

**UNIVERSITE SAAD DAHLED DE BLIDA**

**Faculté des Sciences de l'Ingénieur**  
Département d'électronique

**MEMOIRE DE MAGISTER**

Spécialité : Communication

**MODELISATION ET SIMULATION D'UNE STRUCTURE A  
MULTIPICTS QUANTIQUES A BASE DE GaInAs(N,Sb)/GaAs**

Par

**SEGHILANI MOHAMED SEGHIR**

Devant le jury composé de :

A. GUESSOUM	Professeur, U. de Blida	Président
S. NACER	Maitre de conférences A, U. de Blida	Examineur
K. FERDJANI	Professeur, U. de Blida	Examineur
M.FATHI	Maître de recherche, UDES Bousmail	Examineur
A. AISSAT	Professeur habilité, U. de Blida	Rapporteur

Blida, juin 2011

## ملخص

هذا العمل يتضمن دراسة بنية خماسية نيترو جينية، متكونة من عدة آبار كمونية متقلصة  $Ga_xIn_{1-x}N_yAs_{1-y}Sb_z/GaAs$ ، لقد قمنا بدراسة عملية إدخال النتروجين والانيمونيد في الثلاثي النصف ناقل. لقد وجدنا بأن إضافية كمية صغيرة من النتروجين تؤدي إلى انفجار شريط التوصيل بينما الأنتيمونيد يؤدي إلى انفجار شريط التكافؤ و هذا الانفجار يؤدي إلى تقلص في الشريط الممنوع، مما يؤدي إلى الحصول على طول الموجة 1.55 ميكرومتر. و درسنا كذلك مدى تأثير التقلص على بنية شريط الطاقة. لقد قمنا بحساب طول الموجة بدلالة عرض البئر و تركيبة مكوناته  $x$  ( قليوم) و  $y$  (نيتروجين)  $z$  (أنتيمونيد) باتخاذ عين اعتبار التقلص، عرض البئر، تأثير النتروجين و الأنتيمونيد، لقد تمكنا من الحصول على الموجة 1.55 ميكرومتر بتغيير عرض البئر و مكوناته ثم قمنا بحساب تيار العتبة و طاقة الإشعاع.

## RESUME

Ce travail porte sur la modélisation d'une structure quinaire nitrurée, à base d'un puits quantique contraint " $Ga_xIn_{1-x}N_yAs_{1-y-z}Sb_z$ ". Nous avons étudié d'abord l'effet de l'introduction de l'azote et de l'antimoine dans les alliages ternaires GaInAs. En effet, l'incorporation d'une faible composition d'azote provoque un éclatement de la bande de conduction en deux sous bandes tandis que l'antimoine provoque l'éclatement de la bande de valence. Sous l'effet de cet éclatement, il y a réduction de la bande interdite, ce qui est très intéressant pour l'obtention de la longueur d'onde  $1.55\mu m$  (fenêtre pour fibre optique). Nous avons également étudié l'effet de la contrainte sur la structure de bande, et en particulier sur la bande de conduction. Nous avons calculé la longueur d'onde d'émission en fonction de la largeur du puits et des compositions  $x$  (Gallium),  $y$  (Azote),  $z$  (Antimoine) en prenant en considération l'influence de la contrainte, la température et la largeur du puits. Par la suite nous avons calculé le gain optique pour déterminer et étudier le courant de seuil et la puissance optique générée en fonction de différents paramètres de la structure.

## ABSTRACT

This work consists of modeling of quinary nitride structure "strained quantum well" $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{N}_y\text{As}_{1-y-z}\text{Sb}_z$ ". We have studied the effect of incorporating nitrogen and Antimony into ternary semiconductor III-V alloys. Indeed it has been found that incorporating composition of N leads to a splitting of the conduction band into two sub bands and incorporation of Antimony leads to valence band splitting . This separation leads to a reduction of the fundamental band gap which is interesting for getting a  $1.55\mu\text{m}$  wavelength optical fiber window. We have also studied the effect of strain in the band structure particularly the conduction band. We have calculated the x (Gallium), y (nitrogen) z(Antimony) compositions taking into account the effect of the strain, the temperature, the nitrogen, the well width. Then we calculated and studied the optical gain to determine the threshold current and optical power generated according to different parameters of the structure.

## **REMERCIEMENTS**

Ce travail de mémoire a été réalisé à l'institut d'électronique, au sein du laboratoire LASICOM.

Au terme de cette étude, nous tenons à exprimer nos sincères remerciements à toutes les personnes qui nous ont aidés à accomplir ce travail dans de bonnes conditions.

Nous remercions les enseignants du département d'électronique et les membres du jury d'avoir accepté de juger le présent travail.

Nous tenons à témoigner notre sincère reconnaissance à M.Aissat Abdelkader qui a encadré ce travail avec compétence et disponibilité.

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

# SOMMAIRE

RESUME.....	
REMERCIEMENTS.....	
SOMMAIRE.....	
LISTE DES ILLUSTRATIONS GRAPHIQUES.....	
INTRODUCTION.....	12
1. THEORIE DES PUIITS QUANTIQUES CONTRAINTS.....	14
1.1 Notions fondamentales sur les Semiconducteurs.....	14
1.1.1 La fonction d'onde d'électron.....	15
1.1.2 Structure cristalline.....	17
1.1.2.1 La structure Zinc-blende.....	17
1.1.2.2 La structure wurtzite.....	18
1.1.3 Masses effectives des électrons et des trous.....	18
1.2 L'énergie de gap .....	19
1.2.1 Gap direct.....	19
1.2.2 Gap indire.....	19
1.2.3 Effet de la température sur le gap.....	20
1.2.4 La renormalisation.....	21
1.3 Les hétérostructures .....	21
1.3.1 Les puits quantiques.....	22
1.3.2 Confinement à saut d'indice (SCH) .....	24
1.3.3 Confinement à indice graduel (GRINSCH) .....	24
1.3.4 Les multi-puits quantiques .....	25
1.4 Les puits quantiques sous contraintes .....	25
1.4.1 Notion de couche contrainte .....	26
1.4.2 Epaisseur critique .....	27
1.4.3 Effet de la contrainte sur le gap .....	29
1.5 Conclusion .....	34
2.LES NOUVEAUX MATERIAUX (Ga,In)(N,As,Sb).....	35
2.1 Différentes approches III-N-V .....	35
2.2 Les alliages GaNAs, GaInNAs, GaNAsSb .....	35
2.2.1 L'alliage quaternaire GaInNAs.....	37
2.2 L'alliage quaternaire GaNAsSb.....	37

2.2.3 L'alliage quinaire GaInNAsSb.....	38
2.3 Modèle d'anticroisement de bandes.....	39
2.3.2 La bande de valence .....	41
2.4 Etude des paramètres de l'alliage .....	42
2.4.1 Le paramètre de maille .....	43
2.4.2 La contrainte .....	44
2.4.3 Calcul de la bande interdite .....	48
2.4.4 Dépendance du gap en température .....	52
2.4.5 Les discontinuités de bandes.....	53
2.5 Conclusion .....	57
3.CALCUL DES ENERGIES DE TRANSITION.....	59
3.1 La méthode $k_p$ .....	59
3.1.1 L'hamiltonien contraint .....	61
3.1.2 Modèle à trois bandes .....	62
3.2 Méthode de Galerkin.....	63
3.2.1 Présentation .....	63
3.2.2 Principe et mise en œuvre.....	64
3.2.3 Validation du modèle .....	70
3.2.4 Calcul de la longueur d'onde .....	70
3.3 Conclusion .....	72
4.CALCUL DU GAIN OPTIQUE ET DU COURANT DE SEUIL.....	73
4.1 Modèle de calcul du gain optique .....	73
4.1.1 La règle de sélection en K .....	75
4.1.2 La règle de sélection en nombre quantique .....	75
4.1.3 Les fonctions d'occupation de Fermi .....	76
4.1.4 La matrice de transition .....	77
4.1.5 La fonction d'élargissement .....	78
4.2 Simulation et discussion des résultats .....	79
4.2.1 Influence de l'injection .....	79
4.2.2 Influence de la température .....	80
4.2.3 Influence de la largeur du puits .....	81
4.3 Calcul du gain max .....	82

4.4 Calcul du courant de seuil .....	84
4.4.1 Expression générale du courant de seuil .....	84
4.4.1.1 Calcul de la puissance.....	86
4.4.1.2 L'indice de réfraction du puits quantique.....	86
4.4.1.3 Le facteur de confinement .....	89
4.4.2 La recombinaison Auger .....	91
4.4.2.1 Les principaux mécanismes de recombinaison Auger .....	91
4.4.3 Simulation et discussion des résultats .....	93
4.5 Conclusion .....	101
CONCLUSION .....	102
ANNEXE.....	104
REFERENCES.....	105

## LISTE DES ILLUSTRATIONS GRAPHIQUES

Figure 1.1 : Représentation schématique de la fonction électronique dans un cristal	16
Figure 1.2 : Comparaison des différentes représentations de la fonction de dispersion d'énergie $E(\vec{k})$	17
Figure 1.3 : Représentation d'un cristal de Zinc blende avec le paramètre de maille $a_0$	17
Figure 1.4 : Structure de wurtzite avec les paramètres de maille $a_0$ et $c_0$ constituée de deux sous-réseaux hexagonaux N et Ga	18
Figure 1.5 : Illustration des transitions	20
Figure 1.6 : Niveaux d'énergie $E_n$ , fonction d'onde $\phi_m$ et la dispersion d'énergie $E_m^t(k_x, k_y)$ et la densité d'état dans un puits quantique	32
Figure 1.7 : Schématisation d'une structure de type SCH	24
Figure 1.8 : Schématisation d'une structure de type GRINCH	25
Figure 1.9 : Schématisation d'une structure à multipuits quantiques	25
Figure 1.10 : Illustration des deux types de déformation, (a) couche en tension ( $a_s > a_e$ )	27
Figure 1.11 : Schéma montrant une couche contrainte en compression (a) et Une couche contrainte relaxée (b)	28
Figure 1.12 : La contrainte dans le cas d'une DHS	28
Figure 1.13 : Décalage et déformation des bandes d'énergie du GaAs pour une contrainte compressive, nulle, et des couches en tension. Les axes verticaux donnent l'énergie en eV et les axes longitudinaux donnent les vecteur d'onde $k_x$ et $k_z$ dans un périmètre de 20% de la zone de Brillouin.	31
Figure 1.14 : Déformation du potentiel dans un puits quantique en fonction de la contrainte. (cas de la compression)	33
Figure 2.1 : Energie de gap en fonction du paramètre de maille pour les alliages III – Arsenic, et montrant les lignes de l'accord de maille avec le GaAs et l'InP	36
Figure 2.2 : Effet de l'azote sur l'intensité d'émission dans un puits quantique contraint à base de $GaNAs/GaAs$	38
Figure 2.3 : Paramètre de maille en (Å), en fonction des paramètres de composition d'indium (x) et d'azote (y) pour $Z(Sb)=0.06$ .	43
Figure 2.4 Paramètre de maille en (Å), en fonction des paramètres de composition d'azote (y) et d'antimoine (z), pour $x(In)=0.3$	44



Figure 2.5 : Courbes iso-contrainte en fonction de $x, y$ pour $z=0.06$ : concentrations d'Indium, d'azote et d'antimoine respectivement	45
Figure 2.6 : Courbes iso-contrainte en fonction de $y, z$ pour $x=0.3$ : concentrations d'azote d'indium et d'antimoine respectivement	46
Figure 2.7 : Epaisseur critique en ( $\text{Å}$ ), en fonction de la concentration de l'azote pour différentes fractions d'indium pour $z = 12\%$	46
Figure 2.8 : Epaisseur critique en ( $\text{Å}$ ), en fonction de la concentration de l'azote pour différentes fractions d'antimoine	47
Figure 2.9 : évolution de l'épaisseur critique en ( $\text{Å}$ ), en fonction de la concentration de l'indium pour différentes fractions d'antimoine	47
Figure 2.10 : Les bandes d'énergie dans une structure à puits quantique, avant et après éclatement de la bande de conduction et de la bande de valence	48
Figure 2.11 : Courbes iso-gap en fonction de $x, y$ pour $z=0.04$ : concentrations d'indium d'azote et d'antimoine respectivement	49
Figure 2.12 : Courbes iso-gap en fonction de $y, z$ pour $x=0.3$ : concentrations d'azote d'antimoine et d'indium respectivement	49
Figure 2.13 : Comparaison de variation de l'énergie de gap avec le pourcentage d'azote obtenu par simulation et par mesures de spectroscopie	51
Figure 2.14 : Comparaison de variation de l'énergie de gap avec le pourcentage d'azote obtenu par simulation et par mesures de spectroscopie	51
Figure 2.15 : Comparaison de variation de l'énergie de gap avec le pourcentage d'azote obtenu par simulation et par mesures d'électroréflectance	52
Figure 2.16 : Evolution de l'énergie de la bande interdite en fonction de la température, pour $x=0.3, z=0.12$	53
Figure 2.17 : Courbes de $\Delta E_c$ (eV) en fonction des paramètres de composition $y, z$ pour $x=0.3$	54
Figure 2.18 : Courbes de $\Delta E_v$ (eV) en fonction des paramètres de composition $y, z$ pour $x=0.3$	55
Figure 2.19 : Courbes de $Q_c$ en fonction des paramètres de composition $y, z$ pour $x=0.3$	56
Figure 2.20 : Courbes de $Q_c$ en fonction des paramètres de composition $y, z$ pour $x=0.3$	56
Figure 2.21 : évolution des taux de confinement $Q_c, Q_v$ en fonction de la concentration de l'antimoine obtenus par simulation et par mesures de spectroscopie [55]	57
Figure 3.1 : Puits de potentiel asymétrique $V_g, V_d$ sont les potentiels de gauche et de droite respectivement	64
Figure 3.2 : Evolution de l'énergie des électrons dans le puits quantique à base de $\text{Ga}_{0.7}\text{In}_{0.3}\text{N}_{0.025}\text{As}_{0.955}\text{Sb}_{0.02}$ à $T = 300^\circ\text{K}$	67
Figure 3.3 : Evolution de l'énergie des électrons dans le puits quantique à base de $\text{Ga}_{0.7}\text{In}_{0.3}\text{N}_{0.025}\text{As}_{0.855}\text{Sb}_{0.12}$ à $T = 300^\circ\text{K}$	67
Figure 3.4 : Evolution de l'énergie des électrons dans le puits quantique à base de $\text{Ga}_{0.7}\text{In}_{0.3}\text{N}_{0.01}\text{As}_{0.87}\text{Sb}_{0.12}$ à $T = 300^\circ\text{K}$	68

Figure 3.5 : Evolution de l'énergie des trous lourds dans le puits quantique à base de $Ga_{0.9}In_{0.1}N_{0.025}As_{0.975-z}Sb_z$ à $T = 300^\circ K$	69
Figure 3.6 : Evolution de l'énergie des trous lourds dans le puits quantique à base de $Ga_{1-x}In_xN_{0.03}As_{0.85}Sb_{0.12}$ à $T = 300^\circ K$	69
Figure 3.7 : Comparaison de variation de l'énergie de transition avec le pourcentage d'antimoine obtenu par simulation et par mesures de spectroscopie	70
Figure 3.8 : La longueur d'onde en fonction de la largeur de puits, à $T = 300^\circ K$	71
Figure 3.9 : La longueur d'onde en fonction de la largeur de puits, à $T = 300^\circ K$	72
Figure 4.1 : Spectre du gain optique TE à $T=300K$ pour une structure $GaIn_{0.38}N_{0.025}AsSb_{0.08}$	79
Figure 4.2 spectre du gain optique TE et TM à $T=300K$ pour une structure $GaIn_{0.38}N_{0.025}AsSb_{0.08}$	80
Figure 4.3 : Spectre du gain optique pour la structure $Ga_{0.62}In_{0.38}N_{0.025}As_{0.855}Sb_{0.12}$ $L_z = 60A^\circ, N = 5.10^{18}cm^{-3}$ pour plusieurs températures	81
Figure 4.4 : Spectre du gain optique pour la structure $Ga_{0.62}In_{0.38}N_{0.032}As_{0.868}Sb_{0.1}$ $N = 5.10^{18}cm^{-3}, T = 300A^\circ$ pour plusieurs Largeurs de puits	82
Figure 4.5 : Gain max en fonction de l'injection pour la structure $Ga_{0.62}In_{0.38}N_yAs_{0.88-y}Sb_{0.12},$ $l_z = 80A^\circ T = 300A^\circ$ pour différente fractions d'azote	83
Figure 4.6 : Gain max en fonction de l'injection pour la structure $Ga_{0.62}In_{0.38}N_{0.032}As_{0.968-z}Sb_z,$ $l_z = 80A^\circ T = 300A^\circ$ pour différente fractions d'azote	83
Figure 4.7 : Indice de réfraction en fonction de la longueur d'onde pour plusieurs fractions d'indium pour la structure $y = 0.01, z = 0.12$	88
Figure 4.8 : Indice de réfraction en fonction de la longueur d'onde pour plusieurs fractions d'indium pour la structure $y = 0.01, z = 0.12$	88
Figure 4.9 : facteur de confinement optique en fonction de la largeur de la zone active pour différents nombre de puits à base de $Ga_{0.65}In_{0.35}N_{0.025}As_{0.85}Sb_{0.12}, l_z = 75A^\circ$	90
Figure 4.10 Gain modal max en fonction de la l'injection pour différents nombre de puits quantiques à base de $Ga_{0.65}In_{0.35}N_{0.025}As_{0.85}Sb_{0.12}, l_z = 75A^\circ$	91
Figure 4.11 : Schématisation des différents mécanismes Auger band-to-band	92
Figure 4.12 : Densité de courant Auger en fonction de la température pour la structure $x = 0.2, z = 0.12, l = 75A^\circ$ pour différentes fractions d'azote	94
Figure 4.13: Densité de courant Auger en fonction de la température pour la structure $x = 0.2, y = 0.02, l = 75A^\circ$ pour différentes fractions d'antimoine	94
Figure 4.14 : Densité de courant de seuil en fonction de la température pour la structure $x = 0.2, z = 0.12, l_z = 75A^\circ$ pour différentes fractions d'azote	95

- Figure 4.15: Densité de courant de seuil en fonction de la température pour la structure  $x = 0.2, y = 0.02, l_z = 75\text{\AA}$  pour différentes fractions d'antimoine 96
- Figure 4.16 : La puissance de la diode laser en fonction du courant de seuil pour plusieurs températures pour la structure  $x = 0.2, y = 0.023, z = 0.027, l_z = 75\text{\AA}$  et  $W = 20\ \mu\text{m}, L = 1222\ \mu\text{m}$  97
- Figure 4.17 : densité du courant de seuil en fonction de la température pour différents nombre de puits quantiques à base de  $Ga_{0.65}In_{0.35}N_{0.025}As_{0.85}Sb_{0.12}, l_z = 75\text{\AA}$  97
- Figure 4.18 : Densité du courant de seuil en fonction de la longueur d'onde déterminée par différents auteurs pour le  $GaInNAsSb/GaAs$  98
- Figure 4.19 : Densité du courant de seuil en fonction de la longueur d'onde déterminée par différents auteurs pour le  $GaInNAs/GaAs$  99
- Figure 4.20 : largeur de puits en fonction du pourcentage d'antimoine pour une émission à  $1.55\ \mu\text{m}$ , pour  $x(\text{In})=0.35$  100
- Figure 4.21 : Largeur de puits en fonction du pourcentage d'antimoine pour une émission à  $1.55\ \mu\text{m}$ , pour  $x(\text{In})=0.38$  100

## INTRODUCTION

Les composants optoélectroniques sont des éléments clés des réseaux de télécommunications qui sont désormais le système nerveux de notre planète, ils traversent les océans, relient les villes entre elles, connectent les foyers et les entreprises, ils nous permettent d'échanger de plus en plus d'informations, de plus en plus rapidement.

L'accroissement rapide des besoins en débit de transmission a conduit à introduire le multiplexage en longueur d'onde en supplément du multiplexage temporel offrant ainsi des capacités de transmission supérieures à 100 gigabits par seconde sur une seule fibre optique. Des débits de l'ordre du téra-bit par seconde apparaissent désormais comme prochains objectifs, nécessitant le développement de dispositifs optoélectroniques fonctionnant à très haut débit, compacts, non refroidis, peu onéreux, et émettant dans la fenêtre de transmission des fibres en silice ( $1.3\mu m - 1.55\mu m$ ).

Ces évolutions suscitent un foisonnement de travaux, tant sur les diodes lasers, élément clés traditionnels des systèmes de transmission, que sur de nouveaux dispositifs optoélectroniques : modulateur, régénérateur, commutateur, convertisseur en longueur d'onde, multiplexeur et démultiplexeur.

Malgré la diversité des fonctions, les travaux de conception et d'optimisation menés sur ces composants, tendent de façon similaire à tirer profit aux mieux des propriétés des matériaux semi-conducteurs, en améliorant les filières actuelles ou en développant de nouvelles filières d'alliages.

Depuis le début des années 90, l'avènement des structures à puits quantiques contraints, accompagné de l'apparition des nouveaux matériaux 'nitrides d'éléments *III-V*' aux caractéristiques très attrayantes, a permis d'accroître les potentialités des semiconducteurs et d'améliorer les performances des dispositifs. Ainsi les diodes laser, les photodétecteurs et les amplificateurs optiques, tout en conservant une excellente fiabilité, ont démontré un accroissement significatif de leur niveau de performance : diminution de la densité du courant de seuil et de la sensibilité en température, élargissement de la bande passante, réduction de la largeur de raie, et réalisation des d'amplificateurs optiques à faible bruit insensibles à la polarisation [1,2].

La réalisation de ces composants qui comprend l'épitaxie et la technologie auxquelles il faut ajouter la caractérisation pour évaluer leurs performances s'étend sur environ six mois.

Le coût de fabrication de ces composants est par ailleurs très élevé, il est donc préférable de pouvoir évaluer au mieux leurs performances avant de commencer le cycle de fabrication. C'est dans cet objectif que s'inscrit ce travail de mémoire, et porte sur la modélisation et la simulation de la structure à multipuits quantiques contraints à base de  $GaInNAsSb/GaAs$ .

Le premier chapitre est consacré aux notions fondamentales, et aux rappels théoriques constituant la base de la théorie des puits quantiques contraints, les concepts fondamentaux tels la fonction d'onde, la structure cristalline, les masses effectives...etc seront abordés.

Le chapitre II, porte sur les nouveaux matériaux  $(Ga, In)(N, As, Sb)/GaAs$ , nous développons leurs propriétés très particulières, ainsi que les nombreux avantages qu'ils présentent, nous mettons l'accent particulièrement sur l'incorporation de l'azote et de l'antimoine et les effets qui en résultent, en adoptant le modèle de VBAC qui va nous permettre d'établir la structure de bandes de ce nitrure d'éléments III-V.

Dans le chapitre III, nous présentons différentes méthodes de résolution de l'équation de Schrödinger dans le puits, afin d'en choisir la plus adaptée à notre structure, et l'utiliser par la suite pour calculer les états énergétiques confinés dans le puits quantique.

Enfin dans le chapitre IV nous calculons le gain optique et le courant de seuil du puits quantique, en faisant le bilan des transitions optiques qui se produisent entre les niveaux énergétiques, en vue d'étudier l'influence des différents paramètres de la structure.

## CHAPITRE 1

### THEORIE DES PUIITS QUANTIQUES CONTRAINTS

Dans ce chapitre nous allons aborder les principales caractéristiques des semi-conducteurs et la théorie permettant de les déterminer.

En premier lieu, nous verrons le concept fondamental de la fonction d'onde d'électron (fonction  $\Psi$ ), la dispersion d'énergie  $E(\vec{k})$  et les masses effectives. Puis une brève présentation de la fameuse méthode  $\vec{k} \cdot \vec{p}$  utilisée en optoélectronique pour calculer la structure de bande des semi-conducteurs.

Par la suite nous nous penchons sur les puits quantiques et plus particulièrement les puits quantiques sous contraintes, afin de voir les avantages qu'ils présentent et pour présenter brièvement la théorie nécessaire à la compréhension et la détermination des différentes caractéristiques de ce type de structures.

#### 1.1 Notions fondamentales sur les Semiconducteurs

En optoélectronique les matériaux de choix sont ceux qui permettent la manipulation de la lumière, du courant électrique et leur interaction. Les métaux sont d'excellents conducteurs mais ils sont opaques à la lumière, les verres permettent le guidage des ondes lumineuses mais ils sont des isolants électriques. Les semiconducteurs se situent entre ces deux types de matériaux puisqu'ils permettent à la fois de conduire le courant électrique et le guidage de la lumière.

La conduction du courant électrique est basée sur le mouvement des électrons ; et dans un semiconducteur la majorité des électrons sont liés aux atomes à l'exception de ceux qui parviennent à se libérer, et deviennent ainsi des électrons de conduction libres de bouger, et créant un nombre identique de porteurs de charges positives (trous) dans la bande de valence. Les deux types de porteurs (électrons et trous) sont séparés par l'énergie de gap; en effet un électron de la bande de valence doit recevoir une énergie égale à au moins  $E_g$  pour pouvoir « sauter » dans la bande de conduction. Dans les semiconducteurs cette énergie est de l'ordre de 1eV et elle peut être fournie par une onde lumineuse (photon) ayant une énergie  $E_{ph} = h\nu = \frac{hc}{\lambda}$ . L'énergie des photons doit être au moins égale à celle du gap pour pouvoir générer une paire électron-trou et vice versa. Cet échange d'énergie entre les électrons et les photons est le mécanisme clé en optoélectronique.

### 1.1.1 La fonction d'onde d'électron

Dans la mécanique classique l'électron est considéré comme une particule qui suit la loi de Newton, il est caractérisé par sa masse  $m_0$ , sa position  $r=(x,y,z)$  et sa vitesse  $\vec{v}$ .

Mais cette considération intuitive ne permet pas de décrire le comportement de l'électron dans le cristal solide où il est plus approprié de le considérer comme une onde (apparition de l'effet quantique), utilisant ainsi un des fondements de la mécanique quantique "la dualité onde-corpuscule" [3].

La fonction d'onde pour un électron libre peut être écrite comme une onde plane :

$$\Psi(\vec{k}, \vec{r}) = e^{i\vec{k}\vec{r}} = \cos(\vec{k}\vec{r}) + i \sin(\vec{k}\vec{r}) \quad (1.1)$$

avec le vecteur d'onde  $\vec{k} = (\kappa_x, \kappa_y, \kappa_z)$  qui est parallèle au vecteur quantité de mouvement de l'électron  $\vec{p}$ .

$$\vec{k} = \frac{m_0 \cdot \vec{v}}{\hbar} = \frac{\vec{p}}{\hbar} \quad (1.2)$$

en utilisant l'équation (1.2) on obtient l'énergie cinétique d'électron  $E$  qui est donnée par:

$$E = \frac{m_0 \cdot v^2}{2} = \frac{p^2}{2 \cdot m_0} = \frac{\hbar^2 \cdot k^2}{2 \cdot m_0} \quad (1.3)$$

Dans les semi-conducteurs l'électron est exposé au potentiel périodique du réseau, l'effet quantique apparaît dès que la longueur d'onde de De Broglie associée à l'électron :  $\lambda = \frac{2\pi}{\kappa}$  devient comparable au paramètre de maille  $a_0$  [4], l'électron ne peut alors occuper que certains états d'énergie discrets et bien définis d'où le concept de "bandes d'énergies".

En général, la fonction d'onde d'électron doit satisfaire l'équation de Schrödinger.

$$\frac{\hbar^2}{2m_0} \nabla^2 \Psi + V(\vec{r}) \Psi = E \Psi \quad (1.4)$$

où  $V(\vec{r})$  représente le potentiel périodique du cristal, cette équation est souvent écrite comme suit:

$$H \Psi = E \Psi. \quad (1.5)$$

avec  $H$  : l'Hamiltonien.

Pour un électron libre ( $V(\vec{r}) = 0$ ), la solution de cette équation est de la forme donnée par l'équation (1.1).

Dans un semi-conducteur la solution est appelée “fonction de Bloch”[5] et peut être exprimée par:

$$\Psi_n(\vec{k}, \vec{r}) = u_n(\vec{k}, \vec{r}) e^{i\vec{k}\vec{r}} \quad (1.6)$$

avec  $n$  : niveau électronique.

Cette fonction est une onde plane avec un facteur  $u_n(\vec{k}, \vec{r})$  traduisant la dépendance espace-amplitude, et montrant ainsi la périodicité de la maille.

La probabilité de trouver un électron à une position  $\vec{r}$  est proportionnelle à  $|\Psi_n(\vec{r})|^2$ .

La figure 1.1 est une représentation schématique montrant la relation entre le potentiel du réseau et la fonction de Bloch.

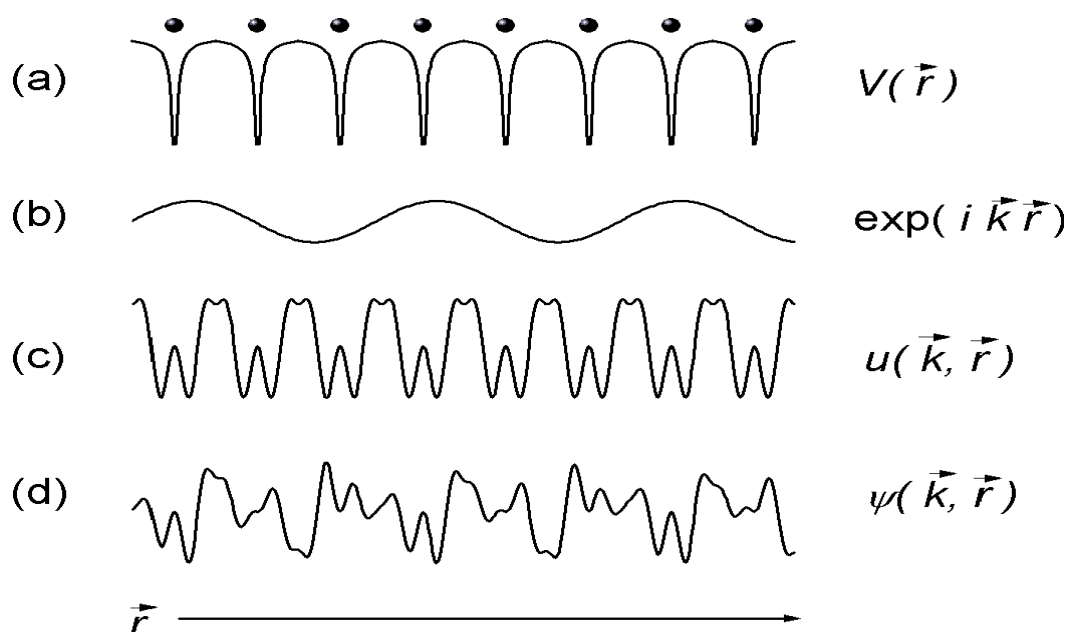


Figure 1.1 : Représentation schématique de la fonction électronique dans un cristal (a) potentiel cristallin.(b) fonction d'onde d'un électron libre. (c) amplitude de la fonction de Bloch de période  $a_0$ .(d) fonction de Bloch. [6]



En insérant la fonction de Bloch, équation (1.6) dans l'équation (1.4) on obtient  $E_n(\vec{k})$ . "Bandes d'énergie séparées par le gap" (figure 1.2).

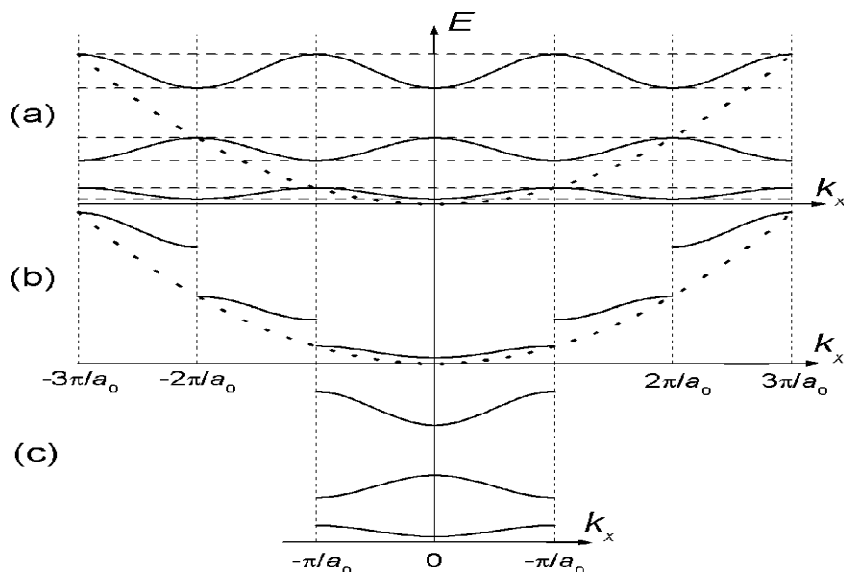


Figure 1.2 : Comparaison des différentes représentations de la fonction de dispersion d'énergie  $E(\vec{k})$ . (a) périodique. (b) nombre d'ondes étendu. (c) nombre d'ondes réduit. [6]

## 1.1.2 Structure cristalline

### 1.1.2.1 La structure Zinc-blende

Les semi-conducteurs III-V binaires comme la plupart des semiconducteurs d'optoélectroniques ont une structure cristalline Zinc blende qui est constituée de deux réseaux cubiques à faces centrées, l'un est décalé du quart de la diagonale principale par rapport à l'autre. Cette structure est schématisée dans la figure 1.3.

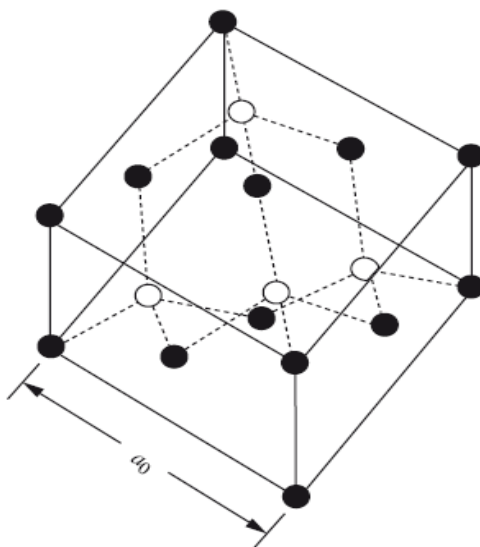


Figure 1.3 : Représentation d'un cristal de Zinc blende avec le paramètre de maille  $a_0$ . [6]

### 1.1.2.2 La structure wurtzite

Certains semi-conducteurs peuvent exister sous forme de structures différentes, par exemple le GaN, AlN et InN existent sous forme de la structure Zinc blende, mais généralement ils croissent sous la forme de la structure cristalline wurtzite, qui est formée de deux réseaux de Bravais hexagonaux comme montré dans la figure 1.4 .

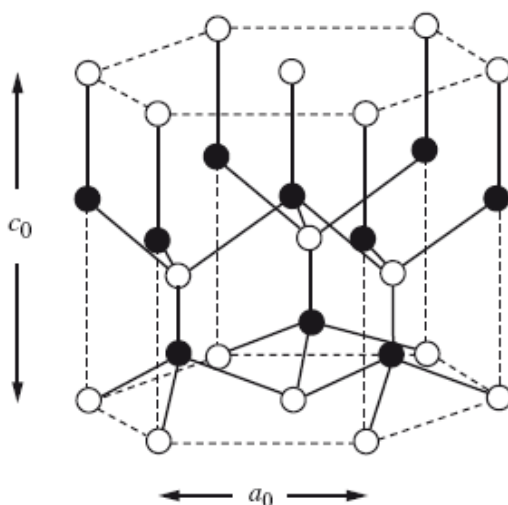


Figure 1.4 : Structure de wurtzite avec les paramètres de maille  $a_0$  et  $c_0$  constituée de deux sous-réseaux hexagonaux N et Ga. [4]

### 1.1.3 Masses effectives des électrons et des trous

Les propriétés des semi-conducteurs sont principalement déterminées par le comportement des électrons au voisinage de la zone du gap minimal, où l'énergie de dispersion  $E_n(\vec{k})$  est quasi-parabolique. L'électron peut être traité alors comme une particule libre, et sa masse  $m_0$  est remplacée par une masse effective  $m_0^*$ .

Pour représenter l'influence du réseau cristallin, la masse effective de l'électron est inversement proportionnelle à la courbure ( $\frac{d^2 E_n}{dk^2}$ ) de la dispersion d'énergie.

$$m_n^* = \hbar^2 \left( \frac{d^2 E_n}{dk^2} \right)^{-1} \quad (1.7)$$

où  $n$  : niveau électronique.

Dans le cas où  $E_n(\vec{k})$  est anisotropique, les masses effectives prennent des valeurs différentes pour chaque direction dans le cristal. Le calcul des masses effectives est basé sur le calcul des solutions de l'équation de Schrödinger, qui ne peut être résolue que par des méthodes approximatives, comme la méthode des ondes planes, de pseudo-potentiel, par la fonction de Green...etc.

En optoélectronique, on s'intéresse particulièrement aux transitions des électrons entre bande de conduction et bande de valence, qui se font au voisinage de la zone du gap minimal. Pour la majorité des semi-conducteurs utilisés, comme le GaAs, InP ou le GaN, cette zone est située au point  $\Gamma$ , c'est-à-dire en  $(\vec{k} = 0)$ , donc  $u_n(\vec{k}, \vec{r})$  devient  $u_n(\vec{0}, \vec{r})$  et la masse effective d'électron est notée  $m_c^\Gamma$ .

Et dans le cas des bandes anisotropiques les masses effectives des trous lourds et des trous légers dans la direction (100) sont données par :

Pour les trous lourds :

$$m_{hh}^{100} = \frac{m_0}{\gamma_1 - 2\gamma_2} \quad (1.8)$$

Pour les trous légers :

$$m_{lh}^{100} = \frac{m_0}{\gamma_1 + 2\gamma_2} \quad (1.9)$$

où  $\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3$  sont les paramètres de Luttinger qui sont donnés avec les masses effectives au point  $\Gamma$  dans l'annexe pour les principaux semiconducteurs.

## 1.2 L'énergie de gap

L'énergie de gap est la bande d'énergie séparant la bande de valence de la bande de conduction des semi-conducteurs, et suivant laquelle les matériaux semiconducteurs se divisent en deux types : à gap direct et à gap indirect

1.2.1 gap direct : la bande de conduction est uni-vallée en  $\kappa=0$  et la dispersion d'énergie  $E(\vec{k})$  est non parabolique et les transitions sont verticales

1.2.2 gap indirect: la bande de conduction est multi-vallée et anisotrope avec plusieurs minimas équivalents situés en différents points de la zone de Brillouin; les surfaces d'énergie constante au voisinage des minimas  $\kappa_0$  sont des ellipsoïdes, et les transitions sont obliques.

Pour la réalisation des composants optoélectroniques, les matériaux d'intérêts sont ceux à gap direct.

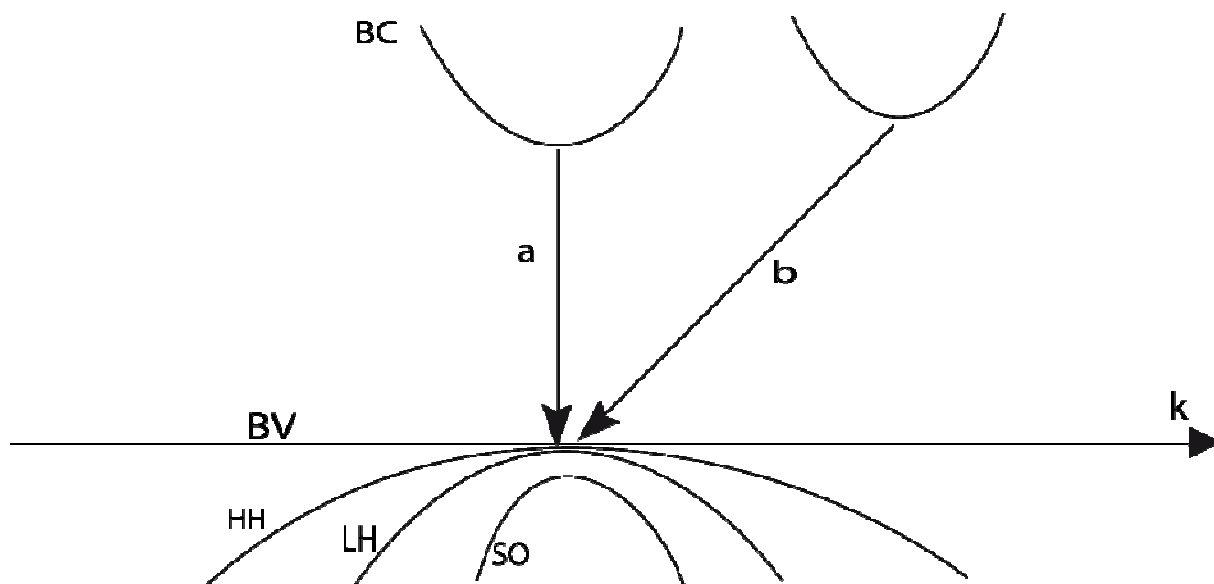


Figure 1.5 : Illustration des transitions a : verticale dans le cas d'un SC à gap direct. b : oblique dans le cas d'un SC à gap indirect.

### 1.2.3 Effet de la température sur le gap

Les mesures expérimentales montrent que l'énergie de gap varie avec la température, ceci est expliqué par le changement du paramètre de maille.

Pour déterminer cette variation, l'approximation de Varshni est souvent utilisée.[6,7]

$$E_g(T) = E_g(0) - \frac{A \cdot T^2}{B + T} \quad (1.10)$$

Où A,B paramètres semi empiriques de Varshni.

Récemment une relation physique plus précise a été proposée par Pässler. [6] elle est donnée par :

$$E_g(T) = E_g(0) \frac{\alpha \cdot \varphi}{2} \left[ \sqrt[2]{1 + \left(\frac{2T}{\varphi}\right)^2} - 1 \right] \quad (1.11)$$

avec  $\varphi$  : température moyenne des phonons.

$p$  : Paramètre de dispersion des phonons.

$\alpha$  : Constante

Les paramètres empiriques de Varshni sont donnés en annexe pour les différents semiconducteurs.

#### 1.2.4 La renormalisation

L'augmentation de la concentration des porteurs dans la bande de conduction et la bande de valence provoque l'écrantage entre l'interaction répulsive des électrons de la bande de conduction et ceux de la bande de valence [6], cet écrantage diminue l'interaction répulsive et conduit à une diminution de l'énergie de la bande interdite. L'analyse théorique du phénomène conduit à la théorie des effets à N corps [8] basée sur la mécanique quantique, et qui dépasse le cadre de ce travail; nous nous contenterons ici de présenter la formule utilisée qui donne la réduction de la bande interdite en fonction de la concentration des porteurs et de la température.

$$\Delta E_g = C \left[ \frac{\epsilon_{al}^5}{N} \left( m_0 \frac{m_e^* + m_v^*}{m_e^* \cdot m_v^*} + D \cdot T^2 \cdot \frac{\epsilon_{al}}{N} \right) \right]^{\frac{1}{4}} \quad (1.12)$$

où  $\epsilon_{al}$  : constante diélectrique.

$m_e^*$  : Masses effectives des électrons

$m_v^*$  : Masses effectives des trous.

$m_0$  : Masse de l'électron.

$N$  : Concentration de porteurs.

$T$ : Température en  $^{\circ}K$ .

avec  $C = 3.9 \cdot 10^5 \text{ eV cm}^{\frac{3}{4}}$ .

$D = 3.1 \cdot 10^{12} \text{ cm}^3 \text{ K}^2$ .

### 1.3 Les hétérostructures

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

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

### 1.3.1 Les puits quantiques

Lorsque l'épaisseur de la couche active devient comparable à la longueur d'onde de De Broglie  $\lambda_F$  donnée par : [9,4]

$$\lambda_F = \frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2.m_e^*.E_F}} \quad (1.13)$$

$E_F$  : niveau de Fermi.

L'effet quantique apparait et le spectre d'énergie devient discret. L'augmentation de l'épaisseur de puits augmente le nombre de niveaux d'énergie, et diminue l'espacement entre ces niveaux, ceci traduit une limite sur l'épaisseur qui dépend du matériau :

$$E_{n+1}-E_n > \frac{\hbar}{\tau}$$

où :  $E_{n+1}$  ,  $E_n$ : niveaux d'énergie discrets.

$\tau$  : Constante de temps prenant en compte toute les diffusions.

Il faut aussi que l'écart entre deux niveaux soit plus grand que la distribution de Fermi due à la température.

$$E_{n+1}-E_n > K_b \cdot T$$

Où  $K_b$  est la constante de Boltzmann.

Avec l'apparition de l'effet quantique, les états électroniques ne correspondent plus au bas de la bande de conduction, mais ils sont quantifiés en structure de sous bande (figure 1.6).

Pour décrire cette structure, il faut ajouter un potentiel  $V_{pq}(z)$  (caractérisant le potentiel dans le puits) au potentiel périodique  $V(\vec{r})$  du cristal, et introduire le potentiel résultant  $[V(\vec{r}) + V_{pq}(z)]$  dans l'équation de Schrödinger. La fonction enveloppe  $\varphi(z)$  est la solution de cette équation. Les méthodes de résolution seront abordées dans le chapitre III.

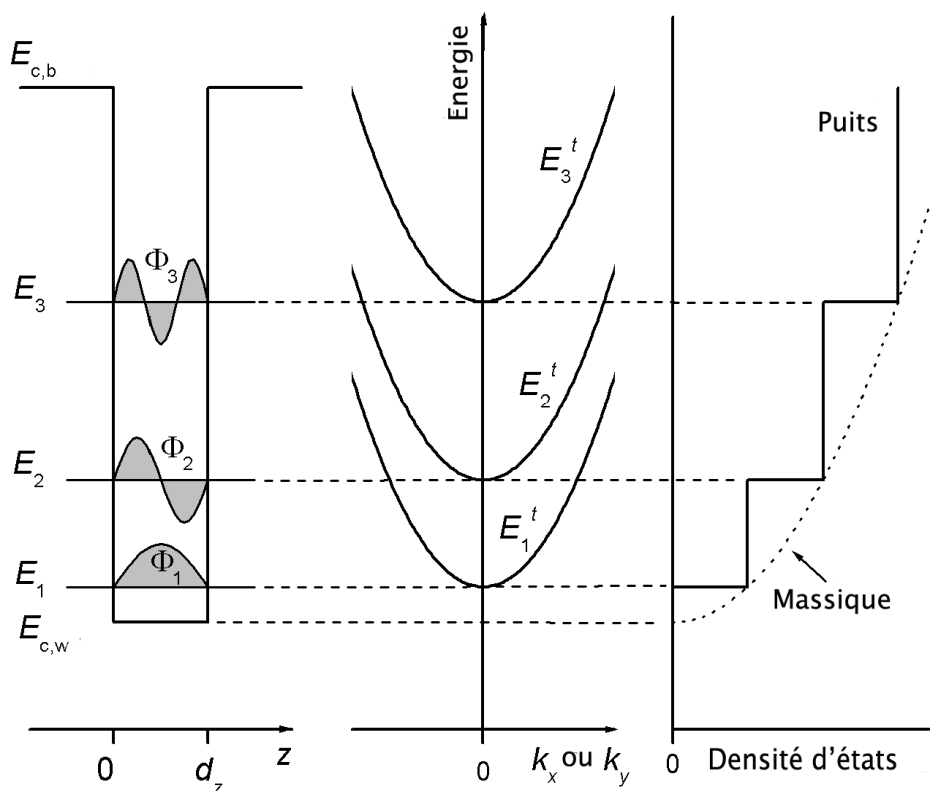


Figure 1.6 : Niveaux d'énergie  $E_n$ , fonction d'onde  $\Phi_m$  et la dispersion d'énergie  $E_m^t(k_x, k_y)$  et la densité d'état dans un puits quantique. [6]

L'apparition de l'effet quantique modifie plusieurs propriétés du matériau, offrant ainsi plusieurs avantages dont les suivants :

Dans un puits quantique et selon l'axe de croissance, les particules sont confinées dans une seule direction, la densité d'états est donnée donc par :

$$\rho^{2D}(E) = \frac{m n_z}{\pi \hbar^2 L_z} \quad (1.14)$$

Et puisque  $n_z=1,2,3\dots$  la densité d'états croît par palier (cf figure 1.6), cette différence fait en sorte que pour une même injection, un puits conduira à un gain plus élevé qu'un matériau massif, où il y a un « gaspillage » de porteurs dans les niveaux de basse énergie, car il faut remplir les états de faible énergie possédant une faible densité de porteurs avant d'accéder à des niveaux intéressants.

Aussi dans un laser classique une injection trop importante engendre des pertes internes élevées, les lasers à puits quantique en opérant avec moins de porteurs sont plus efficaces et peuvent générer des puissances de sortie plus élevées.

Le problème principal avec les dispositifs optoélectroniques à puits quantiques réside dans le facteur de confinement très faible ( $\Gamma_{puits} \approx 0.03$  alors que  $\Gamma_{massique} \approx 0.5$ ) ceci à pour effet de diminuer le gain modal défini par

$$g_{mod} = \Gamma_c \cdot g_{mat} \quad (1.15)$$

Où  $g_{mat}$  est le gain matériau.

Ce désavantage peut être surmonté en adoptant une structure avec un confinement séparé en ajoutant de part et d'autre de la zone active un guide d'onde avec un profil d'indice variable; il existe deux types de confinement.

### 1.3.2 Confinement à saut d'indice SCH

Dans ce type le guide d'onde optique est réalisé grâce à un matériau barrière de composition constante [10] comme montré sur la figure (1.7).

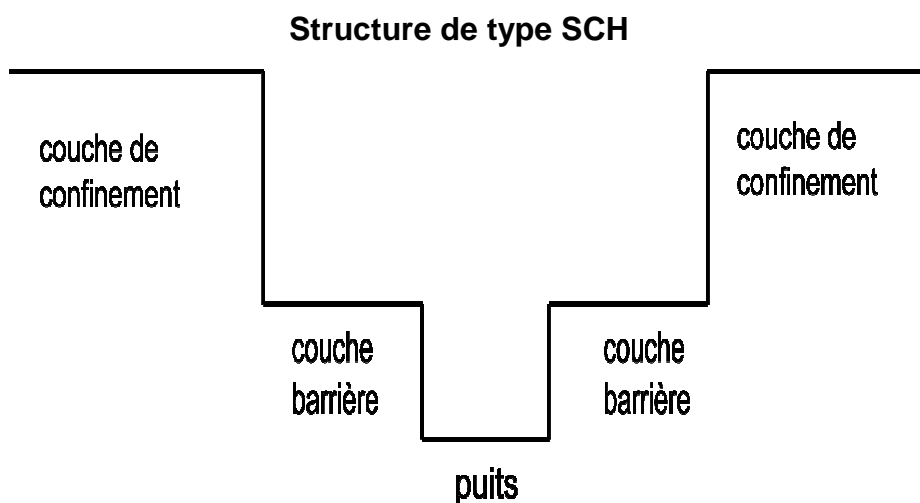


Figure 1.7 : Schématisation d'une structure de type SCH.

### 1.3.3 Confinement à indice graduel GRINSCH

Dans ce type le guide d'onde optique est réalisé grâce à un matériau barrière de composition graduelle, épitaxié sur la couche de confinement comme montré sur la figure 1.8 .



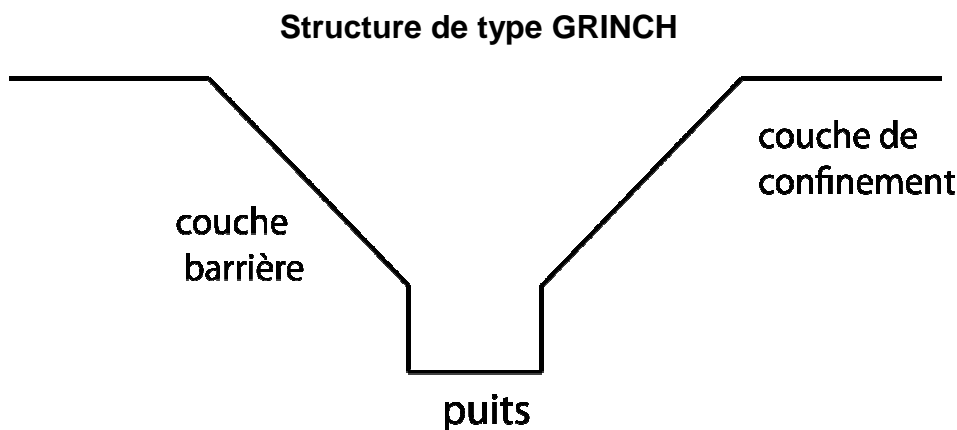


Figure 1.8 : Schématisation d'une structure de type GRINCH.

#### 1.3.4 Les multi-puits quantiques

Les structures à multi-puits quantiques présentent aussi un meilleur facteur de confinement que celles à puits quantique unique, puisque la surface de la région active se trouve augmentée. Dans de telles structures si l'on considère une injection uniforme dans le puits, on parle plutôt de facteur de confinement moyen par puits  $\Gamma_m$  défini par  $\Gamma_m = N_w \cdot \Gamma_w$  où  $N_w$  est le nombre de puits.

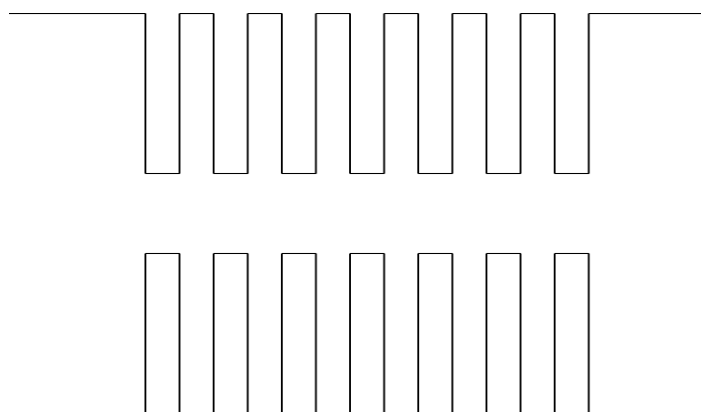


Figure 1.9 : Schématisation d'une structure à multipuits quantiques.

#### 1.4 Les puits quantiques sous contraintes

Traditionnellement, le paramètre de maille du cristal semiconducteur constituant le puits quantique était ajusté de façon à limiter les contraintes mécaniques, c'est la raison pour laquelle, pendant plusieurs années, on croyait que seuls les systèmes à base de InP peuvent émettre à des longueurs d'ondes supérieures à  $1.1\mu\text{m}$ , ainsi presque tout les lasers émettant aux grandes longueurs d'ondes des télécommunications utilisés actuellement dans les réseaux optiques, sont développés à base des système (In,P)(Ga,As) / (In,P).

Au début des années 1980, on a commencé à examiner l'idée d'introduire de faibles contraintes dans les puits, ouvrant la voie à de nouvelles possibilités pour la conception des composants, notamment ceux à base des nouveaux matériaux (Ga, In) (N, As, Sb) qui font l'objet d'investigation du présent travail, et que nous allons présenter dans le deuxième chapitre.

Ainsi, dans les dernières années, l'apparition des puits quantiques sous contraintes a apporté une flexibilité supplémentaire au design des dispositifs optoélectroniques. Les effets de la contrainte sur les propriétés électroniques et optiques des semi-conducteurs ont fait l'objet de plusieurs études récentes [11] dans le but de réaliser des dispositifs optoélectroniques plus performants.

Due au désaccord des paramètres de mailles du substrat et de la couche épitaxiée, la contrainte modifie les caractéristiques intrinsèques du semiconducteur, comme l'énergie de gap, les potentiels de déformation ainsi que les paramètres de structure de bandes comme les masses effectives.

Ces changements présentent plusieurs intérêts pour la réalisation de composants plus performants. A titre d'exemple, on a réussi à exploiter la levée de dégénérescence dans la bande de valence due à la contrainte, pour réaliser des amplificateurs optiques insensibles à la polarisation de la lumière [1] et d'autres études ont porté sur la diminution du courant de seuil avec la contrainte. [12]

#### 1.4.1 Notion de couche contrainte

Lorsque l'on fait croître un semi-conducteur sur un autre, si les deux matériaux constituant le substrat et la couche active ont des paramètres de mailles différents, 'évidemment ces deux matériaux doivent avoir la même structure cristalline ainsi que des paramètres de maille voisins', le matériau constituant la couche de plus grande épaisseur impose sa maille à l'autre au voisinage de l'interface, donc pour les couches suffisamment fines, la maille du matériau épitaxié se déforme de manière élastique dans les deux directions parallèle ( $\kappa_{//}$ ) et perpendiculaire ( $\kappa_{\perp}$ ) 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 un allongement "couche en tension", soit un rétrécissement "couche en compression".

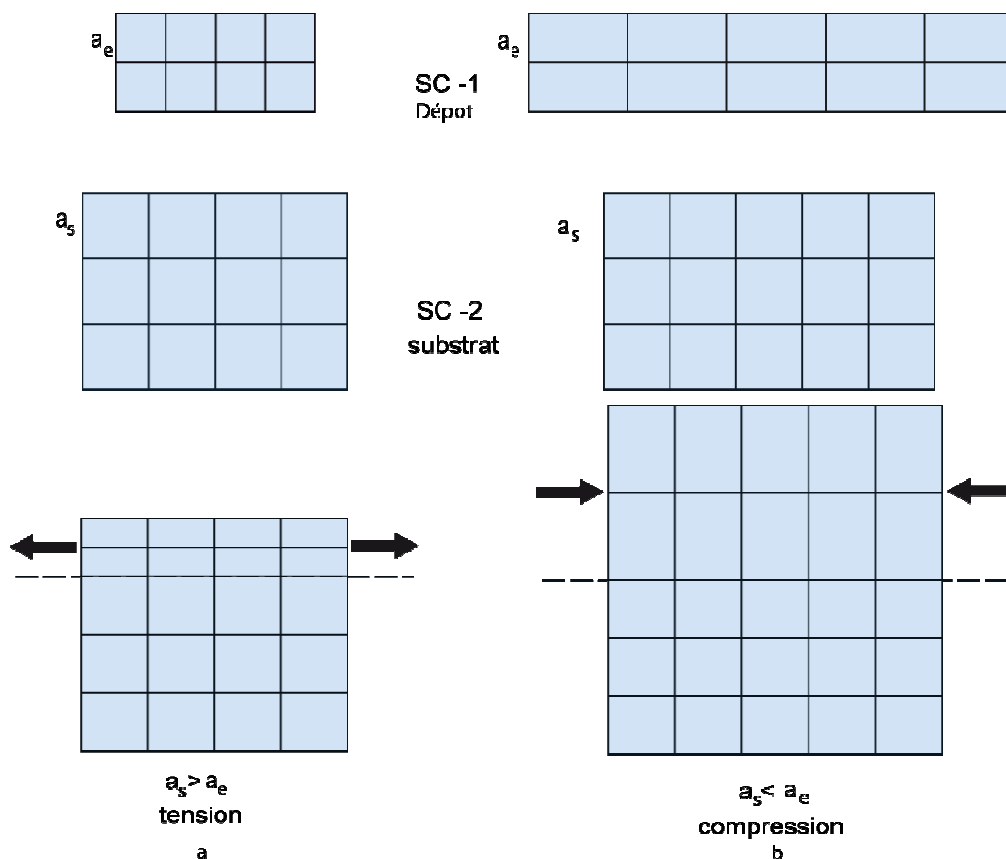


Figure 1.10 : Illustration des deux types de déformation, (a) couche en tension ( $a_s > a_e$ ), où  $a_s$  : paramètre de maille du substrat et  $a_e$  : celui de la couche épitaxiée. (b) couche en compression ( $a_s < a_e$ ).

#### 1.4.2 Épaisseur critique

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", à cette épaisseur la déformation de la maille ne suffit plus pour équilibrer l'énergie mécanique engendrée par la croissance des couches épitaxiées, le matériau tend alors à reprendre son paramètre de maille et devient disloqué. [11, 4]

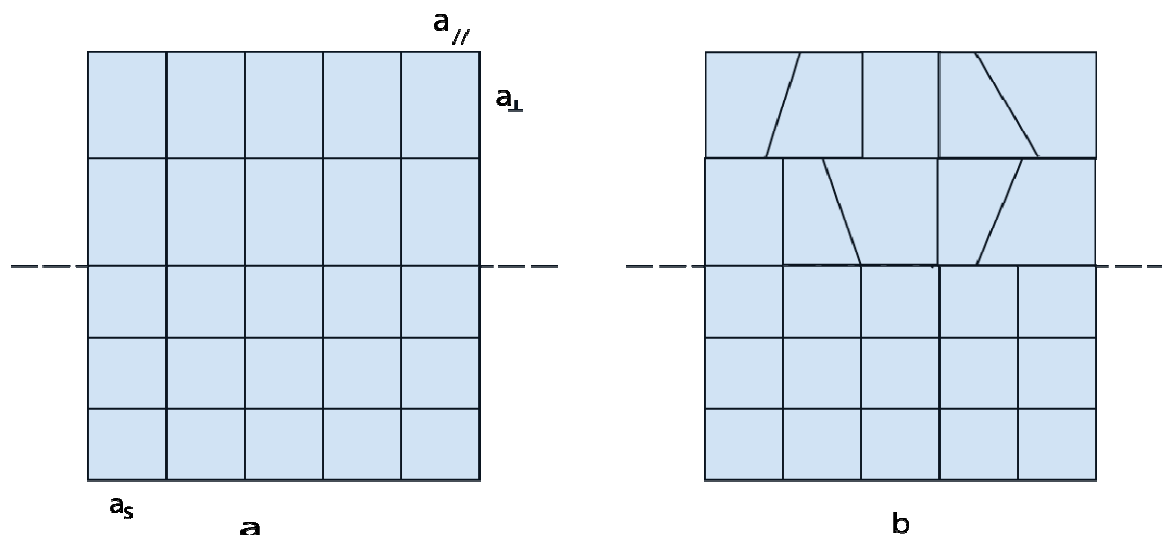


Figure 1.11 : Schéma montrant une couche contrainte en compression (a) et Une couche contrainte relaxée (b).

Cette épaisseur critique est fonction des coefficients élastiques  $C_{ij}$ , et des paramètres de maille  $a_s$  du substrat et  $a_e$  de la couche épitaxiée.

Dans une structure à puits quantique, et comme on a une Double Hétéro Structure (DHS) la contrainte est répartie sur les deux interfaces de croissance comme le montre la figure 1.12 .

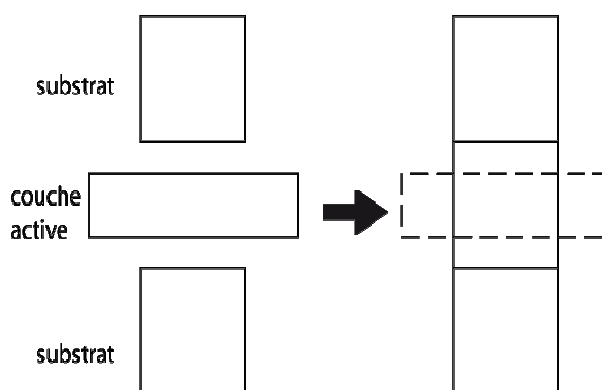


Figure 1.12 : La contrainte dans le cas d'une DHS.

Pour calculer l'épaisseur critique on utilise le modèle proposé par Matthews et Blackeslee qui nous donne l'expression suivante [13] :

$$h_c = \frac{a}{\beta \cdot \sqrt{2} \cdot \pi \cdot \varepsilon} * \frac{1-0.25 \cdot \gamma}{1+\gamma} * \ln \left( \frac{h_c \cdot \sqrt{2}}{a} + 1 \right) \quad (1.16)$$

$$\varepsilon = \frac{a-a_0}{a} \quad (1.17)$$

Où  $a$  : est le paramètre de maille de la couche relaxée.

$a_0$  : est le paramètre de maille du substrat.

$\varepsilon$  : est le désaccord paramétrique.

$\gamma$  : est le coefficient de poisson donné par :

$$\gamma = \frac{C_{12}}{C_{11}+C_{12}} \quad (1.18)$$

Où :  $C_{ij}$  sont les coefficients élastiques.

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

Structure	Puits quantique	Super réseaux
Valeur de $\beta$	2	1

#### 1.4.3 Effet de la contrainte sur le gap

Pour déterminer l'effet de la contrainte sur le gap on doit en premier lieu définir les tenseurs de déformation  $\varepsilon_{ij}$  ( $ij=xx, yy, zz$ ).

Comme nous l'avons déjà vue, l'épitaxie de couches fines sur un substrat de paramètre de maille différent, entraîne l'existence d'une contrainte bi-axiale. Cette

contrainte déforme le réseau cristallin mais sans lui faire perdre sa périodicité, donc la fonction de Bloch reste applicable, et la maille élémentaire du cristal contraint étant déformée, le potentiel et la fonction de Bloch  $U_n^s(\vec{k}, \vec{r})$  auront une nouvelle période. Le changement relatif de la période est :

$$\varepsilon_{ij} = \frac{\Delta a_i}{a_j} \quad (1.19)$$

Où  $a$  est le paramètre de maille,  $ij = x, y$  ou  $z$ .

Le changement relatif du volume est donné par :

$$\frac{\Delta V}{V} = \varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz} \quad (1.20)$$

Pour les faibles contraintes l'hamiltonien contraint  $H_\varepsilon$  peut être considéré comme une perturbation du hamiltonien non contraint  $H_0$ , l'équation générale est donnée Par :

$$[H_0 + H_\varepsilon]U_n^s(\vec{k}, \vec{r}) = E_n(\vec{k})U_n^s(\vec{k}, \vec{r}) \quad (1.21)$$

On considère le cas d'une contrainte bi-axiale (super réseau ou puits quantique avec une croissance suivant l'axe  $Z$  avec  $\varepsilon_{xx} = \varepsilon_{yy} \neq \varepsilon_{zz}$  et  $\varepsilon_{ij} = 0$  pour  $i \neq j$ )

La théorie de l'élasticité nous permet d'écrire les relations constitutives entre le tenseur d'élasticité  $\bar{C}$ , le tenseur de contrainte  $\bar{\sigma}$  et le tenseur de déformation  $\bar{\varepsilon}$

$$\sigma_{ij} = \sum_{kl} C_{ij,kl} \varepsilon_{kl} \quad (1.22)$$

Dans le cas d'un matériau linéaire et iso-tropique :

$$\sigma_{zz} = C_{zz,xx} \cdot \varepsilon_{xx} + C_{zz,yy} \cdot \varepsilon_{yy} + C_{zz,zz} \cdot \varepsilon_{zz} \quad (1.23)$$

et

$$C_{zz,xx} = C_{zz,yy} \quad \text{Noté } C_{12}$$

$$C_{zz,zz} = C_{xx,xx} \quad \text{Noté } C_{11}$$

On a alors :

$$\sigma_{zz} = 2 \cdot C_{12} \cdot \varepsilon_{xx} + C_{11} \cdot \varepsilon_{zz} \quad (1.24)$$

Le matériau ne subissant aucune contrainte, autre que la pression atmosphérique qui peut être négligée, suivant l'axe (z) ( $\sigma_{zz} = 0$ ) on a :

$$2 \cdot C_{12} \cdot \epsilon_{xx} + C_{11} \cdot \epsilon_{zz} = 0 \quad (1.25)$$

$$\epsilon_{zz} = -\frac{2C_{12}}{C_{11}} \epsilon_{xx} \quad (1.26)$$

Le schéma de la figure suivante (figure 1.13) montre l'effet de la contrainte sur la structure de bande de la couche épitaxiée; il représente la structure de bande d'un SC à gap direct en l'absence de contrainte, en compression bi-axiale et le cas d'une contrainte bi-axiale de tension.

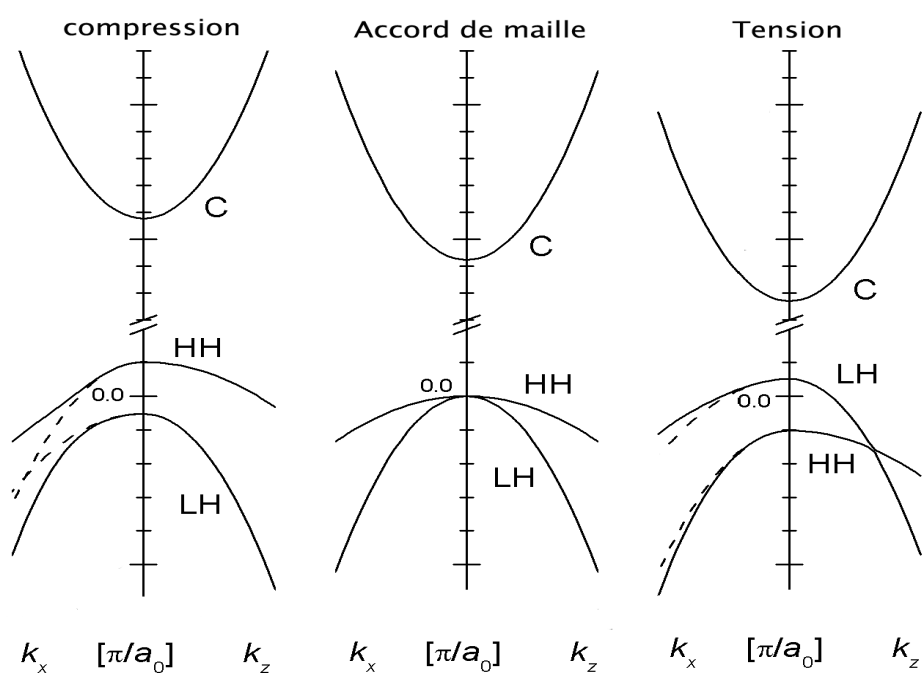


Figure 1.13 : Décalage et déformation des bandes d'énergie du GaAs pour une contrainte compressive, nulle, et des couches en tension. Les axes verticaux donnent l'énergie en eV et les axes longitudinaux donnent les vecteur d'onde  $k_x$  et  $k_z$  dans un périmètre de 20% de la zone de Brillouin[13].

Comme on peut le voir, pour les couches non contraintes les bandes de trous lourds et de trous légers sont isotropes et dégénérées au centre de la zone de Brillouin, et la bande de trous spin-splittée est située à une énergie  $\frac{\Delta_0}{3}$  en dessous de

ces deux bandes. Le centre de gravité de la bande de valence  $E_{V_{moy}} = \frac{E_{hh} + E_{lh} + \Delta_0}{3}$ , se trouve par conséquent à  $\Delta_0$  au dessous du haut de la bande de valence en  $\kappa=0$ .

En posant les quantités suivantes :  $\sigma_{hy} = 2 \left(1 - \frac{C_{12}}{C_{11}}\right) \cdot \epsilon_{xx}$  contrainte hydrostatique, et  $\sigma_{sh} = \left(1 + 2 \frac{C_{12}}{C_{11}}\right) \cdot \epsilon_{xx}$  contrainte de cisaillement.

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

- 1- La composante hydrostatique  $\sigma_{hy}$  liée à la déformation suivant l'axe de croissance ( $oz$ ) provoque un décalage du centre de gravité de la bande de valence ainsi que du centre de gravité de la bande de conduction.
- 2- La contrainte de cisaillement  $\sigma_{sh}$  lève la dégénérescence des états énergétiques des trous lourds et des trous légers en  $\kappa=0$ .

Dans le cas d'une couche soumise à une contrainte bi-axiale de compression la composante hydrostatique augmente le gap moyen entre les bandes de conduction et de valence.

Alors que la composante de cisaillement rend les bandes de valence fortement anisotropes : la bande de plus haute énergie HH devient "lourde" selon  $\kappa_{\perp}$  et "légère" selon  $\kappa_{//}$ , la bande d'énergie inférieure LH devient légère selon  $\kappa_{\perp}$  et lourde selon  $\kappa_{//}$ . Les décalages en énergie des centres de gravités de la bande de valence et de la bande de conduction en  $\kappa=0$  varient proportionnellement à la contrainte

$$\Delta E_{moy}^{hy} = a_v (\epsilon_{xx} + \epsilon_{yy} + \epsilon_{zz}) \quad (1.27)$$

$$\Delta E_c^{hy} = a_c (\epsilon_{xx} + \epsilon_{yy} + \epsilon_{zz}) \quad (1.28)$$

où  $a_c$  et  $a_v$  sont respectivement les potentiels hydrostatiques de déformation pour la bande de conduction et la bande de valence.

Les décalages énergétiques induits par la contrainte de cisaillement pour chacune des bandes constituant la bande de valence sont les suivants :

$$\Delta E_{hh}^{Sh} = -\frac{1}{2} \delta E^{sh} \quad (1.29)$$

$$\Delta E_{lh}^{Sh} = -\frac{1}{2} \Delta_0 + \frac{1}{4} \delta E^{sh} + \frac{1}{2} [\Delta_0^2 + \Delta_0 \cdot \delta E^{sh} + \frac{9}{4} (\delta E^{sh})^2]^{\frac{1}{2}} \quad (1.30)$$

$$\delta E^{sh,100} = 2b (\epsilon_{zz} - \epsilon_{xx}) \quad (1.31)$$

En prenant comme référence énergétique  $E_{V_{moy}}$  et à partir des équations précédentes on définit:



L'énergie  $E_V$  du haut de la bande de valence :

$$E_V = E_{V_{moy}} + \frac{\Delta_0}{3} + \Delta E_{V_{moy}}^{hy} + \max(\Delta E_{lh}^{Sh}, \Delta E_{hh}^{Sh}) \quad (1.32)$$

L'énergie  $E_C$  du bas de la bande de conduction :

$$E_C = E_{V_{moy}} + \frac{\Delta_0}{3} + E_g + \Delta E_{V_{moy}}^{hy} + \Delta E_C^{hy} \quad (1.33)$$

Remarque :  $E_{V_{moy}}$ , l'éclatement spin-orbite  $\Delta_0$  et l'énergie du gap sont relatifs au matériau non contraint

Pour une couche en compression la bande des trous lourds est au dessus de la bande des trous légers et l'on a  $\max(\Delta E_{lh}^{Sh}, \Delta E_{hh}^{Sh}) = \Delta E_{hh}^{Sh}$  et l'inverse pour une couche en tension le  $\max(\Delta E_{lh}^{Sh}, \Delta E_{hh}^{Sh}) = \Delta E_{lh}^{Sh}$

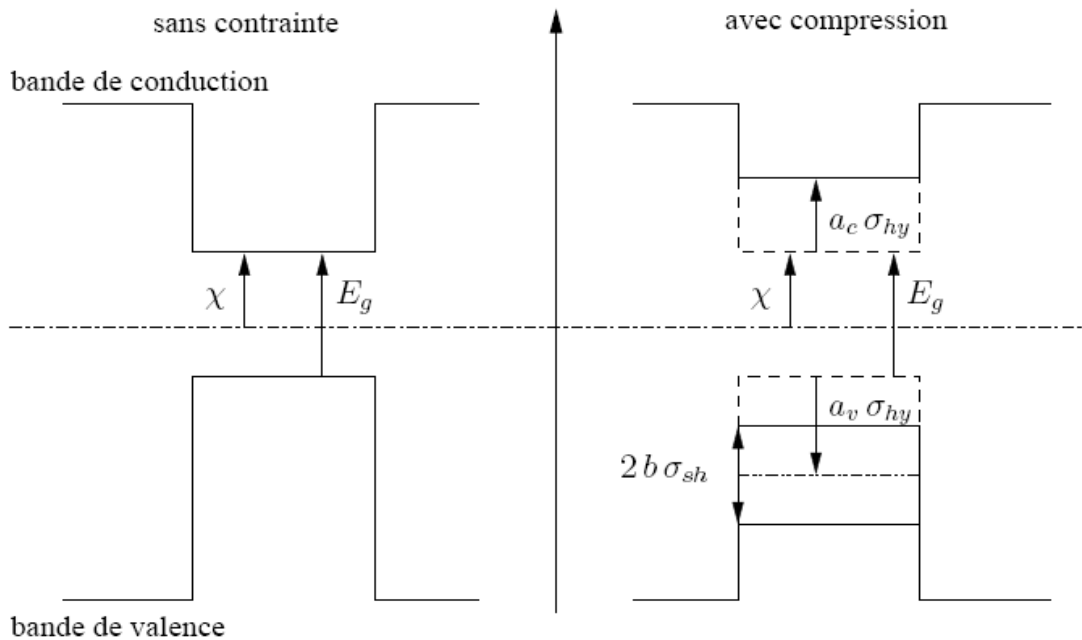


Figure 1.14 : Déformation du potentiel dans un puits quantique en fonction de la contrainte. (cas de la compression)

L'expression de la bande de conduction devient :

$$E_C = \chi + 2a_c(\epsilon_{xx} + \epsilon_{yy} + \epsilon_{zz}) \quad (1.34)$$

$$E_C = \chi + 2a_c\left(1 - \frac{C_{12}}{C_{11}}\right) \cdot \epsilon_{xx} \quad (1.35)$$

où  $\chi$  : l'affinité du matériau.

Et pour la bande de valence on a deux potentiels différents :

-Cas des trous lourds :

$$E_{hh} = \chi - E_g + a_v(\epsilon_{xx} + \epsilon_{yy} + \epsilon_{zz}) + \frac{b}{2}(\epsilon_{xx} + \epsilon_{yy} - 2\epsilon_{zz}) \quad (1.36)$$

$$E_{hh} = \chi - E_g + 2a_v \left(1 - \frac{C_{12}}{C_{11}}\right) \cdot \epsilon_{xx} + b \left(1 + 2 \frac{C_{12}}{C_{11}}\right) \cdot \epsilon_{xx} \quad (1.37)$$

-Cas des trous légers :

$$E_{lh} = \chi - E_g + 2a_v \left(1 - \frac{C_{12}}{C_{11}}\right) \cdot \epsilon_{xx} - b \left(1 + 2 \frac{C_{12}}{C_{11}}\right) \cdot \epsilon_{xx} \quad (1.38)$$

Le gap sera alors :

$$E_g = E_c - E_{hh} \quad (1.39)$$

$$E_{gc} = E_g + 2(a_c + a_v) \left(1 - \frac{C_{12}}{C_{11}}\right) \epsilon_{xx} - b \left(1 + 2 \frac{C_{12}}{C_{11}}\right) \cdot \epsilon_{xx} \quad (1.40)$$

### 1.5 Conclusion

Dans ce chapitre nous avons rappelé les notions fondamentales des semiconducteurs, nous avons vu que pour décrire le comportement de l'électron dans le cristal solide, il faut utiliser le concept de la fonction d'onde électronique, ensuite nous avons décrit différents types de structures cristallines. Puis nous nous sommes penchés sur l'étude des propriétés des puits quantiques qui découlent des hétérostructures et plus particulièrement les puits quantiques sous contrainte.

Le chapitre suivant est consacré à l'étude des nitrures d'éléments III-V et leurs propriétés très attrayantes.

## CHAPITRE 2

### LES NOUVEAUX MATERIAUX (Ga,In)(N,As,Sb)

Ce chapitre porte sur les structures à puits quantiques à base des nouveaux matériaux (Ga,In)(N,As,Sb)/GaAs. Nous développons les propriétés des quaternaires GaInNAs et GaAsNSb pour mettre en évidence les modèles utilisés, comparer les potentialités de ces candidats pour la réalisation des dispositifs optoélectroniques performants, et situer l'alliage quinaire GaInNAsSb qui constitue une approche plus exotique pour l'amélioration des propriétés des structures *III-N-V*, et s'est avéré très prometteur pour l'ingénierie de l'énergie de la bande interdite, car il permet de contrôler les décalages de bandes, la contrainte et le gap d'une manière indépendante par rapport aux autres alliages ternaires et quaternaires.

Nous nous intéressons dans un premier temps à la forte diminution 'atypique' dans les semiconducteurs *III-V* de l'énergie de gap avec l'incorporation de l'azote. Nous utilisons le modèle d'anticroisement de bandes pour la décrire d'une manière quantitative, puis les résultats obtenus sont comparés avec les résultats de la littérature.

Dans un deuxième temps, nous nous intéressons aux décalages de bandes, à la contrainte et au confinement électronique et leurs évolutions en fonction des différentes compositions.

#### 2.1 Différentes approches *III-N-V*

Avant d'aborder de près l'étude de notre structure et ses caractéristiques nous tenons à faire une présentation des nitrures d'élément *III-V* à faible bande interdite dont fait partie le *GaInNAsSb*. Nous présentons différentes approches, notamment les plus intéressantes pour l'amélioration des performances des dispositifs optoélectroniques.

#### 2.2 Les alliages GaNAs, GaInNAs, GaNAsSb

Les premières études portant sur les nitrures dilués d'éléments *III-V* ont commencé il y a plusieurs années avec le *GaP* dopé avec de l'azote, mais c'est seulement dans les années 1990 qu'on a pu développer des sources d'azote suffisamment efficaces pour l'épitaxie, et que les premiers alliages *III-N-V* ont vu le jour. La communauté scientifique s'est immédiatement lancée dans l'étude expérimentale et théorique de ces nouveaux matériaux; le *GaNAs* a été particulièrement étudié, le paramètre de courbure (Bowling) géant observé dans cet

alliage lui a offert une particularité très attrayante : c'est la diminution de l'énergie de gap et du paramètre de maille simultanément avec l'incorporation de faibles fractions d'azote.

Cette propriété s'est avérée très intéressante, car elle offre la possibilité d'étendre le domaine d'application de ces composés en leur permettant d'atteindre le domaine des longueurs d'ondes des télécommunications optiques, jusqu'alors réservé à la filière *InP*.

La figure 2.1 met en évidence cette propriété ; la tendance générale est la suivante : plus le paramètre de maille est faible plus l'énergie de la bande interdite est élevée, et elle montre également qu'avec l'azote on peut accéder à des faibles énergies de gap avec des paramètres de mailles faibles aussi.

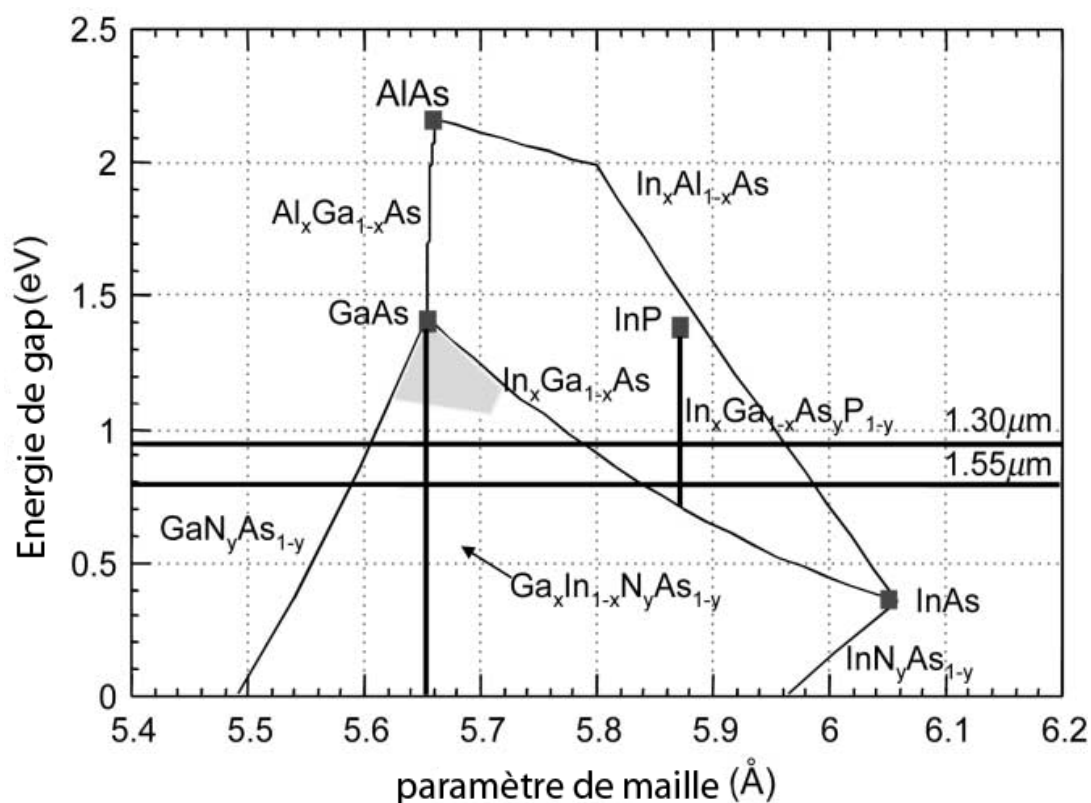


Figure 2.1 : Energie de gap en fonction du paramètre de maille pour les alliages III – Arsenic, et montrant les lignes de l'accord de maille avec le GaAs et l'InP.

### 2.2.1 L'alliage quaternaire GaInNAs

Le quaternaire *GaInNAs* à été découvert en 1996 par Kondow [15], il est aujourd'hui l'alliage *III-N-V* le plus connu. Durant la dernière décennie, le besoin d'avoir des sources optiques peu onéreuses et non refroidies à conduit au développement rapide de ce quaternaire. Les puits quantiques contraints à base de *GaInNAs/GaAs* sont devenus des candidats de choix pour remplacer les systèmes à base de *GaInPAs/InP* pour l'émission à la longueur d'onde 1.3 $\mu$ m, des lasers émettant par la tranche ainsi que des VCSEL à base de cet alliage ont très vite vu le jour [16]. Le *GaInNAs* est également étudié pour la réalisation des cellules solaires multi-spectrales à rendement élevé [17], et des transistors bipolaires à hétérojonctions (HBT) à faible voltage d'offset [18] et travaillant à des fréquences de modulation plus élevées qu'avec les transistors conventionnels à base de *AlGaAs* ou *GaInP*. Tirant avantages de ces caractéristiques, les HBT à base de *GaInNAs* sont devenus des composants de choix pour les amplificateurs de puissance à hautes performances utilisés dans les appareils exigeant une très bonne linéarité et une consommation réduite comme les téléphones portables de la 3<sup>ème</sup> et 4<sup>ème</sup> génération qui suivent le standard CDMA (Code Division Multiple Access) [19]

### 2.2.2 L'alliage quaternaire GaNAsSb

A coté du *GaInNAs* aux propriétés très intéressantes, relativement peu de travaux ont porté sur d'autres candidats *III-N-V* éventuels. Néanmoins le quaternaire *GaNAsSb* s'avère très prometteur également, et présente des propriétés très attrayantes tel que, le paramètre de Bowing qui est plus important que dans le *GaInNAs*, ainsi le gap dans décroît plus rapidement [20]. Si on ajoute le fait que les deux quaternaires subissent pratiquement la même contrainte pour le même taux d'azote, on comprend que le *GaNAsSb* peut émettre à des longueurs d'ondes plus importantes pour la même contrainte et avec moins d'azote, ce qui minimise la détérioration des qualités optiques dues à l'incorporation de l'azote.

Le *GaNAsSb* présente une autre différence par rapport au *GaInNAs* au niveau des discontinuités de bandes, car l'incorporation de l'antimoine joue un rôle très important dans la modification de la configuration de la bande de valence que nous allons aborder dans la partie suivante. De plus, on a montré qu'avec ce quaternaire il est possible d'ajuster de manière indépendante les décalages des bandes de conduction et des bandes de valences  $\Delta E_C$  et  $\Delta E_V$  en jouant sur les fractions de composition de l'azote et de l'antimoine respectivement.

Mais tout cela au prix d'un faible confinement électronique qui doit être assez important si on veut réaliser des dispositifs peu sensibles à la température.

### 2.2.3 L'alliage quinaire GaInNAsSb

La combinaison des cinq éléments qui constituent les deux quaternaires c'est à dire l'alliage quinaire  $GaInNAsSb$  est particulièrement intéressante. Pour avoir un bon compromis entre le confinement électronique et la longueur d'onde d'émission. Ce matériau a fait l'objet de peu d'études relativement. Les premières études publiées ont mis l'accent sur l'amélioration des propriétés optiques et électroniques du  $GaInNAs$  avec l'incorporation de l'antimoine [21], la dégradation de ces propriétés est due principalement à l'incorporation d'un pourcentage élevé d'azote (5%) pour avoir une émission à  $1.55\mu\text{m}$ , mais à un tel pourcentage le matériau perd ses qualités optiques (cf. Figure 2.2).

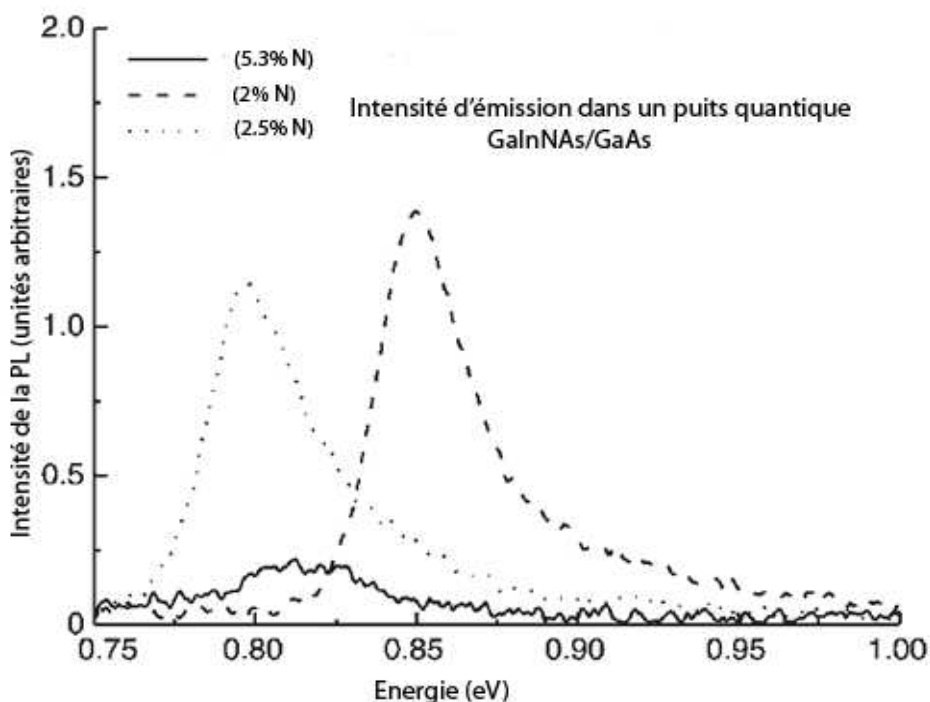


Figure 2.2 : Effet de l'azote sur l'intensité d'émission dans un puits quantique contraint à base de  $GaInNAs/GaAs$  [22]

Ainsi l'incorporation de l'Antimoine devient nécessaire pour avoir une émission au-delà de  $1.3\mu\text{m}$  tout en conservant de bonnes propriétés optiques.

Depuis la première démonstration en l'an 2000 du laser à base du  $GaInNAsSb$ , plusieurs équipes de recherche se sont intéressées à ce quinaire dont les premiers travaux ont porté sur l'émission autour de  $1.3\mu\text{m}$ . Dans une étude

expérimentale Wan et al [23] ont annoncé le premier laser à puits quantique à base de  $GaInNAsSb/GaAs$  émettant à  $1.295\mu\text{m}$  et utilisant le  $AlGaAs$  comme guide d'onde, et avec une densité de courant de seuil de  $1.02\text{KA/cm}^2$ . Le rendement externe et la température caractéristique étaient assez faibles (12% et 64K), cependant c'était une validation des potentialités de ce quinaire.

Cette étude a été rapidement suivie par un groupe au sein de 'Furukawa Electric' qui a réalisé un laser à base de ce matériau et avec des performances améliorées, mais émettant autour de la longueur d'onde  $1.26\mu\text{m}$  seulement, la couche active était composée de  $Ga_{0.61}In_{0.39}As_{0.9807}N_{0.033}Sb_{0.016}/GaAs$  et comme guide d'onde on a utilisé le  $InGaP$ , à la température ambiante ce laser avait un courant de seuil de  $700\text{A/cm}^2$  et une température caractéristique  $T_0=126\text{ K}$ .

Une autre approche réalisée par le même groupe a montré que l'utilisation du  $GaN_{0.019}As_{0.981}$  comme barrière permet de diminuer la contrainte et d'avoir une largeur plus importante de la couche active, donc une réduction de l'énergie de transition; mais le problème majeur avec une telle structure c'est le faible décalage de bandes qui diminue considérablement le confinement électronique. D'autres groupes se sont intéressés à l'incorporation de l'antimoine pour atteindre la longueur d'onde  $1.55\mu\text{m}$ . Un premier résultat de  $1.46\mu\text{m}$  a été obtenu [24] avec une structure composée d'un triple puits quantique à base de  $GaInNAsSb/GaNAsSb$  et avec une densité de courant de seuil de  $2.8\text{ KA/cm}^2$ .

Peu après, on a pu atteindre la longueur d'émission  $1.49\mu\text{m}$  mais avec un courant de seuil extrêmement élevé ( $18.8\text{KA/cm}^2$ ) [25]. Et plus récemment on a obtenu une émission à  $1.5\mu\text{m}$  avec de meilleures performances en utilisant une structure à base de  $Ga_{0.6}In_{0.4}As_{0.975}N_{0.01}Sb_{0.015}/GaN_{0.02}As_{0.088}Sb_{0.1}$  le courant de seuil obtenu est de  $3.5\text{KA/cm}^2$ .

Néanmoins, en marge de ces résultats très prometteurs la physique du matériau  $GaInNAsSb$  aux propriétés atypiques, offre encore un large champ d'investigation.

La partie suivante est donc principalement consacrée à l'étude de la structure de bandes de ce nitrure à faible bande interdite.

### 2.3 Modèle d'anticroisement de bandes

L'étude de la structure de bandes est d'une importance capitale pour évaluer le potentiel d'un système et déterminer les domaines d'applications les plus adaptés.

Il a été montré [26] que dans le  $GaNAs$  l'azote influence la bande de valence et non seulement la bande de conduction. D'autres études sur le  $GaInAs$  vont également dans ce sens [27,28,29], mais pour ces dernières on montre que l'effet de

l'azote sur la bande de conduction est beaucoup plus important que l'effet sur la bande de valence, et qu'il peut être négligé.

D'un autre côté, une forte augmentation dans les discontinuités des bandes de valences est observée dans le *GaNAs* avec l'incorporation du *Sb* [30,31], et pratiquement aucun changement sensible n'est observé dans la bande de conduction.

Nous nous appuyons sur ces résultats pour supposer que la structure de bandes du quinaire *GaInNAsSb* découle de la superposition des effets d'azote et d'antimoine sur la bande de conduction et la bande de valence respectivement. La question qui se pose est : quel modèle utiliser ?

En effet, la littérature bien que récente sur ce type d'alliage, n'en est pas moins très riche, il ya plusieurs modèles qui permettent de rendre compte du comportement de ces nitrures. Nous citons les deux les plus connus, le modèle d'anticroisement de bandes et le modèle d'intermixage  $\Gamma$ -L. Ce dernier propose que les atomes d'azote provoquent une distorsion du réseau cristallin et peuvent causer une interaction entre la vallée L dans la structure de bandes du *GaAs* avec la vallée  $\Gamma$ , ce qui mène à une diminution de la bande de conduction.

Cette théorie s'appuie sur plusieurs résultats expérimentaux et théoriques [32-34], et les deux modèles ont une prédiction correcte du comportement de la bande interdite avec l'incorporation de l'azote, mais le modèle d'anticroisement de bandes, bien que sujet à discussion, est beaucoup plus proche des résultats expérimentaux [35, 36, 37], donc nous l'avons appliqué à notre système pour déterminer sa structure de bandes.

### 2.3.1 La bande de conduction

L'incorporation de l'azote dans une matrice de *GaInAs* introduit un niveau localisé à -1.65eV au dessus du haut de la bande de valence il est appelé : niveau iso-électronique car la valence de l'atome d'azote est identique à celle de l'atome d'arsenic, ce niveau d'impureté est résonnant avec la bande de conduction. Selon le modèle d'anticroisement de bandes proposé par Shan et al [38,35], les états localisés dus aux atomes d'azote isolés dans la matrice de *GaInAs* sont couplés avec les états du minimum  $\Gamma$  de la bande de conduction de cette même matrice.

Pour décrire mathématiquement cette interaction il faut résoudre l'équation aux valeurs propres obtenue par la diagonalisation du déterminant :

$$|H - E.I| \quad (2.1)$$



$$\begin{vmatrix} E_M(\kappa) - E & V_{MN} \\ V_{MN} & E_N - E \end{vmatrix} = 0 \quad (2.2)$$

Et finalement la détermination des valeurs propres des états énergétiques aboutit à deux solutions :

$$E_{\pm} = \frac{1}{2} \left[ E_N + E_M(\kappa) \pm \sqrt{(E_N - E_M(\kappa))^2 + 4V_{MN}^2} \right] \quad (2.3)$$

où  $E_N$  est l'énergie du niveau de l'atome d'azote isolé,  $E_M(\kappa)$  est l'énergie de la bande de conduction  $\Gamma$  du GaAs, et  $V_{MN}$  décrit l'interaction entre ces deux types d'états. Cette interaction est d'autant plus forte que le nombre d'atome d'azote dans la matrice GaInAs est élevé. Il a été montré que [39-41] :

$$E_N = 1.65(1 - x) + 1.44x - 0.38x(1 - x) \quad (2.4)$$

$$E_M = E_0 - 1.55y \quad (2.5)$$

$$V_{MN} = E_{MN} \sqrt{y} \quad (2.6)$$

$$E_{MN} = 2.4(1 - x) + 1.75x \quad (2.7)$$

Où  $E_0$  est l'énergie en absence de l'azote, et  $y$  est sa fraction.

$x$  est la fraction de l'indium.

### 2.3.2 La bande de valence

Pour déterminer la configuration de la bande de valence après l'incorporation de l'antimoine, nous utilisons le modèle d'anticroisement de bandes de valence 'VBAC'. Ce modèle est basé sur la fameuse méthode  $kp$  [42-45] en considérant 6 états de valence du semiconducteur couplés avec 6 états de valence des atomes introduits 'impuretés', la diagonalisation du Hamiltonien mène vers 6 valeurs propres doubles et dégénérées correspondant à deux bandes : une bande supérieure  $E^+$  et une bande inférieure  $E^-$  qui sont le résultat de l'anticroisement des bandes de trous lourds ( $hh$ ), des trous légers ( $lh$ ) et du spin orbite ( $SO$ ).

Nous avons utilisé ce modèle pour déterminer l'influence de l'antimoine sur la bande de valence. Pour cela nous l'avons appliqué avec l'énergie de localisation du  $Sb$  :  $E_{Sb}$  et le paramètre de couplage :  $C_{Sb}$ .

La résolution de l'équation aux valeurs propres (équation 2.2) en remplaçant le  $V_{MN}$  par  $V_{PQ}$  et  $E_N$  par  $E_{Sb}$  permet de déterminer les états propres des trous lourds et des trous légers [7] :

$$E_{\pm hh} = \frac{1}{2} \left[ E_{Sb} + E_{hh}(\kappa) \pm \sqrt{(E_{Sb} - E_{hh}(\kappa))^2 + 4V_{PQ}^2} \right] \quad (2.8)$$

$$E_{\pm lh} = \frac{1}{2} \left[ E_{Sb} + E_{lh}(\kappa) \pm \sqrt{(E_{Sb} - E_{lh}(\kappa))^2 + 4V_{PQ}^2} \right] \quad (2.9)$$

Où

$$V_{PQ} = C_{Sb} \sqrt{z} \quad (2.10)$$

$C_{Sb}=1.05$  et  $E_{Sb}=-1\text{eV}$ . Et  $z$  est la fraction d'antimoine incorporée.

La référence des énergie étant le haut de la bande de valence.

#### 2.4 Etude des paramètres de l'alliage :

Plusieurs paramètres de l'alliage quinaire  $GaInNASb$  peuvent être déterminés par interpolation linéaire des paramètres binaires parents qui le composent, cette interpolation est appelée : 'loi de Végard', elle est donnée par l'expression suivante [26] pour le quinaire  $Ga_{1-x}In_xN_yAs_{1-y-z}Sb_z$  :

$$P(x, y, z) = (1-x) \cdot y \cdot P_{GaN} + (1-x) \cdot (1-y-z) \cdot P_{GaAs} + (1-x) \cdot z \cdot P_{Gasb} + x \cdot y \cdot P_{InN} + x \cdot (1-y-z) \cdot P_{InAs} + x \cdot z \cdot P_{InSb} \quad (2.11)$$

où  $P(x, y, z)$  est le paramètre à déterminer.

Récemment une relation plus précise a été proposée [46] elle est donnée par l'expression suivante :

$$P(x, y, z) = P_1/P_2 \quad (2.12)$$

$$\begin{aligned} P_1 = & (1-x) \cdot x \cdot y \cdot P_{GalnN} + (1-x) \cdot x \cdot (1-y-z) \cdot P_{GalnAs} + (1-x) \cdot x \cdot z \cdot P_{Galnsb} \\ & + (1-x) \cdot y \cdot (1-y-z) \cdot P_{GaNAs} + (1-x) \cdot y \cdot z \cdot P_{GaNsb} \\ & + (1-x) \cdot z \cdot (1-y-z) \cdot P_{GaAsSb} + (1-y-z) \cdot x \cdot y \cdot P_{InNAS} + x \cdot y \cdot z \cdot P_{InNSb} \\ & + (1-y-z) \cdot x \cdot z \cdot P_{InAsSb} \end{aligned} \quad (2.13)$$

Et

$$\begin{aligned} P_2 = & (1-x) \cdot x \cdot y + (1-x) \cdot x \cdot (1-y-z) + (1-x) \cdot x \cdot z + (1-x) \cdot y \cdot (1-y-z) \\ & + (1-x) \cdot y \cdot z + (1-x) \cdot z \cdot (1-y-z) \end{aligned} \quad (2.14)$$

Cependant, la fidélité de l'interpolation linéaire à été remise en question pour les masses effectives et l'énergie de la bande interdite [ 35, 37 ]. Mais pour la structure que nous étudions, on est arrivé [26] à la conclusion que pour les faibles

valeurs d'indium et d'azote, la loi d'interpolation linéaire donne des résultats qui sont en très bon accord avec les résultats expérimentaux, et que pour des pourcentages élevés, l'écart remarqué influence les énergies des trous légers seulement. Donc la propagation de l'erreur qui en résulte touchera uniquement le calcul du gain optique du mode TM, et comme la contrainte dans le puits est essentiellement une contrainte de compression, ce mode est très faible, donc pour le reste des calculs on peut accepter cette approximation.

#### 2.4.1 Le paramètre de maille

Nous avons utilisé la loi de Vegard donnée par l'équation (2.12) pour le calcul du paramètre de maille. La figure 2.3 représente sa variation en fonction des fractions d'indium et d'azote, tandis que dans la figure 2.4, nous avons représenté l'effet de l'antimoine et de l'azote pour une fraction d'indium fixe.

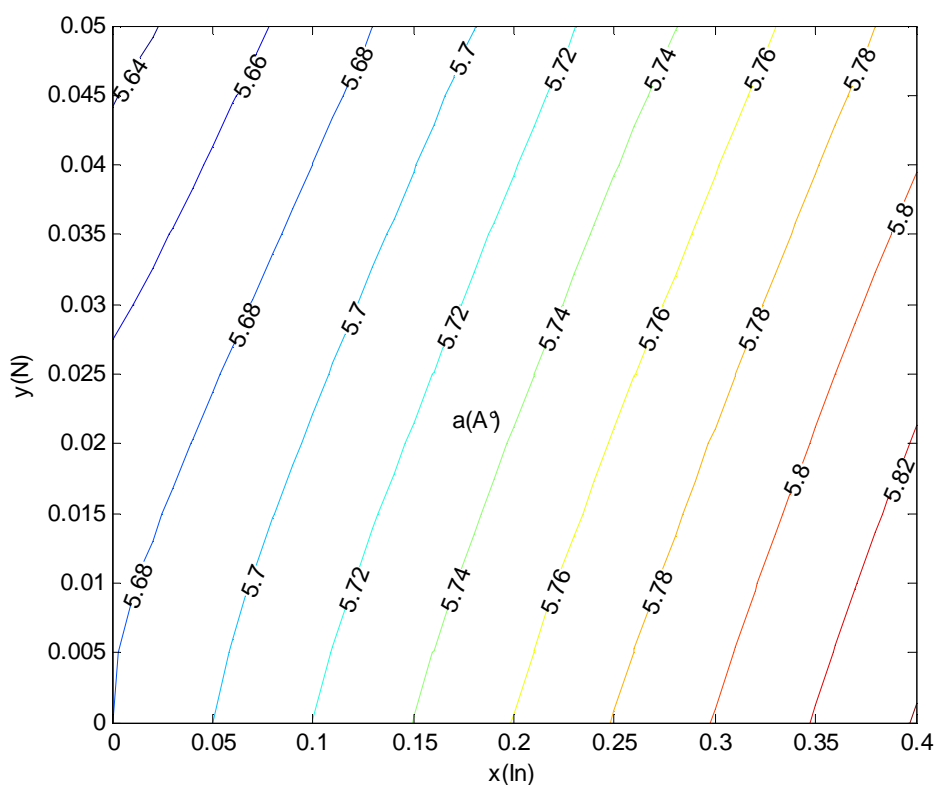


Figure 2.3 : Paramètre de maille en (Å), en fonction des paramètres de composition d'indium ( $x$ ) et d'azote ( $y$ ) pour  $Z(\text{Sb})=0.06$ .

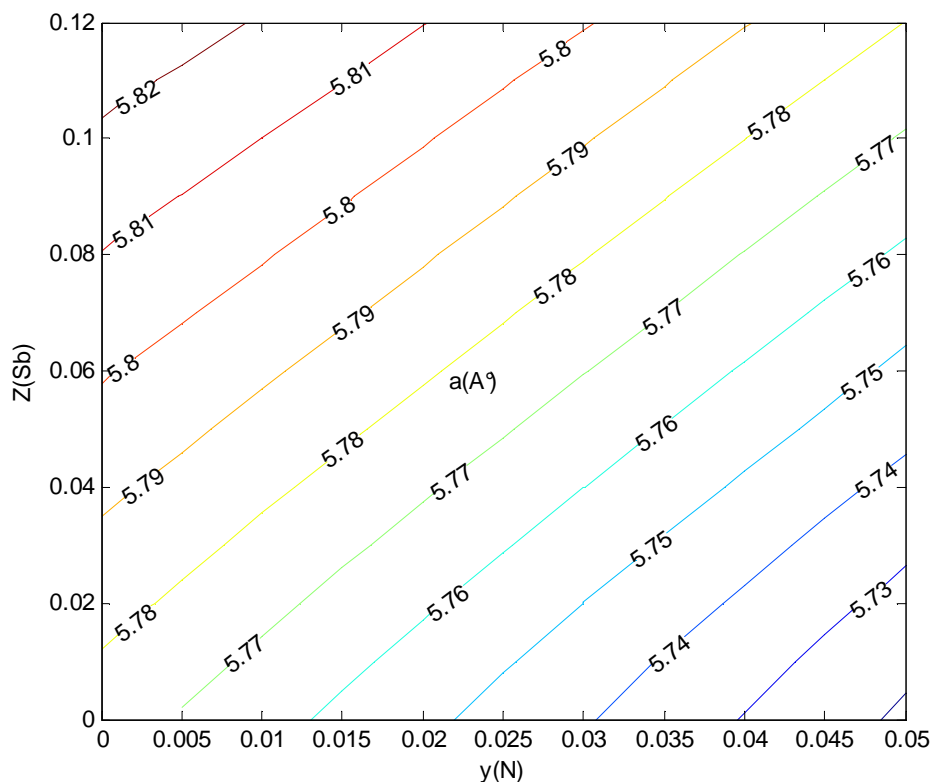


Figure 2.4 : Paramètre de maille en (Å), en fonction des paramètres de composition d'azote ( $y$ ) et d'antimoine ( $z$ ), pour  $x(\text{In})=0.3$ .

La tendance qui apparaît est que l'indium et l'antimoine augmentent le paramètre de maille et que l'azote le diminue.

#### 2.4.2 La contrainte

Il a été montré expérimentalement que l'incorporation de l'azote diminue considérablement la contrainte, ceci a été exploité pour compenser la contrainte engendrée par l'indium.

Nous avons simulé l'effet d'indium, d'azote et d'antimoine sur la contrainte puis sur l'épaisseur critique. Les résultats obtenus sont en bon accord avec les résultats de la littérature (cf figure 2.9). On constate que l'indium accentue la contrainte (cf figure 2.5) et diminue l'épaisseur critique, et que l'antimoine agit de la même façon mais son effet est moins intense, tandis que l'azote diminue la

contrainte et retarde la dislocation en augmentant l'épaisseur critique (figure 2.6 et figure 2.7).

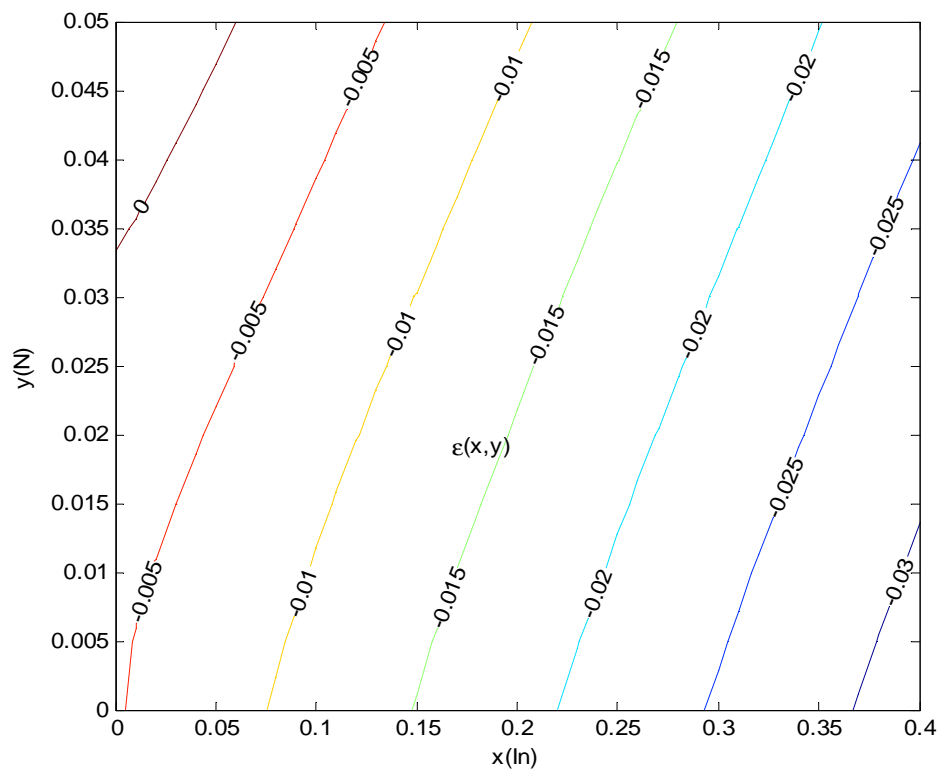


Figure 2.5 : Courbes iso-contrainte en fonction de  $x, y$  pour  $z=0.06$  : concentrations d'Indium, d'azote et d'antimoine respectivement. La surface des valeurs positives représente la zone des couplets  $(x, y)$  de tension, et celle des valeurs négatives les couplets  $(x, y)$  de compression et la ligne '0' représente l'accord de maille.

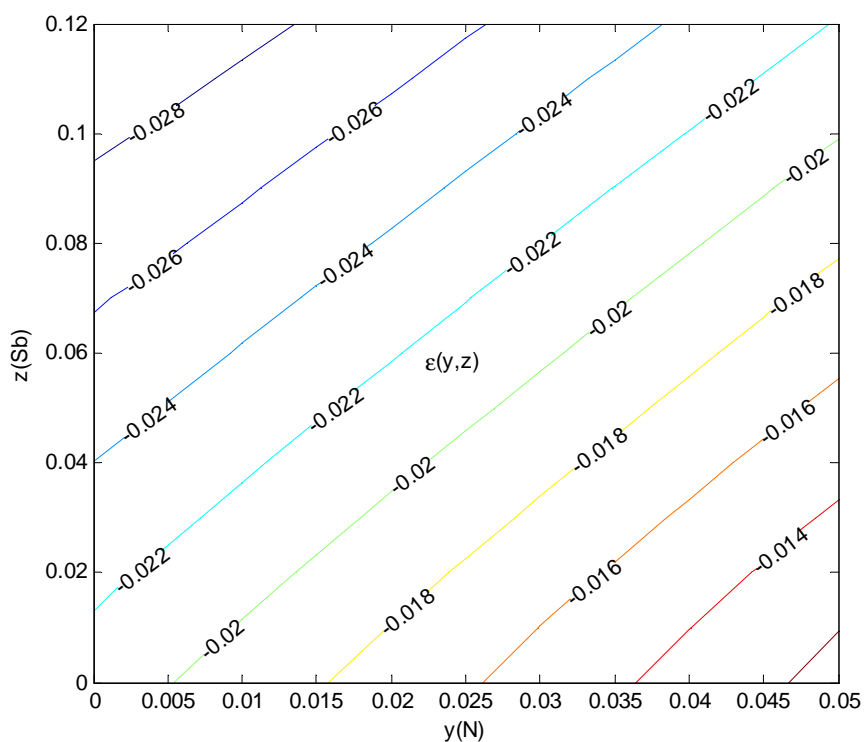


Figure 2.6 : Courbes iso-contrainte en fonction de  $y, z$  pour  $x=0.3$  : concentrations d'azote d'indium et d'antimoine respectivement.

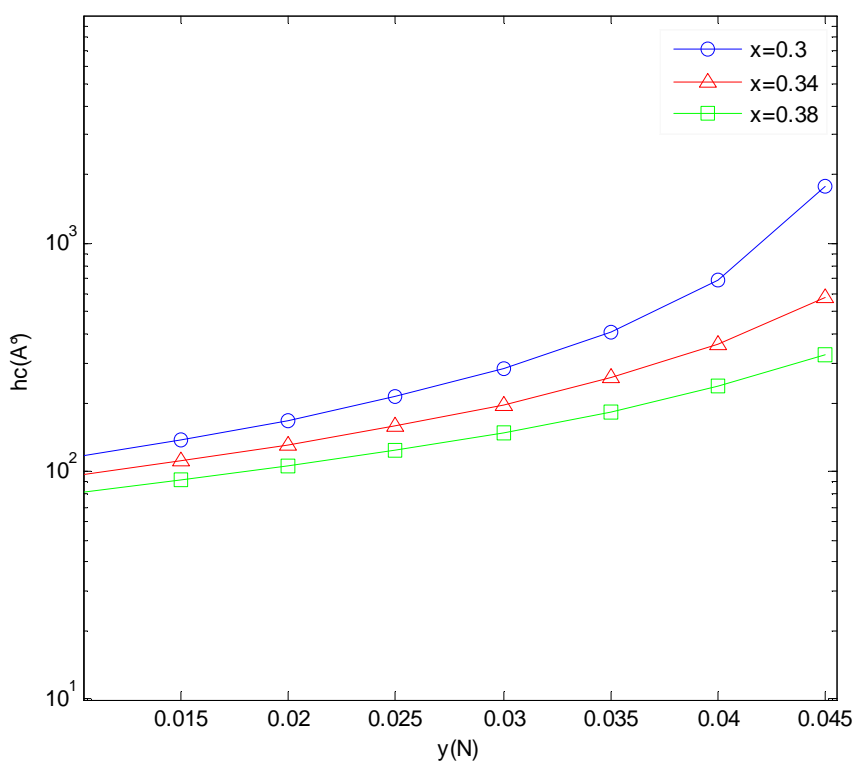


Figure 2.7 : Epaisseur critique en ( $\text{\AA}$ ), en fonction de la concentration de l'azote pour différentes fractions d'indium pour  $z = 12\%$ .

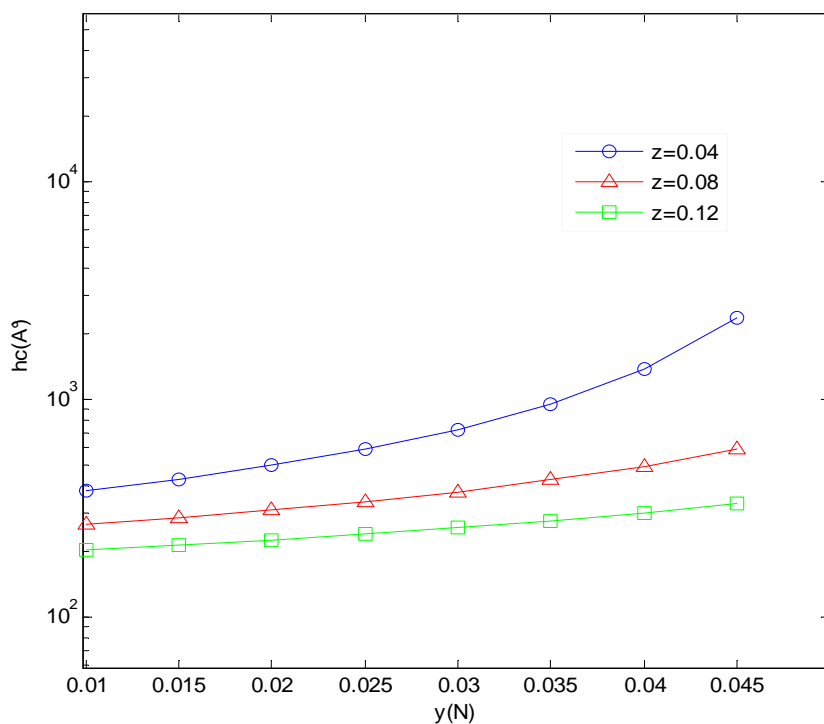


Figure 2.8 : Epaisseur critique en (Å), en fonction de la concentration de l'azote pour différentes fractions d'antimoine pour  $x = 0.30$

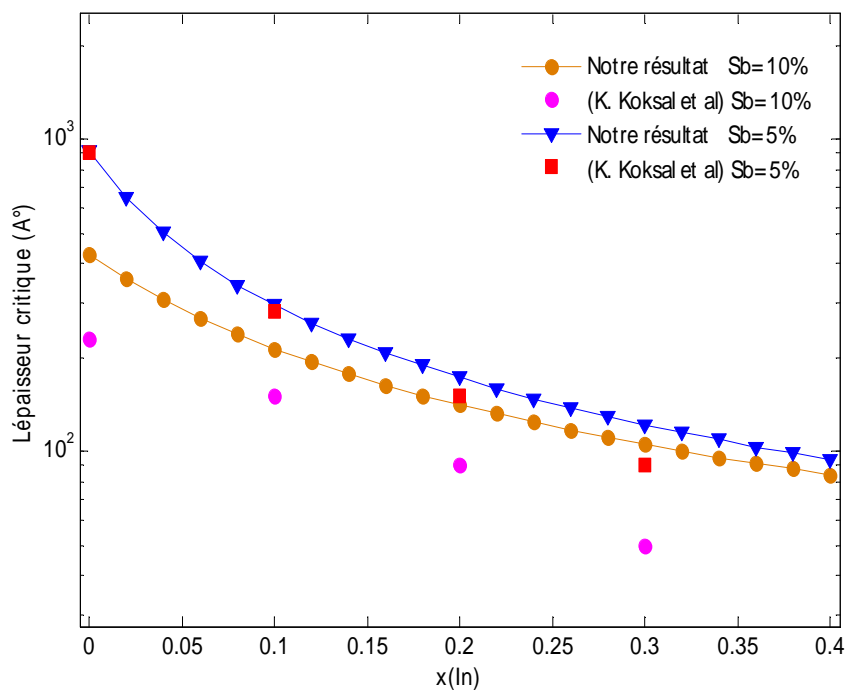


Figure 2.9 : évolution de l'épaisseur critique en (Å), en fonction de la concentration de l'indium pour différentes fractions d'antimoine pour  $y = 0.025$

### 2.4.3 Calcul de la bande interdite

Afin de déterminer l'énergie de la bande interdite nous utilisons le modèle de VBAC (Valence Band Anti-crossing) pour calculer la bande de conduction et la bande de valence, puis nous introduisons l'effet de la contrainte, et à la fin le gap sera donné par :

$$E_g = E_c(x, y, z) - E_v(x, y, z) \quad (2.15)$$

Il a été montré par mesures de spectroscopie [47] qu'à partir d'un certain pourcentage d'azote le gap se divise en deux sous bandes, et que plus la concentration d'azote augmente plus les deux sous bandes s'éloignent l'une de l'autre, ces résultats viennent appuyer ceux obtenus avec le modèle de BAC qui explique la diminution de l'énergie de gap par un éclatement de la bande de conduction avec l'incorporation de l'azote, et aussi un éclatement de la bande de valence avec l'incorporation de l'antimoine pour le VBAC. C'est donc la répulsion des sous bandes qui serait à l'origine de la réduction de l'énergie de la bande interdite, ceci est illustré par le schéma dans la figure 2.9

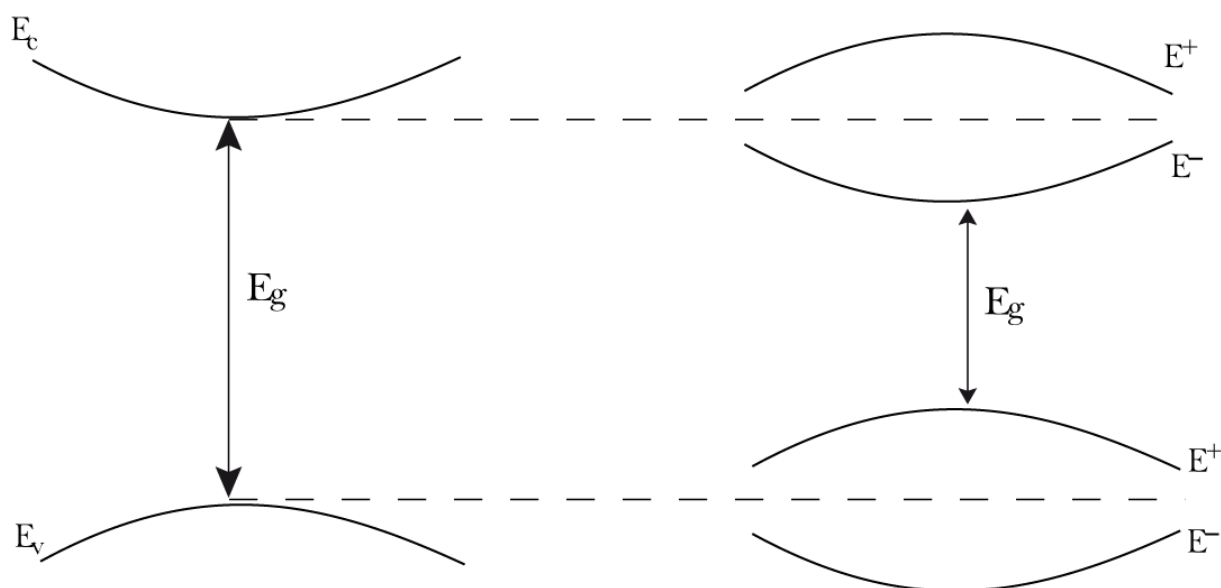


Figure 2.10 : Les bandes d'énergie dans une structure à puits quantique, avant et après éclatement de la bande de conduction et de la bande de valence.

Les résultats de simulation que nous avons obtenus sont représentés dans la figure 2.10 et la figure 2.11 qui décrivent l'évolution de l'énergie de gap en fonction des fractions d'indium et d'azote, et en fonction des fractions d'azote et d'antimoine respectivement.



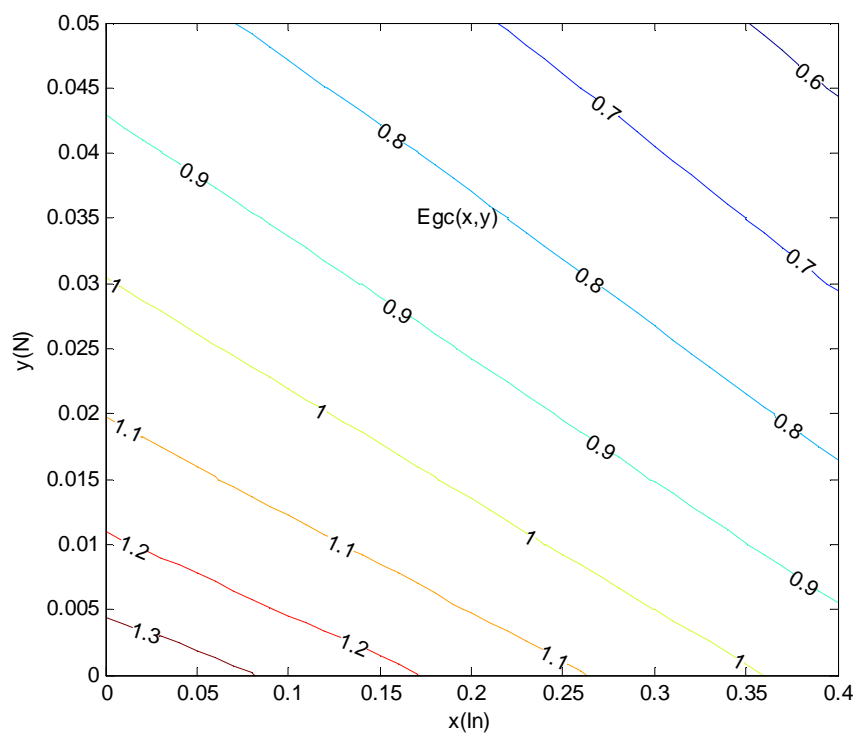


Figure 2.11 : Courbes iso-gap en (eV) en fonction de  $x, y$  pour  $z=0.04$  : concentrations d'indium d'azote et d'antimoine respectivement.

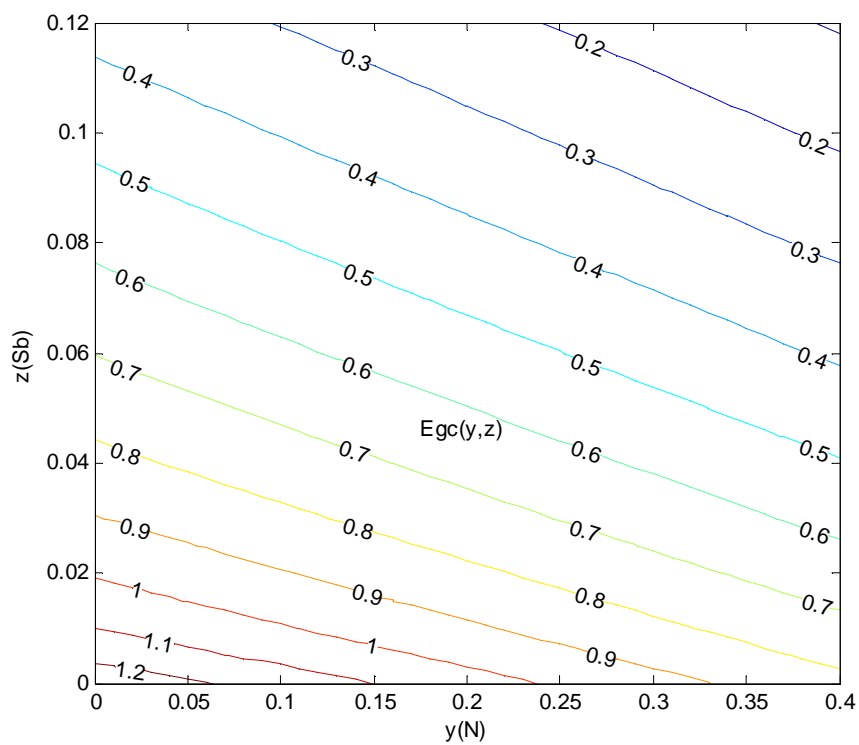


Figure 2.12 : Courbes iso-gap en (eV) en fonction de  $y, z$  pour  $x=0.3$  : concentrations d'azote d'antimoine et d'indium respectivement.

Pour la validation du modèle, nous l'avons appliqué dans un premier temps à l'alliage quaternaire  $GaInNAs$ , car il représente l'alliage  $III-N-V$  le plus étudié d'un côté, et également parce qu'il y a une sorte de consensus général sur les paramètres de ce quaternaire dans la littérature. Dans un deuxième temps nous avons comparé les résultats expérimentaux et de simulation obtenus pour l'alliage quinaire  $GaInNAsSb$ .

Les deux premières figures ( 2.12 et 2.13) représentent l'évolution de l'énergie de gap du quaternaire, les valeurs expérimentales sont obtenues par mesures de photoreflectance [48] pour la première figure, et de photoluminescence [49] pour la deuxième figure. L'erreur relative moyenne est de 1.3%, 6.3% respectivement.

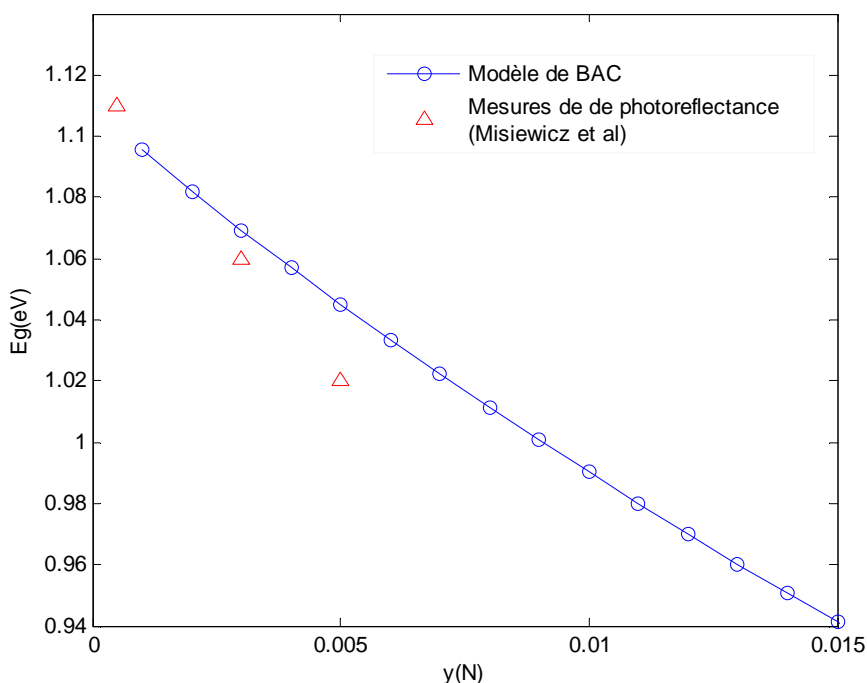


Figure 2.13 : Comparaison de variation de l'énergie de gap avec le pourcentage d'azote obtenu par simulation et par mesures de spectroscopie [48]. les échantillons sont des structures à puits quantique  $Ga_{0.68}In_{0.32}N_yAs_{1-y}/GaAs$  avec une largeur de puits  $L = 72\text{\AA}$ .

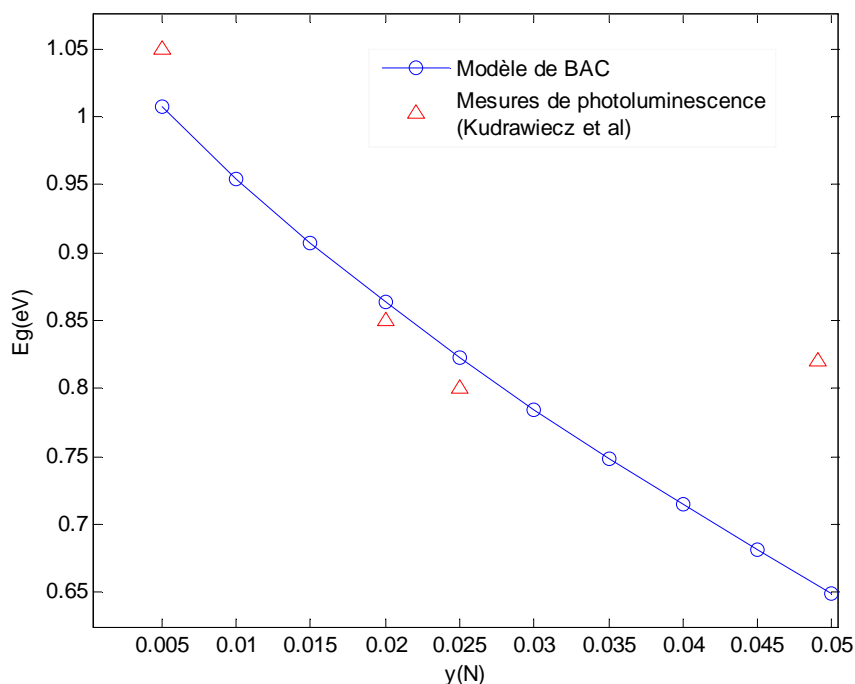


Figure 2.14 : Comparaison de variation de l'énergie de gap avec le pourcentage d'azote obtenu par simulation et par mesures de spectroscopie [49]. les échantillons sont des structures à puits quantique  $Ga_{0.72}In_{0.28}N_yAs_{1-y} / GaAs$  avec une largeur de puits  $L = 90\text{\AA}$ .

Nous avons constaté une erreur relativement élevée dans la deuxième structure '6.3%' ceci est due au pourcentage d'azote élevé '5%' qui détériore les propriétés optiques du matériau, cela introduit une erreur importante dans la lecture des mesures de Photoluminescence. Pour des pourcentages d'azote allant jusqu'à 2.5% l'erreur sur la même structure est beaucoup moins importante '1.5%'.

Et pour le quinaire l'erreur moyenne relative est de 3.65%, les valeurs expérimentales sont obtenues par mesures d'absorption [50], les échantillons sont des structures à puits quantique à base de  $GaInNAsSb/GaAs$  avec  $x=0.09$ ,  $y=0.025$  pour plusieurs valeurs de  $Sb$ .

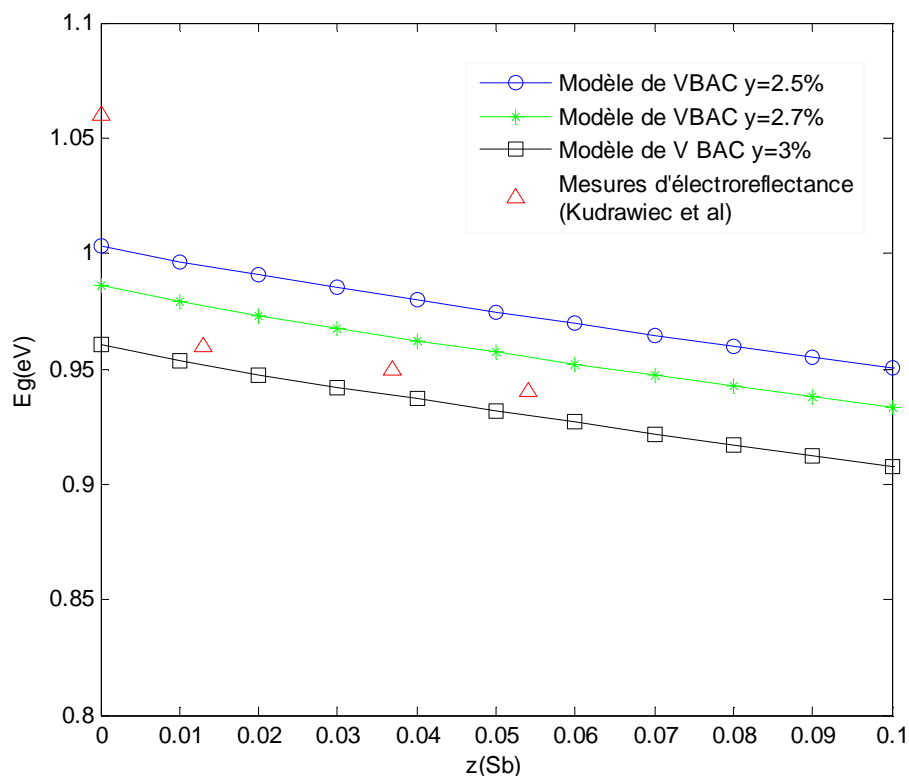


Figure 2.15 : Comparaison de variation de l'énergie de gap avec le pourcentage d'antimoine obtenu par simulation et par mesures d'électroréfectance [50]. Les échantillons sont des structures à puits quantique  $\text{Ga}_{0.91}\text{In}_{0.09}\text{N}_{0.025}\text{As}_{0.975-z}\text{Sb}_z$  / GaAs avec une largeur de puits  $L = 75\text{\AA}$ .

#### 2.4.4 Dépendance du gap en température

Motivés par l'augmentation incessante des quantités d'informations à traiter et à véhiculer sur fibres optiques et qui demandent de plus en plus de capacités, beaucoup de travaux portant sur la dépendance de l'énergie d'émission en température ont été publiés [51, 52, 35], puisque l'augmentation des capacités exige des sources lasers avec une bonne stabilité en température.

La dépendance de l'énergie d'émission en température est due essentiellement à la dépendance de l'énergie de gap. Il a été montré qu'elle diminue d'autant plus que le pourcentage d'azote incorporé est important, à titre d'exemple dans le  $\text{GaInNAs}$  elle diminue à moins de 60% pour 1% d'azote incorporé seulement [35], montrant ainsi l'avantage que présente cette famille de nitrures puisqu'elle a une bonne stabilité face aux fluctuations de la température.

Le modèle de VBAC permet également d'expliquer cette diminution, il décrit cet effet en considérant que le niveau des états localisés introduit par l'azote ne

dépend pas de la température, on obtient alors les expressions décrivant les deux sous bandes issues de l'éclatement  $E_+$  et  $E_-$  :

$$E_{\pm} = \frac{1}{2} [E_N + E_M(T) \pm \sqrt{(E_N - E_M(T))^2 + 4 V_{MN}^2}] \quad (2.16)$$

La figure suivante montre l'évolution de l'énergie de la bande interdite en fonction de la température obtenue par la relation empirique de Varshni.

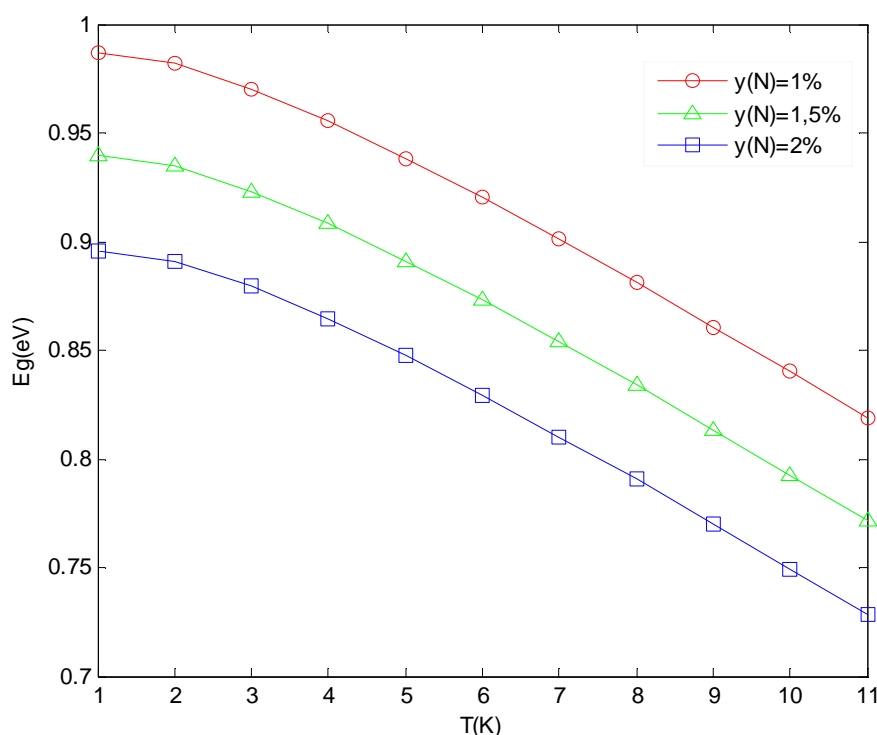


Figure 2.16 : Evolution de l'énergie de la bande interdite en fonction de la température, pour  $x=0.3$ ,  $z=0.12$ .

#### 2.4.5 Les discontinuités de bandes

Pour calculer les niveaux énergétiques dans un puits quantique, il est nécessaire de connaître sa profondeur. Cette dernière dépend de la différence de gap entre les matériaux qui constituent la barrière et le puits, elle dépend également de la façon dont se répartit cette différence entre bande de conduction et bande de valence de l'hétérostructure, ainsi suivant la position relative des gaps, trois possibilités qui correspondent à trois types d'hétérostructures sont envisageables,

Hétérostructure de type *I*: les électrons et les trous sont confinés dans le puits, c'est le cas de notre système.

Et pour les hétérostructures de type *II* et *III* les électrons sont confinés dans le puits, mais les trous se retrouvent cette fois-ci confinés dans la barrière.

Les discontinuités de bandes sont également le mécanisme dominant qui affecte la température caractéristique  $T_0$ , et le courant de fuite [53,54].

Ainsi nous venons de mettre en évidence le fait que les discontinuités de bandes sont des paramètres importants dans la modélisation des structures, malheureusement elles sont difficiles à mesurer de façon directe.

Dans la structure *GaInNAsSb/GaAs* nous avons vu que l'azote agit sur la bande de conduction en réduisant son minimum ( $\Gamma$ ) et que l'interaction avec la bande de valence est négligeable.

En outre, l'antimoine augmente le minimum de la bande de valence avec un effet négligeable sur la bande de conduction. La superposition des deux effets offre à ce quinaire une propriété très intéressante, c'est le fait de pouvoir ajuster les décalages  $\Delta E_c$  et  $\Delta E_v$  indépendamment en modifiant les fractions d'azote et d'antimoine respectivement, ceci est illustré dans les deux figures (2.16 , 2.17) qui représentent l'évolution de  $\Delta E_c$  et de  $\Delta E_v$  en fonction des fractions d'azote et d'antimoine.

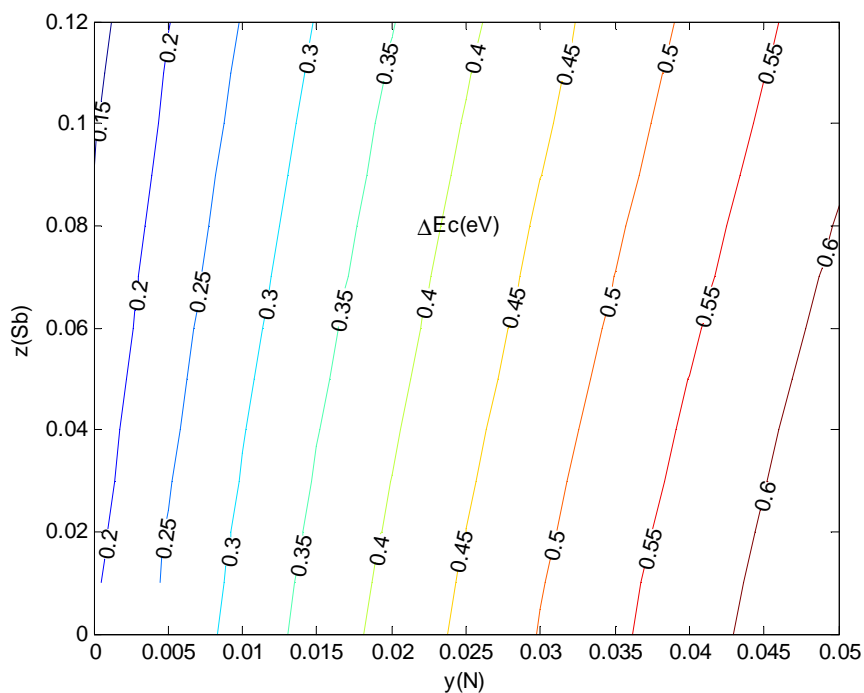


Figure 2.17 : Courbes de  $\Delta E_c$  (eV) en fonction des paramètres de composition  $y, z$  pour  $x=0.3$ .

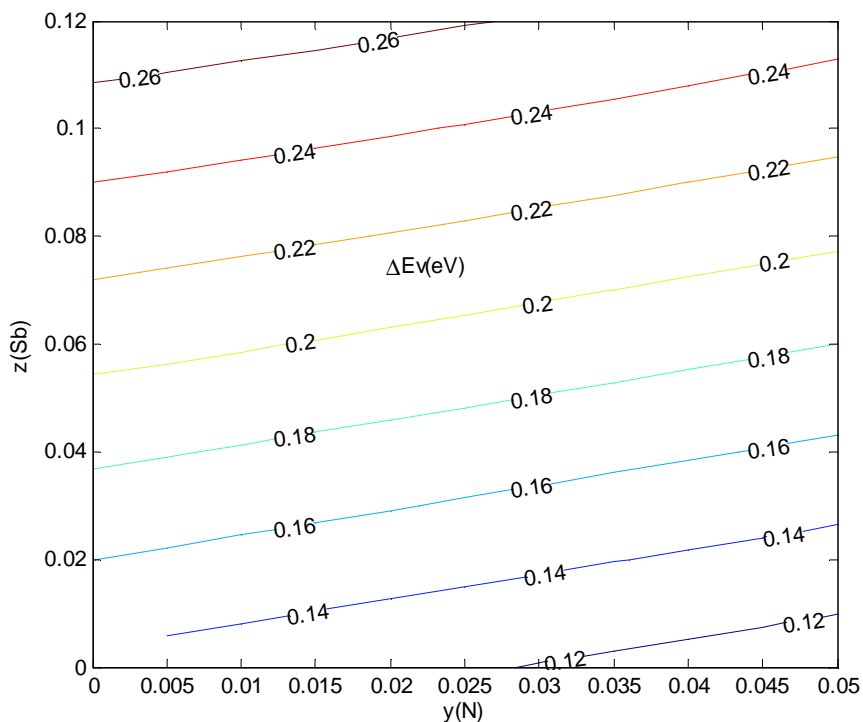


Figure 2.18 : Courbes de  $\Delta E_v$  (eV) en fonction des paramètres de composition  $y, z$  pour  $x=0.3$ .

On remarque que les courbes de  $\Delta E_c$  sont presque verticales car elles changent peu avec la fraction d'antimoine (axe horizontal) et inversement pour les courbes de  $\Delta E_v$  qui sont presque horizontales à cause du faible effet de l'azote.

Nous avons représenté également l'évolution des taux de confinement  $Q_c$  et  $Q_v$  en fonction des fractions de composition  $y, z$ , puis nous avons comparé nos résultats aux résultats expérimentaux de la littérature.

$$\text{où } Q_c = \frac{\Delta E_c}{\Delta E_c + \Delta E_v} \text{ et } Q_v = \frac{\Delta E_v}{\Delta E_c + \Delta E_v} .$$

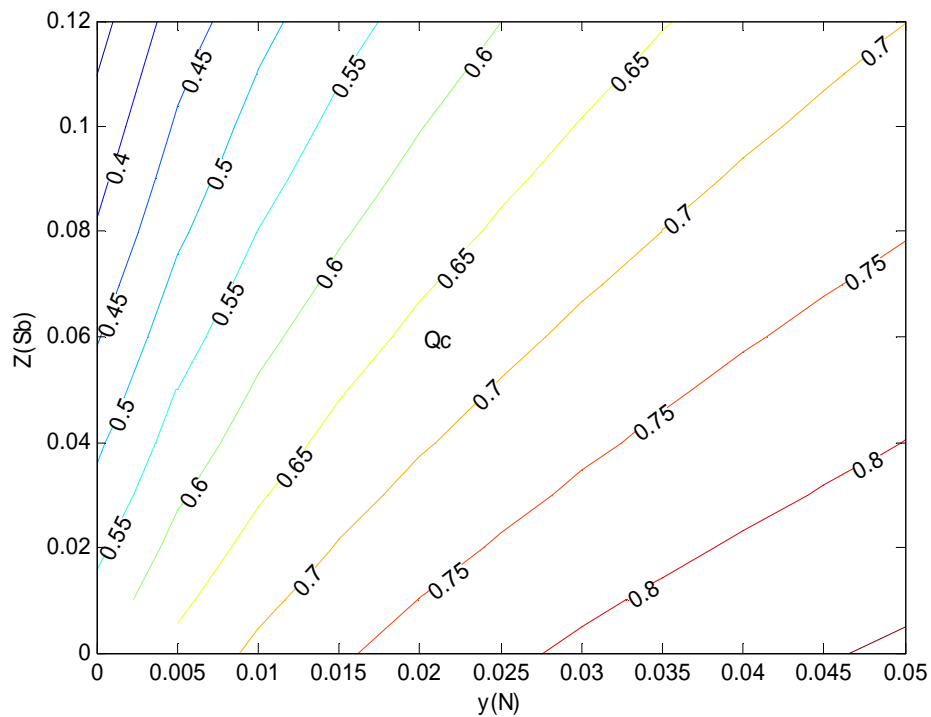


Figure 2.19 : Courbes de  $Q_c$  en fonction des paramètres de composition  $y, z$  pour  $x=0.3$ .

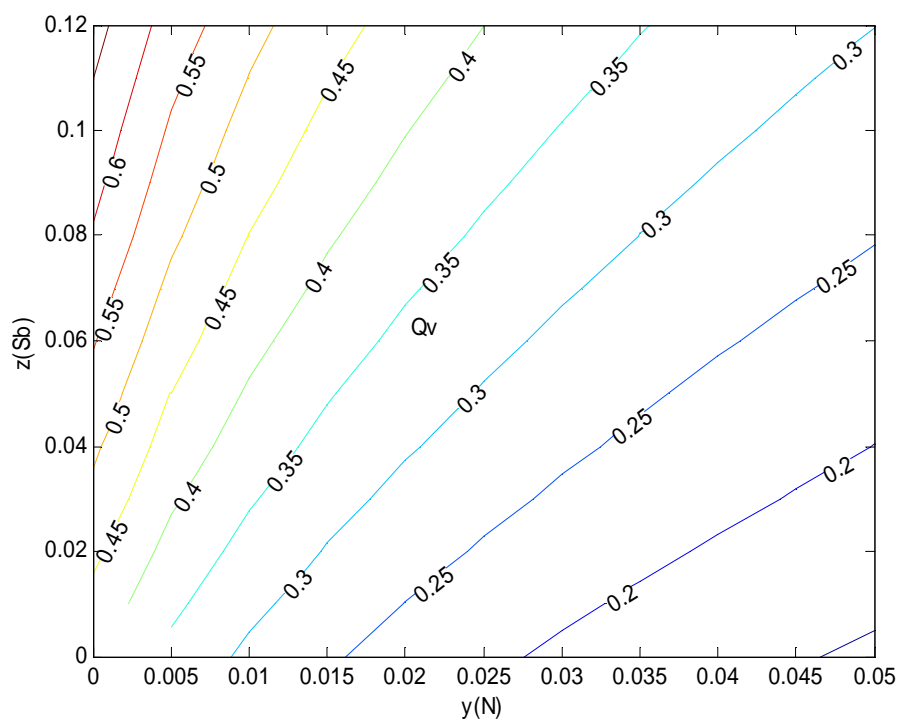


Figure 2.20 : Courbes de  $Q_v$  en fonction des paramètres de composition  $y, z$  pour  $x=0.3$ .



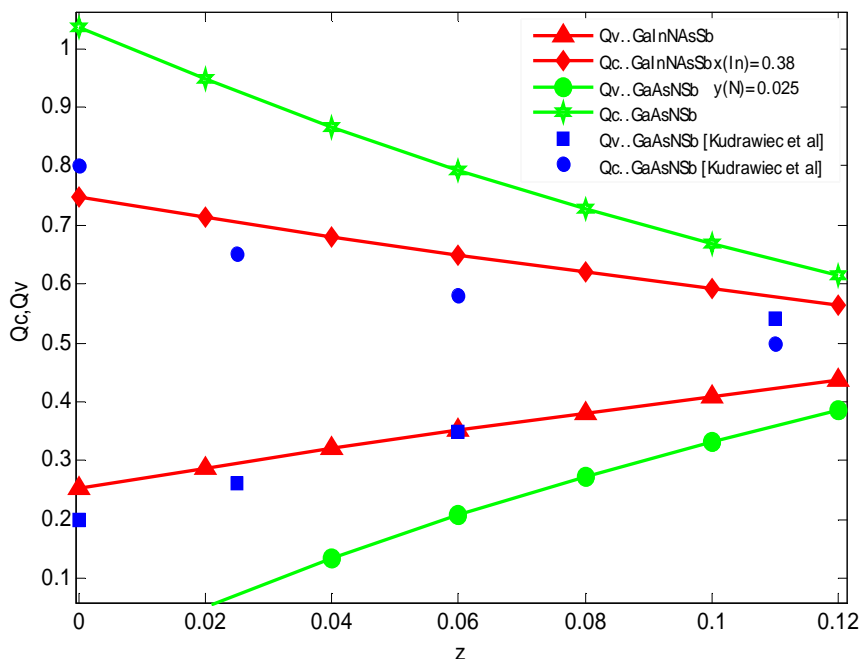


Figure 2.21 : évolution des taux de confinement  $Q_c, Q_v$  en fonction de la concentration de l'antimoine obtenus par simulation et par mesures de spectroscopie [55]

On constate que l'azote améliore le confinement des électrons, et que l'antimoine et l'indium améliorent celui des trous, ce comportement est en bon accord avec les résultats expérimentaux de la littérature [26,55] qui arrivent à la conclusion que le  $Q_c$  dans le système  $GaInNAsSb/GaAs$  varie de 50% à 80% , et que l'introduction de l'azote l'améliore, et en même temps que l'antimoine le diminue. Ils montrent également que l'effet de l'antimoine est d'autant moins important que les fractions d'indium et d'azote diminuent.

## 2.5 Conclusion

Après avoir présenté dans ce chapitre les nouveaux matériaux 'les nitrures d'éléments III-V' nous avons abordé les propriétés très particulières des alliages les plus prometteurs de cette famille, ces propriétés attrayantes sont principalement dues à l'incorporation de l'azote qui a un atome très différent en terme de taille et d'électronégativité de l'atome de l'arsenic auquel il se substitue, ce qui a causé une forte diminution de l'énergie de gap entre autres.

Dans le but de décrire ces propriétés quantitativement, nous avons utilisé le modèle d'Anticroisement de bandes, nous l'avons appliqué en premier lieu aux quaternaires *GaInNAs* et le *GaNAsSb* ce qui nous a permis d'étudier le gap et son évolution en fonction des fractions de composition, nous avons vu que l'azote réduit la dépendance de gap en température, ouvrant la voie à la réalisation des dispositifs avec une bonne stabilité thermique, puis nous avons étudié le paramètre de maille, la contrainte et les décalages de bandes du quinaire.

Ainsi nous mettons en évidence le fait que cette structure constitue un bon compromis qui nous permet de tirer profit des qualités des deux quaternaires le *GaInNAs* et le *GaNAsSb*, notamment le bon confinement, la réduction de l'énergie de gap et la réduction de la contrainte qui ajoute une flexibilité supplémentaire à la réalisation des structures par différentes méthodes de croissance, tout ça en réduisant les inconvénients que présentent les deux quaternaires, grâce à une propriété très attrayante dans le *GaInNAsSb* et qui ajoute un autre degré de liberté dans le design des dispositifs à base de cet alliage, c'est le fait de pouvoir modifier plusieurs paramètres indépendamment, et ce, en jouant sur les fractions de composition  $x, y, z$  d'indium, d'azote et antimoine respectivement.

Dans le chapitre suivant, nous allons calculer les états énergétiques confinés dans le puits quantique et les énergies de transition.

## CHAPITRE 3

### CALCUL DES ENERGIES DE TRANSITION.

Le calcul des transitions électroniques qui se produisent dans un semiconducteur 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.

En optoélectronique ce calcul est souvent fait en résolvant l'équation de Schrödinger selon le formalisme de Ben-Daniel-Duke [56,57]

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial z} \left( \frac{1}{m_e} \frac{\partial}{\partial z} \right) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e} + V_c(z) \right) \varphi(z) = E\varphi(z) \quad (3.1)$$

Il existe plusieurs méthodes qui permettent de résoudre cette équation. Pour calculer la structure de bandes d'un puits quantique sous contraintes, il y a celles qui sont purement numériques, comme les différences finies et les éléments finis, ou bien semi-analytique, comme la fameuse méthode *kp* [58], la méthode dite LCAO (Combinaison linéaire d'Orbitales Atomiques) [59, 60], la matrice de transfert [61] et la méthode de Galerkin.

Dans ce chapitre, nous prendrons comme point de départ la fameuse méthode *kp*, nous évoluerons ensuite vers celle que nous avons choisi, soit la méthode de Galerkin, le but étant de l'explicitier et de montrer les avantages qu'elle présente : 'facilité de mise en œuvre, précision et temps de calcul réduit entre autres'.

#### 3.1 La méthode *kp*

La théorie *kp* est l'une des méthodes les plus utilisées pour calculer la structure de bandes  $E(k)$  au voisinage du point  $\Gamma$ . Ce modèle consiste à introduire la fonction de Bloch (Equation 1.6) dans l'équation de Schrödinger, on obtient alors l'hamiltonien *kp* des électrons [58] :

$$\left[ \frac{\vec{p} \cdot \vec{p}}{2m_0} + V(\vec{r}) + \frac{\hbar}{m_0} \vec{k} \cdot \vec{p} \right] \cdot u_n(\vec{K}, \vec{r}) = \left[ E_n(\vec{K}) + \frac{\hbar^2 \cdot k^2}{2m_0} \right] u_n(\vec{K}, \vec{r}) \quad (3.2)$$

Pour la mise en œuvre de cette méthode, nous allons considérer le modèle le plus simple, soit le modèle à deux bandes. Comme son nom l'indique, ce modèle ne prend en compte que la bande de conduction et la bande de valence, en supposant que le gap du matériau est suffisamment élevé pour négliger le couplage entre ces deux bandes ; de même on considère que l'énergie de spin-orbite  $\Delta_0$  est assez importante pour négliger la bande SO. Mais dans les matériaux à base de *GaAs* et *InP* les deux bandes de valence restantes sont très proches et ne peuvent être traitées séparément. Ainsi l'interaction entre la bande des trous lourds et celle des trous légers mène vers une dispersion d'énergie  $E(k)$  non parabolique, et l'hamiltonien prendra la forme d'une matrice de dimensions 4x4. [61]

$$H = \begin{bmatrix} P_k + Q_k & -S_k & R_k & 0 \\ -S_k^* & P_k - Q_k & 0 & R_k \\ R_k^* & 0 & P_k - Q_k & S_k \\ 0 & R_k^* & S_k^* & P_k + Q_k \end{bmatrix} \quad (3.3)$$

Avec :

$$P_k = \frac{\hbar^2 \gamma_1}{2m_0} (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) - E_v^0 \quad (3.4)$$

$$Q_k = \frac{\hbar^2 \gamma_2}{2m_0} (k_x^2 + k_y^2 - 2k_z^2). \quad (3.5)$$

$$R_k = -\sqrt{3} \frac{\hbar^2 \gamma_1}{2m_0} (k_x^2 - k_y^2) + i \cdot 2 \cdot \sqrt{3} \cdot \frac{\hbar^2 \gamma_3}{2m_0} k_x k_y. \quad (3.6)$$

$$S_k = 2 \cdot \sqrt{3} \frac{\hbar^2 \gamma_3}{2m_0} (k_x - i \cdot k_y) \cdot k_z. \quad (3.7)$$

Où  $k_z$  est orienté dans la direction (100).

$E_v^0$ : est l'énergie du haut de la bande de valence.

$R_k^*$  et  $S_k^*$  sont les conjugués de  $R_k$  et  $S_k$ .

$\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3$  sont les paramètres de Luttinger, on les introduit pour compenser l'effet des bandes non prises en compte.

Pour déterminer les valeurs propres  $E(\vec{k})$  il faut résoudre l'équation :

$$\det[H_{ij} - \delta_{ij}] = 0. \quad (3.8)$$

Où  $\delta_{ij}$  ( $\delta_{ij} = 1$  pour  $i = j$ ,  $\delta_{ij} = 0$  sinon) est appelé 'le symbole de Kronecker.

Les éléments non diagonaux du hamiltonien représentent le couplage entre les bandes de valence. Dans le cas où ( $S_k = R_k = 0$ ) la matrice devient diagonale et la dispersion d'énergie devient parabolique.

Dans une publication théorique [61] Chuang présente une méthode de résolution analytique qui consiste à faire un changement des fonctions de base, cette transformation réduit les dimensions du hamiltonien à 2x2, ce qui permet d'obtenir des solutions analytiques des fonctions de dispersion.

$$E_{hh}(\vec{k}) = P_k + \sqrt{Q_k^2 + |R_k|^2 + |S_k|^2}. \quad (3.9)$$

$$E_{lh}(\vec{k}) = P_k - \sqrt{Q_k^2 + |R_k|^2 + |S_k|^2}. \quad (3.10)$$

Et

$$E_e(\vec{k}) = E_v^0 - \frac{\hbar^2}{2m_0} \left[ \gamma_1 k^2 \pm \sqrt{4\gamma_2^2 k^4 + 12(\gamma_3^2 - \gamma_2^2)(k_x^2 k_y^2 + k_x^2 k_z^2 + k_y^2 k_z^2)} \right] \quad (3.11)$$

### 3.1.1 L'hamiltonien contraint

L'hamiltonien contraint peut être considéré comme une perturbation de l'hamiltonien non contraint  $H_0$ . L'équation (3.3) en présence de la contrainte devient :

$$[H_0 + H_\varepsilon] U_n^s(\vec{k}, \vec{r}) = E_n(\vec{k}) U_n^s(\vec{k}, \vec{r}). \quad (3.12)$$

Où  $U_n^s$  est le potentiel périodique du réseaux sous contrainte.

Pour une contrainte de compression il faut ajouter les termes  $P_\varepsilon$  et  $Q_\varepsilon$  aux éléments de la diagonale ( $P_k = P_k + P_\varepsilon$ ,  $Q_k = Q_k + Q_\varepsilon$ ).

Où

$$P_\varepsilon = -a_v(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}) \quad (3.13)$$

$$Q_\varepsilon = -\frac{b}{2}(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} - 2\varepsilon_{zz}) \quad (3.14)$$

$$\varepsilon_{xx} = \varepsilon_{yy} = \frac{a-a_0}{a_0} \quad (3.15)$$

$$\varepsilon_{xx} = -2 \frac{c_{12}}{c_{11}} \varepsilon_{xx} \quad (3.16)$$

$a$  : paramètre de maille de la couche active.

$a_0$  : paramètre de maille de la barrière.

$a_c, a_v$  sont les potentiels de déformation hydrostatique de la bande de conduction et de la bande de valence respectivement.

La dispersion d'énergie devient alors : [6]

$$E_{hh}(\vec{k}) = E_v^0 - P_k - P_\varepsilon - \text{sgn}(Q_\varepsilon) \sqrt{(Q_k + Q_\varepsilon)^2 + |R_k|^2 + |S_k|^2}. \quad (3.17)$$

$$E_{hh}(\vec{k}) = E_v^0 - P_k - P_\varepsilon + \text{sgn}(Q_\varepsilon) \sqrt{(Q_k + Q_\varepsilon)^2 + |R_k|^2 + |S_k|^2}. \quad (3.18)$$

Le facteur  $Q_\varepsilon$  est négatif pour une contrainte de compression, et positif pour une contrainte de tension.

$$E(\vec{k}) = E_v^0 - P_\varepsilon - \frac{\hbar^2}{2m_0} \left[ \gamma_1(k_x^2 + k_z^2) + \sqrt{\left( \gamma_2^2(k_x^2 - 2k_z^2) + \frac{2m_0}{\hbar^2} Q_\varepsilon \right)^2 + 3\gamma_2^2 k_x^4 + 12\gamma_3^2 k_x^2 k_z^2} \right] \quad (3.19)$$

### 3.1.2 Modèle à trois bandes

Dans cette méthode, le domaine de validité est déterminé par les dimensions de la base, soit le nombre de bandes prises en compte. Pour le modèle que nous venons de présenter, deux bandes seulement ont été prises en compte; ce modèle n'est pas suffisamment précis, car le couplage avec les autres bandes d'énergies a été négligé. D'autres modèles sont proposés dans la littérature, comme le modèle à trois bandes de Bastard [56] ou de Luttinger-Kohn [62] qui prend en compte l'influence des autres bandes sur la bande des trous lourds et de split-off, l'hamiltonien obtenu est de la forme : [63]

$$H = \begin{bmatrix} P + Q & -S & R & 0 & -\frac{S}{\sqrt{2}} & \sqrt{2}R \\ -S^* & P - Q & 0 & R & -\sqrt{2}Q & \sqrt{\frac{3}{2}}S \\ R^* & 0 & P - Q & S & \sqrt{\frac{3}{2}}S^* & \sqrt{2}Q \\ 0 & R^* & S^* & P + Q & -\sqrt{2}R^* & -\frac{S^*}{\sqrt{2}} \\ -\frac{S^*}{\sqrt{2}} & -\sqrt{2}Q & \sqrt{\frac{3}{2}}S & -\sqrt{2}R & P + \Delta_0 & 0 \\ \sqrt{2}R^* & \sqrt{\frac{3}{2}}S^* & \sqrt{2}Q & -\frac{S}{\sqrt{2}} & 0 & P + \Delta_0 \end{bmatrix}$$

$$\text{Avec } P = P + P_\varepsilon, \quad Q = Q + Q_\varepsilon, \quad R = R_k, \quad S = S_k.$$

Il faut aussi prendre en compte les décalages des bandes des trous lourds, des trous légers et de spin-orbite dus à la contrainte :

$$E_{hh}^0 = E_v^0 - P_\varepsilon - Q_\varepsilon. \quad (3.20)$$

$$E_{lh}^0 = E_v^0 - P_\varepsilon + \frac{1}{2} [Q_\varepsilon - \Delta_0 + \sqrt{\Delta_0^2 + 9Q_\varepsilon^2 + 2Q_\varepsilon \Delta_0}] \quad (3.21)$$

$$E_{so}^0 = E_v^0 - P_\varepsilon + \frac{1}{2} [Q_\varepsilon - \Delta_0 - \sqrt{\Delta_0^2 + 9Q_\varepsilon^2 + 2Q_\varepsilon \Delta_0}] \quad (3.22)$$

Par ailleurs, des calculs menés par Moustafa el Kurdi [64] ont montré la nécessité de prendre en compte un modèle  $kp$  à 14 bandes pour modéliser les semiconducteurs à bande interdite indirecte. Plus récemment un modèle  $kp$  à 30 bandes a été proposé pour modéliser les structures du  $Si$  et du  $Ge$  et des alliages  $Si_{1-x}Ge_x$  [58] avec une grande précision.

## 3.2 Méthode de Galerkin

### 3.2.1 Présentation

Contrairement aux méthodes au caractère très général comme les différences finies et la matrice de transfert, cette méthode ne peut s'appliquer qu'aux structures où l'on peut identifier des puits de potentiel pour les quels il est possible d'avoir une expression analytique des états liés, c'est le cas de notre structure [65]. Les avantages majeurs que présente cette méthode et pour lesquels nous l'avons

choisie sont : l'efficacité, la facilité de sa mise en œuvre: il n'ya pas besoin de mailler la structure, les fonctions choisies ont déjà la forme des fonctions que l'on cherche, exponentielles et sinusoïdales, plus un temps de calcul fortement réduit.

### 3.2.2 Principe et mise en œuvre

On prend le cas général d'un puits simple asymétrique figure (3.1),

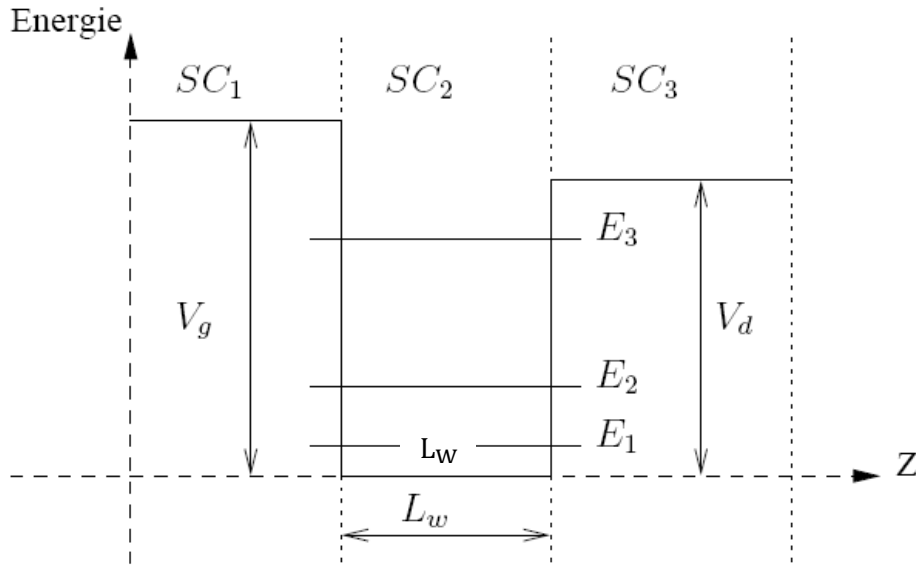


Figure 3.1 : Puits de potentiel asymétrique  $V_g, V_d$  sont les potentiels de gauche et de droite respectivement.

Nous cherchons à résoudre l'équation de Schrödinger dans le puits. Selon l'approximation de Ben-Daniel-Duke (eq. 3.1), les solutions sont de la forme :

$$\varphi_n(z) = \begin{cases} A_{g,n} \cdot e^{(\kappa_{g,n} \cdot z)} & z \leq 0 \\ A_{w,n} \cdot \sin(\kappa_{w,n} \cdot z + \delta_n) & 0 \leq z \leq L_w \\ A_{d,n} \cdot e^{(-\kappa_{d,n} \cdot z)} & z \geq L_w \end{cases} \quad (3.23)$$

Où :

$$\kappa_{g,n} = \frac{\sqrt{2 \cdot m_g^* \cdot (V_g - E_n)}}{\hbar} \quad (3.24)$$

$$\kappa_{w,n} = \frac{\sqrt{2 \cdot m_w^* \cdot E_n}}{\hbar} \quad (3.25)$$

$$\kappa_{d,n} = \frac{\sqrt{2 \cdot m_d^* \cdot (V_d - E_n)}}{\hbar} \quad (3.26)$$



$m_g^*$ ,  $m_w^*$  et  $m_d^*$  étant les masses effectives de l'électron dans la barrière de gauche, le puits et la barrière de droite, respectivement  $\kappa_g$ ,  $\kappa_w$  et  $\kappa_d$  étant les vecteurs d'ondes dans la barrière de gauche, le puits et la barrière de droite, respectivement.

La masse effective et le potentiel étant constant dans chaque matériau, on peut écrire :

$$\text{-dans la barrière de gauche : } \varphi_g(z) = A_g \cdot e^{(\kappa_g \cdot z)} \quad (3.27)$$

$$\text{-dans le puits : } \varphi_w(z) = A_w \cdot \sin(\kappa_w \cdot z + \delta) \quad (3.28)$$

$$\text{-dans la barrière de droite : } \varphi_d(z) = A_d \cdot e^{(-\kappa_d \cdot z)} \quad (3.29)$$

Les conditions aux interfaces :

$\varphi$  est continue et  $\frac{1}{m^*} \frac{\partial \varphi}{\partial z}$  est continue également. Ce qui permet d'écrire le système d'équation :

$$\left\{ \begin{array}{l} A_g = A_w \cdot \sin(\delta) \\ A_g \frac{\kappa_g}{m_g^*} = A_w \cdot \frac{\kappa_w}{m_w^*} \cdot \cos(\delta) \\ A_w \sin(\kappa_w L_w + \delta) = A_d \cdot e^{(-\kappa_d \cdot L_w)} \\ A_w \frac{\kappa_w}{m_w^*} \cos(\kappa_w L_w + \delta) = -A_d \frac{\kappa_d}{m_d^*} \cdot e^{(-\kappa_d \cdot L_w)} \end{array} \right. \quad (3.30)$$

On a donc :

$$\tan(\delta) = \frac{m_g^*}{\kappa_g} \frac{\kappa_w}{m_w^*}$$

$$\tan(\kappa_w L_w + \delta) = -\frac{m_d^*}{\kappa_d} \frac{\kappa_w}{m_w^*}$$

D'où l'équation de la dispersion :

$$\kappa_w L_w + \arctan\left(\frac{m_g^*}{\kappa_g} \frac{\kappa_w}{m_w^*}\right) + \arctan\left(\frac{m_d^*}{\kappa_d} \frac{\kappa_w}{m_w^*}\right) + n\pi = 0 \quad (3.31)$$

On peut connaître le nombre des états confinés dans le puits en considérant que le dernier état (d'énergie la plus élevée) est situé en dessous de la barrière de plus bas potentiel.  $E \leq V_{\text{inf}} = \min(V_g, V_d)$ .

Pour déterminer le nombre d'états, on considère  $m_{\text{inf}}^*$ ,  $m_{\text{sup}}^*$  les masses dans la barrière de plus bas potentiel et dans la barrière de plus haut potentiel respectivement.

on peut écrire alors :

$$\kappa_w L_w + \arctan\left(\frac{m_{\text{sup}}^* \kappa_w}{\kappa_{\text{sup}} m_w^*}\right) + \arctan\left(\frac{m_{\text{inf}}^* \kappa_w}{\kappa_{\text{inf}} m_w^*}\right) + n\pi = 0$$

Lorsque  $E \rightarrow V_{\text{inf}}$ .

$$\arctan\left(\frac{m_{\text{inf}}^* \kappa_w}{\kappa_{\text{inf}} m_w^*}\right) \rightarrow \frac{\pi}{2}$$

Le nombre des états confinés dans le puits sera alors :

$$n_{\text{états}} = \frac{1}{2} + \frac{2 \cdot L_w}{\hbar} \cdot \sqrt{2 \cdot m_w^* \cdot V_{\text{inf}}} + \frac{1}{\pi} \arctan\left(\sqrt{\frac{m_{\text{sup}}^* \cdot V_{\text{inf}}}{m_w^* \cdot |V_g - V_d|}}\right) \quad (3.32)$$

Pour notre structure, nous avons un puits symétrique, donc :

$$V_g = V_d = V_b \quad (V_b \text{ Potentiel dans la barrière}).$$

L'équation (3.19) devient :

$$\kappa_w L_w + 2 \cdot \arctan\left(\frac{m_b^* \kappa_w}{m_w^* \kappa_b}\right) + n\pi = 0 \quad (3.33)$$

Avec  $m_b^*$  : masse effective de l'électron dans la barrière.  $\kappa_b, \kappa_w$  : vecteurs d'ondes dans la barrière et dans le puits respectivement, le nombre d'états sera alors :

$$n_{\text{états}} = 1 + \frac{2 \cdot L_w}{\hbar} \cdot \sqrt{2 \cdot m_w^* \cdot V_b} \quad (3.34)$$

La résolution de l'équation de dispersion (Equation 3.31) nous donne les niveaux quantiques dans le puits. Les figures 3.2 , 3.3 et 3.4 présentent l'évolution de ces niveaux dans le puits en fonction de son épaisseur pour différentes fractions d'indium, d'azote et d'antimoine. Ces résultats sont valables pour des puits quantiques isolés, c'est-à-dire pour des épaisseurs de barrière très supérieures à celle du puits.

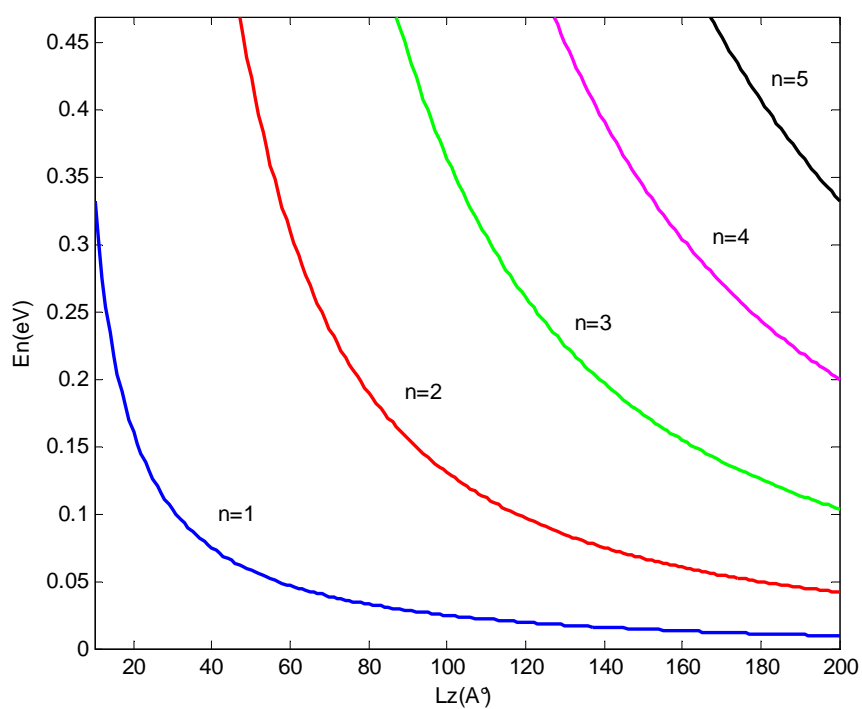


Figure 3.2 : Evolution de l'énergie des électrons dans le puits quantique à base de  $\text{Ga}_{0.7}\text{In}_{0.3}\text{N}_{0.025}\text{As}_{0.955}\text{Sb}_{0.02}$  à  $T = 300^\circ\text{K}$ .

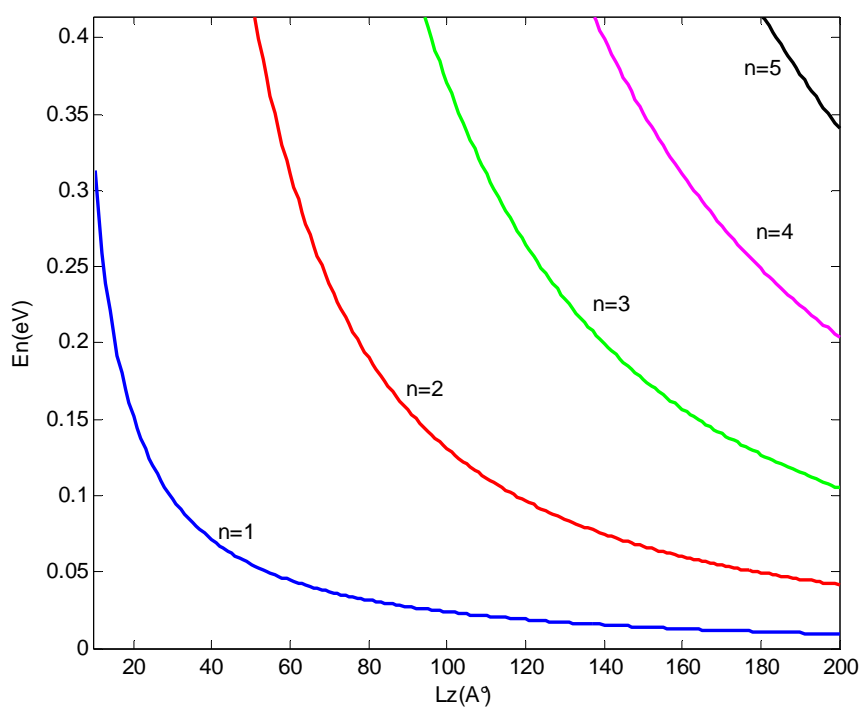


Figure 3.3 : Evolution de l'énergie des électrons dans le puits quantique à base de  $\text{Ga}_{0.7}\text{In}_{0.3}\text{N}_{0.025}\text{As}_{0.855}\text{Sb}_{0.12}$  à  $T = 300^\circ\text{K}$ .

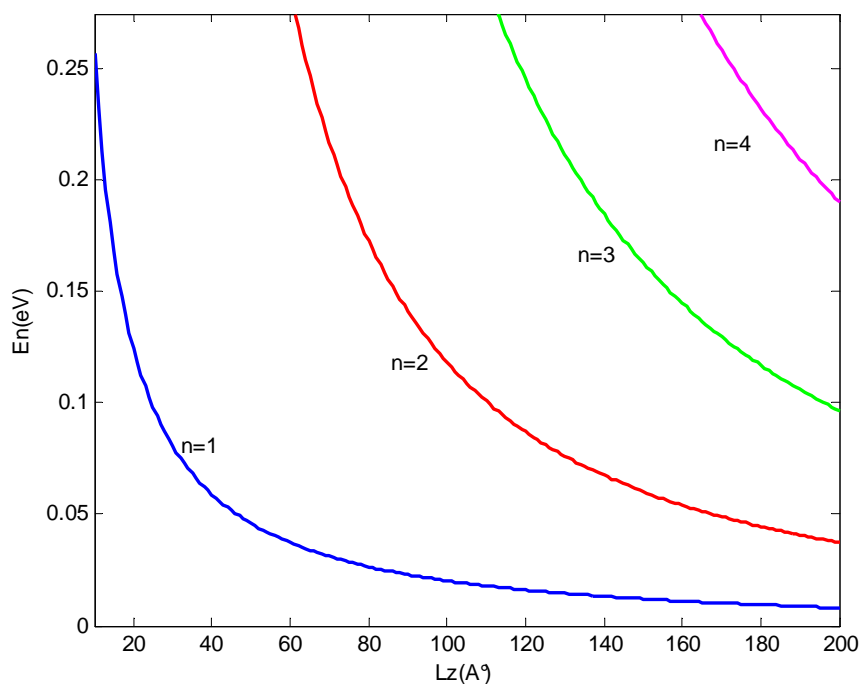


Figure 3.4 : Evolution de l'énergie des électrons dans le puits quantique à base de  $\text{Ga}_{0.7}\text{In}_{0.3}\text{N}_{0.01}\text{As}_{0.87}\text{Sb}_{0.12}$  à  $T = 300^\circ\text{K}$ .

On constate que le nombre de niveaux énergétiques augmente avec la croissance de l'épaisseur de la zone active, et l'espacement entre ces niveaux diminue. Ces résultats montrent également que l'augmentation des fractions d'indium et d'azote augmente l'énergie de quantification dans le puits tandis que l'antimoine la diminue.

Les deux figures (3.5 et 3.6) donnent l'évolution de l'énergie de quantification des trous lourds dans le puits, et on peut voir que cette fois ci c'est l'indium et l'antimoine qui l'augmentent et que l'azote la diminue.

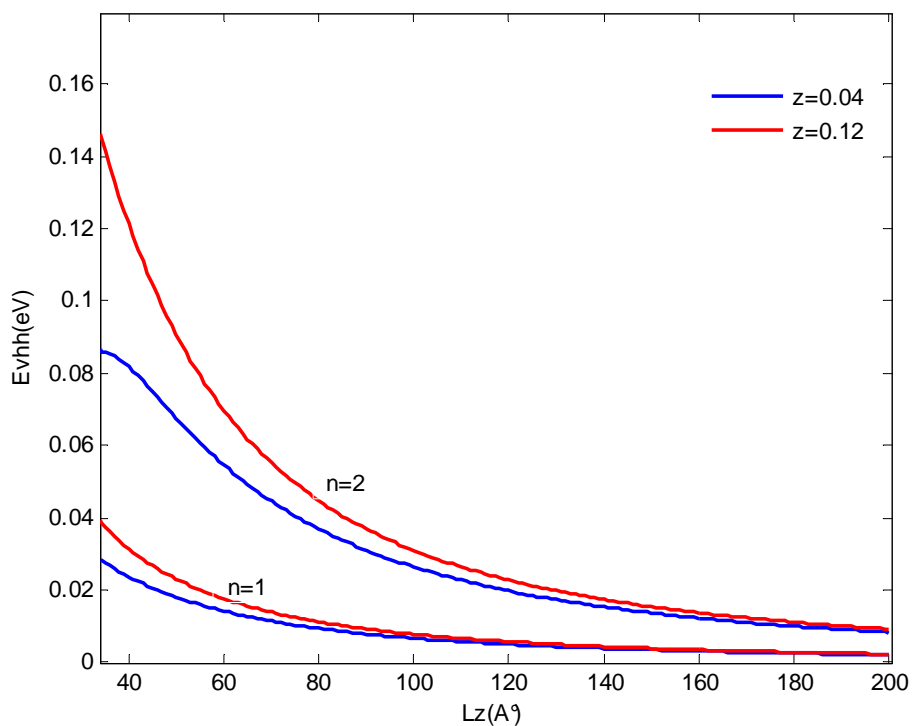


Figure 3.5 : Evolution de l'énergie des trous lourds dans le puits quantique à base de  $\text{Ga}_{0.9}\text{In}_{0.1}\text{N}_{0.025}\text{As}_{0.975-z}\text{Sb}_z$  à  $T = 300^\circ\text{K}$ .

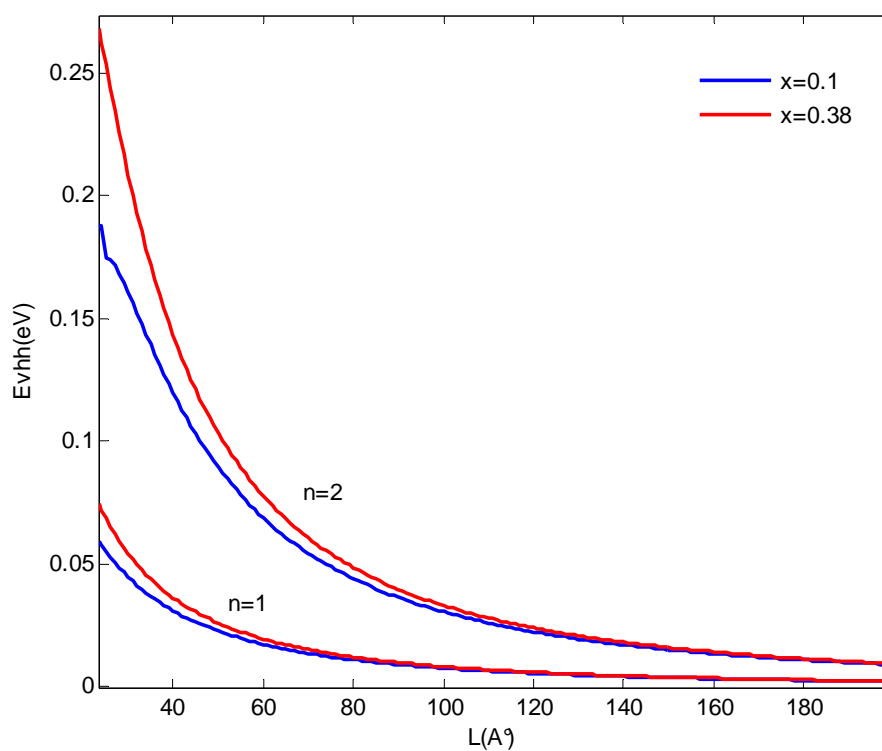


Figure 3.6 : Evolution de l'énergie des trous lourds dans le puits quantique à base de  $\text{Ga}_{1-x}\text{In}_x\text{N}_{0.03}\text{As}_{0.85}\text{Sb}_{0.12}$  à  $T = 300^\circ\text{K}$ .

### 3.2.3 Validation du modèle

Nous avons comparé nos résultats de simulation avec les mesures expérimentales de la littérature effectuées sur une structure à puits quantique à base de  $\text{Ga}_{0.91}\text{In}_{0.09}\text{N}_{0.025}\text{As}_{0.975-z}\text{Sb}_z$  avec une largeur de puits  $L_z = 75\text{\AA}$  [50], les deux résultats sont en bon accord (cf figure 3.7)

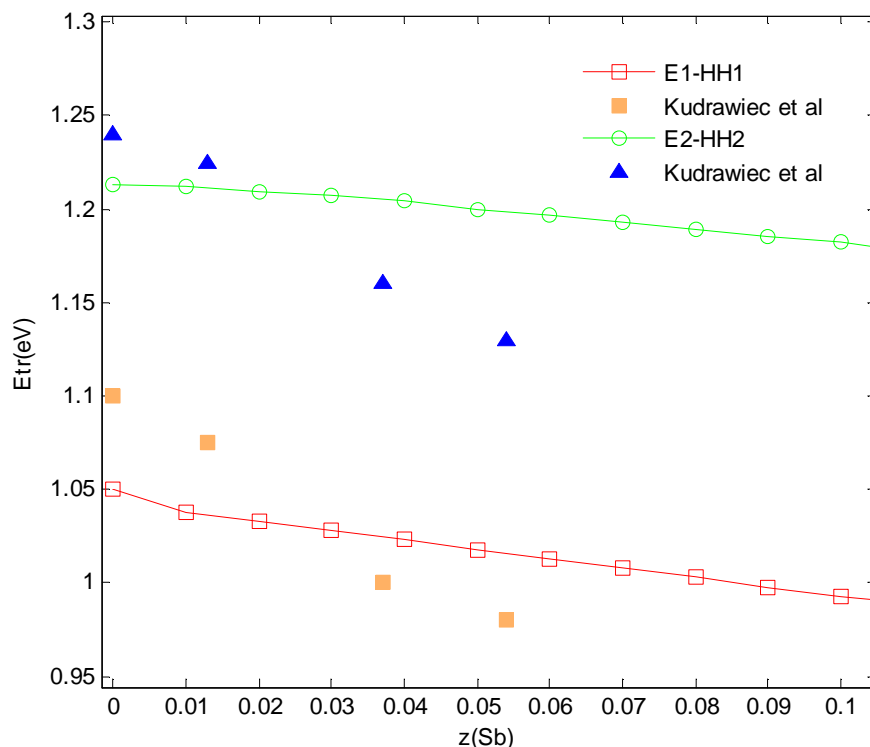


Figure 3.7 : Comparaison de la variation de l'énergie de transition avec le pourcentage d'antimoine obtenu par simulation et par mesures de spectroscopie [50].

### 3.2.4 Calcul de la longueur d'onde

Comme nous l'avons vu dans le chapitre précédent, l'un des avantages que présente ce quinaire par rapport aux autres alliages de cette famille, est le fait qu'il permet d'aller au-delà de  $1.3\mu\text{m}$  sans avoir à trop augmenter la fraction d'azote, limitant ainsi la détérioration des qualités optiques du matériau. Pour illustrer ça, nous avons calculé la longueur d'onde d'émission  $\lambda$  donnée par l'équation 3.35 en fonction des différents paramètres.

$$\lambda = \frac{\hbar c}{E_{tr}} \quad (3.35)$$

Avec

$$E_{tr} = E_g^c + E_{n,e} + E_{n,hh} \quad (3.36)$$

Les figures 3.8 et 3.9 donnent son évolution en fonction de l'épaisseur de la couche active et des fractions de composition  $x(In)$ ,  $y(N)$ ,  $z(Sb)$ .

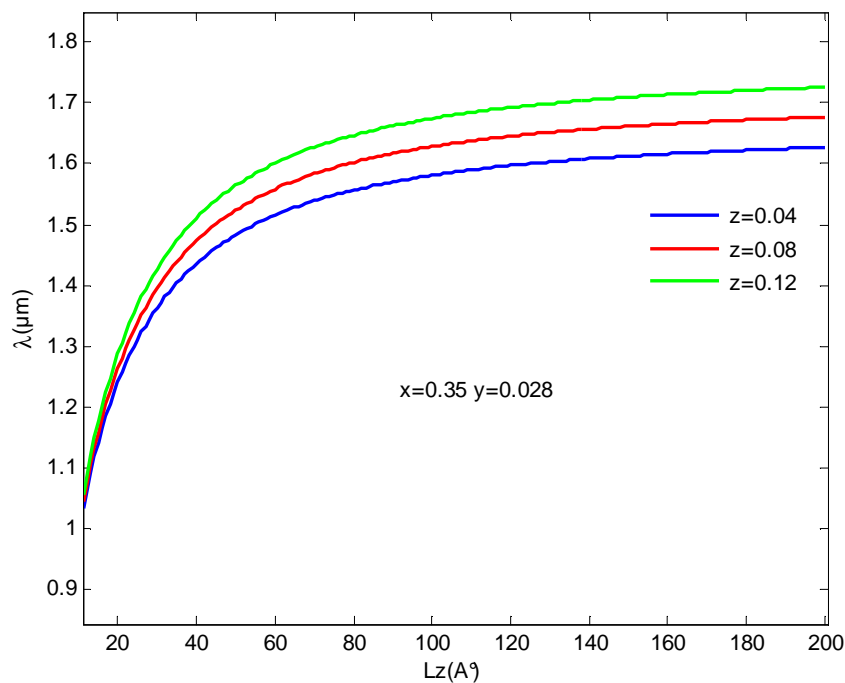


Figure 3.8 : évolution de la longueur d'onde en fonction de la largeur du puits, à  $T = 300^\circ\text{K}$ .

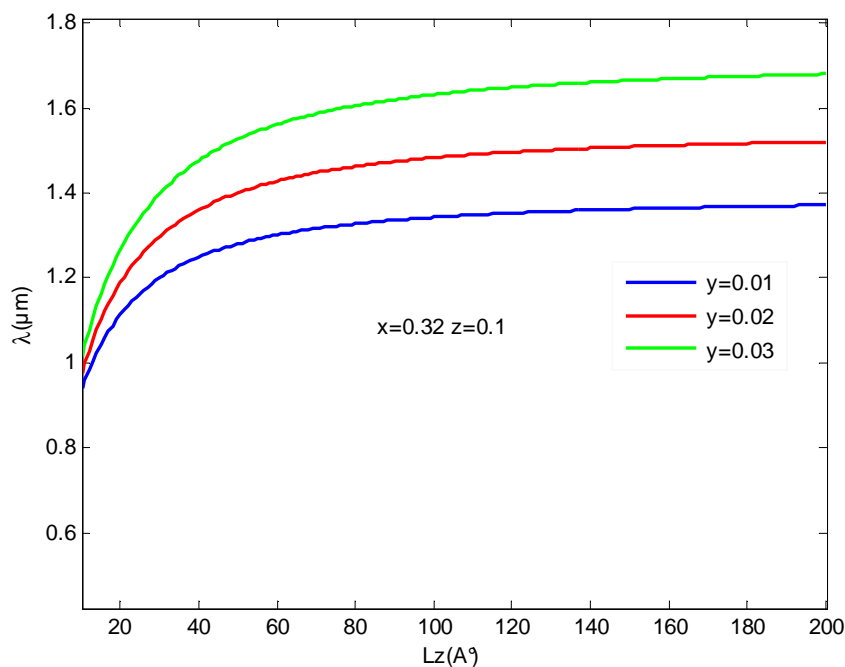


Figure 3.9 : évolution de la longueur d'onde en fonction de la largeur du puits, à  $T = 300^{\circ}\text{K}$ .

Ces deux figures nous permettent de voir que les trois composés augmentent la longueur d'onde d'émission, et qu'avec cette structure on atteint plus aisément la longueur d'onde privilégiée des télécommunications optiques  $1.55\mu\text{m}$ .

### 3.3 Conclusion

Dans ce chapitre nous avons étudié essentiellement le phénomène de quantification et l'énergie de transition des porteurs de charges dans le puits quantique. Nous avons commencé par présenter une méthode d'aspect général mais un peu difficile de mise en œuvre, c'est la fameuse méthode  $kp$ , puis la méthode de Galerkin. La contrainte majeure liée à cette méthode est la nécessité de pouvoir identifier les puits de potentiel, élément de base de notre calcul. Dans notre structure les puits sont bien identifiés, la méthode alors est bien adaptée. Nous l'avons utilisé pour calculer les états quantifiés dans le puits. Les résultats obtenus permettent de conclure que l'incorporation de l'indium augmente l'énergie de quantification des électrons et des trous, tandis que l'azote augmente l'énergie des électrons et l'antimoine celle des trous. Par la suite nous avons calculé l'énergie de transition et la longueur d'onde d'émission en fonction des fractions de composition et de l'épaisseur de la couche active, nous avons vu que la longueur d'onde  $1.55\mu\text{m}$  privilégiée pour les télécommunications optiques peut être atteinte avec ce quinaire.



## CHAPITRE 4

### CALCUL DU GAIN OPTIQUE ET DU COURANT DE SEUIL

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 but de ce chapitre est de calculer le gain matériau et le courant de seuil du puits quantique. Pour cela, il faut faire le bilan des transitions optiques qui se produisent entre les niveaux énergétiques dans le puits. Les photons émis ou absorbés s'échelonnent sur une gamme d'énergie. C'est la courbe de gain en fonction de la longueur d'onde qui nous intéresse principalement. Nous allons donc la calculer pour étudier l'influence des différents paramètres de la structure sur le gain et par la suite sur le courant de seuil.

#### 4.1 Modèle de calcul du gain optique

Comme le coefficient d'absorption  $\alpha$ , le gain se mesure en  $cm^{-1}$ , il est défini comme étant le taux d'amplification de l'intensité lumineuse (densité de photons) par unité de longueur de propagation de l'onde optique. 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.

Pour avoir une émission stimulée, il faut que le nombre d'électrons présents dans la bande de conduction soit supérieur à celui de la bande de valence. Pour un faible courant d'injection, le processus dominant est l'absorption intra-bandes et le gain est négatif. L'augmentation du courant renforce la recombinaison stimulée, et lorsqu'on arrive au courant de transparence les deux processus deviennent égaux et le gain sera nul. Pour les valeurs supérieures au seuil de transparence le gain devient positif et on aura une 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 [ 63,66] et dépasse le cadre de ce travail; nous nous contenterons ici d'évaluer le gain dans le puits quantique donné par [67] :

$$g_{ij}(h\omega) = \left( \frac{q^2 h}{2m_0^2 \varepsilon_0 n_r c} \right) \left( \frac{1}{h\nu} \right) |M(E_{ij})|^2 D_r(E_{ij})(f_j - f_i) \quad (4.1)$$

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

où  $m_0$ : est la masse de l'électron .

$\varepsilon_0$  : est la permittivité du vide.

$q$ : la charge de l'électron.

$h$ : la constante de Planck

$f_i, f_j$ : 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 (4.1) devient alors :

$$g(h\omega) = \sum_n \sum_m \left( \frac{q^2 h}{2m_0^2 \varepsilon_0 n_r c} \right) \left( \frac{1}{h\nu} \right) |M(E_{ij})|^2 D_r(E_{ij})(f_j - f_i) \quad (4.2)$$

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 :

$$\rho_r = \frac{\rho(k)}{dE_t(k)/dk} \quad (4.3)$$

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 :

$$D_r^{2D} = \frac{m_r}{\pi h^2 L_z} \quad (4.4)$$

où  $m_r$  est la masse effective réduite, donnée par :

$$m_r^* = \left[ \frac{1}{m_c^*} + \frac{1}{m_v^*} \right]^{-1} \quad (4.5)$$

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

Lorsque l'énergie augmente, plus de sous bandes viennent s'ajouter dans le calcul du gain total (figure 1.6), cependant les transitions permises sont celles qui vérifient les deux règles suivantes :

#### 4.1.1 La règle de sélection en K

Lors d'une transition optique, la quantité de mouvement de l'électron dans son état final est égale à la somme de celle qu'il avait dans son état initial et celle du photon :

$$hk_v = hk_c + hk_{photon} \quad (4.6)$$

Puisque  $k_{photon} \sim \frac{2\pi}{\lambda}$  et que  $k_c$  et  $k_v$  sont de l'ordre de grandeur de  $\frac{2\pi}{a_0}$  où  $a_0$  est le paramètre de maille du semiconducteur,  $k_{photon}$  est beaucoup plus petit que  $k_c$  et  $k_v$  et on peut considérer qu'une transition doit respecter la condition :  $k_c = k_v$ .

#### 4.1.2 La règle de sélection en nombre quantique

Pour les puits quantiques, une autre règle de sélection vient s'ajouter, elle stipule qu'une transition impliquant une bande de conduction de nombre quantique  $n_c$  et une bande de valence de nombre quantique  $n_v$  prend la valeur

$$1 \text{ si } n_c = n_v.$$

$$0 \text{ si } n_c \neq n_v.$$

### 4.1.3 Les fonctions d'occupation de Fermi

Les fonctions de Fermi  $f_i$  et  $f_j$  donnent les probabilités que les niveaux  $E_i$ ,  $E_j$  soient occupés par des électrons. Le gain maximal est obtenu lorsque  $f_j = 1$  et  $f_i = 0$  ( $E_j > E_i$ ) le cas opposé donne une absorption maximale. Le facteur de Fermi ( $f_j - f_i$ ) dans l'équation 4.1 découle de  $f_j(1 - f_i) - f_i(1 - f_j)$  qui représente la probabilité que le niveau  $j$  soit occupé sachant que le deuxième est vide moins la probabilité que le niveau  $i$  soit occupé sachant que  $j$  est vide ; les deux termes représentent l'émission stimulée et l'absorption respectivement .

Pour déterminer les fonctions d'occupation, commençons par les densités des électrons et des trous dans un puits quantique après l'injection donnée par :

$$n = \int \frac{\rho_{2Dc}(E_2) f_2 dE_2}{L_z} \quad (4.7)$$

$$p = \int \frac{\rho_{2Dv}(E_1)(1 - f_1) dE_1}{L_z} \quad (4.8)$$

où  $\rho_{2D}$  est la densité d'états réduite à deux dimensions,  $L_z$ : épaisseur de la couche active, et  $f_1, f_2$  sont les facteurs de Fermi-Dirac donnés par :

$$f_1 = \frac{1}{e^{\frac{(E_1 - F_v)}{K_B T}} + 1} \quad (4.9)$$

$$f_2 = \frac{1}{e^{\frac{(E_2 - F_c)}{K_B T}} + 1} \quad (4.10)$$

où  $F_c$  et  $F_v$  sont les quasi-niveaux de Fermi,  $K_B$ : constante de Boltzmann,  $T$ : la température en Kelvin.

La densité d'états  $\rho_{2D}$  étant constante dans chaque sous-bande les intégrales (4.7 et 4.8) peuvent être écrites de la manière suivante :

$$n = \frac{m_e K_B T}{\pi^2 \hbar^2 L_z} \sum_n \ln \left[ e^{\left( \frac{F_c - E_{en}}{K_B T} \right)} + 1 \right] \quad (4.11)$$

$$p = \frac{m_h K_B T}{\pi^2 \hbar^2 L_z} \sum_m \ln \left[ e^{\left( \frac{E_{vm} - F_v}{K_B T} \right)} + 1 \right] \quad (4.12)$$

où  $m_e, m_h$ : masses effectives des électrons et des trous respectivement,  $E_{en}, E_{vm}$ : énergie de quantification du niveau électronique  $n$  et des trous  $m$ .

#### 4.1.4 La matrice de transition

L'élément de matrice de transition  $|M|^2$  donne la force de la transition électronique stimulée dans le matériau. Cette force ne dépend pas de la direction de transition, c'est la même pour l'émission et l'absorption. Dans le cas des matériaux massiques, il s'exprime par :[1]

$$|M|^2 = M_b^2 = \frac{m_0^*}{6} E_p = \frac{m_0^*}{6} \left( \frac{m_0^*}{m_c^*} - 1 - 2F_b \right) \left( \frac{E_g(E_g + \Delta_0)}{E_g + \frac{2\Delta_0}{3}} \right) \quad (4.13)$$

où  $F_b$  est un paramètre de correction pour la masse effective de l'électron donné en annexe.

$$E_p = \frac{2m_0^*}{\hbar^2} P_0^2 \quad (4.14)$$

Avec  $P_0$  constante de couplage entre la bande de conduction et la bande de valence [6].

Pour les structures à puits quantiques, l'élément de matrice de transition dépend de la polarisation optique, et la force de transition est différente pour les trous lourds et les trous légers.

$$|M_{hh}^{TE}|^2 = \frac{3+3\cos^2(\theta_e)}{4} \theta_{ij} M_b^2 \quad (4.15)$$

$$|M_{lh}^{TE}|^2 = \frac{5-3\cos^2(\theta_e)}{4} \theta_{ij} M_b^2 \quad (4.16)$$

$$|M_{hh}^{TM}|^2 = \frac{3-3\cos^2(\theta_e)}{2} \theta_{ij} M_b^2 \quad (4.17)$$

$$|M_{ih}^{TM}|^2 = \frac{1+3\cos^2(\theta_e)}{2} \theta_{ij} M_b^2 \quad (4.18)$$

Avec  $\cos(\theta_e)=1$  au point  $\Gamma$  de la sous bande et le terme  $\theta_{ij}$  représente l'intégrale de recouvrement des fonctions enveloppes, on utilise le principe des "transitions interdites " pour évaluer cette intégrale de recouvrement.

Au point  $\Gamma$ ,  $\theta_{ij}$  est égale à 1 seulement si le nombre quantique de la bande  $i$  est égal à celui de la bande  $j$ , sinon  $\theta_{ij} = 0$ . [1]

#### 4.1.5 La fonction d'élargissement

Les porteurs de charges changent souvent d'énergie à l'intérieur de leur propre sous bande à cause des collisions avec d'autres porteurs et avec les phonons. Cette relaxation intra-bandes s'effectue en un temps extrêmement court de l'ordre de  $\tau_s = 0.1\text{ps}$  ; ce temps est beaucoup plus court que le temps de vie radiative habituellement rencontré dans les semiconducteurs. Pour modéliser ce phénomène, le gain est convolué avec une fonction d'élargissement  $L$  [6]

$$g(h\nu) = \int g_{ij}(E_{ij})L(h\nu - E_{ij})dE_{ij} \quad (4.19)$$

Cette convolution veut dire que le gain à l'énergie de photon  $h\nu$  peut recevoir une contribution d'une transition électronique  $E_{ij} \neq h\nu$ .

La fonction la plus simple et la plus utilisée est la Lorentzienne, cette fonction est basée sur l'hypothèse que la probabilité d'occupation d'un état électronique décroît proportionnellement à  $e^{-\frac{t}{\tau}}$ . La transformation de Fourier de cette exponentielle dans le domaine des énergies donne l'équation suivante : [1]

$$L(h\nu - E_{ij}) = \frac{1}{\pi} \frac{\Gamma_s}{(h\nu - E_{ij})^2 + \Gamma_s^2} \quad (4.20)$$

où  $\Gamma_s$  est la moyenne d'élargissement dans la bande de conduction et la bande de valence donné par :

$$\Gamma_s = \frac{h}{\tau_s} \quad (4.21)$$

## 4.2 Simulation et discussion des résultats

Afin d'étudier l'influence des différents paramètres de la structure sur le gain optique nous avons fait une série de simulation du gain en fonction de la longueur d'onde.

### 4.2.1 Influence de l'injection

La figure 4.1 montre l'évolution du gain optique (modes TE) en fonction de la longueur d'onde pour la structure  $Ga_{0.62}In_{0.38}N_{0.025}As_{0.895}Sb_{0.08}$  avec une largeur de puits  $L_z = 80 \text{ \AA}$ , pour différentes injections.

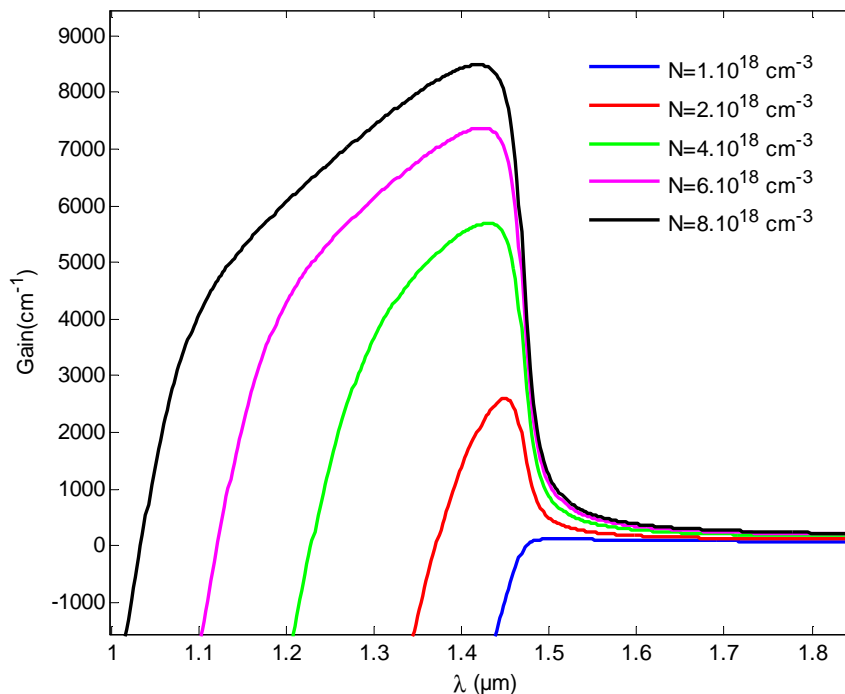


Figure 4.1: Spectre du gain optique TE à T=300K pour une structure  $Ga_{0.62}In_{0.38}N_{0.025}As_{0.895}Sb_{0.08}$

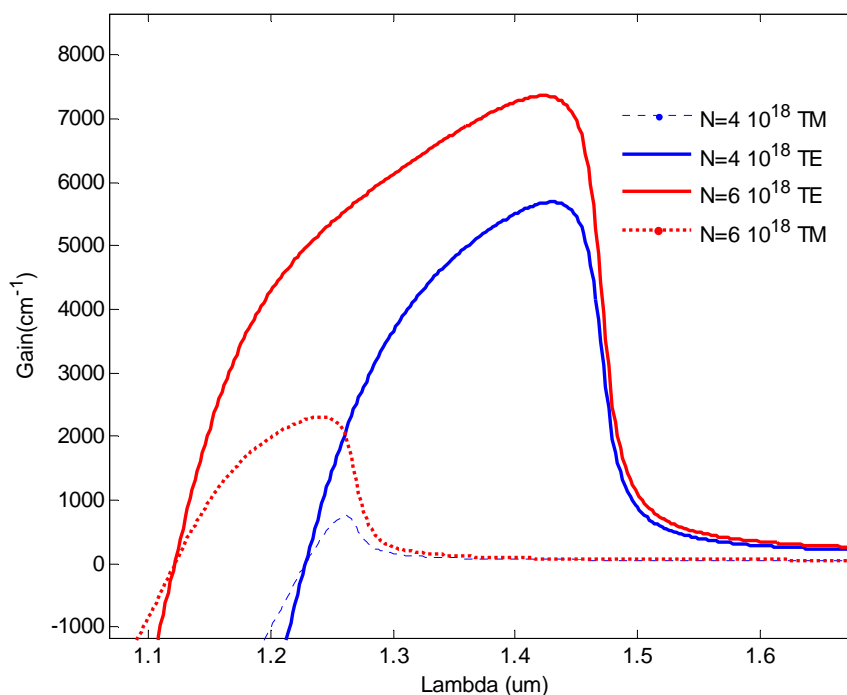
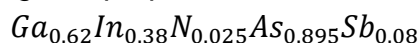


Figure 4.2 : Spectre du gain optique TE et TM à  $T=300K$  pour une structure



On remarque que le spectre est dissymétrique avec un élargissement du côté des petites longueurs d'ondes et le gain augmente avec l'injection, car pour les faibles injections le gain est dû essentiellement à la transition  $e_1 - hh_1$ . Avec l'augmentation de la densité, les porteurs occupent de plus en plus les hauts niveaux d'énergie, donc il y a plus de bandes qui contribuent au gain optique.

On constate aussi que le gain s'annule pour les longueurs d'ondes supérieures à celle qui correspond à la nouvelle bande interdite  $\lambda_{rh}$  (mode TE) et s'annule de nouveau pour la différence des longueurs d'ondes des pseudo-niveaux de fermi  $\Delta\lambda_f$ .

Le gain du mode TM est plus faible que celui de TE dans des proportions de trois pour un, ceci est dû au fait que la contrainte dans cette structure est essentiellement de compression, alors la bande HH passe au dessus de la bande LH, ce qui produira plus de gain TE que de gain TM.

#### 4.2.2 Influence de la température

La figure 4.3 donne l'évolution du gain optique (mode TE) en fonction de la longueur d'onde pour différentes températures, pour la structure  $x = 0.38, y = 0.025, z = 0.12$  avec une injection de  $N = 5.10^{18} \text{ cm}^{-3}$  et une largeur de puits  $L = 60 \text{ \AA}$ .



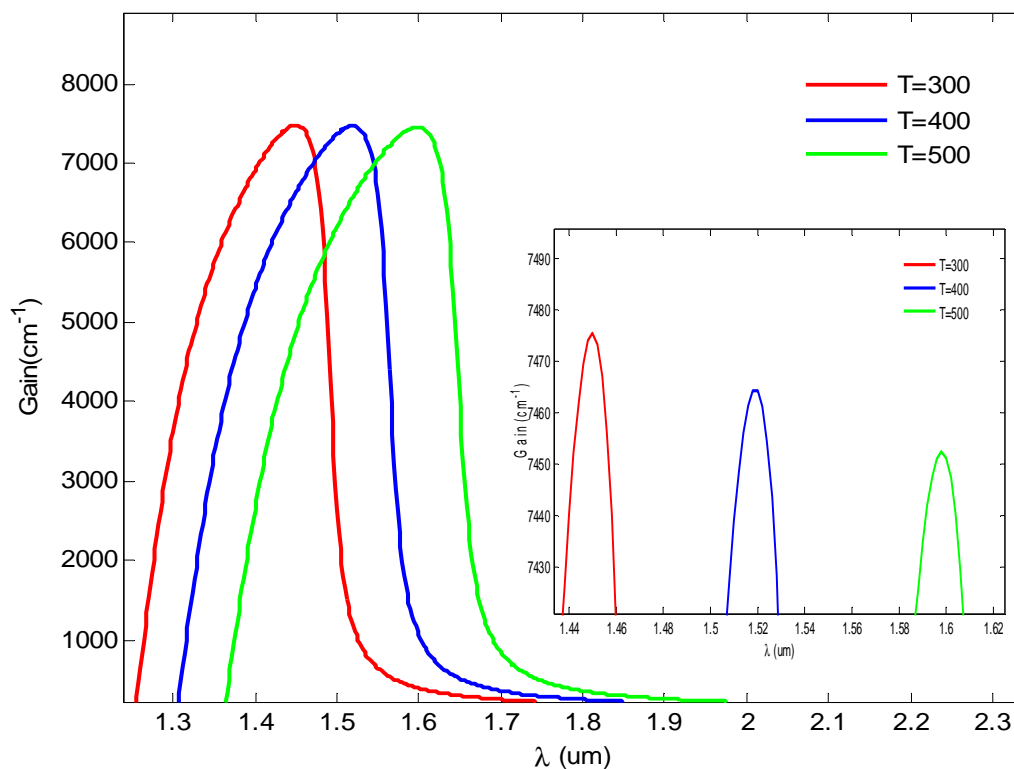


Figure 4.3 : Spectre du gain optique pour la structure  $Ga_{0.62}In_{0.38}N_{0.025}As_{0.855}Sb_{0.12}$   $L_z = 60 \text{ \AA}$ ,  $N = 5.10^{18} \text{ cm}^{-3}$  pour plusieurs températures.

On constate que lorsque la température augmente, le spectre du gain se déplace vers les grandes longueurs d'ondes car avec l'augmentation de la température le gap diminue et la longueur d'onde augmente, on remarque aussi une diminution du gain maximal.

#### 4.2.3 Influence de la largeur du puits

Nous avons simulé sur la figure 4.4 l'évolution du gain optique en fonction de la longueur d'onde pour différentes largeurs de puits, pour une structure ( $x = 0.38$ ,  $y = 0.032$ ,  $z = 0.1$ ) et une injection  $N = 5.10^{18} \text{ cm}^{-3}$

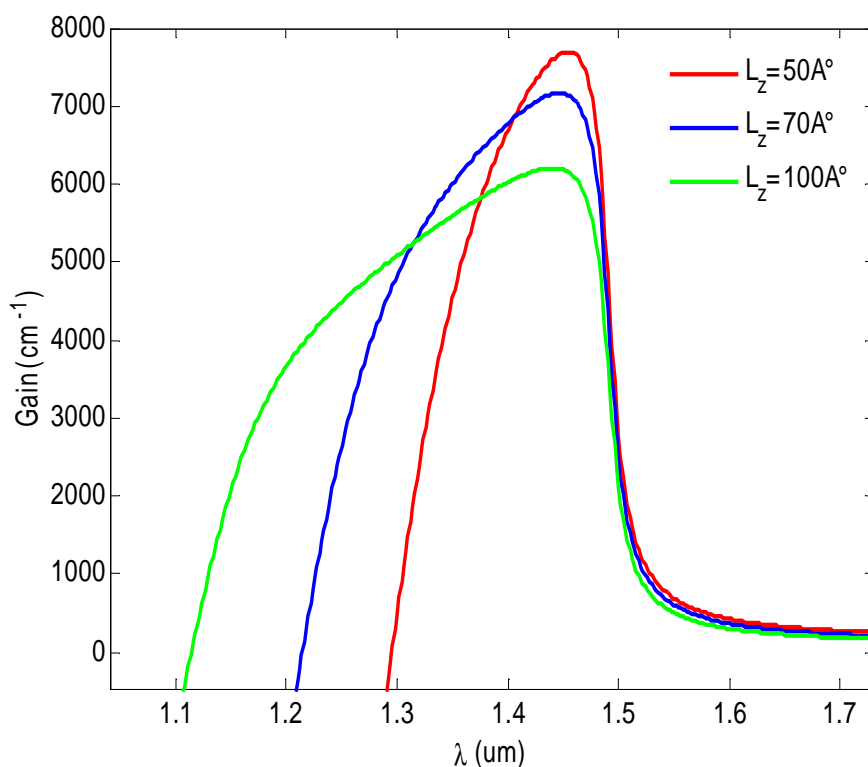


Figure 4.4 : Spectre du gain optique pour la structure  $Ga_{0.62}In_{0.38}N_{0.032}As_{0.868}Sb_{0.1}$   $N = 5.10^{18}cm^{-3}$ ,  $T = 300A^{\circ}$  pour plusieurs Largeurs de puits.

Cette figure nous montre que le spectre s'élargit avec l'augmentation de la largeur de puits à cause de la diminution de l'espacement entre les sous bandes des électrons, et les sous bandes des trous lourds.

#### 4.3 Calcul du gain maximal

Les figures 4.5 et 4.6 présentent l'évolution du gain optique maximal en fonction de l'injection pour la structure  $Ga_{0.62}In_{0.38}N_yAs_{0.9-y}Sb_{0.1}$  paramétrée azote et antimoine respectivement. Cette représentation nous permet de déterminer la densité de seuil qui est un paramètre clef dans la détermination du courant de seuil. On constate que l'incorporation de l'azote diminue le gain max tandis que l'antimoine l'augmente.

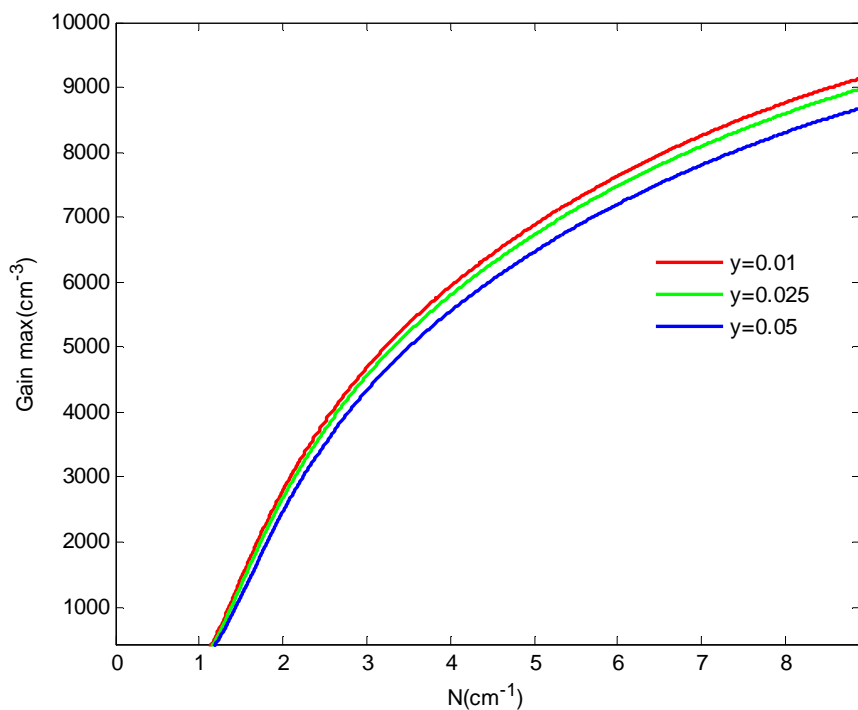


Figure 4.5 : Gain max en fonction de l'injection pour la structure  $Ga_{0.62}In_{0.38}N_yAs_{0.88-y}Sb_{0.12}$ ,  $l_z = 80A^\circ$   $T = 300K$  pour différentes fractions d'azote.

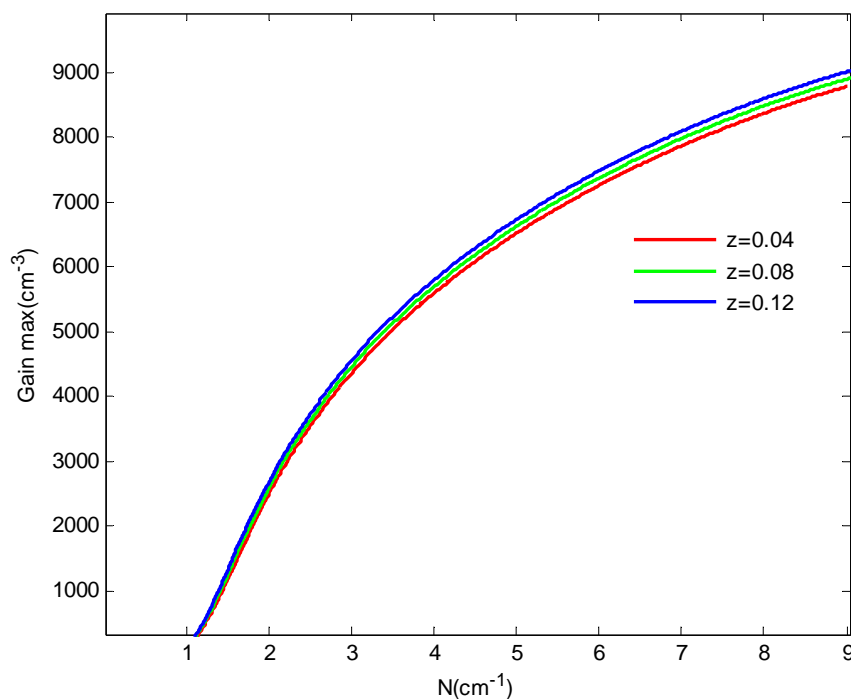


Figure 4.6 : Gain max en fonction de l'injection pour la structure  $Ga_{0.62}In_{0.38}N_{0.032}As_{0.968-z}Sb_z$ ,  $l_z = 80A^\circ$   $T = 300K$  pour différentes fractions d'antimoine.

#### 4.4 Calcul du courant de seuil

Le courant de seuil d'une diode laser est une caractéristique fondamentale qui exprime la condition pour que le gain d'émission stimulée compense les pertes, et que le dispositif fonctionne comme un auto-oscillateur aux fréquences optiques.

A partir d'expressions simplifiées du courant de seuil nous avons mis en avant dans cette partie les paramètres prépondérants qui déterminent la valeur du courant de seuil. Nous avons mis l'accent sur la recombinaison non radiative Auger qui est très mal connue en fait, mais qui constitue la principale source de pertes dans les lasers à puits quantiques.

##### 4.4.1 Expression générale du courant de seuil

Différents phénomènes physiques contribuent à l'augmentation du courant de seuil, il importe de noter que souvent par souci de simplification on parle de densité de courant de seuil et non de courant, sachant que les deux grandeurs sont définies à une constante multiplicative près, l'équation 4.23 donne l'intensité totale du courant de seuil dans la diode laser [13] :

$$I = w \cdot L_z \cdot j + I_f \quad (4.22)$$

$$I_f \sim (KT)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{\Delta E_c \cdot q}{KT}} \quad (4.23)$$

où  $w$  est la largeur de ruban et  $L$  la longueur de la cavité de la diode.  $I_f$  est l'intensité du courant de fuite, c'est-à-dire la partie du courant qui ne traverse pas la couche active (courant de surface) et  $j$  est la densité de courant d'injection donnée par :

$$j = q \cdot L_z \cdot R(N) \quad (4.24)$$

où  $R(N)$  est le taux global de recombinaison en  $(cm^3 \cdot s)$

$l_z$  : épaisseur de la zone active.

$q$  : la charge élémentaire.

Le taux global de recombinaisons, pour une zone active non dopée telle que la concentration résiduelle en porteurs est négligeable devant la concentration en porteurs injectés  $N$  il se découpe en quatre termes [68 ]

$$R(N) = A \cdot N + B \cdot N^2 + C \cdot N^3 + R_{st}(N) \quad (4.25)$$

Avec :

A : coefficient de recombinaisons non radiatives sur des centres profonds, qui ont pour origine des défauts de type dislocations ou bien des niveaux introduits par des impuretés, B : coefficient d'émission spontanée, C : coefficient global de recombinaisons non radiatives Auger. Nous nous attarderons plus spécifiquement sur les recombinaisons Auger dans la section (4.2).

$R_{st}(N)$ : taux de recombinaison stimulée défini par  $R_{st}(N) = R_{st} \cdot N_{ph}$

où  $R_{st}$  est le taux net d'émission stimulée et  $N_{ph}$  est la densité de photons dans la cavité.

Au voisinage du seuil, le terme d'émission stimulée est négligeable par rapport à l'ensemble des émissions spontanées [79], il en résulte qu'au seuil on a :

$$R(N) = A \cdot N_{th} + B \cdot N_{th}^2 + C \cdot N_{th}^3 \quad (4.26)$$

$N_{th}$ : l'injection seuil.

La zone active, d'épaisseur  $L_z$ , présente d'une part un indice de réfraction moyen  $n$  supérieur à celui des couches latérales, en plus ses faces terminales formées par clivage de plan (110), constituent deux faces miroirs.

La zone active se comporte donc comme un guide d'onde et comme une cavité résonnante. Le coefficient d'amplification ou gain optique  $g(h\nu)$  de la couche active directement lié à l'énergie des photons émis, doit être supérieur aux pertes optiques pour qu'une réelle amplification du rayonnement soit obtenue dans la cavité. Comme la courbe  $g(h\nu)$  présente un maximum  $g_{max}$  fonction de la température et de la concentration N en porteurs injectés, le seuil du laser est atteint lorsque :

$$\Gamma \cdot g_{max}(N) = \alpha \quad (4.27)$$

$\Gamma$  le facteur de confinement optique, représente la fraction de la puissance lumineuse se propageant dans la zone active.  $\Gamma \cdot g_{max}(N)$  fournit donc la partie utile du gain maximum.

Le paramètre  $\alpha$  traduit l'ensemble des pertes optiques, celles-ci sont constituées par les pertes  $\alpha_{FP}$  due à la cavité et par les pertes internes  $\alpha_{int}$  dues à l'absorption des photons par les différents mécanismes : absorption par les porteurs libres, diffusion au niveau des interfaces ou des imperfections dans la zone active.

$$\alpha = \alpha_{FP} + \alpha_{int}. \quad (4.28)$$

Si  $R_1$  et  $R_2$  sont les coefficients de réflexion sur les faces de sortie, on a en supposant  $R_1 = R_2 = R$

$$\alpha_{FP} = \frac{1}{2L} \ln \left( \frac{1}{R_1 R_2} \right) = \frac{1}{L} \ln \left( \frac{1}{R} \right). \quad (4.29)$$

Quant aux pertes internes, elles se répartissent dans la région active et dans les couches de confinement

$$\alpha_{int} = \Gamma \cdot \alpha_{act} + (1 - \Gamma) \cdot \alpha_{conf}. \quad (4.30)$$

La condition (4.27) s'écrit donc comme suit :

$$\Gamma \cdot g_{max}(N) = \frac{1}{L} \ln \left( \frac{1}{R} \right) + \alpha_{int}. \quad (4.31)$$

Cette égalité est vérifiée pour une valeur de  $N = N_{th}$ , concentration de porteurs au seuil, la densité de courant de seuil  $J_{th}$  et l'intensité de courant de seuil  $I_{th}$  se calculent alors par

$$J_{th} = q \cdot L_z \cdot R(N_{th}) = q \cdot L_z \cdot (A \cdot N_{th} + B \cdot N_{th}^2 + C \cdot N_{th}^3) \quad (4.32)$$

$$I_{th} = w \cdot L \cdot J_{th} + I_f. \quad (4.33)$$

Donc la détermination du courant de seuil d'une diode laser nécessite par conséquent de connaître les paramètres suivants :

- Les indices de réfraction de la région active et des couches de confinement pour le calcul de  $\Gamma$ ,  $R$  et  $\alpha_{FP}$ .
- Les pertes internes  $\alpha_{int}$ .
- Le gain optique maximum  $g_{max}$ .
- Les coefficients de recombinaisons  $A$ ,  $B$ ,  $C$ .

#### 4.4.1.1 Calcul de la puissance

Les propriétés de conversion d'énergie électrique en énergie optique du laser sont représentées par la caractéristique  $P(I)$ , donnant la puissance optique émise en fonction du courant injecté. Cette caractéristique nous permet de tirer plusieurs paramètres utilisés pour la caractérisation des composants, comme le courant de seuil, la pente de conversion, la puissance de saturation etc... elle est donnée par la relation suivante :

$$P(I) = \frac{\alpha_{FP}}{\alpha_{FP} + \alpha_{int}} h\omega(I - I_{th}). \quad (4.34)$$

#### 4.4.1.2 L'indice de réfraction du puits quantique

La méthode la plus utilisée pour la détermination de l'indice de réfraction des composés  $III - V$  est la méthode d'Adachi [70,71]. Cette méthode donne l'indice de réfraction de l'alliage en fonction de l'énergie des photons. Lorsque cette énergie est proche du gap du semiconducteur, la méthode donne des résultats très proches de

l'expérimental, mais au fur et à mesure qu'on s'éloigne de l'énergie de la bande interdite les résultats deviennent moins précis, l'indice de réfraction dans la région de transparence ( $h\omega < E_g$ ) est donné par :

$$n_r^2(\omega) = A \left[ f(x_1) + 0.5 \left( \frac{E_g}{E_g + \Delta_0} \right)^{1.5} \cdot f(x_2) \right] + B. \quad (4.35)$$

avec :

$$f(x_1) = \frac{1}{x_1^2} (2 - \sqrt{1 + x_1} - \sqrt{1 - x_1}) \quad (4.36)$$

$$\text{où } x_1 = \frac{h\omega}{E_g}$$

$$f(x_2) = \frac{1}{x_2^2} (2 - \sqrt{1 + x_2} - \sqrt{1 - x_2}) \quad (4.37)$$

$$\text{où } x_2 = \frac{h\omega}{E_g + \Delta_0}$$

avec A,B paramètres d'Adachi, donnés en annexe pour les différents binaires III – V.[ 6]

Les figures 4.7 et 4.8 illustrent l'évolution de l'indice de réfraction du quinaire *GaInNAsSb* en fonction de la longueur d'onde pour différentes compositions.

On remarque que le taux d'azote augmente l'indice de réfraction et que celui d'antimoine le diminue.

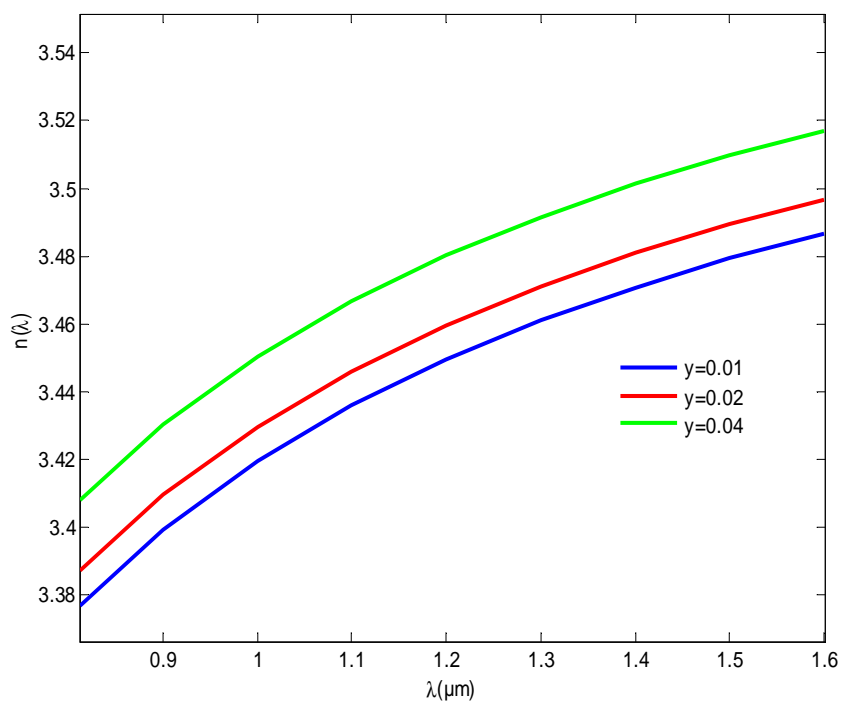


Figure 4.7 : Indice de réfraction en fonction de la longueur d'onde pour plusieurs fractions d'azote pour la structure  $x = 0.1$ ,  $z = 0.12$

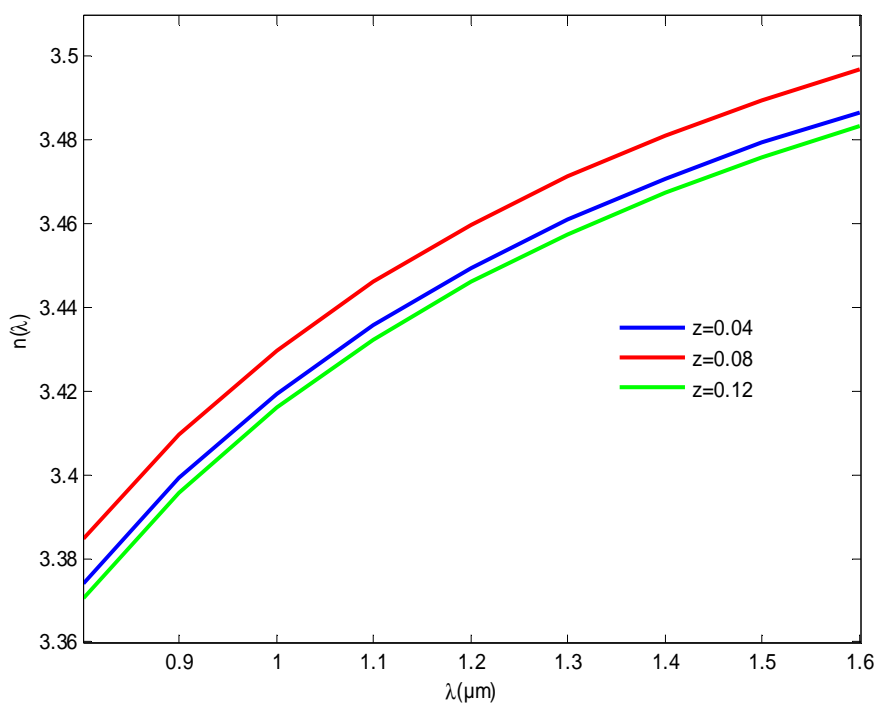


Figure 4.8 : Indice de réfraction en fonction de la longueur d'onde pour plusieurs fractions d'antimoine pour la structure  $x = 0.1$   $y = 0.01$



#### 4.4.1.3 Le facteur de confinement

Pour déterminer le facteur de confinement nous utiliserons l'expression proposée par Botez [72] donnée par :

$$\Gamma = \frac{\int_{-\frac{L_z}{2}}^{+\frac{L_z}{2}} E_y(x)^2 dx}{\int_{-\infty}^{+\infty} E_y(x)^2 dx} \approx \frac{D^2}{D^2+2} \quad (4.38)$$

$$\text{où} \quad D = \left(\frac{2\pi}{\lambda}\right) L_z \cdot \sqrt{(n_p^2 - n_b^2)} \quad (4.39)$$

avec  $n_p$ ,  $n_b$ : indices de réfractions de la couche active et des couches de confinement respectivement,  $\lambda$ : longueur d'onde d'émission.

Dans cette expression  $\Gamma$  se calcule en traitant la région active comme une plaque guidante passive (sans gain ni pertes) et en considérant la répartition du mode fondamental TE, ainsi  $\Gamma$  sera donné par l'intégrale de la courbure  $E(y)^2$  entre  $-\frac{L_z}{2}$  et  $+\frac{L_z}{2}$  sur l'aire totale.

Dans le cas d'une structure à multipuits quantiques, le facteur de confinement augmente sensiblement. Si on appelle  $N_p$  et  $N_b$  le nombre de puits et de barrières,  $L_p$  et  $L_b$  leurs épaisseurs respectives, et enfin  $n_p$  et  $n_b$  les indices respectifs des matériaux puits et barrière, on peut définir l'indice moyen de la région d'épaisseur

$$\bar{L} = N_p \cdot L_p + N_b \cdot L_b$$

$$\bar{n} = \frac{N_p \cdot L_p \cdot n_p + N_b \cdot L_b \cdot n_b}{N_p \cdot L_p + N_b \cdot L_b} \quad (4.40)$$

Le facteur de confinement

$$\bar{\Gamma} = \frac{\bar{D}^2}{\bar{D}^2+2}$$

$$\text{où} \quad \bar{D} = \frac{2\pi}{\lambda} \sqrt{n_p^2 - n_b^2} \cdot \bar{L}$$

le facteur de confinement dans les régions actives que constitue chacun des puits de la structure, est obtenu en multipliant  $\bar{\Gamma}$  par le rapport de la largeur active réelle  $N_p \cdot L_p$  à la largeur  $\bar{L}$  du système de multipuits.

$$\Gamma_{mp} = \bar{\Gamma} \frac{N_p \cdot L_p}{(n_p^2 - n_b^2) \cdot L}$$

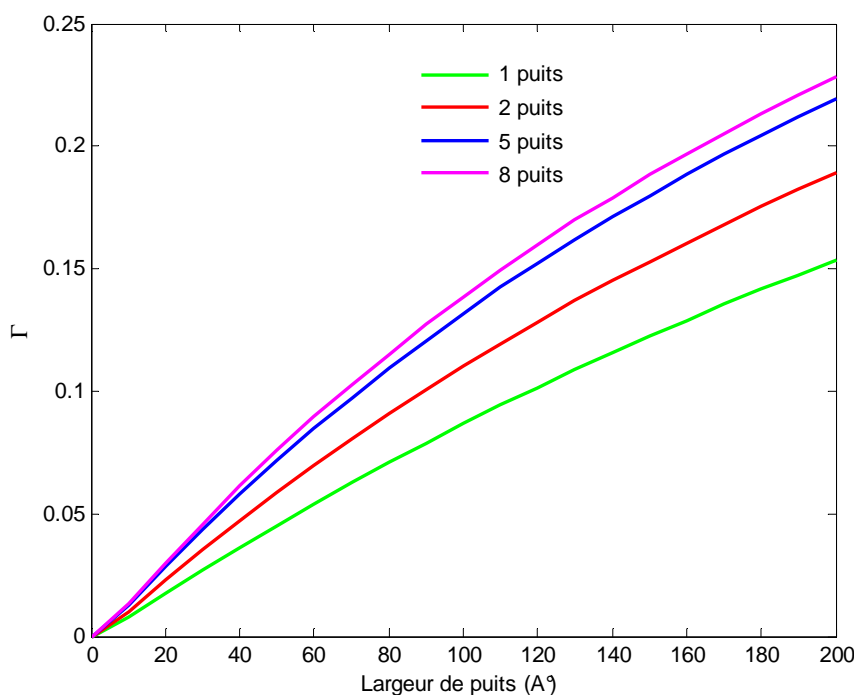


Figure 4.9 : facteur de confinement optique en fonction de la largeur de la zone active pour différent nombre de puits à base de  $Ga_{0.65}In_{0.35}N_{0.025}As_{0.85}Sb_{0.12}$ ,  $l_z = 75\text{\AA}$

La figure 4.9 montre que le facteur de confinement augmente lorsque l'épaisseur de la zone active augmente, elle montre aussi que par rapport au puits quantique unique, les multipuits quantiques améliorent le facteur de confinement, mais il importe de noter qu'à partir de  $N_{\text{puits}} = 5$ , il y a saturation du facteur de confinement, comme on peut le voir dans la figure, le structure à 8 puits quantiques a un facteur de confinement très proche de celle à 5 puits quantiques.

Cette amélioration dans le facteur de confinement implique une augmentation du gain modal de la structure. Pour illustrer ça, nous avons représenté son évolution en fonction de l'injection pour des structures à 1, 2 et 5 puits quantiques.

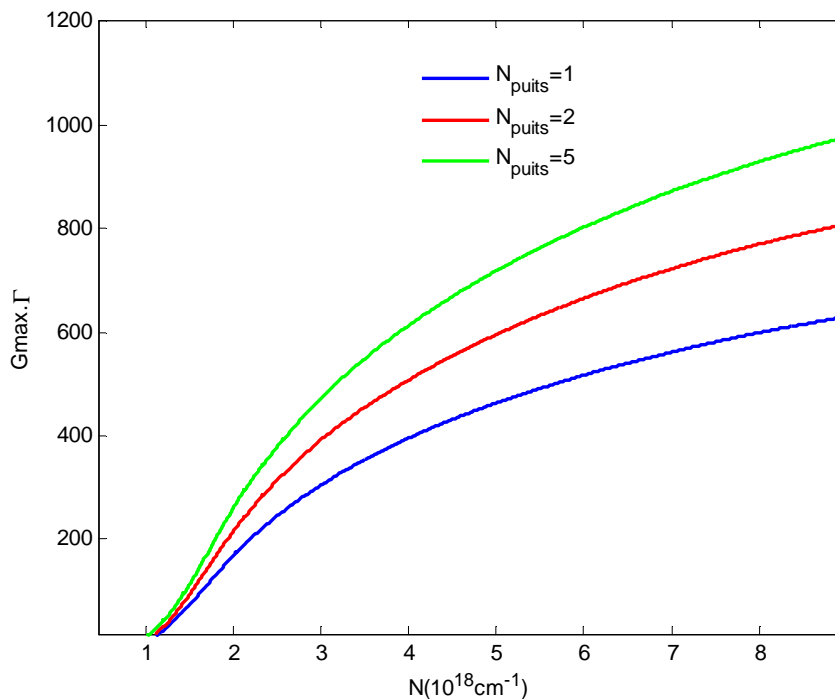


Figure 4.10 : Gain optique max en fonction de la l'injection pour différents nombre de puits quantiques à base de  $Ga_{0.65}In_{0.35}N_{0.025}As_{0.85}Sb_{0.12}$ ,  $l_z = 75\text{\AA}$

#### 4.4.2 La recombinaison Auger

Une recombinaison d'une paire électron-trous peut exciter un troisième porteur de la bande de valence ou de la bande de conduction, la transition ne génère alors aucun photon, trois porteurs actifs sont impliqués dans ce processus et qui sont désormais non disponibles pour la recombinaison radiative, entraînant une augmentation du courant de seuil proportionnelle à  $N_{th}^3$ . On appelle ce processus, la recombinaison Auger; elle constitue le mécanisme de pertes prépondérant dans les lasers opérant au voisinage de 300k [ 73].

##### 4.4.2.1 Les principaux mécanismes de recombinaison Auger

Il existe trois types de recombinaisons Auger :

a) Mécanisme CVCC

L'énergie perdue par la recombinaison d'une paire électron-trou est fournie à un électron de conduction qui vient occuper un état de plus haute énergie. Ce mécanisme est noté aussi (CHCC)

b) Mécanisme CVVV

L'énergie perdue par la recombinaison d'une paire électron-trou est communiquée à un électron de la bande de valence qui vient occuper un état sur une bande de plus haute énergie. On trouve dans ce mécanisme deux possibilités :

- un électron de la bande *SO* se place sur la bande (*CHSH*).
- un électron de la bande *HH* se place sur la bande (*CHHL*).

c) Mécanisme CVVV assisté par phonons

Dans ce cas l'électron excité passe par un état intermédiaire interdit (*I*), puis diffuse par absorption ou émission d'un phonon jusqu'à l'état final.

La figure 4.11 illustre ces différents mécanismes de recombinaison Auger.

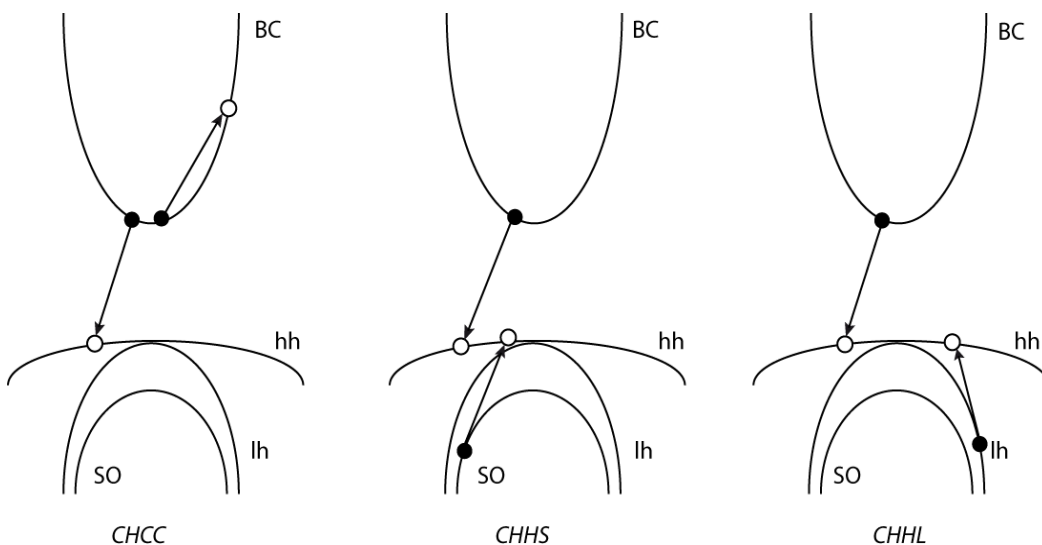


Figure 4.11 : Schématisation des différents mécanismes Auger band-to-band

Pour les processus Auger bande à bande, le coefficient d'Auger  $C_i$  est donné, en utilisant la statistique de Boltzmann, par [74,75] :

$$C_i = C_0 e^{-\frac{E_a}{kT}}. \quad (4.41)$$

avec :

$$E_a(CVCC) = \frac{m_e^* E_g}{m_e^* + m_{hh}^*}. \quad (4.42)$$

$$E_a(CVVV) = \frac{m_{SO}^* (E_g - \Delta_{hh})}{2m_{hh}^* + m_e^* - m_{SO}^*}. \quad \text{pour } E_g > \Delta_{hh}. \quad (4.43)$$

$$E_a(CVVV) = E_g - \Delta_{hh}. \quad \text{pour } E_g < \Delta_{hh}. \quad (4.44)$$

où  $m_e^*$  est la masse effective des électrons,  $m_{hh}^*$  celle des trous lourds et  $m_{SO}^*$  celle des trous de la bande splitée.

Et  $C_0$  est le coefficient de Auger direct, il est donné pour le processus  $CHCC$  par :

$$C_0 = \frac{4.\pi.e^4.m_c^*(m_{hh}^*+m_e^*)}{h\varepsilon^2(2m_{hh}^*+m_c^*)^2 KT} |M|^2 \quad (4.45)$$

où  $|M|^2$  est l'élément de la matrice d'interaction 'électron-électron' donné par :

$$|M|^2 = \frac{h^4 E_p}{12.m_0^2.m_c^*.E_g^3} \quad (4.46)$$

avec  $E_p$  donné dans l'équation 4.14

#### 4.4.3 Simulation et discussion des résultats

Nous avons représenté l'évolution du courant Auger en fonction de la température pour différentes concentrations d'azote (figure 4.12) et d'antimoine (figure 4.13)

On remarque que bien qu'elle diminue l'injection seuil, l'augmentation des pourcentages d'azote et d'antimoine augmente le courant Auger, car l'effet de l'azote et de l'antimoine sur le coefficient Auger est beaucoup plus important que sur l'injection de seuil.

A partir des deux figures on peut noter que l'influence de l'azote sur la densité de courant Auger est plus importante que celle de l'antimoine, ceci peut être expliqué

par le fait que l'incorporation de l'azote crée des niveaux d'agrégats qui constituent des centres de recombinaisons non radiatives.

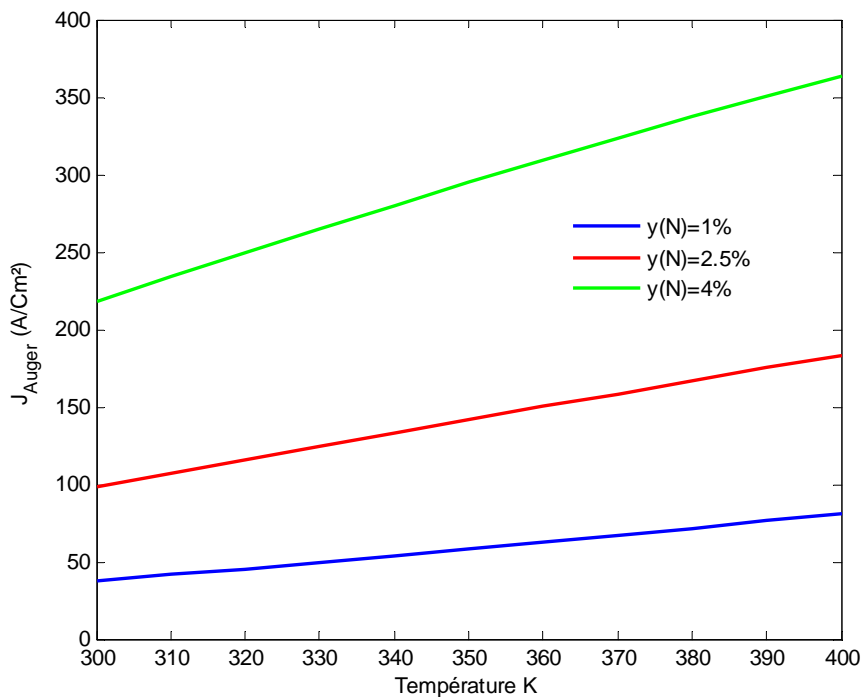


Figure 4.12: densité de courant Auger en fonction de la température pour la structure  $x = 0.2, z = 0.12, L_z = 75\text{\AA}, N = N_{th}$  pour différentes fractions d'azote.

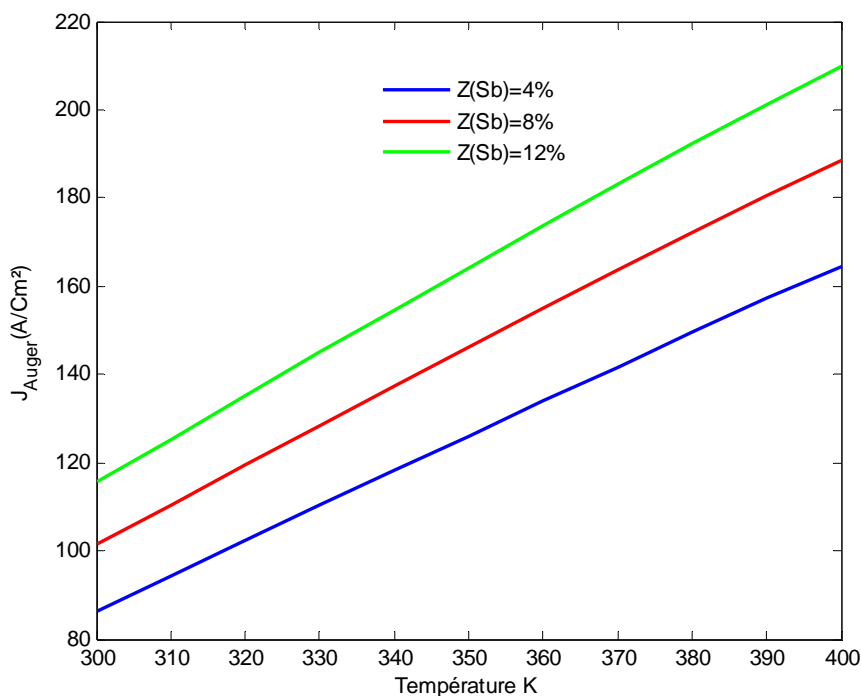


Figure 4.13 : Densité de courant Auger en fonction de la température pour la structure  $x = 0.2, y = 0.02, L_z = 75\text{\AA}, N = N_{th}$  pour différentes fractions d'antimoine.

Nous avons représenté également l'évolution de la densité du courant de seuil en fonction de la température pour différentes fractions d'azote (figure 4.14) et d'antimoine (figure 4.15), puis l'évolution de la puissance en fonction du courant pour différentes températures (figure 4.16), puis afin de montrer l'avantage que présente les structures à multipuits quantiques par rapport à celles à puits unique, nous avons représenté l'évolution du courant de seuil en fonction de la température pour des structures avec des nombres de puits différents.

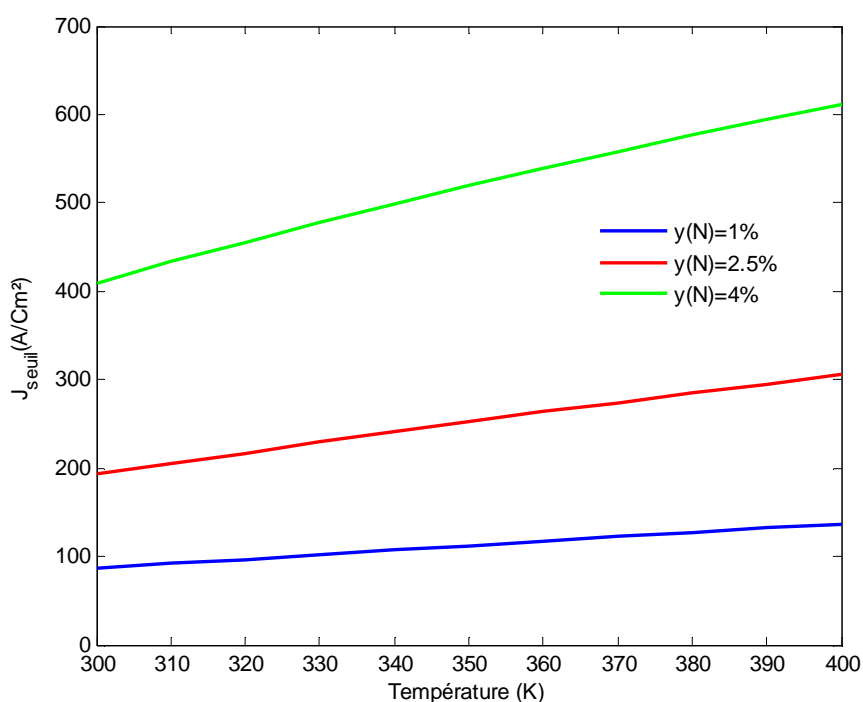


Figure 4.14 : Densité de courant de seuil en fonction de la température pour la structure  $x = 0.2$ ,  $z = 0.12$ ,  $L_z = 75\text{\AA}$  pour différentes fractions d'azote.

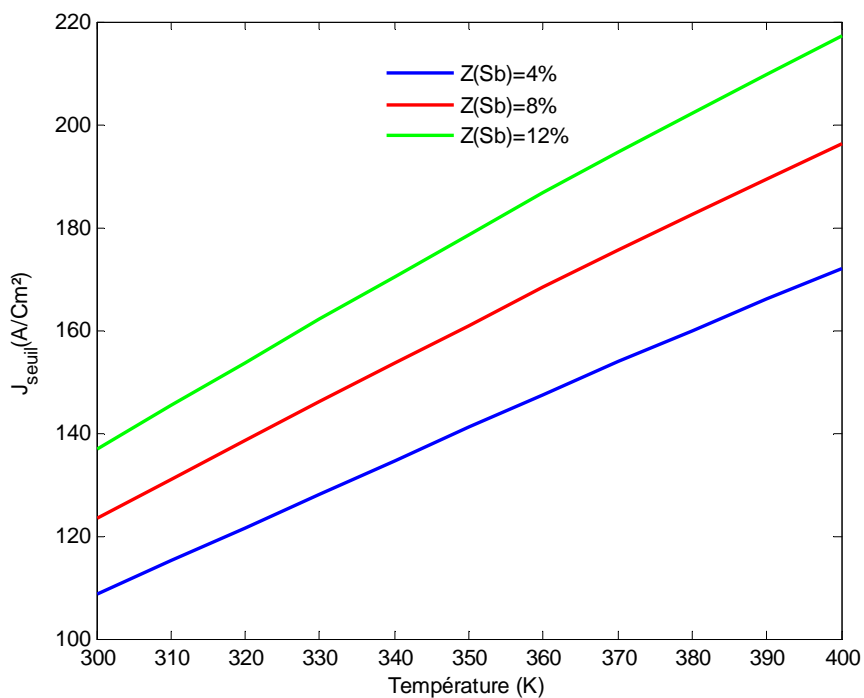


Figure 4.15 : densité de courant de seuil en fonction de la température pour la structure  $x = 0.2, y = 0.02, L_z = 75\text{\AA}$  pour différentes fractions d'antimoine.

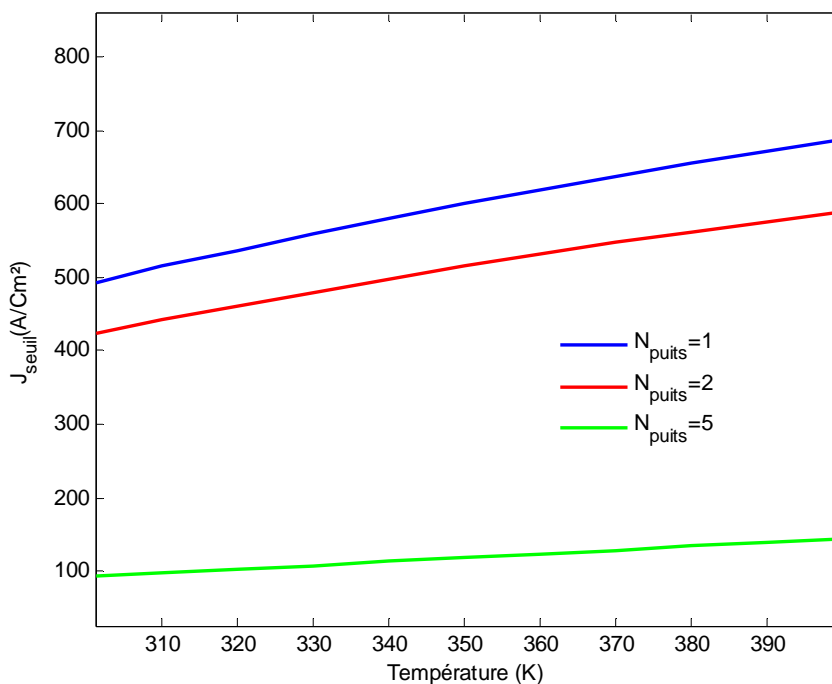


Figure 4.16 : densité du courant de seuil en fonction de la température pour différents nombre de puits quantiques à base de  $Ga_{0.65}In_{0.35}N_{0.025}As_{0.85}Sb_{0.12}$ ,  $L_z = 75\text{\AA}$  et  $W = 20\ \mu\text{m}$ ,  $L = 300\ \mu\text{m}$ .



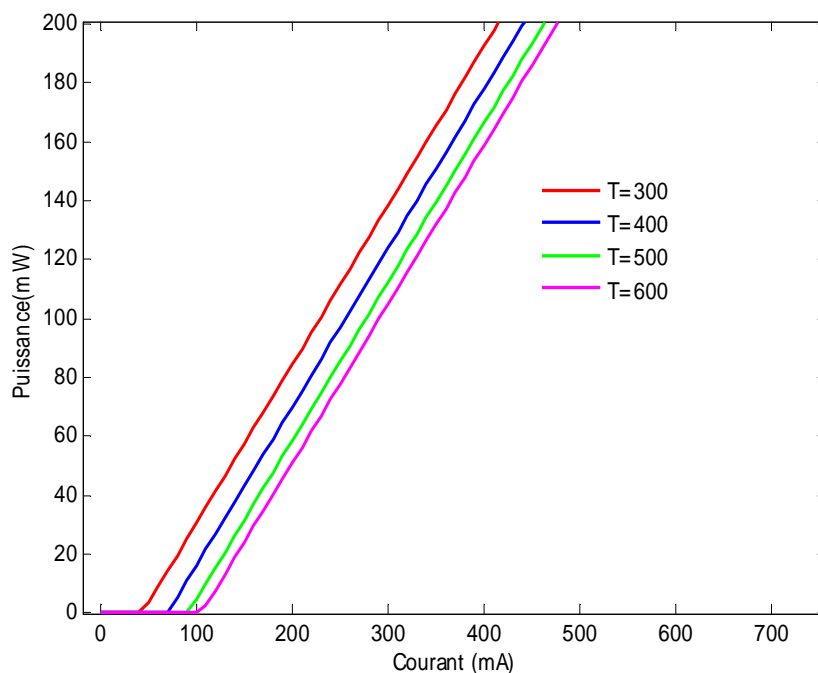


Figure 4.17 : la puissance de la diode laser en fonction du courant de seuil pour plusieurs températures pour la structure  $x = 0.2, y = 0.023, z = 0.027 L_z = 75A^\circ$  et  $W = 20 \mu m, L = 1222 \mu m$ .

On constate que le courant de seuil augmente avec la fraction d'azote et d'antimoine, on note aussi que ces deux éléments augmentent la sensibilité du courant de seuil en température, comme le montrent les figures (4.13, 4.14), les courbes qui correspondent aux pourcentages élevés d'azote et d'antimoine, ont une pente plus importante, traduisant une plus grande sensibilité à la température. On remarque également que l'influence de l'azote sur le courant de seuil est plus importante que celle de l'antimoine; Ceci confirme l'avantage que présente ce quinaire par rapport au quaternaire *GaInNAs* puisque l'incorporation de l'antimoine permet de minimiser la fraction d'azote.

Bien que les résultats expérimentaux de la littérature soient très dispersés, nous avons trouvé dans l'ensemble une bonne partie et particulièrement les plus récents, qui sont d'une manière plus ou moins grossière en bon accord avec nos résultats de simulation qui donnent des valeurs de densité de courant de  $200 \text{ A/cm}^2$  et  $500 \text{ A/cm}^2$  pour des structures émettant à  $1.3 \mu m$  et  $1.55 \mu m$  respectivement.

Les tout premiers résultats ont été obtenus par Wan et son équipe de recherche à l'université de Columbia [76]. Ils ont rapporté une densité de courant de seuil de  $1.02 \text{ KA/cm}^2$  pour une structure émettant à  $1.295 \mu m$ . Peu après Bank et al [77] ont obtenu une densité de  $1.1 \text{ KA/cm}^2$  pour une structure à base de

$Ga_{0.62}In_{0.38}N_{0.015}As_{0.975}Sb_{0.01}$  avec une largeur de puits de  $50\text{\AA}$ , émettant à  $1.46\ \mu\text{m}$ , puis une valeur de  $1.06\text{KA}/\text{cm}^2$  a été obtenue par le même auteur pour une émission à  $1.49\ \mu\text{m}$  [78]. Les deux auteurs que nous venons de citer rapportent une augmentation du courant de seuil avec le pourcentage d'azote. D'autres études expérimentales vont également dans ce sens, par exemple Riechert et al montrent que le courant de seuil est multiplié par trois lorsque le pourcentage d'azote passe de 0.95% à 1.35% [79].

L'amélioration des techniques de croissance a permis d'obtenir des courants de seuil de plus en plus faibles, à titre d'exemple dans deux publications expérimentales récentes, Goddard et al [80,81] rapportent des densités de courant de seuil de  $480\text{A}/\text{cm}^2$  et de  $450\text{A}/\text{cm}^2$  pour la structure

$Ga_{0.62}In_{0.38}N_{0.023}As_{0.95}Sb_{0.027}$  ces résultats sont très proches de ceux de notre simulation, puisque pour la même structure, nous avons obtenu une densité de courant de seuil de  $446.5\text{A}/\text{cm}^2$ .

Nous avons regroupé l'ensemble de ces résultats dans les deux figures (4.18 et 4.19) pour les comparer avec les nôtres.

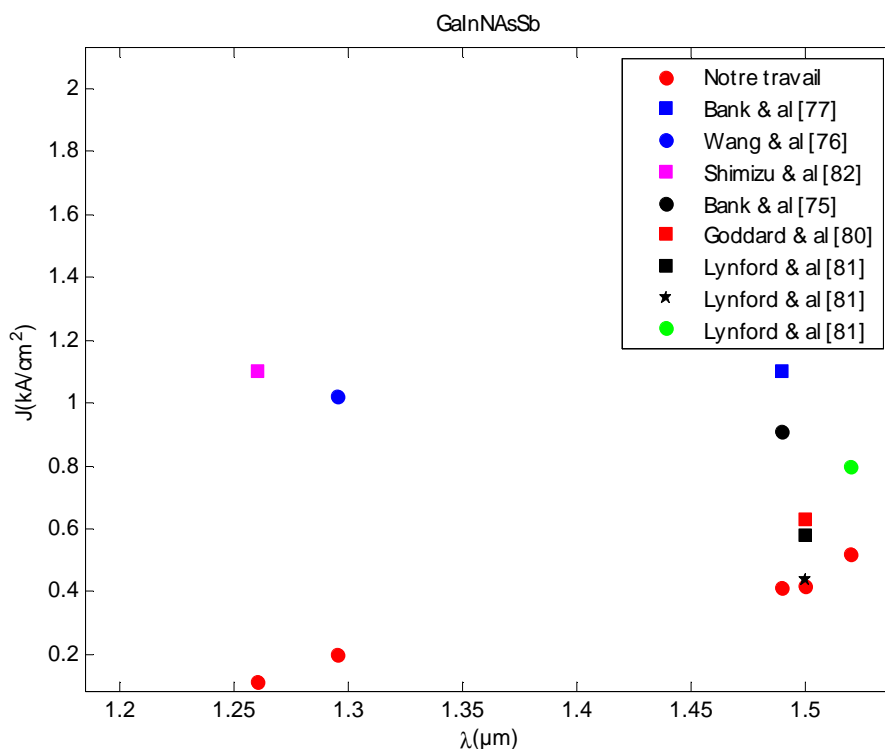


Figure 4.18 : Densité du courant de seuil en fonction de la longueur d'onde déterminée par différents auteurs pour le  $GaInNAsSb/GaAs$ .

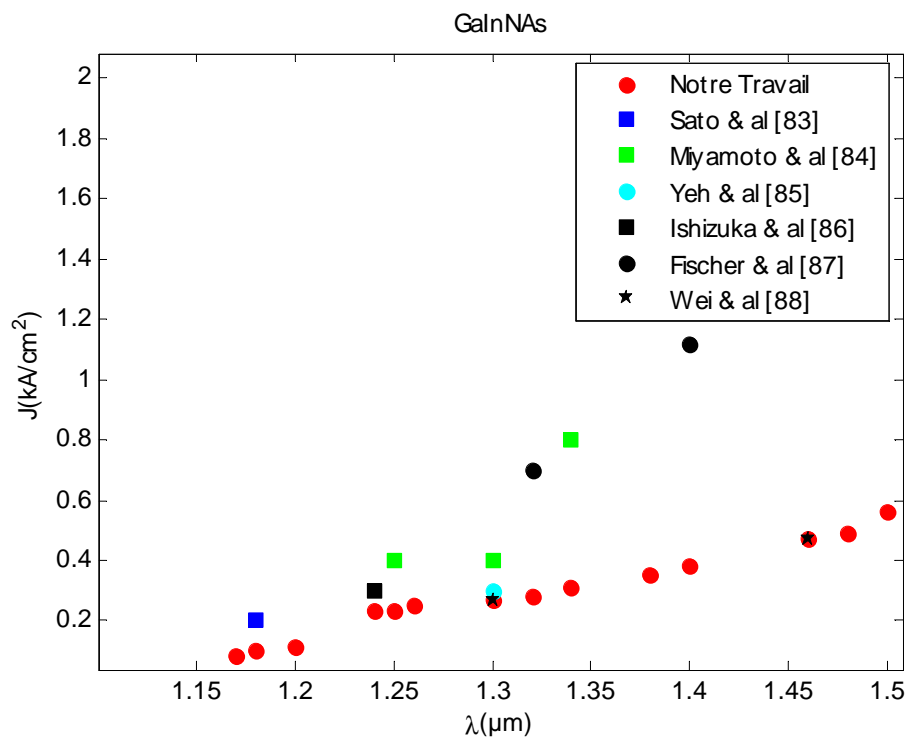


Figure 4.19 : Densité du courant de seuil en fonction de la longueur d'onde déterminée par différents auteurs pour le *GaInNAs/GaAs*.

Nous nous sommes basés sur l'ensemble des résultats obtenus le long de ce travail pour choisir des structures émettant à  $1.55\mu\text{m}$  avec de bonnes caractéristiques. Nous les avons regroupés dans les graphes des figures (4.20 et 4.21), qui représentent plusieurs combinaisons  $(x, y, z, L_z)$ .

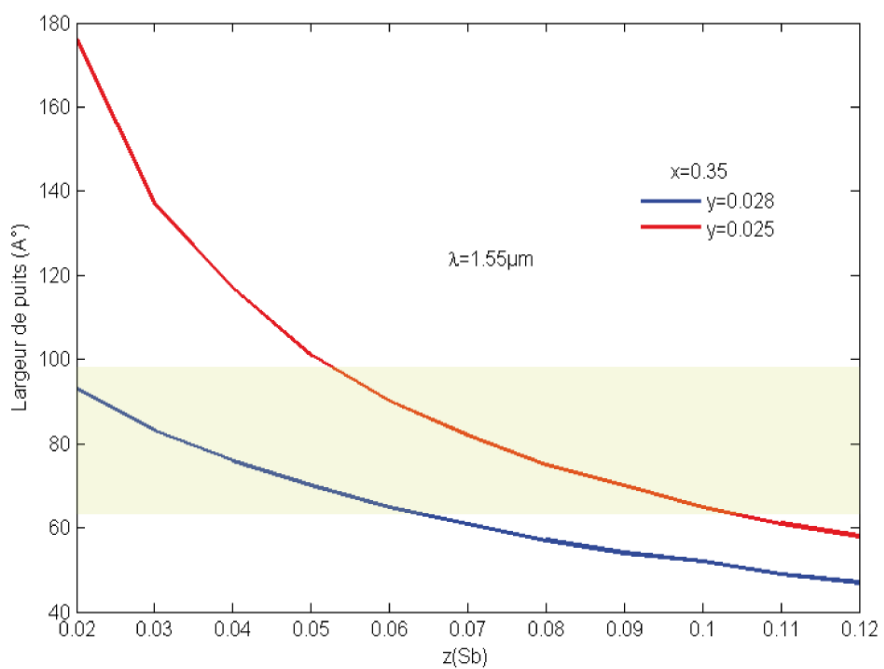


Figure 4.20 : Largeur de puits en fonction du pourcentage d'antimoine pour une émission à  $1.55 \mu\text{m}$ , pour  $x(\text{In}) = 0.35$

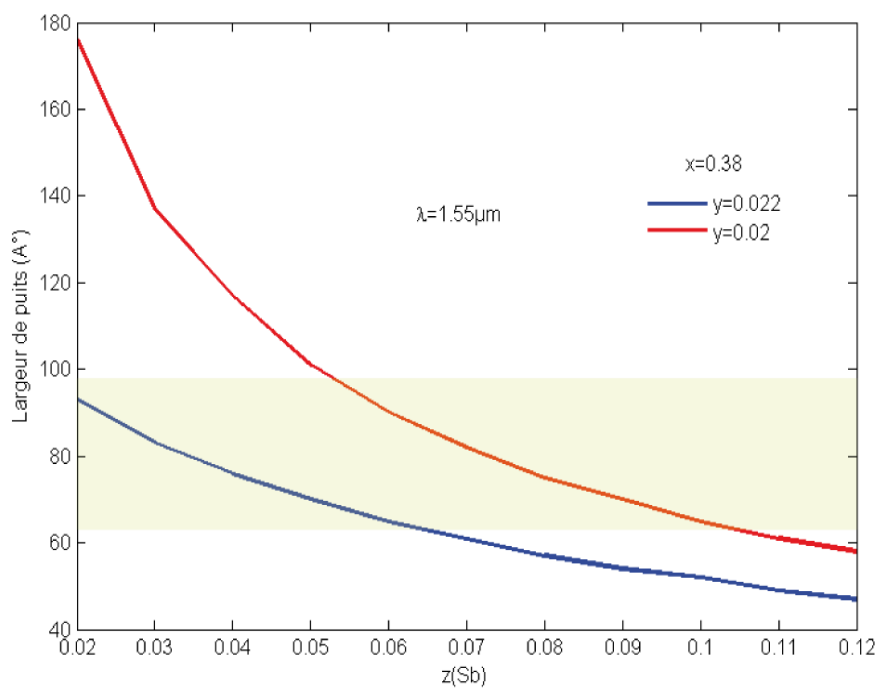


Figure 4.21 : Largeur de puits en fonction du pourcentage d'antimoine pour une émission à  $1.55 \mu\text{m}$ , pour  $x(\text{In}) = 0.38$ .

On remarque que plus les pourcentages d'azote et d'antimoine diminuent on atteint la longueur d'onde désirée à des largeurs de puits plus importantes, à titre d'exemple à 5% d'antimoine et 2.5% d'azote la structure émet à 1.55  $\mu\text{m}$  pour une largeur de puits  $L_z=96\text{\AA}$ , et pour 0.3% d'azote de plus, on obtient la même longueur d'onde pour  $L_z=65\text{\AA}$ . Ceci s'explique par la diminution de l'énergie de quantification avec l'augmentation de la largeur de la couche active. Dans les deux dernières figures nous avons délimité l'ensemble des structures que nous avons choisi par une bande colorée qui va de largeur de puits 65 $\text{\AA}$  jusqu'à 95 $\text{\AA}$ .

## 5.5 Conclusion

Le gain optique d'une structure laser est une caractéristique très importante; il est fondamental de le définir précisément pour avoir accès à d'autres caractéristiques, comme le courant de seuil et la puissance. Tel était le but principal de ce chapitre; nous avons commencé par présenter le modèle de calcul utilisé pour le calcul du gain optique; tout au long nous avons abordé les éléments indispensables à la modélisation, comme la densité d'états, les règles de sélection, les fonctions d'occupation de Fermi etc. Puis, après avoir effectué une série de simulations, nous avons étalé et commenté les résultats obtenus; ce qui nous a permis de mieux comprendre l'influence des différents paramètres de la structure sur le gain optique, notamment l'injection qui augmente le gain, la température qui provoque une translation du spectre vers les grandes longueurs d'ondes, et la largeur de puits qui contribue à l'élargissement du spectre à cause de la diminution de l'espacement entre les niveaux quantifiés .

Par la suite, nous nous sommes penchés sur le courant de seuil. A partir d'expressions simplifiées nous avons mis en avant les paramètres prépondérants qui déterminent sa valeur, nous nous sommes particulièrement attardés sur les recombinaisons Auger qui constituent la principale source de perte dans les lasers à puits quantique.

Nous avons vu que l'augmentation de la température et l'incorporation de l'azote et de l'antimoine augmentent le courant de seuil. Puis, afin de situer notre travail, nous avons cité les résultats expérimentaux de la littérature et plus particulièrement les plus récents, et nous sommes arrivés à la conclusion qu'ils vérifient le comportement constaté dans nos simulations.

## CONCLUSION

L'objectif de ce travail, motivé par les propriétés très particulières des alliages à base de nouveaux matériaux ( $Ga, In$ ), ( $N, As, Sb$ ), était la modélisation et la simulation de la structure à puits quantique contraint  $GaInNAsSb/GaAs$  pour application dans les télécommunications optiques.

Nous avons tout d'abord présenté les caractéristiques principales des semiconducteurs et la théorie permettant de les déterminer, nous avons ainsi évoqué le concept fondamental de la fonction d'onde électronique, la dispersion d'énergie  $E(\vec{k})$  et les masses effectives, enfin nous nous sommes penché sur les puits quantiques sous contraintes pour présenter brièvement la théorie nécessaire à la compréhension et la détermination des différentes caractéristiques de ce type de structures.

La deuxième partie a été consacrée aux structures à puits quantiques à base des nouveaux matériaux. Nous avons développé les propriétés des principaux alliages de cette famille ( $GaInNAs, GaAsNSb$ ) et le quinaire  $GaInNAsSb$  qui constitue une approche plus exotique pour l'amélioration des propriétés des structures  $III-N-V$ , et qui s'est avéré très prometteur pour l'ingénierie de l'énergie de la bande interdite en ajoutant un degré de liberté supplémentaire dans le design des dispositifs à base de cet alliage, car il permet de modifier plusieurs paramètres indépendamment, et ce en jouant sur les fractions de composition d'indium, d'azote et d'antimoine.

La suite de ce travail a été principalement consacrée au calcul des énergies. Les résultats de simulation, étant en bon accord avec les résultats expérimentaux de la littérature, nous ont permis de conclure que l'incorporation de l'indium augmente l'énergie de quantification des électrons et des trous, tandis que l'azote augmente l'énergie des électrons et l'antimoine celle des trous. Par la suite nous avons calculé l'énergie de transition et la longueur d'onde d'émission en fonction des fractions de composition et de l'épaisseur de la couche active, nous avons vu que la longueur d'onde  $1.55\mu m$  privilégiée pour les télécommunications optiques peut être atteinte avec ce quinaire.

Enfin la dernière partie avait pour objectif, la détermination du gain optique : caractéristique fondamentale pour le calcul du courant de seuil et de la puissance optique des dispositifs. Nous avons commencé par la présentation du modèle de calcul, puis l'ensemble des résultats obtenus nous ont permis de mieux comprendre l'influence des différents paramètres de la structure sur le gain optique, notamment l'injection qui augmente le gain, la température qui provoque une translation du spectre vers les grandes longueurs d'ondes et la largeur de puits qui contribue à

l'élargissement du spectre à cause de la diminution de l'espacement entre les niveaux quantifiés .

Puis nous avons abordé le calcul du courant de seuil, et nous nous sommes particulièrement attardé sur les recombinaisons Auger qui constituent la principale source de perte dans les lasers à puits quantique. Après la comparaison avec les résultats expérimentaux de la littérature et plus particulièrement les plus récents, nous sommes arrivés à la conclusion qu'ils vérifient le comportement constaté dans nos simulations.

A la 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.

## ANNEXE

Table des paramètres physiques (300K)

Les paramètres physiques	<i>GaAs</i>	<i>InAs</i>	<i>GaN</i>	<i>InN</i>	<i>GaSb</i>	<i>InSb</i>
Paramètre de maille : $a(\text{Å})$	5.65	6.05	4.46	5.02	6.09	6.74
L'énergie spin orbite : $\Delta_0(\text{eV})$	0.34	0.39	0.017	0.005	0.82	0.81
Potentiel hydrostatique de déformation de la bande de conduction : $a_c(\text{eV})$	-7.17	-5.08	-6.17	2.56	-7.5	-6.94
Potentiel hydrostatique de déformation de la bande de valence : $a_v(\text{eV})$	1.16	1.00	0.6	0.7	0.8	0.36
Potentiel de déformation de cisaillement: $b(\text{eV})$	-2.0	-1.8	-2.0	1.2	-2.0	-2.0
Constante élastique : $C_{11}(\text{Gpa})$	1221	832.9	293	187	884.2	684.7
Constante élastique : $C_{12}(\text{Gpa})$	566	452.6	159	125	402.6	373.5
Masse effective des électrons : $m_e(m_0)$	0.0632	0.0213	0.13	0.14	0.039	0.0135
Masse effective des trous lourds : $m_{hh}(m_0)$	0.5	0.517	0.806	0.8	0.28	0.43
Masse effective des trous légers : $m_{lh}(m_0)$	0.088	0.024	0.205	0.19	0.05	0.015
Bande interdite à 300°K : $E_g(\text{eV})$	1.422	0.354	3.24	0.756	0.72	0.17
Bande interdite à 0°K : $E_g(\text{eV})$	1.519	0.414	3.470	1.994	0.812	0.235
Indice de réfraction : $n_{ref}$	3.62	3.89	2.39	2.73	3.82	4.00
Constante de Varshni: A	0.54	0.27	0.909	0.245	0.417	0.32
Constante de Varshni : B	204	93	830	624	140	170
Référence des énergie de valence : $E_{vav}(\text{eV})$	-6.92	6.67	-6.5	-5.4	-6.25	-6.09
Paramètre d'Adachi : a	6.30	5.14	9.84	53.57	4.05	7.91
Paramètre d'Adachi : b	9.40	10.15	2.74	-9.19	12.66	13.07



## REFERENCES

- 1     Philippe Mercure  
Calcul de gain optique de structures à puits quantiques sous contraintes  
Thèse de doctorat. Ecole polytechnique de Montréal (2006).
- 2     P.J.A. Thijs, L.F. Tiemijer, J.J.M Binsma an T.Van Dongen.  
IEEE J.Quantum Electron, 30,477,(1994)
- 3     F.Alexander.  
Epitaxial Growth of Dilute Nitrides by Metal-Organic Vapour Phase Epitaxy.  
Dilute Nitride semiconductors, M.Henini: Elsevier, 2005 pp 93-117.
- 4     DAOUDI ATTIA  
Etude et simulation du gain optique d'un laser à puits quantique à base de  
 $Al_xGa_{1-x}N/GaN$ .  
Thèse de magistère. Université BLIDA, 2004
- 5     Claude cohen-Tannoudzi, Jaques Dupont-Roc, Gillert Grynberg.  
Photons et atomes : introduction à l'électrodynamique quantique.  
EDP. Sciences /CNRS EDITIONS, 2001.
- 6     JOACHIN PIPREK.  
Semi-conductors: optoelectronic Devices, introduction to physics and  
simulation.  
ACADEMIC PRESS, Elsevier, 2003.
- 7     W.Walukiewicz, W.Shan, J.Wu, K.M.Yu and J.W AgerIII.  
Band Anti-crossing and Related Electronic structure in III-N-V Alloys.  
Dilute Nitride semiconductors, M.Henini: Elsevier, 2005 pp 325-359.
- 8     Olivier GILARD  
Contribution à la modélisation de diodes laser à puits quantiques contraints  
pour télécommunications optiques.  
Thèse de doctorat, Institut National des Sciences Appliquées de Toulouse,  
1999.
- 9     B. de Cremoux.  
Les diodes laser: des principes aux développements récents, partie2.  
Laboratoire central de Recherche Thomson-CSF, France 1994.
- 10    AISSAT ABDELKADER  
Modélisation et calcul du gain optique et du courant de seuil d'un laser à puits  
quantique contraint à base de  $Ga_xIn_{1-x}As/InP$ .  
Thèse de magistère. Université BLIDA, 1999.
- 11    A.Fisher, H.Kuhn and H.Richter  
New approach in equilibrium theory for strained layer relaxation.  
Phys. Rev. Lett. 73, 2712–2715 (1994)
- 12    ROBERT P. SARZALA

- Physical analysis of an operation of GaInAs/GaAs quantum-well vertical-cavity surface-emitting diode lasers emitting in the 1.3- $\mu\text{m}$  wavelength range  
*Optica Applicata*, Vol. XXXV No. 2. pp 225-240 2005
- 13 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.
  - 14 J.S.Harris Jr, H.Yuen, S.Bank, M.Wistey, V.Lordi, T.Gugov, H.Bee and L.Goddard.  
MBE Growth and characterization of long wavelength Dilute Nitride III-V Alloys. Dilute Nitride semiconductors, M.Henini, Elsevier, 2005 pp 1-92.
  - 15 Kondow, M., Uomi, K., Niwa, A., Kitatani, T., atahiki, S., Yazawa, Y.  
GaInNAs : A novel material for long-wavelength-range laser diodes with excellent high-temperature performance.  
*Jpn. J. Appl. Phys.*, 1999, vol.35, part 1, N°2B, pp .1273-1275
  - 16 Nakara, K Kondow, M Kitatani, T Larsn, M.C Vomi, K  
1,3  $\mu\text{m}$  continous-wave lasing operation in GaInNAs quatum-well lasers  
*IEEE photonics technol. Lett.*, 1998, Vol.10 n°4 pp. 487-488
  - 17 J F Geiszand Dj Friedman  
*III-N-V Semiconductors for solar photovoltaic application.*  
*Semiconductor sci Technol.*17 (2002) pp.769-777
  - 18 JC.Harmand, L.Li R.Mouillet, .Unaro,V. Sallet,L.Travers, G.patriarche, L.Largeau, GaInNAsSb Alloy and its Potential for device applications  
*Dilute Nitride semiconductors*, M.Henini, Elsevier, 2005 .pp 471-493
  - 19 Rebecca J.Welty, Roger E.Welser, Charles W.Tu and Peter M. Asbeck.  
Application of dilute nitride materials to Heterojunction Bipolar Transistors  
*Dilute Nitride semiconductors*, M.Henini, Elsevier, 2005 pp 579-610
  - 20 Shimizu, H., Setiagung, C., Ikenaga, Y., Ariga, M., Kumada, K., Hama, T., Iwai, N. & Kasukawa, A.  
1.3  $\mu\text{m}$ -GaInNAsSb based material and its application to VCSELs.  
*Proc.IPRM*, 263. (2003)
  - 21 Yang, X., Heroux, J.B., Mei, L.F. & Wang, W.I.  
nGaAsNSb/GaAs quantum wells for 1.55  $\mu\text{m}$  lasers grown by molecular-beam epitaxy.  
(2001) *Appl. Phys. Lett.*, 78, 4068.
  - 22 R. Kudrawiec, M. Motyka, J. Andrzejewski, J. Misiewicz, D. Gollub and A. Forchel  
Photoreflectance and photoluminescence study of step-like

- GaNAs/GaNAs/GaAs quantum wells  
 IEE Proc.-Optoelectron., Vol. 151, No. 5, 313-316 October 2004
- 23 Yang, X., Heroux, J.B., Jurkovic, M.J. & Wang, W.I.  
 Low-threshold 1.3  $\mu\text{m}$  InGaAsNSb-GaAs single-quantum-well lasers grown by molecular beam epitaxy. IEEE Photon. Technol. Lett., 12, 128–130. (2000)
  - 24 Li, L.H., Sallet, V., Patriarche, G., Largeau, L., Bouchoule, S., Merghem, K., Travers, L. & Harmand, J.C  
 1.5  $\mu\text{m}$  laser on GaAs with GaInNAsSb quinary quantum well. Electron. Lett., 39, 519–520. (2003)
  - 25 Ha, W., Gambin, V., Wistey, M., Bank, S., Kim, S. & Harris, J.S., Jr.  
 Long-wavelength GaInNAs(Sb) lasers on GaAs. IEEE J. Quantum Electron., 38, 1260–1267. (2002)
  - 26 J. Misiewicz, R. Kudrawiec, M. Gladysiewicz, J. S. Harris,  
 "Electromodulation Spectroscopy of GaInNAsSb/GaAs Quantum Wells: The Conduction Band Offset and Effective Mass Issues,"  
 Dilute III-V Nitride Semiconductors and Materials Systems, 105, 163-179 (2008).
  - 27 J. Misiewicz, R. Kudrawiec, K. Ryczko, G. Sek, A. Forchel, J.-C. Harmand, M. Hammar, *Photoreflectance investigations of the energy level structure in GaInNAs-based quantum wells*  
 J. Phys.: Condens. Matter 16, S3071 (2004)
  - 28 J.B. Heroux, X. Yang, W.I. Wang,  
 Photoreflectance spectroscopy of strained (In)GaAsN/GaAs multiple quantum wells  
 J. Appl. Phys. 92, 4361 (2002)
  - 29 S.A. Choulis, T.J.C. Hosea, S. Tomic, M. Kamal Saadi, A.R. Admas, E.P. O'Reilly, B.A. Weinstein, P.J. Klar,  
 Electronic structure of  $\text{In}_y\text{Ga}_{1-y}\text{As}_{1-x}\text{N}_x/\text{GaAs}$  multiple quantum wells in the dilute- $N$  regime from pressure and  $k \cdot p$  studies, Phys. Rev. B 66, 165321 (2002)
  - 30 R. Kudrawiec, K. Ryczko, J. Misiewicz, H.B. Yuen, S.R. Bank, M.A. Wistey,  
 Band-gap discontinuity in  $\text{GaN}_{0.02}\text{As}_{0.87}\text{Sb}_{0.11}/\text{GaAs}$  single-quantum wells investigated by photoreflectance spectroscopy  
 H.P. Bae, J.S. Harris, Appl. Phys. Lett. 86, 141908 (2005)
  - 31 R. Kudrawiec, M. Gladysiewicz, J. Misiewicz, H.B. Yuen, S.R. Bank, M.A.  
 interband transitions in  $\text{GaN}_{0.02}\text{As}_{0.98-x}\text{Sb}_x/\text{GaAs}$  ( $0 < x < 0.11$ ) single quantum wells studied by contactless electroreflectance spectroscopy.  
 Wistey, H.P. Bae, J.S. Harris, Phys. Rev. B 73, 245413 (2006)
  - 32 H. M. Cheong, Y. Zhang, A. Mascarenhas, and J. F. Geisz, "Nitrogen-induced levels in  $\text{GaAs}_{1-x}\text{N}_x$  studied with resonant Raman scattering,"

- Phys. Rev. B*, vol.61, no. 20, pp. 13687-13690, May 15, 2000.
- 33 E. D. Jones, A. A. Allerman, S. R. Kurtz, N. A. Modine, K. K. Bajaj, S. T. Tozer, and X. Wei, "Photoluminescence-linewidth-derived reduced exciton mass for  $\text{In}_y\text{Ga}_{1-y}\text{As}_{1-x}\text{N}_x$  alloys," *Phys. Rev. B*, vol. 62, no. 11, pp. 7144-7148, Sept. 15, 2000.
  - 34 M. Kozhevnikov, V. Narayanamurti, C. V. Reddy, H. P. Xin, C. W. Tu, A. Mascarenhas, and Y. Zhang, "Evolution of  $\text{GaAs}_{1-x}\text{N}_x$  conduction states and giant  $\text{Au}/\text{GaAs}_{1-x}\text{N}_x$  Schottky barrier reduction studied by ballistic electron emission spectroscopy," *Phys. Rev. B*, vol. 61, no. 12, pp. 7861-7863, Mar. 15, 2000.
  - 35 GRENOUILLET LAURENT.  
Spectroscopie optique de nouveaux matériaux à base de  $(\text{Ga}, \text{In})(\text{N}, \text{As})$  pour la réalisation de composants à cavité verticale émettant à  $1.3\mu\text{m}$  sur substrat GaAs.  
Thèse de doctorat, Institut National Des Sciences Appliquées de Lyon, 2001.
  - 36 E P O'Reilly, A Lindsay and S Fahy,  
Theory of the electronic structure of dilute nitride alloys: beyond the band-anti-crossing model  
*J. Phys.: Condens. Matter* 16 (2004) S3257–S3276
  - 37 J-C Harmand, A Caliman, E VK Rao, L Largeau, J Ramos, R Teissier, L Travers, G Ungaro, B Theys and I F L Dias  
 $\text{GaNAsSb}$ : how does it compare with other dilute III–V-nitride alloys?  
*Semicond. Sci. Technol.* 17 (2002) 778–784
  - 38 W. Shan, W. Walkiewicz, and J.W. Ager III.  
Band Anti-crossing in  $\text{GaInNAs}$  Alloys.  
*Phys. Rev.* 1999 Vol 82, n°6 pp 1221-1224.
  - 39 A. Aissat, S. Nacer, M. Bensebti, J.P. Vilcot,  
Investigation on the emission wavelength of  $\text{GaInNAs}/\text{GaAs}$  strained compressive quantum wells on GaAs substrates.  
*Microelectr. J.* 39 (2008) 63.
  - 40 A. Aissat, S. Nacer, M. Bensebti, J.P. Vilcot,  
Effect of on band alignment of compressively strained  $\text{Ga}_{1-x}\text{In}_x\text{N}_y\text{As}_{1-y-z}\text{Sb}_z/\text{GaAs}$  quantum well structures  
*Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures* Vol 43, Issue 1, 2010, pp 40-44
  - 41 W. Shan, K.M. Yu, W. Walukiewicz, J.W. Ager III, E.E. Haller, M.C. Ridgway,  
Reduction of band-gap energy in  $\text{GaNAs}$  and  $\text{AlGaNAs}$  synthesized by  $\text{N}^+$  implantation  
*Appl. Phys. Lett.* 75 (1999) 1410.

- 42 Alberi, K.M. Yu, P.R. Stone, O.D. Dubon, W. Walukiewicz, T. Wojtowicz, X. Liu, J.K.  
Formation of Mn-derived impurity band in III-Mn-V alloys by valence band anticrossing  
Furdyna, Phys. Rev. B 78 (2008) 075201.
- 43 S. Tiwari, D.J. Frank,  
Empirical Fit to Band Discontinuities and Barrier Heights in III-V. Alloy Systems  
Appl. Phys. Lett. 60 (5) (1992) 630.
- 44 A. Ubukata, J. Dong,  
Growth of  $\text{Ga}_{0.46}\text{In}_{0.54}\text{N}_y\text{As}_{1-y}$  Single Quantum Wells on InP(100) Substrate by Metalorganic Chemical Vapor Deposition  
Jpn.J. Appl. Phys. 39 (2000) 5962.
- 45 L. Bhusal, A. Freundlich,  
Band structure and absorption properties of  $\text{GaAs}_{1-x}\text{N}_x/\text{InAs}_{1-y}\text{N}_y$  short period superlattices strained to InP (001)  
Phys. Rev. B 75 (2007) 075321.
- 46 A. Aissat a,n, S.Nacer , M.Seghilani , J.P.Vilcot  
Effect of on band alignment of compressively strained  $\text{Ga}_{1-x}\text{In}_x\text{N}_y\text{As}_{1-y-z}\text{Sb}_z/\text{GaAs}$  quantum well structures  
Physica E 2010, vol. 43, n°1, pp. 40-44
- 47 W.Shan, W.Walkiewicz, and J.W.Ager III.  
Effect of nitrogen on the band structure of GaInNAs Alloys.  
J.Appl.Phys. 1999, Vol 86, n°4 pp 2349-2351.
- 48 J.Misiewicz, R.Kudrawiec and G.Sek.  
Photo- and Electro-Reflectance of III-N-V compounds and low Dimensional Structures.  
Dilute Nitride semiconductors, M.Henini, Elsevier, 2005 pp 297-323.
- 49 R.Kudrawiec, M.Motyka, J.Andrzejewski, J.Misiewicz, D.Gallub and A.Forehel.  
Photo-reflectance and photoluminescence study of step-like GaInNAs/  
GaInNAs/GaAs quantum wells.  
IEEE Proc-optoelectron, 2004 Vol 151, n°5 pp 313-316.
- 50 R. Kudrawiec, H. B. Yuen, S. R. Bank, H. P. Bae, M. A. Wistey, J. S. Harris, M. Motyka,  
M. Gladysiewicz, and J. Misiewicz  
The Fermi level position in as-grown GaInNAs(Sb) quantum wells and layers studied by contactless electroreflectance  
p hys. stat. sol. (c) 5, No. 2, 473–477 (2008)

- 51 Ikuo Suemune, Katsuhiko Uesugi and Sasikala Ganapaty.  
MOMBE Growth and characterization of III-V-N compounds and application to InAs quantum Dots.  
Dilute Nitride semiconductors, M.Henini, Elsevier, 2005 pp 137-155.
- 52 G.P.O Reilly, A.Lindsay, S.Fahy, S.Tomic and P.J.Klar.  
ATight-binding Based analysis of the band Anti-crossing Model and Its application in Ga(In)NAs Alloys.  
Dilute Nitride semiconductors, M.Henini, Elsevier, 2005 pp 297-391.
- 53 Bank, S.R., Wistey, M.A., Goddard, L.L., Yuen, H.B., Lordi, V. & Harris, J.S.  
Low threshold, continuous wave, 1.5 mm GaInNAsSb lasers grown on GaAs.  
IEEE J. Quantum Electron, 40, 656–664. (2004)
- 54 Tansu, N., Chang, Y.L., Takeuchi, T., Bour, D.P., Corzing, S.W., Tan, M.R.T. & Mawst, L.J.  
Temperature analysis and characteristics of highly strained InGaAs–GaAsP–GaAs ( $\lambda = 1.17 \mu\text{m}$ ) quantum-well lasers. IEEE J. Quantum Electron., 38, 640–651. (2002)
- 55 R. Kudrawiec, M. Gladysiewicz, J. Misiewicz, H.B. Yuen, S.R. Bank, M.A. Wistey, H.P. Bae, James S. Harris  
Contactless electroreflectance and photoluminescence of InAs quantum dots with GaInNAs barriers grown on GaAs substrate  
J.Phys. Rev. B 73 (245413) (2006)
- 56 G. Bastard and J.A. Brum.  
Electronic states in semiconductor heterostructures.  
IEEE Journal of Quantum Electronics, 22(9), september 1986.
- 57 D.J Ben Daniel and C.B Duke  
Space-charged effect on electron tunneling  
Phy. Rev. 152,683-692(1966)
- 58 Soline Richard  
Modélisation physique de la structure électronique, du transport et de l'ionisation par choc dans les matériaux *III-V* massifs contraints et dans les puits quantiques  
Université paris XI, UFR scientifique d'Orsay
- 59 P. Vogl, H.P. Hjalmarson et J.D. Dow, "A semi-empirical tight-binding theory of the electronic structure of semiconductors", *J. Phys. Chem. Solids*, 44, 5, 365-378 (1983).
- 60 J.M. Jancu, R. Scholz, F. Beltram, et F. Bassani, "Empirical sp<sup>3</sup>s\* tightbinding calculation for cubic semiconductors: General method and

- material parameters”, *Phys. Rev. B* 57, 11, 6493-507 (1998)
- 61 Shun Lien Chung.  
Efficient band-structure calculations of strained quantum wells.  
*Phys.Rev B* 1991, Vol 43,n°12 pp 9649-9661.
- 62 J.M. Luttinger and W. Kohn.  
Motion of electrons and holes in perturbed periodic fields.  
*Physical Review*, 97(4):869\_883, february 1955.
- 63 S. L. Chuang, *Physics of Optoelectronic Devices*. New York: Wiley, 1995.
- 64 M. Elkurdi, G. Fishman, S. Sauvage et P. Boucaud.  
“Comparison between 6-band and 14-band k.p formalisms in SiGe/Si heterostructures”,  
*Phys.Rev. B* 68, 165333 (2003)
- 65 Nicolas TRENAD.  
Modélisation et simulation des composants optoélectroniques à puits quantiques.  
Thèse de doctorat, UNIVERSITE DE ROUEN, 2002.
- 66 W.W. Chow and S.W. Koch, *Semiconductor-Laser Fundamentals*. Berlin: Springer-Verlag, 1999.
- 67 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.
- 68 G.P. Agrawal and N.K Dutta,  
“Long wavelength semiconductor lasers”,  
Van Nostrand Reinhold company, New York (1986)
- 69 J.S. Harris Jr., M. Wistey, S. Bank, L. Goddard, V. Lordi, H. Bae and H. Yuen  
Long-wavelength Dilute Nitride–Antimonide Lasers  
*Dilute Nitride semiconductors*, M.Henini, Elsevier, 2005 pp 507-578.
- 70 Ozaki, S. & Adachi, S.  
Spectroscopic ellipsometry thermorefectance of GaAs.  
*J. Appl.Phys.*, 78, (1995) 3380–3386.
- 71 Adachi, S. Model dielectric constants of GaP, GaAs, GaSb, InP, InAs, InSb.  
*Phys. Rev. B*, 35, (1987) 7454–7463.
- 72 D.Botez. “InGaAsP/InP” double hétérostructure lasers: Simple expression for wave confinement, beam width and threshold current over wide,  
*IEEE, J.Quantum electron* 17 (1981) 178-186

- 73 A.Hang .  
Auger recombination in quantum well InGaAs  
Electron Lett 26 (1990) 1415-1416
- 74 Adachi, S. Model dielectric constants of GaP, GaAs, GaSb, InP, InAs, InSb.  
Phys. Rev.B, 35, 7454–7463. (1987)
- 75 A.Hang. “Relation between the  $T_0$  value bulk and quantum well GaAs  
App.phys. B, 44 (1987).
- 76 Yang, X., Heroux, J.B., Jurkovic, M.J. & Wang, W.I. Low-threshold 1.3  $\mu\text{m}$   
InGaAsN:Sb-GaAs single-quantum-well lasers grown by molecular beam  
epitaxy.  
IEEE Photon. Technol. Lett., 12, 128–130. (2000)
- 77 Hetterich, M., Dawson, M.D., Egorov, A.Yu., Bernklau, D. & Riechert, H.  
Electronic  
states and band alignment in GaInNAs/GaAs quantum-well structures with low  
nitrogen content.  
Appl. Phys. Lett., 76, 1030–1032. (2000)
- 78 Bank, S.R., Wistey, M.A., Yuen, H.B., Goddard, L.L., Ha, W., Harris, J.S., Jr.  
Low threshold QW GaInNAsSb/GaAs laser at 1.49  $\mu\text{m}$ .  
Electron. Lett., 39, 1445–1446. (2003)
- 79 Riechert, H., Ramakrishnan, A. & Steinle, G.  
Development of InGaAsN-based 1.3  $\mu\text{m}$  VCSELs.  
Semicond. Sci. Technol., 17, 892–897. (2002)
- 80 L. L. Goddard, S. R. Bank, M. A. Wistey, H. B. Yuen, H. P. Bae, and J. S.  
Harris Jr., *Fellow*,  
Reduced monomolecular recombination in GaInNAsSb/GaAs lasers at 1.5  $\mu\text{m}$   
IEEE, J.Quantum electron (2004)
- 81 Lynford L. Goddard, Seth R. Bank, Mark A. Wistey, Homan B. Yuen, James S.  
Harris Jr.  
High performance GaInNAsSb/GaAs lasers at 1.5  $\mu\text{m}$   
SPIE, Vol. 5738 Bellingham (2005)
- 82 Shimizu, H., Kumada, K., Uchiyama, S. & Kasukawa,  
A. High performance CW 1.26  $\mu\text{m}$  GaInNAsSb-SQW and 1.20  $\mu\text{m}$   
GaInAsSb-SQW ridge lasers.  
Electron. Lett. 36, (2000) 1701–1703.
- 83 Sato, S. & Satoh, S.  
1.3  $\mu\text{m}$  continuous-wave operation of GaInAsN lasers grown by MOCVD.  
Electron. Lett., 35 (15), 12 (1999).



- 84 Miyamoto, T., Kawaguchi, M., Minobe, S., Kawakami, S. & Koyama, F.  
Proceedings of the International Workshop on GaAs Based Lasers for 1.3–1.5  
mm Wavelength Range, Wroclaw, Poland. (2003)
- 85 Yeh, J.Y., Tansu, N. & Mawst, L.  
Proceedings of the 15th InP and Related Materials  
International Conference, Santa Barbara, USA, p. 269. (2003)
- 86 Ishizuka, T., Iguchi, Y., Katsuyama, T., Takagishi, S., Murata, M., Hashimoto, J. &  
Ishida, A.  
Proceedings of the 15th InP and Related Materials International Conference,  
Santa Barbara, USA, p. 273. (2003)
- 87 Fischer, M., Reinhardt, M. & Forchel, A.  
Electron. Lett., 36 (14), 1208. (2000)
- 88 Wei, J., Xia, F., Li, C. & Forrest, S.  
IEEE Photon. Technol. Lett., 14, 597. (2002)
- 89 Bank, S.R., Wistey, M.A., Yuen, H.B., Goddard, L.L., Ha, W. & Harris, J.S., Jr.  
Electron. Lett., 39 (20), 1445. (2003)
- 90 Li, L.H., Sallet, V., Patriarche, G., Largeau, L., Bouchoule, S., Travers, L. &  
Harmand, J.C.  
Appl. Phys. Lett., 83 (7), 1298 (2003)