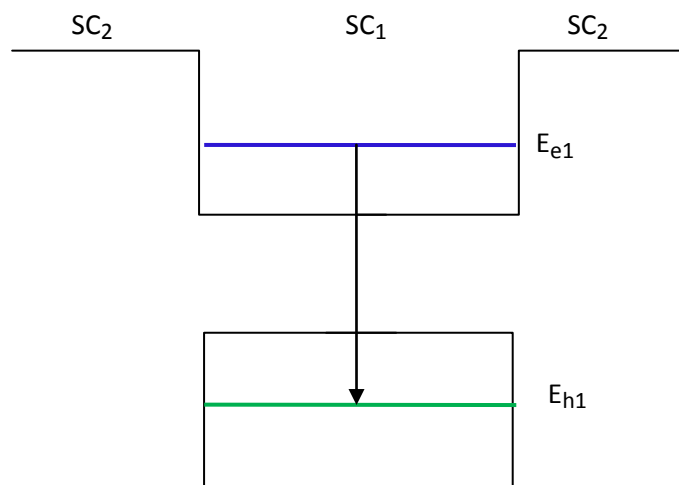


Figure 1.13. Hétéro structure de type II.

### 1.9.3 Hétérostructure 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.



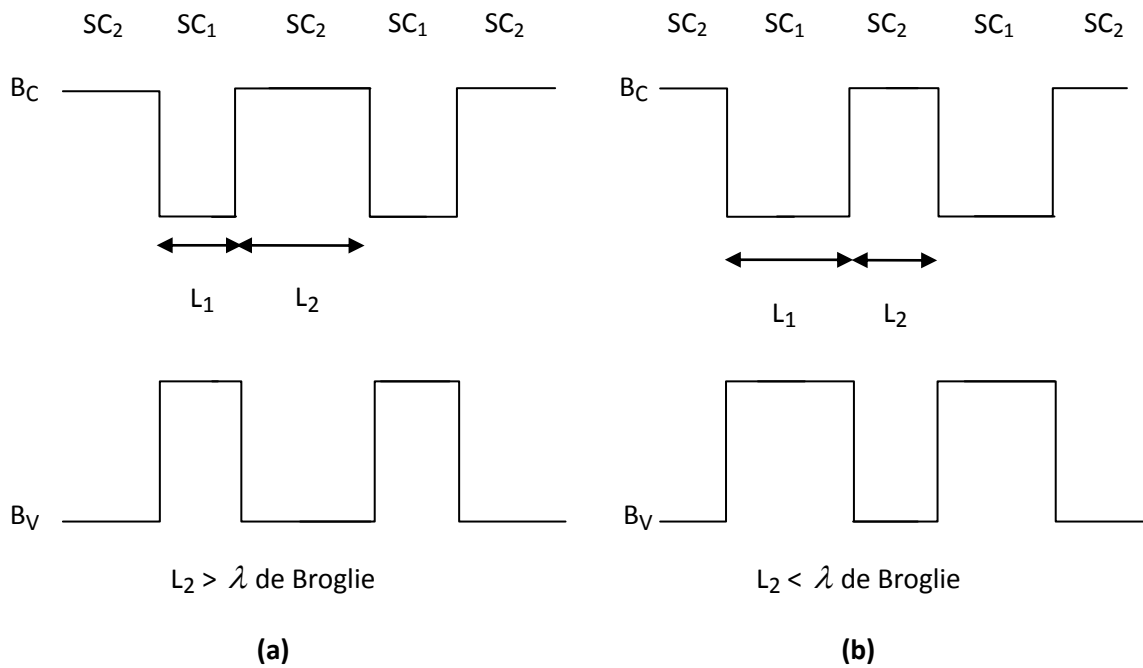
**Figure 1.14.** Hétérostructure à simple puits quantique.

### 1.9.4 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 (1.15).

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.





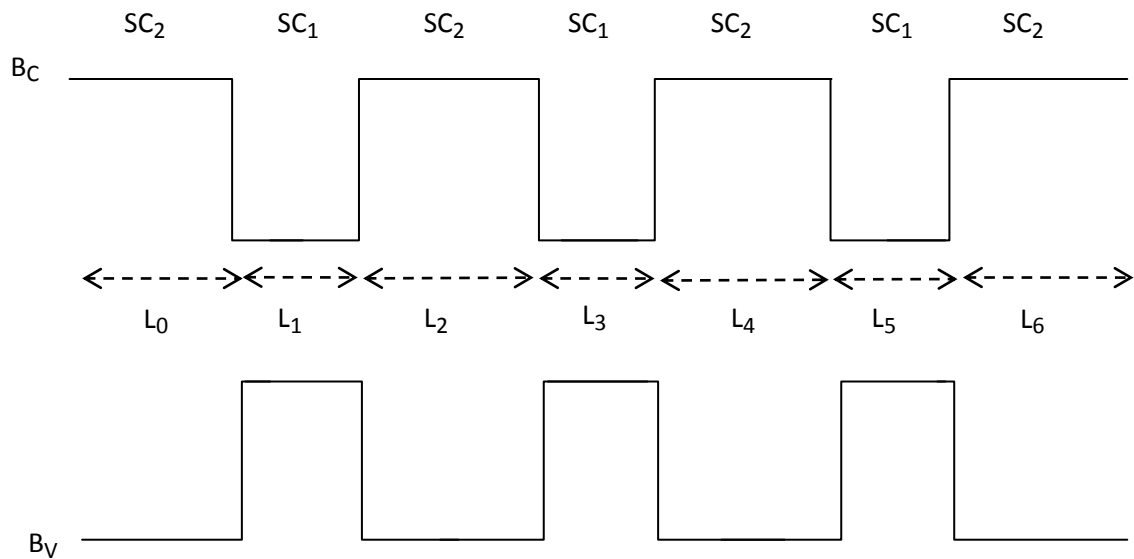
**Figure 1.15.** Hétérostructure à double puits quantique découplés(a) et couplés (b).

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.

### 1.9.5 Hétérostructure 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. 16) avec 3 puits et 4 barrières.



**Figure 1.16.** Hétérostructure a multi-puits quantiques avec 3 puits et 4 barrières.

Là aussi le comportement physique de ce type d' hétérostructures 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 a une hétérostructure symétrique.

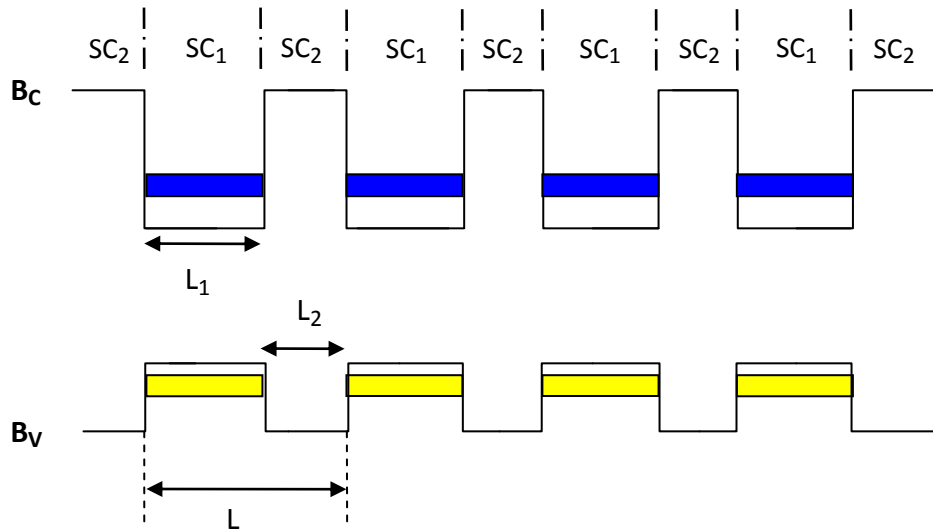
Deux cas intéressants peuvent apparaitre :

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.

## 1.9.6 Super-réseau



**Figure 1.17.** 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 jaune.

Un super-réseau figure(1.17) 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.
5.  $L_0+L_1=L_2+L_3=L_n+L_{n+1}=L$

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 bandes 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 sont formées par des niveaux quantiques 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 jaune sur la figure (1.17)).

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 les décalages des bandes  $\Delta E_c$  et  $\Delta E_v$  [16].

## **1.10 Modélisation de l'effet quantique dans les hétérostructures InAs /GaAs**

### **1.10.1 confinements quantiques**

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

#### **1.10.2 Confinement sur 0 dimension**

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

#### **1.10.3 Confinement sur une dimension**

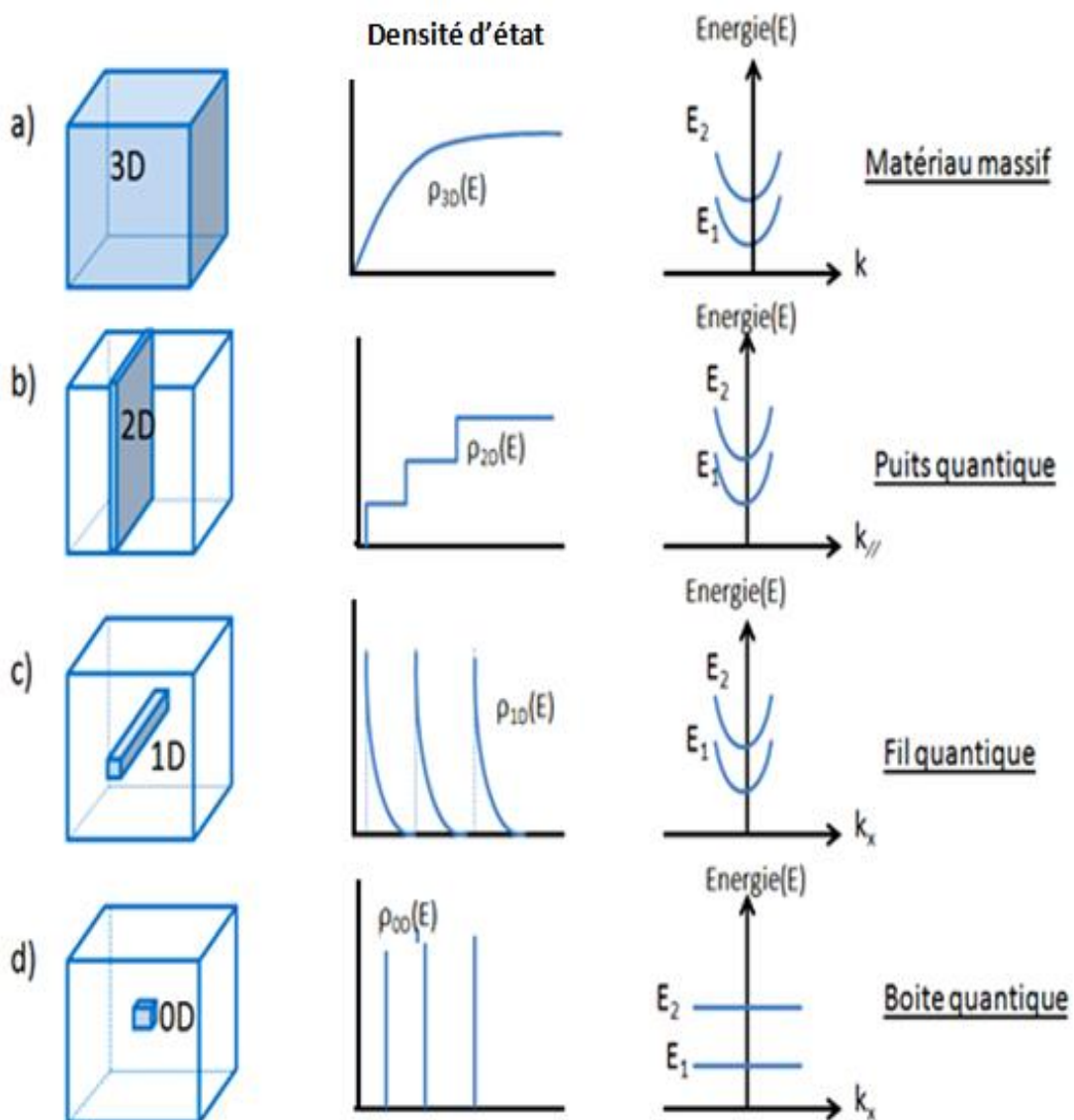
Ce cas se présente lorsqu'on restreint une dimension de l'espace. Les particules sont confinées dans un plan, c'est-à-dire l'une de dimensions est comparable à la longueur d'onde de la particule. Il s'agit des puits quantiques ou "quantum Wells".

### 1.10 .4 Confinement sur deux dimensions

Dans ce cas, deux des 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 " [4].



**Figure 1.18.** Description schématique de l'effet de confinement des porteurs sur la densité d'état et la structure électronique des bandes dans : (a) un matériau massif 3D, (b) un puits quantiques 2D, (c) un fil quantique 1D, (d) une boîte quantique 0D [17].

## 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 Déposition), aussi appelée MOVPE (Metal-Organic Vapor Phase Epitaxy). Le procédé d'épithaxie par jet moléculaire peut se schématiser de la façon suivante (Figure 1.19) [19].

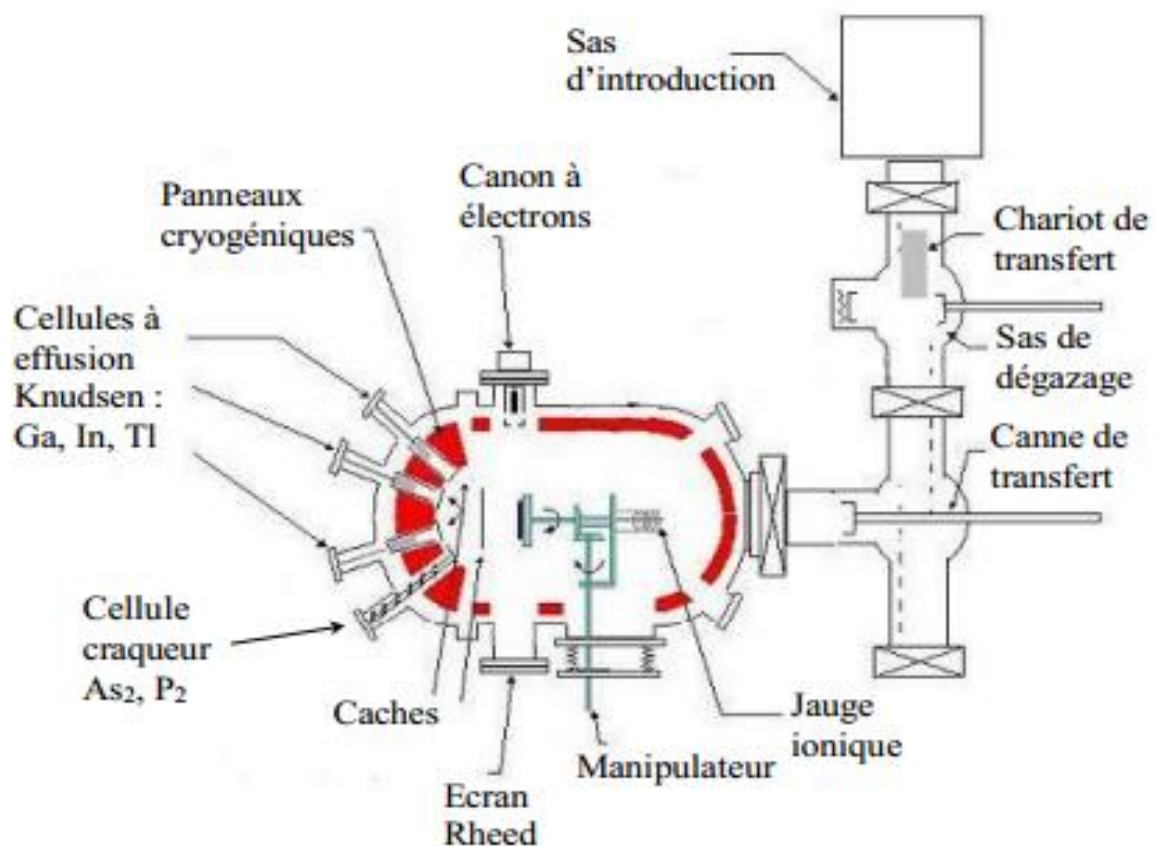


Figure 1.19. Exemple du bâti EJM [18].

## 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, doublepuits, multi puits quantiques et super-réseaux.

# Chapitre2 Théorie des puits quantiques

---

## 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. [19]

De ce qui précède, nous avons jugé utile de présenter dans ce chapitre les conditions d'obtention de l'effet quantique et les différentes notions sur les structures à puits quantique et à super réseaux (une dimension, deux dimensions et trois dimensions), on présentera également la théorie qui permet d'aboutir aux valeurs propres d'énergie dans ces structures quantiques qui constituent l'intérêt principal de notre travail. Le but est d'apporter les outils nécessaires à la compréhension du chapitre suivant qui constitue le cœur du thème abordé.

## 2.2 Notion de puits quantique

### 2.2.1 Conditions d'apparition 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.

$h$  : 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 :

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

Où  $\tau$  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 :

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

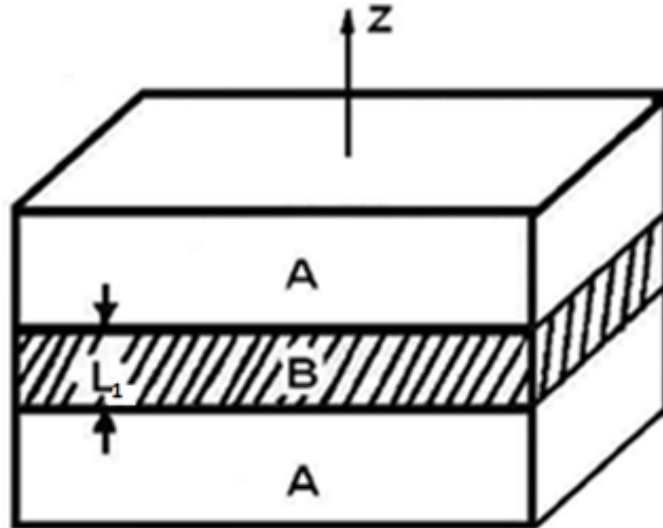
Avec : K : la constante de Boltzmann.

T : la température absolue.

### 2.2.2 Les puits quantiques

Les puits quantiques sont la base de nombreux dispositifs semi conducteurs où le confinement est caractérisé dans les systèmes de petites dimensions. Certes pour les ésoériques, on peut imaginer un creux, avec une bille à l'intérieur. C'est ce qu'on appelle un puits de potentiel. Quand la bille est dans le trou, on dit qu'elle est confinée. a moins qu'elle n'ait une vitesse (donc une énergie) suffisamment grande, elle ne pourra pas sortir du trou. Dans un puits quantiques, la bille est une particule. Généralement un électron ou un trou, la largeur du puits est si petite que l'énergie se discrétise. Cela signifie que la particule ne peut pas avoir n'importe quelle énergie mais prend des valeurs bien précises qui dépendent des paramètres du puits. [20]

Considérons une hétéro structure constituée d'une couche de semi conducteur SC<sub>1</sub> d'épaisseur L<sub>1</sub> en sandwich entre deux couches de semi conducteurs SC<sub>2</sub> tel que E<sub>g1</sub><E<sub>g2</sub>. La différence de gap ΔE<sub>g</sub> est distribuée entre les bandes de conduction et de valence.



**Figure 2. 1.** Structure schématique d'un puits quantique.

Si l'épaisseur L<sub>1</sub> du semi-conducteur SC<sub>1</sub> est faible, typiquement L<sub>1</sub><200 Å, les états électroniques ne correspondent plus au bas de la bande de conduction, mais sont quantifiés en structure de sous bandes d'énergie. [21]

### 2.2.3 La fonction d'onde et l'équation de Schrödinger

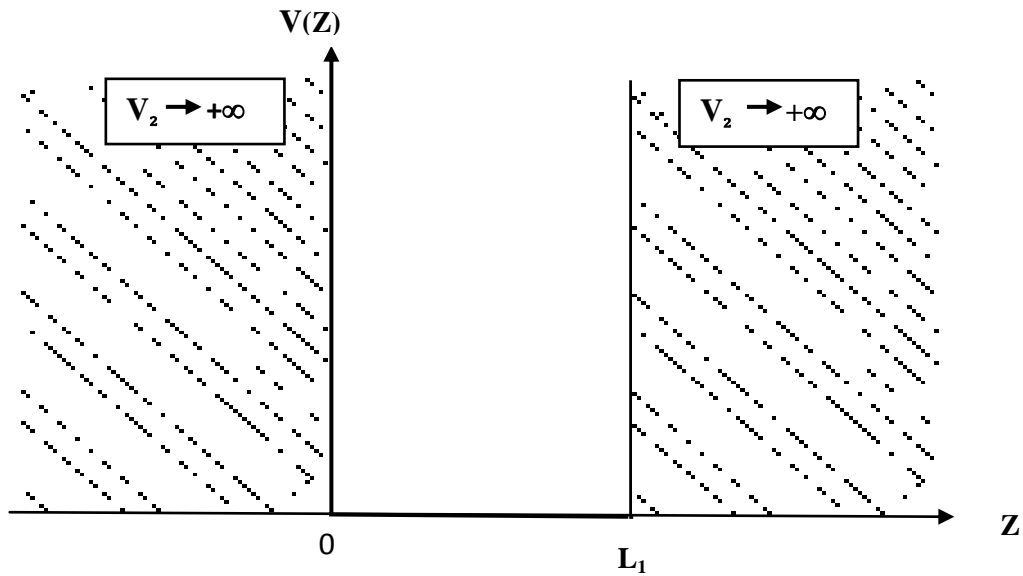
Si l'épaisseur du semi-conducteur SC<sub>1</sub> est faible, Le mouvement des électrons est quasi libre dans le plan de la structure et quantifié dans la direction perpendiculaire au plan de la structure est régi par l'équation de Schrödinger :

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

Où  $\Psi(z)$  est la fonction d'onde.

### 2.2.4 Puits de profondeur infinie

On propose d'étudier le comportement d'une particule dans un puits de potentiel unidimensionnel, de largeur « L<sub>1</sub> » selon la direction OZ.



**Figure 2.2.** 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 :

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

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

$$K_1 = \sqrt{\frac{2m_1 E}{\hbar^2}} \quad (2.10)$$

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,

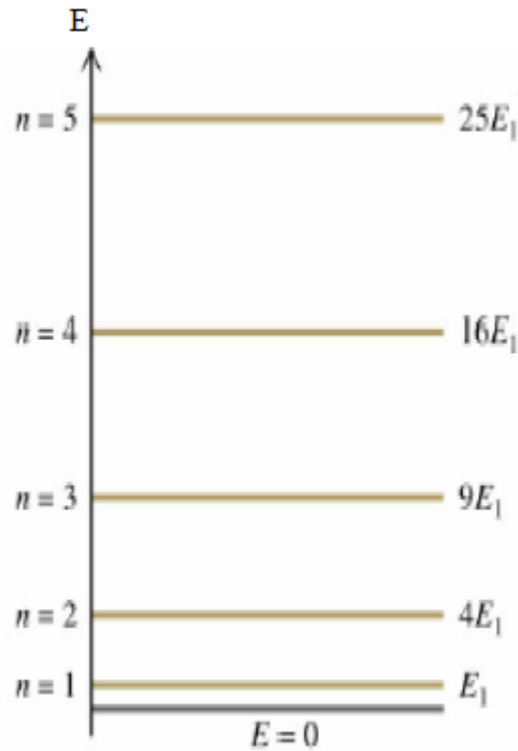
$$\Psi(z) = A \sin(Kz) \quad \text{et} \quad E = \frac{\hbar^2 K^2}{2m_1} = \frac{\hbar^2 n^2 \pi^2}{2m_1 L_1^2} \quad (2.13)$$

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

$$E_t = E_c + \frac{\hbar^2 n^2 \pi^2}{2m_1 L_1^2} + \frac{\hbar^2 K_{//}^2}{2m_1} \quad (2.14)$$

Avec

$K_{//}$  : vecteur d'onde des électrons dans la direction x y.



**Figure 2.3.** Energie totale 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

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

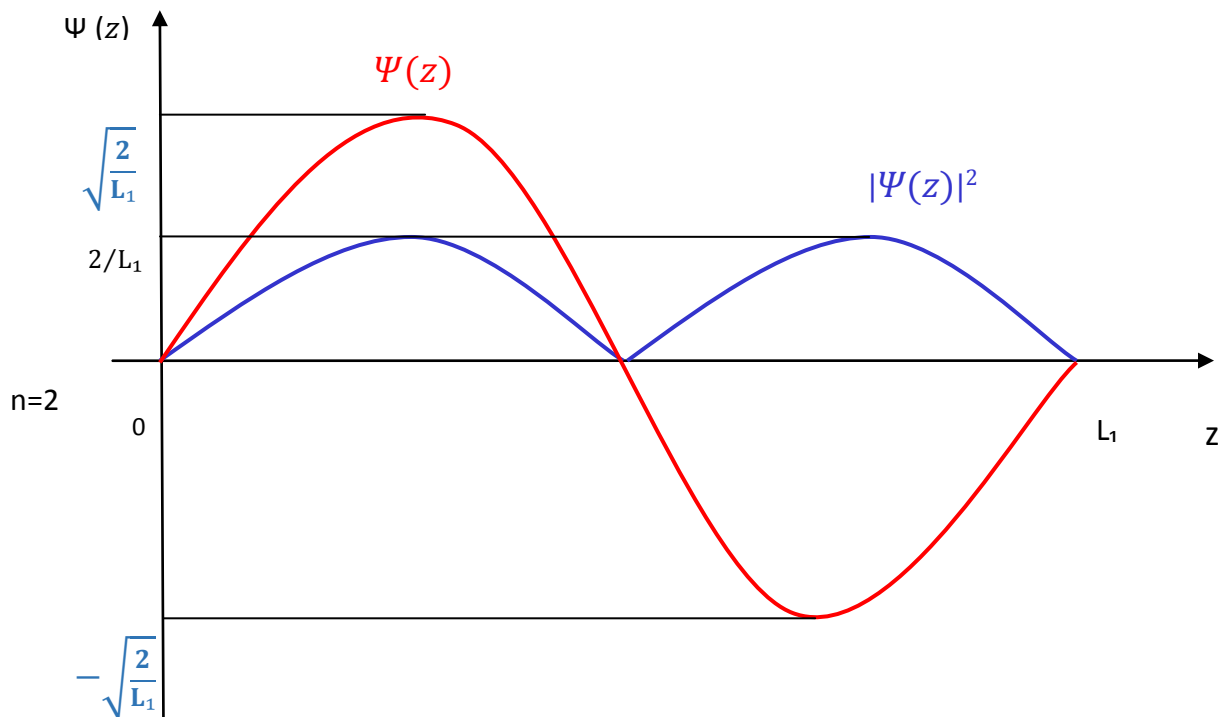
$$A = \sqrt{2/L_1} \quad (2.19)$$

Finalement :

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

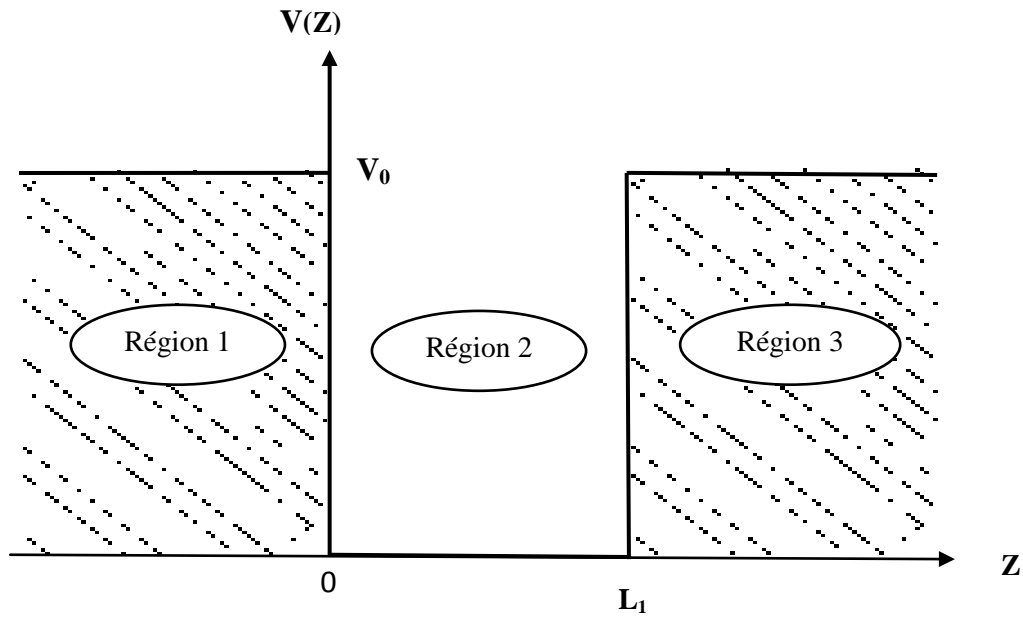
$$|\Psi(z)|^2 = \frac{2}{L_1} \left[ \sin^2\left(\frac{n\pi z}{L_1}\right) \right] \quad (2.21)$$

A titre d'exemple, sont représentés sur la figure (2.4) les allures des fonctions d'onde



**Figure 2.4.** 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 2.5.** Puits quantiques isolé résultant de la configuration des bandes d'une Structure  $SC_2-SC_1-SC_2$ .

Le potentiel carré délimite les trois régions suivantes :

$$\begin{cases} \text{Région 1 pour } z < 0, & V(z) = V_0 \\ \text{Région 2 pour } 0 < z < L_1, & V(z) = 0 \\ \text{Région 3 pour } z > L_1, & V(z) = V_0 \end{cases}$$

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

$$\begin{cases} (d^2\Psi_1/dz^2) - K_2^2\Psi_1 = 0 \\ (d^2\Psi_2/dz^2) - K_1^2\Psi_2 = 0 \\ (d^2\Psi_3/dz^2) - K_2^2\Psi_3 = 0 \end{cases} \quad (2.22)$$

Avec :

$$\begin{cases} K_1 = \frac{\sqrt{2m_1^*E}}{\hbar} \\ K_2 = \frac{\sqrt{2m_2^*(V_0-E)}}{\hbar} \end{cases} \quad (2.23)$$

Où :

$m_1^*$  : est la masse effective de semi-conducteur SC<sub>1</sub> dans la région 2.

$m_2^*$  : est la masse effective de semi-conducteur SC<sub>2</sub> dans les deux régions 1 et 3.

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

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

$$\text{La condition aux limites} \begin{cases} \Psi_1(z \rightarrow -\infty) = 0 \Rightarrow B_1 = 0 \\ \Psi_3(z \rightarrow +\infty) = 0 \Rightarrow A_3 = 0 \end{cases}$$

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

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

En  $z=0$

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

(2.26)

On obtient

$$\begin{cases} A_1 - A_2 - B_2 = 0 \\ (K_2/m_1^*) \cdot A_1 - j(K_1/m_2^*) \cdot A_2 + j(K_1/m_2^*) \cdot B_2 = 0 \end{cases}\tag{2.27}$$

En  $z=L_1$



- $\Psi_2(L_1) = \Psi_3(L_1)$  (2.28)
- $(1/m_2^*) \cdot d\Psi_2(L_1)/dz = (1/m_1^*) \cdot d\Psi_3(L_1)/dz$

On obtient

$$\begin{cases} A_2 e^{jK_1 L_1} + B_2 e^{-K_1 L_1} - B_3 = 0 \\ j(K_1/m_2^*) \cdot A_2 e^{jK_1 L_1} - j(K_1/m_2^*) \cdot B_2 e^{-jK_1 L_1} + (K_2/m_1^*) \cdot B_3 = 0 \end{cases} \quad (2.28)$$

D'où le système d'équations

$$\begin{cases} A_1 - A_2 - B_2 = 0 \\ (K_2/m_1^*) \cdot A_1 - j(K_1/m_2^*) \cdot A_2 + j(K_1/m_2^*) \cdot B_2 = 0 \\ A_2 e^{jK_1 L_1} + B_2 e^{-K_1 L_1} - B_3 = 0 \\ j(K_1/m_2^*) \cdot A_2 e^{jK_1 L_1} - j(K_1/m_2^*) \cdot B_2 e^{-jK_1 L_1} + (K_2/m_1^*) \cdot B_3 = 0 \end{cases} \quad (2.29)$$

Ce système admet des solutions non nulles, si son déterminant est nul

$$\begin{vmatrix} 1 & -1 & 0 & -1 \\ K_2/m_1^* & -j(K_1/m_2^*) & 0 & j(K_1/m_2^*) \\ 0 & e^{jK_1 L_1} & -1 & e^{-K_1 L_1} \\ 0 & j(K_1/m_2^*) e^{jK_1 L_1} & K_2/m_1^* & -j(K_1/m_2^*) e^{-jK_1 L_1} \end{vmatrix} = 0 \quad (2.30)$$

D'où l'équation :

$$\sqrt{2m_2 E_n / \hbar^2} \cdot L_1 = n \cdot \pi + 2 \text{Arctan}[\sqrt{m_2(V_0 - E_n) / m_1 E_n}] \quad (2.31)$$

Les valeurs propres  $E_n$  correspondantes à chaque entier  $n$  sont déterminées à partir de l'équation (2.31), ainsi appelée équation aux valeurs propres.

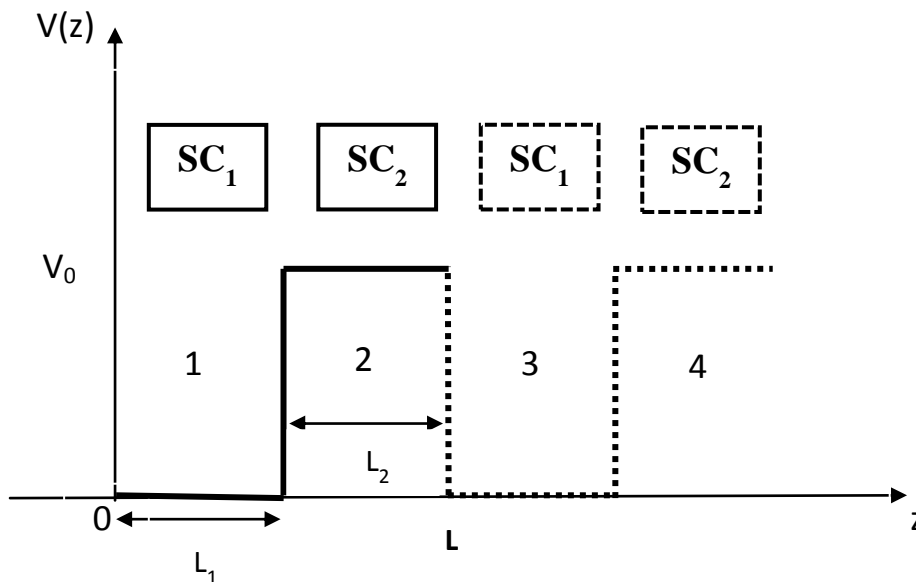
## 2.3 Les super-réseaux

Un super-réseau est un empilement périodique de couches de faibles épaisseurs (typiquement plusieurs nanomètres) de deux matériaux différents. Si ces couches sont suffisamment fines, un couplage quantique est possible. Les porteurs (trous

et électrons) ont alors accès à un continuum énergétique selon des « mini-bandes » contrairement à ce qui se passe dans un puits quantique où ils accèdent à des niveaux énergétiques discrets. Les énergies de ces mini-bandes sont alors dépendantes de l'épaisseur et de la composition des couches utilisées (de puits et de barrière).

### 2.3.1 Modèle de Kronig-penney (KP)

Nous présentons un modèle de mécanique quantique simple de l'état solide, qui donne directement la structure électronique des super réseaux. Ce modèle a été formulé en premier par R. de L. Kronig et W. G. Penney en 1930, appelé le modèle de Kronig-penney.



**Figure 2.6.** Maille élémentaire du Super-réseau formé de couches minces alternées de  $SC_1$ - $SC_2$  d'épaisseurs  $L_1$ ,  $L_2$ .

La bande de conduction se présente dans la direction du super réseau, comme une succession de puits quantiques de profondeur  $V_0 = \Delta E_c$ , de largeur  $L_1$  et distante de  $L_2$ . Ce potentiel périodique, de période  $L = L_1 + L_2$ , correspond tout à fait au modèle de Kronig-penney.

Considérons la maille élémentaire du super-réseau représentée sur la figure (2.6). L'équation de Schrödinger des électrons est, dans l'approximation de la masse effective de la forme :

$$\left( -\frac{\hbar^2 d^2}{2m_e dz^2} + V(z) \right) \Psi(z) = E\Psi(z) \quad (2.32)$$

Avec  $V(z)=0$  et  $m_e=m_1$  dans la région 1 correspondant au semi-conducteur  $SC_1$  et  $V(z)=V_0$  et  $m_e=m_2$  dans la région 2 correspondant au semi-conducteur  $SC_2$ . Dans chacune des régions, l'équation (2.32) s'écrit respectivement

$$\text{Région 1} \quad \frac{d^2\Psi(z)}{dz^2} + k_1^2\Psi(z) = 0 \quad (2.33)$$

$$\text{Région 2} \quad \frac{d^2\Psi(z)}{dz^2} - K_2^2\Psi(z) = 0 \quad (2.34)$$

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 (2.33 et 2.34) sont respectivement de la forme

$$\Psi_1(z) = A_1 \cos K_1 z + B_1 \sin K_1 z \quad (2.35)$$

$$\Psi_2(z) = A_2 \cosh K_2(z - L_1) + B_2 \sinh K_2(z - L_1) \quad (2.36)$$

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  $e^{ikL}$

$$\Psi_3(z) = e^{ikL} \Psi_1(z - L) \quad (2.37)$$

Soit

$$\Psi_3(z) = e^{ikL} (A_1 \cos K_1(z - L) + B_1 \sin K_1(z - L)) \quad (2.38)$$

Aussi les dérivées dans les trois régions s'écrivent comme suit :

$$\Psi'_1(z) = -A_1K_1\sin K_1z + B_1K_1\cos K_1z \quad (2.39)$$

$$\Psi'_2(z) = A_2K_2\operatorname{sh}K_2(z - L_1) + B_2K_2\operatorname{ch}K_2(z - L_1) \quad (2.40)$$

$$\Psi'_3(z) = e^{ikL}(-A_1K_1\sin K_1(z - L) + B_1K_1\cos K_1(z - L)) \quad (2.41)$$

Les conditions de continuité de la fonction d'onde  $\Psi$  et du courant de

Probabilités  $(1/m) \cdot d\Psi(z)/dz$  aux interfaces  $z=L_1$  et  $z=L$  sont

En  $Z=L_1$

$$\bullet \Psi_1(z = L_1) = \Psi_2(z = L_1) \quad (2.42)$$

$$\bullet (1/m_1^*) \cdot d\Psi_1(z = L_1)/dz = (1/m_2^*) \cdot d\Psi_2(z = L_1)/dz \quad (2.43)$$

En  $Z=L$

$$\bullet \Psi_2(z = L) = \Psi_3(z = L) \quad (2.44)$$

$$\bullet (1/m_2^*) \cdot d\Psi_2(z = L)/dz = (1/m_1^*) \cdot d\Psi_3(z = L)/dz \quad (2.45)$$

Avec  $L=L_1+L_2$  la période du réseau.

Les conditions de continuité s'écrivent donc

$$A_1\cos K_1L_1 + B_1\sin K_1L_1 - A_2 = 0 \quad (2.46)$$

$$-A_1\frac{K_1}{m_1}\sin K_1L_1 + B_1\frac{K_1}{m_1}\cos K_1L_1 - B_2\frac{K_2}{m_2} = 0 \quad (2.47)$$

$$e^{ikL}A_1 - A_2\operatorname{ch}K_2L_2 - B_2\operatorname{sh}K_2L_2 = 0 \quad (2.48)$$

$$e^{ikL}B_1\frac{K_1}{m_1} - A_2\frac{K_2}{m_2}\operatorname{sh}K_2L_2 - B_2\frac{K_2}{m_2}\operatorname{ch}K_2L_2 = 0 \quad (2.49)$$

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

S'écrivent sous forme matricielle,

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

Les coefficients ne sont différents de zéro que si le déterminant de la matrice est nul, donc La solution de l'équation de Schrödinger avec les conditions de continuité donnent l'équation aux valeurs propres

$$\cos kL = ch K_2 L_2 \cdot \cos K_1 L_1 + \frac{1}{2} \left( \frac{K_2 m_1}{K_1 m_2} - \frac{K_1 m_2}{K_2 m_1} \right) sh K_2 L_2 \cdot \sin K_1 L_1 \quad (2.50)$$

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

$$f(V_0, L_1, L_2, m_1, m_2, E) = \cos kL \quad (2.51)$$

Dans la mesure où le cosinus est toujours compris entre -1 et +1, l'expression (2.51) 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.

La fonction  $F(E)$ , est une fonction de l'énergie  $E$  pour un potentiel  $V_0$  fixe, il est possible de résoudre cette équation graphiquement et avoir les énergies des mini-bandes. Voir la figure 2.7.

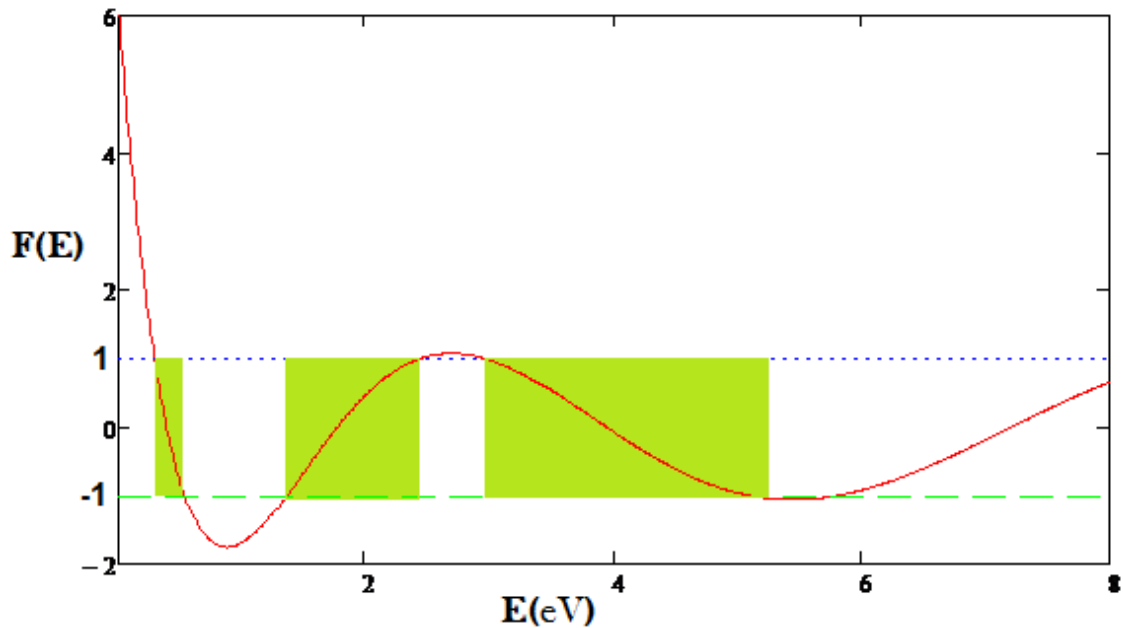


Figure 2.7 Les mini-bandes d'énergie dans un super-réseau.

### 2.3.2 La méthode des éléments finis (MEF ou FEM : Finite Element Method)

Cette méthode s'appuie sur des relations aux dérivées partielles déduites des équations de Maxwell. L'analyse par éléments finis est une analyse fréquentielle pouvant être appliquée à des structures 2D ou 3D à géométrie quelconque.

La MEF consiste à diviser le domaine d'étude en sous domaines qui sont de forme triangulaire en 2D et de forme tétraédrique en 3D. Le champ électromagnétique est alors approximé sur chacune des cellules élémentaires, ce qui confère une grande souplesse au maillage par éléments finis. Par conséquent, cette méthode permet l'étude rigoureuse de structures planaires, mais surtout de structures 3D à géométrie complexe. Elle est cependant limitée par son coût en termes de temps de calcul et espace mémoire requis. [22]

### 2.3.3 Structure de super-réseau à une dimension

L'équation de Schrödinger à une dimension s'écrit :

$$\frac{d}{dx} \left( \frac{-\hbar^2}{2m_e} \frac{d\Psi(x)}{dx} \right) + (V - E)\Psi(x) = 0 \quad (2.52)$$

D'après le théorème de Bloch, on peut mettre la fonction d'onde sous la forme :

$$\Psi(x) = u(x)e^{ikx} \quad (2.53)$$

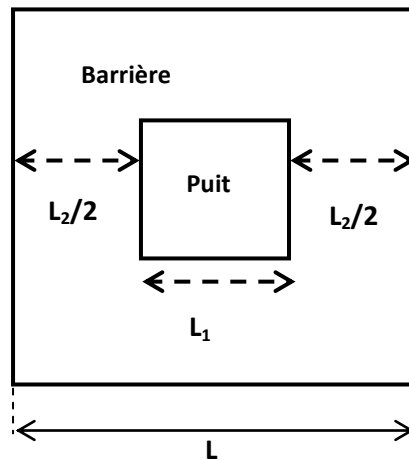
$u(x)$ : Fonction de Bloch ayant la périodicité de la structure

$\vec{K}$ : Vecteur d'onde

La nouvelle équation de Schrödinger vérifiée par les fonctions de Bloch s'écrit :

$$\begin{aligned} \frac{d}{dx} \left( \frac{-\hbar^2}{2m_e} \frac{du(x)}{dx} \right) - ik \frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{du(x)}{dx} - ik \frac{d}{dx} \left( \frac{\hbar^2}{2m_e} u(x) \right) + \left( \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e} + V \right) u(x) \\ = Eu(x) \end{aligned} \quad (2.54)$$

### 2.3.4 Structure de super-réseau à deux dimensions



**Figure 2.8.** Maille élémentaire du Super-réseau à deux dimensions.

L'équation de Schrödinger à deux dimensions s'écrit

$$\frac{d}{dx} \left( \frac{-\hbar^2}{2m_e} \frac{d\Psi(x, y)}{dx} \right) + \frac{d}{dy} \left( \frac{-\hbar^2}{2m_e} \frac{d\Psi(x, y)}{dy} \right) + (V - E)\Psi(x, y) = 0 \quad (2.55)$$

En posant :

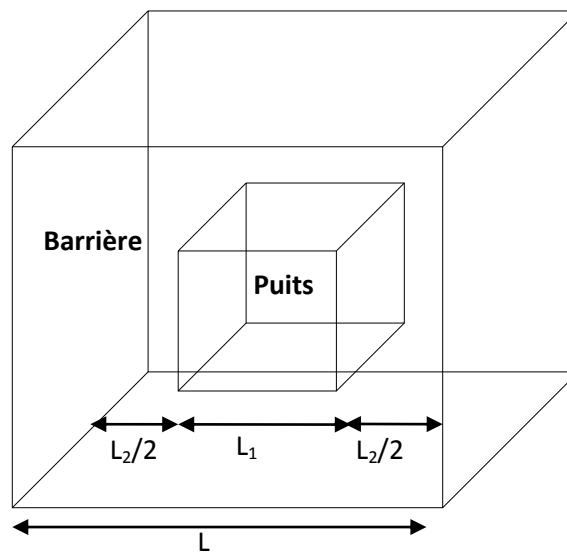
$$\Psi(x, y) = u(x, y)e^{ikx} \quad (2.56)$$

$u(x, y)$  ayant la périodicité de la structure

En remplaçant l'expression (2.56) dans l'équation (2.55) nous obtenons :

$$\begin{aligned} \frac{d}{dx} \left( \frac{-\hbar^2}{2m_e} \frac{du(x, y)}{dx} \right) + \frac{d}{dy} \left( \frac{-\hbar^2}{2m_e} \frac{du(x, y)}{dy} \right) - ik \frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{du(x, y)}{dx} \\ - ik \frac{d}{dx} \left( \frac{\hbar^2}{2m_e} u(x, y) \right) + \left( \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e} + V - E \right) u(x, y) = 0 \end{aligned} \quad (2.57)$$

### 2.3.5 Structure de super-réseau à trois dimensions



**Figure 2.9.** Maille élémentaire du Super-réseau à trois dimensions.

L'équation de Schrödinger à trois dimensions s'écrit :



$$\frac{d}{dx} \left( \frac{-\hbar^2}{2m_e} \frac{d\Psi(x, y, z)}{dx} \right) + \frac{d}{dy} \left( \frac{-\hbar^2}{2m_e} \frac{d\Psi(x, y, z)}{dy} \right) + \frac{d}{dz} \left( \frac{-\hbar^2}{2m_e} \frac{d\Psi(x, y, z)}{dz} \right) + (V - E)\Psi(x, y, z) = 0 \quad (2.58)$$

$$\Psi(x, y, z) = u(x, y, z)e^{ikx} \quad (2.59)$$

En remplaçant l'expression (2.59) dans l'équation (2.58) nous obtenons :

$$\frac{d}{dx} \left( \frac{-\hbar^2}{2m_e} \frac{du(x, y, z)}{dx} \right) + \frac{d}{dy} \left( \frac{-\hbar^2}{2m_e} \frac{du(x, y, z)}{dy} \right) \frac{d}{dz} \left( \frac{-\hbar^2}{2m_e} \frac{du(x, y, z)}{dz} \right) - ik \frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{du(x, y, z)}{dx} - ik \frac{d}{dx} \left( \frac{\hbar^2}{2m_e} u(x, y, z) \right) + \left( \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e} + V - E \right) u(x, y, z) = 0 \quad (2.60)$$

## 2.4 Conclusion :

Dans ce chapitre, nous avons abordé les principales notions théoriques fondamentales nécessaires à la compréhension des structures à puits quantiques et super réseaux (1D, 2D et 3D), Puis nous nous sommes penchés sur les calculs des états liés d'une structure à multi-puits quantiques ainsi que leurs fonctions d'onde associées. Les développements théoriques exposés dans ce chapitre vont nous servir dans les simulations qui vont être réalisées dans le chapitre suivant.

## Chapitre 3 Résultats de simulation

---

### 3.1 Introduction

La simulation numérique est un outil d'analyse et d'étude de plus en plus utilisé dans de nombreux domaines de recherche et développement tels que la mécanique, la science des matériaux, la physique théorique, la mécanique quantique...etc. Elle permet de prédire le comportement du sujet étudié sans avoir à passer par la construction de prototypes ou la réalisation d'essais réels, coûteux et/ou difficiles à mettre en place, ce qui est un avantage essentiel en matière de coûts de production, notamment dans les domaines innovants.

Notre simulation repose sur MATHCAD, qui est un logiciel mathématique à interface très maniable, qui permet de réaliser des calculs scientifiques. Son interface permet de réaliser des rapports, c'est-à-dire des documents formatés qui mêlent des calculs et des textes nécessaires à la compréhension d'un projet d'ingénierie. On a aussi utilisé COMSOL qui est un logiciel de simulation numérique basé sur la méthode des éléments finis (MÉF, ou FEM pour finite elements method) qui est utilisée pour résoudre numériquement des équations aux dérivées partielles.

Ce logiciel permet de simuler de nombreuses physiques et applications en ingénierie, et tout particulièrement les phénomènes couplés ou simulation multi-physiques.

Dans ce chapitre, nous allons calculer les niveaux d'énergie de quantification et la probabilité de présence d'une structure GaAs/InAs/GaAs à puits quantiques et super réseau 1D et 2D, 3D et cela en faisant varier la largeur de puits et de la barrière.

La structure que nous avons choisie est la suivante :

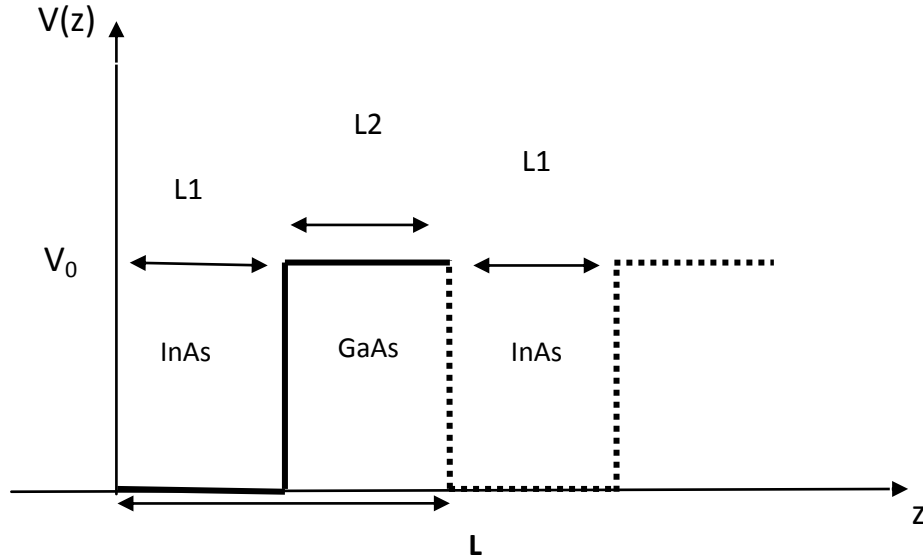


Figure 3.1. Maille élémentaire du super-réseau.

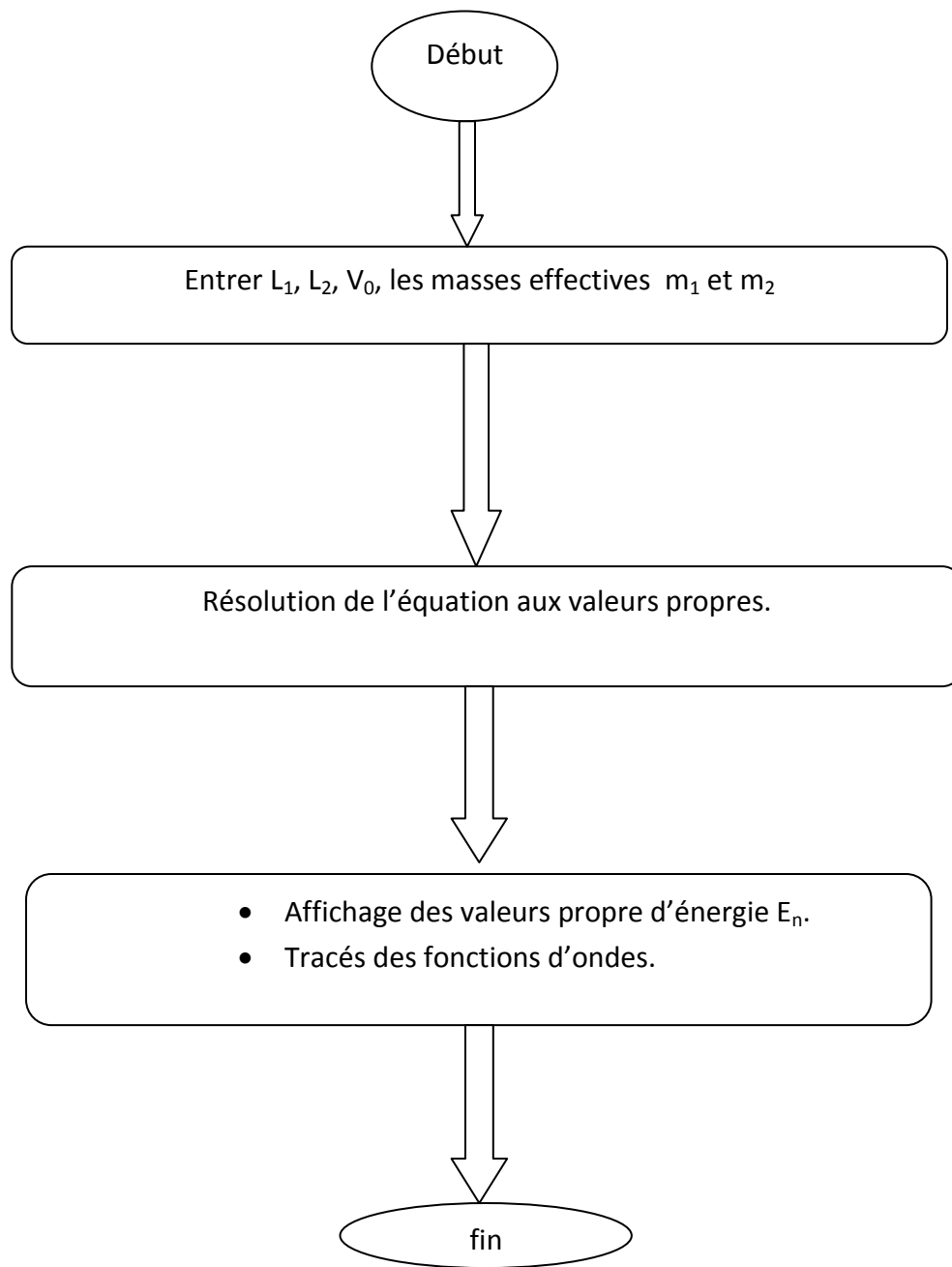
### 3.2 Calcul de l'énergie de quantification

Le calcul des énergies de quantification est basé sur la relation appelée « équation aux valeurs propres (équation (2.31), équation (2.50)) ».

l'organigramme de la figure(3.2) montre le processus de calcul des valeurs d'énergie quantifiée dans le puits et le super-réseau, 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 :

Masse effective du matériau puits	Masse effective du matériau barrière	Masse de l'électron libre (kg)	Potentiel de puits quantique (eV)
$m_1$	$m_2$	$m_0$	$V_0$
$0.023 \cdot m_0$	$0.067 \cdot m_0$	$9.1 \cdot 10^{-31} \text{kg}$	$0.697 \text{eV}$

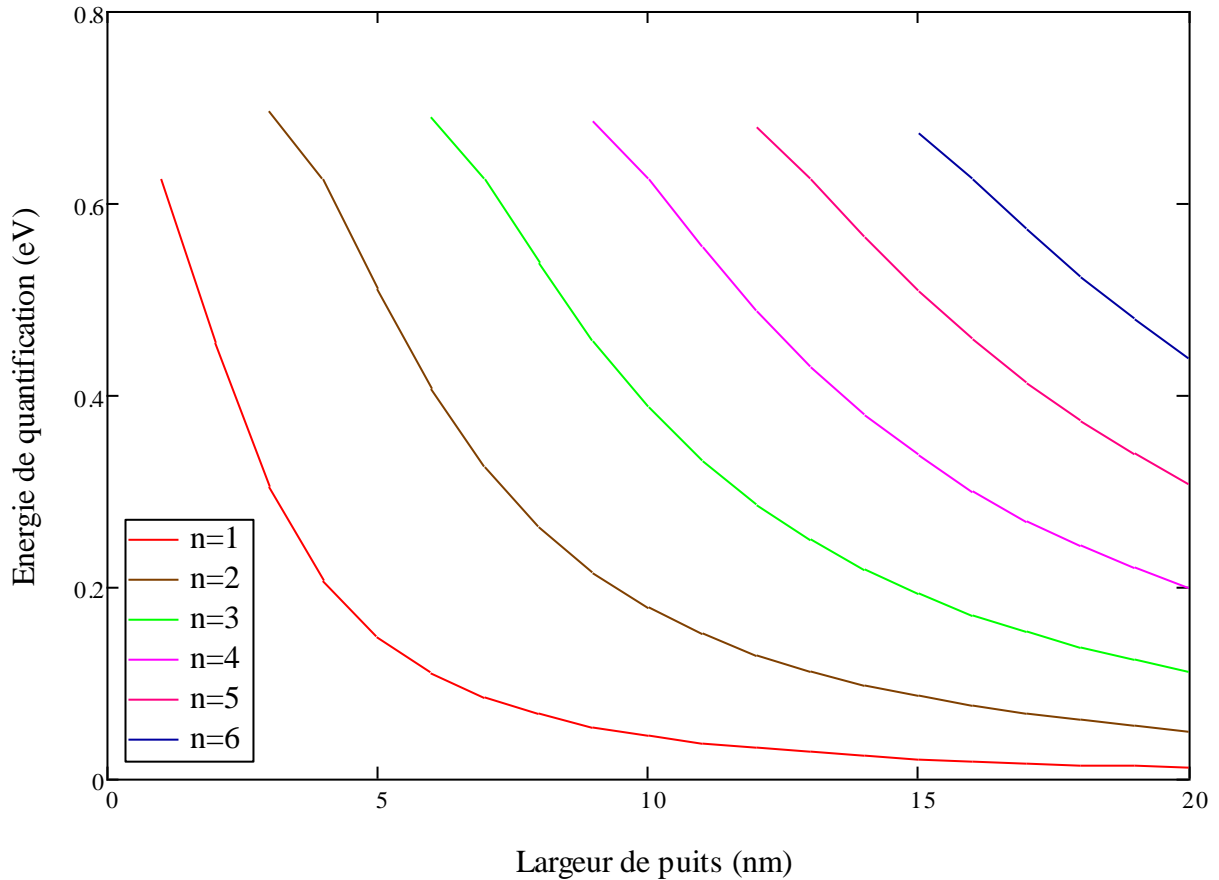
Tableau 3.1. Les paramètres d'entrée de la simulation.



**Figure 3 .2.** Organigramme du calcul de l'énergie de quantification dans le puits quantiques et le super réseau.

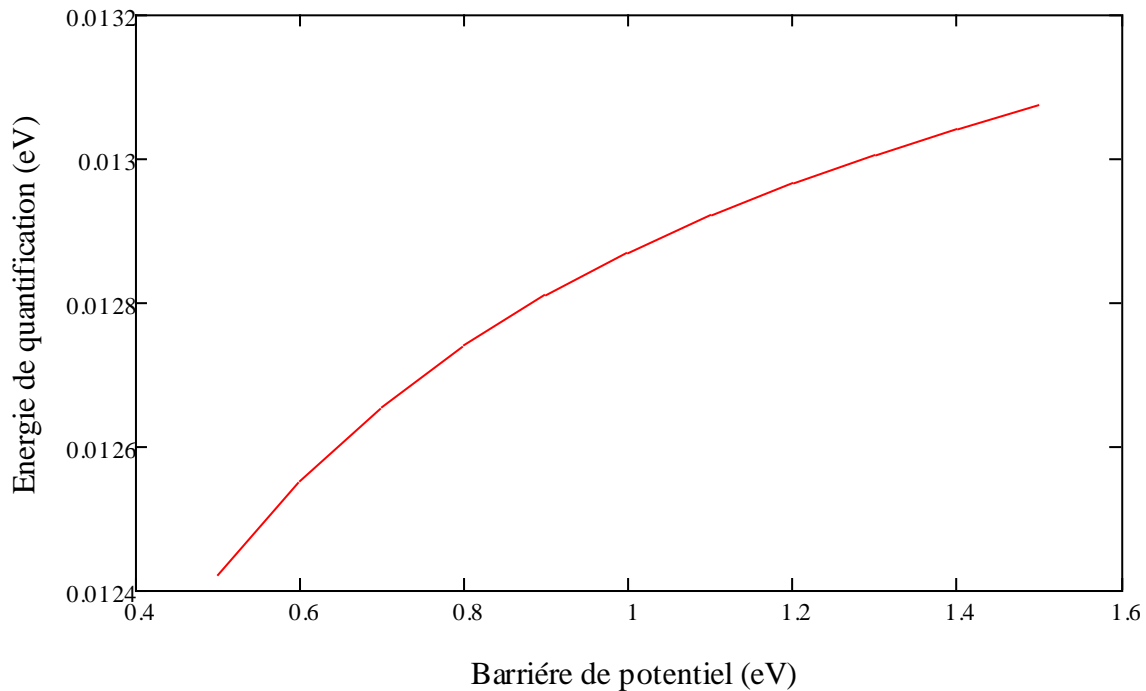
### 3.3 Etude du puits quantique isolé

#### a-Energie de quantification dans la bande de conduction



**Figure 3.3.** Energies de quantification des six premiers niveaux des électrons en fonction de la largeur de puits.

La figure (3.3) représente la variation des énergies de quantification des électrons pour les six premiers niveaux, en fonction de la largeur de puits. On remarque que les énergies de quantifications suivent une évolution décroissante.

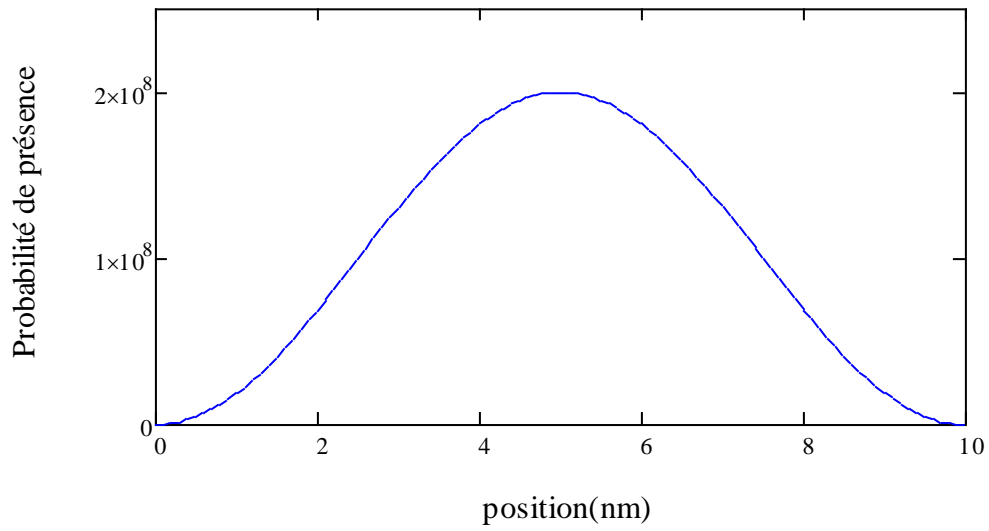


**Figure 3.4.** Energie de quantification des électrons en fonction de la barrière de potentiel  $V_0$ , pour  $L_1=20\text{nm}$ ,  $n=1$ .

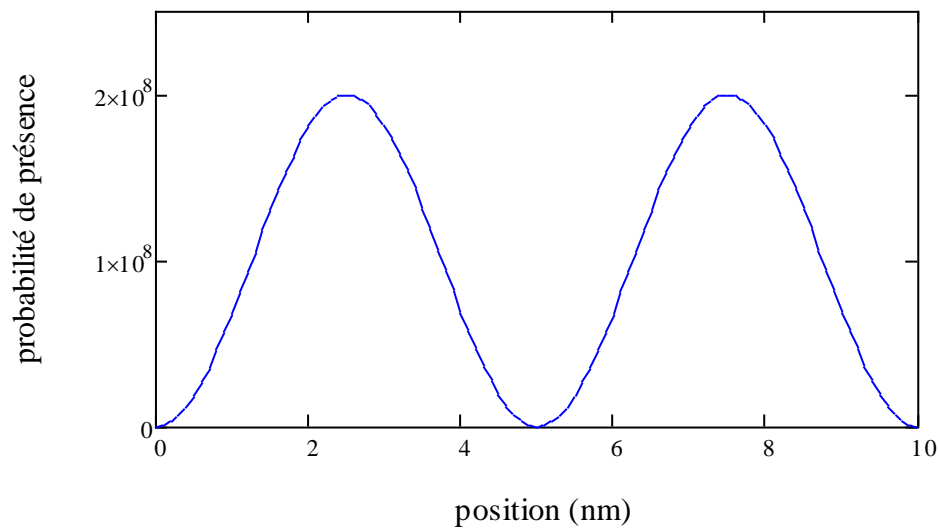
La figure (3.4) représente la variation de l'énergie de quantification des électrons en fonction de la barrière de potentiel  $V_0$ . On remarque que l'énergie de quantification augmente avec l'augmentation de la barrière de potentiel.

### **b-Probabilité de présence dans la bande de conduction**

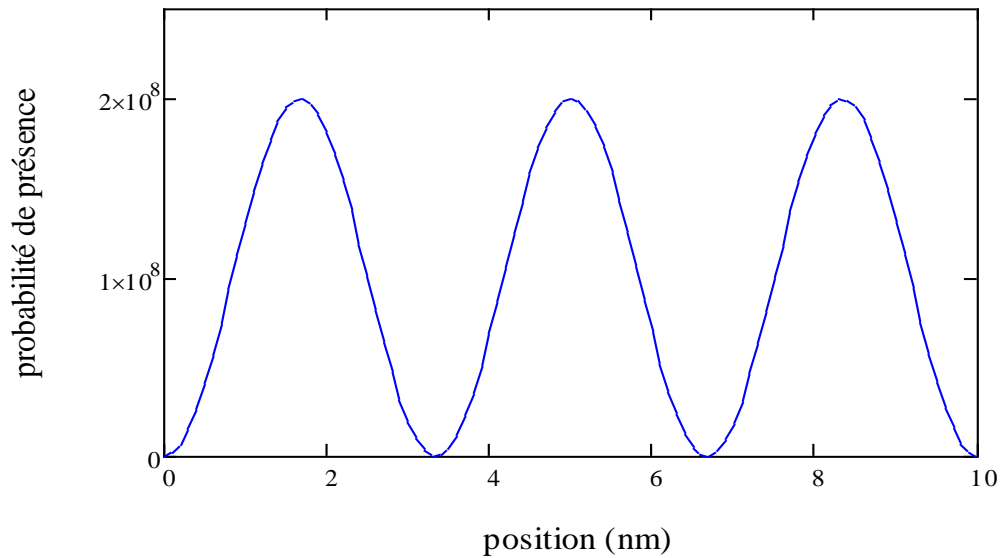
La probabilité de trouver une particule (trou ou électron) à une position est donnée par la norme au carré de la fonction d'onde ( $|\Psi|^2$ ).



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



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



**Figure 3.7.** Densité de probabilité de présence relative 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.

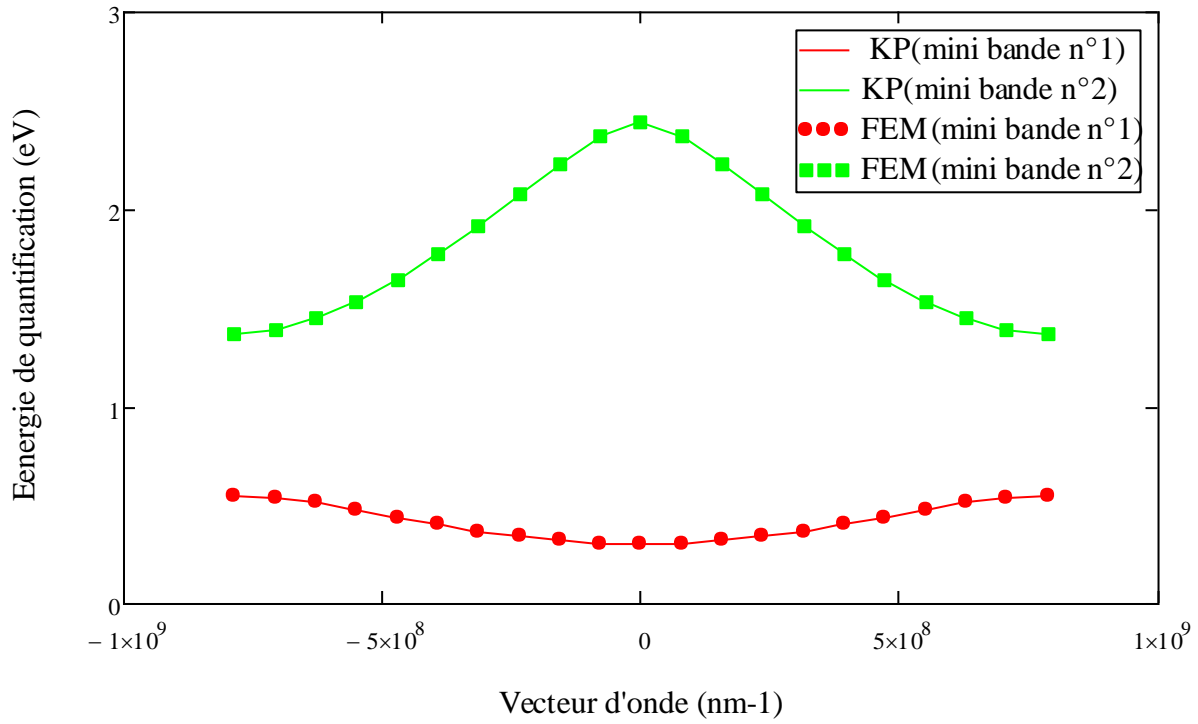
### 3.4 Etude du super-réseau

#### 3.4.1 Etude du super-réseau à 1 dimension

##### *a- Les bandes d'énergie*

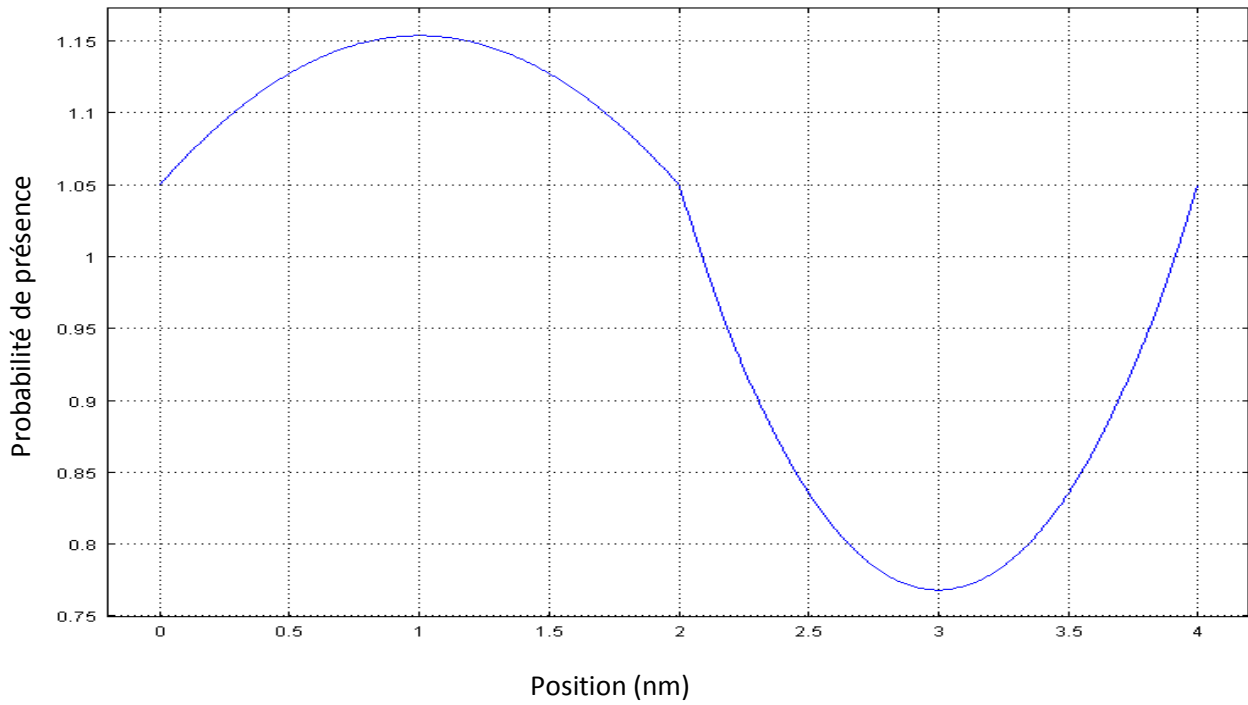
Nous avons utilisé l'équation aux valeurs propre (équation (2.47)). Les mini bandes d'énergie sont représentées sur la figure (3.8).





**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  $L_2=2\text{nm}$ .

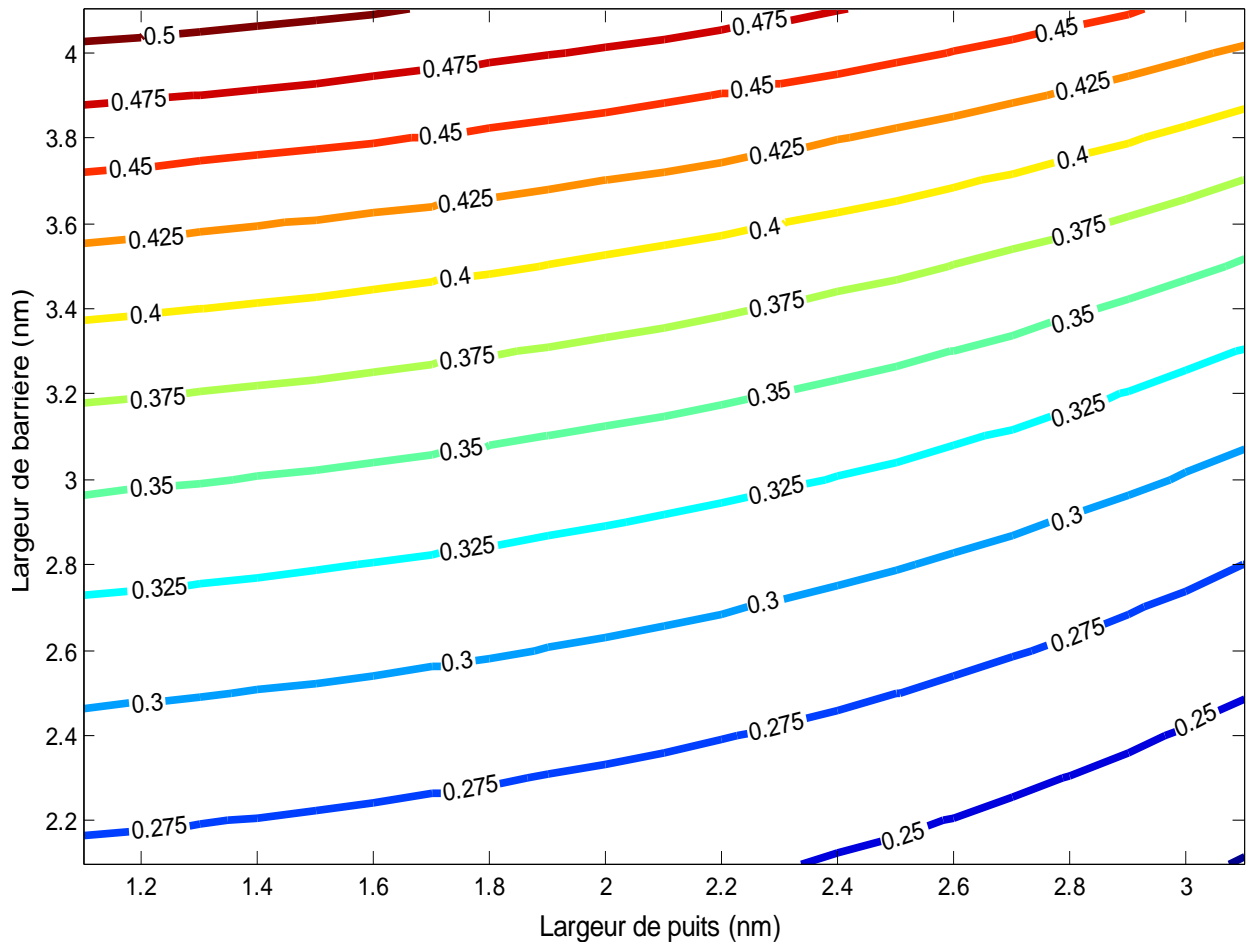
***b-Probabilité de présence***



**Figure 3.9.** Densité de probabilité de présence des électrons du super-réseau pour  $L_1=2\text{nm}$  et  $L_2=2\text{nm}$ .

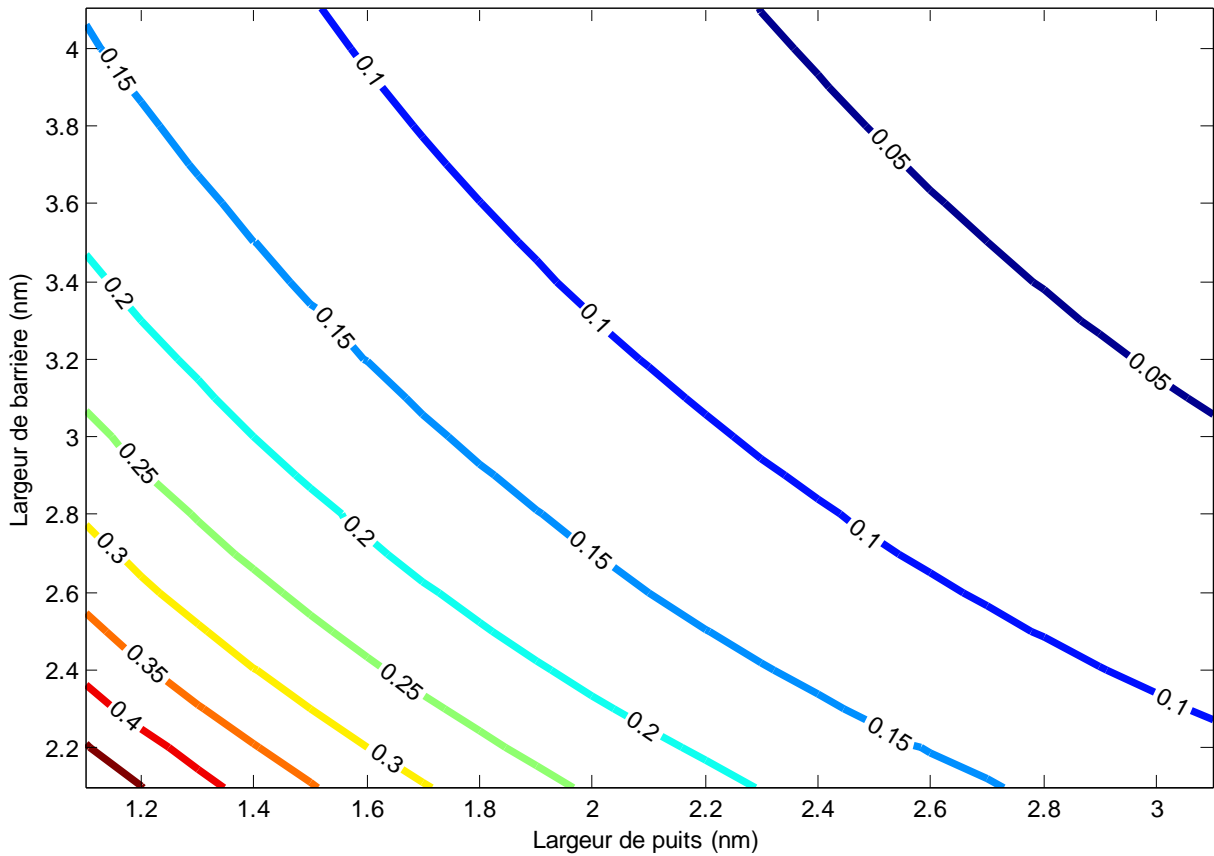
la figure (3.9) représente la probabilité de présence des électrons dans le super-réseau . On constate qu'elle n'est pas nulle dans la barrière donc l'électron n'est plus confiné dans le puits et peut se déplacer dans toute la structure, contrairement au cas du puits isolé.

**c-Première bande d'énergie**



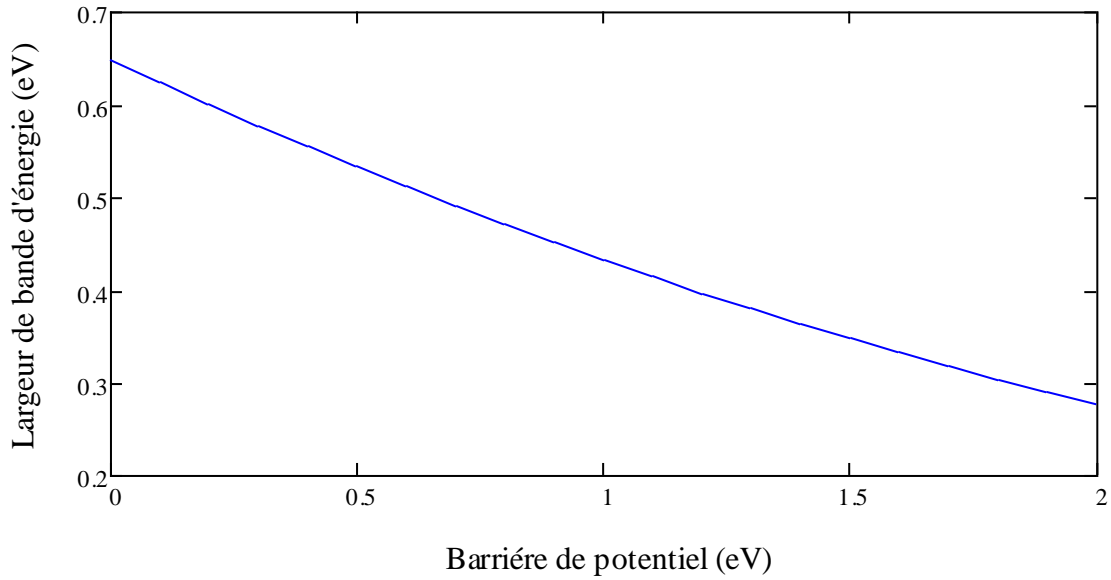
**Figure 3.10.** Évolution de la position de la première bande d'énergie  $E_1$  (eV) en fonction de la largeur de puits et la largeur de barrière.

La figure (3.10) 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.



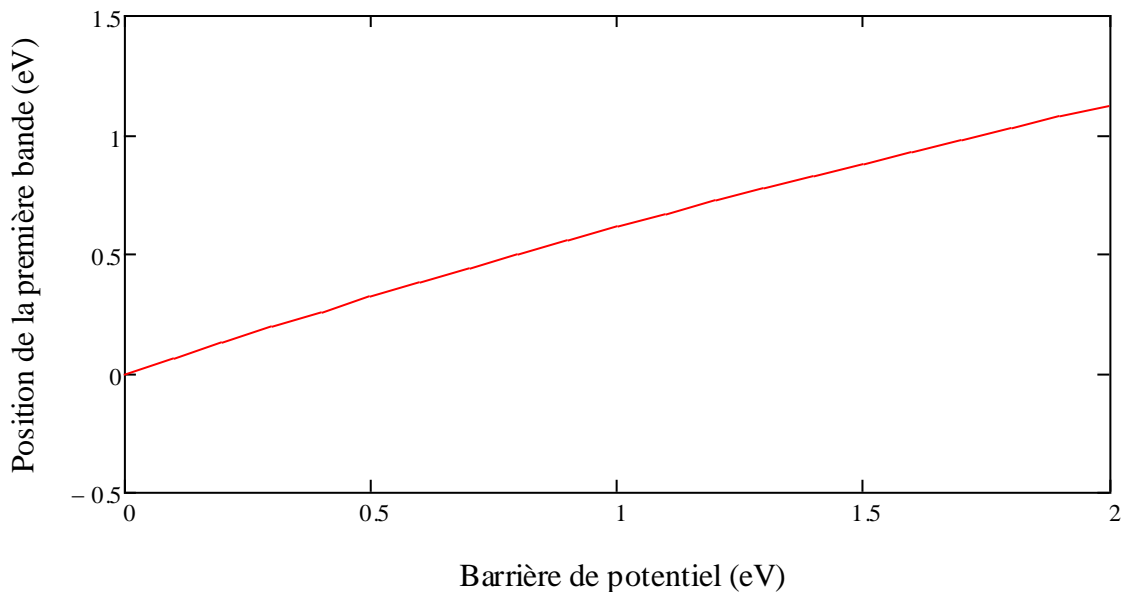
**Figure 3.11.** Évolution de la largeur de la première mini-bande d'énergie  $\Delta E_1$  (eV) en fonction de la largeur du puits quantique  $L_1$  et la largeur de barrière  $L_2$ .

La figure (3.11) 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.



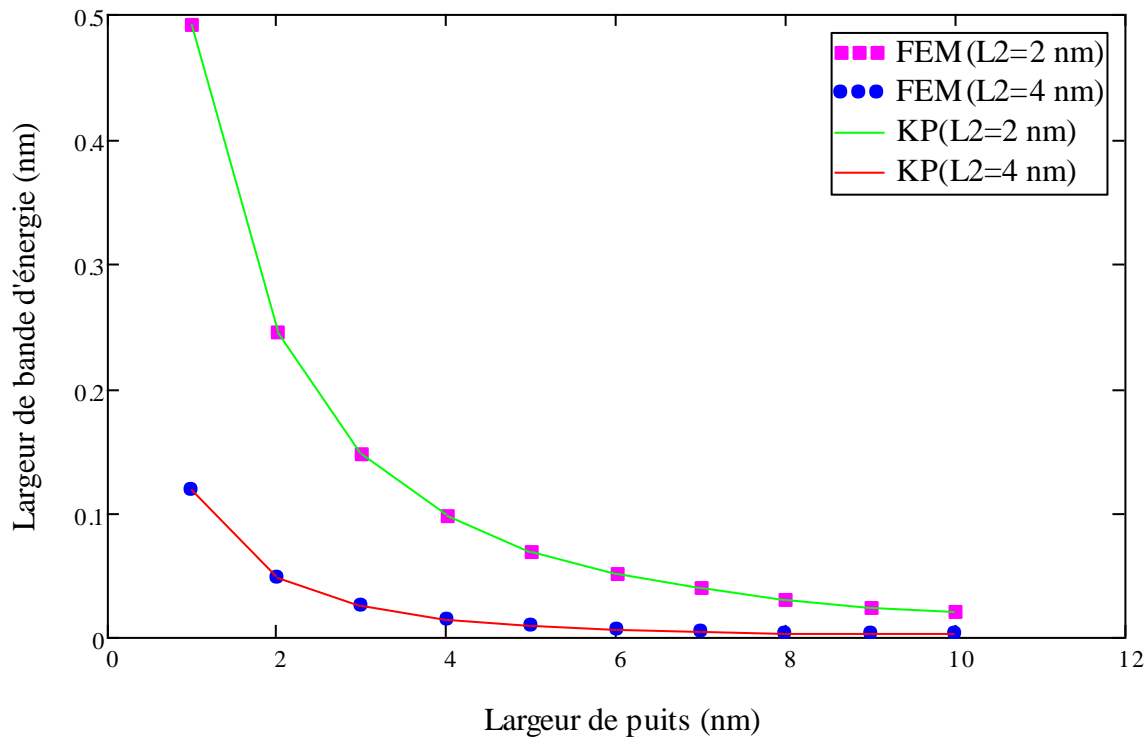
**Figure 3.12.** Évolution de la largeur de la première mini-bande d'énergie  $\Delta E_1$  (eV), en fonction de la barrière de potentiel  $V_0$  pour  $L_1=1\text{nm}$  et  $L_2=2\text{nm}$ .

La figure (3.12) montre l'évolution de la largeur de la première mini-bande d'énergie en fonction de la hauteur 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.** Évolution de la position de la première mini-bande d'énergie  $E_1$  (eV), en fonction de la barrière de potentiel  $V_0$ .  $L_1=1\text{nm}$  et  $L_2=2\text{nm}$ .

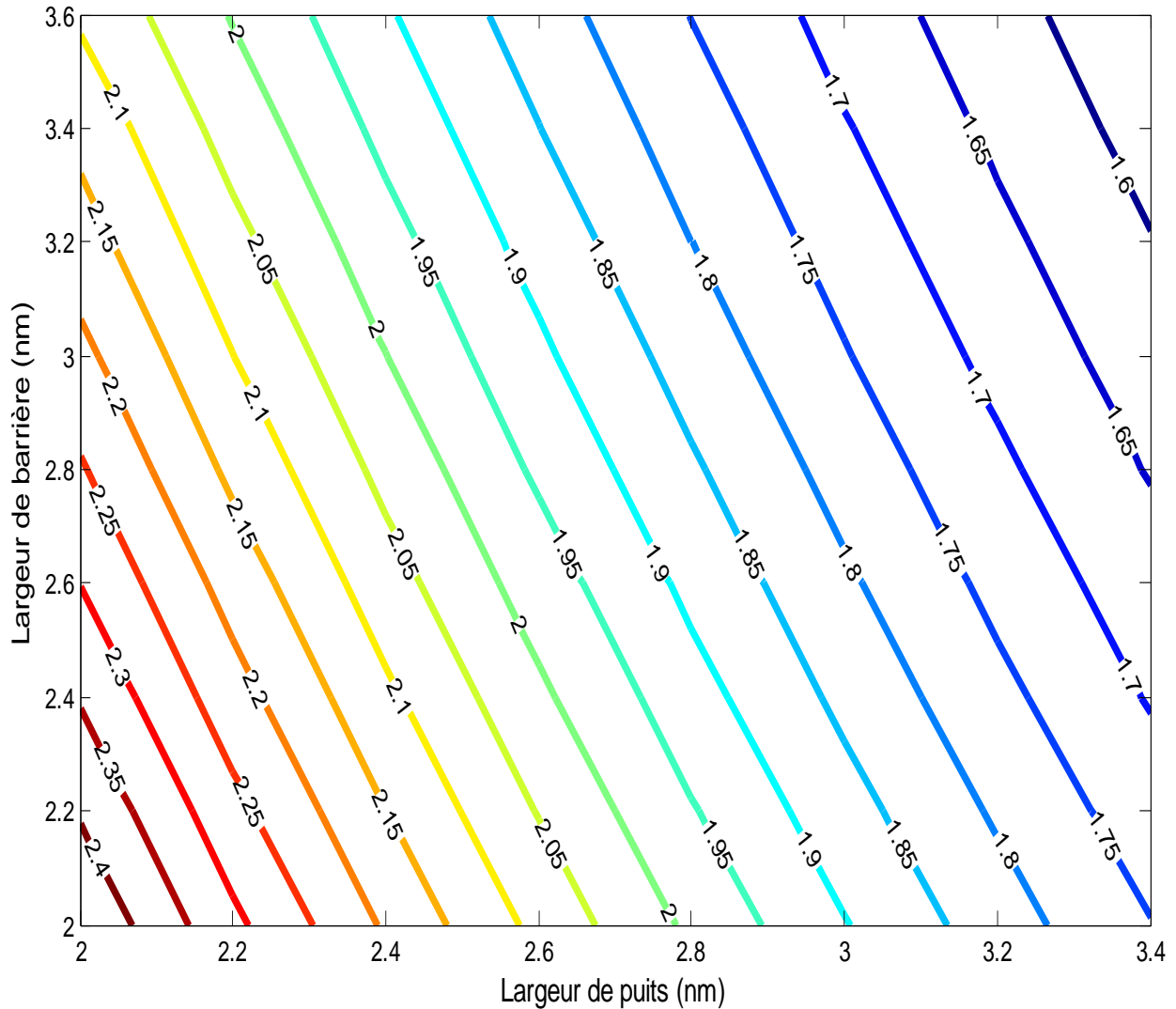
La figure (3.13) montre la variation de la position de la première mini-bande d'énergie en fonction de la barrière de potentiel  $V_0$ . On voit bien que la position de la première mini-bande d'énergie suit une évolution croissante en fonction de la barrière de potentiel.



**Figure 3.14.** Évolution de la largeur de la première mini-bande d'énergie  $\Delta E_1$  (eV), en fonction de la largeur de puits  $L_1$ , pour  $L_2=2$ nm et  $L_2=4$ nm.

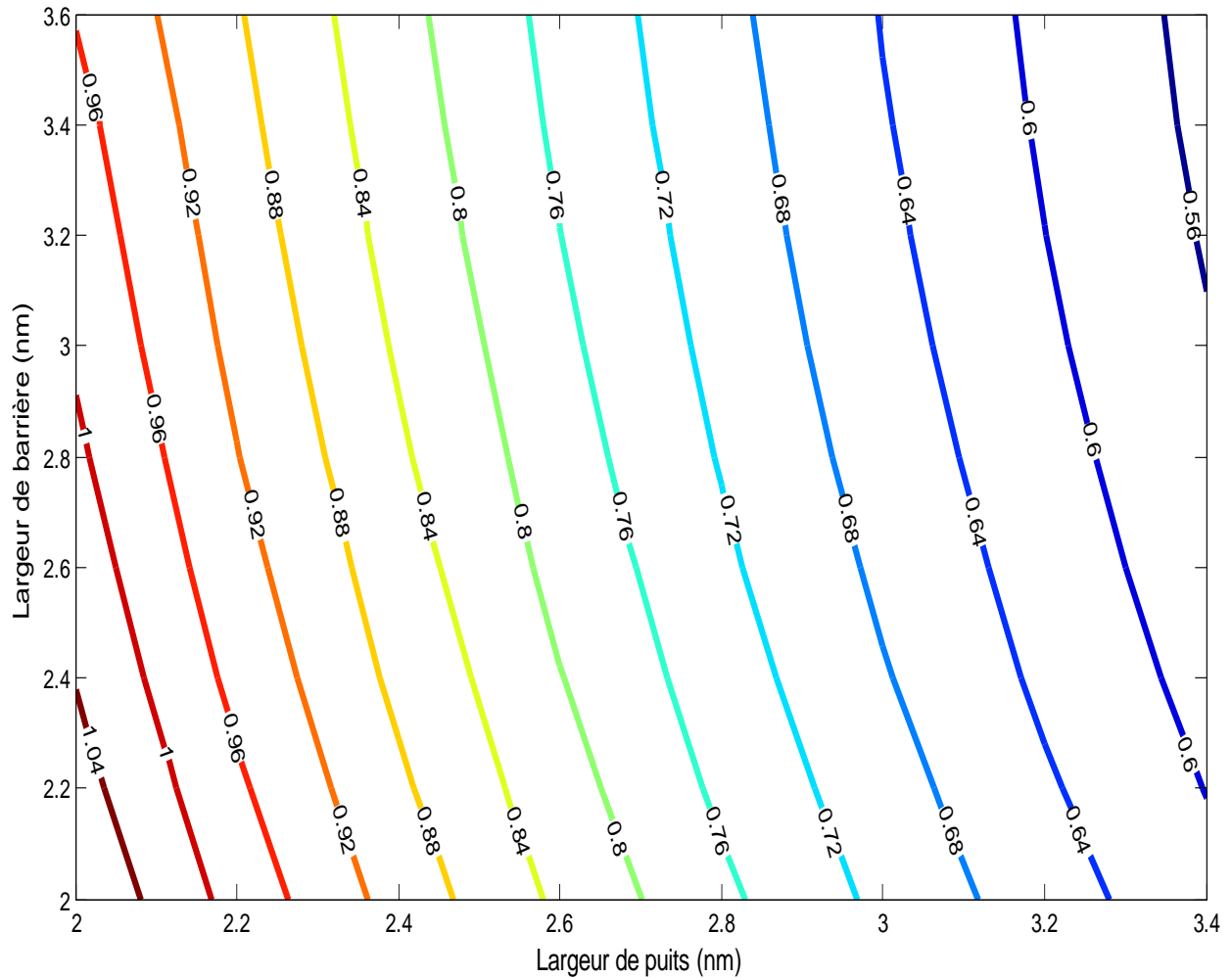
La figure (3.14) montre l'évolution de la largeur de la première mini-bande d'énergie en fonction de la largeur de puits  $L_1$  pour deux valeurs de la largeur de la barrière  $L_2$  nous remarquons que les deux méthodes (KP et FEM) donnent des résultats concordants.

#### d- deuxième mini-bande d'énergie



**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.

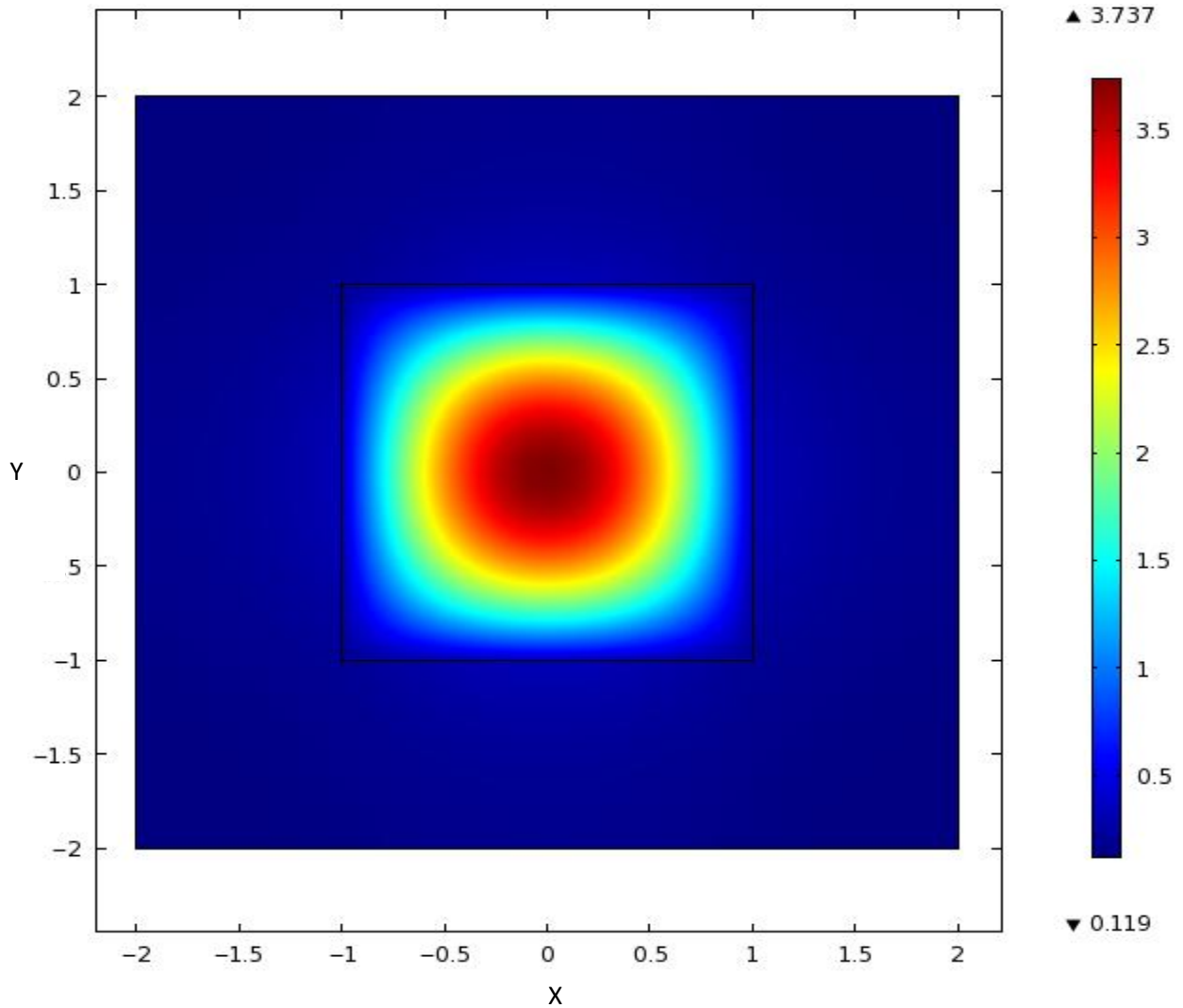


**Figure 3.16.** Evolution de la largeur de la deuxième mini-bande d'énergie  $\Delta E_2$  (eV) en fonction de la largeur du puits quantique  $L_1$  et la largeur de barrière  $L_2$ .

La figure (3.16) 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.

### 3.4.2 Etude du super-réseau à deux dimensions

#### *$\alpha$ -Probabilité de présence*

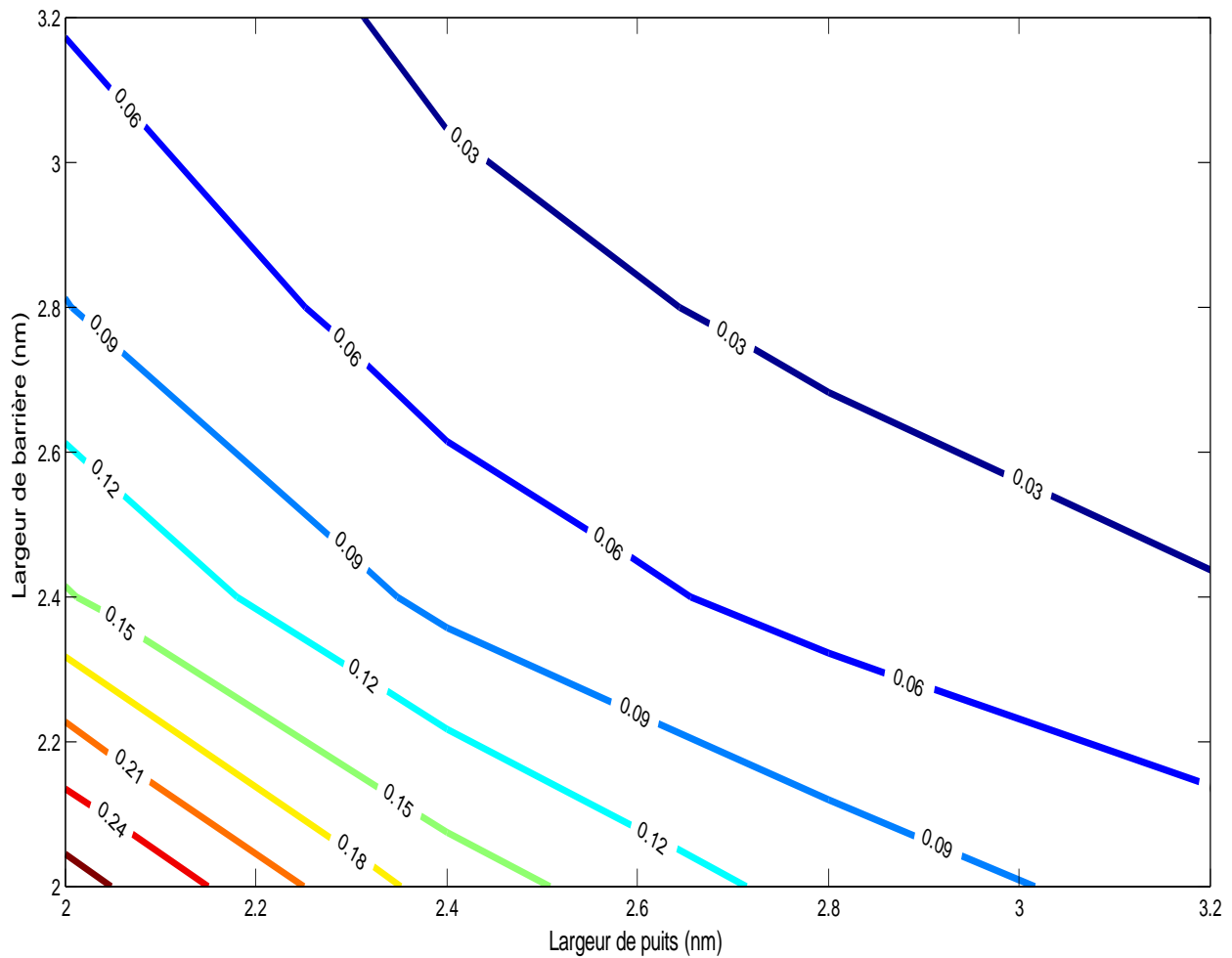


**Figure 3.17.** Densité de probabilité de présence des électrons du super-réseau pour  $L_1=2\text{nm}$  et  $L_2=2\text{nm}$ .

la figure (3.17) représente la probabilité de présence des électrons dans le super-réseau à deux dimensions. 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.



### ***b-première bande d'énergie***

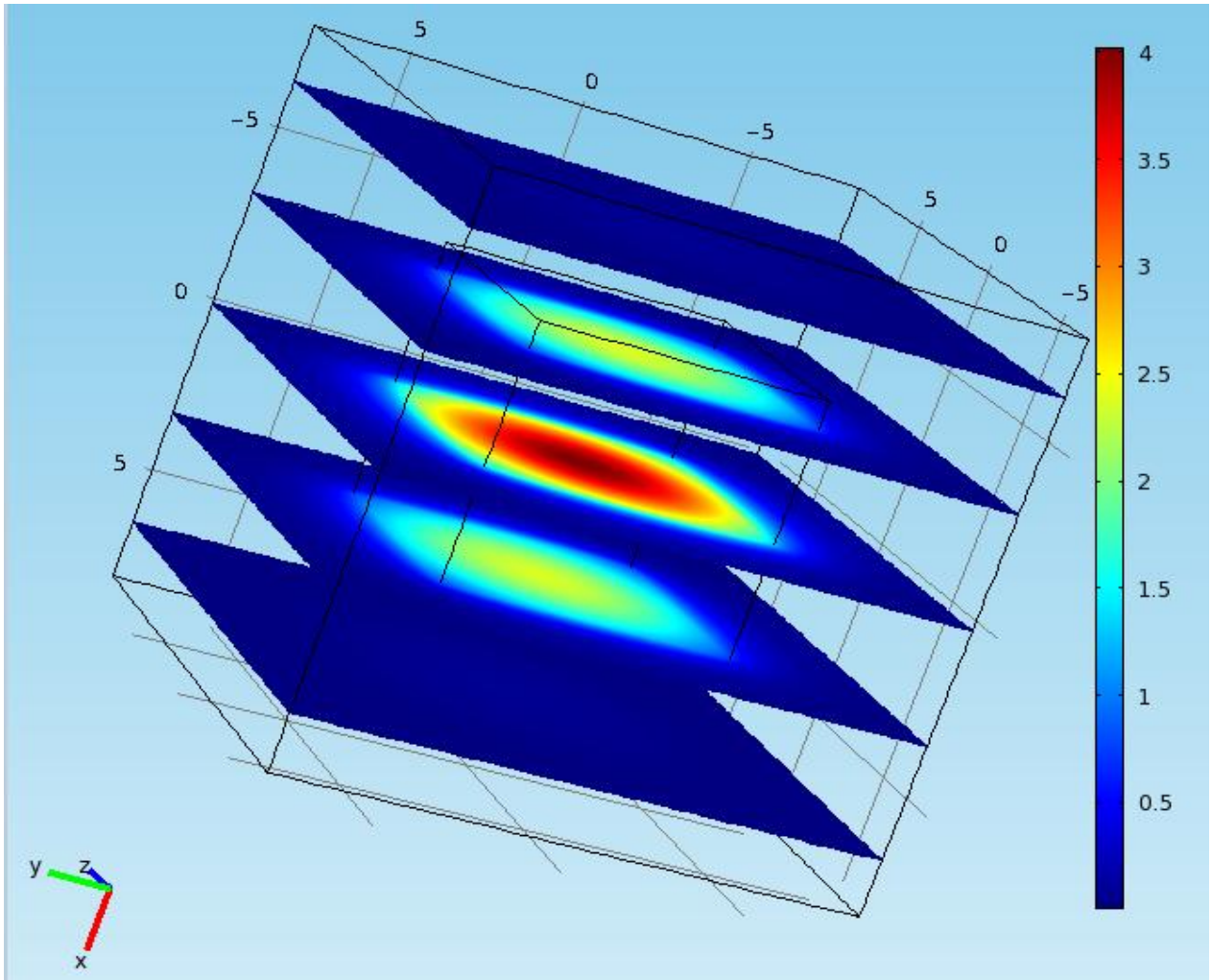


**Figure 3.18.** Évolution de la largeur de première mini-bande d'énergie  $\Delta E_1$  (eV), en fonction de la largeur de puits  $L_1$  et la largeur de barrière  $L_2$ .

La figure (3.18) 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.

### 3.4.3 Etude du super-réseau à trois dimensions

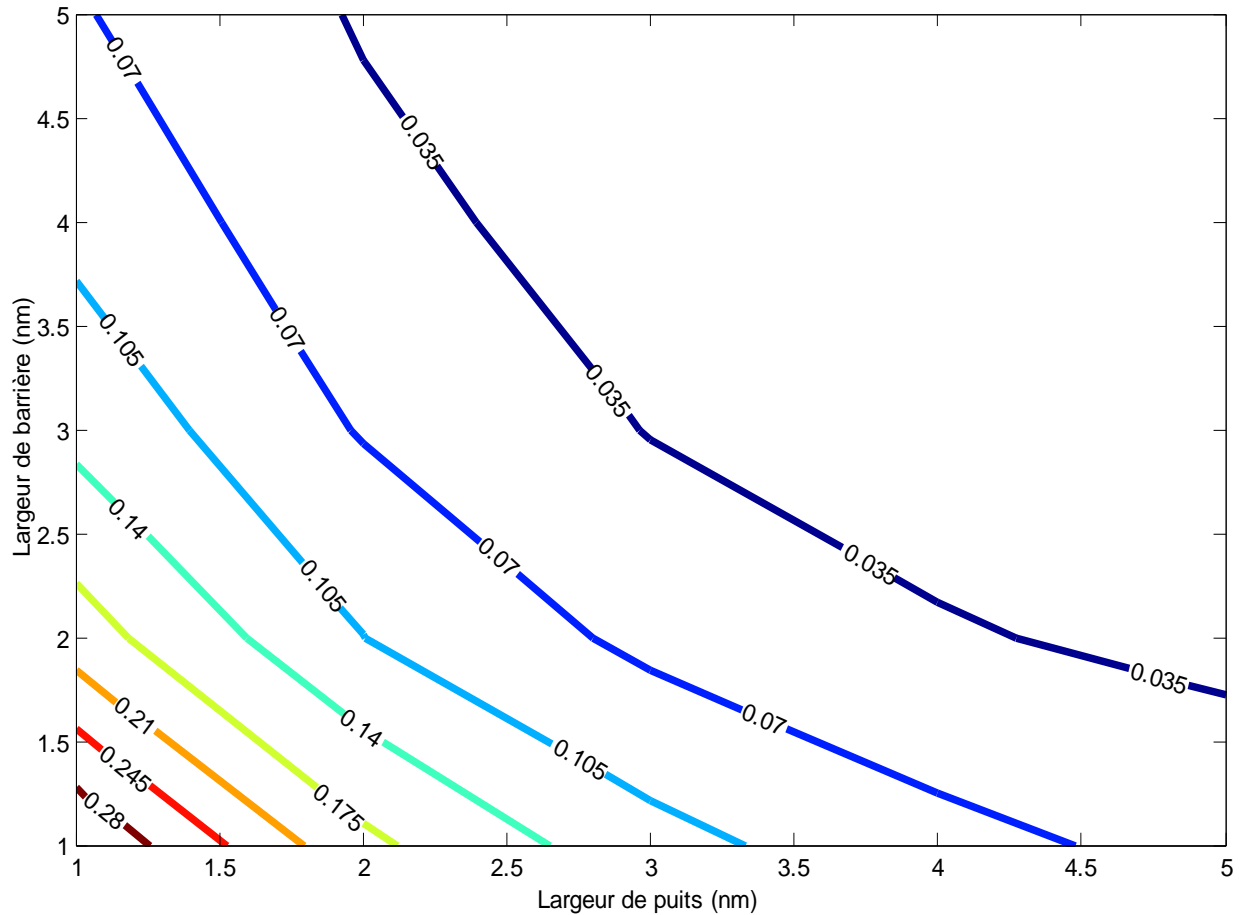
#### *a-Probabilité de présence*



**Figure 3.19.** Densité de probabilité de présence des électrons du super-réseau pour  $L_1=2\text{nm}$  et  $L_2=2\text{nm}$ .

la figure (3.19) représente la probabilité de présence des électrons dans le super-réseau à trois dimensions. On constate qu'elle n'est pas nulle dans la barrière donc l'électron n'est plus confiné dans la boîte quantique et peut se déplacer dans toute la structure, contrairement au cas de la boîte quantique isolée.

### ***b-première bande d'énergie***



**Figure 3. 20.** Evolution de la largeur de la première mini-bande d'énergie  $\Delta E_1$  (eV), en fonction de la largeur de puits  $L_1$  et la largeur de barrière  $L_2$ .

La figure (3.20) 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.

### 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 probabilité de présence et la variation de la largeur des mini-bandes et de leur position en fonction de la largeur de puits et la largeur de barrière pour une dimension, deux dimensions et trois dimensions. Dans le cas à une dimension, les résultats obtenus par le modèle de Kroning-Penny et la méthode des éléments finis sont très concordants.

# 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].

Les progrès spectaculaires réalisés dans le domaine de la physique des semi-conducteurs et de ses applications ont été rendus possibles par une bonne maîtrise des méthodes de croissance. Plusieurs techniques ont été développées à partir des années 1970 conduisant au contrôle ultime du dépôt d'atomes, monocouche par monocouche. Ainsi, on a pu concevoir des structures semi-conductrices dont les tailles sont réduites à des dimensions de l'ordre de la longueur d'onde de l'électron dans le milieu (typiquement quelques nanomètres) et dont les compositions peuvent également varier à l'échelle du nanomètre. Dans ce type de structure, des effets de confinement apparaissent du fait de la discontinuité du potentiel électronique aux interfaces entre deux matériaux d'énergie de bande interdite différente. Les porteurs ne sont plus libres de se mouvoir dans toutes les directions et leurs états d'énergie deviennent quantifiés dans les directions de confinement [2].

L'optoélectronique est une discipline au confluent des propriétés électroniques et optiques: depuis une trentaine d'années, l'optique et l'électronique ont été révolutionnées

avec l'apparition des structures artificielles dont les propriétés ne peuvent être comprises qu'en tenant compte de leurs caractères quantiques et de la nature ondulatoire de l'électron et si on veut aller plus loin, on peut parler des nouvelles technologies qui apparaissent au centre d'enjeux économiques d'une importance cruciale dans l'évolution des réseaux et des services. Les puits quantiques et leurs panoplies de paramètres structuraux sont au cœur de ce mémoire.

La physique des semi-conducteurs est une branche de la physique de solides qui est étudiée depuis plusieurs dizaines d'années. Ce qui a permis de comprendre les propriétés de nombreux matériaux dont certains sont maintenant technologiquement importants. Les super-réseaux sont des structures artificielles obtenues par empilement de couches dont les épaisseurs peuvent être aussi faibles qu'une dizaine d'Angströms. L'existence de ces très faibles dimensions a des conséquences sur la quantification du mouvement électronique et même à l'observation de propriétés inhabituelles et originales.

Ce sont les progrès effectués dans le domaine des techniques de fabrication par épitaxie des matériaux semi-conducteurs qui ont permis d'élaborer et de développer de nouvelles microstructures proposées en 1970 par Léo Esaki et Raphael Tsu.

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-rapides 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 structures à 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...etc.

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 simple puits, double puits, multi-puits et super-réseau.

Dans le deuxième chapitre, nous étudions théoriquement une structure à puits quantique et super-réseau (1D, 2D, 3D). 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 super-réseau selon les trois dimensions.

Dans le troisième chapitre, nous abordons la partie simulation. Les énergies de quantification, la probabilité de présence des porteurs d'une structure à puits quantique et super-réseau (1D et 2D, 3D), seront calculées et cela en faisant varier la largeur de puits et de la barrière.

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

## 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] S. Claire-Marie : « Contrôle optique de l'exciton dans des boîtes quantiques individuelles », thèse de doctorat, université de Toulouse, 2010.
- [3] M. Benaïcha: 'Etude des Matériaux semi conducteur III-V application à la conversion photovoltaïque', mémoire de magister, université Colonel Hadj Lakhdar Batna, p (1, 3), 2007.
- [4] A. Aouina : 'Rôle du Rayonnement dans l'élaboration et l'étude de Nano agrégats Semi Conducteurs de Zns', Mémoire de Magister, Université Mentouri Constantine, p (3, 17), 2013.
- [5] 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.
- [6] Vurgaftman and J.R.Meyer, L.R.Ram-Mohan. 'Band Parameters for III-V compound semiconductors and their alloys', 2001
- [7] N. Moussaoui: 'Effet de la lumière sur les caractéristiques électriques des dispositifs à semi conducteurs', Mémoire de Master, Université Med Khider Biskra, 2013
- [8] Y. Aiche: 'Calcul de l'énergie de transition dans une hétérostructure a puits quantiques en fonction des paramètres structuraux en vue de l'obtention d'une émission a 1.3  $\mu\text{m}$ ', mémoire de magister, Université de Blida, p (16,27), 2010.



- [9] A. Elouchdi: 'Caractérisation du phénomène de transport électronique dans Les matériaux composés ternaires: Application aux matériaux  $Ga_xIn_{1-x}Sb$ ', 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', thèse de magister, Abou Bekr Belkaid-Tlemcen, 2006.
- [11] S. S. Li: 'Semiconductor Physical Electronics', 2nd edition, Springer, New York, 2006.
- [12] A. Kourabacha, M. Nacry: 'Etude et simulation de l'effet tunnel dans une structure à double puits quantique', mémoire de master, Université de Blida, p 8, 2013.
- [13] L. Khaled Sofiane: 'Etude et simulation des structures à base de GaInAsP et AlGaInAs pour le photovoltaïque', mémoire de magister, Université de Blida, 2012.
- [14] J. Arnaud : 'Physique des diodes lasers', Equipe de micro-électronique de Montpellier-Unité associé au CNRS p 392,1989.
- [15] 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, p 21, 2011.
- [16] M. Zenati: 'Etude des propriétés optoélectronique de nanostructures GRINCH à base d'antimoniures III-Sb et application', mémoire de magister, université d'Oran, 29-30, 2010.
- [17] M. Zouaoui: 'Etude des propriétés électroniques des boites quantiques InAs/InP par spectroscopie de défauts profonds (DLTS) pour des applications optoélectroniques', Electronique, INSA de Lyon, 2013. Français, <NNT : 2013ISAL0092>, <tel-01066429>.
- [18] 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.
- [19] B. Dorra: 'Étude des rayures dans un double puits quantique en champ magnétique intense', Thèse doctorat, université Sherbrooke (Québec), Canada, mai 2002.
- [20] S. Laval: 'Physique des semi-conducteurs III-V ',1989.
- [21] H. Mathieu: 'Physique des Semiconducteurs et des Composants Electronique', 6<sup>eme</sup> édition, p (616, 622), Paris, 2009.

[22] J. JIN: 'The finite element method in electromagnetic Wiley', 1993.