

الجمهورية الجزائرية الديمقراطية الشعبية
République Algérienne démocratique et populaire

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

جامعة سعد دحلب البليدة 1
Université Saad Dahlab Blida 1

كلية التكنولوجيا
Faculté de Technologie

قسم الإلكترونيك
Département d'Électronique



Mémoire de master

Présenté par :

Bekhtari Abdelillah

Chouaou Yasmine

ETUDE ET SIMULATION DES NANOSTRUCTURE A BASE DE NOUVEAUX MATERIAUX POUR L'OPTOELECTRONIQUE InAsSb/GaAs & InAsSb/InP

Promoteur :

Pr. AISSAT Abdelkader

Dr. BESTAM Rachid

Année Universitaire 2017-2018

Remerciements

Tout d'abord, nous remercions Dieu, notre créateur de nous avoir donné la force, la volonté et le courage afin d'accomplir ce travail modeste.

Nous adressons le grand remerciement à notre encadreur Mr Aissat, et le co-promoteur Mr Bestam qui ont proposé le thème de ce mémoire, pour leurs conseils et de nous avoir dirigés du début à la fin de ce travail.

Nous tenons également à remercier messieurs les membres de jury pour l'honneur qu'ils nous ont fait en acceptant de siéger à notre soutenance.

Finalement, nous tenons à exprimer notre profonde gratitude à nos familles qui nous ont toujours soutenues et à tout ceux qui ont participé à la réalisation ce travail. Ainsi que l'ensemble des enseignants qui ont contribué à notre formation.

ملخص

هذا العمل يركز على المحاكاة لهيكلين أساسهما أنصاف نواقل (InAsSb / GaAs) و (InAsSb / InP) و هذا لتطبيق الليزر .على وجه التحديد ، يهدف إلى تقييم تأثير الأنتيمون "Sb" على نطاق التكافؤ والكسب البصري باستخدام نموذج نطاق مكافحة العبور (BAC).

في البداية قمنا بدراسة الخصائص الفيزيائية والهيكلية لمواد III-V، بالإضافة إلى أنواع مركباتها وفوائدها . ثم دراسة تأثير دمج تركيز منخفض من الأنتيمون في سبيكة InAsSb الثلاثي .يتسبب هذا التضمين في رشقة من نطاق التكافؤ في نطاق فرعيين، وتتمثل ميزة هذا التأثير في تغيير طول موجة البث من أجل الوصول إلى أطوال موجات الانبعاث القابلة للاستخدام في الألياف البصرية 0.85 و 1.33 و 1.55 ميكرومتر.

كلمات المفاتيح : الليزر - الابار الكمومية – InAsSb/GaAs – InAsSb/InP

Résumé

Ce travail porte sur la simulation de deux structures à base de semiconducteurs (InAsSb/GaAs et InAsSb/InP) pour une application laser. Il s'agit plus précisément d'évaluer l'influence de l'antimoine 'Sb' sur la bande de valence et le gain optique en utilisant le modèle de bande anti-croisement (BAC).

Nous avons étudié d'abord les propriétés physiques et structurales des matériaux III-V, ainsi que leurs types de composé et leurs avantages. Ensuite, on a étudié l'effet de l'incorporation d'une faible concentration de l'antimoine dans l'alliage ternaire InAsSb. Cette incorporation provoque un éclatement de la bande de valence en deux sous bandes, l'avantage de cet effet est de faire varier la longueur d'onde d'émission afin d'atteindre les longueurs d'onde d'émission exploitable dans les fibres optiques 0.85, 1.33 et 1.55 μm .

Mots Clés : Laser – Puits quantique – InAsSb/GaAs – InAsSb/InP.

Abstract

This work concerns the simulation of two structures containing semiconductors (InAsSb/GaAs and InAsSb/InP) for a laser application. It aims to evaluate the influence of antimony 'Sb' on the valence band and optical gain using the anti-crossing band (BAC) model.

Firstly, we studied the physical and structural properties of III-V materials, as well as their types of compounds and their benefits. Then, we studied the effect of incorporating of low concentration of antimony into the ternary InAsSb alloy. This incorporation causes a burst of the valence band in two sub-bands, the advantage of this effect is to vary the emission wavelength in order to reach the usable emission wavelengths in the optical fibers. 0.85, 1.33 and 1.55 μm .

Keywords: Laser – Quantum well – InAsSb/GaAs – InAsSb/InP.

TABLE DES MATIERES

Introduction générale.....	1
CHAPITRE 1 : ETAT DE L'ART DES SEMI-CONDUCTEURS III-V	
1.1 Introduction.....	3
1.2 La notion des semi-conducteurs.....	3
1.3 L'intérêt des Semi-conducteurs de type III-V.....	4
1.4 Comparaison entre les matériaux III-V et le silicium	5
1.5 Les types Composés Des Semi-conducteurs III-V.....	5
1.5.1 Les composés semi-conducteurs binaires.....	5
1.5.2 Les composés semi-conducteurs ternaire et quaternaire	5
1.6 Propriétés physiques des semi- conducteurs III-V.....	6
1.6.1 Propriétés structurales.....	6
1.6.1.1 La structure zinc-blende et würtzite.....	6
1.6.2 Propriétés électroniques	7
1.6.2.1 Structure de bande d'énergie électronique	7
1.6.2.2 Gap indirect – Gap direct	8
1.6.3 Effets des perturbations extérieures sur les matériaux III-V	10
1.6.3.1 Effet de la température sur les III-V.....	10
1.6.3.2 L'effet de la pression.....	11
1.7 Les avantages des semi-conducteurs III-V.....	11
1.8 Conclusion	12
Références bibliographiques	13
CHAPITRE 2 : PUICTS QUANTIQUE A BASE DE InAsSb/GaAs et InAsSb/InP	
2.1 Introduction.....	15
2.2 Laser a puits quantique.....	15
2.3 Quelques applications des propriétés des semi-conducteurs	16
2.4 Emissions spontanée et stimulée.....	18
2.5 Définition d'un puits quantique	19
2.5.1 Puits quantique type I	20
2.5.2 Puits quantique type II	20
2.5.3 Puits quantique type III.....	21
2.6. Notion de couche contrainte	21
2.6.1 La contrainte	21
2.6.2 Epaisseur critique	23
2.7 L'effet de la contrainte sur les bandes d'énergies	25
2.8 Niveau de confinement dans un puits quantique	28
2.9 Energie de transition	30
2.10 Propriétés des matériaux constituant le puits quantique	31
2.10.1 Propriétés des matériaux InAs, InSb, GaAs et InP.....	31
2.10.2 Description de l'alliage InAsSb	32
2.10.2.1 Paramètre de maille de InAsSb.....	33

2.10.2.2	Eclatement de la bande de valence par l'introduction de l'antimoine.....	33
2.11	Gain optique.....	34
2.12	Conclusion.....	36
	Références bibliographiques	37

CHAPITRE 3 : SIMULATION ET INTERPRETATION DES RESULTATS

3.1	Introduction	40
3.2	Paramètres	40
3.3	Désaccord paramétrique.....	41
3.4	Epaisseur critique.....	41
3.5	Éclatement de la bande de valence	42
3.5	L'énergie de la bande interdite.....	43
3.6	Barrières de potentiel.....	44
3.7	Niveaux d'électrons dans le puits.....	44
3.8	Niveaux trous lourds dans le puits.....	46
3.9	Niveaux trous légers dans le puits.....	48
3.10	Energies de transition bande de conduction vers trous lourds.....	50
3.11	Energies de transition bande de conduction vers trous légers.....	52
3.12	Longueur d'onde due aux transitions bande de conduction vers trous lourds.....	54
3.13	Longueur d'onde due aux transitions bande de conduction vers trous légers.....	55
3.14	Le gain optique.....	56
3.14.1	Gain optique avec plusieurs concentrations de l'antimoine.....	56
3.14.2	Gain optique avec plusieurs densités d'injection N.....	57
3.14.3	Gain optique avec plusieurs largeurs de puits L_z	58
3.15	Conclusion.....	59
3.16	Conclusion générale	62

LISTE DES ILLUSTRATIONS GRAPHIQUES ET TABLEAUX

Chapitre 1

Figure 1.1 : Mailles cristallographiques de Zinc Blende (GaAs).....	6
Figure 1.2: (A) Structure de würtzite avec les paramètres de maille c_0 et a_0 , (B) Représentation 3D de la structure würtzite.....	7
Figure 1.3 : Représentation schématique des bandes d'énergie.....	8
Figure 1.4 : Bandes d'énergies pour les matériaux Isolant, Semi-conducteur et Conducteur...	8
Figure 1.5 : Structure de bande d'énergie du : A-gap indirect et B-gap direct.....	9

Chapitre 2

Figure 2.1 : Laser à puits quantique.....	16
Figure 2.2 : Les propriétés optiques des semi-conducteurs et leurs applications.....	17
Figure 2.3 : Mécanisme d'interaction entre un atome et un photon	18
Figure 2.4 : Présentation d'un puits quantique	19
Figure 2.5 : Profil de puits quantique de type I.....	20
Figure 2.6 : Profil de puits quantique de type II.	21
Figure 2.7 : Profil de puits quantique de type III.	21
Figure 2.8 : Différentes configurations de croissance en accord ou en désaccord de maille sur un substrat épais.	22
Figure 2.9 : Propagation de dislocation dans la couche épitaxie épaisse.	24
Figure 2.10 : Structure de bande d'un semi-conducteur à gap directe (A) non contraint (B) en compression (C) en tension.....	26
Figure 2.11 : Représentation de dimension de confinement dans puits quantique et la densité d'état.....	29
Figure 2.12 : Energie de transition dans le puits quantique	30
Figure 2.13 : Les bandes d'énergie dans une structure à puits quantique, avant et après l'éclatement de la bande de valence.	34

Chapitre 3

Figure 3.1 : Variation du paramètre de maille d'InAsSb en fonction de la concentration Sb	40
Figure 3.2 : Évolution de la contrainte en fonction de la concentration de Sb.....	41

<i>Figure 3.3</i> : Variation de l'épaisseur critique de InAsSb sur les substrats GaAs et InP.....	42
<i>Figure 3.4</i> : éclatement de la bande de valence en fonction de la concentration de l'antimoine.....	42
<i>Figure 3.5</i> : Bande interdite de InAsSb contraint sans eclatement sur les substrats GaAs et InP.....	43
<i>Figure 3.6</i> : Bande interdite de InAsSb contraint avec eclatement sur les substrats GaAs et InP.....	44
<i>Figure 3.7</i> : Variation des barrières de potentiel en fonction de la concentration de L'antimoine	45
<i>Figure 3.8. a.</i> Variation des niveaux énergétiques des électrons dans le puits InAsSb/InP.....	45
<i>Figure 3.8.b.</i> Variation des niveaux énergétiques des électrons dans le puits InAsSb/GaAs en fonction de sa largeur pour plusieurs concentrations de Sb.....	46
<i>Figure 3.9. a.</i> Variation des niveaux énergétiques des trous lourds dans le puits InAsSb/InP en fonction de sa largeur pour plusieurs concentrations de Sb.....	47
<i>Figure 3.9. b.</i> Variation des niveaux énergétiques des trous lourds dans le puits InAsSb/GaAs en fonction de sa largeur pour plusieurs concentrations de Sb.....	48
<i>Figure 3.10.a.</i> Variation des niveaux énergétiques des trous légers dans le puits InAsSb/InP en fonction de sa largeur pour plusieurs concentrations de Sb.....	49
<i>Figure 3.10.b.</i> Variation des niveaux énergétiques des trous légers dans le puits InAsSb/GaAs en fonction de sa largeur pour plusieurs concentrations de Sb.....	50
<i>Figure 3.11.a.</i> Variation des énergies de transition trous lourds vers bande de conduction dans les puits InAsSb/InP, InAsSb/GaAs en fonction Lz pour une concentration de Sb égale 0.05.....	51
<i>Figure 3.11.b.</i> Variation des énergies de transition trous lourds vers bande de conduction dans les puits InAsSb/InP, InAsSb/GaAs en fonction Lz pour une concentration de Sb égale 0.08	51
<i>Figure 3.11.c.</i> Variation des énergies de transition trous lourds vers bande de conduction dans les puits InAsSb/InP, InAsSb/GaAs en fonction Lz pour une concentration de Sb égale 0.10.....	52
<i>Figure 3.12.a.</i> Variation des énergies de transition trous lourds vers bande de conduction dans les puits InAsSb /InP, InAsSb /GaAs en fonction Lz pour une concentration de Sb égale 0.05.....	52

Figure 3.12.b. Variation des énergies de transition trous lourds vers bande de conduction dans les puits InAsSb/InP, InAsSb/GaAs en fonction Lz pour une concentration de Sb égale 0.08.....	53
Figure 3.12.c. Variation des énergies de transition trous lourds vers bande de conduction dans les puits InAsSb/InP, InAsSb/GaAs en fonction Lz pour une concentration de Sb égale 0.10.....	53
Figure 3.13.a. Variation la longueur d'onde du aux transitions trous lourds vers bande de conduction dans les puits InAsSb/InP, InAsSb/GaAs en fonction Lz avec x= 0.05.....	54
Figure 3.13.b. Variation la longueur d'onde du aux transitions trous lourds vers bande de conduction dans les puits InAsSb/InP, InAsSb/GaAs en fonction Lz avec x= 0.08.....	54
Figure 3.13.c. Variation la longueur d'onde du aux transitions trous lourds vers bande de conduction dans les puits InAsSb/InP, InAsSb/GaAs en fonction Lz avec x= 0.10.....	55
Figure 3.14.a. Variation la longueur d'onde du aux transitions trous légers vers bande de conduction dans les puits InAsSb/InP, InAsSb/GaAs en fonction Lz avec x= 0.05.....	55
Figure 3.14.b. Variation la longueur d'onde du aux transitions trous légers vers bande de conduction dans les puits InAsSb/InP, InAsSb/GaAs en fonction Lz avec x= 0.08.....	56
Figure 3.14.c. Variation la longueur d'onde du aux transitions trous légers vers bande de conduction dans les puits InAsSb/InP, InAsSb/GaAs en fonction Lz avec x= 0.08.....	56
Figure 3.15. Variation du gain optique en fonction de la longueur d'onde pour InAsSb/InP et InAsSb/GaAs avec plusieurs fractions de l'antimoine.....	57
Figure 3.16. Variation du gain optique en fonction de la longueur d'onde pour InAsSb/InP et InAsSb/GaAs avec plusieurs densités d'injection.....	58
Figure 3.17. Variation du gain optique en fonction de la longueur d'onde pour InAsSb/InP et InAsSb/GaAs avec plusieurs largeurs de puits.....	59

Chapitre 1 :

<i>Tableau 1.1</i> : Les matériaux III-V dans le tableau périodique.....	10
<i>Tableau 1.2</i> : Comparaison entre les matériaux III-V et le silicium.....	14
<i>Tableau 1.3</i> : type d'énergie de quelle que matériaux binaire.....	18
<i>Tableau 2.1</i> : les Paramètres de maille et coefficients élastiques des binaires InAs et InSb ...	24
<i>Tableau 2.2</i> : les Propriétés du InAs, InSb, GaAs et de l'InP a température ambiante.....	31

Introduction générale

Auparavant, l'homme a essayé de montrer l'existence des atomes, aujourd'hui il peut même les manipuler un par un, de les assembler en fonction de ses besoins afin de créer des matériaux nouveaux aux propriétés excellentes. Et ce progrès est du aux nouveaux questionnements fondamentaux qui se posent.

La connaissance et la maîtrise des phénomènes microscopiques (diffusion, arrangement des atomes, recristallisation etc.) est obligatoire pour élaborer des matériaux aux propriétés et aux performances voulues vue que la science matériaux est basée sur la relation entre les propriétés, les performances et la structure du matériau.

Avec le Silicium on peut réaliser des composants tels que les transistors, diodes... Mais en électronique rapide et l'optoélectronique ses propriétés sont insuffisantes (mobilités des porteurs relativement petites et transitions électroniques indirectes au seuil d'absorption optique). Dans telles applications, les composés semi-conducteurs III-V sont préférables. Ils sont dotés d'une forte mobilité électronique et une bande interdite directe permettant l'émission de lumière.

Le laser à semi-conducteurs à beaucoup d'avantages ce que lui a permit d'avoir une très grande place dans la télécommunication, le domaine industriel et militaire, et cela depuis leurs inventions dans les années 1960. Ils sont caractérisés par une utilisation facile, un fort rendement énergétique et un coût de production faible.

Dans ce travail, nous allons étudier l'optimisation de laser à semi-conducteur émettant dans la gamme des longueurs d'onde des télécommunication par fibre optique 0.85, 1.33 et 1.55 μm [2,3]. Ce manuscrit se décompose en trois parties :

- ✓ Le premier chapitre se compose de deux parties : les différents paramètres physique et optique comme le gap et la mobilité, ensuite les avantages et le choix des matériaux III-V.
- ✓ Le deuxième chapitre est consacré aux notions fondamentales, rappels théoriques sur les puits quantiques (plus particulièrement les puits quantiques sous contraintes), ainsi que la méthode de calcul de gain.
- ✓ Le dernier chapitre nous allons présenter et l'interpréter les résultats obtenus par simulation des deux structures à puits quantique InAsSb/GaAs et InAsSb/InP pour déterminer les concentrations optimales de l'antimoniure et le substrat qui résultent des longueurs d'onde d'émission exploitables dans les fibres optique 0.85, 1.33 et 1.55 μm .

Chapitre 1 Etat de l'art des semi-conducteurs III-V

1.1 Introduction

Les matériaux semi-conducteurs font la révolution technologique ces dernières années dans le domaine d'électronique. Les matériaux semi-conducteurs interviennent principalement dans la microélectronique (le silicium le plus utilisé commercialement), applications médicales, spatiales et télécommunication, ainsi les équipements électriques et optiques.

Ces matériaux sont conçus à partir d'alliages contenant des éléments du groupe :

- Les matériaux II – VI
- Les matériaux III – V avec les 4 grandes familles : Antimoniures, Arséniures, Phosphures et les Nitrures.

L'utilisation des matériaux composés apporte de nombreux avantages en termes de propriétés des matériaux. En effet, le but de leur fabrication est de profiter des bonnes propriétés de chaque matériau afin d'en former un qui sera mieux adapté à certaines applications.

Dans ce chapitre nous allons présenter les propriétés physiques et électroniques des matériaux semi-conducteurs III-V, ainsi que leurs différents types composés qui seront destinés à une utilisation en optoélectronique, en particulier lasers à puits quantiques.

1.2 La notion des semi-conducteurs

Les semi-conducteurs ont acquis une importance considérable dans notre société. On les trouve dans tous les composants électroniques et optoélectroniques : les dispositifs informatiques, télécommunications, télévision et radio, électroménagers, etc....

Les semi-conducteurs sont des matériaux caractérisés par des propriétés physiques et chimiques bien déterminées. Ces propriétés obéissent à des lois typiques si on les compare avec les propriétés de l'ensemble des corps solide. [1]

Les semi-conducteurs III-V sont constitués par l'association d'un élément de la colonne III avec un élément de la colonne V de la classification périodique de Mendeleïev (tableau 1.1). GaAs, InP et InAsSb en sont des exemples.

I	II	III	IV	V	VI	VII
Li ³	Be ⁴	B⁵	C ⁶	N⁷	O ⁸	F ⁹
Na ¹¹	Mg ¹²	Al¹³	Si ¹⁴	<u>P¹⁵</u>	S ¹⁶	Cl ¹⁷
Cu ²⁹	Zn ³⁰	<u>Ga³¹</u>	Ge ³²	<u>As³³</u>	Se ³⁴	Br ³⁵
Ag ⁴⁷	Cd ⁴⁸	<u>In⁴⁹</u>	Sn ⁵⁰	<u>Sb⁵¹</u>	Te ⁵²	I ⁵³
Au ⁷⁹	Hg ⁸⁰	Ti⁸¹	Pb ⁸²	Bi⁸³	Po ⁸⁴	At ⁸⁵

Tableau 1.1. Les matériaux III-V dans le tableau périodique [1]

1.3 L'intérêt des Semi-conducteurs de type III-V

Les semi-conducteurs III-V sont rapidement apparus comme les matériaux de choix pour des applications spécialisées. Notamment, GaAs et InP se sont distingués par leur grande mobilité électronique qui permet d'obtenir des dispositifs à haute rapidité de commutation en électronique, et aussi leur bande interdite directe qui favorisent les transitions optiques. Ces propriétés, leurs permettent d'être des matériaux prometteurs surtout dans le domaine des télécommunications tels que les lasers.

En électronique rapide et en optoélectronique, les composés semi-conducteurs III-V sont préférables que d'autres (les propriétés du silicium par exemple sont insuffisantes : mobilités des porteurs relativement petites et transition électroniques indirectes au seuil d'absorption optique) [2].

1.4 Comparaison entre les matériaux III-V et le silicium

	Matériau III-V	Silicium
Vitesse de saturation des électrons	Plus grande	Plus petite
Une mobilité	Plus grande	Plus petite
Bruit en hautes fréquences	Moins de bruit	Plus de bruit
Gap	direct	indirect

Tableau 1.2. Comparaison entre les matériaux III-V et le silicium

1.5 Les types composés des semi-conducteurs III-V

L'alliage est une combinaison homogène de deux ou plusieurs matériaux. L'alliage était uniquement réservé aux métaux, pourtant cette définition s'est très vite associée à d'autres matériaux, notamment la céramique et les polymères. Après le développement des techniques modernes de la croissance cristalline et la purification des semi-conducteurs, il a été réalisé plusieurs alliages binaires, ternaires et quaternaires.

1.5.1 Les composés semi-conducteurs binaires

Les semi-conducteurs binaires (III-V) sont constitués par l'association des éléments de la colonne III et des éléments de la colonne V de la classification périodique, dont la somme d'électrons des deux matériaux sur la bande de valence est égale à huit, par exemple : les composé à base aluminium (AlP, AlAs, AlSb), ou les composés à base gallium (GaAs, GaSb), d'indium (InN, InP, InAs, InSb). Les semi-conducteurs binaires comme GaAs représentent actuellement une classe intéressantes des matériaux dans le domaine optoélectronique et l'électronique.

1.5.2 Les composés semi-conducteurs ternaire et quaternaire

On peut renforcer les semi-conducteurs de types III-V on réalisant des alliages par substitution partielle avec deux éléments de la même colonne. On peut obtenir des alliages ternaires de type InAsSb ou quaternaire comme InGaPSb.

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.

1.6 Propriétés physiques des semi-conducteurs III-V

1.6.1 Propriétés structurales

Les semi-conducteurs III-V sont composés à partir des éléments des colonnes III et V du tableau périodique de Mendeleïev. Ils sont obtenus, soit par tirage de monocristaux massifs, soit par croissance épitaxiale de couches minces et cristallisent dans la structure Zinc Blende (ZB) ou Würtzite (WZ).

1.6.1.1 La structure zinc-blende et würtzite

Un grand nombre de solides se cristallisent dans une structure périodique. La majorité des semi-conducteurs utilisés dans les applications électroniques (Si, Ge) ou optoélectroniques (composés III-V comme le GaAs) sont basés sur la même structure cristallographique qui ressemble à celle du diamant (C) appelée Zinc blende ou sphalérite comme illustré dans la figure suivante [3].

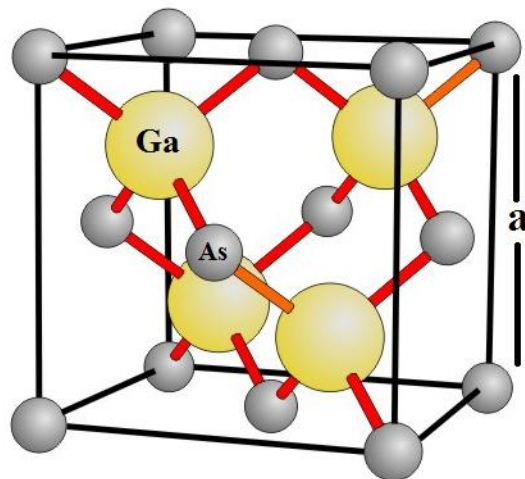


Figure 1.1. Mailles cristallologiques de Zinc Blende (GaAs) [4]

Les atomes du réseau sont à liaisons tétraédriques qui se décomposent en deux sous réseaux cubiques faces centrées (CFC) décalés l'un par rapport l'autre par un quart ($1/4$) de la grande diagonale du cube d'une valeur de $(a/4, a/4, a/4)$, a étant le paramètre cristallin (ou constante du réseau), qui représente la longueur de l'arête du cube [5].

La structure wurtzite présentée sur la figure 1.2 est constituée de deux réseaux hexagonaux, les atomes forment ces deux sous-réseaux hexagonaux compacts l'un pour les atomes de type métallique; le deuxième, pour les atomes de type non métallique qui sera décalée sur l'axe polaire (c). Les paramètres utilisés pour décrire la structure sont le côté (a) de l'hexagone dans le plan (0001), et c correspondant à la hauteur de la maille selon l'axe [0001] [5].

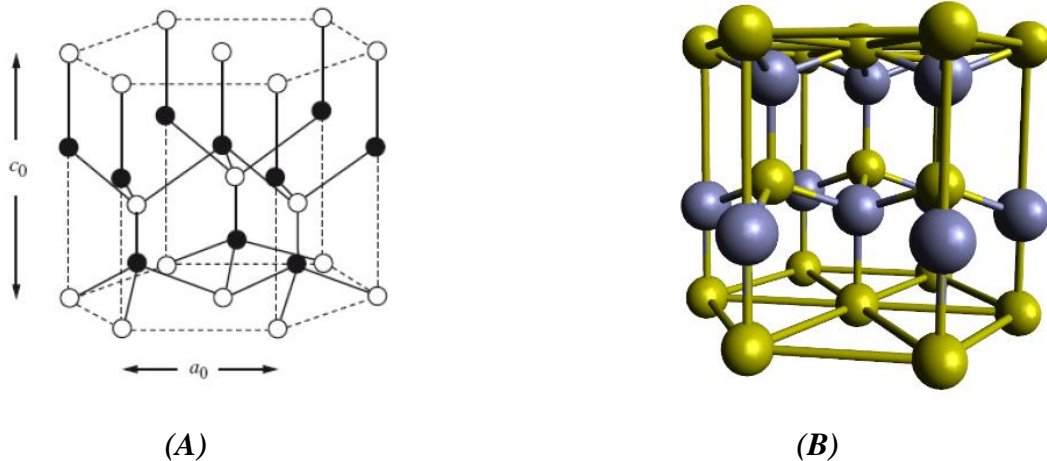


Figure 1.2. (A) Structure de wurtzite avec les paramètres de maille c_0 et a_0 [6]
(B) Représentation 3D de la structure wurtzite [7]

1.6.2 Propriétés électroniques

1.6.2.1 Structure de bande d'énergie électronique

Les bandes d'énergie donnent les états d'énergie possibles pour les électrons en fonction de leur vecteur d'onde. On les représente donc dans l'espace réciproque et pour simplifier, dans les directions de plus hautes symétries de la première zone de Brillouin. Elles se décomposent en bandes de valence et bandes de conduction (Figure 1.3). Ce sont la bande de valence la plus basse, la bande de conduction la plus haute, et la bande interdite qui les sépare qui déterminent principalement les propriétés de transport du semi-conducteur [8].

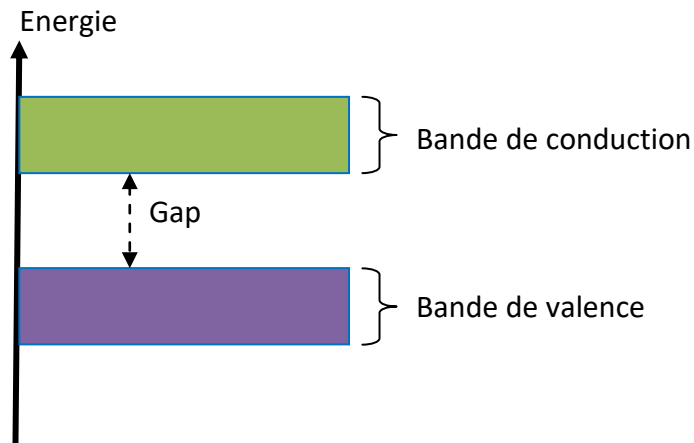


Figure 1.3. Représentation schématique des bandes d'énergie.

1.6.2.2 Gap indirect – Gap direct

Il existe 3 types de matériaux, ils contiennent une bande de valence (bande basse en énergie) et une bande de conduction (bande haute d'énergie). La différence entre ces types de matériaux est la distance qui sépare ces deux bandes d'énergie, elle est appelée la bande interdite (gap) comme le montre la figure 1.4. [9]

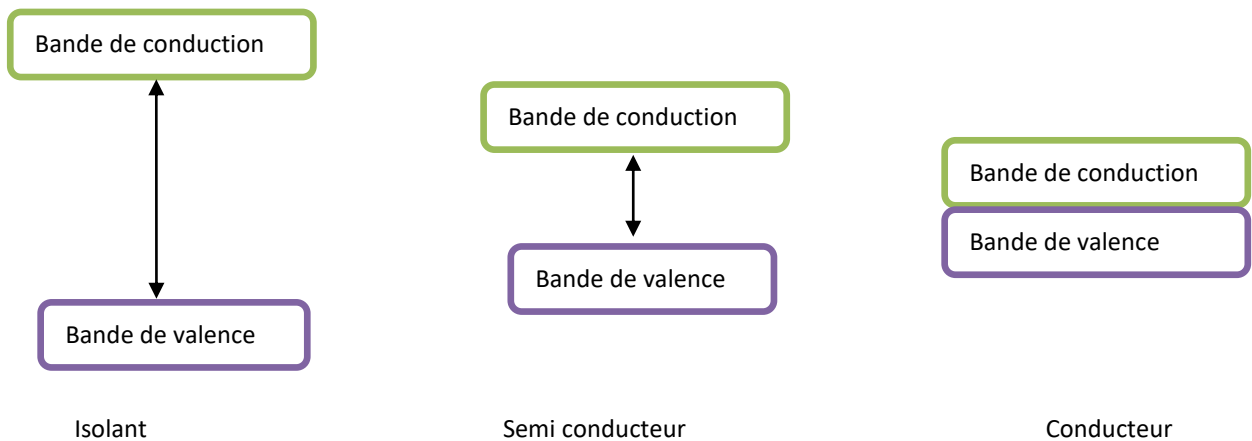


Figure 1.4 : Bandes d'énergies pour les matériaux Isolant, Semi-conducteur et Conducteur.

Les structures de bande représentées dans la figure (1.5) font apparaître deux cas fondamentaux de semi-conducteur.

Pour les semi-conducteurs à gap indirect on prend la valeur minimale de la bande de conduction et la valeur maximale de la bande de valence qui se trouve sur l'espace des k. par

contre pour les semi-conducteurs à gap direct on prend les extrema qui se trouvent sur l'espace k (pour $k=0$). [10]

Dans les gaps indirects, la bande de conduction correspond à des électrons de grande masse effective, cela veut dire qu'il y a une faible mobilité. Par contre dans les gaps directs, la valeur minimale de la bande de conduction correspond à des électrons de faible masse effective, donc très mobiles. [10]

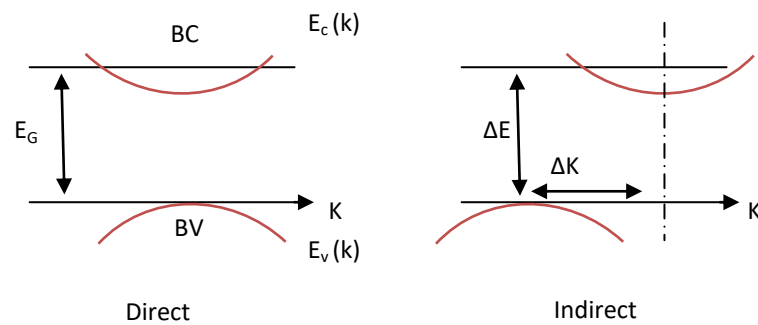


Figure 1.5 : Structure de bande d'énergie du : A-gap indirect et B-gap direct

Dans les semi-conducteurs à gap directe, le minimum central de la bande de conduction correspond à des électrons de faible masse effective, donc très mobiles. Par contre, ceux qui ont un gap indirect, leur bande de conduction correspond à des électrons de grande masse effective, donc ayant une faible mobilité. Exemple : le silicium a un gap indirect de 1,11 eV. Le germanium, moins utilisé, a également un gap indirect, de 0,66 eV. Ces matériaux étant utilisés depuis longtemps, ils ont défini une valeur de référence pour le gap, de l'ordre de 1 eV.

On distingue alors les semi-conducteurs petits gaps qui ont une bande interdite très inférieure à 1 eV et les semi-conducteurs grands gaps qui ont une bande interdite très supérieure.

Tableau 1.3 représente le type d'énergie de quelle que matériaux binaire.

Semi-conducteur	Type d'énergie de gap
InP	Direct
GaAs	Direct
AlP	Indirect
BP	Indirect

Tableau 1.3. Le type d'énergie de quelle que matériaux binaire

Enfin, les semi-conducteurs III-V sont presque tous à gap direct et sont les champions des dispositifs optoélectroniques, L'arséniure de gallium GaAs et Le phosphure d'indium InP sont les représentants les plus connus caractériser par leurs gap respectivement 1.42 eV et 1.4236 eV sont les représentants les plus connus. Leur grande force réside dans le nombre quasi illimité d'alliages possibles entre Ga, As, Al, In et P. Cette particularité essentielle a donné aux semi-conducteurs III-V la première place pour l'optoélectronique et notamment pour les lasers semi-conducteurs. Cependant, le gap reste toujours inférieur à 2 eV environ et on ne peut pas les considérer comme des matériaux grand gap. En particulier, le domaine visible n'est pas couvert par ces semi-conducteurs III-V classiques.

1.6.3 Effets des perturbations extérieures sur les matériaux III-V

En raison de l'importance des III-V pour la conception des dispositifs optoélectroniques, on s'est intéressé aux effets des perturbations extérieures (température, pression) sur leurs paramètres caractéristiques (constante de réseau, gap d'énergie,..). Plusieurs modèles ont été proposés tels celui de VARSHNI, pour étudier l'effet de température et l'équation de Murnaghan pour mettre en évidence l'effet de pression sur le gap de ces matériaux [11].

1.6.3.1 Effet de la température sur les III-V

Le paramètre de réseau des III-V est influencé par l'effet de la température selon l'équation de Varshni [11] :

$$E_g(T) = E_g(0) - \frac{\alpha \times T^2}{T + \beta} \quad (1-1)$$

où :

- $E_g(0)$: est le gap de la bande d'énergie à 0 K.
- α : Est en électronvolts par degré Kelvin.
- β : Est proportionnel à la température de Debye (en kelvins).

1.6.3.2 L'effet de la pression

Sous l'effet de pression, les écarts d'énergie entre les bandes de valence et de conduction sont considérables, et les gaps d'énergie présentent, en fonction de la pression, une variation quadratique de la forme [11] :

$$E(P) = E_g(0) + \frac{dE_g}{dP} \cdot P + \frac{d^2E_g}{dP^2} \cdot P^2 \quad (1-2)$$

où :

- $E_g(P)$ et $E_g(0)$ sont les gaps d'énergie sous pression normale et sous pression nulle.
- dE_g/dP le coefficient de pression linéaire.
- d^2E_g/dP^2 le coefficient de pression quadratique.

1.7 Les avantages des semi-conducteurs III-V

Les principaux avantages des semi-conducteurs III-V sont les suivants:

1. Propriété semi-isolant permet la fabrication des circuits intégrés hyperfréquences.
2. Ils résistent aux radiations.
3. Ils ont une capacité de travailler à des températures plus importantes que celle du silicium, ce qui est important pour les applications militaires.
4. Performances vitesse et consommation nettement supérieure à celles des calculateurs utilisant des circuits en silicium (applications numériques).
5. Très grand domaine de fréquences couvert puisqu'il s'étend de 1Ghz à plus de 100Ghz.

La filière des composés III-V est la seule filière hyperfréquence dont la technologie soit actuellement mature pour des réalisations au niveau industriel. Cette maturité et son développement ont donc permis d'aboutir à des coûts de production abordables, qui restent cependant largement supérieurs à ceux de la filière silicium (les composants à base de silicium sont actuellement limités à une fréquence inférieure à quelque Giga Hertz).

Les composés III-V sont donc parfaitement appropriés à la réalisation de circuits hyperfréquences [12].

1.8 Conclusion

Dans ce chapitre on a pu définir les matériaux III-V et présenter leurs propriétés structurelles physiques et électriques. Ces propriétés varient en fonction des alliages et la concentration de leurs constituants, ce qui rend ses composants optoélectroniques plus performants.

On a défini les effets de perturbation extérieures tel que la température et la pression sur les matériaux III-V. A la fin de ce chapitre on a cité les principaux avantages des semi-conducteurs III-V.

Références bibliographiques

- [1] Francis Lévy, " *physique et technologie des semiconducteurs* ", édition première, 1995, Lausanne.
- [1] M. Guillaume Levaufre , thèse de doctorat. *Circuits photonique intègres incluant des lasers hybrides III-V sur silicium pour applications en Télécommunication très haut débit*. L'université Paris-Saclay, (2016).
- [2] Foundation, w. (2010, octobre 12). " Fichier : Mendeleïev.jpg". Consulté le mai 15,2011, sur [www.wikipedia.org/wiki/fichier : Mendeleïev.jpg](http://www.wikipedia.org/wiki/fichier:Mendeleïev.jpg).
- [3] Tarik Bouragba. *Propriétés optiques de puits quantiques GaInAsN/GaAs. Physique des Hautes Energies- Expérience [hep-ex]*. Université Blaise Pascal - Clermont-Ferrand II, (2006) Français. <NNT : 2006CLF21648>. <tel-00688818>.
- [4] J. L. Birman, *Simplified lcao method for zinblende, wurtzite, and mixed crystal structures*, Phys. Rev., vol. 115, pp. 1493–1505, (Sep 1959).
- [5] Francis levy. *Traité des matériaux (18).Physique et technologie des semiconducteurs*. Presses polytechniques et universitaires Romandes(1995).
- [6] solidstates, openchemistry.in. The Wurtzite structure <http://openchemistry.in/solid/solidstateS.html>.
- [7] J. L. Birman, *Simplified lcao method for zinblende, wurtzite, and mixed crystal structures*, Phys. Rev., vol. 115, pp. 1493–1505, (Sep 1959).
- [8] J. L. Birman, *Simplified lcao method for zinblende, wurtzite, and mixed crystal structures*, Phys. Rev., vol. 115, pp. 1493–1505, (Sep 1959).

- [9] Henry Mathieu, *physique des semiconducteurs et des composants électroniques*, Dunod, ISBN 2 10 005654 9, paris, (2001).
- [10] Ali Lanacer, *Etude des propriétés optiques de puits quantiques contraints ultra-minces d'InAs/InP*. Thèse présentée à la Faculté des études supérieures en vue de l'obtention du grade de Philosophiæ Doctor (Ph.D.) en Physique. Université de Montréal, (2006).
- [11] H.Abid, thèse de doctorat 1997, *Contribution à l'étude des propriétés électroniques et optiques*, des alliages semiconducteurs de type III-V.
- [12] J. W. Matthews ET A. E. Blakeslee. Defects *in epitaxial multilayers: I. Misfit dislocations*, *J. Cryst. Growth*, vol. 27, p. 118-125, déc. 1974.

Chapitre 2 Puits quantique à base de InAsSb /GaAs et InAsSb /InP

2.1 Introduction

Le laser a fait son apparition dans les années 1960, dans un modeste laboratoire Californie. A l'époque, son inventeur, Theodore Maiman, a d'abord vu son invention être qualifiée de banale par la revue scientifique à qui il l'avait soumise. Aujourd'hui le laser est devenu incontournable dans l'industrie, la médecine, dans la recherche, mais aussi dans notre vie quotidienne.

La connaissance des règles fondamentales des lasers est essentielle et permette l'explication des résultats est tenus de la modélisation.

Donc l'objet de cette section est de rappeler la physique du laser et de donner quelques brèves définitions des différentes structures lasers à puits quantiques qui seront par la suite exploitées dans la partie calcul.

2.2 Laser a puits quantique

Le "laser" (*Light Amplification by Stimulated Emission of Radiation*) qui signifie amplification de lumière par émission stimulée, est constitué de 3 éléments : un milieu amplificateur, une cavité résonante et une source de pompage. On utilisant les techniques de croissance on peut fabriqué des nanostructures à base de matériaux semi-conducteurs

qui permettent de réaliser des empilements de puits quantiques en combinant plusieurs matériaux cristallins.

Dans un laser à semi-conducteur, la lumière induit ce qu'on appelle la recombinaison électron-trou. L'électron se désexcite de la bande de conduction vers la bande de valence et émet un photon de caractéristique identique au photon inducteur. Pour accroître l'intensité de sortie de ces lasers, il faut augmenter la densité de porteurs, c'est-à-dire d'électron et de trous, ce qui conduit à l'inversion de population des lasers, elle est réalisée dans une zone du semi-conducteur appelée zone active, par injection d'un courant qui est équivalent au pompage des autres lasers.

La physique des hétéro-structures à base de semi-conducteurs s'est développée et permet de réaliser, par épitaxie sous jets moléculaires, des empilements de couches minces (d'épaisseur typiquement inférieure à 30 nm) de deux semi-conducteurs de bandes interdites différentes, ces deux semi-conducteurs forment le puits et la barrière (Figure 2.1), le matériau à faible gap et à plus de petite affinité électronique forme le puits quantique et le matériau à plus grande valeur de l'affinité électronique forme la barrière [1].

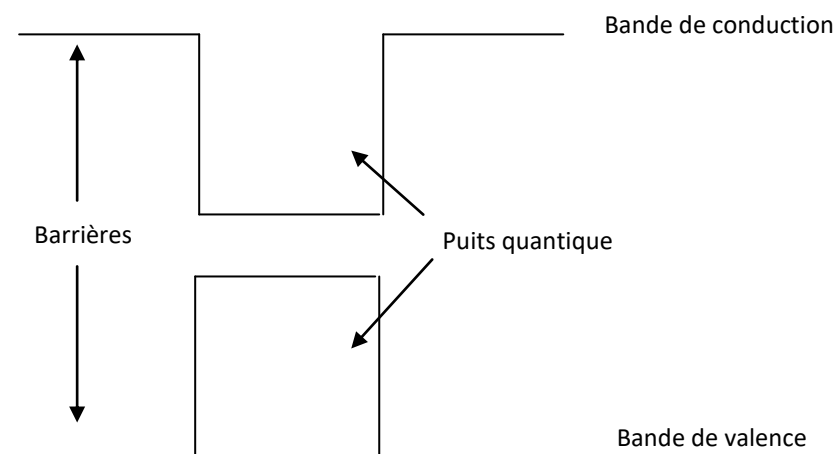


Figure 2.1. Laser à puits quantique

2.3. Quelques applications des propriétés des semi-conducteurs

La venue des semi-conducteurs a largement contribué à l'évolution du développement technologique. L'extraordinaire avancé des semi-conducteurs a donné lieu à des systèmes électroniques de plus en plus complexes et variés, ils sont de ce fait utilisés dans un large éventail d'appareillages.

L'étude, les comportements microscopiques et l'utilisation à l'échelle macroscopique des semi-conducteurs à donné naissance à des dispositifs électroniques avec des performances compétitives.

Selon la propriété utilisée, on peut citer quelques dispositifs qui ont été déjà conçus :

Les applications en électronique

En utilisant les semiconducteurs nous pouvons réaliser : [3]

- Des diodes, en tant qu'interrupteurs, régulateurs,
- Des transistors, en tant qu'amplificateurs, switchs, suiveurs,
- Des varistances en tant que résistance réglable.

Les applications optoélectroniques

Les matériaux semi-conducteurs interviennent dans la construction de détecteurs de rayonnement lumineux et de sources de radiation spontanée ou stimulée, la figure ci-dessous montre les trois phénomènes et leurs domaines d'applications. [4]

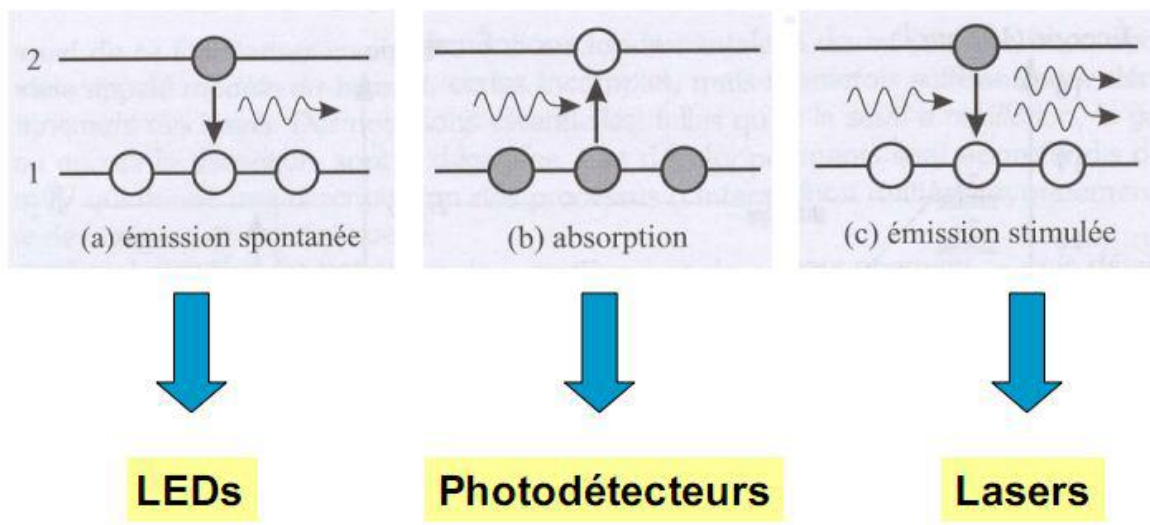


Figure 2.2 : Les propriétés optiques des semi-conducteurs et leurs applications.

Dans ces applications, on exploite la réaction des semi-conducteurs à une excitation lumineuse. Les électrons du matériau sont mis en jeu soit par perte soit par gain de photon. Dans ce cas là, on peut citer plusieurs dispositifs selon le phénomène utilisé dans le matériau.

Détecteurs de radiation électromagnétique

- Détecteurs d'ultra violet

- Les détecteurs photovoltaïques

Les émetteurs de radiation électromagnétique

- Les diodes électroluminescentes
- Les lasers

2.4. Emissions spontanée et stimulée

Dans un système à deux niveaux, un photon ayant une énergie égale à l'énergie E séparant les niveaux peut être absorbé pour conduire l'électron du niveau fondamental à l'état excité. Si aucun photon n'arrive avec cette énergie pendant que l'électron se trouve dans cet état, l'électron relaxe son excès d'énergie E spontanément au bout d'un certain temps, en émettant un photon de phase et de direction aléatoires. C'est le phénomène d'émission spontanée. Par contre quand l'électron se trouve dans un état excité et qu'un photon d'énergie E arrive, une autre possibilité de recombinaison radiative est possible: L'émission stimulée. (Voir la figure 2.3) [5].

L'émission stimulée correspond à l'émission d'un photon d'énergie E induite par un photon de la même énergie. Les deux photons sont parfaitement cohérents, c'est à dire que le photon émis par émission stimulée a la même fréquence, direction et phase que le photon inducteur. Tout va en fait dépendre de la densité d'excitation. Si l'on excite peu le matériau, le nombre de porteurs dans les états excités est faible et la probabilité d'absorption est alors plus grande que celle de l'émission stimulée. Cependant lorsque l'on augmente la densité d'excitation, on augmente aussi le nombre de porteurs dans des états excités et à partir d'un certain seuil, la probabilité de recombinaison par émission stimulée est plus grande que celle de l'absorption. On dit qu'on est en régime d'inversion de population et qu'on a du gain (notion que nous allons clairement exposer).

Dans un semiconducteur massif, ce sont les bandes de conduction et de valence qui vont jouer le rôle d'état fondamental et d'état excité. Ces deux bandes sont séparées par une énergie appelée énergie de bande interdite E_g .

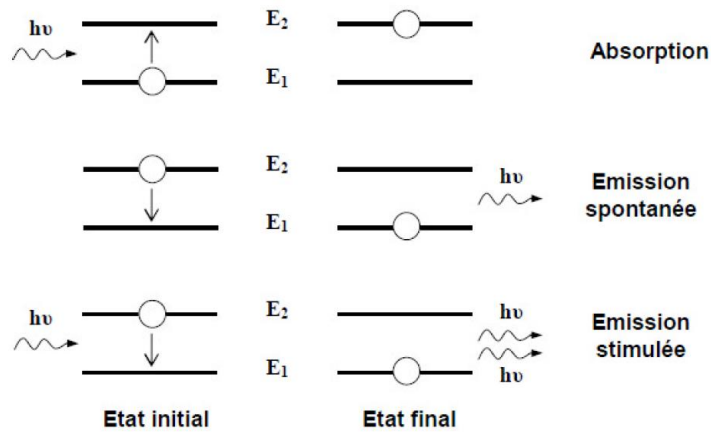


Figure 2.3 : Mécanisme d'interaction entre un atome et un photon.

2.5 Définition d'un puits quantique

Un puits quantique est constitué par une fine couche (nm) d'un matériau semiconducteur de faible gap entourée de matériaux de plus grand gap. (Voir la figure 2.4). On peut réaliser un puits de potentiel artificiel de taille quantique dans lequel les porteurs libres du semi-conducteur (électrons et trous) vont se retrouver confinés sur des niveaux d'énergie discrets. A chacune des énergies liées permises à l'intérieur du puits est associée une fonction d'onde dont le carré représente la densité de probabilité de présence sur le niveau d'énergie quantifiée. L'utilisation de puits quantiques au sein de la zone active engendre un confinement des électrons et des trous dans un plus faible volume, ce qui pour une injection donnée, permet d'augmenter la densité de porteurs et donc d'atteindre l'inversion de population plus facilement [6].

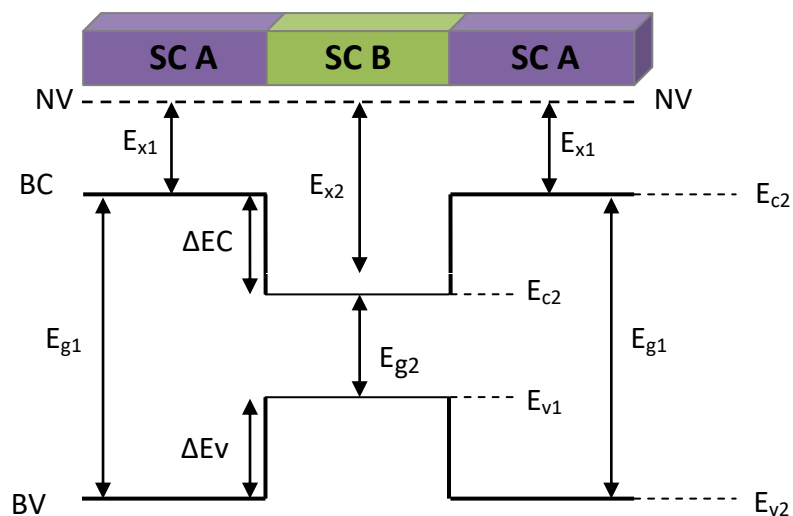


Figure 2.4. Présentation d'un puits quantique [4]

où :

- E_{g1} est le gap du matériau 1 qui forme la barrière.
- E_{g2} est le gap du matériau 2 qui forme le puits quantique.
- E_{x1} est l'affinité électronique du matériau 1.
- E_{x2} est l'affinité électronique du matériau 2.

Selon la nature de la discontinuité de bandes interdites à l'interface puits-barrière, on distingue trois types de puits quantiques.

2.5.1 Puits quantique type I

Des puits quantiques de type-I où les électrons et les trous sont confinés dans le même matériau constituant le puits. L'énergie du photon dépend des énergies de confinement des porteurs et du gap du matériau puits. (Voir la Figure 2.5) [6].

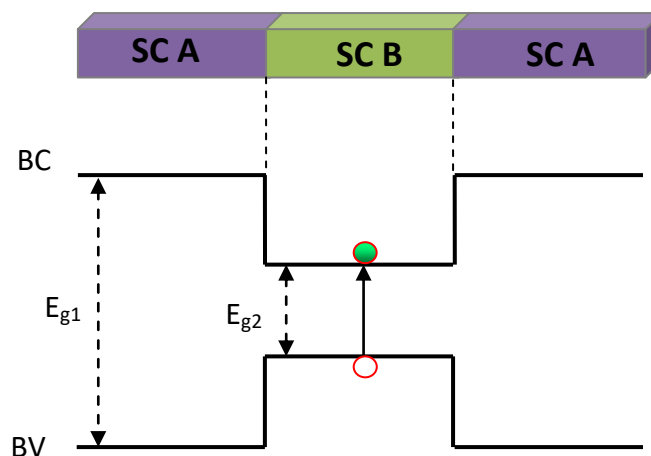


Figure 2.5 : Profil de puits quantique de type I [7].

2.5.2 Puits quantiques de type II

Des puits quantiques de type-II où les porteurs sont confinés dans deux matériaux adjacents. Dans ce cas, l'énergie du photon est fonction des énergies de confinement des porteurs mais aussi des gaps des deux matériaux formant l'hétérostructure, Voir la Figure 2.6. [6].

- Le matériau semi-conducteur 1 joue le rôle de puits quantique pour les électrons et de barrière de potentiel pour les trous

- Le matériau semi-conducteur 2 joue le rôle de puits quantique pour les trous et de barrière de -potentiel pour les électrons.

Les transitions optiques dans ce type de puits sont indirectes. C'est pour cette raison que les puits quantiques de type 2 sont évités pour fabriquer des émetteurs de lumière LED et surtout LASER.

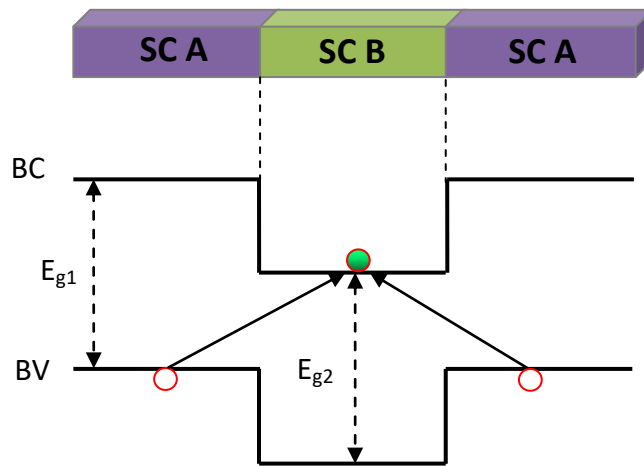


Figure 2.6 : Profil de puits quantique de type II [7].

2.5.3 Puits quantiques de type III

La configuration dite de type-III qui est un cas particulier du type-II dans lequel le bas de la bande de conduction se trouve en dessous du haut de la bande de valence. Cette situation appelé aussi configuration semi-métallique, Elle offre une grande souplesse dans le choix de la longueur d'onde d'émission puisque l'énergie du photon émis n'est alors fonction que des énergies de confinement des électrons et des trous, donc des épaisseurs des couches, Voir la figure 2.7 [6].

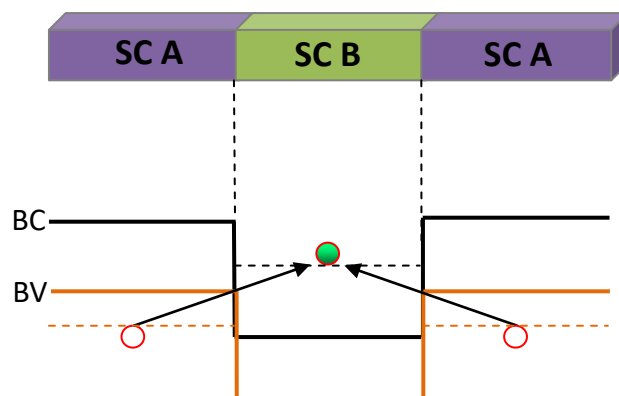


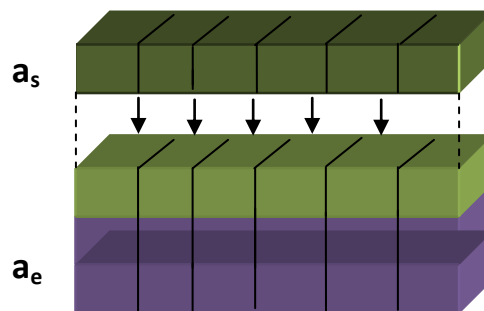
Figure 2.7 : Profil de puits quantique de type III [7].

2.6. Notion de couche contrainte

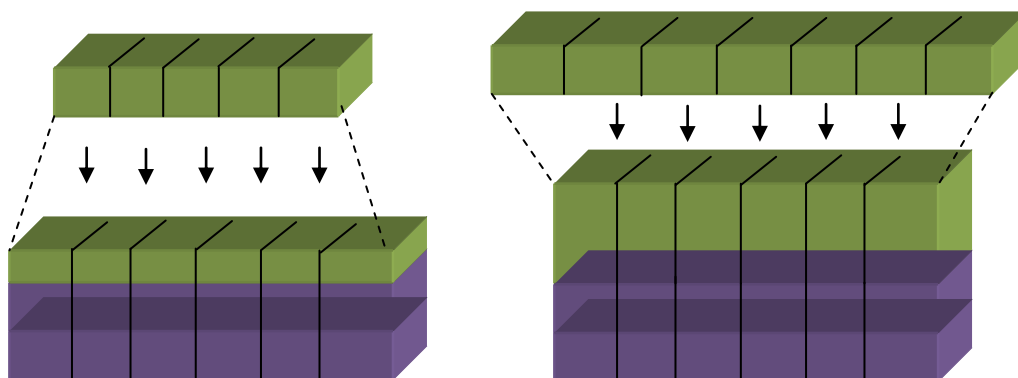
2.6.1 La contrainte

Lorsqu'on fait croître un semiconducteur sur un autre et que les deux matériaux constituant le substrat et la couche active ont la même structure cristalline et des paramètres de maille différents, la maille du matériau épitaxié se déforme de manière élastique dans les deux directions parallèle et perpendiculaire à la surface de croissance, et selon que le paramètre de la couche épitaxiée est plus petit ou plus grand que celui du substrat, la déformation est soit : [8]

- Un allongement "couches en tension" : si le paramètre de la couche épitaxie est plus petit que celui du substrat ($a_e < a_s$). Voir Figure
- Un rétrécissement "couche en compression" : si le paramètre de la couche épitaxie est plus grand que celui du substrat ($a_e > a_s$). Voir Figure 2.8.



Couche en accorde de maille



Couche en tension $a_e < a_s$

Couche en compression $a_e > a_s$

Figure 2.8. Différentes configurations de croissance en accord ou en Désaccord de maille sur un substrat épais [9].

Après le dépôt, la couche épitaxiale se déforme pour rattraper le désaccord de maille,

Soit $\vec{X} = \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}$, la position d'un atome dans le semi-conducteur A avant épitaxie ; sa nouvelle

position est $\vec{X}' = \bar{\epsilon}\vec{X}$ où $\bar{\epsilon} = \begin{pmatrix} \epsilon_{xx} & 0 & 0 \\ 0 & \epsilon_{yy} & 0 \\ 0 & 0 & \epsilon_{zz} \end{pmatrix}$ tenseur de déformation de cristal dans le cas

d'une déformation biaxiale.

$$\epsilon_{//} = \epsilon_{xx}(x) = \epsilon_{yy} = \frac{a_s - a_e}{a_e} \quad (2-1)$$

De plus, la théorie de l'élasticité permet d'écrire la relation entre le tenseur d'élasticité \bar{C} , le tenseur de déformation $\bar{\epsilon}$ et le tenseurs de la contrainte $\bar{\sigma}$ [10].

$$\sigma_{ij} = \sum_{n,m} C_{ij, mn} \epsilon_{mn} \quad (2-2)$$

Et dans le cas d'un matériau linéairement isotopique :

$$\sigma_{zz} = C_{zz,xx} \epsilon_{xx} + C_{zz,yy} \epsilon_{yy} + C_{zz,zz} \epsilon_{zz} \quad (2-3)$$

Avec

$$C_{zz,xx} = C_{zz,yy} \text{ notés } C_{12} \text{ et } C_{zz,zz} \text{ noté } C_{11} \text{ car dans ce cas } C_{zz,zz} = C_{xx,xx}$$

On aura

$$\sigma_{zz} = 2C_{12} \epsilon_{xx} + C_{11} \epsilon_{zz} \quad (2-4)$$

Dans le cas où le matériau ne subissant aucune contrainte autre que la pression atmosphérique qui peut être négligée suivant l'axe Z ($\sigma_{ij} = 0$), ϵ_{zz} est donnée par

$$\epsilon_{zz} = -2 \frac{C_{12}}{C_{11}} \epsilon_{xx} \quad (2-5)$$

2.6.2 Epaisseur critique

L'épaisseur au-delà d'une certaine épaisseur les couches contraintes commencent à relaxer, et génèrent des dislocations qui se propagent du substrat vers l'interface de croissance cette épaisseur limite est appelée "épaisseur critique". Cette épaisseur critique dépend des propriétés mécaniques des matériaux (coefficients élastiques C_{ij}), ainsi que du degré de désaccord paramétrique ε entre le substrat et la couche épitaxiée [11].

Si l'épaisseur de la couche épitaxiée dépasse la valeur de l'épaisseur critique le matériau tend alors à reprendre son paramètre de maille et devient disloqué.

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

où :

- ε : Désaccord paramétrique.
- a_e : Paramètre de maille de la couche relaxée.

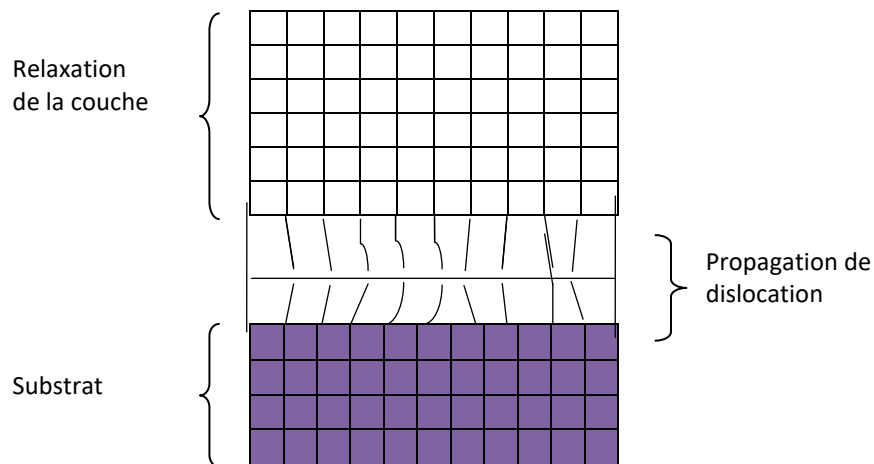


Figure 2.9 : Propagation de dislocation dans la couche épitaxiée épaisse [11].

Pour calculer l'épaisseur critique d'un système couche/substrat. On utilise le modèle de K. Koksal et B. Gonul [12] :

$$L_c = \frac{a_s}{k \cdot \sqrt{2} \cdot \pi \cdot \varepsilon} \times \frac{1 - (0.25 \cdot \gamma)}{(1 + \gamma)} \times \ln \left(\frac{l_c \cdot \sqrt{2}}{a_s} + 1 \right) \quad (2-6)$$

où :

a_s : est le paramètre de maille du substrat.

γ : est le coefficient de poisson donné par :

$$\gamma = \frac{C_{12}}{C_{11} + C_{12}} \quad (2-7)$$

où :

C_{ij} sont les coefficients élastiques.

K : est un coefficient qui prend les valeurs suivantes selon le type de la structure.

- Super réseaux : K= 1
- Puits quantique : K= 2
- Couche unique : k=4

Les Paramètres de maille et coefficients élastiques des binaires InAs et InSb.

Matériaux	InAs	InSb
Paramètre de maille a (Å)	6.0583	6.4794
C11 (GPa)	832.9	684.7
C12 (GPa)	452.6	373.5

Tableau 2.1. Les Paramètres de maille et coefficients élastiques des binaires InAs et InSb[13]

2.7. L'effet de la contrainte sur les bandes d'énergies

En absence de contrainte, les bandes de trous lourds et trous légers sont isotropes et dégénérées au centre de la zone de Brillouin, la bande des spin-splittée étant située à une énergie Δ_0 en dessous de ces deux bandes (figure 2.10.a). Le centre de gravité de la bande de valence d'énergie moyenne $E_{v\ moy}$ se trouve par conséquent à $\Delta_0/3$ en dessous du haut de la bande de valence en $k=0$ [14].

$$E_{v\ moy} = \frac{E_{hh} + E_{lh} + \Delta_0}{3} \quad (2-8)$$

- E_{hh} : L'énergie de la bande des trous lourds.
- E_{lh} : L'énergie de la bande des trous légers.
- Δ_0 : L'énergie de décalage des bandes des trous spin-splitte.

L'effet de la contrainte sur les bandes de valence et de conduction peut être décomposé en deux parties :

- La composante hydrostatique liée à la déformation selon l'axe de croissance oz, provoque un décalage du centre de gravité de la bande de valence ainsi que le centre de gravité de la bande de conduction.

- La contrainte de cisaillement, qui lève la dégénérescence des états énergétiques des

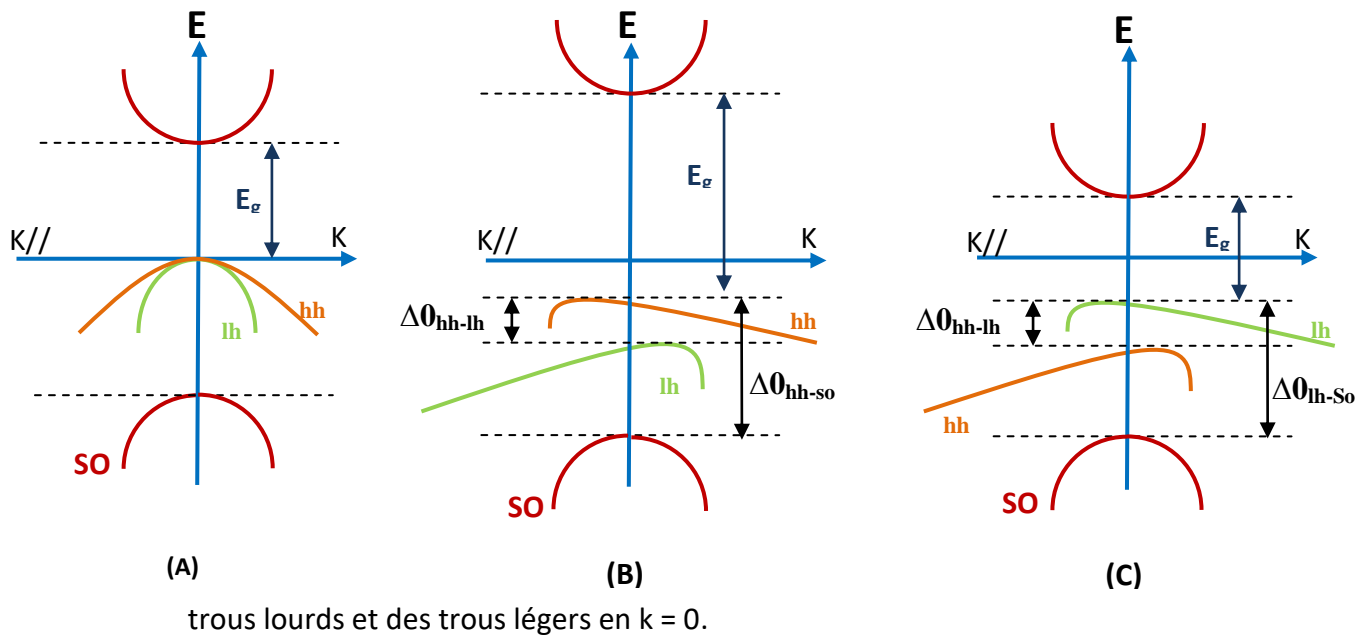


Figure 2.10. Structure de bande d'un semi-conducteur à gap directe [15].
 (A) non contraint (B) en compression (C) en tension

Pour une couche soumise à une contrainte bi-axiale de compression (figure 2.10.b), la composante hydrostatique augmente l'écart entre la bande de valence et la bande de conduction, la contrainte de cisaillement rend les bandes de valence fortement anisotropes : la bande de plus haute énergie devient lourde selon K_{\perp} et légère selon K_{\parallel} (bande de trous lourds HH). La bande d'énergie inférieure devient légère selon K_{\perp} et lourde selon K_{\parallel} (bande de trous légers LH).

Si la couche est soumise à une contrainte biaxiale de tension (figure 2.10.c) le gap moyen diminue et les bandes de valences sont inversées par rapport à celles d'une couche soumise à une contrainte en compression. La bande de plus haute énergie (bande LH) reste légère selon K_{\perp} et lourde selon K_{\parallel} .

Les décalages énergétiques des centres de gravité des bandes de valence et de conduction et $K=0$ induits par la contrainte hydrostatique varient proportionnellement à la contrainte [16] :

$$\Delta E_{v,moy}^{hyd} = a_v(2\varepsilon_{\parallel} + \varepsilon_{\perp}) \quad (2.9)$$

$$\Delta E_c^{hyd} = a_c(2\varepsilon_{\parallel} + \varepsilon_{\perp}) \quad (2.10)$$

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

Dans le cas d'une croissance sur un substrat (100), les décalages énergétiques induits par la contrainte de cisaillement dans chacune des bandes constituant la bande de valence sont les suivants :

$$\Delta E_{hh}^{cisa} = -\frac{\delta E^{cisa}}{2} \quad (2.11)$$

$$\Delta E_{lh}^{cisa} = -\frac{\Delta_0}{2} + \frac{\delta E^{cisa}}{4} + \frac{1}{2} \sqrt{\Delta_0^2 + \Delta_0 \delta E^{cisa} + \frac{9}{4} (\delta E^{cisa})^2} \quad (2.12)$$

$$\Delta E_{so}^{cisa} = -\frac{\Delta_0}{2} + \frac{\delta E^{cisa}}{4} - \frac{1}{2} \sqrt{\Delta_0^2 + \Delta_0 \delta E^{cisa} + \frac{9}{4} (\delta E^{cisa})^2} \quad (2.13)$$

Avec :

$$\Delta E^{cisa,100} = 2b(\varepsilon_{\parallel} + \varepsilon_{\perp}) \quad (2.14)$$

où : b est le potentiel de déformation tétragonale.

En prenant comme référence énergétique $E_{v\text{ moy}}$, et compte tenu des équations (2.11) et (2.12), on peut définir l'énergie du haut de la bande de valence E_v ainsi que l'énergie du bas de la bande conduction E_c comme suit :

$$E_v = E_{v\text{ moy}} + \frac{\Delta_0}{3} + \Delta E_{v\text{ moy}}^{cisa} + \max(\Delta E_{hh}^{cisa}, \Delta E_{lh}^{cisa}) \quad (2.15)$$

$$E_c = E_{v\text{ moy}} + \frac{\Delta_0}{3} + E_g + \Delta E_c^{hyd} \quad (2.16)$$

Dans ces expressions $E_{v\text{ moy}}$, l'éclatement spin-orbite Δ_0 et l'énergie de gap E_g sont relatifs au matériau non contraint. En utilisant les équations (2.15) et (2.16), on peut déterminer l'équation du gap contraint E_g^{cont} :

$$E_g^{cont} = E_c - E_v = E_g + \Delta E_c^{hyd} - \Delta E_{v\text{ moy}}^{cisa} - \max(\Delta E_{hh}^{cisa}, \Delta E_{lh}^{cisa}) \quad (2.17)$$

Si la couche épitaxiale est soumise à une contrainte en compression, la bande des trous lourds HH est au dessus de la bande des trous légers LH (figure 2.8.b) et on aura :

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

Et dans le cas où la couche épitaxiale est soumise à une contrainte en tension, la bande des trous lourds HH devient au-dessous de la bande des trous légers LH (figure 2.8.c), on aura :

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

Donc l'équation (2.17) devient pour une contrainte en compression :

$$E_g^{count,com} = E_g + \Delta E_c^{hyd} - \Delta E_{v,moy}^{cisa} - \Delta E_{hh}^{cisa} \quad (2.18)$$

Et pour une contrainte en tension :

$$E_{g\ lh} = E_g + \Delta E_c^{hyd} - \Delta E_{v,moy}^{cisa} - \Delta E_{lh}^{cisa} \quad (2.19)$$

2.8 Niveau de confinement dans un puits quantique

En physique, le confinement des électrons est important et il provoque une quantification des niveaux d'énergie perpendiculaire dans un puits de potentiel. L'énergie de ces niveaux va alors dépendre de la taille du puits de potentiel.

Lorsque les dimensions dans lesquelles se déplacent les porteurs de charge sont suffisamment petites pour discrétiser leurs niveaux d'énergie. Il y a apparitions des phénomènes de confinement dans les semi-conducteurs.

Lorsque les porteurs de charge sont confinés dans une petite dimension (une seule) pour laquelle il y a confinement, et deux grandes dimensions pour lesquelles il n'y a pas de confinement on parle alors de puits quantique. Le changement du nombre de dimensions de confinement a un impact fort sur les propriétés électroniques et optiques de l'objet, en particulier la courbe de densité d'état est considérablement affectée. Celle-ci est représentée par des marches d'escalier dans les puits quantiques (Figure 2.11) [17].

*

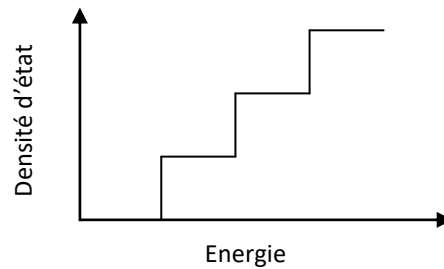
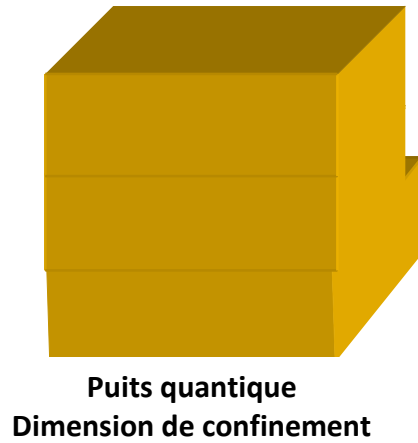


Figure 2.11. Représentation de dimension de confinement dans puits quantique et la densité d'état.

Le facteur de confinement optique dépend de plusieurs variantes, telles que l'énergie d'émission, la largeur du puits, l'indice de réfraction de la couche active et des couches de confinement.

A partir d'équation de dispersion (2.20) on peut connaître le nombre et les niveaux des états confinés dans le puits quantique :

$$K_w L_w + \arctang\left(\frac{m_g^* K_w}{K_g m_w^*}\right) + \arctang\left(\frac{m_d^* K_w}{K_d m_w^*}\right) + n\pi = 0 \quad (2.20)$$

où :

- n : le numéro de puits.
- L_w : la largeur de puits.

m_g^*, m_w^*, m_d^* Étant les masses effectives de l'électron dans la barrière de gauche, le puits et la barrière de droite, respectivement k_g, k_w, k_d étant les vecteurs d'ondes dans la barrière de gauche, le puits et la barrière de droite, respectivement.

La résolution de l'équation précédente détermine l'évolution de ces niveaux de confinement en fonction de la profondeur et largeur de puits quantique, ainsi que le nombre d'état de confinement qui est donné par :

$$n_{\text{états}} = 1 + \frac{2L_w}{h} \cdot \sqrt{2 \cdot m_w^* \cdot V_b} \quad (2.21)$$

où : V_b : Potentiel dans la barrière.

2.9 Energie de transition

L'énergie de transition est l'énergie nécessaire pour qu'un électron passe de la bande de valence vers la bande de conduction, Dans un puits quantique ou les niveaux énergétiques sont quantifiés (Figure 2.12).

Le calcul des transitions électroniques qui se produisent dans un semi-conducteur est un paramètre clef pour l'étude des propriétés optiques comme le gain ou l'absorption, mais cela nécessite la connaissance de la structure de bandes du matériau, c'est-à-dire les bandes d'énergie et leurs fonctions d'ondes correspondantes.

Pour la détermination de l'énergie de transition dans le puits quantique d'une structure à base de InAsSb/GaAs en résolvant l'équation de Schrödinger selon le formalisme de Ben-Daniel-Duke [18,19].

$$-\frac{\hbar^2 \partial^2 \varphi(x)}{2m^* dx^2} + V(x)\varphi(x) = E\varphi(x) \quad (2-22)$$

où :

- $\hbar = \frac{h}{2\pi}$.
- h : constante de Planck
- m^* : La masse de la particule.
- φ : La fonction d'onde.
- $V(x)$: Fonction décrivant le potentiel pour chaque valeur de x .

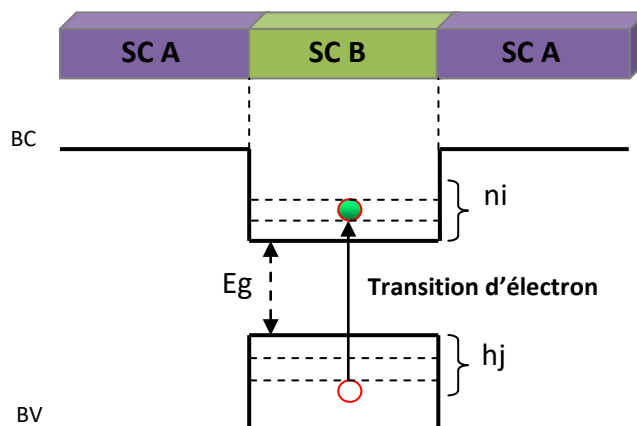


Figure 2.12. Energie de transition dans le puits quantique [20]

2.10 Propriétés des matériaux constituant le puits quantique

2.10.1 Propriétés des matériaux InAs, InSb, GaAs et InP

InAs est le symbole chimique de l'arséniure d'indium. Le InAs est un semi-conducteur composite binaire de type III-V. Il est assez similaire à l'arséniure de gallium, ses propriétés sont assez proches, il possède un gap direct et l'une des plus importantes mobilités d'électron parmi les semi-conducteurs, et l'un des plus petits gaps. Mais il est toxique et dangereux pour l'environnement.

InSb est le symbole chimique de l'antimoniure d'indium. Le InSb est un composé semiconducteur III-V. C'est un composé à gap étroit utilisé comme détecteur infrarouge, notamment en imagerie thermique, dans les systèmes de guidage autodirecteur infrarouge et en astronomie infrarouge. Les détecteurs à base d'antimoniure d'indium sont sensibles aux longueurs d'ondes comprises entre 1 et 5 μm .

GaAs est le symbole chimique de l'arséniure de gallium. Ces deux éléments se combinent et forment un semi-conducteur III-V à bande interdite direct avec une structure cristalline zinc blende. Il est souvent utilisé dans des dispositifs tels que les circuits intégrés à hyperfréquences, les circuits intégrés micro-ondes monolithiques, les diodes électroluminescentes, les diodes laser et les cellules solaires. Grâce de son émission efficace de lumière et sa très haute mobilité d'électrons comparés aux autres semi-conducteurs le GaAs est le matériau idéal pour les dispositifs optoélectroniques de haute commutation.

InP est le symbole chimique du phosphore d'indium. Le InP est un semiconducteur binaire de type III-V, il est utilisé en micro-électronique. Le phosphore d'indium est distingué par leur grande mobilité électronique et leur bande interdite direct. Sa grande mobilité électronique permet d'obtenir des dispositifs à haute rapidité de commutation en électronique. Grâce à son gap direct, il est apte à l'utilisation en optoélectronique, comme dans la fabrication des diodes laser.

Les composés binaires GaAs, InP restent utilisés comme substrat pour réaliser ou fabriquer les diodes lasers à hétéro-structures.

Le tableau 2-2 présente les Propriétés du InAs, InSb, GaAs et de l'InP a température ambiante [21] [22].

	InAs	InSb	GaAs	InP
Largeur de bande interdite Eg (eV)	0.354	0.17	1.42	1.34
Mobilité des électrons μ_e ($\text{cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$)	4000	77000	8500	5400
Mobilité des trous μ_h ($\text{cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$)	500	850	400	200
Résistivité intrinsèque ($\Omega \cdot \text{cm}^2$)		40	3.3×10^8	8.6×10^7
Densité électronique ($e^- / \text{Å}^3$)	5.68	5.77	1.55	1.45
Constante diélectrique	15.15	16.8	12.9	12.5
Paramètre de maille (Å°)	6.06	6.58	5.63	5.87
Structure cristalline	Zinc-blende	Zinc-blende	Zinc-blende	Zinc-blende
Masse volumique ($\text{g} \cdot \text{cm}^{-3}$)	5.68	5.77	5.32	4.81

Tableau 2.2. Les Propriétés du InAs, InSb, GaAs et de l'InP à température ambiante

2.10.2 Description de l'alliage InAsSb

InAsSb a été récemment traité pour développer des applications dans l'optoélectronique à grande longueur d'onde. Les propriétés de cet alliage justifient l'intérêt de ces études. Car ils offrent des propriétés complémentaires à celles des semi-conducteurs conventionnels. Il a été montré que l'addition des petites quantités de Sb produit une réduction importante de la bande interdite de GaAs, cette réduction est censée être due à une interaction résonnante des atomes de l'antimoine avec le haut de la bande de valence [23].

2.10.2.1 Paramètre de maille de InAsSb

Plusieurs paramètres de l'alliage ternaire InAsSb (paramètre de maille, épaisseur critique, gap d'énergie ... etc.) peuvent être déterminés par interpolation linéaire des paramètres binaires parents qui le composent (InAs, InSb), par une loi qui s'appelle : la loi de Vegard, elle est donnée par l'expression suivante [23] :

$$P(x) = x * P(InAs) + (1 - x) * P(InSb) \quad (2-23)$$

Des études pour la détermination du paramètre de maille du InAsSb ont été faites en 2002 qui montrent que le paramètre de maille de cet alliage obéit à la loi de Vegard (III-1) et est donc calculable en extrapolant linéairement les paramètres de maille des binaires correspondants [24].

$$a_{(AB_xC_{1-x})} = x * a_{(AB)} + (1 - x) a_{(AC)} \quad (2.24)$$

où :

$a_{(AB_xC_{1-x})}$ est le paramètre de maille du composé AB_xC_{1-x} considéré de concentration x en élément B, et $a_{(AB)}$ et $a_{(AC)}$ les paramètres de maille des deux binaires AB et AC

Pour l'alliage InAsSb :

$$a_e(x) = x * a(InAs) + (1 - x) * a(InSb) \quad (2-25)$$

2.10.2.2 Eclatement de la bande de valence par l'introduction de l'antimoine

L'effet de l'incorporation de l'antimoine sur la structure de bande de InAsSb a été expliqué par l'approche des bandes anti croisement (BAC) [25], il a été montré que l'interaction des états localisés des atomes de Sb avec les états de InAs induit l'éclatement de la bande de valence en deux sous bandes.

Le calcul des énergies des sous bandes est déterminé par la loi suivante:

$$E_{\pm} = \frac{E_B + E_M \pm \sqrt{(E_B - E_M)^2 + 4V_{MB}^2}}{2} \quad (2-26)$$

Avec E_B et E_M sont respectivement les niveaux des états localisés de l'antimoniure Sb et les états du minimum de la bande de valence. V_{MB} décrit l'interaction entre ces deux niveaux ($V_{MB} = C_{MB} \gamma$) avec γ indiquant la concentration de l'antimoniure dans l'alliage InAsSb. La

figure 2.13, illustre les bandes d'énergie avant et après l'éclatement de la bande de valence à cause de l'incorporation de Sb.

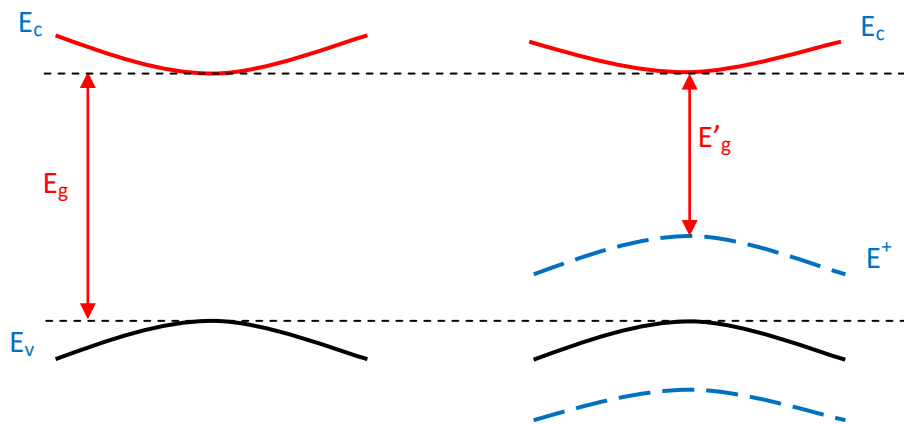


Figure 2.13. Les bandes d'énergie dans une structure à puits quantique, avant et après l'éclatement de la bande de valence.

2.11 Gain optique

Le gain optique dans un laser à puits quantique contraint en fonction de la structure microscopique a fait l'objet de nombreux travaux aussi bien expérimentaux que théoriques [26-30].

La plupart des caractéristiques d'un laser comme le courant de seuil, la largeur de raie ou la bande passante résultent des propriétés du gain de la structure à puits quantique, il est donc fondamental de le définir avec précision.

Le gain d'un matériau par unité de longueur est défini par le taux de croissance de la densité des photons pendant leur propagation suivant une direction dans le cristal. Le gain est généré par la recombinaison stimulée d'une paire électron-trou par un photon incident, créant un deuxième photon de même longueur d'onde et de même phase que le premier, doublant ainsi l'amplitude de l'onde monochromatique. La répétition de ce processus mène à une forte amplification de la lumière.

Le gain optique est proportionnel à la probabilité qu'un photon déclenche une transition d'un niveau (j) à un niveau d'énergie inférieure (i), l'énergie du photon ($h\nu$) doit être égale à l'énergie de transition. $E_{ij} = E_j - E_i$. Le calcul de cette probabilité est basé sur la mécanique quantique [31,32], le gain dans le puits quantique est donné par [33] :

$$g_{ij}(h\omega) = \left(\frac{q^2 h}{2m_0^2 \varepsilon_0 n_r c} \right) \left(\frac{1}{h\nu} \right) |M(E_{ij})|^2 D_r(E_{ij})(f_j - f_i) \quad (2-27)$$

$$h\nu = E_{ij}$$

où :

- m_0 : est la masse de l'électron.
- ε_0 : est la permittivité du vide.
- q : la charge de l'électron.
- h : la constante de Planck
- f_j, f_i : Les fonctions de Fermi.
- n_r : L'indice de réfraction relatif du matériau.
- C : célérité de la lumière.

Dans un puits quantique le gain est obtenu en faisant la somme de tous les gains produits par les transitions entre les sous bandes (n bandes de conduction et m bandes de valence); l'équation (2-27) devient alors :

$$g(h\omega) = \sum_n \sum_m \left(\frac{q^2 h}{2 m_0^2 \varepsilon_0 n_r c} \right) \left(\frac{1}{h\nu} \right) |M(E_{ij})|^2 D_r(E_{ij})(f_j - f_i) \quad (2-28)$$

Le paramètre principal dans cette équation est la matrice de transition $|M|^2$ qui donne la force de la transition.

$D_r(E)$: est la densité des transitions permises, elle est appelé densité d'états réduite définie par :

$$\rho_r = \frac{\rho(k)}{2 E_t(k)/dk} \quad (2-29)$$

où :

$\rho(k)$ est la densité d'états dans l'espace K_t et E_t est l'énergie de transition ($E_e - E_h$)

Pour un puits quantique d'épaisseur L_z , la densité d'états réduite de chaque sous bande est donnée par :

$$D_r^{2D} = \frac{m_r}{\pi h^2 L_z} \quad (2-30)$$

où :

m_r : est la masse effective réduite, donnée par :

$$m_r^* = \left[\frac{1}{m_c^*} + \frac{1}{m_v^*} \right]^{-1} \quad (2-31)$$

m_c^* et m_v^* : Masses effectives des porteurs dans les bandes de conduction et de valence respectivement.

2.12 Conclusion

Dans ce chapitre nous avons parlé sur le laser, qui est fait à base de puits quantique, la définition de ce dernier et ces différents types.

On a aussi montré que l'incorporation d'une faible quantité d'atomes de l'antimoniure induit une grande réduction dans la bande interdite due à l'éclatement de la bande de valence en deux sous bande car elle est identique à celle de l'atome d'arsenic. Enfin, nous avons présenté le modèle mathématique pour le calcul de gain optique.

Le chapitre suivant est consacré à la présentation et interprétation des résultats obtenus par la simulation des deux structures à puits quantique InAsSb/GaAs et InAsSb/InP pour déterminer les concentrations optimales de l'antimoine et le substrat qui résultent des longueurs d'onde d'émission exploitables dans les fibres optique comme 0.85, 1.33 et 1.55 μm .

Références Bibliographiques

- [1] P. S. Zory, JR (ED.), *Quantum Well Lasers*, Academic Press, New York (1993).
- [2] Luc BÉAUR., Propriétés excitoniques de puits quantiques ZnO/(Zn,Mg)O. thèse de doctorat, 2011, Information, Systèmes et Structures, Université de Montpellier 2, France.
- [3] Julien Bouvier., Etude des épitaxies sélectives des alliages SiGe(C) pour électrode de base des transistors bipolaires performants. Thèse de Doctorat, 2010, Matériaux, L'institut National des sciences appliquées, Lyon
- [4] Flsher, H.Kuhn AND H.Richter. *New approach in equilibrium theory for strained layer relaxation*. Phys. Rev. Lett. 73, 2712–2715 (1994).
- [5] SELMANE Djamel, Mémoire de Magister, Modélisation et optimisation des lasers à puits quantiques à base de nitrures et de matériaux II- VI utilisant des hétérostructures de l'ordre de l'Angstrom (2009).
- [6] MLE Klouch Nawel. Thèse de doctorat, *Etude d'une structure laser à semi conducteurs. pour application dermatologique*, université d'Oran (2014/2015).
- [7] M.Menezla sif eddine, thèse de doctorat, *Etude de lasers émettant dans l'infrarouge et le visible à base de nanostructure a puits quantique de GaAsBi/GaAs et GaNbi/GaAs*. Université d'Oran (Décembre 2015).
- [8] Joonas hilska. *Effect of growth parameters on the properties of GaAsBi Tampere*. University of technology Master of Science Thesis, 68 pages, 0 Appendix pages May (2016).
- [9] Ghione,G. *Semiconductor Devices for High-Speed optoelectronics*, Politecnico Ditorino, Italy, Cambridge University Press,(2009).
- [10] Luc BÉAUR., Propriétés excitoniques de puits quantiques ZnO/(Zn,Mg)O. thèse de doctorat, 2011, Information, Systèmes et Structures, Université de Montpellier 2, France.
- [11] J.M Bethoux,, "Relaxation des Contraintes dans les Hétérostructures Epaises (Al,Ga)n : une Piste Originale pour la Réalisation de Diodes Electroluminescentes à Cavité Résonante", Thèse de doctorat, Université de Nice Sophia-Antipolis, (2004).
- [12] Mickaël D. TESSIER. Thèse de Doctorat, Synthèse et spectroscopie optique de puits quantiques colloïdaux. ÉCOLE DOCTORALE : Physique et Chimie des Matériaux (ED397), (2013).

- [13] Band parameters for III–V compound semiconductors and their alloys, I. Vurgaftman, J. R. Meyer, and L. R. Ram-Mohan (2001)
- [14] A. Aissat, M. El Bey et al., Modeling and Simulation of $\text{Al}_x\text{Ga}_y\text{In}_{1-x-y}\text{As}/\text{InP}$ quaternary structure for photovoltaic. International journal of Hydrogen Energy, 2014, Vol 39: p 15287-15291.
- [15] Y. Van Cluminal. Réalisation et étude de diodes lasers à base de GaSb émettant vers 2. $3\mu\text{m}$ pour application à l'analyse des gaz. Thèse de doctorat. Université MONTPELLIERII, 1997.
- [16] C. I. Cabrera, J. C. Rimada et al., Modelling of GaAsP/InGaAs/GaAs strainbalanced multiple-quantum well solar cells, Journal of Applied Physics, 2013, Vol 113: p 024512-1 to 024512-7.
- [17] Mickaël D. TESSIER. Thèse de Doctorat, Synthèse et spectroscopie optique de puits quantiques colloïdaux. ÉCOLE DOCTORALE : Physique et Chimie des Matériaux (ED397), (2013).
- [18] G. Bastard and J.A. Brum. Electronic states in semiconductor heterostructures. IEEE Journal of Quantum Electronics, 22(9), (september 1986).
- [19] D.J Ben daniel and C.B Duke. Space-charged effect on electron tunneling Phy. Rev. 152,683-692(1966).
- [20] K.Koksal, B.G. Critical Layer Thickness og GaIn (n) As(Sb) qws on GaAs and InP substrates for (001) and (111) orientations. The European Physical journal (5 may 2009), 211-218.
- [21] Lasladj Meriem, Mémoire de Magistère, Simulation numérique des cellules solaires de troisième génération pour des applications spatiales, université Sétif 1 (2014/2015).
- [22] El M'Naouer. Materials, C., & Exactes, S. (2008). Département de Physique-Chimie, Ecole Normale Supérieure de l'Enseignement Technique, BP 1523, 31000 Oran, Algeria, (May).
- [23] Vanessa Gorge. Caractérisations de matériaux et tests de composants des cellules solaires à base des nitrures des éléments III-V. Thèse de doctorat, Université Paris-SUD 11, (2012).
- [24] C A Broderick, M Usman et al., Band engineering in dilute nitride and bismide semiconductor lasers. Semiconductors Science and Technology, (2011), Vol 27: (094011) 1-14.

- [25] Philippe Mercure, Calcul de gain optique de structures à puits quantiques sous contraintes, Thèse de doctorat. Ecole polytechnique de Montréal (2006).
- [26] P.J.A. Thijs, L.F. Tiemijer, J.J.M Binsma AN T.VAN Dongen. *IEEE J. Quantum Electron*, 30,477,(1994)3F.Alexander.
- [27] M.Henini , Epitaxial Growth of Dilute Nitrides by Metal-Organic Vapour Phase Epitaxy. *Dilute Nitride semiconductors*, Elsevier, (2005) pp 93-117.
- [28] Daoudi Attia, *Etude et simulation du gain optique d'un laser à puits. quantique à base de AlGaIn/GaN*. Thèse de magistère. Université BLIDA, (2004).
- [29] Claude Cohen-Tannoudzi, Jaques Dupont-Roc, Gillert Grynberg. *Photons et atomes : introduction à l'électrodynamique quantique*. EDP. Sciences /CNRS EDITIONS, (2001).
- [30] Joachin Piprek. *Semi-conductors: optoelectronic Devices, introduction to physics and simulation*. ACADEMIC PRESS, Elsevier, (2003).
- [31] S. L. Chuang, *Physics of Optoelectronic Devices*. New York: Wiley, (1995).
- [32] W.W. Chow and S.W. Koch, *Semiconductor-Laser Fundamentals*. Berlin: Springer Verlag, (1999).
- [33] R. yan, S. Corzine, L. Coldren, AND I. Suemune. *Corrections to the expression of gain in GaAs*, *IEEE J. Quantum Electron*. vol. 26, pp. 213–216,(1990).

Chapitre 3 Simulation et interprétation des résultats

3.1. Introduction

Le but de ce chapitre, est de présenter et interpréter les résultats obtenus par simulation des deux structures à puits quantique InAsSb/GaAs et InAsSb/InP pour déterminer les concentrations optimales d'antimoine et le substrat qui résultent des longueurs d'onde d'émission exploitables dans les fibres optique comme 0.85, 1.33 et 1.55 μm .

Pour cela des simulations ont été faites afin d'étudier les effets de la contrainte et la variation de la concentration d'antimoine dans la couche active InAsSb, sur les différents paramètres comme l'épaisseur critique, la gap, les barrière de potentiel et les niveaux de confinement et les paramètre optique comme la longueur d'onde d'émission et le gain optique ainsi que la gamme d'émission.

3.2 Paramètres de maille

La figure 3.1, représente la variation des paramètres de maille de l'alliage ternaire InAsSb en fonction de la concentration d'antimoine. L'incorporation du Sb entraîne une augmentation du paramètre de maille, pour une centration nul de Sb le paramètre de maille égal à celui de InAs puis il augmente pour atteindre les 6.102 \AA pour une concentration de Sb égale 12%.

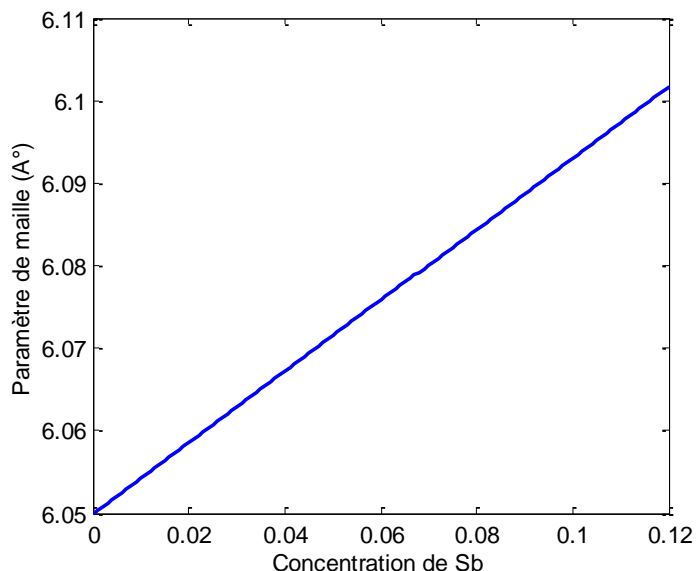


Figure 3.1. Variation du paramètre de maille d'InAsSb en fonction de la concentration Sb.

3.3 Désaccord paramétrique

La variation de la contrainte en fonction de la concentration de Sb est illustrée sur la figure suivante. Pour les deux structures InAsSb /GaAs, la contrainte augmente avec la variation de Sb. D'après cette simulation on constate que l'alliage InAsSb est contraint en compression sur les deux substrats GaAs et InP et la contrainte avec le substrat GaAs est plus importante par rapport à InP.

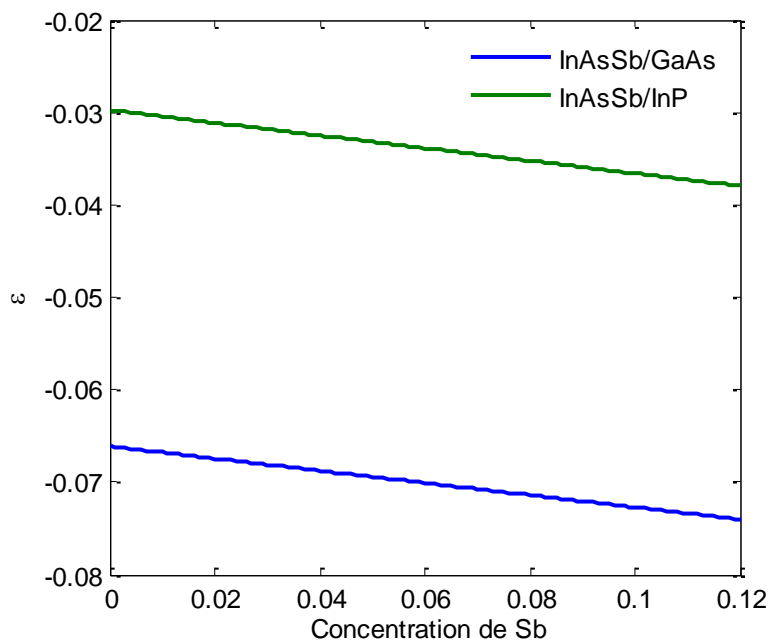


Figure 3.2. Évolution de la contrainte en fonction de la concentration de Sb.

3.4 Epaisseur critique

La figure 3.3, illustre la variation de l'épaisseur critique des deux structures InAsSb/GaAs et InAsSb/InP. Sur les deux substrats, l'épaisseur critique diminue avec l'augmentation de Sb cette réduction est causée par la contrainte ; plus la contrainte est importante plus l'épaisseur critique devient plus petite. Si on compare les deux épaisseurs on observe que l'épaisseur de la couche InAsSb sur GaAs est inférieure que sur le substrat InP.

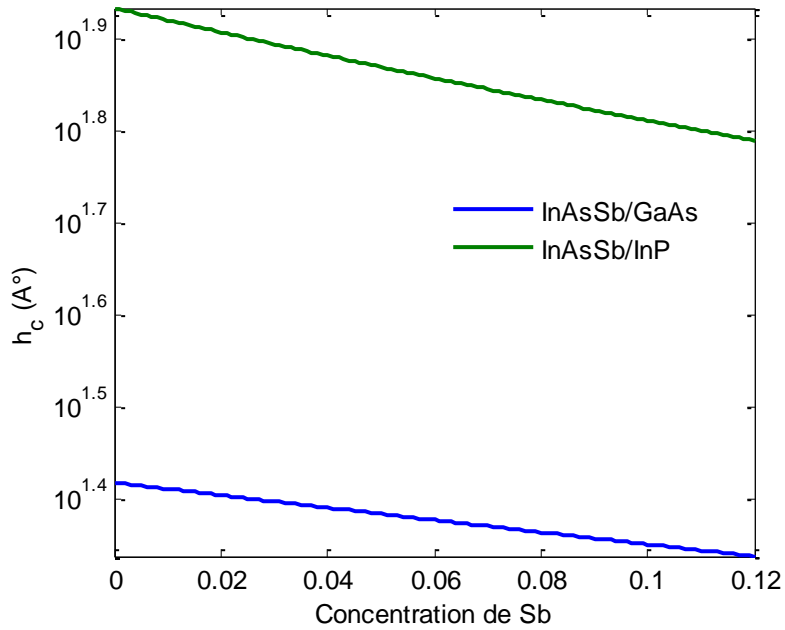


Figure 3.3. Variation de l'épaisseur critique de InAsSb sur les substrats GaAs et InP

3.5 Éclatement de la bande de valence

La figure 3.4, montre l'effet de l'incorporation de Sb sur la bande de valence, en fait l'antimoine induit un éclatement de la bande de valence en deux sous bandes ce qui induira une réduction de la bande interdite du matériau en fonction de la concentration de Sb. Soit pour $\Delta x = 0.12$ on a une réduction de 0.3 eV.

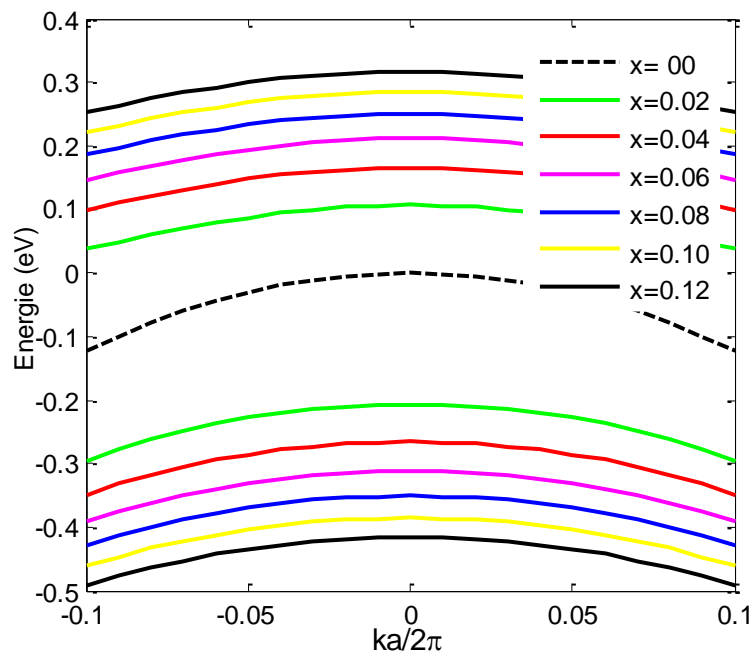


Figure 3.4 : éclatement de la bande de valence en fonction de la concentration d'antimoine

3.5 L'énergie de la bande interdite

Les figures 3.5 et 3.6, montrent respectivement la variation des bandes interdites des structures InAsSb/GaAs, InAsSb/InP contraint sans éclatement et contraint avec éclatement en fonction de la concentration d'antimoine. Dans les deux simulations on remarque que le gap diminue avec l'augmentation de la concentration de Sb. Comme la contrainte est en compression dans les deux structures ; le gap des trous lourds E_{ghh} est toujours inférieur à celui des trous légers E_{glh} alors que les valeurs des gaps sur le GaAs et netement inférieur que sur le InP car la contrainte est plus importante sur le substrat GaAs. L'incorporation de Sb entrain un éclatement de la bande de valence ce qui réduit encore la bande interdite, pour une concentration de Sb égale à 6% on note une réduction d'environ 1 eV.

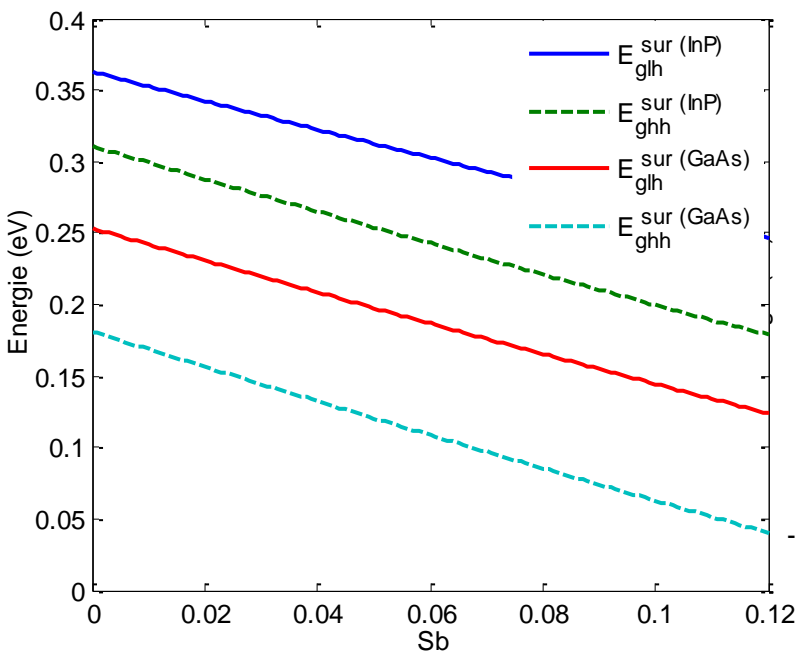


Figure 3.5. Bande interdite d'InAsSb contraint sans éclatement sur les substrats GaAs et InP

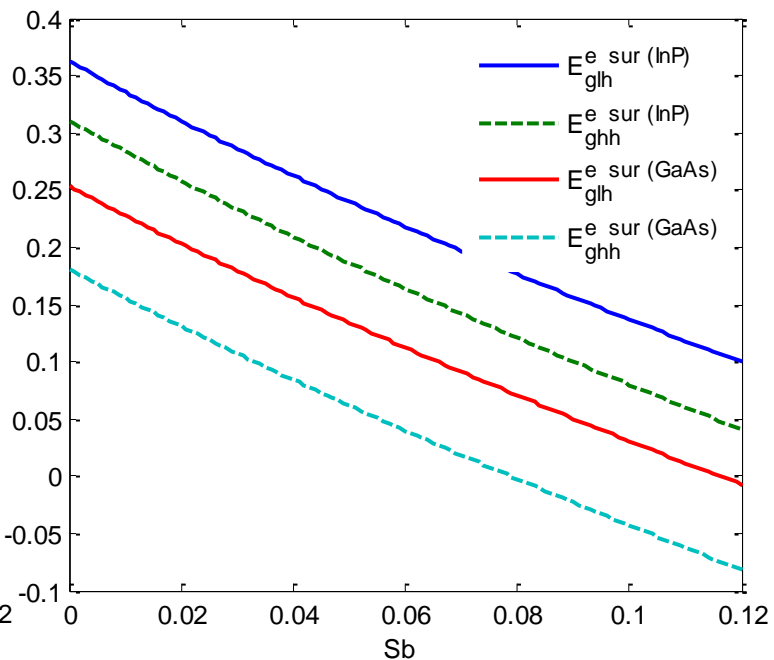


Figure 3.6. Bande interdite d'InAsSb contraint avec éclatement sur les substrats GaAs et InP

3.6 Barrières de potentiel

La figure 3.7, montre la variation des barrières de potentiel créées entre la alliage ternaires et les deux substrats ; dans les deux simulations la valeur de la barrière augment en fonction de la concentration de Sb cela est due à la réduction de la bande interdite par la contrainte et l'éclatement de la bande de valence. Dans la première structure (InAsSb/GaAs) à $x=0$ la barrière au niveau de la bande de conduction égale à 1.239 eV et avec l'augmentation de x cette différence de potentiel entre l'alliage ternaire et le substrat augment pour atteindre 1.5 eV. Dans les deux cas les barrières de potentiel sont toujours positives ce qui donne un puits quantique de type I quelque soit la concentration de Sb dans la couche active.

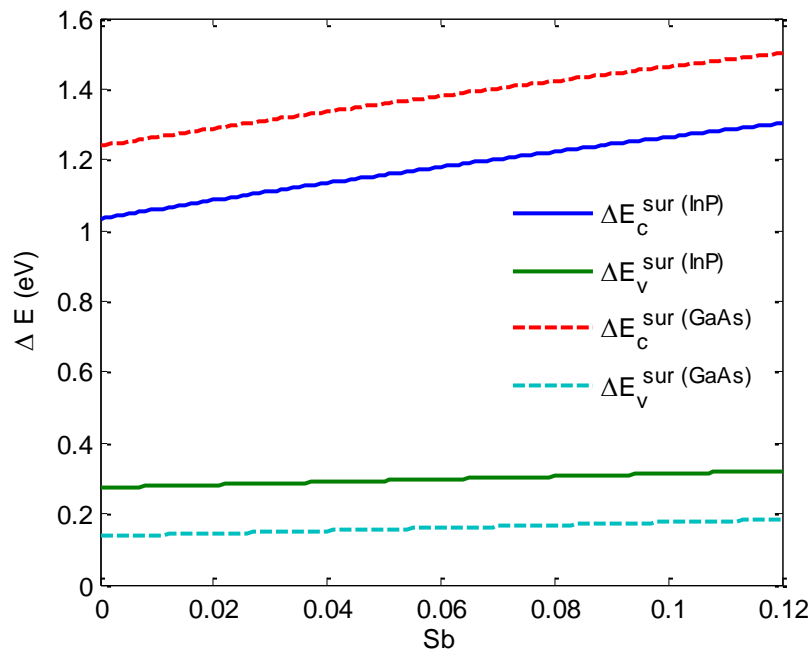


Figure 3.7. Variation des barrières de potentiel en fonction de la concentration de l'antimoine.

3.7. Niveaux d'électrons dans le puits

Les figure 3.8.a et 3.8.b illustrent respectivement la variation des niveaux énergétiques des électrons dans les puits InAsSb/InP et InAsSb/GaAs en fonction de la largeur L_z et pour plusieurs concentrations d'antimoine (5, 8 et 10%). Dans cette simulation, on remarque que les niveaux d'électron diminuent avec l'élargissement de puits quantique dans les deux structures. Avec l'augmentation de la concentration de Sb le barrières de

potentiel accroît ce qui rend le puits quantique plus profond et réduit encore le niveau de confinement: pour la structure InAsSb/InP, le premier niveau est à 0.9 eV pour une concentration de Sb égale 5% et une largeur de 10 nm, pour la même l'argeur ce niveau égal à 0.8 eV pour 10 % de Sb soit une réduction de 0.1 eV. Dans les deux structures on a trois niveaux de confinement pour les concentrations 5, 8 et 10%.

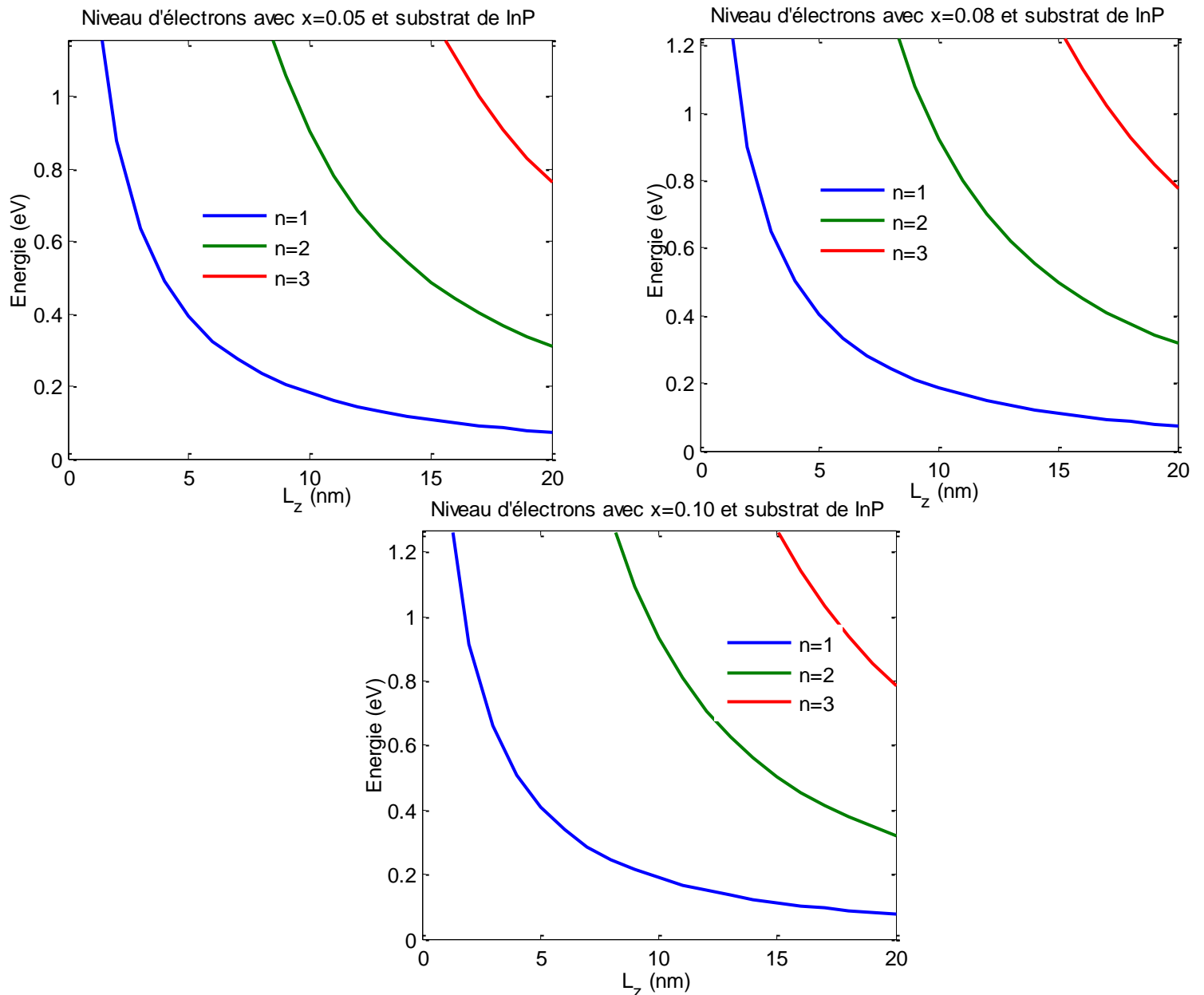


Figure 3.8. a. Variation des niveaux énergétiques des électrons dans le puits InAsSb/InP

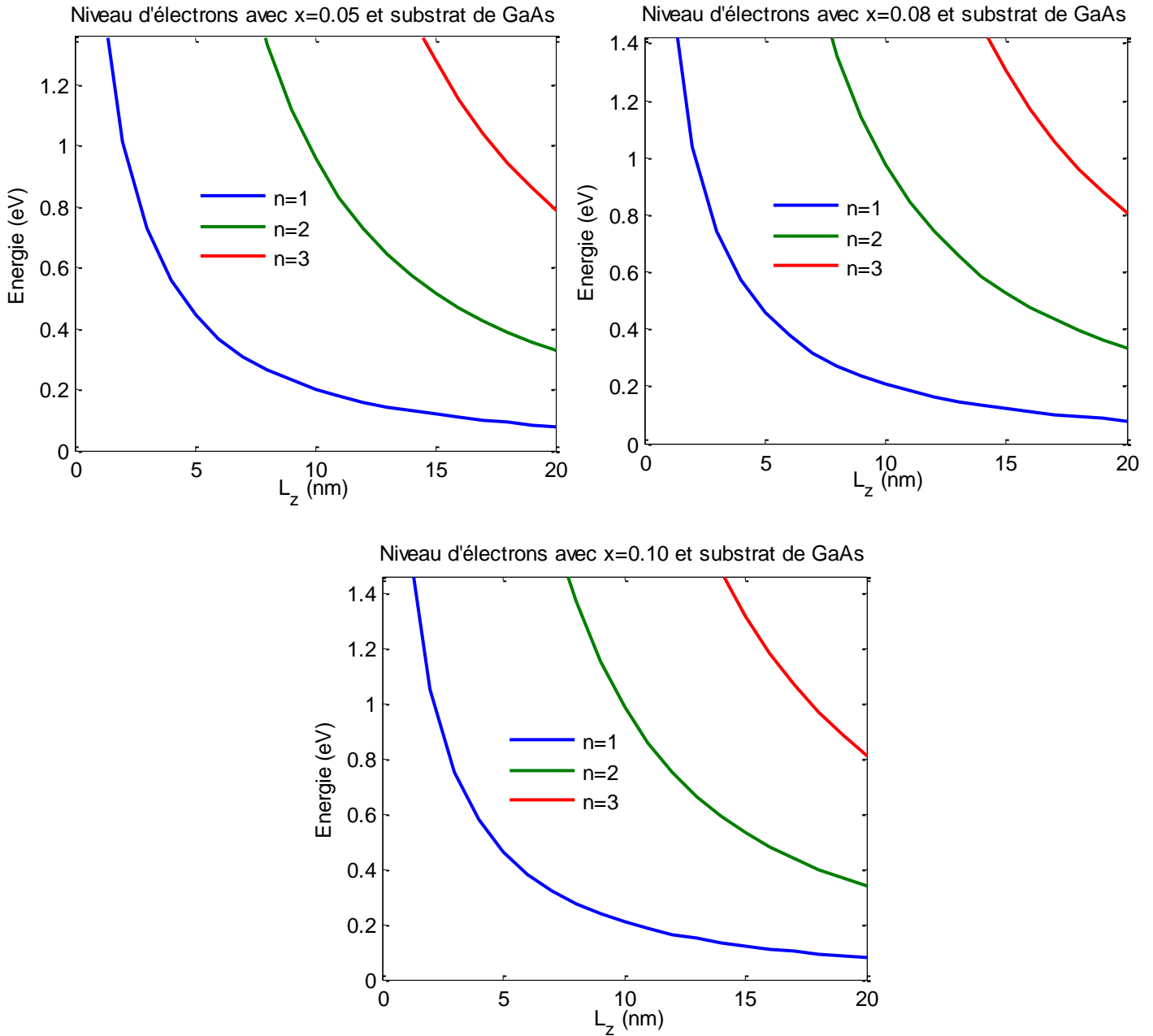


Figure 3.8.b. Variation des niveaux énergétiques des électrons dans le puits InAsSb/GaAs en fonction de sa largeur pour plusieurs concentrations de Sb.

3.8. Niveaux trous lourds dans le puits

Les figure 3.9.a et 3.9.b illustrent respectivement la variation des niveaux énergétiques des trous lourds dans les puits InAsSb/InP et InAsSb/GaAs en fonction de la largeur L_z et pour plusieurs concentrations de l'antimoine (5, 8 et 10%). Dans cette simulation, on note que les niveaux des trous diminuent avec l'augmentation de l'épaisseur de la couche active InAsSb dans les deux structures. la barrière augmente avec

l'incorporation de Sb ce qui donne de nouveaux niveau de confinement : pour la structure InAsSb/InP on a trois niveaux pour $x= 0.05$ et 0.08 et quatre à $x=0.10$ et deux niveaux à $x= 0.05$ et trois $x=0.08$ et 0.10 pour la structure InAsSb/GaAs. Le nombre de niveau avec le substrat de InP et plus important qu'avec le GaAs car la barrière de la bande de valence créée entre le InAsSb et supérieur a celle créée avec le GaAs.

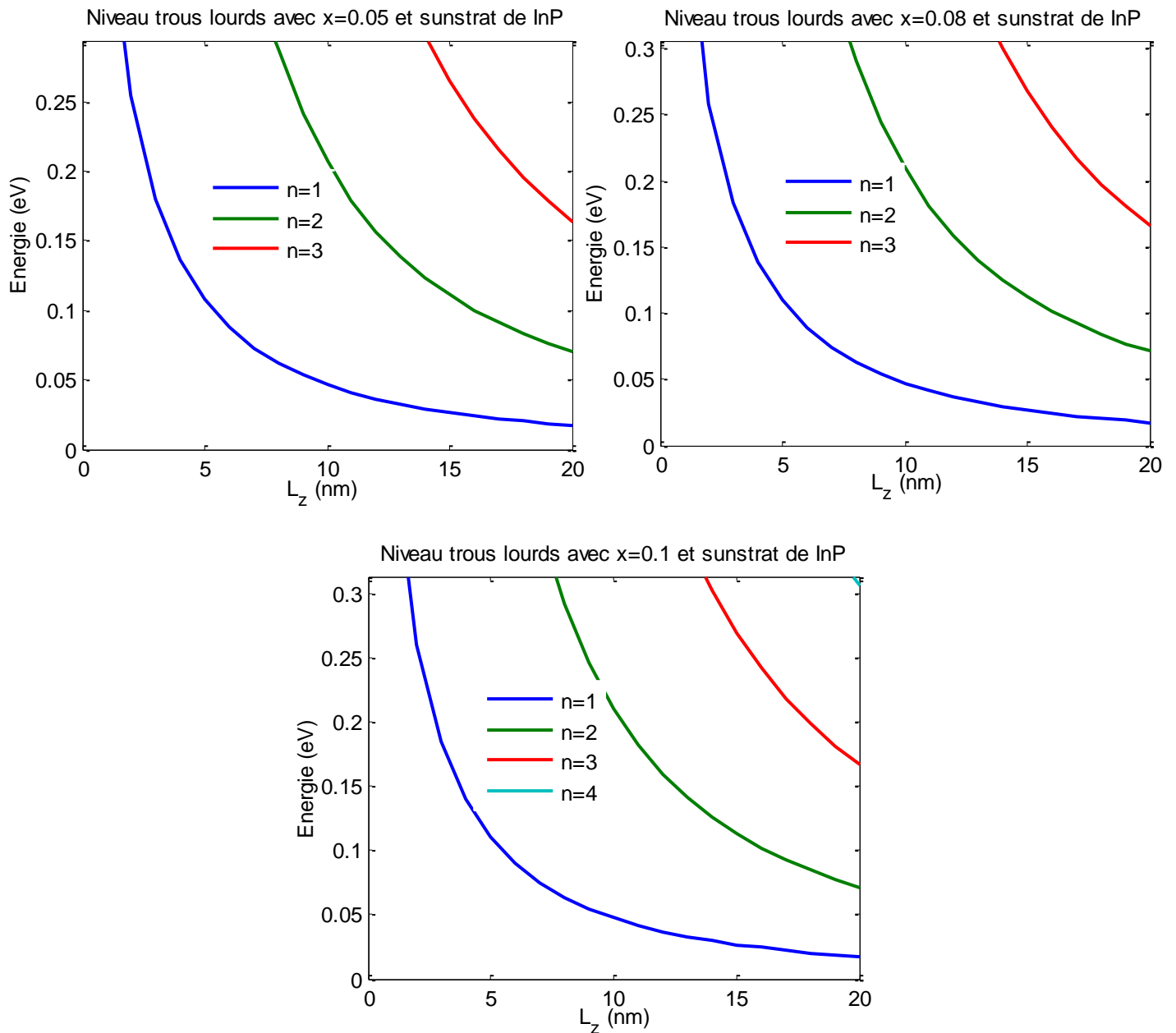


Figure 3.9. a. Variation des niveaux énergétiques des trous lourds dans le puits InAsSb/InP en fonction de sa largeur pour plusieurs concentrations de Sb.

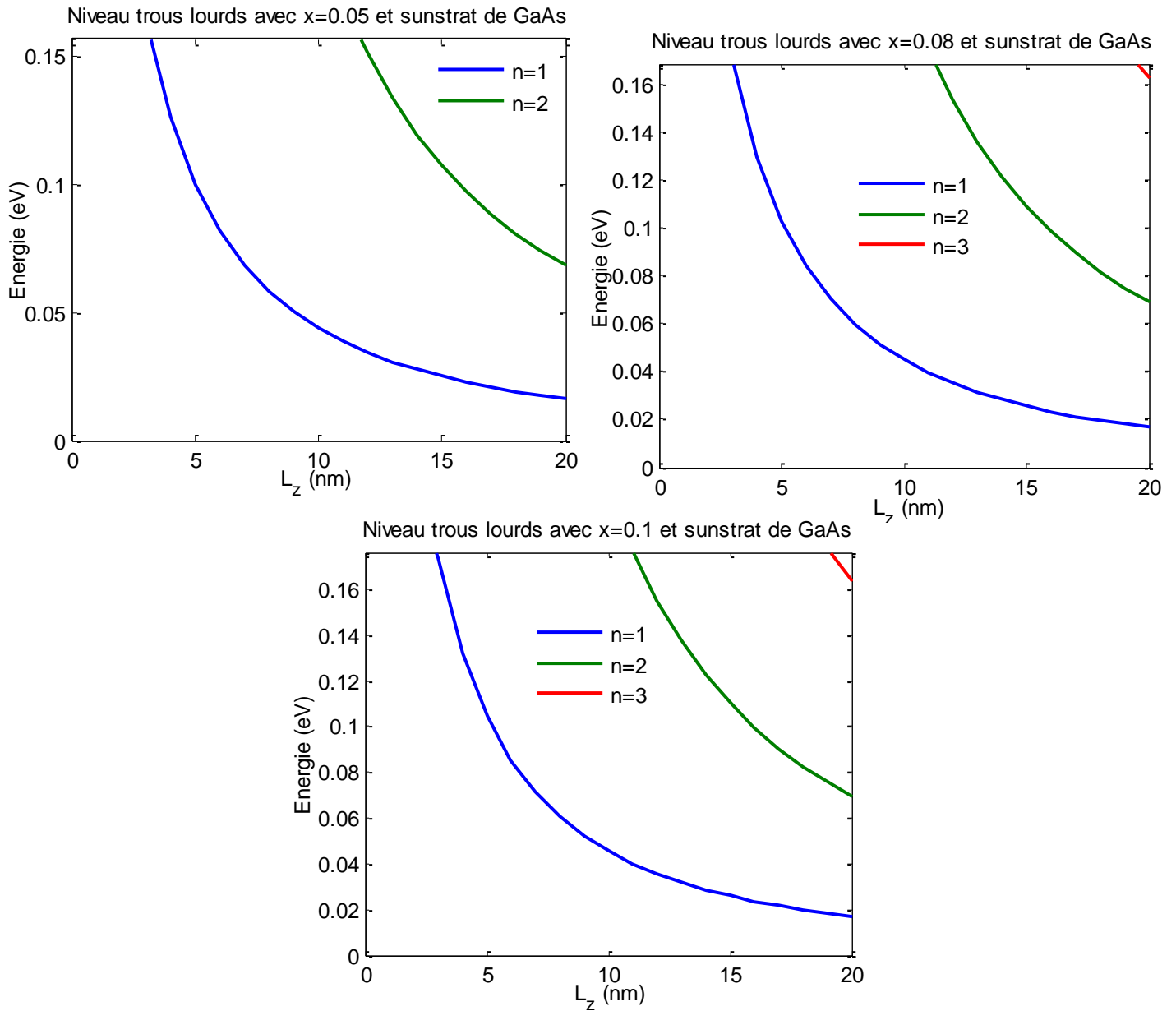


Figure 3.9. b. Variation des niveaux énergétiques des trous lourds dans le puits InAsSb/GaAs en fonction de sa largeur pour plusieurs concentrations de Sb.

3.9. Niveaux trous légers dans le puits

Les figures 3.10.a et 3.10.b montrent respectivement la variation des niveaux énergétiques des trous légers dans les puits InAsSb/InP et InAsSb/GaAs en fonction de la largeur L_z et pour plusieurs concentrations de l'antimoine (5, 8 et 10%). Dans cette simulation, on remarque que les niveaux de confinement diminuent avec l'augmentation de l'épaisseur de InAsSb dans les deux structures. la barrière augmente avec l'incorporation de Sb ce qui réduit encoeur les niveau de confinement. Pour les deux structures il y a un seul niveau de confinement quelque soit la concentration de l'antimoine.

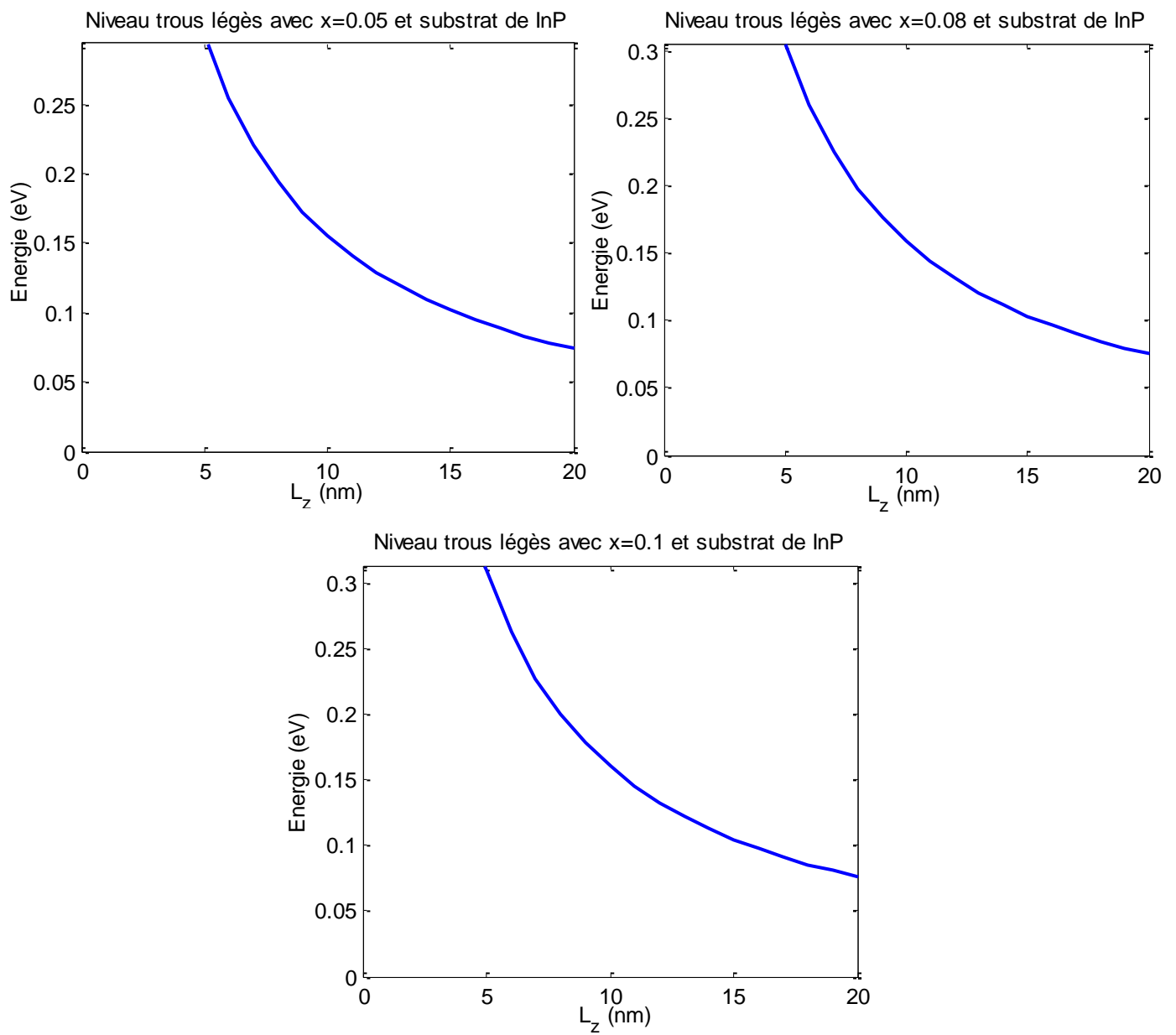


Figure 3.10.a. Variation des niveaux énergétiques des trous légers dans le puits InAsSb/InP en fonction de sa largeur pour plusieurs concentrations de Sb.

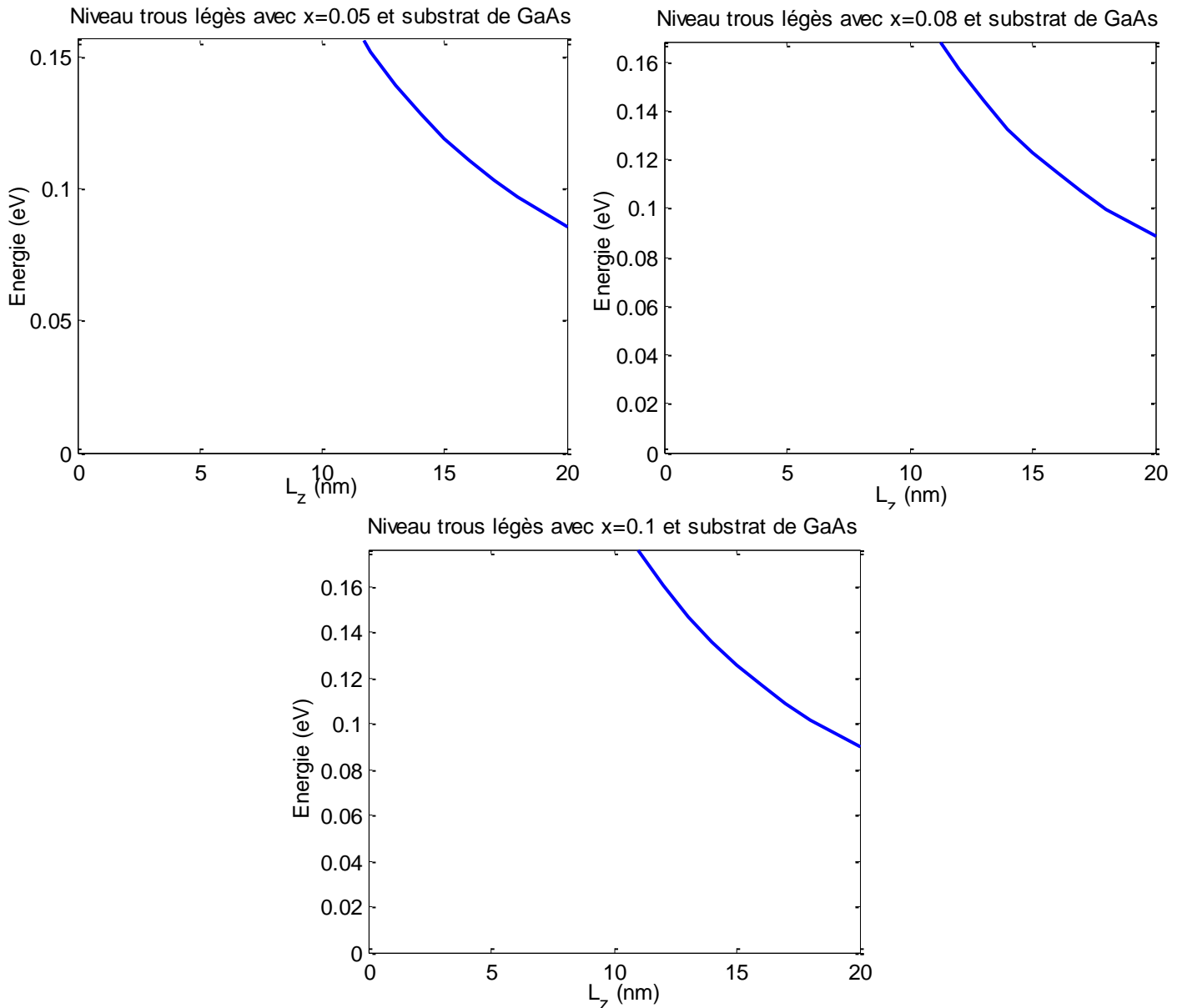


Figure 3.10.b. Variation des niveaux énergétiques des trous légers dans le puits InAsSb/GaAs en fonction de sa largeur pour plusieurs concentrations de Sb.

3.10. Energies de transition bande de conduction vers trous lourds

La somme des niveaux de confinement des électrons et des trous lourds et l'énergie de la bande interdite du ternaire donne la valeur de l'énergie libérée par la transition de l'électron de la bande de conduction vers la bande de valence. Les figures suivantes illustrent la variation de cette énergie en fonction de la largeur de puits quantique pour les deux structures InAsSb/InP et InAsSb/GaAs avec trois concentrations de l'antimoine (5, 8 et 10%). On remarque que les niveaux de transition diminuent avec l'élargissement de puits et l'énergie libérée devient plus importante pour les transitions entre des niveaux plus

éloignés. Comme le nombre des niveaux de confinement dans la structure InAsSb/InP et plus important que celui de InAsSb/GaAs on a une probabilité de transition plus grande. Les énergies des transitions pour $x=0.10$ sont faibles par rapport aux énergies données par $x=0.05$ et 0.08 ; cette différence est due à l'éclatement de la bande de valence et à la réduction du gap due à l'augmentation de la concentration de l'antimoine dans l'alliage InAsSb.

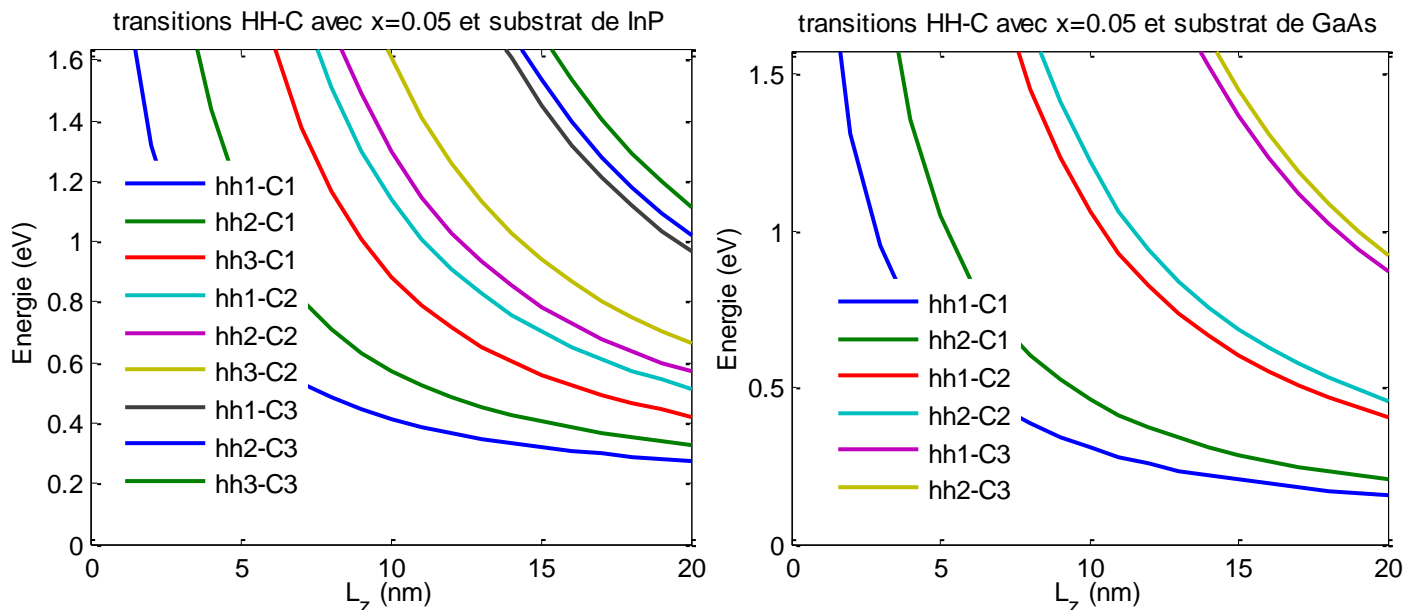


Figure 3.11.a. Variation des énergies de transition trous lourds vers bande de conduction dans les puits InAsSb/InP, InAsSb/GaAs en fonction L_z pour une concentration de Sb égale 0.05.

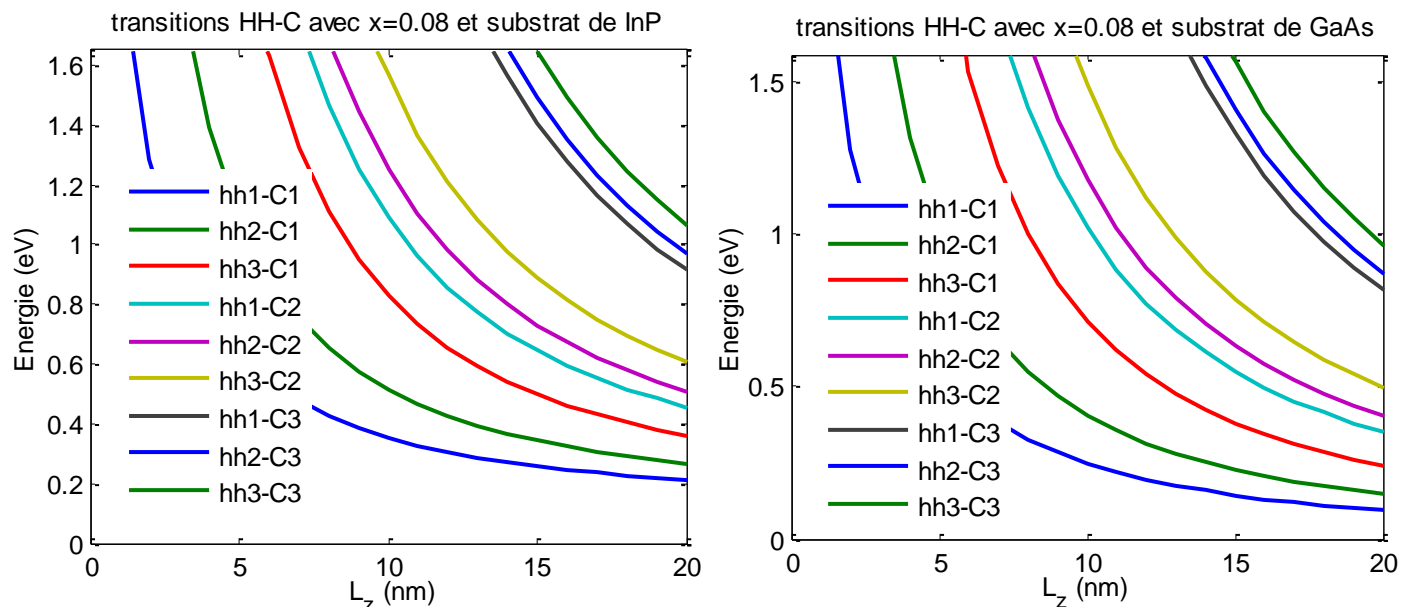


Figure 3.11.b. Variation des énergies de transition trous lourds vers bande de conduction dans les puits InAsSb/InP, InAsSb/GaAs en fonction L_z pour une concentration de Sb égale 0.08.

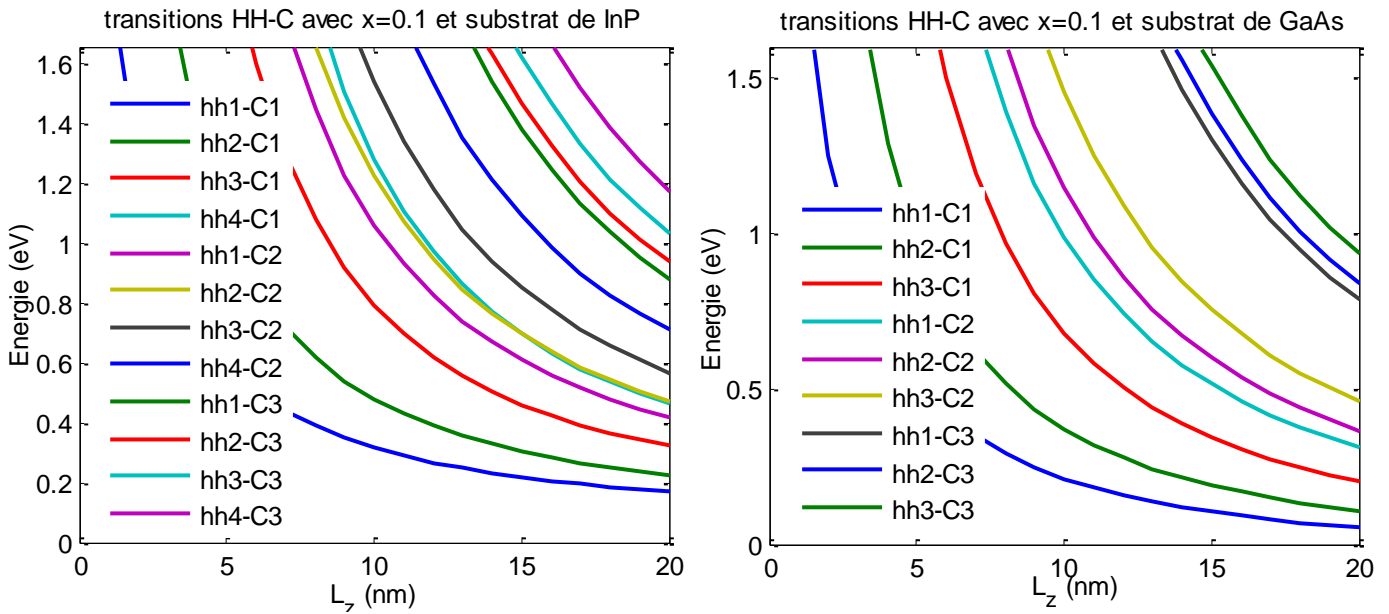


Figure 3.11.c. Variation des énergies de transition trous lourds vers bande de conduction dans les puits InAsSb/InP, InAsSb/GaAs en fonction L_z pour une concentration de Sb égale 0.10.

3.11. Energies de transition bande de conduction vers trous légers

La variation des niveaux d'énergie de transition entre les sous bande trous légers vers la bande de conduction dans les deux structures InAsSb/InP et InAsSb/GaAs sont illustrés sur les figures suivantes. D'après ces simulations on remarque que dans les deux structures l'énergie de transition diminue avec l'élargissement de puits quantique, cette réduction est due à diminution des niveaux de confinement. Avec l'augmentation de Sb dans la couche active InAsSb on a une diminution de la bande interdite ce qui réduit les énergies due à la transition des électrons entre les sous bande de valence et les sous bande de conduction dans le puits.

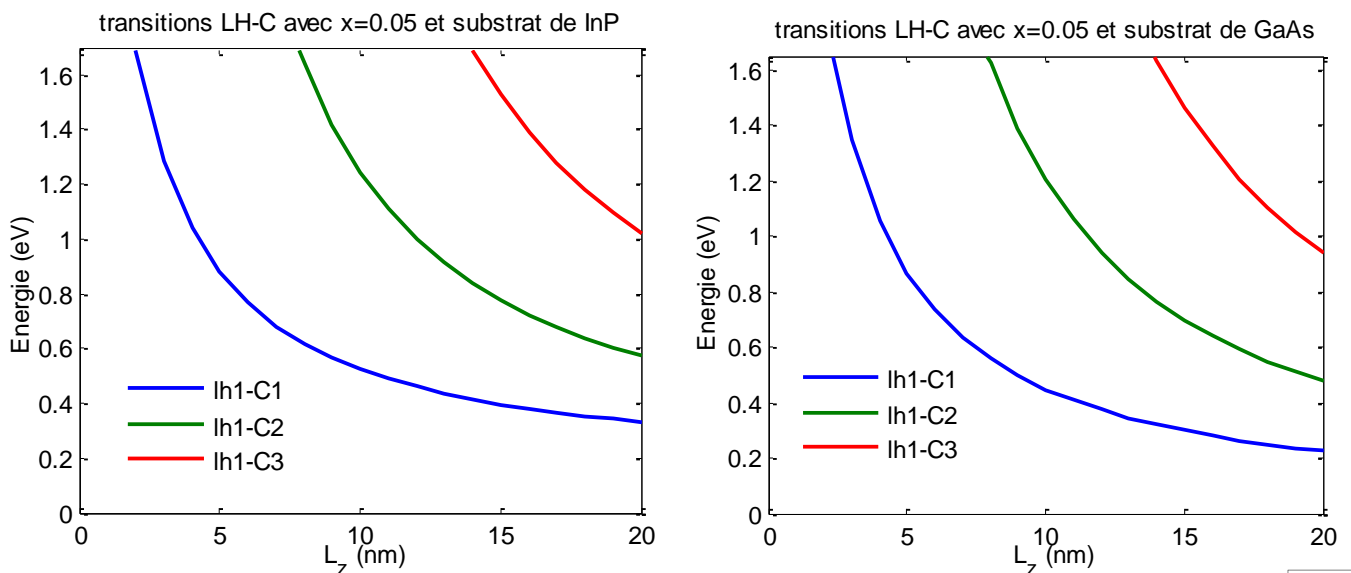


Figure 3.12.a. Variation des énergies de transition trous lourds vers bande de conduction dans les puits InAsSb /InP, InAsSb /GaAs en fonction L_z pour une concentration de Sb égale 0.05.

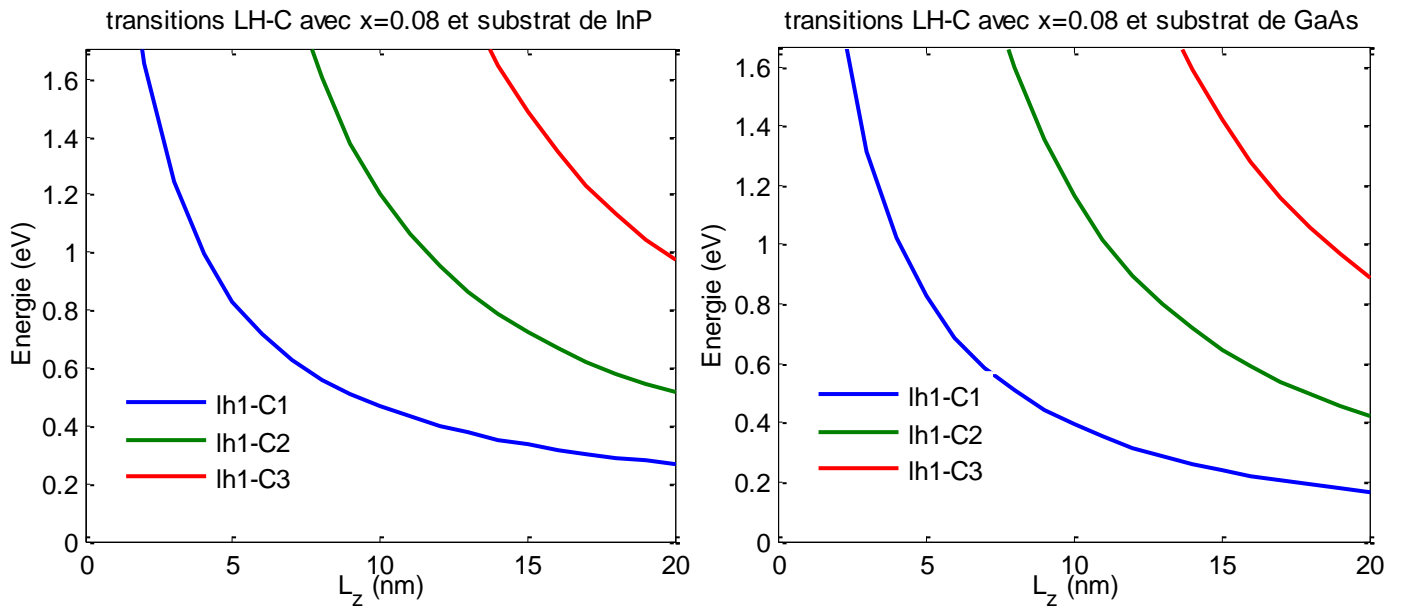


Figure 3.12.b. Variation des énergies de transition trous lourds vers bande de conduction dans les puits InAsSb/InP, InAsSb/GaAs en fonction L_z pour une concentration de Sb égale 0.08.

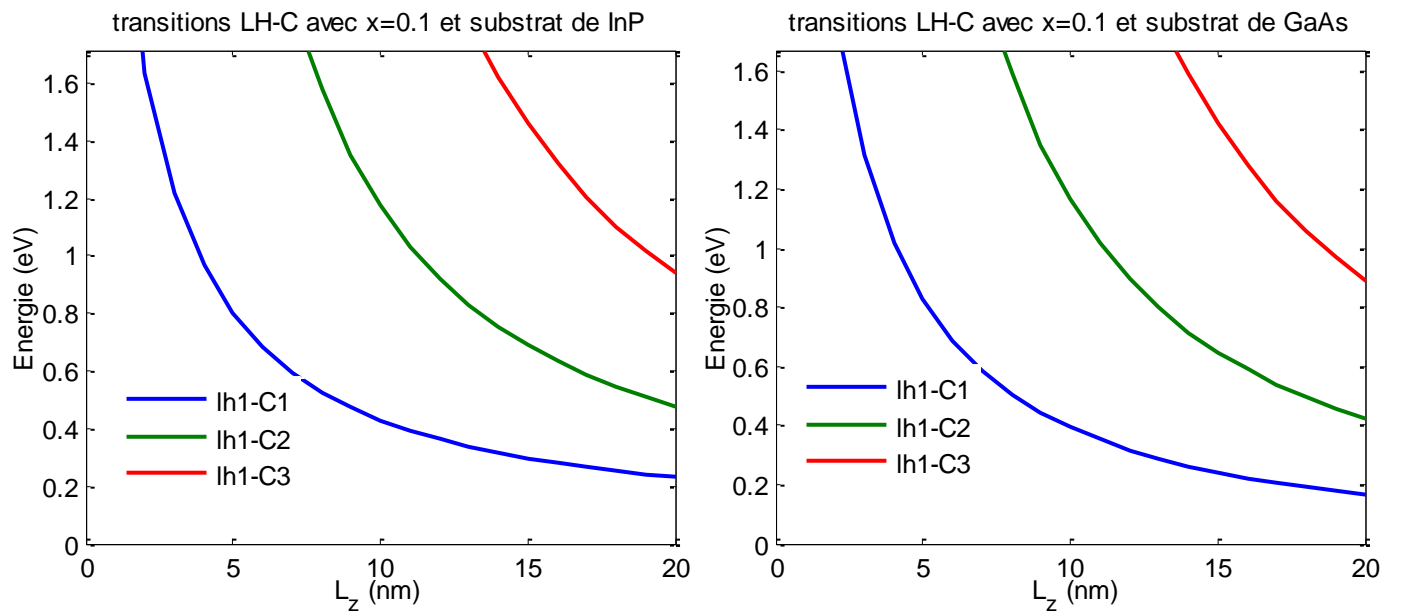


Figure 3.12.c. Variation des énergies de transition trous lourds vers bande de conduction dans les puits InAsSb/InP, InAsSb/GaAs en fonction L_z pour une concentration de Sb égale 0.10.

3.12 Longueur d'onde due aux transitions bande de conduction vers trous lourds

Les figures 3.13, représentent la variation de la longueur d'onde d'émission due aux transitions sous bande trous lourds vers bande de conduction en fonction du largeur de puits avec plusieurs concentrations de Sb pour les deux structure InAsSb/InP et InAsSb/GaAs. Comme $\lambda = hv/E_{tr}$, la longueur d'onde augmente avec l'élargissement de puits à cause de la réduction de l'énergie de transition E_{tr} et aussi avec l'augmentation de la concentration de Sb dans le puits qui diminue l'énergie de transition par la réduction du gap de la couche active InAsSb.

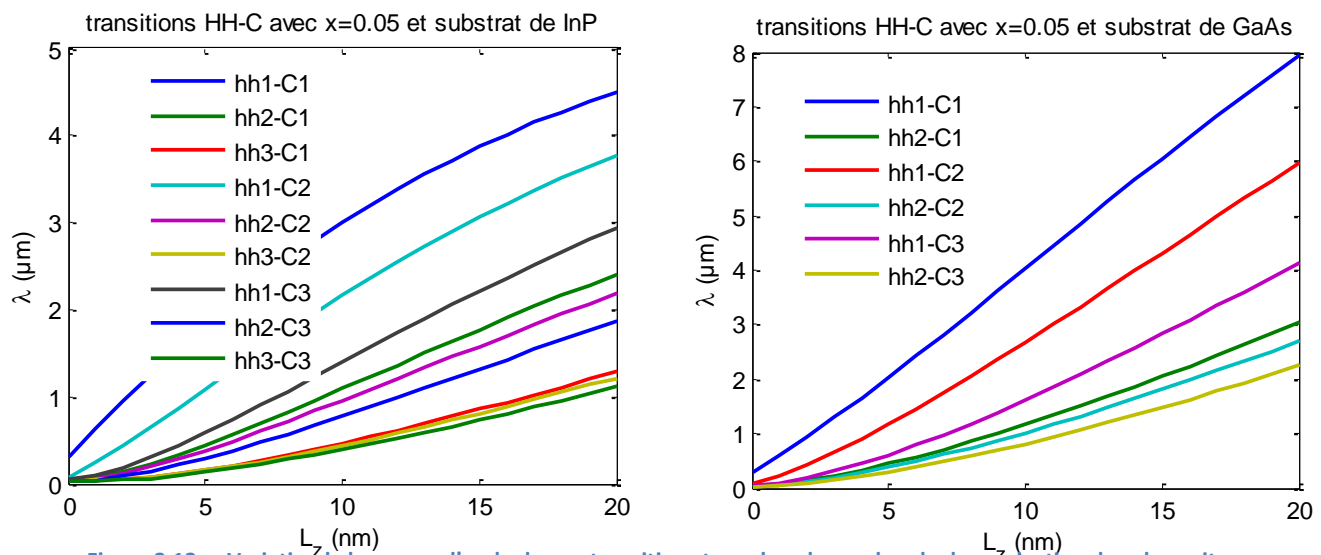


Figure 3.13.a. Variation la longueur d'onde du aux transitions trous lourds vers bande de conduction dans les puits InAsSb/InP, InAsSb/GaAs en fonction L_z avec $x = 0.05$.

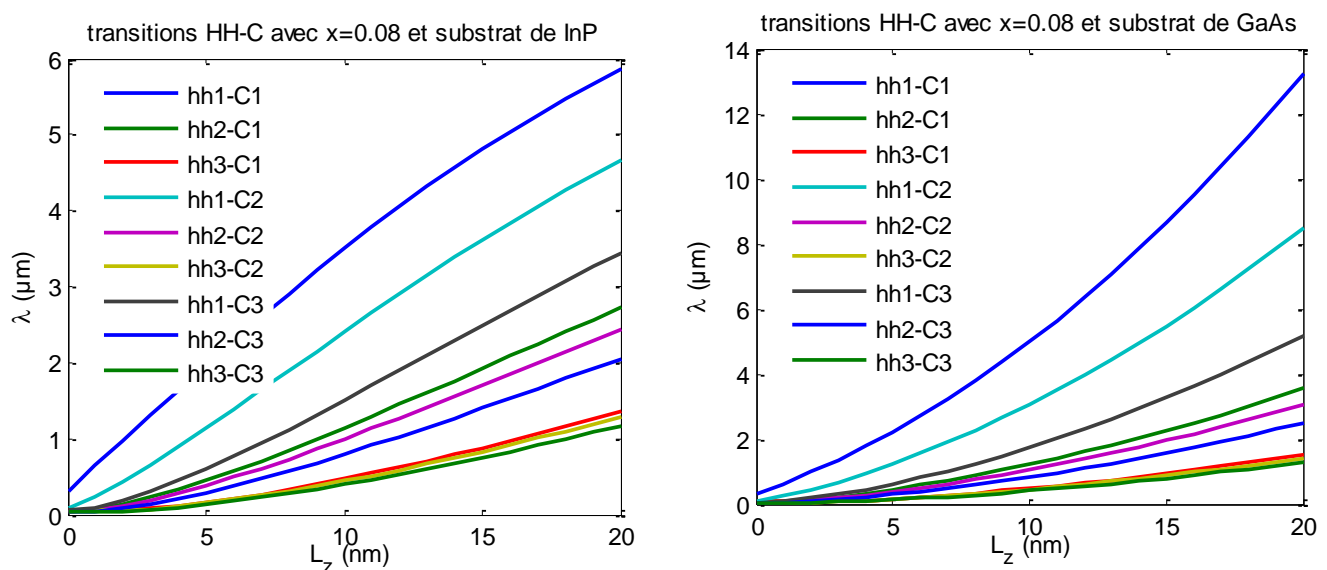


Figure 3.13.b. Variation la longueur d'onde du aux transitions trous lourds vers bande de conduction dans les puits InAsSb/InP, InAsSb/GaAs en fonction L_z avec $x = 0.08$

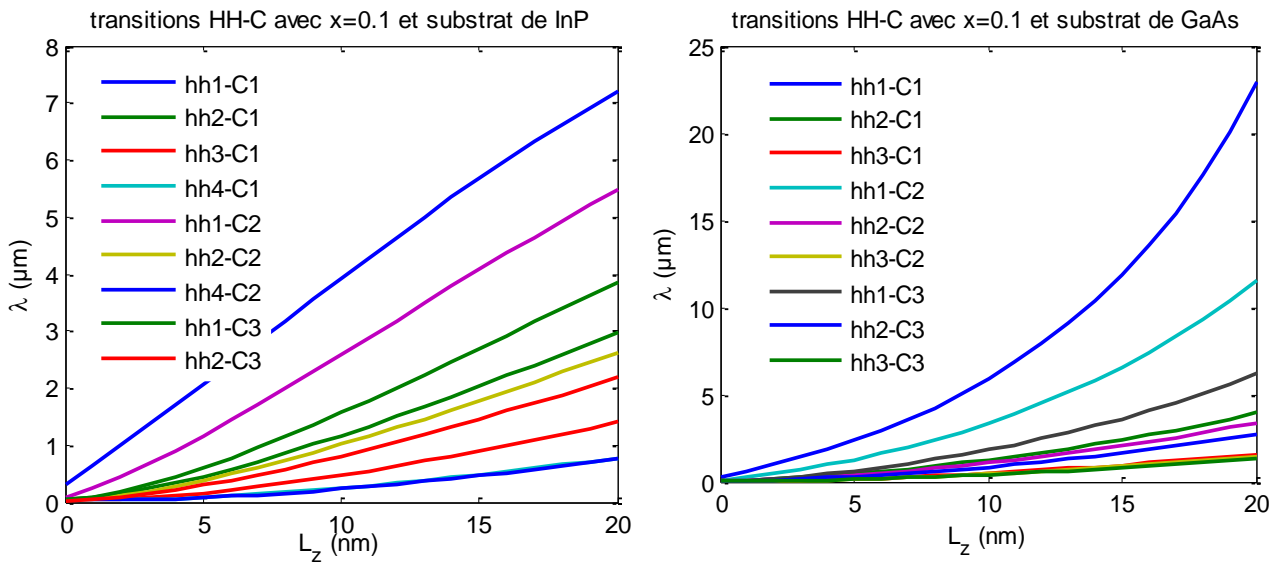


Figure 3.13.c. Variation la longueur d'onde du aux transitions trous lourds vers bande de conduction dans les puits InAsSb/InP, InAsSb/GaAs en fonction L_z avec $x= 0.10$.

3.13. Longueur d'onde due aux transitions bande de conduction vers trous légers

La variation de la longueur d'onde d'émission due aux transitions sous bande trous légers vers la bande de conduction en fonction du largeur de puits avec plusieurs concentrations de Sb pour les deux structure InAsSb/InP et InAsSb/GaAs sont illustrées par les figure 3.14. La longueur d'onde d'émission augmente avec l'élargissement du puits dans les deux structures à cause de la réduction de niveaux de confinement. Avec l'augmentation de la concentration de Sb dans l'alliage InAsSb, on a une deuxième augmentation de la longueur d'onde due à la réduction de la bande interdite de la couche active InAsSb. Comme la variation des niveaux de transition et grande, on a un large choix de longueur d'onde d'émission.

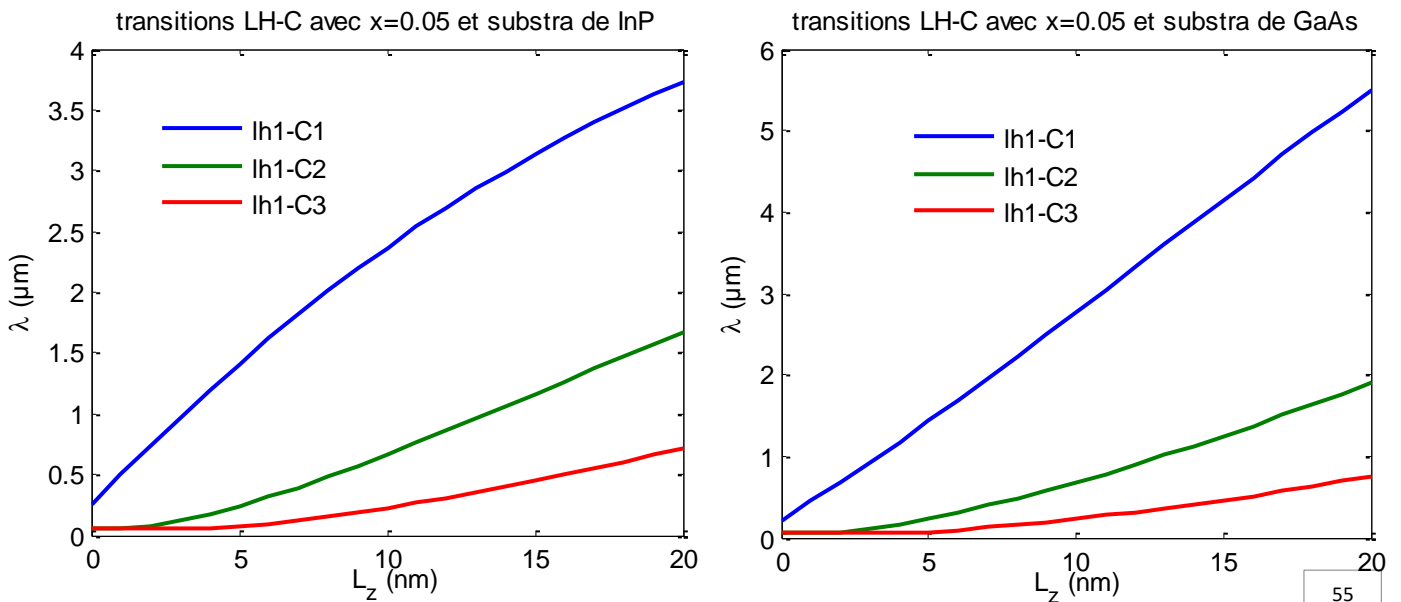


Figure 3.14.a. Variation la longueur d'onde du aux transitions trous légers vers bande de conduction dans les puits InAsSb/InP, InAsSb/GaAs en fonction L_z avec $x= 0.05$.

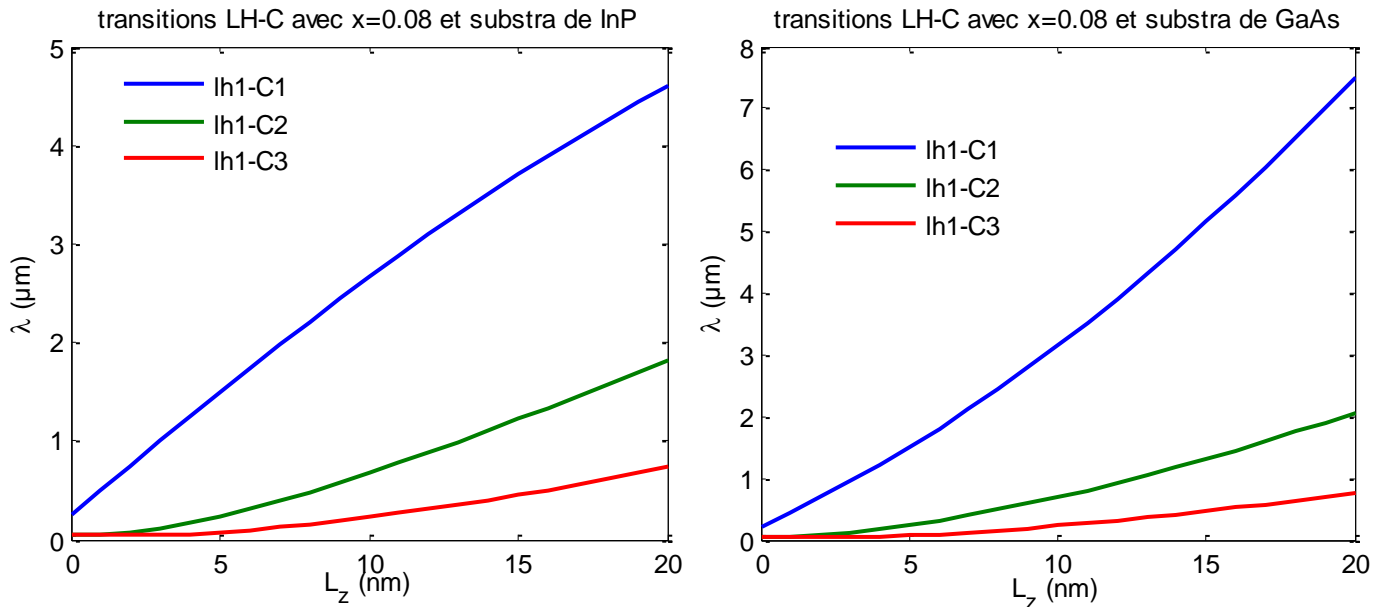


Figure 3.14.b. Variation la longueur d'onde du aux transitions trous légers vers bande de conduction dans les puits InAsSb/InP, InAsSb/GaAs en fonction L_z avec $x = 0.08$.

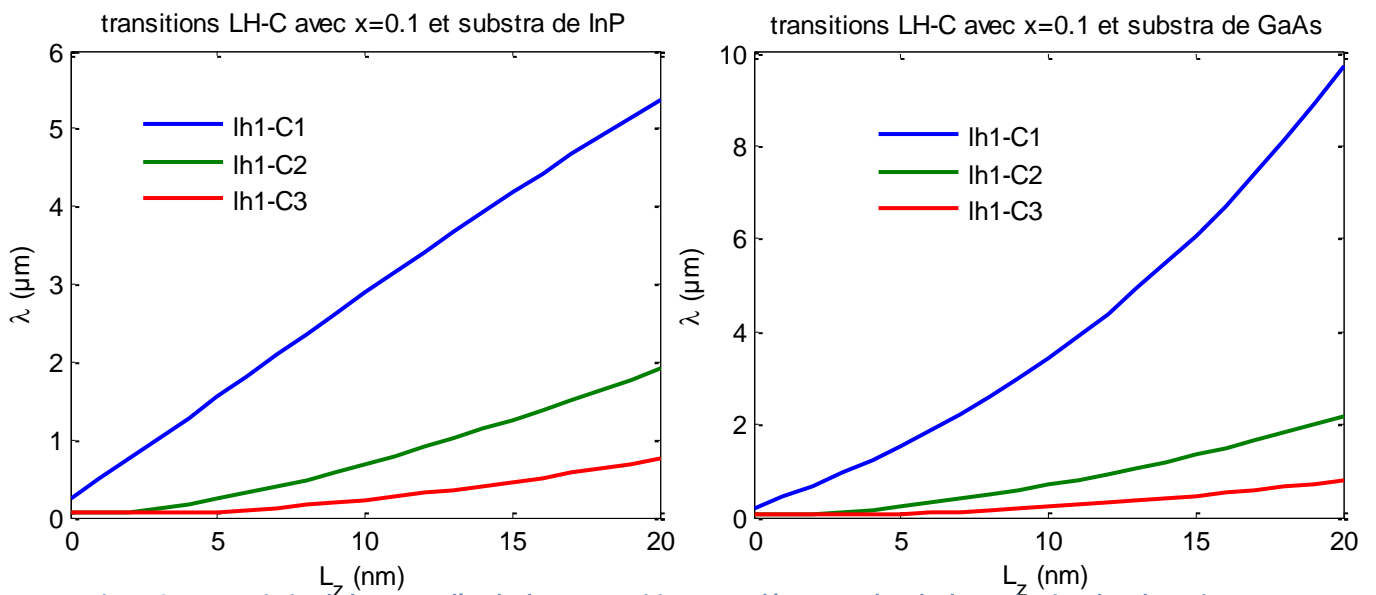


Figure 3.14.c. Variation la longueur d'onde du aux transitions trous légers vers bande de conduction dans les puits InAsSb/InP, InAsSb/GaAs en fonction L_z avec $x = 0.08$.

3.14 Le gain optique

3.14.1 Gain optique avec plusieurs concentrations de l'antimoine

La figure 3.15, illustre la variation du gain optique des deux structures InAsSb/InP et InAsSb/GaAs en fonction de la longueur d'onde λ pour plusieurs concentrations de l'antimoine dans l'alliage InAsSb avec une largeur de puits $L = 4$ nm, à $T = 300\text{K}$ et une concentration d'électron $N = 3 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-3}$.

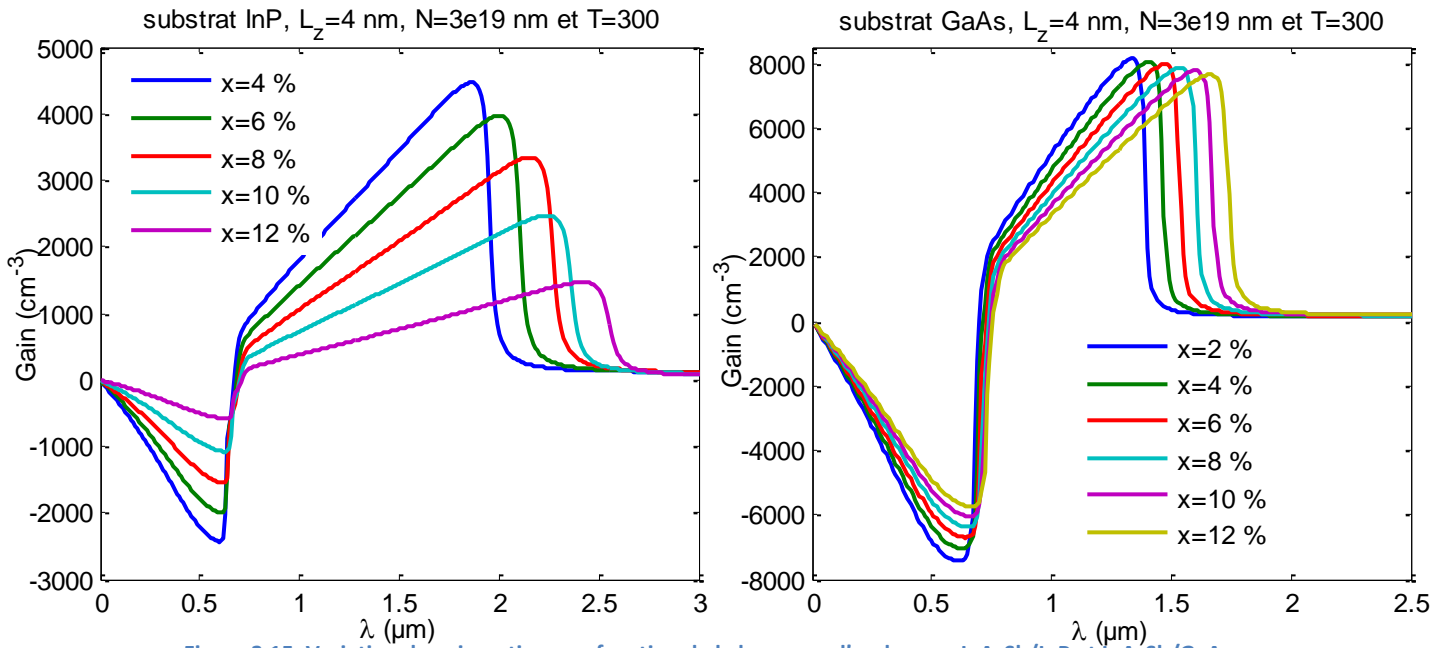


Figure 3.15. Variation du gain optique en fonction de la longueur d'onde pour InAsSb/InP et InAsSb/GaAs avec plusieurs fractions de l'antimoine.

Avec l'augmentation de la concentration de l'antimoine, on remarque un élargissement avec un décalage du gain optique vers les $1.55 \mu\text{m}$ pour la structure InAsSb/GaAs et dépasse les $2 \mu\text{m}$ par la structure InAsSb/InP. Ce décalage est dû à la réduction de la bande interdite de la couche active InAsSb causée par la contrainte aussi l'élargissement est accompagné par l'apparition de nouveaux niveaux de confinement qui donnent de nouvelles longueurs d'onde d'émission. Dans la structure InAsSb /InP le nombre de niveau de confinement est plus important que celui de InAsSb/GaAs et pour la même injection ($N = 3 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-3}$) et avec l'augmentation de Sb on observe une réduction de l'amplitude du gain optique plus importante car la densité des électrons est répartie sur un nombre plus grand de niveaux de confinement.

3.14.2 Gain optique avec plusieurs densités d'injection N

La figure 3.16 représente la variation du gain optique des deux structures InAsSb/InP et InAsSb/GaAs en fonction de la longueur d'onde λ pour plusieurs densités d'injection N avec une largeur de puits $L = 4 \text{ nm}$, à $T = 300\text{K}$ pour une concentration de Sb égale 5%.

Avec l'augmentation de la densité d'injection on a un élargissement de la gamme d'émission à cause de la saturation des niveaux de confinement supérieur dans la bande de conduction et un accroissement de l'amplitude du gain optique pour qu'il atteigne la saturation entre 4 et $6 \cdot 10^{19}$ pour les deux structures. Avec des densités d'injection importantes, On remarque

l'apparition de pics en amplitude dans les longueurs d'onde inférieures, cet aspect est expliqué par l'activation de niveaux de confinement plus supérieurs.

L'injection d'électron permet une augmentation la puissance ($h\nu$) mais les densités importantes d'électron provoquent une détérioration du matériau de la couche active puisque les électrons dégagent de la chaleur ce qui peut conduire à une température trop élevée.

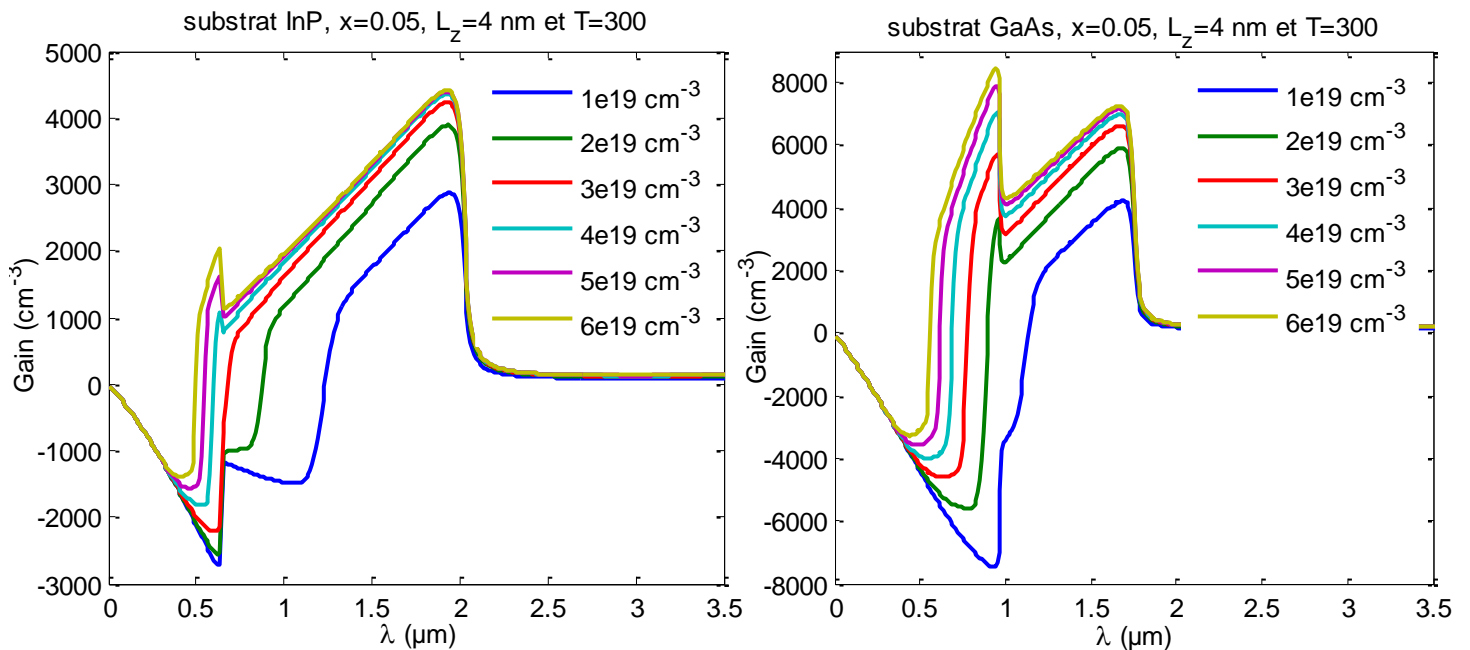


Figure 3.16. Variation du gain optique en fonction de la longueur d'onde pour InAsSb/InP et InAsSb/GaAs avec plusieurs densités d'injection.

3.14.3 Gain optique avec plusieurs largeurs de puits L_z

La figure 3.17 montre la variation du gain optique des deux structures InAsSb/InP et InAsSb/GaAs en fonction de la longueur d'onde λ pour plusieurs larguer de puits avec une injection $N=4.10^{19} \text{ cm}^{-3}$, à $T = 300\text{K}$ pour une concentration de Sb égale 5%.

Si on augmente l'épaisseur de la couche active InAsSb, on constate dans les deux structures un élargissement du gain optique avec une réduction de leur amplitude. L'augmentation de la largeur du puits quantique provoque une réduction de l'énergie de transition et induit l'apparition de nouveaux niveaux de confinement ce qui créé de nouvelle longueur d'onde d'émission donc un spectre d'émission plus large. En revanche si on garde la même densité d'injection N , l'amplitude du gain est réduite car cette densité va être confinée sur un nombre de niveau de confinement plus important.

Aussi avec l'élargissement de puits quantique, On remarque une apparition de pics dans les longueurs d'onde inférieures, ce phénomène est expliqué par la réduction et l'activation des niveaux de confinement supérieurs.

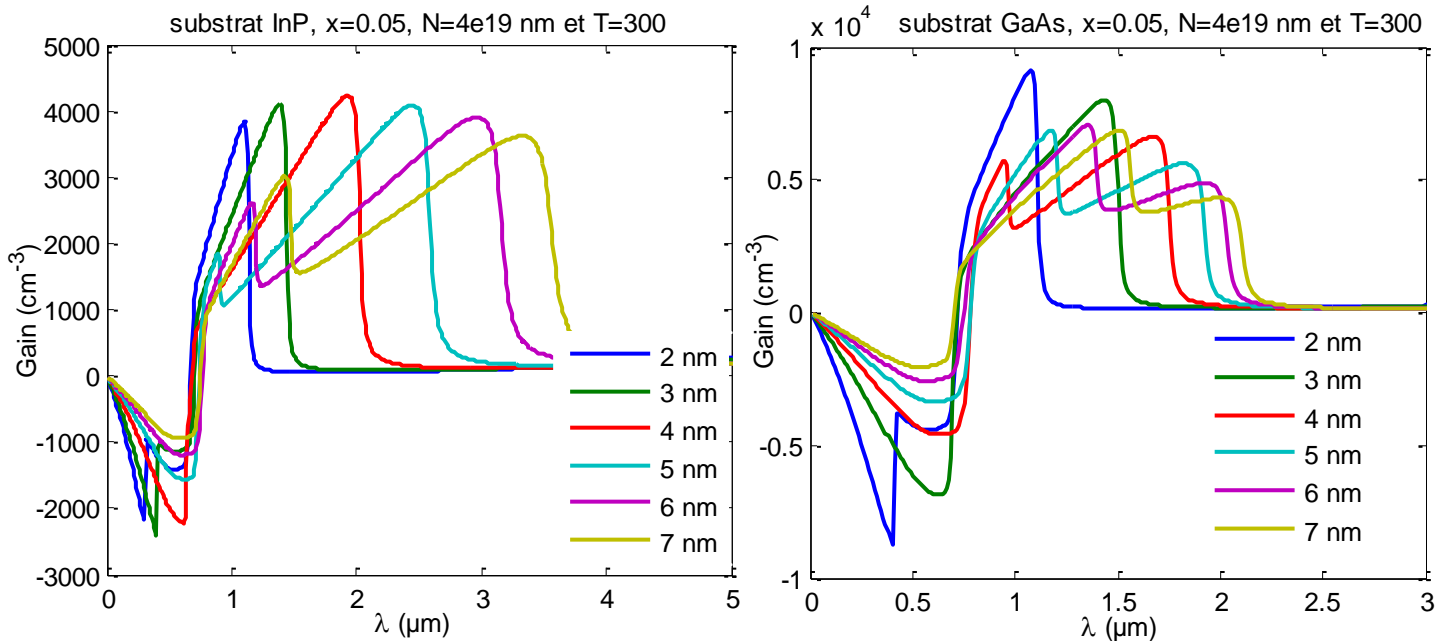


Figure 3.17. Variation du gain optique en fonction de la longueur d'onde pour InAsSb/InP et InAsSb/GaAs avec plusieurs largeurs de puits.

3.15. Conclusion

Dans ce chapitre, nous nous sommes intéressés à l'optimisation de la concentration de Sb dans la couche active, la longueur de puits quantique ainsi que l'injection afin d'avoir des longueurs d'onde d'émission exploitables par la télécommunication avec un gain optique important.

Dans la première partie de ce chapitre, on a étudié l'effet de l'introduction de Sb sur les propriétés physique des deux structures InAsSb/InP et InAsSb/GaAs :

- L'incorporation de Sb, augmente la contrainte créée entre la couche active InAsSb et les deux substrats GaAs et InP, l'alliage InAsSb est soumis à une contrainte compression sur le deux substrats InP et GaAs quel que soit la concentration de l'antimoine, la contrainte créée avec le GaAs est plus importante que celle créée avec InP.

- La simulation de l'épaisseur critique, montre que la couche active InAsSb sur le InP doit pas dépassée 8 μm et les 2 μm sur le GaAs afin d'éviter la distorsion à l'interface de contact.
- L'évolution des barrières de potentiel montre que pour les deux structure nous avons un puits quantique de type I quelque soit la concentration de l'antimoine dans la couche active InAsSb.

Dans la deuxième partie, on a procédé à quantification des niveaux d'énergie et la simulation de l'effet de la contrainte sur le gap de la couche active dans le but de déterminer l'énergie de transition et la longueur d'onde d'émission :

- La contrainte décale les bande d'énergie ce qui donne de gap trous lourd et trous légers avec $E_{g_{hh}} < E_{g_{lh}}$ pour les deux structures, ces deux gaps diminuent avec la contrainte et aussi par l'introduction de l'antimoine qui favorise l'éclatement de la bande de valence en deux sous bande.
- Les niveaux de confinement diminuent avec l'élargissement de puits quantique ainsi qu'avec l'augmentation de la densité de Sb dans le puits. Alors que le nombre de niveaux de confinement augmente par l'élargissement de puits et la variation de Sb.
- Comme les niveaux de confinement diminuent avec l'élargissement de puits aussi la bande interdite de la couche active avec l'incorporation de Sb, l'énergie de transition diminue aussi car égale à la somme de ces énergies, cette réduction énergétique décale λ vers des valeurs supérieures.

La troisième et la dernière partie de ce chapitre a été consacrée à la simulation et l'interprétation du gain optique des deux structures InAsSb/InP et InAsSb/GaAs :

- Pour la variation de la concentration de Sb, le gain de la structure InAsSb/InP dépasse les 2 μm alors qu'il décale vers le 1.55 μm pour la structure InAsSb/GaAs. Ces décalages sont causés par la diminution de l'énergie de la bande interdite de la couche active. L'antimoine élargie aussi la gamme d'émission par la réduction des niveaux de confinement.
- L'injection augmente l'amplitude du gain optique se qui résulte une puissance d'émission importante. on a constaté l'apparition des pics dans les longueurs d'onde

inférieurs pour des densités d'injections importante, ce qui a été expliquée par l'activation de niveaux de confinement supérieurs.

- Avec l'augmentation de l'épaisseur de la couche active on obtient un décalage du gap vers les longueurs d'onde supérieures, ce décalage est dû à la réduction de l'énergie de transition avec la variation de l'épaisseur L_z . Aussi l'élargissement de puits diminue les niveaux de confinement ce qui provoque l'apparition de nouvelles énergies de transition donc de nouvelles longueurs d'onde d'émission.

Si on compare les deux structures on peut constater que :

- L'amplitude du gain obtenu par la structure InAsSb/GaAs dépasse d'environ 70000 cm^{-3} , ce qui donne une puissance plus importante.
- Avec la variation de la concentration de Sb dans la couche active et l'élargissement de puits dans les deux structures, nous avons trouvé que la gamme d'émission de la structure InAsSb/InP est toujours supérieure à celle de InAsSb/GaAs, ce qui donne un large choix de longueur d'onde et favorise l'utilisation de substrat InP.
- Pour les mêmes concentrations de Sb, la première structure InAsSb/InP donne une gamme d'émission plus importante et avec des épaisseurs de puits plus faibles que la deuxième structure InAsSb/GaAs donc une faible quantité du matériau ternaire InAsSb utilisée, donc le prix de la première structure est inférieur par rapport à la deuxième.

Conclusion générale

Les semi-conducteurs III-V à base de l'antimoine occupe une classe importante dans la télécommunication.

Notre travail a eu comme objectif principal l'optimisation d'un laser à base de deux hétérostructures InAsSb/GaAs et InAsSb/InP basées sur une nouvelle famille III-V à base de l'antimoine. Des résultats intéressants sont obtenus et qui sont en bon accord avec les travaux de recherche actuels dans le domaine. Ce dernier qui reste toujours vaste et où l'exploitation de toutes les caractéristiques des lasers à puits quantique n'est encore pas achevée.

Dans le premier chapitre, nous avons pu présenter les caractéristiques principales des semi-conducteurs III-V, leurs notions relatives par un rappel sur leurs propriétés structurales. Nous avons ainsi évoqué leurs intérêts dans le domaine optoélectronique et leur importance dans la vie quotidienne.

Au second chapitre, nous avons présenté les effets de la contrainte et les différents paramètres comme l'épaisseur critique, le gap, les barrières de potentiel, les niveaux de confinement et l'effet de l'éclatement sur la bande de valence. A la fin de cette partie on a présenté le modèle mathématique pour le calcul de gain optique.

Le troisième chapitre à été consacré à la présentation et l'analyse détaillée de l'effet de l'introduction de Sb sur les propriétés physique des deux structures InAsSb/InP et InAsSb/GaAs. Ensuite, nous avons a procédé à quantification des niveaux d'énergie et la simulation de l'effet de la contrainte sur le gap de la couche active dans le but de déterminer l'énergie de transition et la longueur d'onde d'émission. En fin, nous nous sommes basés sur les résultats obtenus le long de ce travail pour proposer des structures émettant à $1.55\mu\text{m}$, et présentant de bonnes caractéristiques.