

الجمهورية الجزائرية الديمقراطية الشعبية
République Algérienne démocratique et populaire

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

جامعة سعد دحلب البليدة
Université SAAD DAHLAB de BLIDA

كلية التكنولوجيا
Faculté de Technologie

قسم الإلكترونيك
Département d'Électronique



Mémoire de Master

Filière ELECTRONIQUE
OPTION : INSTRUMENTATION

présenté par

MEZIANE ANIS

Matériaux intelligents pour les composants optoélectroniques (AlGaSb/AlSb)

Promotrice:

M^{me}. Chenini Lynda

Co-promoteur :

M^r. Aissat Abdelkader

2022-2023

Résumé

Le but de ce travail est de mener une étude sur les transitions intersousbandes ainsi que le coefficient d'absorption des structures à puits quantiques à base du ternaire AlGaSb/AlSb. On s'est intéressé en premier lieu à étudier les principales propriétés optoélectroniques qui caractérisent cette structure. Nous avons ensuite étudié l'effet d'introduction de l'Aluminium sur le coefficient d'absorption intersousbandes.

Mots clés :

$Al_xGa_{1-x}Sb/AlSb$, optoélectronique, absorption, intrabande.

Summary

The aim of this work is to conduct a study on the intersubband transitions and the absorption coefficient of quantum well structures based on AlGaSb/AlSb ternary. We are first interested in studying the basic optoelectronic properties that define this system. Then, we investigated the effect of introducing Aluminium on the intersubband absorption coefficient.

Key words:

$Al_xGa_{1-x}Sb/AlSb$, optoelectronic, absorption, intraband.

ملخص

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

الكلمات الدالة:

$Al_xGa_{1-x}Sb/AlSb$ ، الكترولوضوني ، امتصاص

Remerciements

J'exprime toute ma reconnaissance au grand DIEU, Maître des temps et des circonstances ; de m'avoir donné la force et la volonté durant toutes ces années d'études afin que je puisse arriver à ce stade.

Mes remerciements particuliers à ma promotrice, M^{me} CHENINI LYNDIA. Merci Pour votre confiance et votre patience. Le soutien et les conseils qu'elle m'a prodigué tout au long de ce travail, m'ont permis de réaliser ce mémoire dans des conditions favorables à l'approfondissement de la pensée. Travailler avec elle est une expérience passionnante.

Je remercie tous mes enseignants que j'ai connus tout le long de mon parcours universitaire en particulier Mr A. Aïssat et F. Yekhléf.

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

Dédicaces

Je dédie ce travail à mes chers parents, quoi que je fasse ou que je dise, je ne saurai point vous remercier comme il se doit. Votre affection me couvre, votre bienveillance me guide et votre présence à mes côtés a toujours été ma source de force pour affronter les différents obstacles. Que Dieu vous protège.

A toute personne qui m'a aidé de près ou de loin à la réalisation de ce travail.

A mes amis:

Kessaisia Mohamed Fares et Ferhat Mohamed.

Table des matières

Résumé	
Remerciements	
Dédicaces	
Table des matières	
Liste des abréviations	
Liste des figures	
Liste des tableaux	
Introduction générale.....	1

Chapitre 1 : Milieux semi-conducteurs Généralités

1.1. Introduction	3
1.2. Conducteurs – Isolants – Semi-conducteurs	3
1.3. Semi-conducteur simples et composés	4
1.4. Propriétés structurales des semiconducteurs	5
1.5. Bandes d'énergie.....	6
1.6. Porteurs de charges libres dans les milieux semiconducteurs	9
1.7. La température.....	10
1.8. Semi-conducteurs intrinsèques (purs) à l'équilibre	12
1.9. Semi-conducteurs extrinsèques à l'équilibre.....	13
1.10. Techniques de croissance.....	14
1.11. La contrainte.....	16
1.12. Types de confinements	18
1.13. Puits quantique	19
1.14. Transitions intersousbandes.....	22
1.15. Application des semiconducteurs.....	23
Conclusion	24

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

2.1. Introduction	25
-------------------------	----

2.2. Détermination des paramètres (Loi de Végard)	25
2.3. Propriétés optoélectroniques... ..	26
2.3.1. Paramètre de maille	26
2.3.2. La contrainte	27
2.3.3. Epaisseur critique	28
2.3.4. Energie de la bande interdite.....	29
2.3.5. La masse effective	30
2.3.6. Les alignements des bandes	31
2.3.7. Energie de quantification	34
2.3.8. L'absorption intersousbandes.....	36
Conclusion	38
Conclusion générale.....	39
Références	

Listes des acronymes et abréviations

a : Paramètre de maille.

a_e : Le paramètre de maille de la couche épitaxie.

a_c : Potentiels hydrostatiques de déformation pour la bande de conduction.

a_v : Potentiels hydrostatiques de déformation pour la bande de valence.

a_s : Le paramètre de maille du substrat.

Al : Aluminium

b : le potentiel de déformation tétragonale.

BC: Bande de conduction.

BV : Bande de valence.

C_{ij} : Les coefficients d'élasticité.

E_c : Energie de la bande conduction.

E_g : Énergie de la bande interdite.

E_n : Energie de quantification.

E_{tr} : Energie de transition.

E_v : Energie de la bande valence.

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

Ga : Gallium.

hh : Trou lourd (Heavy hole).

k : Constante de Boltzmann

h_c : L'épaisseur critique.

lh : Trou léger (Light hole).

L_p : Largeur du puits quantique.

m_0 : La masse effective de l'électron.

Sb : Antimoine.

T : Temperature

x : Concentration d'Aluminium.

ΔE_{hh} : Décalage d'énergie de la bande de trous lourds.

ΔE_{lh} : Décalage d'énergie de la bande de trous légers.

λ : Longueur d'onde.

ε : La déformation ou le désaccord de maille.

α : Coefficient d'absorption.

Liste des figures

Figure 1.1. Diagrammes de bandes d'énergie d'un isolant, un semi-conducteur et un métal (conducteur)	4
Figure 1.2. Structure zinc blende avec le tétraèdre	5
Figure 1.3. Structure wurtzite avec les sites tétraédriques et octaédriques formés entre les couches A et B	5
Figure 1.4. Diagramme de bandes d'énergie	7
Figure 1.5. (a) Semi-conducteur à gap direct, (b) Semi-conducteur à gap indirect.....	8
Figure 1.6. Apparition d'un électron et d'un trou libres lors d'une rupture d'une liaison covalente.....	9
Figure 1.7. Position du niveau de Fermi intrinsèque.	12
Figure 1.8. Types des semiconducteurs extrinsèques	13
Figure 1. 9. Bâti d'épitaxie par jet moléculaire	15
Figure 1.10. Bâti d'épitaxie par dépôt en phase vapeur	15
Figure 1.11. Représentation schématique de la structure de bande d'un matériau SC	17
Figure 1.12. Evolution de la densité d'état avec le niveau de confinement quantique	19
Figure 1.13. Diagrammes schématiques montrant les puits quantiques de types I et II.....	21
Figure 1.14. Transitions intersousbandes	23
Figure 1.15. Composants électroniques à semi-conducteur.....	24
Figure 2. 1. Schéma de la structure à puits quantique AlGaSb/AlSb.....	26
Figure 2.2. Variation du paramètre de maille de l'alliage $Al_xGa_{1-x}Sb$ en fonction de la concentration d'Al.....	27
Figure 2.3. Variation de la contrainte en fonction de la concentration d'Al de la structure $Al_xGa_{1-x}Sb / AlSb$	28
Figure 2.4. Variation de l'épaisseur critique en fonction de la concentration d'Al	28
Figure 2.5. Evolution des bandes d'énergie E_g^Γ , E_g^X et E_g^L à $T=300K$	30
Figure 2.6. Variation de la masse effective en fonction des concentrations d'Al des différents porteurs e , hh et lh	31
Figure 2.7. Schéma du décalage des bandes ΔE_c et ΔE_v	31
Figure 2.8. Variation de ΔE_c et ΔE_v en fonction de la concentration d'Al.....	33
Figure 2.9. Variation de l'énergie de quantification en fonction de L_p , ($x=0.1$).....	34
Figure 2.10. Variation de l'énergie de quantification en fonction de L_p , ($x=0.2$).....	35

Figure 2.11. Variation de l'énergie de quantification en fonction de L_p , ($x=0.3$).....	35
Figure 2.12. Variation de l'énergie de quantification en fonction de L_p , ($x=0.4$).....	36
Figure 2.13. Variation du coefficient d'absorption intersousbandes en fonction de λ pour différentes concentrations d'Al ($L_p=70\text{\AA}$).....	37
Figure 2.14. Variation du coefficient d'absorption intersousbandes en fonction de λ pour différentes largeurs du puits quantique $\text{Al}_{0.1}\text{Ga}_{0.9}\text{Sb}/\text{AlSb}$	38

Liste des tableaux

Tableau 1.1. Energie de bande interdite (E_g (eV) à $T = 4\text{K}$) des nitrures d'éléments III et de ZnO cristallisés dans la phase WZ et ZB.....	6
Tableau 1.2. Energies de gap et les paramètres de Varshni des principaux semi-conducteurs à $T = 0\text{k}$ au voisinage des points Γ	11
Tableau 1.3. Les différents paramètres de nitrure de type Wurtzite	11
Tableau 2.1. Paramètre de maille des matériaux binaires AlSb et GaSb... ..	26
Tableau 2.2. Energie de gap des matériaux binaires AlSb et GaSb	29
Tableau 2.3. Paramètre de Bowing.....	29
Tableau 2.4. Valeur des paramètres de Luttinger des matériaux binaires AlSb et GaSb	30
Tableau 2.5 : Valeur des paramètres de potentiel des matériaux binaires AlSb et GaSb	32

Introduction générale

Les premières civilisations se sont construites grâce à des matériaux naturels : le bois, la pierre, le cuir, l'os, la corne ou le lin. Nous avons ensuite connu, mais plus récemment, l'émergence des matières plastiques, puis des composites, dans le bâtiment, l'automobile l'aéronautique, le sport ou le secteur militaire. Un objet naturel ou en matière plastique dépend des caractéristiques de la matière qui le constitue. Mais progressivement, les chercheurs et les ingénieurs ont eu le besoin d'utiliser des matériaux comportant eux-mêmes leurs propres fonctions. C'est l'avènement des matériaux intelligents, nés au début des années 1980 de travaux menés principalement aux États-Unis dans le domaine de l'aérospatiale et qui concernent aujourd'hui tous les secteurs d'activités. Grâce aux matériaux intelligents les fonctions sont inscrites dans la forme et dans la matière [1].

Un matériau intelligent est sensible, adaptatif et évolutif. Ils possèdent des fonctions qui lui permettent de se comporter comme un capteur (détecter des signaux), un actionneur (effectuer une action sur son environnement) ou parfois comme un processeur (traiter, comparer, stocker des informations). Ce matériau est capable de modifier spontanément ses propriétés physiques, par exemple sa forme, sa connectivité, sa viscoélasticité ou sa couleur, en réponse à des excitations naturelles ou provoquées venant de l'extérieur ou de l'intérieur du matériau - variations de température, contraintes mécaniques, champs électriques ou magnétiques. Un matériau intelligent est ainsi apte à remplir des fonctions de commande, de détection ou de collecte d'énergie sans modification de sa structure fondamentale.

Les matériaux intelligents s'imposent aujourd'hui dans les secteurs les plus divers, allant du bâtiment aux équipements sportif en passant par la biomédecine, la robotique ou le secteur militaire.

Les semi-conducteurs sont des matériaux clés pour les applications en micro-électronique. Les déposer en couche mince sur des supports fragiles ou délicats, tels que du verre fin, des feuilles de plastiques souples ou des pièces imprimées en 3D, est une prouesse technologique qui permettrait de créer de nouveaux matériaux intelligents comme des capteurs ou des photodétecteurs transparents.

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

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

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

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

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

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

Dans le chapitre 2, on explore la structure AlGaSb/GaSb en détaillant les propriétés optoélectroniques principales. Par conséquent, il serait très intéressant d'étudier l'effet de l'introduction de l'Aluminium sur les propriétés de ce matériau et surtout sur le coefficient de l'absorption intersousbandes. Pour en finir, on termine par une conclusion générale résumant les principaux résultats du travail.

Chapitre 1 : Milieux Semi-conducteurs

Généralités

1.1. Introduction

Les matériaux intelligents jouent un rôle crucial dans le développement des composants optoélectroniques rapides. Ces composants exploitent les propriétés optiques et électroniques avancées des matériaux pour permettre des performances optoélectroniques supérieures, notamment en termes de vitesse de fonctionnement [1].

Les matériaux intelligents sont des matériaux dont les propriétés peuvent être modifiées de manière contrôlée en réponse à des stimuli externes tels que la lumière, la chaleur, le champ électrique ou magnétique. Dans le cas des composants optoélectroniques rapides, ces matériaux doivent présenter des réponses rapides et efficaces aux stimuli pour permettre des applications à haute vitesse telles que la communication optique à haut débit et le traitement optique de l'information [1].

1.2. Conducteurs – Isolants – Semi-conducteurs

Les matériaux sont classés en trois catégories selon leurs propriétés électriques, telle que l'on peut voir sur la figure 1.1.

Conducteurs

Ce sont les métaux, tels que le fer (Fe), le cuivre (Cu), l'or (Au), l'argent (Ag) et l'aluminium (Al), ayant la plus faible résistivité à température ambiante, typiquement inférieure à $10^{-5} \Omega\text{cm}$. La conduction électrique de ces métaux s'effectue essentiellement au moyen des électrons libres situés dans les couches périphériques des atomes qui les constituent.

Isolants

Ce sont les matériaux dont la résistivité ρ est supérieure à $10^8 \Omega\text{cm}$, tels que le verre, la silice (SiO_2) et le carbone (diamant).

Semiconducteur :

C'est une classe de matériaux qui se situe entre les métaux et les isolants, dont la résistivité varie entre $10^{-5} \Omega\text{cm}$ et $10^4 \Omega\text{cm}$. Le transport électrique se fait par les porteurs de

charges électrons et trous. Un semi-conducteur peut être soit intrinsèque (pur) ou extrinsèque (dopé par des atomes impuretés).

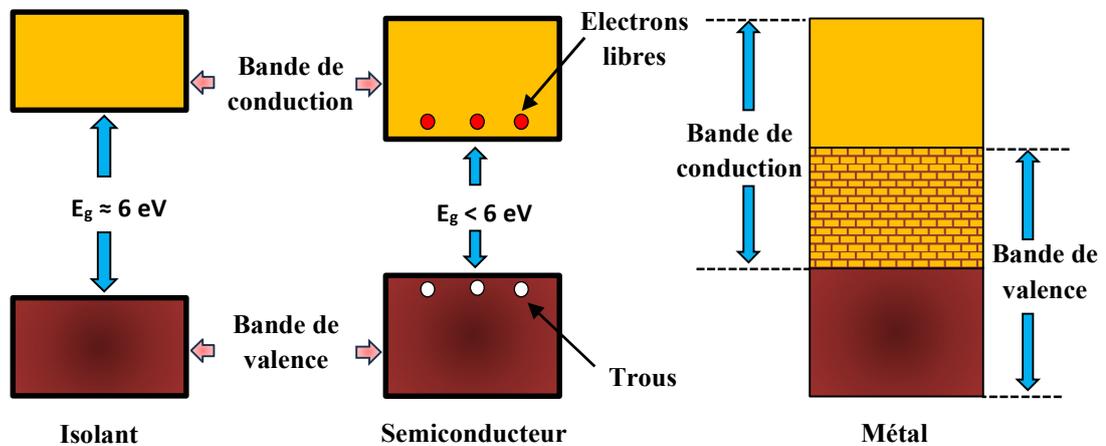


Figure 1.1 : Diagrammes de bandes d'énergie d'un isolant, un semi-conducteur et un métal (conducteur).

1.3. Semiconducteurs simples et composés

Semiconducteur simple

C'est un semi-conducteur composé d'un seul élément atomique tel que les semiconducteurs qui appartiennent à la colonne IV de classification périodique comme le silicium (Si) et le germanium (Ge).

Semiconducteur composé

C'est un semi-conducteur composé d'au moins deux types d'atomes différents. Ils peuvent être des semi-conducteurs binaires qui appartiennent aux différentes classes II-VI, III-V, IV-IV, .. etc. Il existe aussi des semi-conducteurs ternaires composés de trois types d'atomes et des semi-conducteurs quaternaires composés de quatre types d'atomes.

Semiconducteurs binaires : GaAs, InAs, ZnO, HgTe, GaP, GaN,

Semiconducteurs ternaires : InGaAs, AlInAs, CdZnTe, HgZnTe, GaNAs,

Semiconducteurs quaternaires : AlGaAsP, AlInAsP, AlInGaP, GaAsSbN,

Semiconducteurs quinaires : GaInNAsSb, GaInAsSbP

1.4. Propriétés structurales des semiconducteurs

En générale, les semi-conducteurs se cristallisent dans l'une des deux structures suivantes :

Structure Zinc blende

Tel que le GaAs, InGaAs, InGaNaNs,...etc. Dans cette structure (figure 1.2), les deux réseaux CFC contiennent deux types d'atomes différents. Quatre atomes occupent les nœuds du premier CFC et quatre autres atomes sont placés à l'intérieur du cube et occupent les positions $(1/4, 1/4, 1/4)$, $(3/4, 1/4, 3/4)$, $(1/4, 3/4, 3/4)$ et $(3/4, 3/4, 1/4)$.

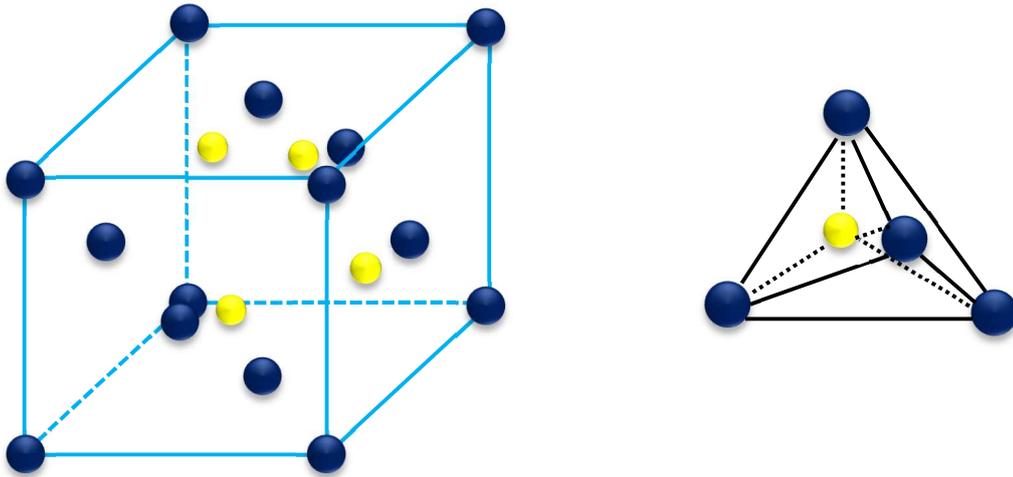


Figure 1.2. Structure zinc blende avec le tétraèdre.

Structure Wurtzite

Dans cette structure (sulfure de zinc ZnS), le motif est constitué de deux atomes différents qui occupent les positions $(0, 0, 0)$ et $(1/3, 2/3, 1/2)$. Comme dans la structure zinc blende, chaque atome est entouré de quatre atomes de l'autre élément formant ainsi des tétraèdres (figure 1.3).

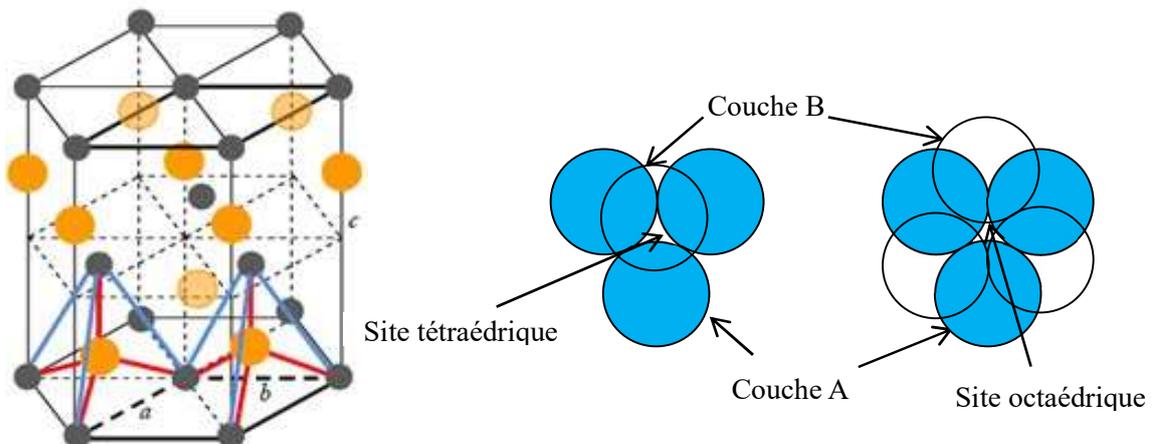


Figure 1.3. Structure wurtzite avec les sites tétraédriques et octaédriques formés entre les couches A et B.

Remarque :

Les nitrures d'éléments III : GaN, AlN, InN et leurs alliages se présentent principalement sous deux phases cristallines : la structure Wurtzite et la structure Zinc Blende.

Table 1.1. Energie de bande interdite (E_g (eV) à $T = 4K$) des nitrures d'éléments III et de ZnO cristallisés dans la phase WZ et ZB [2].

Elément	Zinc Blende	Wurtzite
GaN	3.29	3.51
AlN	5.40	6.25
InN	0.78	0.78
ZnO	3.27	3.44

1.5. Bandes d'énergie

Les électrons d'un atome isolé occupent des niveaux discrets d'énergie. Lorsque les atomes se rapprochent les uns aux autres, les distances deviennent de l'ordre atomique ($d \cong \text{Å}$) et les niveaux d'énergie se dédoublent. La dégénérescence des niveaux d'énergie fait apparaître des bandes d'énergie permises, séparées par des bandes d'énergie interdites, de largeur E_g (énergie de gap).

Dans les semi-conducteurs, la dernière bande complètement remplie est appelée bande de valence (BV) et la bande complètement vide, située juste au-dessus est appelée bande de conduction (BC) à $T=0K$. Le niveau le plus bas de la BC est noté par E_C , tandis que celui le plus haut de la BV est noté par E_V (figure 1.4).

A $0K$, la bande de conduction est vide et la bande de valence est complètement remplie d'électrons. Pour une température élevée, un électron de la BV peut recevoir suffisamment d'énergie pour passer dans la BC et un trou apparaît alors dans la BV, ce qui rend possible la conduction électrique.

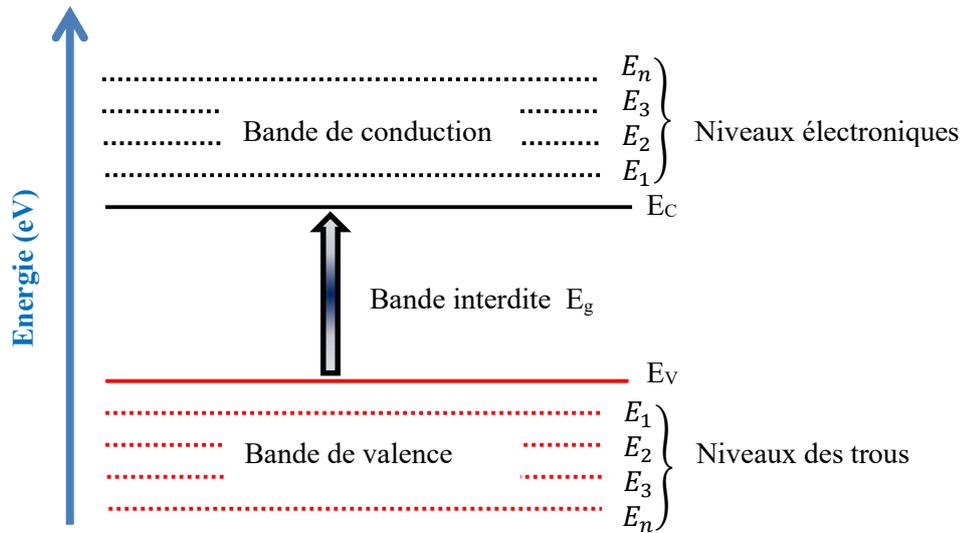


Figure 1.4. Diagramme de bandes d'énergie.

A titre d'exemples, les énergies de gap des semi-conducteurs les plus courants sont : Si (1.12 eV), Ge (0.67 eV), GaAs (1.42 eV). Les isolants ont des bandes interdites d'énergie nettement plus larges : SiO₂ (9.0 eV), diamant (5.47 eV) et Si₃N₄ (5.0 eV).

1.5.1. Gap direct et indirect

Un gap est dit direct si le maximum de la BV et le minimum de la BC sont situés au même point (même vecteur d'onde \vec{k}) de la zone de Brillouin (Figure 1.5.a). Dans ce cas, la transition électronique entre E_V et E_C conserve le vecteur d'onde ($\Delta\vec{k} = \vec{0}$).

Dans le cas du gap indirect, le minimum de la BC est situé à une distance ($\Delta\vec{k} \neq \vec{0}$) du maximum de la BV dans la zone de Brillouin (Figure 1.5.b) et la transition électronique entre E_V et E_C est accompagnée par le changement de la quantité de mouvement $\Delta\vec{P} = \hbar\Delta\vec{k}$.

Cette distinction entre matériaux semi-conducteurs à gap direct ou indirect est importante, particulièrement pour les applications optoélectroniques qui mettent en jeu à la fois des électrons et des photons.

La transition d'énergie minimale entre ces deux bandes peut avoir lieu sans changement de vecteur d'onde dans les semi-conducteurs à gap direct, ce qui permet l'absorption et

l'émission de lumière de façon beaucoup plus efficace que dans les matériaux à gap indirect. Cette différence oriente le choix des matériaux pour les applications optoélectroniques.

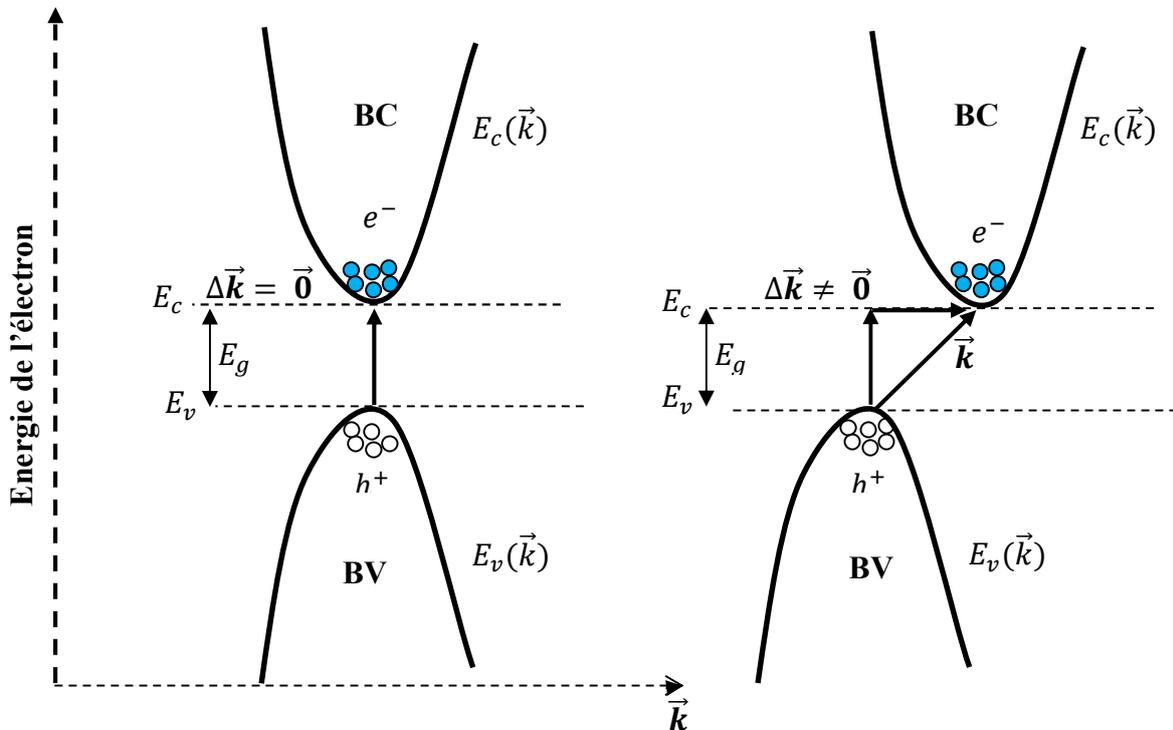


Figure 1.5. (a) Semi-conducteur à gap direct, (b) Semi-conducteur à gap indirect.

1.5.2. Transition interbandes

Deux types de transitions peuvent avoir lieu au sein d'un semi-conducteur : les transitions radiatives et celles non radiatives. Les transitions radiatives dites inter-bande sont à leur tour classifiées selon la configuration des bandes du semi-conducteur en transitions directes et indirectes (avec intervention d'un phonon), [3].

Transitions directes (verticales)

En absorption directe, les photons sont absorbés par le cristal, créant des électrons et des trous. Puisque le minimum de bande de conduction a la même valeur de \vec{k} , que le maximum de la bande de valence, la transition optique a lieu sans qu'il y'ait un changement significatif de \vec{k} , car le photon absorbé a un très petit vecteur d'onde (Fig 1.5.a). Ces transitions sont très efficaces dans le cas des semi-conducteurs II-VI et III-V.

📌 Transitions indirectes

Dans le processus d'absorption indirecte, la largeur minimale de la bande interdite fait intervenir des électrons et des trous séparés par un vecteur d'onde non négligeable. Ce processus fait intervenir en plus de l'électron et du photon, un phonon (Fig. 1.5.b). Si un phonon de vecteur d'onde et de fréquence ω est créé par ce processus, alors nous avons d'après les lois de la conservation :

$$\vec{k}_{\text{photon}} = \vec{k}_c + \vec{k}_{\sim 0} \quad (1.1)$$

Et

$$h\nu_e - E_p = E_g \text{ (émission de phonon d'énergie } E_p = \hbar\omega)$$

$$h\nu_a + E_p = E_g \text{ (absorption de phonon)}$$

Les énergies des phonons sont généralement bien inférieures à E_g (0,01 à 0,03 eV). Au cours de ce processus d'absorption, un photon est absorbé et trois particules se forment : électron, trou, phonon. De tels processus sont moins probables que l'absorption directe [4].

1.6. Porteurs de charges libres dans les milieux semiconducteurs

Lorsque le semi-conducteur est porté à une énergie thermique ou lumineuse suffisante, la liaison de valence sera brisée : on arrache ainsi un ou plusieurs électrons précédemment engagés dans ces liaisons. Ces électrons seront excités vers la BC et des trous seront par la suite créés, à la place des électrons, dans la BV, voir figure 1.6.

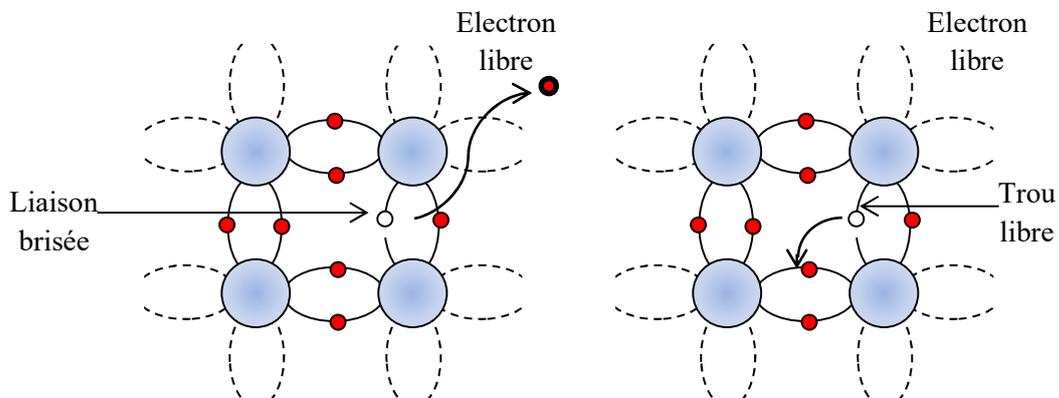


Figure 1.6. Apparition d'un électron et d'un trou libres lors d'une rupture d'une liaison covalente.

De ce fait, l'électron occupe le niveau E_c le plus bas et se comporte comme une particule libre de masse effective m_e^* différente de la masse m_0 (9.1×10^{-31} kg) de l'électron libre dans le vide. De même, le trou créé dans la BV peut être occupé par un autre électron de la même bande et possède lui aussi une masse effective. La masse effective des électrons est donnée par la relation :

$$m^* = \hbar^2 \frac{\partial^2 E}{\partial k^2} \quad (1.2)$$

La masse effective des trous lourds (hh) et légers (lh) est obtenue à partir des relations suivantes :

$$m_{hh}^* = \frac{m_0}{\gamma_1 - \gamma} \quad , \quad m_{lh}^* = \frac{m_0}{\gamma_1 + \gamma} \quad (1.3)$$

$$\gamma = \sqrt{2(\gamma_2^2 + \gamma_3^2)} \quad (1.4)$$

γ_1, γ_2 et γ_3 sont les paramètres de Luttinger.

1.7. La température

Considérons le cas d'un semi-conducteur intrinsèque. L'énergie de gap E_g représente en fait la séparation minimum d'énergie entre la bande de conduction E_c et la bande de valence E_v soit :

$$E_g = E_c - E_v \quad (1.5)$$

La taille de la bande interdite confère des caractéristiques optoélectroniques importantes à chaque semi-conducteur. E_g , dépend fortement de la température. En effet, la largeur de la bande interdite fixe la limite en température en dessous de laquelle le dispositif peut fonctionner sans détérioration, ainsi que l'aptitude du semi-conducteur à résister aux radiations.

D'après [5,6], deux mécanismes sont responsables à la diminution de l'énergie de la bande interdite d'un semiconducteur lorsque sa température augmente:

- 📊 la dilatation thermique, qui modifie les positions des bandes de valence et de conduction.

- ✚ les interactions électron-phonon, qui induisent un décalage des positions relatives des bandes de valence et de conduction. C'est ce phénomène qui donne lieu à la plus forte contribution dans la variation en température de E_g .

Pour décrire la variation du gap en fonction de la température, on utilise généralement la loi de Varshni qui s'écrit :

$$E_g(T) = E_g(0) - \frac{A.T^2}{B+T} \quad (1.6)$$

Avec A et B sont les paramètres empiriques de Varshni donnés dans le tableau (1.2) pour les principaux semiconducteurs qui se cristallisent dans Zinc Blende au voisinage du point Γ (centre de la zone de Brillouin).

Tableau 1.2 : Energies de gap et les paramètres de Varshni des principaux semi-conducteurs à $T = 0k$ au voisinage du point Γ [7].

Paramètres	E_g^Γ	A^Γ	B^Γ
Unité	(eV)	(meV/K)	(K)
<i>Si</i>	4.34	0.391	125
<i>GaAs</i>	1.519	0.5405	204
<i>InP</i>	1.423	0.363	162
<i>AlSb</i>	2.386	0.420	140
<i>InAs</i>	0.417	0.276	93

Et pour les composés qui ont une structure de type Wurtzite, le gap et les paramètres sont donnés dans le tableau 1.3 suivant:

Tableau 1.3 : Les différents paramètres de nitrure de type Wurtzite [7].

Paramètre	E_g	A	B
Unité	eV	meV/K	K
<i>InN</i>	1.994	0.245	624
<i>GaN</i>	3.47	0.909	830
<i>AlN</i>	6.20	1.799	1462

1.8. Semi-conducteurs intrinsèques (purs) à l'équilibre

Un semi-conducteur intrinsèque est un semi-conducteur dépourvu de toute impureté susceptible de modifier la densité de porteurs. Les électrons de la bande de conduction (BC) ne peuvent résulter que de l'excitation thermique d'électrons liés à la bande de valence (BV). Il en résulte que les électrons et les trous existent par paires, de sorte que les densités en électrons « n » et en trous « p » soit identique: Dans cette expression $n=p=n_i$, densité de porteurs intrinsèques, est une caractéristique du semi-conducteur à une température donnée.

$$n = N_c e^{-(E_c - E_{F_i})/kT} \quad (1.7)$$

$$p = N_v e^{(E_v - E_{F_i})/kT} \quad (1.8)$$

Où N_c et N_v sont, respectivement, la densité effective d'états des électrons dans la bande de conduction ($2,82 \times 10^{19} \text{cm}^{-3}$ à 300 K pour le Si) et la densité effective d'états des trous dans la bande de valence ($1,83 \times 10^{19} \text{cm}^{-3}$ à 300 K pour le Si), E_{F_i} : La position du niveau de Fermi dans un semi-conducteur intrinsèque.

1.8.1. Niveau de Fermi

Le niveau de Fermi d'un semi-conducteur intrinsèque est toujours très voisin du milieu du gap à la température ambiante. Il peut être noté que le niveau de Fermi se trouve dans la bande interdite, c'est à dire à un niveau énergétique non accessible aux électrons. Le niveau de fermi traduit un niveau statistique et non pas un niveau effectivement occupé.

$$E_{F_i} = \frac{E_c + E_v}{2} \quad (1.9)$$

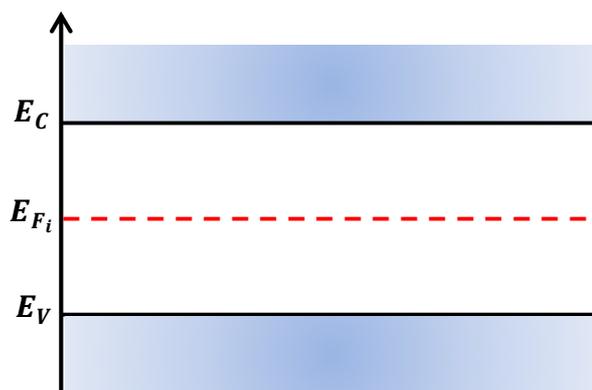


Figure 1. 7. Position du niveau de Fermi intrinsèque.

1.9. Semi-conducteurs extrinsèques à l'équilibre

Un semi-conducteur dopé peut avoir un excès d'électrons libres ou un excès de trous, c'est pour cela qu'il y a deux types de semi-conducteurs dopés : type N et type P.

Semi-conducteur de type N

Pour un tel matériau, des atomes pentavalents de la colonne V de la classification périodique des éléments sont introduits (en général en faible quantité), afin de privilégier la conduction par électrons, (figure 1.8).

Semi-conducteur de type P

Cette fois-ci, les impuretés sont de type accepteur ce qui correspond aux atomes de la colonne III de la classification périodique des éléments. Les éléments les plus utilisés dans le dopage sont le bore (B) et le gallium (Ga), figure 1.8.

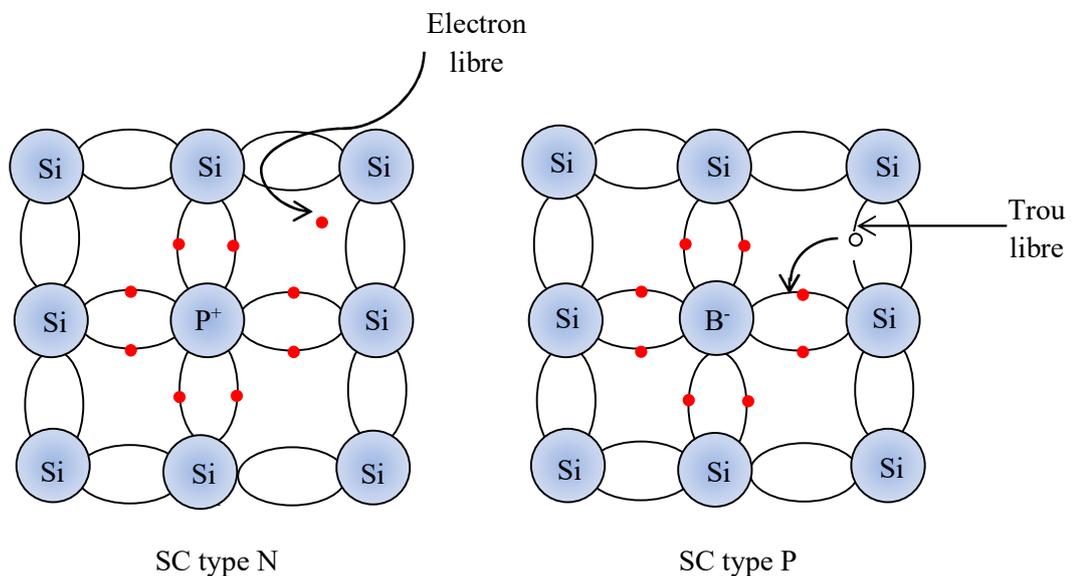


Figure 1.8. Types des semiconducteurs extrinsèques.

Un semi-conducteur est considéré comme un système constitué de N électrons qui cherchent à occuper l'état de plus basse énergie. A 0K, les électrons occupent tous les

niveaux de basse énergie dans la BV. Lorsque la température absolue T augmente, la distribution des électrons est gérée par la statistique de Fermi-Dirac.

La statistique de Fermi-Dirac tient compte du principe d'exclusion de Pauli et représente la probabilité d'occupation d'un niveau d'énergie E dans la BC par un électron et est donnée par:

$$f_n(E) = \frac{1}{1 + e^{\left(\frac{E-E_F}{k_B T}\right)}} \quad (1.10)$$

k_B est la constante de Boltzmann ($k_B = 1.38 * 10^{-23} \text{ J.K}^{-1}$) et E_F est le niveau d'énergie de Fermi qui représente le niveau le plus haut occupé à 0K.

Le niveau E_F correspond à une probabilité d'occupation égale à 1/2 quel que soit la température T . La probabilité (E) pour qu'un niveau E soit occupé par un trou dans la BV est complémentaire de la probabilité (E), soit :

$$f_p(E) = 1 - f_n(E) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E_F - E}{k_B T}\right)} \quad (1.11)$$

1. 10. Techniques de croissance

L'épitaxie est utilisée pour faire croître des couches minces (quelques nanomètres d'épaisseur). On utilise pour cela une surface parfaitement polie d'un monocristal, le substrat, sur lequel seront déposés d'autres atomes. Le substrat est choisi de façon à avoir des paramètres de maille proches de ceux du cristal que l'on veut obtenir. Il existe différentes méthodes d'épitaxie : l'homo-épitaxie, l'hétéro-épitaxie.

Par rapport à l'homo-épitaxie, l'hétéro-épitaxie consiste à faire croître un cristal où le substrat et le film sont de natures différentes. Les deux principales techniques étant l'épitaxie par jet moléculaire et l'épitaxie par dépôt en phase vapeur.

 **Epitaxie par jet moléculaire** [8]: cette technique consiste à envoyer un ou plusieurs jets moléculaires vers un substrat préalablement choisi pour réaliser une croissance épitaxiale (figure 1. 9). Elle permet de faire croître des échantillons nanostructurés de plusieurs cm^2 à une vitesse d'environ une monocouche atomique par seconde.

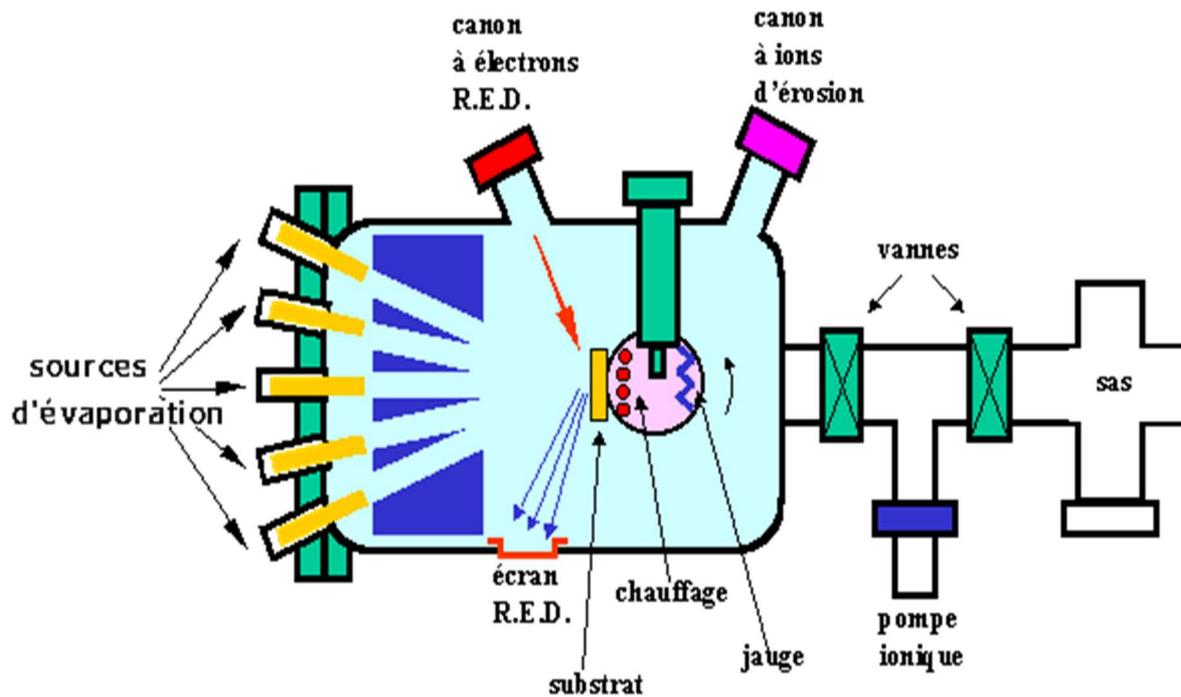


Figure 1. 9. Bâti d'épitaxie par jet moléculaire [9].

✚ **Epitaxie par dépôt en phase vapeur** [10]: cette technique (figure 1.10) consiste à la création d'espèces ou d'éléments à déposer à basse température grâce à l'apport d'énergie sous forme électromagnétique (source radiofréquence en général). Cette technique évite donc des passages à haute température qui peut entraîner une redistribution des dopants par exemple. Toutefois, afin d'améliorer la qualité du matériau des couches déposées, il est nécessaire de chauffer "légèrement" les substrats (quelques centaines de degrés éventuellement).

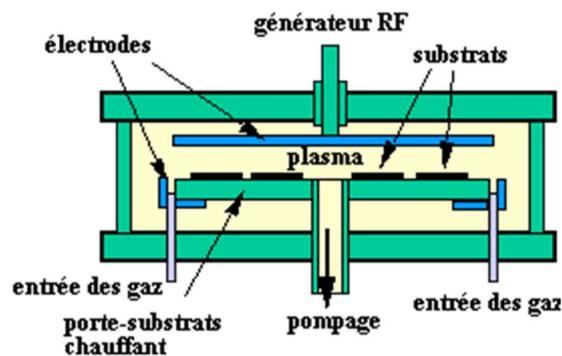


Figure 1. 10. Bâti d'épitaxie par dépôt en phase vapeur [11].

1.11. La contrainte

La condition nécessaire à la réalisation d'une bonne hétéro-épitaxie d'un semi-conducteur SC_1 sur un semi-conducteur SC_2 est que les deux matériaux aient:

- Même structure cristalline;
- Des paramètres de maille voisins.

Si les paramètres de maille sont différents, le matériau constituant la couche de plus grande épaisseur impose sa maille à l'autre, au moins au voisinage de l'interface. Ceci entraîne l'existence, dans le matériau de faible épaisseur, d'une contrainte biaxiale dans le plan de la couche.

1.11.1. Compression et tension

La compression et la tension d'un semi-conducteur font référence aux modifications de sa structure cristalline dues à la différence des paramètres de mailles des deux matériaux épitaxiés. Ces deux types de contrainte modifient les distances interatomiques ce qui crée un impact sur les propriétés électroniques et mécaniques du matériau semi-conducteur telles que la bande interdite (band gap) ou la mobilité des porteurs de charge.

Il convient de noter que la réponse d'un semi-conducteur à la compression ou à la tension dépendra de ses propriétés spécifiques, telles que sa structure cristalline, sa composition chimique et son dopage. Différents semi-conducteurs peuvent réagir différemment aux contraintes, ce qui peut être exploité dans divers dispositifs électroniques et optoélectroniques.

La couche épitaxiée est déformée en compression ($a_s < a_e$) et en tension ($a_s > a_e$) par des déformations bi-axiales (ε_{xx} et ε_{yy}) est uni-axial (ε_{zz}) :

- Bi-axiale dans le plan croissance :

$$\varepsilon_{\parallel} = \varepsilon_{xx} = \varepsilon_{yy} = \frac{a_s - a_e}{a_e} \quad (1.12)$$

- Uni-axial dans la direction de croissance :

$$\varepsilon_{\perp} = \varepsilon_{zz} = \frac{2 \cdot C_{12}}{C_{11}} \varepsilon_{xx} \quad (1.13)$$

Où :

ε : La déformation de la maille.

a_s : Paramètre de maille du substrat.

a_e : Paramètre de maille de la couche épitaxiée.

C_{11} et C_{12} : Constantes d'élasticité.

La figure 1.11 montre l'effet de la contrainte (compression et tension) sur la structure de bande d'un semiconducteur.

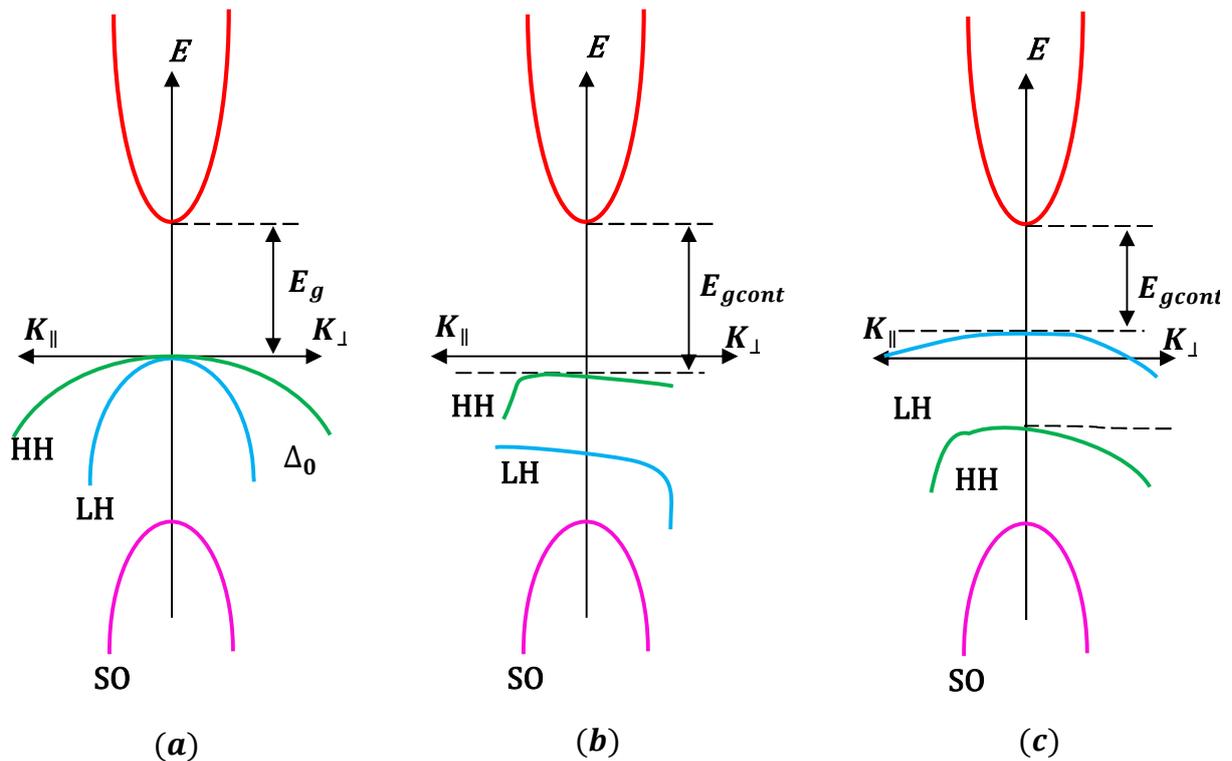


Figure 1.11. Représentation schématique de la structure de bande d'un matériau SC (a) non contraint, (b) contrainte compressive, (c) contrainte en tension.

1.11.2. Épaisseur critique

Dans les films minces ou les couches épitaxiales déposés sur un substrat, il peut y avoir une épaisseur critique au-dessus de laquelle des contraintes mécaniques induisent des défauts tels que des dislocations ou des fissures dans le matériau. Cette épaisseur critique dépendra des propriétés mécaniques du matériau et de la différence de coefficients de dilatation thermique entre le film et le substrat.

Il est important de noter que l'épaisseur critique est une propriété spécifique à chaque système ou matériau. L'épaisseur critique d'un semi-conducteur peut être étudiée

expérimentalement en utilisant des techniques telles que l'épitaxie par jet moléculaire, la spectroscopie d'absorption, la microscopie électronique à transmission, etc. De plus, des simulations et des modèles théoriques peuvent être utilisés pour prédire l'épaisseur critique en fonction des propriétés du matériau.

Pour calculer l'épaisseur critique, on utilise le modèle proposé par Matthews et Blackeslee qui nous donne l'expression suivante [12]:

$$h_c = \frac{a}{\beta \cdot \sqrt{2} \cdot \pi \cdot \varepsilon} \cdot \frac{1-0,25\gamma}{1+\gamma} \cdot \ln \left(\frac{h_c \cdot \sqrt{2}}{a} + 1 \right) \quad (1.14)$$

Où :

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

ε : est le désaccord paramétrique.

β : Un coefficient qui prend les valeurs suivantes selon le type de la structure :
couche unique 4, puits quantique 2, super réseau 1.

γ : est le coefficient de poisson donnée par :

$$\gamma = \frac{c_{12}}{c_{11}+c_{12}} \quad (1.15)$$

Avec :

C_{ij} : Les coefficients d'élasticité.

1.12. Type de confinements

Les matériaux semi-conducteurs peuvent présenter différents types de confinement en fonction de leur structure et de leurs propriétés électroniques.

Le confinement quantique se produit lorsque des électrons ou des trous sont confinés dans une région spatiale restreinte à l'échelle nanométrique. Cela peut se produire dans des structures telles que les puits quantiques, les fils quantiques et les boîtes quantiques. Le confinement quantique peut modifier les propriétés électroniques des matériaux, entraînant de forts effets quantiques.

La figure 1.12 représente l'évolution de la densité d'état en fonction de la dimensionnalité du matériau. Pour la figure (a) il n'y a aucun confinement dans le semiconducteur massif (3D). Pour la figure (b), il s'agit d'un puits quantique où le confinement est selon une direction (système 2D). Concernant la figure (c), le confinement est selon deux directions (système 1D), il s'agit donc d'un fil quantique et pour la figure (d) c'est une boîte quantique, le confinement est selon les trois directions (système 0D).

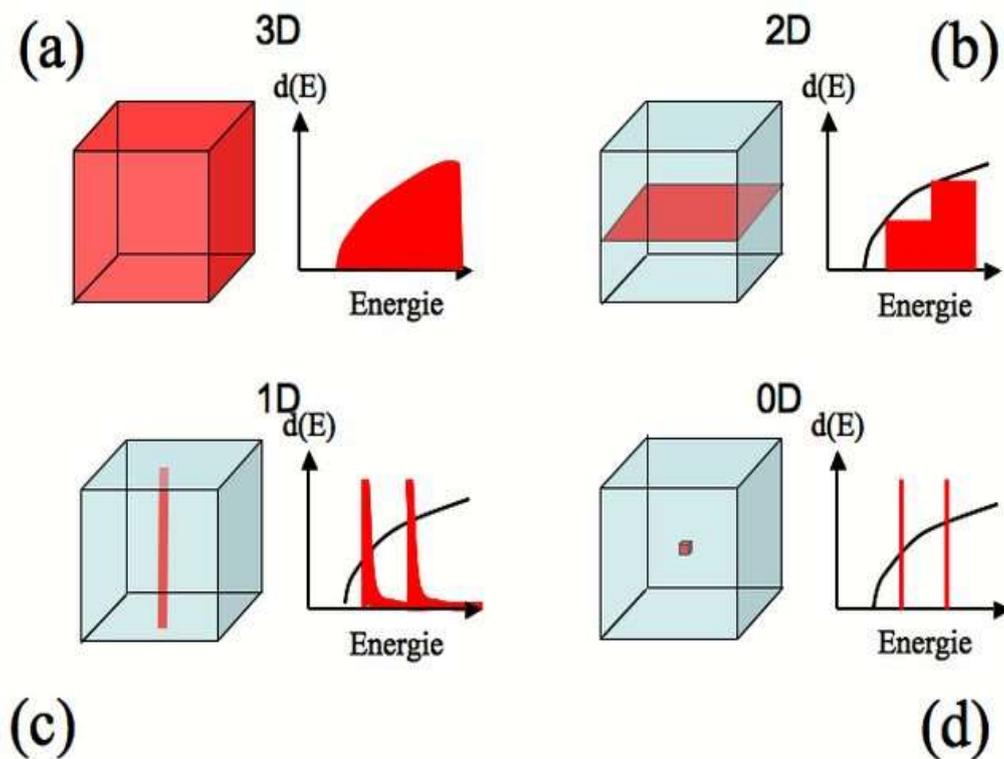


Figure 1.12. Evolution de la densité d'état avec le niveau de confinement quantique [13].

1.13. Puits quantique

1.13.1. Définition

Les puits quantiques dans les semi-conducteurs sont des structures dans lesquelles les porteurs de charge, tels que les électrons ou les trous, sont confinés dans une dimension spatiale. Les puits quantiques sont généralement fabriqués en combinant différentes couches semi-conductrices avec différentes caractéristiques de bande d'énergie.

Par exemple, un puits quantique peut être créé en prenant en sandwich une fine couche de matériau à bande interdite étroite entre deux couches de matériau à bande interdite plus large. La différence de bande interdite crée une barrière de potentiel qui confine les porteurs de charge à la couche centrale, formant un puits quantique.

Les puits quantiques ont des propriétés quantiques différentes car les porteurs de charge sont confinés dans une dimension. Les porteurs de charge se comportent comme des particules quantiques avec des niveaux d'énergie discrets au lieu de niveaux d'énergie continus (figure 1.13). Selon la forme et les propriétés du puits quantique, les porteurs de charge peuvent se comporter différemment.

Les puits quantiques sont utilisés dans de nombreux dispositifs électroniques et optoélectroniques. Ils sont couramment utilisés dans les lasers à semi-conducteurs [14], les diodes électroluminescentes (DEL) et les photodétecteurs [15]. En contrôlant la taille et la forme des puits quantiques et les propriétés des matériaux utilisés, il est possible de concevoir des dispositifs aux propriétés spécifiques, tels que des émetteurs de longueur d'onde précis ou des dispositifs à photon unique.

Puits quantique de type I

Les extrema des bandes de valence et de conduction sont situés dans le même matériau, c'est-à-dire dans la même région de l'espace (figure 1.13. a). Dans l'hétérostructure de type I, les électrons et les trous sont piégés dans le même semi-conducteur, ici SC₂.

Hétérostructure de type II

Les extrema des bandes de valence et de conduction ne sont pas situés dans la même région de l'espace (figure 1.13. b). Dans l'hétérostructure de type II, les électrons et les trous sont spatialement séparés.

Dans l'hétérostructure de type I, leurs recombinaisons seront importantes, dans l'hétérostructure de type II, ces recombinaisons seront beaucoup moins probables.

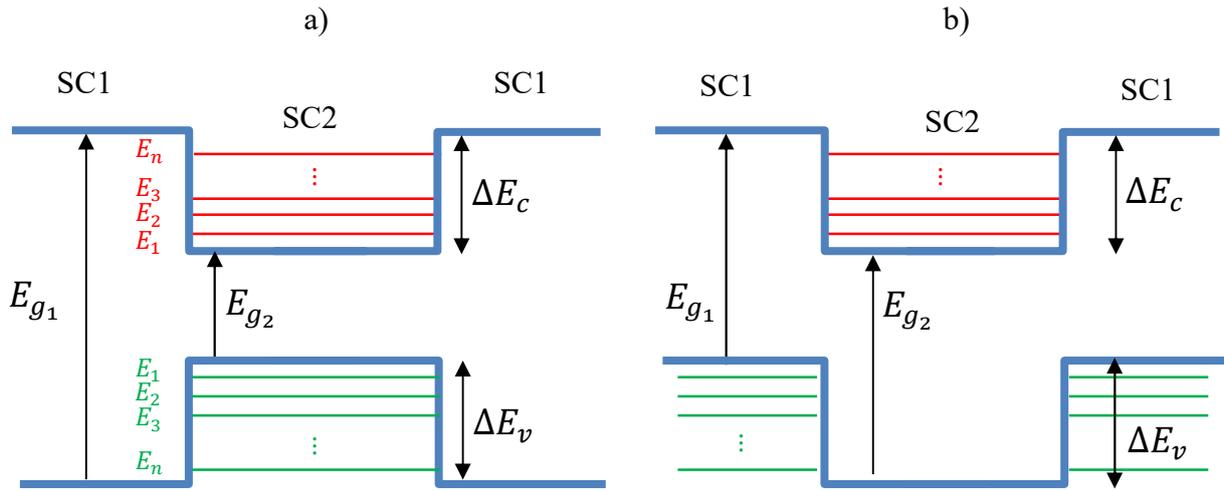


Figure 1. 13. Diagrammes schématiques montrant les puits quantiques de types:
a) type I et b) type II.

1.13.2. Séparation des mouvements

Si l'épaisseur du semi-conducteur SC₂ est faible, ($L < 200 \text{ \AA}$), les états électroniques ne correspondent plus au bas de la bande de conduction, mais sont quantifiés en structure de sous-bandes d'énergie. Le mouvement des électrons est quasi-libre dans le plan de la structure et est quantifié dans la direction perpendiculaire. Il en résulte une structure de sous-bandes d'énergie avec une quantification discrète suivant k_z et une variation pseudo-continue suivant $k_{//}$. L'énergie totale d'un électron s'écrit:

$$E(n, k_x, k_y) = E_n + \frac{\hbar^2}{2m^*} (k_x^2 + k_y^2) \quad (1.16)$$

Les énergies E des minima des différentes sous-bandes sont évidemment fonction de la profondeur et de la largeur du puits de potentiel.

1.13.3. Fonction d'onde

On peut séparer le mouvement dans le plan de la structure du mouvement dans la direction perpendiculaire et écrire la fonction d'onde des électrons sous la forme:

$$\Psi(\mathbf{r}) = \xi(z)e^{i(k_x x + k_y y)} \phi(x, y) \quad (1.17)$$

$\phi(x, y)$ est la fonction de Bloch et $\xi(z)$ une fonction enveloppe qui décrit la quantification du mouvement suivant z . Dans l'approximation de la masse effective le mouvement suivant z est régi par l'équation de Schrödinger.

$$\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2\Psi(z)}{dz^2} + (E - V(z))\Psi(z) = 0 \quad (1.18)$$

Où \hbar est la constante de Planck, Ψ est la fonction d'onde, V est la profondeur du puits de potentiel, m^* représente la masse effective de la particule.

L'écriture des conditions de raccordement des fonctions d'ondes et de leurs dérivées $\frac{1}{m^*} \frac{d\psi}{dz}$ qui doivent être continues aux interfaces $z=0$ et $z=L_p$ (L_p est l'épaisseur du puits), dans le cas de puits de profondeur finie, on aboutit à l'équation aux valeurs propres donnée par l'expression:

$$\frac{\sqrt{2m_1E_n}}{\hbar} L_p = n\pi - 2\arctg\left(\sqrt{\frac{m_2E_n}{m_1(V-E_n)}}\right) \quad (1.19)$$

où m_2 et m_1 sont, respectivement, les masses effectives de l'électron dans le puits et la barrière.

V est l'énergie potentielle définie, en prenant l'origine des énergies au bas de la bande de conduction du semi-conducteur SC_2 , c'est-à-dire $V(z) = \Delta E_c$.

1.14. Transitions intersousbandes

La quantification unidimensionnelle de l'énergie des porteurs donne lieu à la formation de sousbandes dans la bande de conduction ou de valence. La particularité des transitions intersousbandes est remarquable (figure 1.14). Du point de vue fondamental, l'énergie des transitions intersousbandes est étudiée en fonction de l'épaisseur des puits quantiques [16], de la hauteur des barrières [17], du dopage [18] et de la température [19]. Le temps de retour à l'équilibre des électrons entre les sous-bandes est mesuré par photo blanchiment ou saturation. Toutes ces études ont contribué à l'optimisation des paramètres pour la réalisation de dispositifs performants par la suite [20].

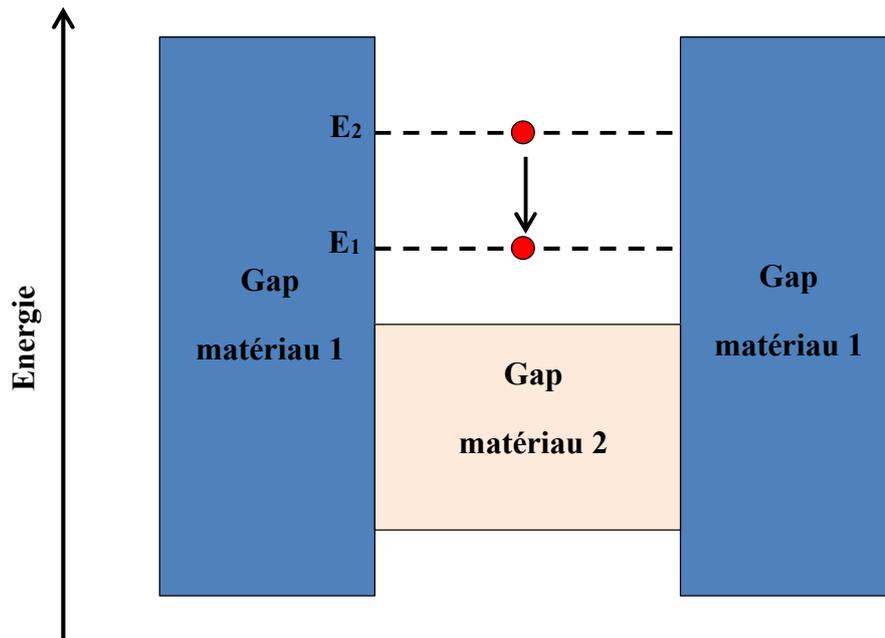


Figure 1.14. Transitions intersousbandes.

1.15. Applications des semi-conducteurs

Un dispositif semi-conducteur est constitué d'un matériau semi-conducteur. De tels dispositifs (figure 1.15) ont établi de larges applications en raison de leur fiabilité, compacité et faible coût. Ce sont des composants discrets utilisés dans les dispositifs d'alimentation, les capteurs optiques et les émetteurs de lumière, y compris les lasers à semi-conducteurs. Plus important encore, les dispositifs à semi-conducteurs se prêtent parfaitement à l'intégration dans des circuits microélectroniques complexes mais faciles à construire. Ils sont les éléments clés de la plupart des systèmes électroniques, y compris les communications avec des équipements de traitement de données, des équipements grand public et des systèmes de contrôle industriels. Les dispositifs à semi-conducteurs sont fabriqués à la fois pour des dispositifs discrets et des circuits intégrés, composés de quelques à plusieurs milliards de circuits fabriqués et interconnectés sur un substrat de semi-conducteur unique.

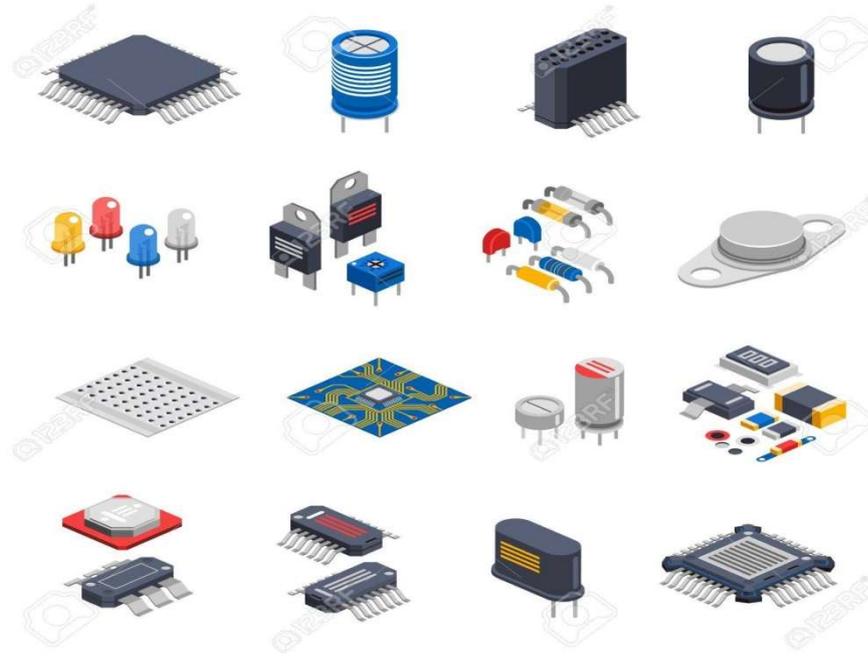


Figure 1.15. Composants électroniques à semi-conducteur

Conclusion

L'utilisation de matériaux semiconducteurs offre de nombreux avantages en termes de propriétés des matériaux. En fait, le but de leur fabrication est de tirer parti des propriétés supérieures de chaque matériau pour les rendre mieux adaptés à des applications spécifiques. Ainsi, l'association de deux ou plusieurs matériaux permet d'améliorer les propriétés des matériaux, ce qui a fait l'objet de plusieurs études.

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

2.1. Introduction

Les transitions intersousbandes dans les hétérostructures sont intensifiées dans le traitement infrarouge pour les applications de télécommunications. C'est par exemple le développement de détecteurs et d'imagers rapides en quantité en cascade dans la gamme 2-5 μm . C'est aussi l'extension des dispositifs intersousbandes dans le domaine de fréquences THz. Dans l'ensemble de ce chapitre nous allons effectuer une étude théorique sur les propriétés optoélectroniques de la structure à puits quantique AlGaSb/AlSb en se basant sur les transitions intersousbandes dans la bande de conduction. La structure d'alliage ternaire à base de puits quantiques $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{Sb}/\text{AlSb}$ permet une variation très flexible des performances et des caractéristiques en fonction de sa composition pour fixer l'application de la structure proposée.

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

2.2. Détermination des paramètres (Loi de Végard)

Pour calculer les paramètres d'une structure ternaire ou quaternaire il faut passer, en général, par la loi de Végard (loi d'interpolation linéaire). Les matériaux ternaires sont formés à partir de deux matériaux binaires AC et BC ayant un élément commun. Si x est la concentration en A , alors $(1 - x)$ est la concentration en B .

Les paramètres Q du matériau ternaire $A_xB_{1-x}C$ varient selon une loi linéaire, fonction des paramètres des deux matériaux A et B

$$Q(x) = x \cdot Q_{AC} + (1 - x) \cdot Q_{BC} \quad (2.1)$$

2.3. Propriétés optoélectroniques

La figure 2.1 montre le schéma de la structure qui suscite notre intérêt et qui sera examinée dans notre étude. La structure à puits quantique se base sur un alliage ternaire III-V appelé AlGaSb/AlSb, où les atomes d'Al et de Ga appartiennent à la colonne III du tableau périodique et l'élément Sb appartient à la colonne V. Cet alliage est déposé sur un substrat en AlSb.



Figure 2.1. Schéma de la structure à puits quantique AlGaSb/AlSb.

2.3.1. Paramètre de maille

Le paramètre de maille de l'alliage $Al_xGa_{1-x}Sb$ sera obtenu en fonction de la loi de Végard, ce qui veut dire qu'il évolue linéairement en fonction de la composition de l'aluminium. Il sera défini par l'expression suivante

$$a = x \cdot a(AlSb) + (1 - x) \cdot a(GaSb). \quad (2.2)$$

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

Tableau 2.1. Paramètre de maille des matériaux binaires AlSb et GaSb [20]

	AlSb	GaSb
a (Å)	6.1355	6.059

La figure (2.2) visualise la variation du paramètre de maille de l'alliage ternaire $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{Sb}$ en fonction des concentrations de l'aluminium. Le paramètre de maille croit en augmentant la concentration de l'aluminium (Al).

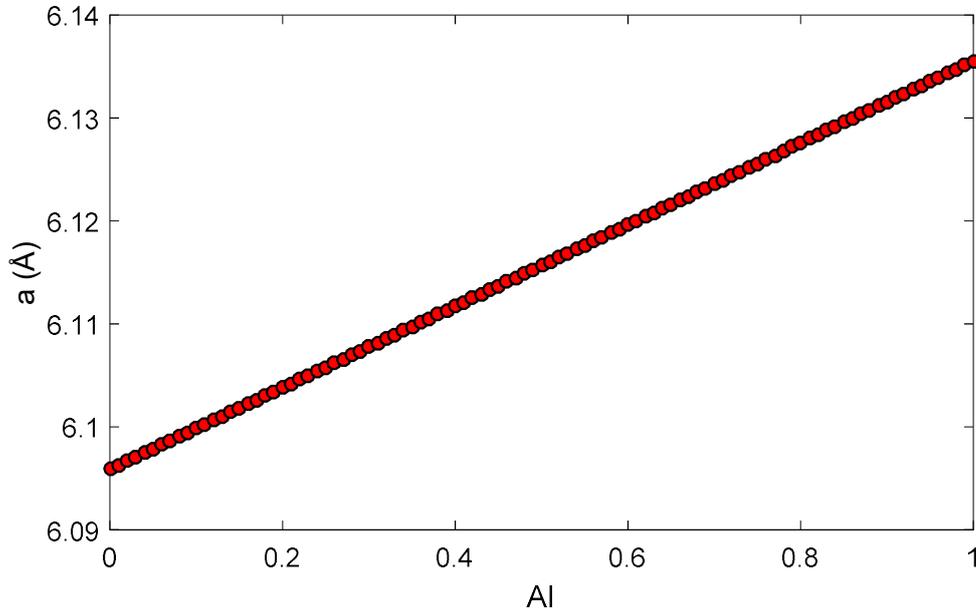


Figure 2.2. Variation du paramètre de maille de l'alliage $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{Sb}$ en fonction de la concentration d'Al.

2.3.2. La contrainte

La différence des valeurs des paramètres de mailles du matériau épitaxié $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{Sb}$ sur un substrat AlSb, provoque l'apparition de la contrainte de type tension car selon la figure précédente de l'évolution du paramètre de maille de l'alliage $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{Sb}$, ce dernier est toujours inférieur que celui du substrat AlSb ($a_e < a_s$).

La figure 2.3 représente l'évolution de la contrainte en fonction des concentrations de l'aluminium. L'ajout de l'aluminium mène à une décroissance de la valeur de la contrainte en tension.

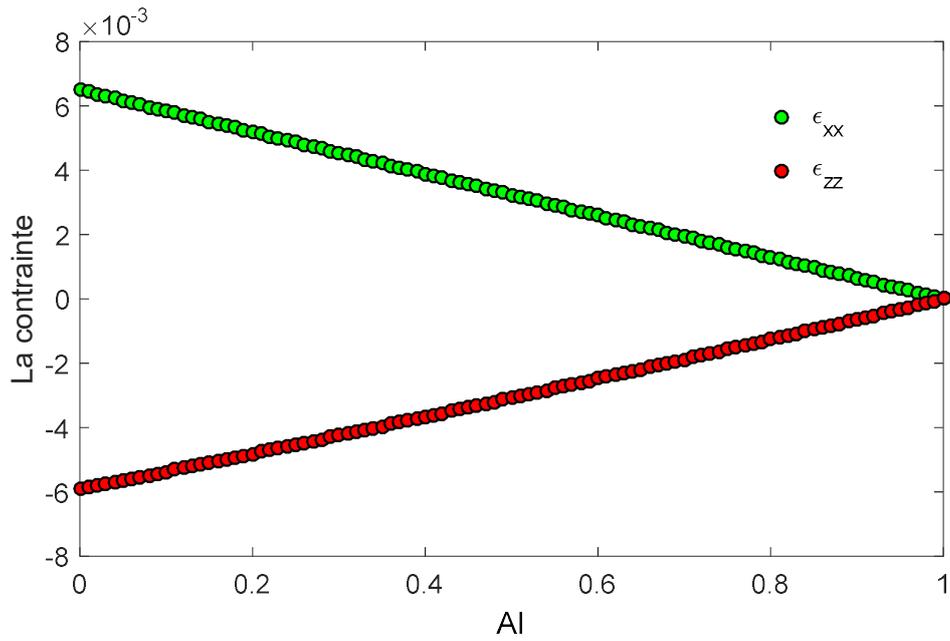


Figure 2. 3. Variation de la contrainte en fonction de la concentration d'Al de la structure $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{Sb} / \text{AlSb}$.

2.3.3. Epaisseur critique

La figure 2.4 présente la variation de l'épaisseur critique de l'alliage $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{Sb}$ en fonction de la teneur en aluminium selon l'équation vue au chapitre 1.

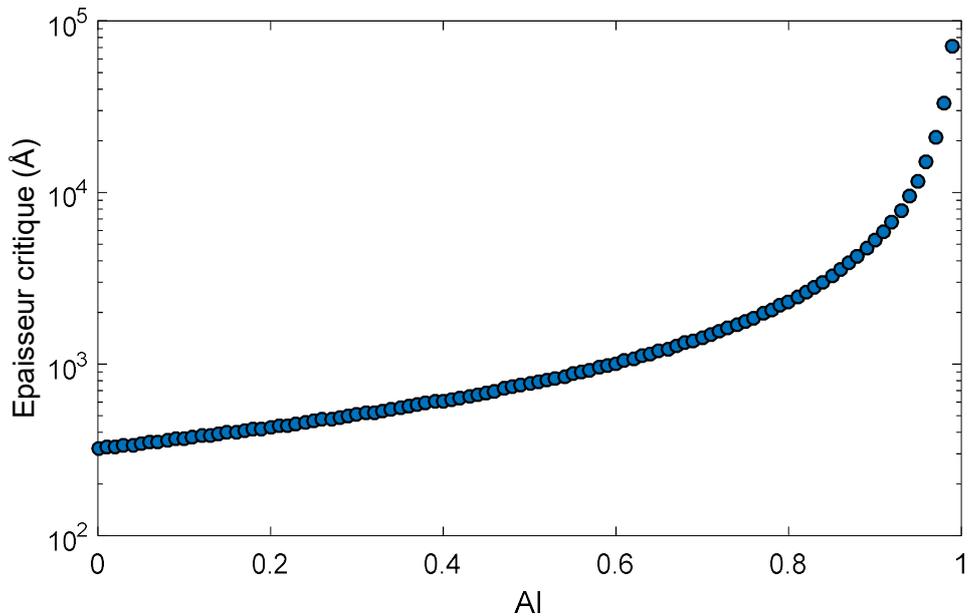


Figure 2. 4. Variation de l'épaisseur critique en fonction de la concentration d'Al de la structure $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{Sb} / \text{AlSb}$.

2.3.4. Energie de la bande interdite

L'incorporation des atomes de l'aluminium dans le GaSb peut se modéliser en utilisant la loi de Végard tout en ajoutant le facteur de Bowing C (terme correctif).

Les énergies des bandes interdites selon les trois vallées Γ , X et L sont données par l'équation (2.3)

$$E_g(\text{AlGaSb}) = x \cdot E_g(\text{AlSb}) + (1 - x) \cdot E_g(\text{GaSb}) - x \cdot (1 - x) \cdot C \quad (2.3)$$

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

Tableau 2.2 Energie de gap des matériaux binaires AlSb et GaSb [20].

	E_g^Γ	E_g^X	E_g^L
AlSb	2.27 eV	1.615 eV	2.211 eV
GaSb	0.72 eV	1.05 eV	0.76 eV

Tableau 2.3. Paramètre de Bowing [20]

	E_g^Γ	E_g^X	E_g^L
C (AlGaSb)	0.47 eV	0 eV	0.55 eV

La figure 2.5 montre la variation de l'énergie de la bande interdite du ternaire AlGaSb selon les trois vallées Γ , X et L (Γ , X et L sont les points de plus haute symétrie dans la zone de Brillouin) en fonction des concentrations de l'aluminium. L'ajout de l'aluminium mène à une croissance des gap E_g^Γ , E_g^X et E_g^L .

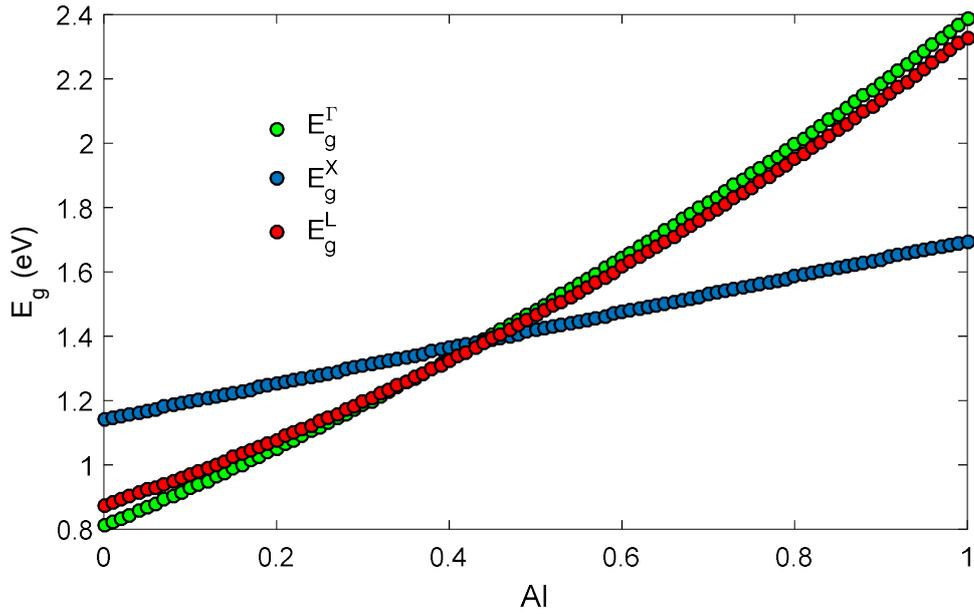


Figure 2.5. Evolution des bandes d'énergie E_g^Γ , E_g^X et E_g^L à $T=300K$.

2.3.5. La masse effective

La masse effective des porteurs : électrons (ϵ), trous lourds (hh) et des trous légers (lh) est inversement proportionnelle à la dérivée seconde de la courbe de dispersion de l'énergie dans l'espace k , elle peut être exprimée par les équations vues au chapitre 1. Les paramètres utilisés pour le calcul des masses effectives sont indiqués dans le tableau 2.4. D'après la figure 2.6, on remarque que l'incorporation de l'aluminium mène à l'augmentation de la valeur de la masse effective de tous les porteurs.

Tableau 2.4. Valeur des paramètres de Luttinger des matériaux binaires AlSb et GaSb [20].

	γ_1	γ_2	γ_3
AlSb	5.18	1.19	1.97
GaSb	13.4	4.7	6.0

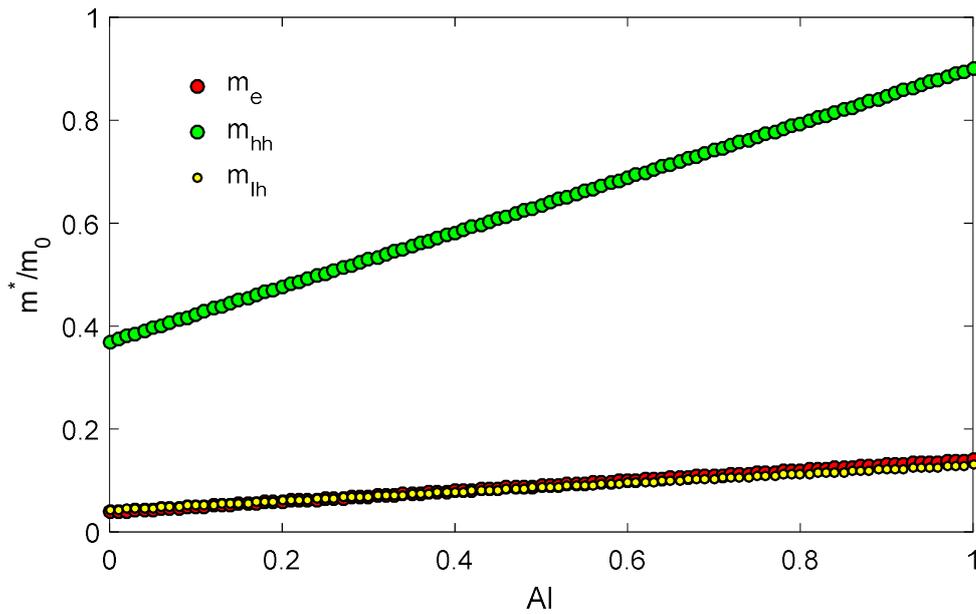


Figure 2.6. Variation de la masse effective en fonction des concentrations d'Al des différents porteurs e , hh et lh .

2.3.6. Les alignements des bandes

Les deux structures de bandes des deux matériaux, AlGaSb et substrat AlSb , sont positionnées de façon discontinue les unes des autres tel que nous avons schématisé sur la figure 2.7 où ΔE_c et ΔE_v sont, respectivement, les discontinuités de la bande de conduction et la bande de valence.

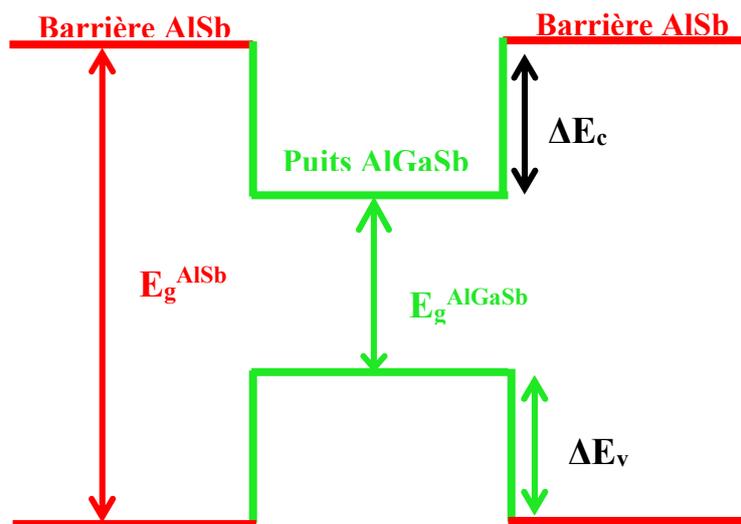


Figure 2.7. Schéma du décalage des bandes ΔE_c et ΔE_v dans la structure à puits quantique $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{Sb}/\text{AlSb}$.

Les décalages énergétiques induits par la contrainte de cisaillement pour chacune des bandes constituant la bande de valence sont les suivantes, (est l'énergie du spin-orbite):

$$\Delta E_{hh}^{Sh} = -\frac{1}{2}\delta E^{Sh} \quad (2.4)$$

$$\Delta E_{lh}^{Sh} = -\frac{1}{2}\Delta + \frac{1}{4}\delta E^{Sh} + \frac{1}{2}\left[\Delta^2 + \Delta \cdot \delta E^{Sh} + \frac{9}{4}(\delta E^{Sh})^2\right]^{1/2} \quad (2.5)$$

$$\delta E^{Sh} = 2b(\varepsilon_{zz} - \varepsilon_{xx}) \quad (2.6)$$

L'énergie E_v de la bande de valence est:

$$E_v = E_{vmoy} + \frac{\Delta}{3} + E_g + \Delta E_{vmoy}^{hy} + \max(\Delta E_{lh}^{Sh}, \Delta E_{hh}^{Sh}) \quad (2.7)$$

L'énergie E_c de la bande de conduction est:

$$E_c = E_{vmoy} + \frac{\Delta}{3} + E_g + \Delta E_{vmoy}^{hyd} + \Delta E_c^{hyd} \quad (2.8)$$

Les décalages en énergie des centres de gravités de la bande de valence et de la bande de conduction en $k=0$ varient proportionnellement à la contrainte.

$$\Delta E_{vmoy}^{hyd} = a_v (2\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{zz}) \quad (2.9)$$

$$\Delta E_{cmoy}^{hyd} = a_c (2\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{zz}) \quad (2.10)$$

Où a_c , a_v et b sont respectivement les potentiels hydrostatiques de déformation pour la bande de conduction et la bande de valence et le potentiel de déformation tétragonale.

Tableau 2.5. Valeur des paramètres de potentiel des matériaux binaires AlSb et GaSb [20].

	a_c	a_v	b
AlSb	-6.97	1.38	-1.35
GaSb	-9	0.79	-2.4

Le calcul des décalages des bandes de la structure à puits quantique AlGaSb/AlSb se fait selon le modèle de la théorie du solide de Van De Walle [21] :

$$\Delta E_c = E_c(\text{AlSb}) - E_c(\text{AlGaSb}) \quad (2.11)$$

$$\Delta E_v = E_v(\text{AlGaSb}) - E_v(\text{AlSb}) \quad (2.12)$$

La figure 2.8 visualise l'évolution des décalages de bande ΔE_c et ΔE_v entre le puits AlGaSb et la barrière AlSb en fonction de la concentration de l'aluminium.

On peut constater de la figure 2.8 que le décalage de bande de la bande de conduction ΔE_c diminue rapidement avec l'incorporation de l'aluminium.

La figure 2.8, nous montre aussi que le décalage de bande de la bande de valence ΔE_v augmente progressivement avec l'incorporation d'aluminium.

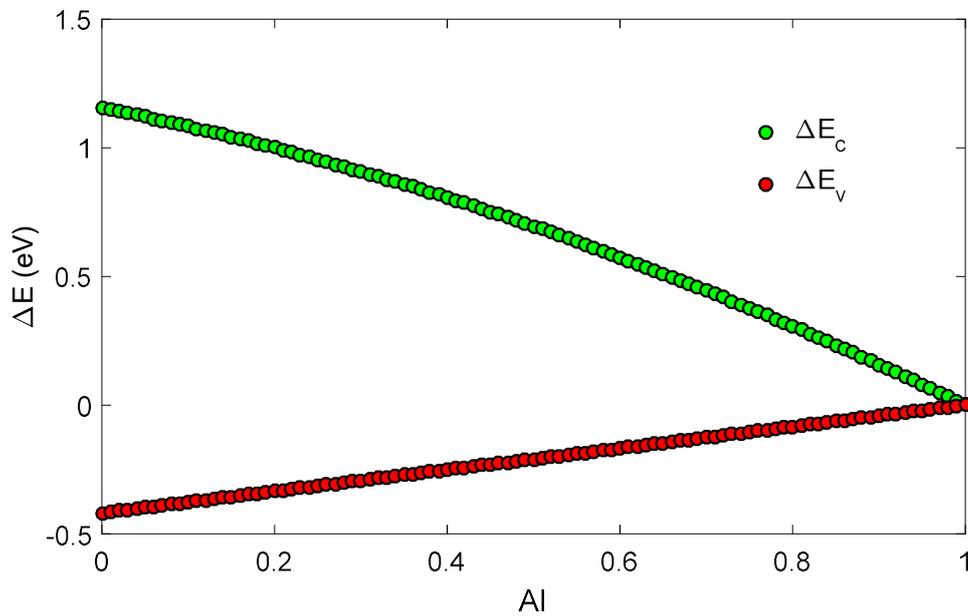


Figure 2.8. Variation de ΔE_c et ΔE_v en fonction de la concentration d'Al.

2.3.7. Energie de quantification

Les figures (2.9), (2.10), (2.11) et (2.12) montrent la variation de l'énergie de quantification, respectivement, des structures $\text{Al}_{0.1}\text{Ga}_{0.9}\text{Sb}/\text{AlSb}$, $\text{Al}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{Sb}/\text{AlSb}$, $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{Sb}/\text{AlSb}$ et $\text{Al}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{Sb}/\text{AlSb}$.

L'ajout de l'aluminium mène à la création de nouveaux niveaux énergétiques dans la bande de conduction. On remarque que pour une structure $\text{Al}_{0.1}\text{Ga}_{0.9}\text{Sb}/\text{AlSb}$ de puits de largeur 100 Å, il y a un seul niveau d'énergie, alors que pour la structure $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{Sb}/\text{AlSb}$, on aura deux niveaux énergétiques pour les électrons dans la bande de conduction pour la même largeur de puits.

Aussi, l'augmentation de la concentration d'Al mènera à la diminution de la valeur de l'énergie de quantification. Pour la structure $\text{Al}_{0.1}\text{Ga}_{0.9}\text{Sb}/\text{AlSb}$ de puits de largeur 50 Å, l'énergie du premier niveau sera de 456.8 meV, alors que pour la structure $\text{Al}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{Sb}/\text{AlSb}$, la valeur est de 428.2 meV tandis que pour les deux structures $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{Sb}/\text{AlSb}$ et $\text{Al}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{Sb}/\text{AlSb}$, la valeur sera, respectivement, de 398.2 meV et 366.2 meV.

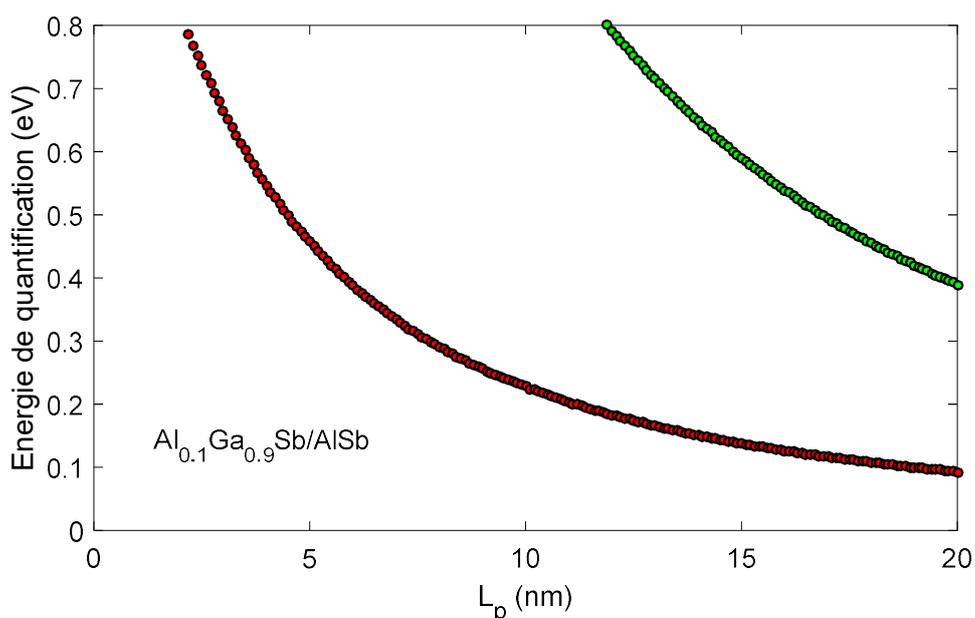


Figure 2.9. Variation de l'énergie de quantification en fonction de L_p , ($x=0.1$).

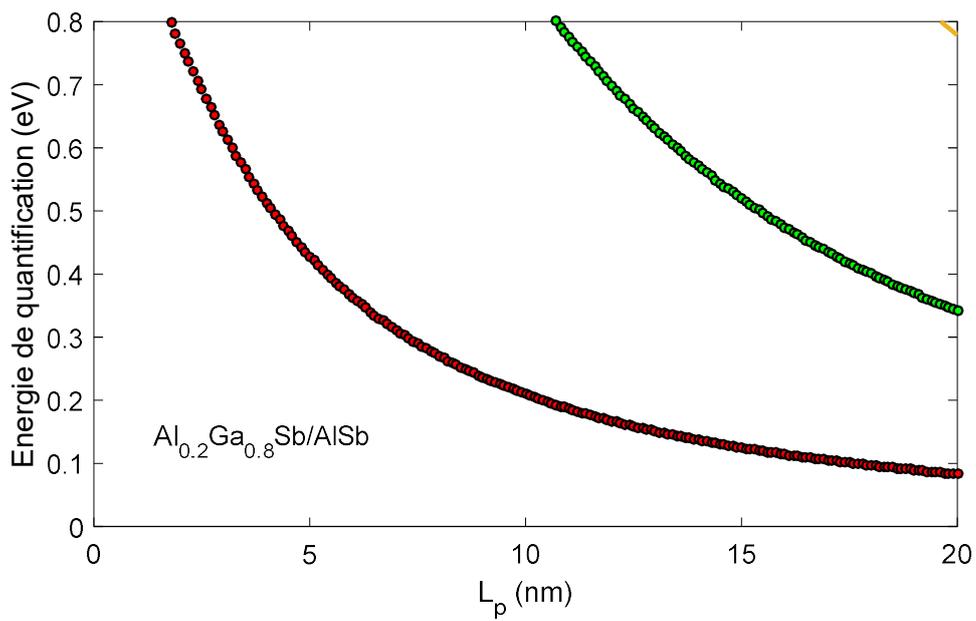


Figure 2.10. Variation de l'énergie de quantification en fonction de L_p , ($x=0.2$).

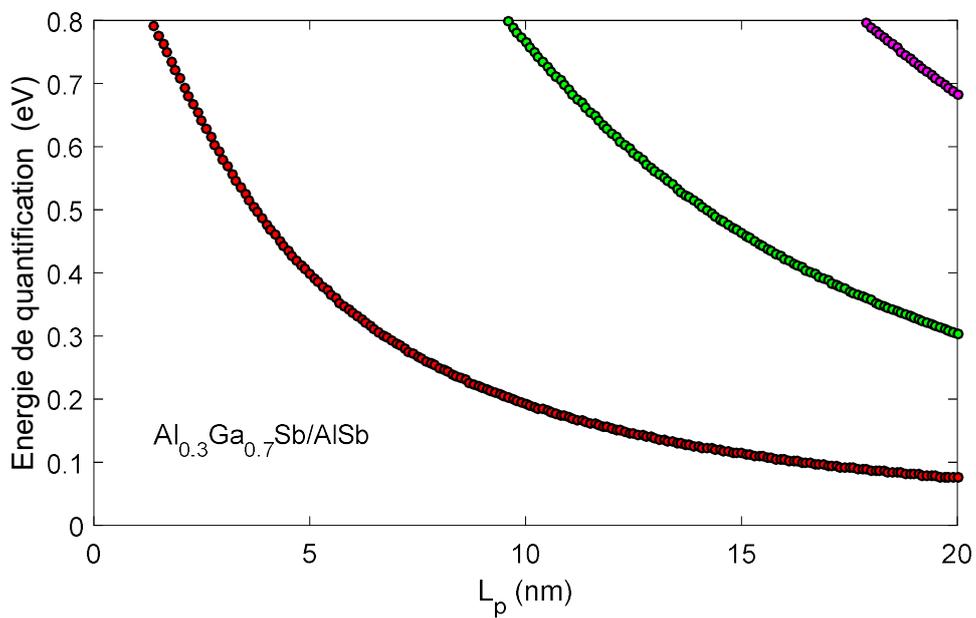


Figure 2.11. Variation de l'énergie de quantification en fonction de L_p , ($x=0.3$).

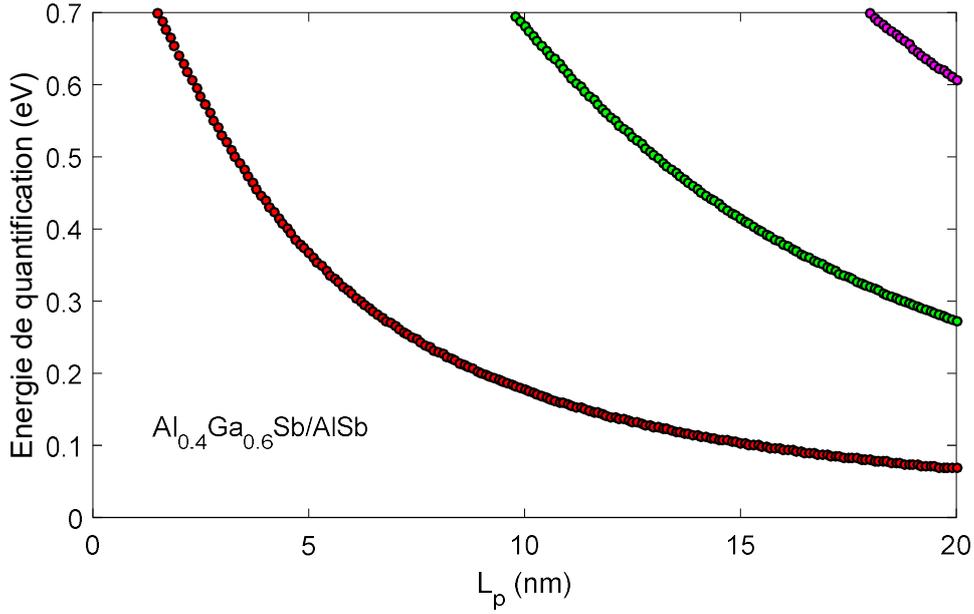


Figure 2.12. Variation de l'énergie de quantification en fonction de L_p , ($x=0.4$).

2.3.8. L'absorption intersousbandes

Le coefficient d'absorption α est défini comme étant le rapport entre l'énergie absorbée par unité de volume et par unité de temps, et l'énergie incidente. Pour une transition entre les sousbandes i et f , il est donné par [22] :

$$\alpha = \frac{\pi e^2 (E_i - E_f)}{2m_0 L_p \omega n c \epsilon_0} f_{12} \frac{(\sin\theta)^2}{\cos\theta} (n_i^s - n_f^s) g(E_f - E_i - \hbar\omega) \quad (2.13)$$

e la charge de l'électron; m_0 la masse de l'électron; \hbar la constante réduite de Planck; ϵ_0 la permittivité du vide; L_p la largeur du puits quantique ; c célérité de la lumière; n L'indice de réfraction relatif du matériau.

f_{12} : la force d'oscillateur décrivant la force de couplage quantique entre les sousbandes i et f , donnée par la relation :

$$f_{12} = \frac{2m_0}{\hbar^2} (E_2 - E_1)^2 |z_{12}|^2 \quad (2.14)$$

$z_{12} = \langle \psi_1 | z | \psi_2 \rangle$, est le moment dipolaire électrique des transitions entre les deux niveaux énergétiques initial 1 et final 2.

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

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

$$g(E) = \frac{\hbar\Gamma}{\pi} \frac{1}{(E_f - E_i - \hbar\omega)^2 + (\hbar\Gamma)^2} \quad (2.15)$$

Γ : la largeur à mi-hauteur du maximum des spectres d'absorption, ce facteur dépend du temps de relaxation intersousbande, $\Gamma = 1/\tau_{in}$.

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

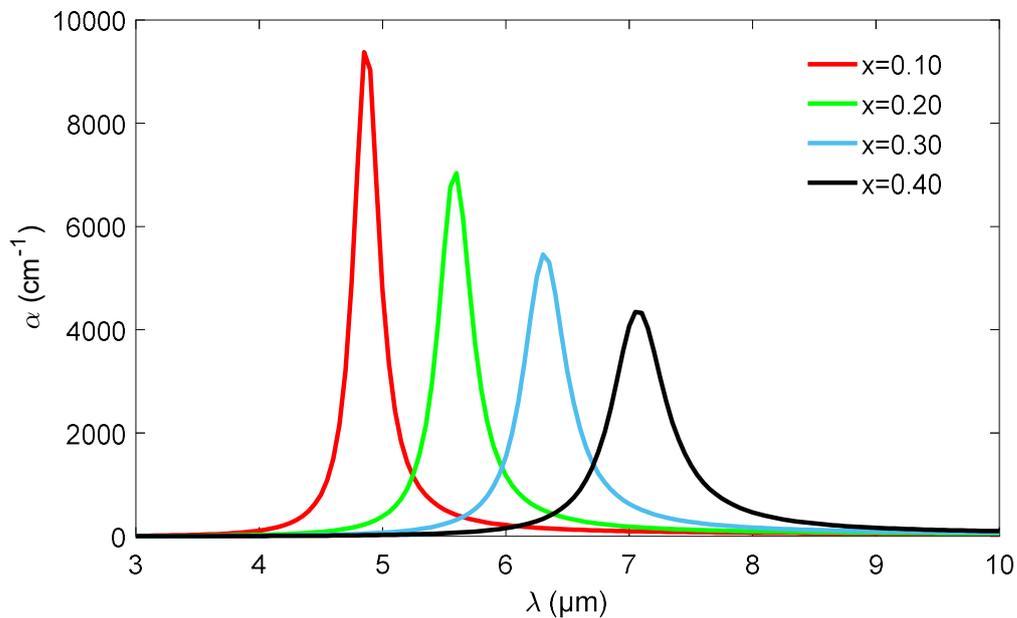


Figure 2.13. Variation du coefficient d'absorption intersousbandes en fonction de λ pour différentes concentrations d'Al ($L_p=70\text{\AA}$).

La figure 2.14 montre la dépendance du coefficient d'absorption intersousbande à la largeur du puits quantique $\text{Al}_{0.1}\text{Ga}_{0.9}\text{Sb}/\text{AlSb}$. En faisant croître la largeur du puits cela mène à l'augmentation de la valeur du coefficient d'absorption et décale la longueur d'onde correspondante vers les longueurs d'ondes les plus longues.

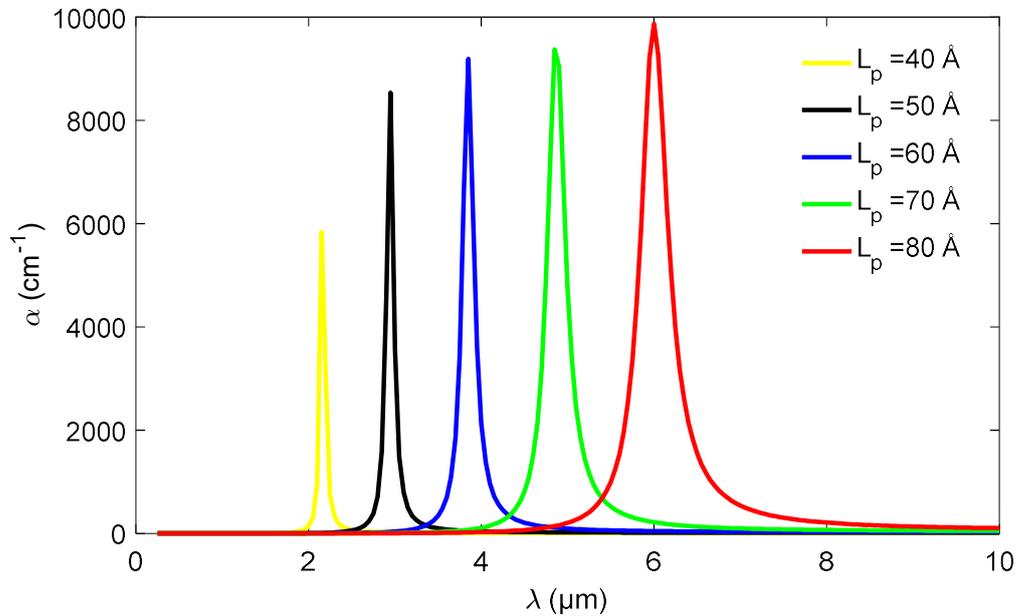


Figure 2.14. Variation du coefficient d'absorption intersousbandes en fonction de λ pour différentes largeurs du puits quantique $\text{Al}_{0.1}\text{Ga}_{0.9}\text{Sb}/\text{AlSb}$.

Conclusion

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

Conclusion générale

Dans le domaine des matériaux qui est la base de tous les dispositifs fabriqués, on est tout le temps en train d'explorer et à la recherche d'autres classes de matériaux afin de faciliter notre vie quotidienne. L'emploi des semi-conducteurs s'est avéré très fructueux et divers dispositifs ont prouvé leurs importances. L'exploit d'autres classes de matériaux ouvre un grand éventail de recherches de matériaux magiques, petits et rapides. Un matériau intelligent est un matériau possédant une ou plusieurs propriétés qui peuvent être considérablement modifiées de manière contrôlée par des stimuli externes tels que des contraintes mécaniques, la température, l'humidité, le pH, la lumière, les champs électriques ou magnétiques, etc.

Il est possible de retrouver des matériaux intelligents dans plusieurs champs d'application (biologie et nanomédecine, capteurs, aérospatial, robotique, automobile, énergie, environnement, électronique, etc).

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

Nous avons vu que l'ajout de l'aluminium augmente la valeur du paramètre de maille, l'épaisseur critique, l'énergie de la bande interdite ainsi que la masse effective de tous les porteurs. Alors que l'augmentation de la concentration de ce facteur diminue la contrainte et le décalage des bandes de conduction.

L'augmentation de la concentration d'Al mènera à l'augmentation du nombre des niveaux énergétiques dans la bande de conduction de la structure à puits quantique à base d'AlGaSb/AlSb et cela mène aussi à la diminution de la valeur de l'énergie de quantification électronique.

Nous avons également pu constater que l'introduction de l'aluminium en petite quantité joue un rôle majeur dans l'augmentation de la valeur du coefficient d'absorption intersousbandes et que la longueur d'onde correspondante peut être ajustée dans le domaine de l'infrarouge selon l'application désirée tout en augmentant la largeur du puits.

Références

- [1] J De Rosney, " Les matériaux intelligents ", Texte de la 278e conférence de l'Université de tous les savoirs donnée le 4 octobre 2000.
- [2] I. Vurgaftman et J. R. J. Meyer, « Band parameters for nitrogen-containing semiconductors », Journal of Applied Physics, vol. 94, no. 6, p. 3675, 2003.
- [3] C. Kittel, « Physique de l'état solide », Dunod, Paris, 1983.
- [4] M. Labidi, "Etude des propriétés structurales, électroniques des quaternaires", Thèse de doctorat, Université Badji Mokhtar, Annaba, Algérie, 2011.
- [5] H.Y. Fan, "Temperature dependence of the energy gap in semiconductors", Physical Review, vol. 82, n° 6, pp. 900-905, 1951.
- [6] Y.P.Varshni, "Temperature dependence of the energy gap in semiconductors" Physica, vol.34, pp. 148-154, 1967.
- [7] I. Vurgaftman, J. R. J. Meyer et L. R. Ram-Mohan, « Band parameters for III-V compound semiconductors and their alloys », Journal of Applied Physics, vol. 89, pp. 5815-582, 2003.
- [8] G. Tourbot, « Croissance par épitaxie par jets moléculaires et détermination des propriétés structurales et optiques de nanofils InGaN/GaN », Université de Grenoble, France, 2012.
- [9] D. V. Morgan; K. Board « An Introduction to Semiconductor Microtechnology », John Wiley & Sons, 1990.
- [10] R. Ciprot, «Épitaxie en phase vapeur aux organométalliques et caractérisation de semi-conducteur III-As sur substrat silicium dans une plateforme microélectronique », thèse de doctorat, Université Grenoble Alpes, France, 2016.
- [11] S.M. Sze, "VLSI Technology", 2nd edition, McGraw-Hill International Editions, 1988.
- [12] J. W. Matthews et A. E. Blakeslee, « Defects in epitaxial multilayers. I. Misfit dislocations », Journal of Crystal Growth, vol 27, p. 118-125.
- [13] A. Berthelot, "Diffusion spectrale et rétrécissement par le mouvement dans les boites quantiques", Thèse de doctorat, université Paris-sud, France, 2008.
- [14] K. Benatman, "Étude de lasers à base de semi-conducteurs III-V », Thèse de Magister, Université El Hadj Lakhdar, Batna, Algérie, 2011.
- [15] S. Rebiai-Benahmed, « Composants optoélectroniques », e-Science, p.116.

- [16] H. Asai and Y. Kawamura, « Well-width dependence of intersubband absorption in InGaAs/InAlAs multiquantum wells », Appl. Phys. Lett., vol 56, p. 1149-1151, 1990.
- [17] M. Nakayama, H. Kuwahara, H. Kato, and K. Kubota, “Intersubband transitions in GaAs-Al_xGa_{1-x}As modulation-doped superlattices”, Appl. Phys. Lett, vol 51, p. 1741-1743, 1987
- [18] M. Ramsteiner, J. D. Ralston, P. Koidl, B. Dischler, H. Biebl, J. Wagner, and H. Ennen, “Doping density dependence of intersubband transitions in GaAs/Al_xGa_{1-x}As quantum-well structures”, J. Appl. Phys., vol 67, p. 3900-3903, 1990.
- [19] L. Nevou, « Émission et modulation intersousbande dans les nanostructures de nitrures », Thèse de Doctorat, Université Paris-Sud 11, France, 2008.
- [20] S. Adachi, « Ternary and quaternary compounds », S. Kasap, P. Capper (Eds.), Springer Handbook of Electronic and Photonic Materials, 725-741, 2017.
- [21] C. Van De Walle, “Band lineups and deformation potentials in the model-solid theory”, Phy. Rev. B, V 39, 1871-1883, 1989.
- [22] H. Machahadani, « Transitions intersousbandes dans les puits quantiques GaN/AlN du proche infrarouge au THz », Thèse de doctorat, université Paris-sud 11, France, 2011.