

République algérienne démocratique et populaire
Ministère de l'enseignement supérieur et de la recherche scientifique
Université Saad Dahleb Blida 1



Faculté des sciences
Département de physique

Mémoire de fin d'étude
Pour l'obtention du diplôme de Master en Physique

Option : Physique Appliquée

Thème :

Optimisation d'une structure à base d'un matériau III-V
pour la diode laser

Présenté par :

M^{elle} Chergui Hafidha

Soutenu le 24 / 07 / 2019 devant le jury composé de :

Ouir Souad	M_C_B	USDB1	Présidente
Aissat Abdelkader	Professeur	USDB1	Encadreur
Benahmed Abdlmoumen	M_A_B	USDB1	Examineur

Blida 1-2018/2019-

Remerciements

Je remercie tout d'abord, le bon dieu tout puissant de nous avoir donné la santé, la volonté et la puissance pour achever ce travail.

Mes gratitudee remerciements s'adressent au directeur de ce mémoire Mr
AISSAT. Abdelkader pour son encadrement, sa disponibilité et son encouragement durant la réalisation de ce travail malgré ses multiples occupations.

Mes sincères remerciements vont également à tous mes enseignants, sans exception, qui ont veillé à ma formation.

Je remercie infiniment mes chers parents qui m'ont soutenu et encouragé tout au long de mon parcours, tous les membres de ma famille pour leur contribution et leur soutien.

Je tiens à remercier également toute l'équipe des doctorants qui étaient toujours disponibles.

ملخص

على البئر الكمومية $\text{In}_x \text{Ga}_{(1-x)} \text{N}$ من أجل تحسين أداء مكون الكترولوضوئي لتطبيقات الاتصالات، تمت دراسة بنية الركيزة والمحاكاة. أولاً، درسنا المعلمة شعيرية للهيكل كدالة لتركيز لندوم، في الواقع أن هذا الأخير يتناسب مع التركيز، كما قمنا بمحاكاة عدم تطابق الشبكة، والذي يعطي هيكلنا في النقاط القيد الضغط

إن محاكاة الحاجز المحتمل لهيكلنا، وإثبات أننا عملنا في بئر كمية من النوع الأول، وهذا الهيكل وبعض تركيز ميكرون، المرور عبر دراسة المعلمة الإلكترونية المختلفة مثل الضغط 0.5، 0.4 الإنديوم (في) يعطي طول موجي قدره والفجوة ... إلخ. جميع نتائجها تظهر استخدام تركيزات منخفضة من الإنديوم

كلمات البحث

البئر الكمومية، معلمة شبكة، إجهاد، طول موج $\text{In}_x \text{Ga}_{(1-x)} \text{N}$ في بنية

Résumé

Afin d'améliorer la performance d'un composant optoélectronique pour des applications en communications, on a étudié et simulé la structure $\text{In}_x \text{Ga}_{(1-x)}\text{N}$ sur le substrat GaN à puits quantique. D'abord, on a étudié le paramètre de maille de la structure en fonction de la concentration d'indium, en effet ce dernier est proportionnel avec la concentration, nous avons aussi simulé le désaccord de maille et, qui pour notre structure donne dans tous les points une contrainte compressive.

La simulation de la barrière du potentiel pour notre structure prouve qu'on a travaillé dans un puits quantique de type I, cette structure et pour certain concentration d'indium (In) donne une longueur d'onde d'émission de 0,4 à 0,5 μm , qui est émetteur dans le bleu et le violet pour les diodes laser, après le passage par l'étude de différents paramètres électroniques tel que l'énergie de transition, la longueur d'onde d'émission, le gap ...etc. tous leurs résultats montrent l'utilisation des faibles concentrations d'indium (In).

Mots clés :

Structure $\text{In}_x \text{Ga}_{(1-x)}\text{N}$, puits quantique, paramètre de maille, contrainte, longueur d'onde.

Abstract

In order to improve the performance of an optoelectronic component for communications applications, the $\text{In}_x \text{Ga}_{(1-x)}\text{N}$ structure on the quantum well GaN substrate was studied and simulated. First, we studied the lattice parameter of the structure as a function of the indium concentration, in fact the latter is proportional to the concentration, we also simulated the mesh mismatch and, which for our structure gives in all the points a compressive constraint.

The simulation of the potential barrier for our structure, proof that we worked in a quantum well of type I, this structure and for certain indium concentration In gives a wavelength of 0.4 0.5 μm , after the passage through the study of different electronic parameters such as stress, gap... etc. All their results show the use of low concentrations of indium In .

Keywords:

$\text{In}_x \text{Ga}_{(1-x)}\text{N}$ structure, quantum well, mesh parameter, stress, wavelength.

Table des matières

République algérienne démocratique et populaire	
Remerciements	I
ملخص.....	II
Résumé	III
Abstract	IV
Table des matières	V
Liste des figures	VIII
Introduction Générale.....	1
Chapitre I : Généralités.....	3
I. Introduction :	3
II. Définition de l'optoélectronique :	3
II.1 Définition d'un semi-conducteur :	4
II.1.1 Bande de conduction :	4
II.1.2 Bande de valence :	5
II.2 Gap d'énergie.....	5
II.2.1 Gap direct :	6
II.2.2 Gap indirect :	6
II.3 Absorption de la lumière par les semi-conducteurs :	6
II.4 Emission de la lumière par les semi-conducteurs :	6
II.5 Types de recombinaisons :	7
II.5.1 Recombinaisons radiatives :	7
II.5.2 Recombinaisons non radiatives :	7
III. Les différents groupes des semi-conducteurs :	8
III.1 Semi-conducteurs IV :	9
III.2 Les semi-conducteurs II-VI :	9

III.3	Définitions des semi-conducteurs III-V :	9
IV.	Propriété des matériaux nitrure III-V :	10
IV.1.	Les structures cristallines :	10
IV.2.	L'intérêt des semi-conducteurs :	11
IV.3.	Les Composés Binaires :	11
IV.4.	Les composés ternaires et quaternaires :	11
V.	Généralités sur les émetteurs de lumières :	12
V.1.	Les diodes électroluminescentes "LED" :	12
V.1.1.	Les matériaux utilisés :	12
V.2.	Le laser :	13
V.2.1.	Historique :	13
V.2.2.	Définition :	15
V.2.3.	Matériaux utilisés pour les diodes laser :	16
V.2.4.	Principe D'un Laser :	16
V.2.5.	Principe de fonctionnement d'un laser :	16
VI.	Puits Quantiques :	17
VI.1.	Définition de puits quantique :	17
VI.1.1.	puits quantiques de type-I :	19
VI.1.2.	puits quantiques de type-II :	19
VI.2.	L'équation de Schrödinger dans un puits quantique :	19
VI.2.1.	Puits quantique de profondeur fini :	21
VII.	Masse effective :	22
VII.1.	Masse effective des électrons :	22
VII.2.	Masse effective des trous :	23
VIII.	Modèle physique :	24
VIII.1.	Paramètre de maille :	24
VIII.2.	La contrainte :	24
	Effet de la contrainte sur le Gap d'énergie :	26
	27
VIII.4	Epaisseur critique :	27
IX.	Conclusion :	29
	Chapitre II : Résultats et discussions.....	32
I.	Introduction :	32
II.	Paramètre de maille :	32

III.	Désaccord de maille :	33
IV.	L'épaisseur critique :	34
V.	Energie de la bande interdite des trous lourds et trous légers :	35
IX.	La bande d'interdite (Simulation + exp)	36
X.	L'influence de la température sur l'énergie de la bande interdite :	37
XI.	L'absorption :	38
XII.	Taux de confinement :	38
XIII.	La mobilité :	39
XIII.1	La mobilité des électrons :	39
XIII.2	La mobilité des trous :	41
XIV.	Barrières du potentiel :	43
XV.	Quantification d'énergie :	44
XV.1	Introduction :	44
XV.2	Quantification d'énergie pour les électrons :	44
XV.3	L'énergie de quantification des trous lourds :	45
XV.4	L'énergie de quantification pour les trous légers :	47
XVI.	Energie de transition :	48
XVI.1	Energie de transition des trous lourds :	48
XVI.2	Energie de transition pour les trous légers :	49
XVII.	Longueur d'onde d'émission :	50
XVII.1	Longueur d'onde d'émission pour les trous lourds :	50
XVII.2	Longueur d'onde d'émission des trous légers :	51
XVIII.	Conclusion :	53
	Conclusion générale	54
	Bibliographie	56

Liste des figures

Figure I.1 : Diagrammes énergétiques pour les trois types des matériaux [6].

Figure I.2 : Energie de gap [8].

Figure I.3 mécanisme d'interaction entre un atome et un photon.

Figure I.4 tableau périodique des éléments chimiques.

Figure I.5. Structure de wurtzite avec les paramètres de maille c_0 et a_0 constitué de 2 sous-réseaux hexagonaux [21].

Figure I.6 :les lasers.

Figure I.7 : Principe de fonctionnement d'un laser.

Figure I.8 : puits quantique .

Figure I.9 : les types du puits quantique .

Figure I.10 : Puits quantique conventionnel.

Figure I.11 : Illustration des deux types de déformation [32].

Figure I.12 : Évolution de l'énergie de la bande interdite en fonction de l'état de contrainte d'une couche déposée sur un substrat [32]].

Figure I.13 : Structure de bande d'un semi-conducteur à gap direct [33].

Figure I.14 : Schéma montrant une couche contrainte en compression (a) et Une couche contrainte relaxée (b) [34].

Figure I.15:Variation des énergies du gap aux points Γ,so en fonction de la composition de l'indium de l'alliage ternaire $Ga_{(1-x)}In_xN$.

Figure I.16 : Variation des masses effectives de $In_xGa_{(1-x)}N$ en fonction de la composition en indium

Figure I.17 :Variation du désaccord de maille en fonction de la composition x en indium de la couche $In_xGa_{(1-x)}N$ sur substrat de GaN .

Figure II.1 : variation du paramètre de maille en fonction de la concentration d'indium (In).

Figure II.2 : Variation du désaccord de maille de la structure $\text{In}_x \text{Ga}_{(1-x)} \text{N}$ en fonction de la concentration d'indium (In).

Figure II.3 : Variation de l'épaisseur critique (h_c) de l'alliage (In Ga N) en fonction de la concentration d'indium (In).

Figure II.4 : Variation de l'énergie de la bande interdite en accord de maille de la structure $\text{In}_x \text{Ga}_{(1-x)} \text{N} / \text{Ga N}$ en fonction de la concentration d'indium (In).

Figure II.5 : Variation de l'énergie de la bande interdite des trous lourds et légers en fonction de la concentration d'indium (In).

Figure II.6 : Variation de l'énergie de la bande interdite et l'expérimentale des couches relaxées et contraintes en fonction de la concentration d'indium (In)[28] .

Figure II.7 : L'influence de la température sur l'énergie de la bande interdite.

Figure II.8 : L'évolution de l'absorption des trous lourds en variant la température et la concentration d'indium.

Figure II.9 : Taux de confinement de barrière de valence et de conduction en fonction de la concentration d'indium.

Figure II.10.a : variation de la mobilité des électrons en fonction de la concentration de porteurs pour différents concentrations d'indium à 300 k.

Figure II.10.b : La mobilité des électrons en fonction de la concentration des porteurs pour différentes températures.

Figure II.10.c : La mobilité des trous en fonction de la concentration des porteurs pour différentes concentration d'indium.

Figure II.10.d : La mobilité des trous en fonction de la concentration des porteurs pour différentes températures.

Figure II.11 : Barrière du potentiel des trous lourds et légers en fonction de la concentration.

Figures (II.12.a.b.c.d.e) : Variation de l'énergie de quantification en fonction de la largeur du puits .

Figures (II.13.a.b.c.d.e.f) : Variation de l'énergie de quantification des trous lourds en fonction de la largeur du puits .

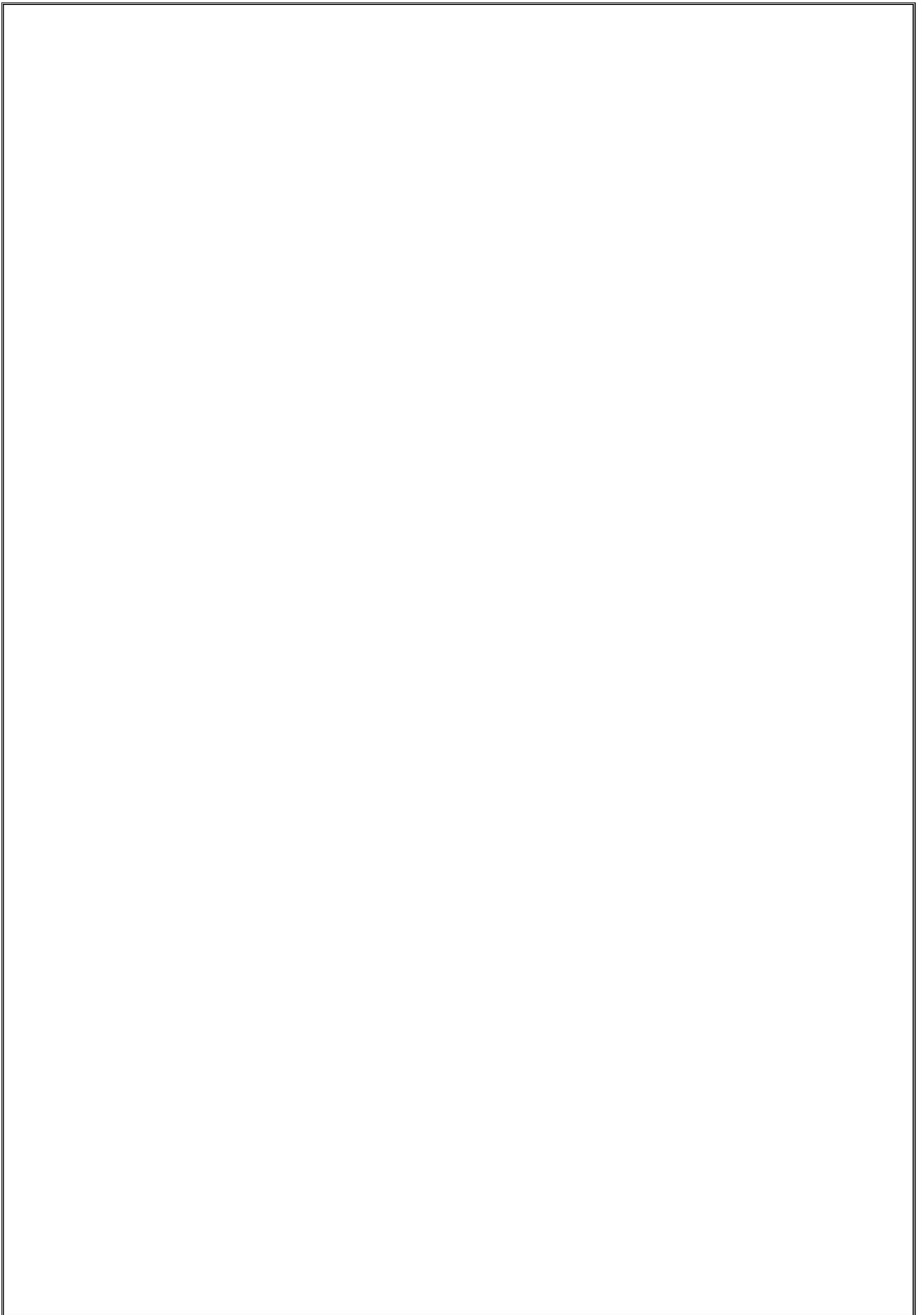
Figures (II.14.a.b.c) : Variation de l'énergie de quantification des trous légers en fonction de la largeur du puits .

Figures (II.15.a.b.c.d.e.f) : Variation de l'énergie de transition des trous lourds en fonction de l'élargissement du puits pour différents incorporations de l'indium.

Figures (II.16.a.b.c) : Variation de l'énergie de transition des trous légers en fonction de l'élargissement du puits pour différents incorporations de l'indium.

Figures (II.17.a.b.c.d.e.f) : La longueur d'onde d'émission pour les trous lourds en fonction de largeur du puits quantique.

Figures (II.18.a.b.c) : La longueur d'onde d'émission pour les trous légers en fonction de largeur du puits quantique.



Introduction Générale

Succédant à l'ère industrielle traditionnelle, qui a duré depuis le XVII^e siècle jusqu'à la période d'après la deuxième guerre mondiale, l'avènement de l'ère de l'information correspond à une mutation profonde de notre société.

Elle fut déclenchée par l'essor combiné des systèmes de télécommunications qui permettent l'échange de l'information ; et de la micro-électronique qui permettent le traitement de l'information.

Le monde des semi-conducteurs est dominé, en termes de marché, par le silicium. Ce dernier a été l'un des premiers matériaux utilisés avec le germanium pour fabriquer des composants électroniques [1].

Dans les années 1960, une nouvelle famille est apparue, celle des matériaux III-V, les alliages binaires comme le GaAs, ternaires comme le InGaP, quaternaires comme le AlGaAsP, InGaAsBi [2].

Actuellement la difficulté réside dans le fait que le silicium ne permet pas de fabriquer l'intégralité des fonctions nécessaires à un circuit optoélectronique. En effet avec son énergie de bande interdite gap indirect, le silicium est un très mauvais émetteur de lumière.

Face à ce problème, les matériaux de la famille des III-V est l'une des solutions les plus prometteuses.

Les semi-conducteur III-V sont des matériaux composites fabriqué à partir d'un ou plusieurs éléments de la colonne III du tableau périodique des éléments (bore, aluminium, galium, Indium ...etc.), et d'un ou plusieurs éléments de la colonne V (azote, phosphore, arsenic, antimoine... etc.). Principalement utilisées en microélectronique pour des circuits intégrés, dans les cellules photovoltaïques et dans les dispositifs optoélectronique tels que les diodes lasers.

Le plus grand intérêt semi-conducteur III-V réside dans leurs propriétés, ils sont robustes, possèdent une conductivité thermique élevée, leur point de fusion est élevé et aussi une bande interdite directe.

En exposition dans ce mémoire l'étude et la simulation d'une structure a puits quantique à base d'un matériau ternaire In Ga N /Ga N comme pour l'application photovoltaïque, le choix de ce matériau est basé sur ses caractéristiques tel que sa large bande interdite.

Dans le premier chapitre nous décrivons les généralités sur les semi-conducteurs, les lasers le principe de fonctionnement d'un laser, des notions sur les puits quantiques aussi nous décrivons quelques équations mathématiques .

Le deuxième chapitre sera un enchaînement de simulations avec leurs interprétations appliquées sur notre matériaux en utilisant le logiciel Matlab.

L'objectif de ce travail est d'étudier et d'optimiser une structure à base d'un semi –conducteur III-V afin d'améliorer la performance d'un composant optoélectronique diode laser à semi-conducteur pour des applications en communications.

Chapitre I : Généralités

I. Introduction :

L'importante croissance des semi-conducteurs au niveau mondial est liée au fait que ces matériaux forment la base de la révolution technologique de ces quarante dernières années dans le domaine de l'électronique qui, au sens large représente le marché mondial le plus important à l'heure actuelle en même temps que celui qui bénéficie de la croissance la plus rapide. Les matériaux semi-conducteurs interviennent principalement en microélectronique (dominée par le Silicium), dans les domaines radiofréquences et hyperfréquences; applications militaires et spatiales ainsi qu'en optoélectronique. L'activité de recherche concernant la microélectronique, est importante et porte sur la recherche de nouveaux matériaux, de nouveaux procédés, de nouvelles architectures de transistors pour répondre à des besoins différents (calcul logique, mémoires, analogique,...).

Dans ce chapitre, nous allons voir quelques notions sur les semi-conducteurs tel que : bande de conduction, bande de valence. , et puis après on va entamer le concept des matériaux III-V et leur propriétés. par la suite on va parler sur les émetteurs de la lumières pour aborder la notion des laser et en finissant par les puits quantiques et quelques équations mathématiques **II.**

Définition de l'optoélectronique :

L'Optoélectronique est l'étude des composants qui interagissent avec de la lumière. Elle est généralement considérée comme une sous branche de la photonique.[3]

Les interactions rayonnement électromagnétique – semi-conducteurs sont le principe des composants optoélectroniques dont le rôle est la conversion d'un signal optique en un signal électrique ou réciproquement. Ce sont donc des transducteurs électronique vers optique ou optique vers électrique [3] .

Suivant leur mode opératoire, on distingue deux types de composants optoélectroniques :

- Les photodétecteurs qui sont des composants qui convertissent le signal optique en un signal électrique,
- Les photoémetteurs qui convertissent le signale électrique en un signal optique

Ces deux types de composants sont élaborés à partir de matériaux semi-conducteurs et le

principes de fonctionnement sont basés sur les interactions rayonnement- semi-conducteur.

Pour cela, on va aborder la notion des semi-conducteurs.

II.1 Définition d'un semi-conducteur :

Un semi-conducteur est un matériau qui a les caractéristiques électriques d'un isolant et d'un conducteur, sa résistivité est intermédiaire entre les deux. Les électrons libres et les trous mobiles sont les porteurs de charges responsables de la conductivité électrique la conductivité électrique d'un semi-conducteur est intermédiaire entre les métaux et les isolants. On différencie trois types des matériaux : les isolants, les conducteurs et les semi-conducteurs.

- Conducteurs : la dernière bande occupée est partiellement remplie, il existe beaucoup de niveaux disponibles et la conduction est grande.
- Semi-conducteurs : le taux de remplissage de la dernière bande occupée est soit très faible soit très important. La hauteur de la bande interdite est faible. La conduction est faible est varié beaucoup avec la température.
- Isolants : les bandes d'énergie les plus faibles sont entièrement pleines. La hauteur de la bande interdite est grande (5eV).il n'y a pas de niveaux d'énergie accessibles et pas de conduction [4].

Deux bandes d'énergie permises jouent un rôle particulier :

- La dernière bande complètement remplie, appelée « bande de valence »
- La bande d'énergie permise suivante appelée « bande de conduction »

II.1.1 Bande de conduction :

Les structures de bande des semi-conducteurs diffèrent essentiellement par la bande de Conduction. En effet, tous les semi-conducteurs ont le maximum de leur bande de valence au centre de la zone de Brillouin, ce qui n'est pas toujours le cas du minimum de la bande de conduction. Le minimum de la bande de conduction pour le InGaN se trouve au centre de la zone de Brillouin, c'est-à-dire en vallée. Si un électron peut passer directement de la bande de valence à la bande de conduction on dit alors c'est un gap direct.

Dans le cas du Si, les minimas de bande de conduction se trouvent à 85% du bord de zone. Les électrons doivent changer de vecteur d'onde pour passer de la bande de valence à la bande de conduction [5].

II.1.2 Bande de valence :

Il existe 3 bandes de valence dont les maximas sont en π . Ces bandes sont issues des orbitaux pliants triplement dégénérés. Cette dégénérescence est partiellement levée par l'interaction spin-orbite. La prise en compte de l'hamiltonien d'interaction spin-orbite décale de $\frac{1}{2}\Delta_{so}$. On l'appelle bande « split-off » l'une des 3 bandes de valence. Les 3 bandes présentent des courbures différentes, donc des masses différentes. Les 2 bandes qui restent dégénérées en $k = 0$ sont appelées bande de trous lourds (ou hh pour heavyholes) et bande de trous légers (ou lh pour light holes). Ce sont essentiellement ces deux bandes qui déterminent les propriétés de transport des trous dans le semi-conducteur [5].

La bande de Valence et la bande de conduction sont séparées par un espace appelé « bande Interdite » comme la Figure 1.) montre [6].

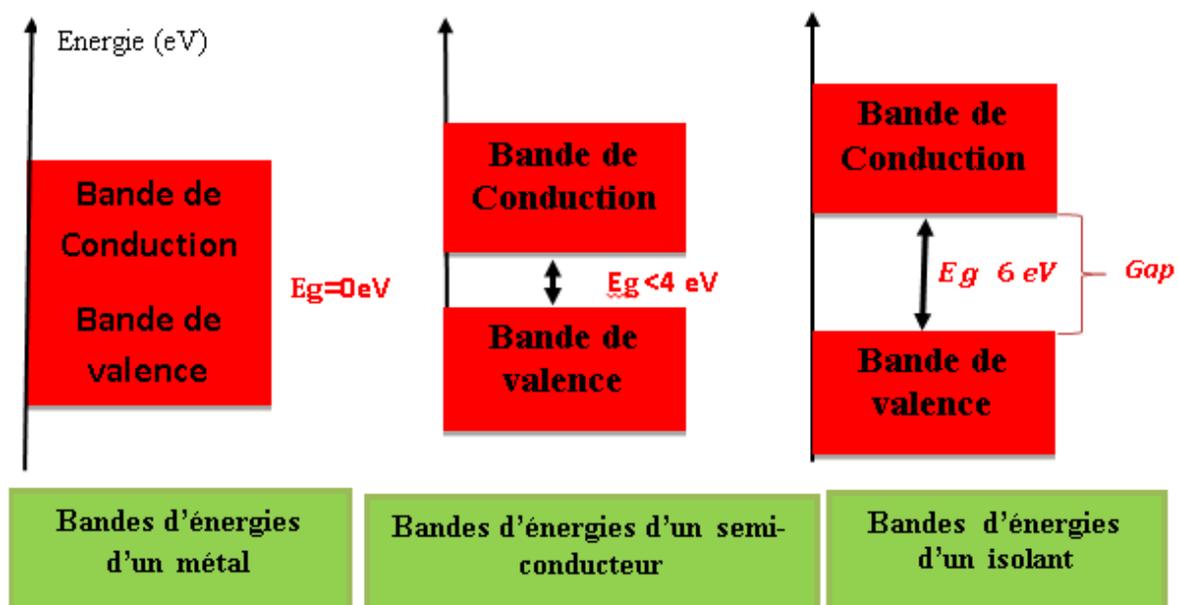


Figure I.1 : Diagrammes énergétiques pour les trois types des matériaux [6].

II.2 Gap d'énergie

Les semi-conducteurs sont caractérisés par leur bande interdite ou gap, qui sépare les derniers états occupés de la bande de valence et les états libres suivants dans la bande de conduction. Les électrons dans la bande de conduction et les trous dans la bande de valence ont une énergie qui dépend de leur vecteur d'onde, et suivant laquelle les matériaux semi-conducteurs se divisent en deux types : à gap direct et à gap indirect [7].

II.2.1 Gap direct :

Quand le minimum de la bande de conduction possède le même vecteur d'onde que le maximum de la bande de valence, le gap est dit direct.

II.2.2 Gap indirect :

Dans ce gap c'est le contraire de gap direct. Si le minimum de la bande de conduction ne possède pas le même vecteur d'onde que le maximum de la bande de valence, le gap est dit indirect.

Cette différence est très importante pour les transitions optiques car elles s'opèrent à vecteur d'onde quasi constant : les semi-conducteurs à gap direct sont donc, d'une manière générale, plus adaptés que les autres pour les applications optoélectronique [7].

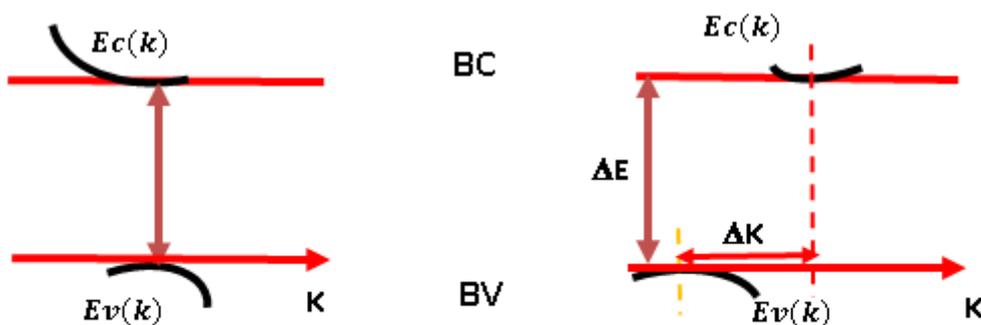


Figure I.2 : Energie de gap [8].

II.3 Absorption de la lumière par les semi-conducteurs :

Si on éclaire un semi-conducteur par une lumière de fréquence, telle que l'énergie h du photon est suffisante pour faire passer l'électron de la bande de valence à la bande de conduction, il y a effet photoélectrique interne lié à la structure de bande interdite.

II.4 Emission de la lumière par les semi-conducteurs :

Les émetteurs de lumière représentent la fonction réciproque des photorécepteurs : transformation du signal électrique en un signal optique (photonique). L'émission photonique correspond à une transition de l'électron vers le bas ; retour à l'équilibre ou recombinaison électron-trou.

II.5 Types de recombinaisons :

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

II.5.1 Recombinaisons radiatives :

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

- la recombinaison bande à bande entre un électron de la bande de conduction et un trou de la bande de valence. C'est la recombinaison radiative la plus dominante. Sa probabilité est proportionnelle à la concentration de dopants.
- la recombinaison à travers des niveaux donneurs et accepteurs, Les recombinaisons dues aux isoélectriques (excitons).
- Les excitons représentent des atomes ou molécules avec la même valence que les atomes auxquels elles se substituent dans le matériau mais qui n'ont ni le même diamètre ni la même électronégativité. Ils n'ajoutent aucune charge supplémentaire dans le matériau hôte. exemple : Azote et ZnO dans le GaP:
- L'azote permet une émission de lumière dans le jaune-jaune vert, suivant le dopage.
- Le ZnO permet une émission de lumière dans le rouge.

II.5.2 Recombinaisons non radiatives :

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

➤ La recombinaison de type Auger :

Elle se fait par transition directe bande à bande ou par l'intermédiaire d'un centre recombinant. L'énergie résiduelle est cédée à une troisième particule (électron ou trou) qui est excitée à un état d'énergie supérieur puis transférée de façon non radiative au réseau. La probabilité pour que ce processus ai lieu est proportionnelle à n^2p si deux électrons sont impliqués et à np^2 si deux trous sont impliqués.

➤ La recombinaison de type Shockley-Read -Hall (SRH):

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

Chapitre I: Généralités

Les quatre étapes possibles dans ce processus sont :

1. La capture d'un électron par un niveau piège (passage de l'électron de E_c vers E_p).
2. L'émission d'un électron à partir d'un niveau piège (passage de l'électron de E_p vers E_c).
3. L'émission d'un trou à partir d'un niveau piège (passage de l'électron de E_v vers E_p).
4. La capture d'un trou par un niveau piège (passage de l'électron de E_p vers E_v).

Les trois processus d'interaction entre le rayonnement et le semi-conducteur d'énergie de gap E_g (bande interdite) étant :

- L'absorption du photon par un électron de la bande de valence et son passage vers la bande de conduction, entraînant l'apparition d'un trou dans la bande de valence
- L'émission spontanée d'un photon par retour de l'électron excité de la bande de conduction vers la bande de valence et sa recombinaison avec le trou, dans le cas où l'énergie cédée par l'électron est de type radiatif.
- L'émission stimulée d'un photon avec retour de l'électron excité vers la bande de valence et sa recombinaison avec un trou. le photon émis est identique, en longueur d'onde et en phase, au photon incident, il est dans le même état de polarisation. Ce dernier processus est à la base de l'effet laser.

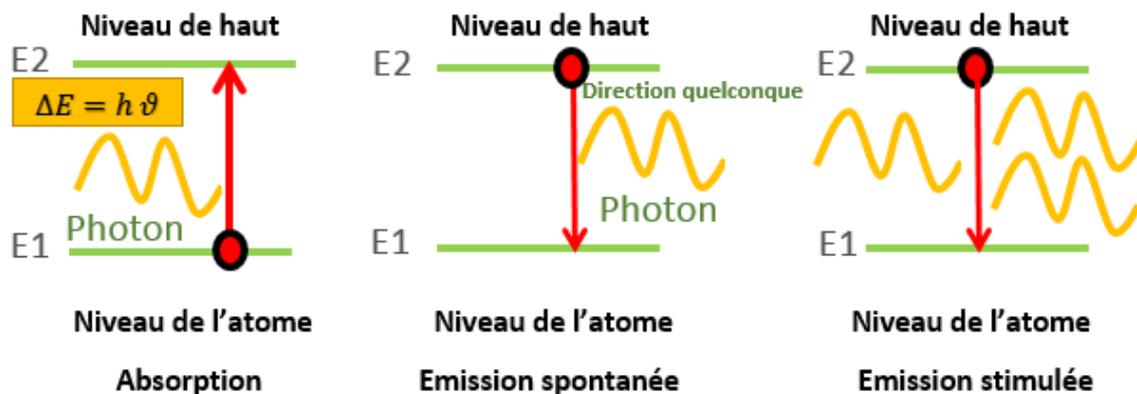


Figure I.3 mécanisme d'interaction entre un atome et un photon

III. Les différents groupes des semi-conducteurs :

La recherche sur les matériaux semi-conducteurs a commencée au début du 19ème siècle. Au fil des années de nombreux semi-conducteurs ont été étudiés. Parmi les plus célèbres, nous trouvons le silicium Si [9] et le germanium Ge [10,11] de la colonne IV du tableau périodique. Ces deux semi-conducteurs sont composés d'atomes identiques, mais d'autres, comme l'arséniure de gallium GaAs (III-V) [12] sont composés d'atome d'éléments différents : Ga (III)

et As (V). La composition de semi-conducteurs permet d'accéder à des propriétés électriques et optiques que n'ont pas les semi-conducteurs purs.

Avant l'invention du transistor bipolaire en 1947 [13,14], les semi-conducteurs [15] sont présents dans seulement deux dispositifs électroniques que sont les photodiodes et les redresseurs. Dans les années 1950, le germanium est le plus utilisé [16 ,17]. Cependant, il ne peut pas être employé dans les applications nécessitant une faible consommation de courant et/ou soumises à de hautes températures. Le silicium, d'un coût moins élevé et permettant des applications à faibles consommations, sera très utilisé dès 1960.

III.1 Semi-conducteurs IV :

Il est constitué d'un seul élément tels que les semi-conducteurs de la colonne IV de la classification périodique par exemple : silicium (Si) et de germanium (Ge). C'est un semi-conducteur pur sans défaut de structure. C'est un matériau semi-conducteur dont le comportement électrique ne dépend que de sa structure, et non de l'adjonction d'impuretés comme dans le cas du dopage.

III.2 Les semi-conducteurs II-VI :

Les semi-conducteurs II-VI sont des composés polarisés de la maille élémentaire est constitué de deux éléments, les éléments de la colonne II étant que cations et les d'autre de la colonne VI comme des anions en échangeant deux électrons, ils cristallisent dans la structure zinc-blende ou wurtzite , il a grand gap présentent un grand l'intérêt pour la réalisation des dispositifs électroluminescents, grâce à la largeur de leur bande interdite, ils peuvent émettre de la lumière visible avec des rendements d'émission importants, car ils sont à gap direct..

III.3 Définitions des semi-conducteurs III-V :

Les matériaux semi-conducteurs III-V sont des corps composés formés à partir d'un élément III^{ème} colonne et d'un élément de la V^{ème} colonne de la classification périodique de Mendeleïev. Ces composés sont stable dans la structure zinc-blende, et parfois ce cristallisent dans la structure wurtzite. Les semi-conducteurs III-V présentent un grand intérêt en raison de leurs propriétés :

- ils sont robustes.
- ils possèdent une conductivité thermique élevée.
- leur point de fusion est élevé.
- ils ont une bande interdite directe.

Chapitre I: Généralités

Les composés III-V se forment entre les cations de groupe III dans un état de trois électrons perdus et entre les anions captant trois électrons soit un échange de trois électrons pour avoir la symétrie cubique d'une géométrie tétraédrique par une simple hybridation de SP³.

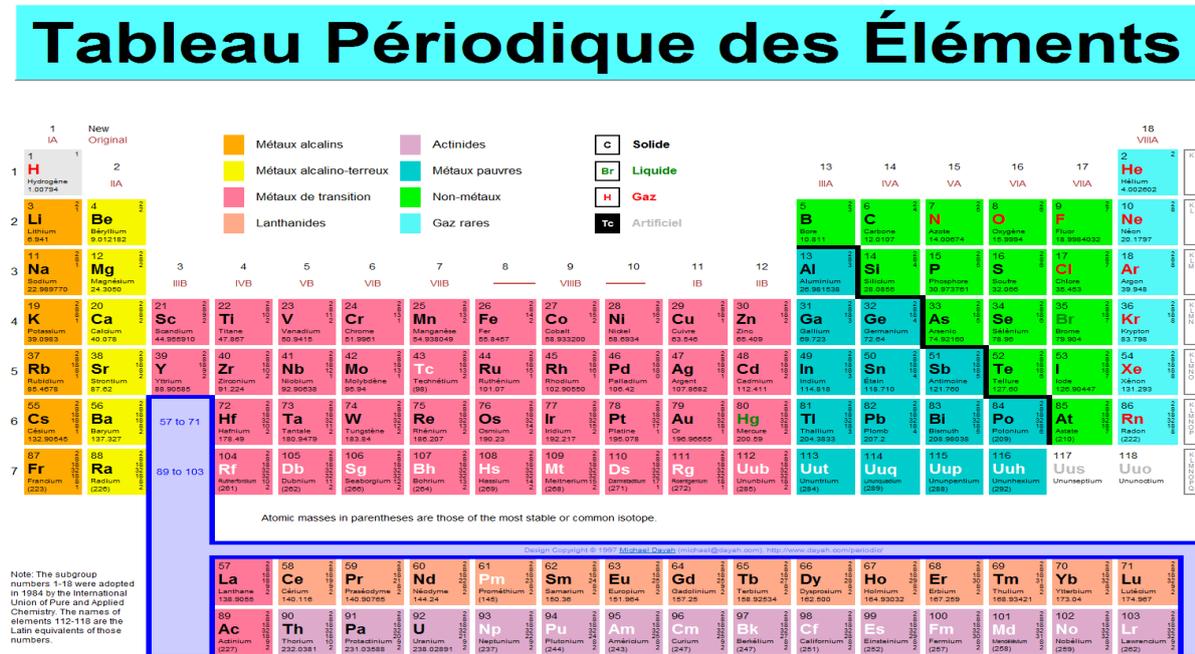


Figure I.4 : tableau périodique des éléments chimiques

IV. Propriété des matériaux nitrure III-V :

Les composés III-nitrure et leurs alliages sont considérés comme des matériaux très prometteurs pour la réalisation des dispositifs optoélectronique.

IV.1. Les structures cristallines :

La base atomique constitue le contenu matériel du cristal, par opposition au réseau, entité purement mathématique qui décrit la géométrie de l'édifice cristallin. Les constituants élémentaires du motif peuvent être de différents types, correspondant à différentes catégories de cristaux. Le motif d'un cristal (métallique) est donc les atomes contenus dans une maille élémentaire (à spécifier dans chaque cas), le cristal résultant de la répétition tridimensionnelle de ce motif suivant les translations du réseau associé [18].

La structure cristalline Zinc-blende est une structure qui s'apparente à celle du diamant et elle est constituée de deux sous-réseaux cubiques à faces centrées, l'un étant constitué des atomes de l'élément III, l'autre des atomes de l'élément V. Ces deux sous-réseaux sont décalés l'un par rapport à l'autre le long de la diagonale du cube, d'une quantité $(a_0/4, a_0/4, a_0/4)$, étant le paramètre cristallin, c'est-à-dire la longueur de l'arête du cube élémentaire [19-20].

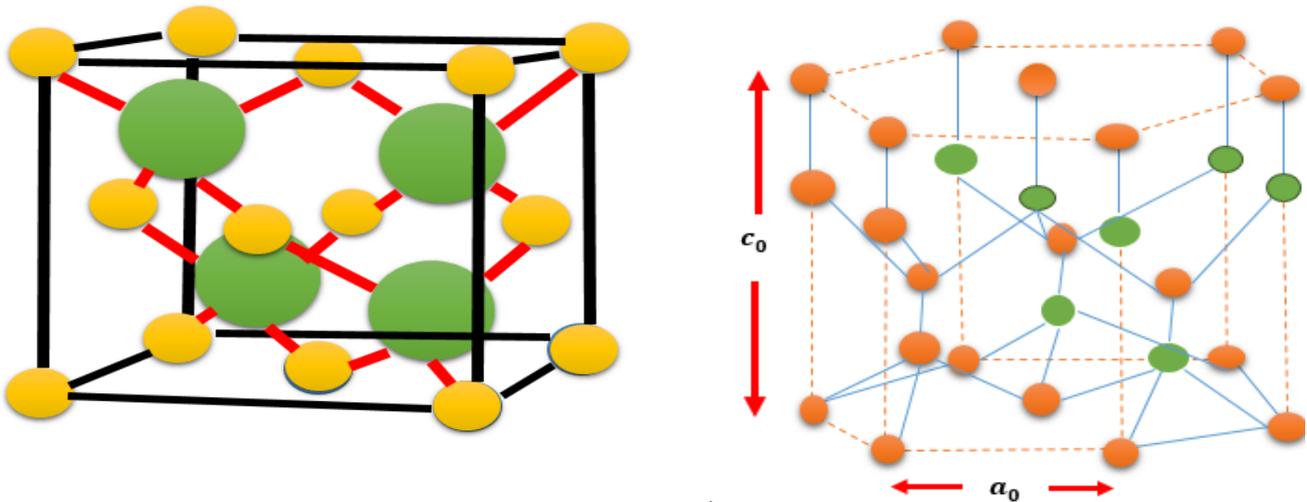


Figure I.5 : Structure de wurtzite avec les paramètres de maille c_0 et a_0 constitué de 2 sous-réseaux hexagonaux [21].

La structure wurtzite : Les semi-conducteurs existent sous forme de structure zinc blende, mais croissent généralement sous la forme d'une autre structure appelée structure wurtzite formé par deux réseaux de Bravais hexagonaux, cette dernière est la plus stable car tout système physique cherche à avoir la stabilité.

IV.2. L'intérêt des semi-conducteurs :

Dans l'ensemble des matériaux, les semi-conducteurs III-V constituent une classe bien définie, avec des propriétés physiques particuliers qui sont sources d'intérêt au plan de la connaissance fondamentale et à celui des applications

IV.3. Les Composés Binaires :

Les semi-conducteurs binaires de la classe (III-V) sont composés d'un élément de la colonne III et d'un autre élément de la colonne V de la classification périodique par exemple ; les composé a base Aluminium (AlP, AlAs, AlSb), ou les composés base galium (GaN, GaSb), d'indium (InN, InP, InAs, InSb)[22] .

IV.4. Les composés ternaires et quaternaires :

L'intérêt pratique des semi-conducteurs III-V est encore considérablement renforcé par la possibilité de réaliser des alliages par substitutions partielle de l'un des éléments par un autre élément de la même colonne. On sait par exemple obtenir des alliages ternaires du type $I_{(1-x)}$ ou quaternaire comme $Gax_{(1-x)}As_{(1-y)}$ [22] .

V. Généralités sur les émetteurs de lumières :

Les émetteurs optiques à semi-conducteurs, utilisés dans les liaisons par fibres optiques, sont très utilisés du fait de leur : [3] .

- ✓ petite taille.
- ✓ émission à des longueurs d'onde couvrant le visible et l'infrarouge et même l'ultraviolet.
- ✓ Bon rendement.
- ✓ Possibilité de modulation par le courant.
- ✓ Intégration facile.

Les matériaux semi-conducteurs utilisés pour leur développement sont à gap direct, donc à transitions radiatives .On distingue deux types d'émetteurs à semi-conducteurs :

- **les Diodes électroluminescentes (DEL)**
- qui constituent les éléments les plus simples.
- Elles couvrent tous le spectre visible et peuvent être modulées par le courant jusqu'à 100 MHz. Les DEL produisent un rayonnement monochromatique incohérent de faible puissance [3] .
- **les diodes laser (laser à semi-conducteurs)** qui sont les composants essentiels dans les transmissions par fibres optiques. Elles présentent un rayonnement cohérent et une bande passante de modulation de plusieurs GHz, avec une puissance optique émise pouvant atteindre quelques Watts [3] .

V.1. Les diodes électroluminescentes "LED" :

V.1.1. Les matériaux utilisés :

Le choix de la couleur dépend de l'utilisation :

- ✓ Les LED de couleur visible sont utilisées pour la visualisation (éclairage, affichage, témoins, indicateurs lumineux, feux tricolores et les feux de signalisation) alors que,
- ✓ Les LED IR sont utilisées dans les télécommandes, les barrières de comptage de personnes, dans certaines alarmes, pour certaines transmissions d'informations dans l'air et dans la transmission d'informations par fibre optique. Elles sont aussi utilisées sur les caméscopes permettant de "voir" la nuit [3] .

V.1.1.1. Emission dans le visible :

L'œil humain n'étant sensible qu'aux lumières d'énergie supérieure ou égale à 1.4eV (inférieur à 0.8m), les matériaux utilisés pour la fabrication de LED à émission dans le visible sont à énergie de gap 1.4 eV. Ce sont des composés III-V, souvent à base de gallium, comme les

Chapitre I: Généralités

alliages de type $\text{GaAs}_x\text{P}_{1-x}$ ou $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{P}$ dont l'énergie de gap E_g est une fonction de la fraction x ; $E_g(x)$

Dans le cas du $\text{GaAs}_{1-x}\text{P}_x$, par exemple, on a Pour l'émission dans le bleu les matériaux utilisés sont :

- ✓ Le SiC avec des dopages en Al(p) et N(n) (E_g 2.6 eV, 0.475 m), avec un rendement d'environ 0.001%, avec un spectre d'émission assez large du à des transitions indirectes.
- ✓ Le GaN (E_g 2.8 eV, 0.44 m) avec un rendement de 0.005%
- ✓ L'InGaN (0.45 -0.473 m).
- ✓ Ce n'est que dans les années 90 que les LED bleues furent commercialisées. Cela est dû à la difficulté de produire du bleu avec un matériau semi-conducteur.
- ✓ Il est plus aisé de réaliser des LED avec un petit gap car un grand gap est plus difficile à maîtriser. Il n'est donc pas aussi aisé de produire une LED bleue qu'une LED rouge [3] .

V.1.1.2. Emission dans l'infrarouge :

Les LED à IR, qui sont d'importantes sources pour la communication par fibres optiques, sont réalisées suivant la même configuration que celle des LED pour le visible mais à partir de matériaux à gap direct, ayant une bande interdite inférieure à 1.5 eV, tels le GaAs pour $\lambda = 0.87 \mu\text{m}$ ou le $\text{Ga}_{1-x}\text{In}_x\text{As}_{1-y}\text{P}_y$ qui couvre la gamme allant de 1 à 1.7 μm en jouant sur les fractions x et y de l'indium et du phosphore, respectivement.

V.1.1.3. Emission dans l'ultraviolet :

Pour les DEL émettant dans l'ultraviolet, les matériaux utilisés ont un gap plus grand. Un des matériaux utilisé est le GaN avec λ comprise entre 370 -390 nm. En outre, ce type de LED s'abime du fait du rayonnement UV. En effet, les ultraviolets attaquent la résine époxy et l'opacifie. Les LED UV ont l'avantage de posséder un spectre très fin, ce qui leur permet de ne pas émettre d'infrarouges et de la chaleur. Elles sont utilisées dans la constitution de détecteurs miniatures de faux billets, mais trouvent d'autres applications telles que détection de substances particulières réagissant aux UV (par fluorescence par exemple).

Les Diodes Electroluminescentes dans l'UV remplacent peu à peu les lampes traditionnelles en photochimie, biologie et dans les applications médicales.

V.2.Le laser :

V.2.1. Historique :

Le principe de l'émission stimulée(ou émission induite) est décrit dès 1916 par Albert Einstein. En 1950, Alfred Kastler (lauréat du prix Nobel de physique en 1966 propose un

procédé de pompage optique, qu'il valide expérimentalement, deux ans plus tard, avec Brossel et Winter. Mais ce n'est qu'en 1953 que le premier maser (au gaz ammoniac) est conçu par J. P. Gordon, H. J. Zeiger et Ch. H. Townes. Au cours des années suivantes, de nombreux scientifiques tels N. G. Bassov, Alexandre Prokhorov, Arthur Leonard Schawlow et Charles H. Townes contribuent à adapter ces théories aux longueurs d'onde du visible. Townes, Bassov, et Prokhorov partagent le Prix Nobel de Physique en 1964 pour leurs travaux fondamentaux dans le domaine de l'électronique quantique, qui mènent à la construction d'oscillateurs et d'amplificateurs basés sur le principe du Maser-Laser. En 1960, le physicien américain Théodore Maiman obtient pour la première fois une émission laser au moyen d'un cristal de rubis. Un an plus tard, Ali Javan met au point un laser au gaz (hélium et néon) puis en 1966, Peter Sorokin construit le premier laser à liquide. Les lasers trouvent très tôt des débouchés industriels. La première application fut réalisée en 1965 et consistait à usiner un perçage de 4,7 mm de diamètre et de 2 mm de profondeur dans du diamant avec un laser à rubis. Cette opération était réalisée en 15 min, alors qu'une application classique prenait 24 heures⁴.

En 1963 des chercheurs américains tels que White et Anderholm montrent qu'il est possible de générer une onde de choc à l'intérieur d'un métal à la suite d'une irradiation laser impulsionnelle. Les pressions exercées sont de l'ordre de 1 GPa, ou 3 FPs.

En 1967, Peter Holcroft découpe une plaque d'acier inoxydable de 2,5 mm d'épaisseur à une vitesse de 1 m/min, sous dioxygène avec un laser CO₂ de 300 W⁵ et conçoit la première tête de découpe.

Bien que les procédés soient démontrés, il faut attendre leurs associations à des machines adaptées pour qu'ils soient implantés en milieu industriel. Ces conditions sont remplies à la fin des années 1970. Et les premières plates-formes industrielles sont implantées en France dès les années 1980⁶. Dès lors le laser s'impose comme un outil de production industrielle dans le micro-usinage. Ses principaux avantages sont un usinage à grande vitesse de l'ordre de 10 m/min, sans contact, sans usure d'outil.

Le laser devient un moyen de lecture en 1974 avec l'introduction des lecteurs de codes barres. En 1978, les *laserdiscs* sont introduits, mais les disques optiques ne deviennent d'usage courant qu'en 1982 avec le disque compact. Le laser permet alors de lire un grand volume de données [22] .

V.2.2. Définition :

Le LASER est un procédé d'amplification de la lumière, défini en anglais par l'acronyme LASER: Light Amplification by Stimulated Emission of Radiation. L'amplification de la lumière par émission stimulée de photons produit une lumière qui est monochromatique, directionnelle, cohérente et de haute intensité.

Différentes sortes de lasers existent. Ils comprennent tous trois éléments nécessaires qui sont : le milieu émetteur, l'excitation et l'amplification. Parmi ces lasers nous distinguons: le laser à semi-conducteur ou la diode laser. La diode laser est un composant similaire à la diode électroluminescente, car elle est constituée d'une jonction p-n réalisée sur des matériaux à gap direct avec une région active où les porteurs injectés, par forte polarisation directe de la diode, se recombinent de façon radiative, produisant une lumière cohérente issue d'émissions stimulées de photons.

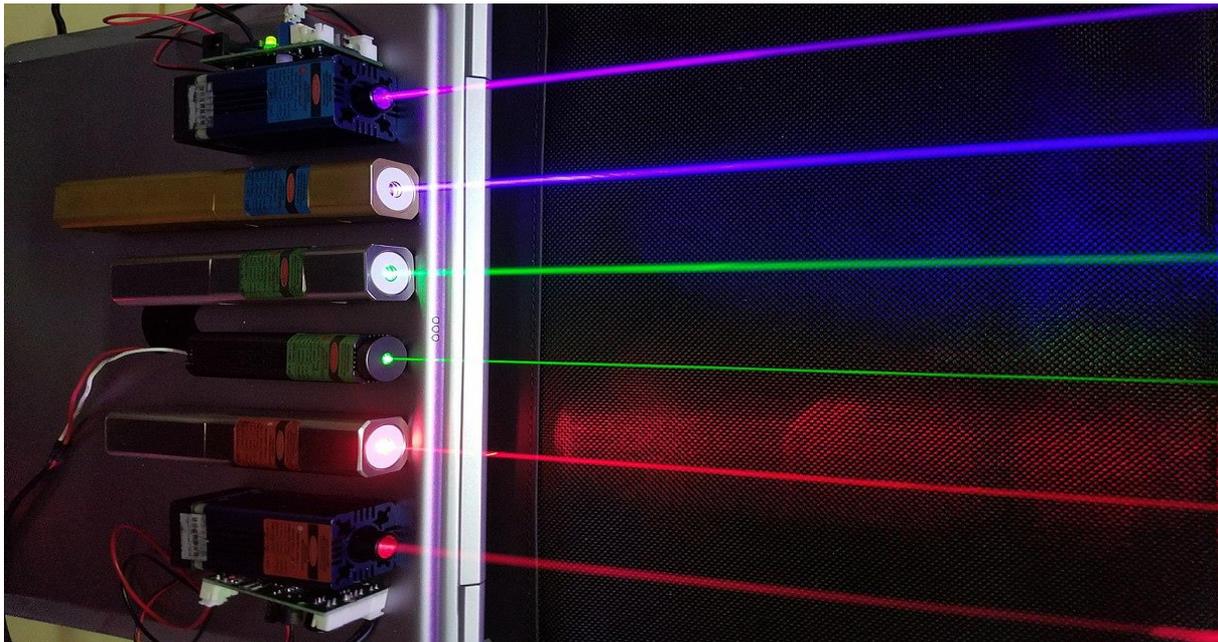


Figure 1.6 : les lasers

Matériaux utilisés pour les diodes laser :

La longueur d'onde de la lumière émise d'une diode laser est directement liée au matériau de la région active, région où a lieu le maximum d'émissions stimulées. Elle est une fonction de la largeur de la bande interdite et est déterminée par la concentration de dopants et la configuration de la zone active. Ainsi, Les mêmes types de matériaux et alliages utilisés pour les LED sont aussi utilisés pour les diodes laser [3] .

- ✓ Les premières diodes laser étaient réalisées à base d'homojonction GaAs en 1962 sans confinement latéral. Elles sont utilisées en régime pulsé à cause des fortes densités de courant d'injection qu'elles nécessitaient pour leur fonctionnement.
- ✓ Les diodes Laser actuelles sont à hétérojonctions et à base d'alliages ternaires (exemple : **GaAlAs**) et quaternaires (exemple : **GaInAsP**) et peuvent fonctionner en régimes continus et pulsés.

V.2.3. Principe D'un Laser :

V.2.3.1. Produire une Lumière Normale :

On commence d'abord par provoquer une décharge électrique dans un gaz, plusieurs atomes sont excités, les électrons dans l'atome se déplacent vers les orbites d'énergie inférieure ; c'est alors qu'une lumière est émise arbitrairement dans le temps, et dans des directions arbitraires a différentes longueurs d'ondes [23].

V.2.3.2. Produire la lumière d'un laser :

Avec la présence d'un milieu résonant le photon émis par un atome passe près de l'atome voisin il stimule l'électron à se déplacer vers une orbite plus faible d'énergie ; les photons émis sont identiques en tout point c'est-à-dire que deux photons ont la même direction, phase, longueur d'onde et énergie [23].

La lumière émise est donc monochromatique (toute la lumière est d'une seule longueur d'onde ou couleur), directionnelle (le faisceau d'un laser ne s'élargit pas aussi rapidement que la lumière) et aussi cohérente (toutes les ondes sont générées en phase les unes avec les autres) [23].

V.2.4. Principe de fonctionnement d'un laser :

L'effet Laser repose sur le phénomène d'émission stimulée de photons illustré dans le cas d'un laser semi-conducteur d'un électron et d'un trou. Générant un nouveau photon identique au premier : même longueur d'onde, même phase et même direction de propagation. Suite à ce processus, l'amplitude de l'onde est doublée : il s'agit d'un processus de gain qui aboutit à une

Chapitre I: Généralités

amplification du signal ; ce qui justifie l'acronyme *Light Amplification by Emission of Radiation (laser)* [24].

Un laser doit être composé de quatre éléments indispensables :

- ✓ **Un matériau actif** : lieu de recombinaisons stimulées.
- ✓ **Un système de pompage** : permettant l'inversion de population (nécessaire pour vaincre l'absorption).
- ✓ **Une cavité résonnante** : où passe plusieurs fois les photons dans le matériau actif.
- ✓ **Un coupleur optique** : permettant d'extraire une partie des photons de la cavité pour les collecter dans une structure guidée.

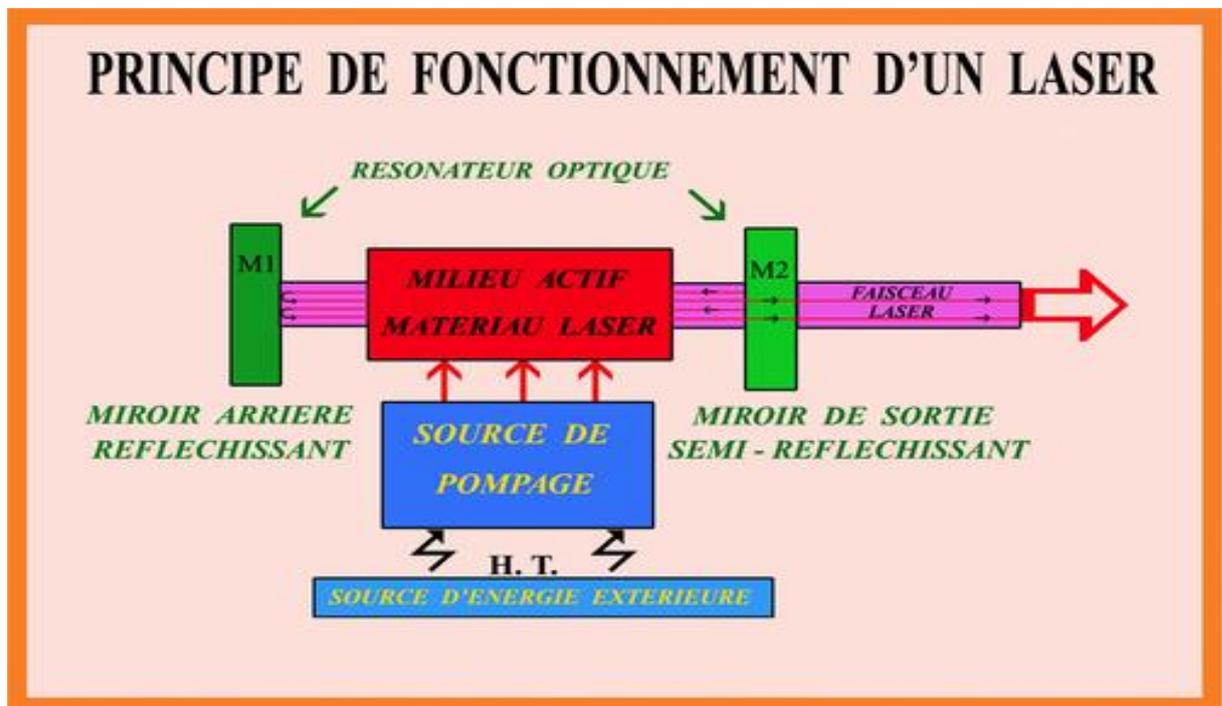


Figure I.7 : Principe de fonctionnement d'un laser

VI. Puits Quantiques :

VI.1. Définition de puits quantique :

Un puits quantique est constitué d'une fine couche quelques nm d'un matériau semiconducteur de faible gap entourée de matériaux de plus grand gap. On réalise ainsi un puits de potentiel artificiel de taille quantique dans lequel les porteurs libres du semi-conducteur (électrons et trous) vont se retrouver confinés sur des niveaux d'énergie discrets. A chacune des énergies liées permises à l'intérieur du puits est associée une fonction d'onde dont le carré représente la

Chapitre I: Généralités

densité de probabilité de présence sur le niveau d'énergie quantifiée. La structure à puits quantique, montrée dans la figure (1,8) :

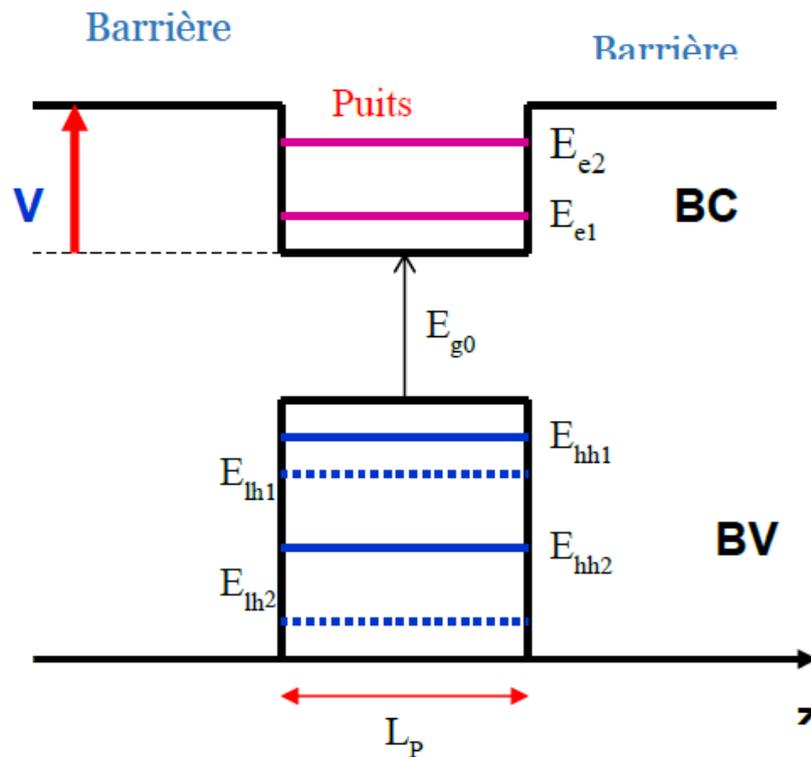


Figure I.8 : puits quantique.

où

E_{en} : Le nième niveau d'énergie des électrons.

E_{hnn} : Le nième niveau d'énergie des trous lourds.

E_{lhn} : Le nième niveau d'énergie des trous légers.

L'utilisation de puits quantiques au sein de la zone active engendre un confinement des électrons et des trous dans un plus faible volume, ce qui pour une injection donnée qui permet d'augmenter la densité de porteurs et donc d'atteindre l'inversion de population plus facilement. Selon la nature de la discontinuité de bandes interdites à l'interface puits-barrière, deux types de puits quantiques existent figure 1.9.

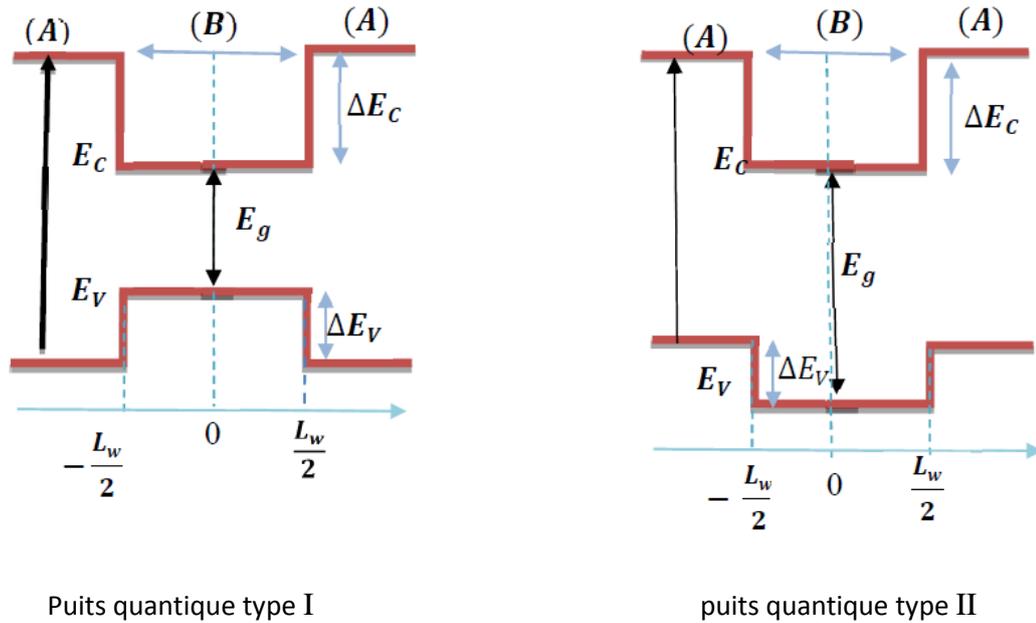


Figure I.9 : les types du puits quantique.

VI.1.1. Puits quantiques de type-I :

Les électrons et les trous sont confinés dans le même matériau constituant le puits. L'énergie du photon dépend des énergies de confinement des porteurs et du gap du matériau puits.

VI.1.2. Puits quantiques de type-II :

Les porteurs sont confinés dans deux matériaux adjacents. Dans ce cas, l'énergie du photon est fonction des énergies de confinement des porteurs mais aussi des gaps de deux matériaux formant l'hétéro structure [25].

VI.2. L'équation de Schrödinger dans un puits quantique :

En 1926 Schrödinger a montré que la fonction d'onde et l'énergie sont la solution d'une équation au dérivé partielle du second ordre cette équation s'écrit.

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta \Psi^i(z) + V(z) \Psi^i(z) = E^i \Psi^i(z) \quad (1.1)$$

où :

Δ : le Laplatien.

m_e : la masse de l'électron.

V : l'énergie potentiel.

Chapitre I: Généralités

E^i : l'énergie totale de l'électron.

Ψ^i : la fonction d'onde.

$\hbar = \frac{h}{2\pi}$: h est la constante de Planck.

On peut le lire sous la forme :

$$\left[- \left(\frac{\hbar^2}{8\pi^2 m_e} \right) \Delta + V \right] = E^i \Psi^i \quad (1,2)$$

$$H^i \Psi^i = E^i \Psi^i \quad (1,3)$$

où H^i : l'opérateur Hamiltonien.

La résolution de l'équation de Schrödinger nécessite la connaissance de terme du potentiel ce qui veut dire que l'équation de Schrödinger et l'équation de Poisson sont couplées. Le potentiel V varie suivant un axe perpendiculaire à la structure de l'hétérojonction, ce potentiel est égal à la somme de 4 types de potentiel la potentielle image qui est due à la différence des constantes diélectriques.

- ✓ Le potentiel périodique qui est dû à l'interaction des ions.
- ✓ Le potentiel d'inversion qui est dû à l'accumulation des électrons à l'interface.
- ✓ Le potentiel de déplétion qui est dû à l'ionisation des impuretés.

Le puits de l'énergie potentielle vu par les électrons de la bande de conduction est entièrement déterminé par la donnée de sa largeur L_w et de sa profondeur V_0 . Considérons l'exemple d'un puits simple dans la bande de conduction. Pour des raisons de commodité, l'origine des énergies est prise au fond du puits. Le profil du potentiel est défini par la suite comme suit.

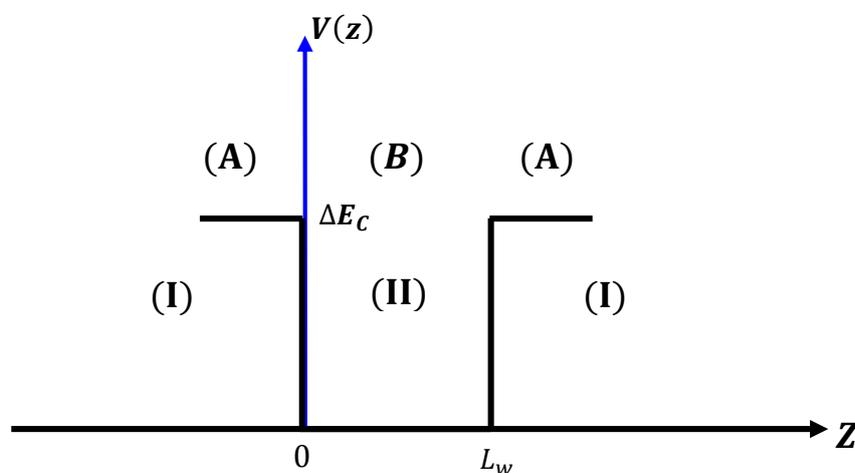


Figure I.10 : Puits quantique conventionnel.

$$V(z) = \begin{cases} \Delta E_c & z < 0 \text{ et } z > L_w \\ 0 & 0 < z < L_w \end{cases} \quad (1,4)$$

VI.2.1. Puits quantique de profondeur fini :

Lorsque l'énergie de confinement des électrons n'est plus négligeable devant la hauteur de la barrière de potentiel, c'est soit à cause de ΔE_c qui n'est pas très important ou de L_w qui est petit.

En posant $\Delta E_c = V_0$ le potentiel s'écrit :

$$V(z) = V_0 \text{ pour } z < 0 \text{ et } z > L_w \quad (1,5)$$

$$V(z) = 0 \text{ pour } 0 < z < L_w \quad (1,6)$$

On trouve dans les trois régions (I) ($z < 0$), (II) ($0 < z < L_w$), (I) ($z > L_w$) :

$$\frac{d^2 \xi_I(z)}{dz^2} - \frac{2m_2^*}{\hbar^2} (V_0 - E_n) \xi(z) = 0 \quad (1,7)$$

$$\frac{d^2 \xi_{II}(z)}{dz^2} - \frac{2m_2^*}{\hbar^2} E_n \xi(z) = 0 \quad (1,8)$$

$$\frac{d^2 \xi_I(z)}{dz^2} - \frac{2m_2^*}{\hbar^2} (V_0 - E_n) \xi(z) = 0 \quad (1,9)$$

Donc la solution de l'équation après la condition limite de chaque région est de la forme :

$$\xi_I(z) = A e^{k_1 z} + B e^{-k_1 z} \quad (1,10)$$

Compte tenu de la condition aux limites $\xi_I(z \rightarrow -\infty) = 0$ entraîne $A = 0$, la fonction d'onde s'écrit :

$$\xi_I(z) = A e^{k_1 z} \quad (1,11)$$

$$\text{Avec } k_1 = \sqrt{2m_1^* (V_0 - E_n)} / \hbar$$

$$\xi_{II}(z) = B \sin(k_2 z + \varphi) \quad (1,12)$$

$$\text{Avec } k_1 = \sqrt{2m_2^* E_n} / \hbar$$

$$\xi_I(z) = C' e^{k_1 z} + C e^{-k_1 z} \quad (1,13)$$

Compte tenu de la condition $\xi_I(z \rightarrow +\infty) = 0$ entraîne $C' = 0$, la fonction d'onde s'écrit :

$$\xi_I(z) = C e^{-k_1 z} \quad (1,14)$$

Dans ce cas les conditions aux limites sont données par :

En $z = 0$

$$\xi_I(0) = \xi_{II}(0) \rightarrow A = B \sin \varphi \quad (1,15)$$

$$\frac{1}{m_1^*} \xi_I(0) = \frac{1}{m_2^*} \xi_{II}(0) \rightarrow A \frac{k_1}{m_1^*} = B \frac{k_2}{m_2^*} \cos \varphi \quad (1,16)$$

$$\xi_{II}(L_w) = \xi_I(L_w) \rightarrow B \sin(k_2 L_w + \varphi) = C e^{-k_1 L_w} \quad (1,17)$$

$$\frac{1}{m_2^*} \xi_{II}(L_w) = \frac{1}{m_1^*} \xi_{III}(0) \rightarrow B \frac{k_2}{m_2^*} \cos(k_2 L_w + \varphi) = -C \frac{k_1}{m_1^*} C e^{-k_1 L_w} \quad (1,18)$$

En divisant les équations (1,15) sur (1,16) et (1,17) sur (1,18) on obtient respectivement :

$$\tan \varphi = \frac{k_2 m_1^*}{k_1 m_2^*} \quad (1,19)$$

$$\tan(k_2 L_w + \varphi) = -\frac{k_2 m_1^*}{k_1 m_2^*} \quad (1,20)$$

$$\text{Compte tenu de la relation : } \sin^2 \alpha = \frac{1}{\left(1 + \frac{1}{\tan^2 \alpha}\right)} \quad (1,21)$$

$$\text{L'expression (1,19) donne : } \quad \sin \varphi = \frac{\frac{k_2}{m_2}}{\sqrt{\frac{k_2^2}{m_2^2} + \frac{k_1^2}{m_1^2}}} \quad (1,22)$$

D'autre part la relation $\tan \varphi = -\tan(k_2 L_w + \varphi)$ entraîne $\varphi = -(k_2 L_w + \varphi) + n\pi$

$$\text{Où } n \text{ est un nombre entier } k_2 L_w = n\pi - 2\varphi \quad (1,23)$$

Soit, en explicitant φ , k_1 et k_2 en (1,22):

$$\frac{\sqrt{2m_2^* E_n}}{\hbar} = n\pi - 2 \arcsin \sqrt{\frac{E_n}{\frac{V_0 m_2^*}{m_1^*} + E_n \left(1 - \frac{m_2^*}{m_1^*}\right)}} \quad (1,24)$$

VII. Masse effective dans le vide :

VII.1. Masse effective des électrons :

Dans la bande de conduction un électron est caractérisé par une fonction d'onde qui représente la somme d'ondes de Bloch d'orbitale anti liante. En termes corpusculaires, c'est une particule dans un potentiel cristallin. On représente cette particule quasi-libre de charge e^- et de masse m_e^* qu'on appelle masse effective de l'électron. La masse effective des électrons est

inversement proportionnelle à la dérivée seconde de la courbe de dispersion de l'énergie dans l'espace k

$$m_e^* = \frac{\hbar^2}{d^2E^2/dK^2} \quad (1,25)$$

Dans le cas d'un semi-conducteur à gap direct, la bande de conduction est une vallée, centrée en $k_0=0$ et isotrope au voisinage de k_0 . Si on appelle E_c l'énergie minimum, l'expression $E(k)$ s'écrit :

$$E(K) = E_c + \frac{1}{2} \frac{d^2E(K)}{dK^2} K^2 \quad (1,26)$$

Ou, compte tenu de la définition de la masse effective équation (1,25))

$$E(k) = E_c + \frac{\hbar^2 K^2}{2m_e^*} \quad (1,27)$$

Ainsi l'électron au voisinage du minimum de la bande de conduction se comporte comme un électron libre de masse m_e^* .

Dans la mesure où la courbure de la bande de conduction varie peu au voisinage du minimum, la masse effective est constante et par suite l'énergie $E(K)$ varie quadratiquement en fonction du vecteur d'onde K .

Cette loi de variation constitue ce que l'on appelle l'approximation des bandes paraboliques.

Lorsque l'énergie cinétique des électrons devient très importante, l'électron s'éloigne de E_c dans l'espace des énergies, sa masse varie et l'approximation parabolique n'est plus justifiée.

Dans le cas d'un semi-conducteur à gap indirect, la bande de conduction est multi vallée et anisotrope avec plusieurs minima équivalents situés en différents points de la zone de Brillouin.

Les surfaces d'énergies constantes au voisinage des minima K_0 sont des ellipsoïdes. Les expressions des masses effectives sont données par :

$$m_i^* = \frac{\hbar^2}{d^2E^2/dK^2} \quad m_t^* = \frac{\hbar^2}{d^2E^2/dK^2} \quad (1,28)$$

Avec m_i^* : masse effective de l'électron de la vallée considérée, dans son mouvement suivant l'axe de révolution de l'ellipsoïde, appelée aussi masse effective longitudinale.

m_t^* : masse effective de l'électron dans son mouvement dans le plan perpendiculaire à l'axe de révolution, appelée aussi masse effective transversal [26].

VII.2. Masse effective des trous :

La masse effective des trous est définie comme celle des électrons, cependant la bande de valence des semi-conducteurs cubique est composée de deux branches dégénérées en $K=0$. Les

énergies des trous sont comptées positivement vers le bas. La bande de plus grande courbure, bande inférieure, correspond à des trous de masse effective inférieure (bande des trous légers) et la bande de plus faible courbure, bande supérieure, correspond à celle des trous lourds

$$m_{hh} = \frac{m_{hh}^*}{y_1 + 2y_2} \quad m_{lh} = \frac{m_{lh}^*}{y_1 - 2y_2} \quad (1,29)$$

y_1 et y_2 paramètre de Luttinger [26].

VIII. Modèle physique :

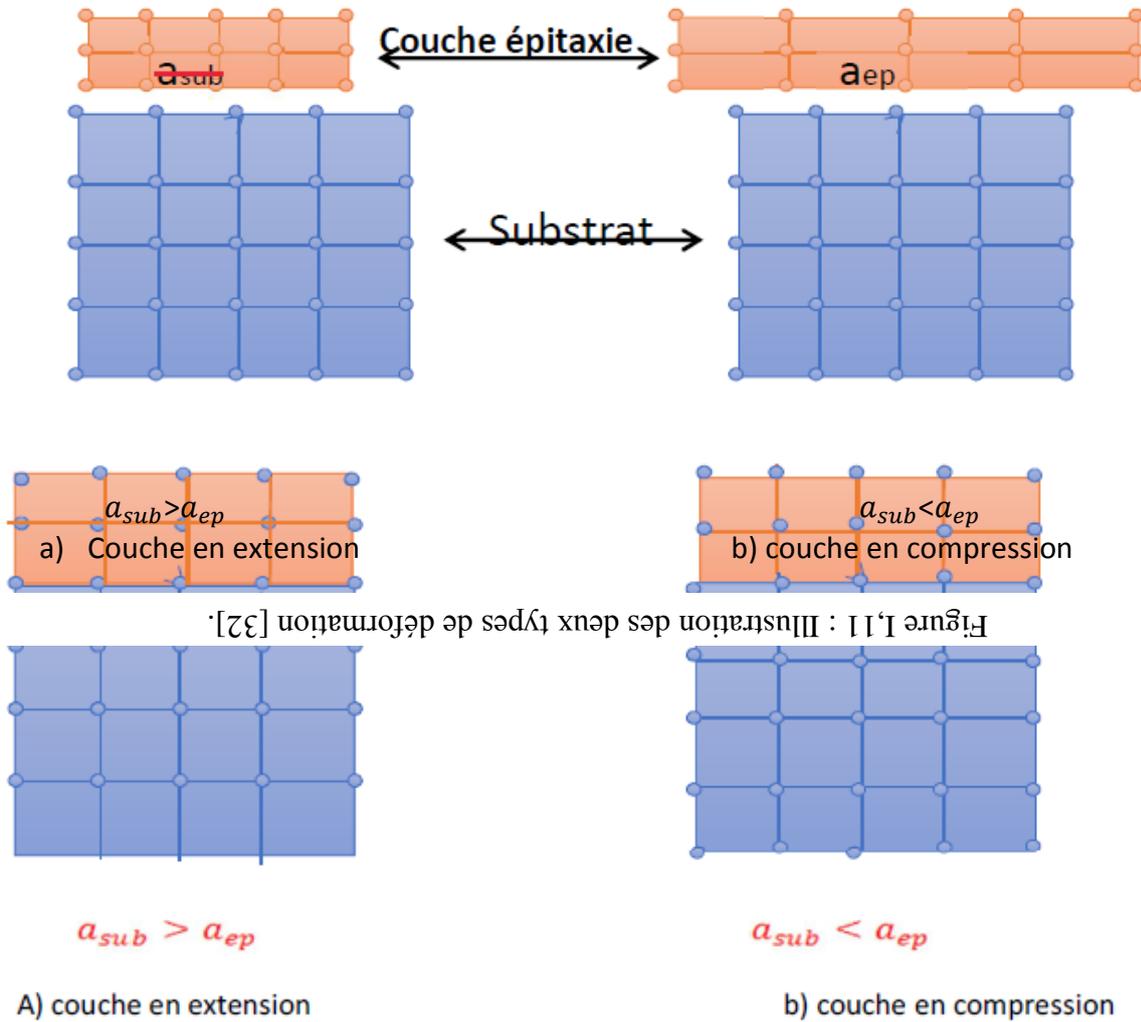
VIII.1. Paramètre de maille :

Le paramètre de maille d'une telle structure dépend de la nature des éléments chimiques mis en jeu. Une maille cristalline est d'autant plus grande que le numéro atomique des éléments constituants est grand. Ainsi dans le cas d'une structure ternaire $\text{In}_x \text{Ga}_{(1-x)}\text{N}$, l'incorporation d'indium dans la maille cristalline de GaN augmente le paramètre de maille a de l'alliage. Pour $\text{In}_x \text{Ga}_{(1-x)}\text{N}$, on considère cette variation comme quasi-linéaire et donnée par la loi de Vegard [27] :

$$a_{\text{In}_x \text{Ga}_{(1-x)}\text{N}} = x a_{\text{InN}} + (1-x) a_{\text{GaN}} \quad (1,30)$$

VIII. 2. La contrainte :

L'hétéroépitaxie du matériau InGaN sur GaN de paramètre de maille initialement différent provoque une contrainte. La maille du matériau épitaxié se déforme de manière élastique dans les deux directions parallèle et perpendiculaire. Dans le cas où les couches épitaxiées sont suffisamment fines, la maille du matériau épitaxié se déforme de manière élastique dans les deux directions parallèle et perpendiculaire à la surface de croissance, et selon que le paramètre de la couche épitaxie InN est plus petit ou plus grand que celui du substrat GaN, la déformation est soit un allongement "couches en tension", soit un rétrécissement "couches en compression" [28].



Cette différence de maille provoque une déformation de la couche épitaxiale, soit en extension figure 2.7.a, ou en compression figure 2.7.b. Par des déformations biaxiales (ϵ_{xx} et ϵ_{yy}) et uni axiales (ϵ_{zz}).

La déformation biaxiales dans le plan de croissance :

$$\epsilon_{//} = \epsilon_{xx}(x) = \epsilon_{yy}(x) = \frac{a_s - a_e(x)}{a_e(x)} \tag{1,31}$$

La déformation dans la direction de croissance :

$$\epsilon_{\perp} = \epsilon_{zz}(x) = -2 \frac{c_{12}(x)}{c_{11}(x)} \epsilon_{xx}(x) \tag{1,32}$$

- ϵ : la déformation ou le désaccord de maille.
- a_s : le paramètre de maille du substrat (GaAs).
- a_e : le paramètre de maille de la couche épitaxiée.
- $C_{i,j}$: les coefficients d'élasticité.

Soit $\vec{X} = (x, y, z)$, la position d'un atome de cristal du matériau SCI avant épitaxie. Sa nouvelle position est : $\vec{X}' = \epsilon_1 \vec{X}$ avec :

$$\epsilon_1 = \begin{pmatrix} \epsilon_{xx} & 0 & 0 \\ 0 & \epsilon_{yy} & 0 \\ 0 & 0 & \epsilon_{zz} \end{pmatrix} \quad (1,33)$$

ϵ_1 est le tenseur de déformation du cristal dans le cas d'une déformation biaxiale .

$$\epsilon_{xx} = \epsilon_{yy} = \frac{a_s - a_e}{a_e} \quad (1,34)$$

a_s étant le paramètre de maille du substrat et a_e celui de la couche déposée .

De plus , la théorie de l'élasticité nous permet d'écrire les relations constitutives entre le tenseur d'élasticité C_{ij} ,le tenseur de la contrainte σ et le tenseur de d'formation ϵ_1 .

$$\begin{bmatrix} \sigma_{xx} \\ \sigma_{yy} \\ \sigma_{zz} \\ \sigma_{xy} \\ \sigma_{xz} \\ \sigma_{yz} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{11} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{12} & C_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{11} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{11} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{11} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \epsilon_{xx} \\ \epsilon_{yy} \\ \epsilon_{zz} \\ \epsilon_{xy} \\ \epsilon_{xz} \\ \epsilon_{yz} \end{bmatrix} \quad (1,35)$$

C_{ij} sont les constantes d'élasticité.

Effet de la contrainte sur le Gap d'énergie :

L'effet de la contrainte sur les bandes de valence et de conduction peut être décomposé en deux composantes [29].

- ✓ Une composante hydrostatique, qui diminue l'énergie de bande interdite dans le cas d'une augmentation de volume ou qui l'augmente dans le cas contraire.
- ✓ Une composante de cisaillement qui a pour effet de lever la dégénérescence trous lourds, trous légers du haut de la bande de valence figure

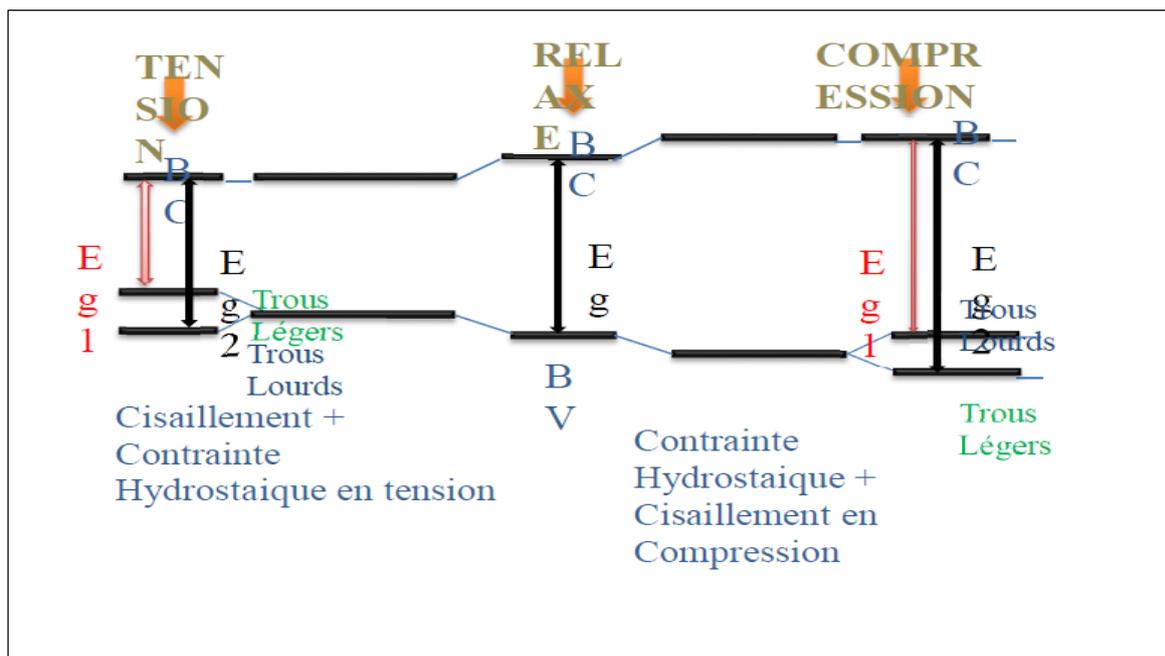


Figure I.12 : Évolution de l'énergie de la bande interdite en fonction de l'état de contrainte d'une couche déposée sur un substrat [32]].

En première approximation, même si les boîtes quantiques ne sont pas symétriques dans le plan perpendiculaire à l'axe de croissance, rappelons que la décomposition de la contrainte en première approximation, même si les boîtes quantiques ne sont pas symétriques dans le plan perpendiculaire à l'axe de croissance, rappelons que la décomposition de la contrainte hydrostatique et biaxiale conduit aux composantes de déformations suivantes :

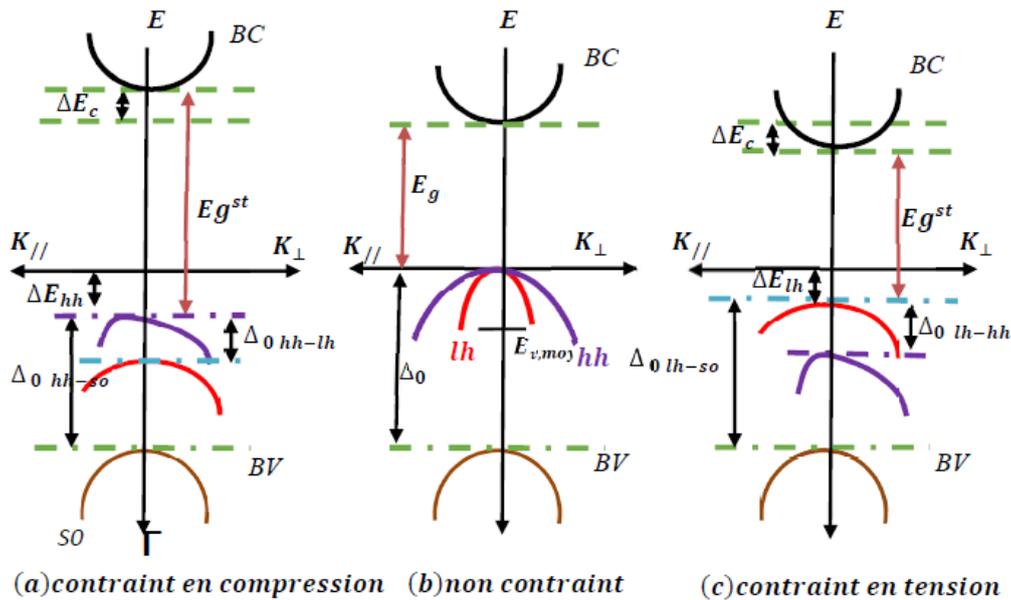
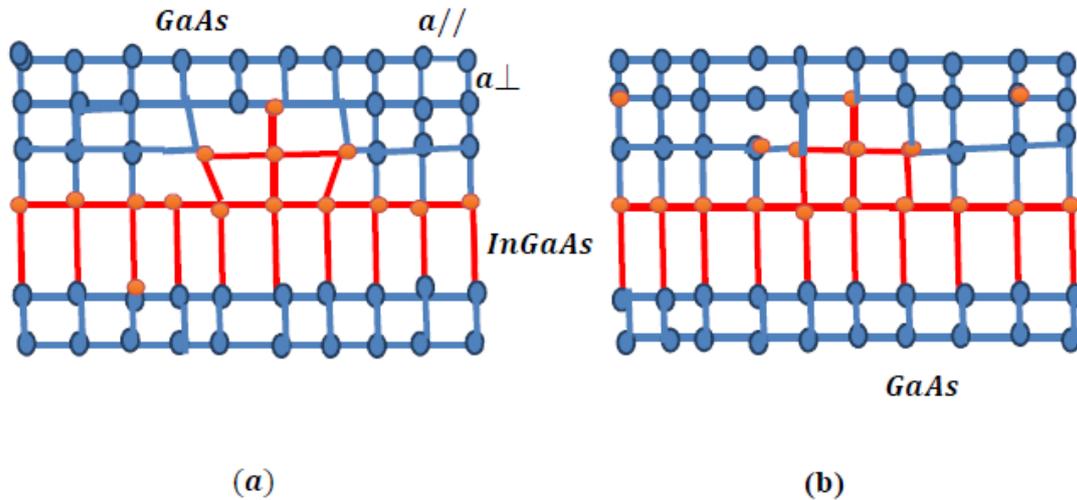


Figure I.13 : Structure de bande d'un semi-conducteur à gap direct [33].

VIII.4 Epaisseur critique :

L'épaisseur au-delà de laquelle la couche épitaxiale commence à reprendre sa forme est appelée épaisseur critique. Cette épaisseur critique dépend des propriétés mécaniques des matériaux (coefficients élastiques C_{ij}), ainsi que du degré de désaccord paramétrique entre le substrat et la couche épitaxiale [30]. Si l'épaisseur de la couche épitaxiale est supérieure à l'épaisseur critique, les mailles ne subissent plus les contraintes mécaniques imposées par le substrat et le paramètre de maille. Dans notre calcul, on a utilisé le modèle le plus classique, celui de K. Köksal et B. Gonul, qui traite le cas d'un matériau faiblement désaccordé par rapport au substrat (désaccord de maille $< 2\%$). La valeur de l'épaisseur critique h_c qui en résulte dans le cas d'un matériau de structure sphalérite (zinc blende) épitaxiale sur la surface n'est donnée par l'équation suivante [31].

$$h_c = \frac{a_e}{\beta\sqrt{2\pi\Delta_a}} \times \frac{1-(0,25.Y)}{(1+y)} \times \ln\left(\frac{h_c\sqrt{2}}{a_e} + 1\right) \quad (1,36)$$



(a) Couche contrainte en compression.

(b) Couche contrainte relaxée.

Figure I.14 : Schéma montrant une couche contrainte en compression (a) et Une couche contrainte relaxée (b) [34].

Dans notre calcul, on a utilisé le modèle le plus classique, celui de K. Köksal et B.Gonul, qui traite le cas d'un matériau faiblement désaccordé par rapport au substrat (désaccord de maille $< 2\%$). La valeur de l'épaisseur critique h_c qui en résulte dans le cas d'un matériau de structure sphalérite (zinc blende) épitaxie sur la surface n'est donnée par l'équation suivante [31].

Δ_a : Le désaccord paramétrique qui est donné par :

$$\Delta_a = \frac{a_s - a_e}{a_s} \quad (1,37)$$

γ : Le coefficient de poisson qui est donné par :

$$\gamma = \frac{C_{12}}{C_{11} + C_{12}} \quad (1,38)$$

Où, C_{11} et C_{12} sont les constantes d'élasticité obtenues par l'interpolation linéaire des binaires InAs, GaAs.

a_e : Paramètre de maille de la couche relaxée.

β : C'est un coefficient égal à 1 dans le cas d'un super-réseau ; à 2 pour un puits quantique

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

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

Tableau : Les valeurs de β pour différents types de puits quantique [31].
 $\text{Ga}_{(1-x)}\text{In}_x\text{N}$:

Structure	Puits quantique	Super réseaux
Valeur de β	2	1

C'est un alliage à gap direct composé par deux binaires le GaN et InN, le gap de cet alliage varie de 0,64 eV à 3,435eV, il est souvent utilisé comme puits quantique et un composant clé dans la région active des LED et des diodes lasers émettant dans le bleu [29].

Nous démontrons la variation des gaps d'énergie et Δ_{SO} en fonction de la composition x sur la figure , en utilisant les équations (1,39) suivantes [30] :

$$E_g^{\Gamma}(x) = (1-x)3,435 + x0,64 - x(1-x)3 \quad (1,39)$$

$$\Delta_{SO}(x) = (1-x)(-0,06) + x(-0,023) - x(1-x)0$$

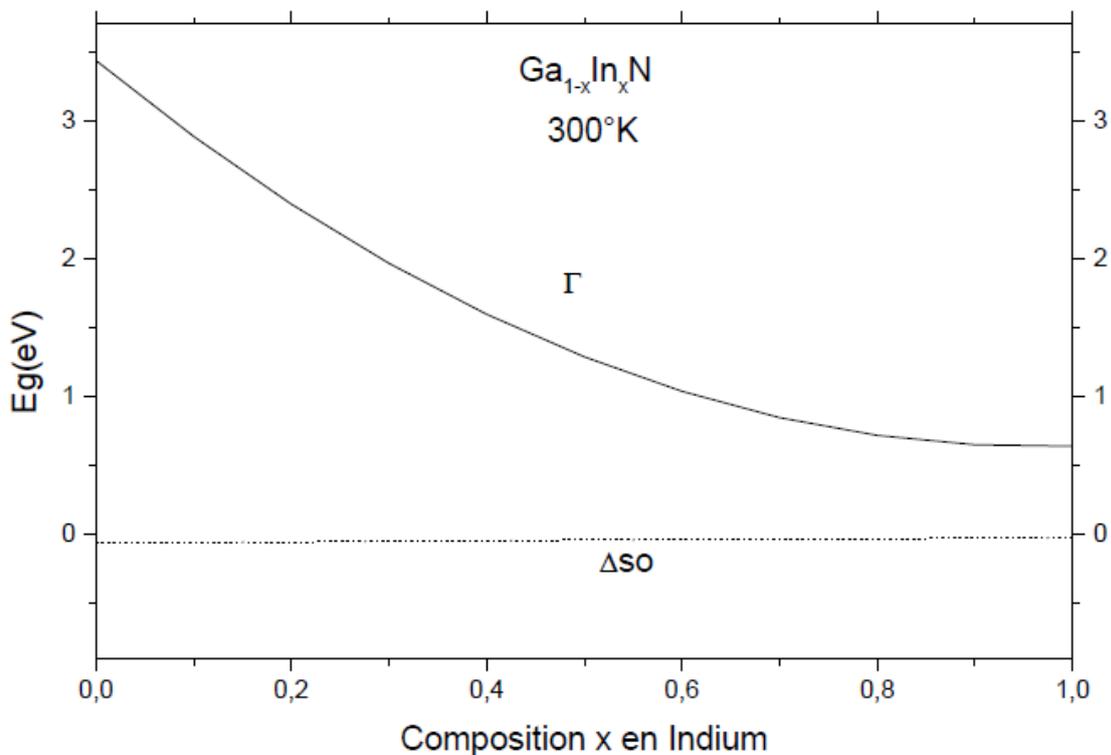


Figure I.15 : Variation des énergies du gap aux points Γ , Δ_{SO} en fonction de la composition de l'indium de l'alliage ternaire $\text{Ga}_{(1-x)}\text{In}_x\text{N}$.

Chapitre I: Généralités

Le gap dans le $\text{Ga}_{(1-x)}\text{In}_x\text{N}$ est direct en toute la composition en indium, y a pas un croisement $\Delta_{SO-\Gamma}$ d'où y a pas un effet Auger, nous constatons qu'il y a un désordre important dans cet alliage qui a donné un bowing important de l'ordre de 3eV.

Les variations des masses effectives en fonction de la composition d'alliage sont calculées à partir des équations (1.40) de l'alliage $\text{In}_x\text{Ga}_{(1-x)}\text{N}$ qui sont données comme suit [30] :

$$m_e^*(\Gamma) = (1-x)0,171 + x0,119 - x(1-x).3$$

$$m_{hh}^*(\Gamma) = (1-x)0,321 + x1,63$$

$$m_{lh}^*(\Gamma) = (1-x)0,013 + x0,27 \quad 1,40)$$

$$m_{so}^*(\Gamma) = (1-x)0,102 + x0,65$$

La figure I.15 représente les variations des masses effectives m_e^* , m_{hh}^* , m_{lh}^* , m_{so}^* en fonction de la composition d'alliage.

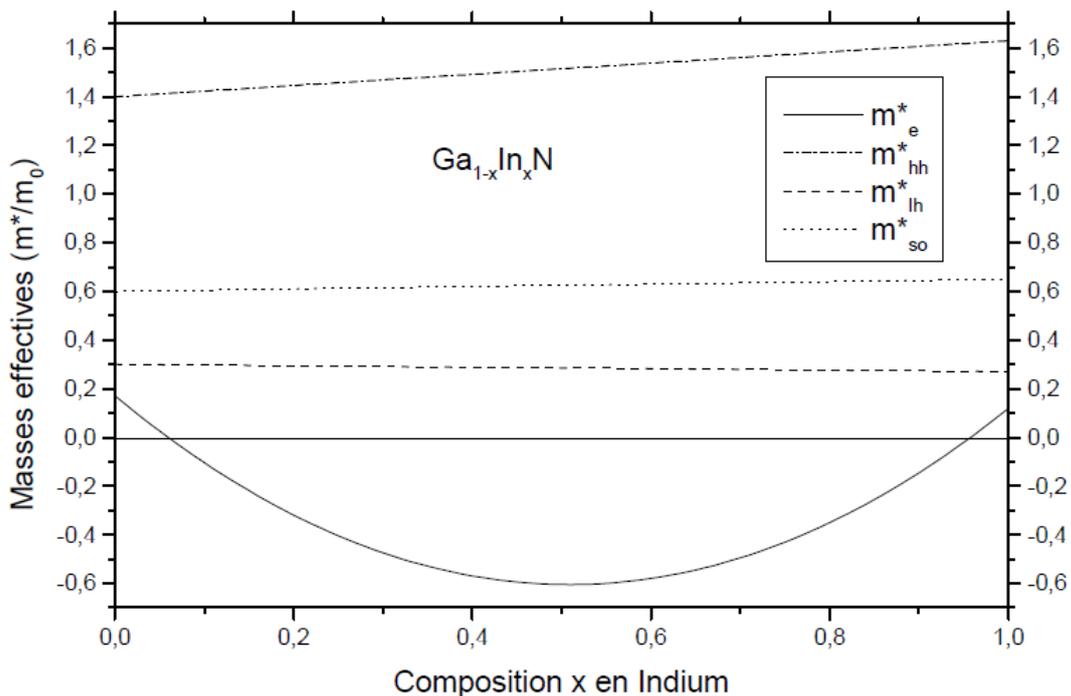


Figure I.16 : Variation des masses effectives de $\text{In}_x\text{Ga}_{(1-x)}\text{N}$ en fonction de la composition en indium

Comme on peut le voir sur cette figure, la variation m_e^* est fortement non linéaire qui présente même des valeurs négatives (comportement inverse de la particule : l'électron se comporte

Chapitre I: Généralités

comme un trou et vice-versa).Ce résultat est due à la chimie difficile de l'indium et de l'azote ,avec un très fort effet de désordre d'alliage .

La contrainte du système $\text{In}_x \text{Ga}_{(1-x)} \text{N}/\text{GaN}$ est démontrée sur la figure I.16 ;

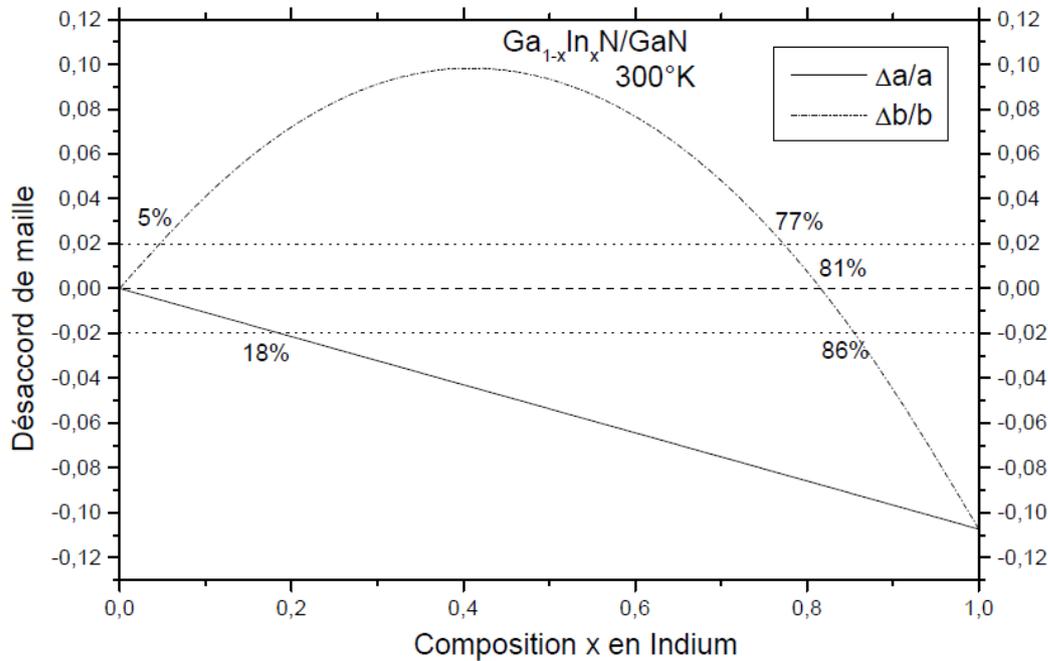


Figure I.17 :Variation du désaccord de maille en fonction de la composition x en indium de la couche $\text{In}_x \text{Ga}_{(1-x)} \text{N}$ sur substrat de GaN .

Pour la variation, linéaire, la contrainte est faible à de petite composition en indium pour $x < 18\%$, la couche $\text{In}_x \text{Ga}_{(1-x)} \text{N}$ est comprimée par rapport au substrat Ga N. Quand $x > 18\%$ la contrainte est plus forte cela du a la nature chimique des éléments constituant l'alliage comme par exemple Indium qui a une chimie difficile et au désordre d'alliage qui est très fort pour de composition supérieur a 18%. Pour la variation non linéaire, la contrainte est faible à de petite composition en indium pour $0 < x < 5\%$ (la couche $\text{In}_x \text{Ga}_{(1-x)} \text{N}$ est détendue par rapport au substrat GaN),et pour $81\% < x < 86\%$ (la couche $\text{In}_x \text{Ga}_{(1-x)} \text{N}$ est comprimée par rapport au substrat Ga N) :la contrainte est trop forte pour $5\% < x < 81\%$ et pour $86\% < x < 100\%$.

Conclusion :

Dans ce chapitre, on a regroupé tout un tas des notions théoriques commençons par l'introduire des composants optoélectronique afin d'entamer le concept de semi-conducteur, les émetteurs de la lumière, le sdiodes lasers, tous cela faite pour bien comprendre la théorie avant de passer à la partie simulation. Dans le chapitre suivant on va étudier les résultats de la simulation de matériaux InGaN / GaN

Chapitre II : Résultats et discussions.

I. Introduction :

Dans ce chapitre, nous allons commenter et interpréter les résultats obtenus par la simulation de la structure $\text{In}_x\text{Ga}_{(1-x)}\text{N}/\text{GaN}$, de ce fait, nous allons utiliser logiciel Matlab. Ces résultats nous ont permis d'optimiser notre structure après l'étude de quelques paramètres électroniques tels que : paramètre de maille, le désaccord de maille, l'épaisseur critique, énergie de transition, longueur d'onde d'émission...etc.

II. Paramètre de maille :

La figure II.1, représente l'évolution du paramètre de maille de la couche active $\text{In}_x\text{Ga}_{(1-x)}\text{N}$ en fonction de la concentration d'indium (In) à $T=300\text{K}$ (voir l'annexe A).

Nous observons qu'il y a une augmentation linéaire selon la loi de Vegard entre la concentration d'indium (In) et le paramètre de maille (a) de la couche épitaxie $\text{In}_x\text{Ga}_{(1-x)}\text{N}$ par exemple : pour $x=0.2$ on a $a=4,5\text{\AA}$ et pour $x = 0,6$ on a $a=4,8\text{\AA}$.

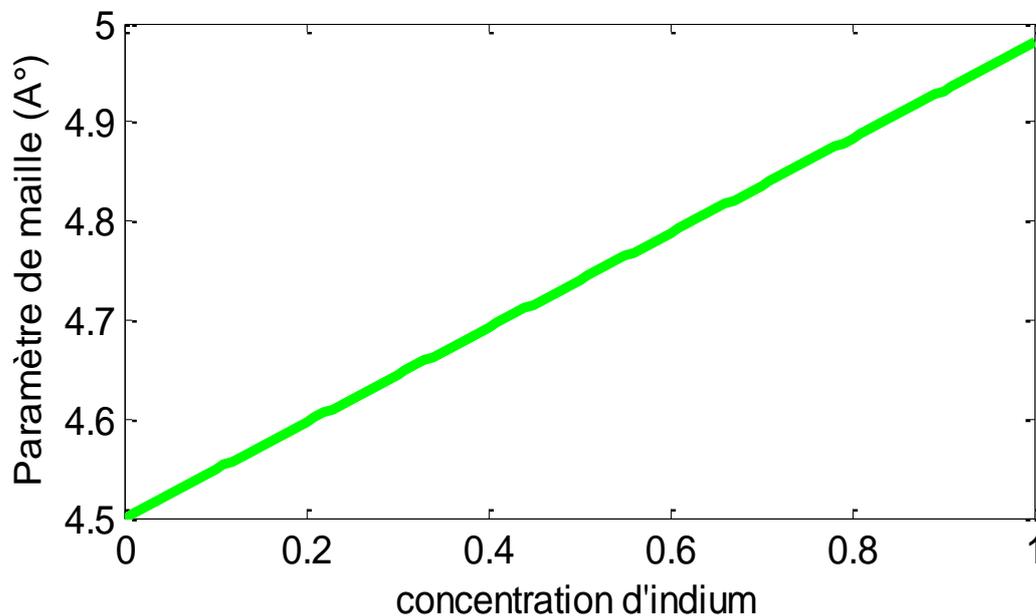


Figure II.1 : variation du paramètre de maille en fonction de la concentration d'indium (In).

Chapitre II : Résultats et discussions

Lorsqu'on a une différence entre les paramètres de mailles de la couche active et le substrat (désaccord de maille), cela génère une déformation de la structure que ce soit par compression lorsqu'on a : $a_s < a_e$, ou bien l'extension dans le cas inverse.

III. Désaccord de maille :

La figure II.2 : représente la variation de la contrainte (ε) en fonction de la concentration d'indium (In) à 300K

Nous observons qu'il y a une relation proportionnelle et linéaire entre l'augmentation de la contrainte (ε) et la concentration d'indium (In).

Nous remarquons, également que les valeurs de la contrainte sont négatives pour n'importe quelle valeur de la concentration d'indium, cela signifie qu'il y a une contrainte compressive, par exemple lorsque la concentration d'indium égale à 0,1 ; 0,3 ; 0,4 on a une déformation 1% , 3% et 4%, successivement.

Dans notre étude, on voudrait que la structure soit stable et fiable, d'après l'expérimental, nous pouvons fixer la valeur de la contrainte pour avoir cette condition, donc toutes les valeurs de la concentration d'indium correspond ou inférieur à $\varepsilon = 4\%$ sont acceptables.

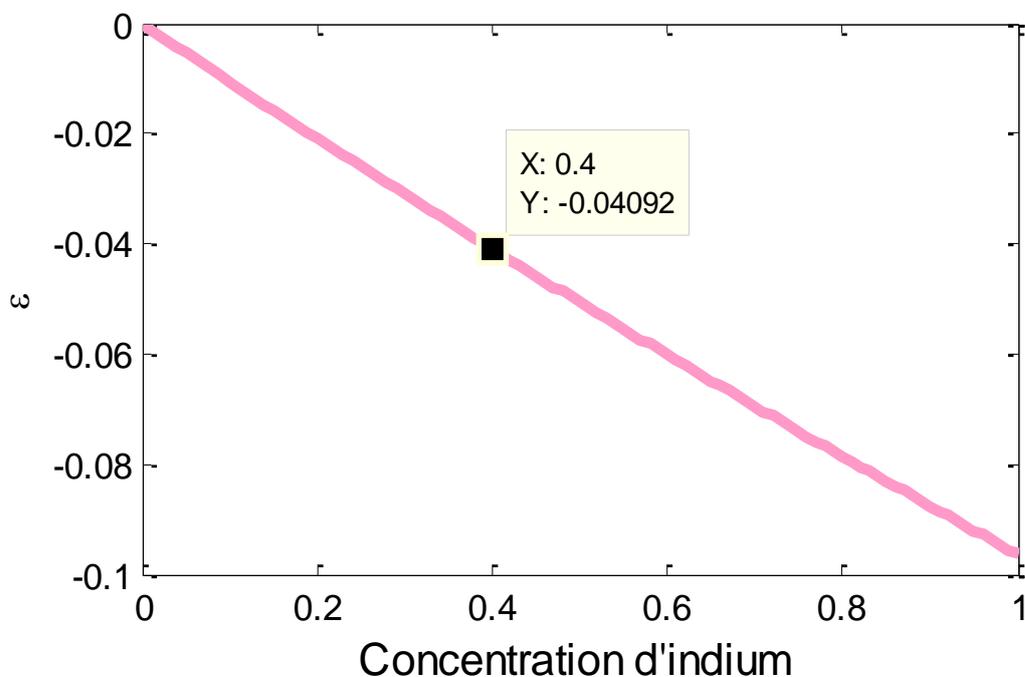


Figure II.2 : Variation du désaccord de maille de la structure $\text{In}_x \text{Ga}_{(1-x)} \text{N}$ en fonction de la concentration d'indium (In).

IV. L'épaisseur critique :

La figure II.3 montre la variation de l'épaisseur critique de l'alliage $\text{In}_x \text{Ga}_{(1-x)} \text{N}$ en fonction de la concentration d'indium (In) à $T=300\text{K}$.

Nous observons que l'épaisseur critique diminue d'une façon semi-log avec la variation de la concentration d'indium (In).

D'après le résultat du désaccord de maille, on avait dit que nous allons travailler pour des faibles concentrations d'indium correspondant à la limite de la déformation optimale. Dans ce cas-là, nous allons prendre l'épaisseur critique égal à 10 nm correspond à $x=0,34$ (concentration d'indium).

On voudrait optimiser également la valeur de la largeur du puits pour qu'il soit inférieur à celui de l'épaisseur critique pour éviter la dislocation du matériau.

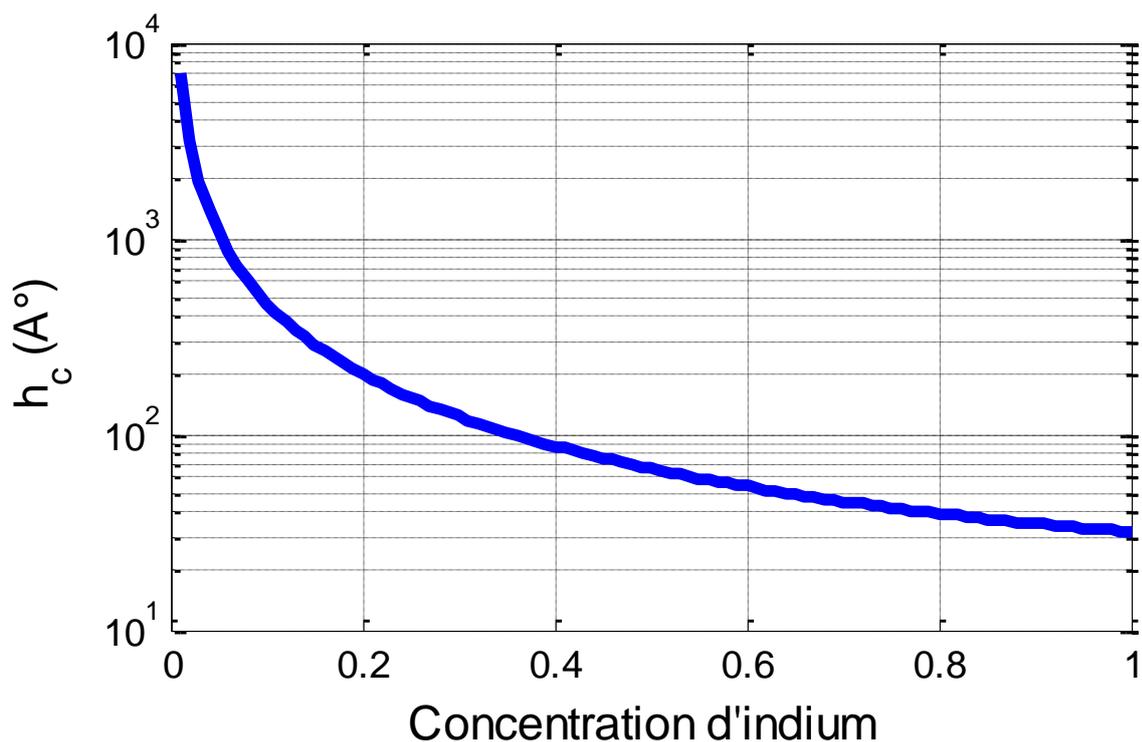


Figure II.3 : Variation de l'épaisseur critique (h_c) de l'alliage (In Ga N) en fonction de la concentration d'indium (In).

Energie de la bande interdite (sans contrainte) :

La figure II.4 décrit la variation de l'énergie de la bande interdite en accord de maille de la structure $\text{In}_x \text{Ga}_{(1-x)}\text{N} / \text{Ga N}$ en fonction de la concentration d'indium (In) à $T= 300\text{K}$.

Nous observons qu'il y a une diminution de l'énergie de la bande interdite de la structure $\text{In}_x \text{Ga}_{(1-x)}\text{N}$ en fonction de la concentration d'indium (In), par exemple : pour $x= 0,1$ on a $E_g = 3,046 \text{ eV}$, $x=0,4$ on a $E_g=2,44 \text{ eV}$ et pour $x=0,9$ on a $E_g=1,95 \text{ eV}$, et c'est un bon résultat puisque on est dans le cas d'émission .

Ainsi, nous remarquons que les niveaux d'énergies des trous lourds et trous légers Sont isotropes.

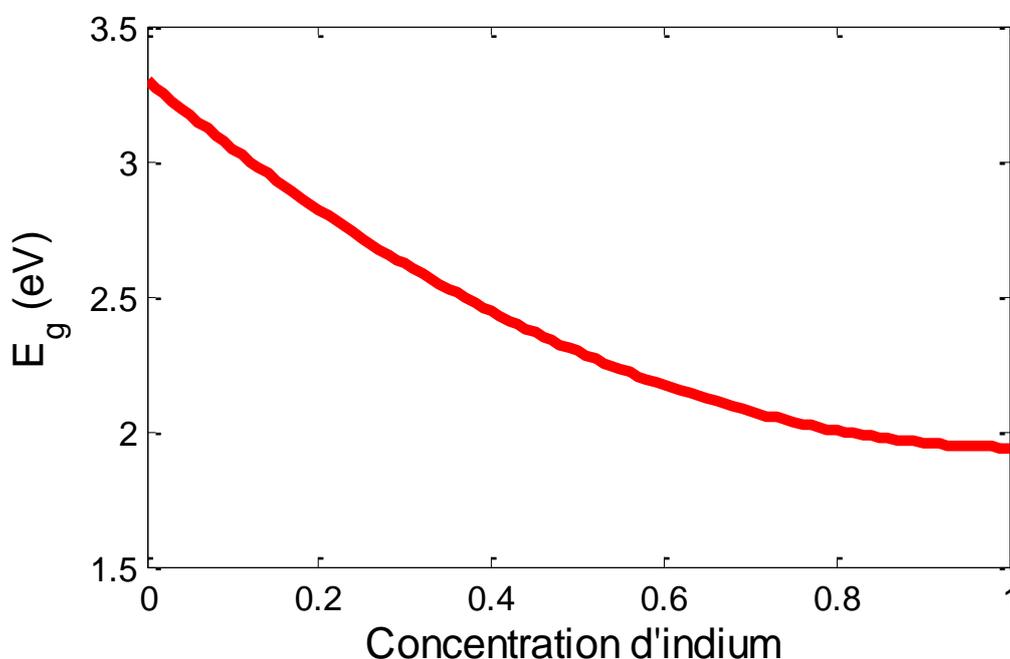


Figure II.4 : Variation de l'énergie de la bande interdite en accord de maille de la structure $\text{In}_x \text{Ga}_{(1-x)}\text{N} / \text{Ga N}$ en fonction de la concentration d'indium (In).

V. Energie de la bande interdite des trous lourds et trous légers :

La figure II.5 exprime la variation de l'énergie de la bande interdite des trous lourds et légers en fonction de la concentration d'indium (In) à $T=300\text{K}$. Il apparaît un levé de dégénérescence du gap pour les trous lourds et les trous légers. ces deux derniers diminuent également en fonction de la concentration d'indium, mais ils sont inférieurs à celui du premier (gap sans contrainte).

Chapitre II : Résultats et discussions

On observe l'apparition de la dégénérescence des niveaux d'énergies des trous lourds et légers. , l'énergie des trous lourds est inférieure à celle des trous légers. $E_{g\ hh} < E_{g\ lh} < E_g$ (contrainte en compression)

Nous constatons que l'incorporation d'indium provoque le levé de dégénérescence des bandes d'énergies (trous lourds et légers).

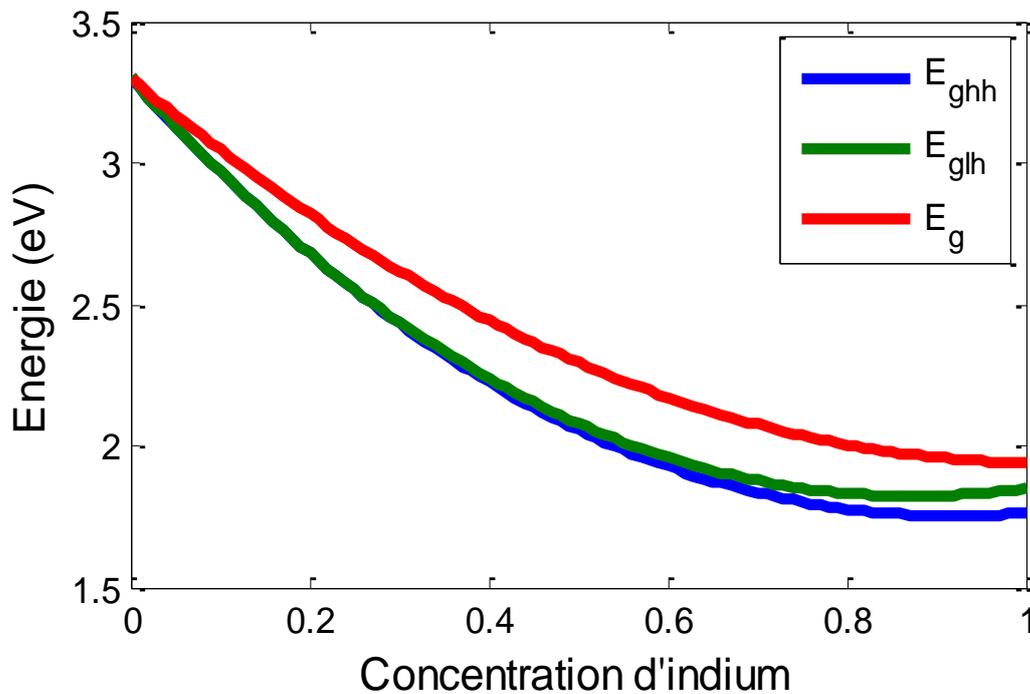


Figure II.5 : Variation de l'énergie de la bande interdite des trous lourds et légers en fonction de la concentration d'indium (In).

VI. La bande d'interdite (Simulation + exp)

La figure II.6 montre la variation de l'énergie de la bande interdite et l'expérimentale des couches relaxées et contraintes en fonction de la concentration d'indium (In) à $T=300K$.

On remarque qu'il y a une diminution de l'énergie de la bande interdite en fonction de la concentration d'indium, cette diminution apparaît également pour les couches relaxées et contraintes.

On constate qu'il y a un accord entre l'expérimentale et la théorie que pour des faibles concentrations d'indium.

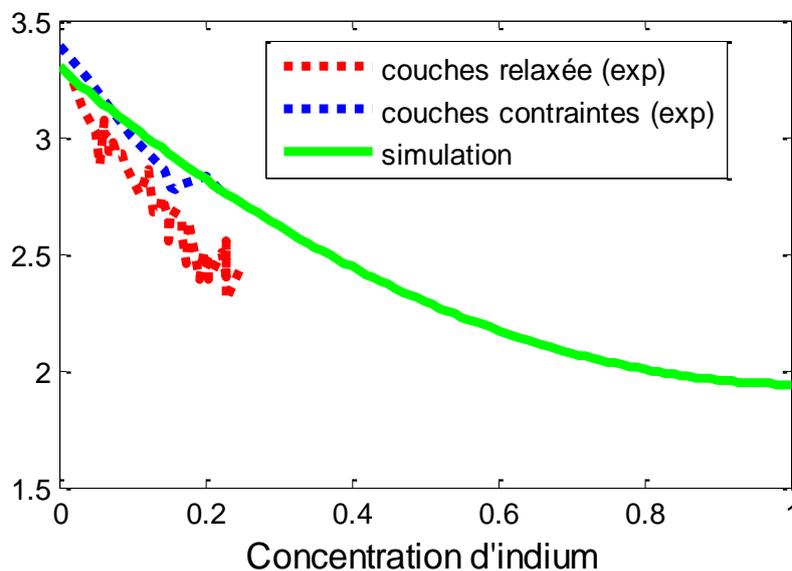


Figure II,6 : l'énergie de la bande interdite et l'expérimentale des couches relaxées et contraintes en fonction de la concentration d'indium (In) [28].

VII. L'influence de la température sur l'énergie de la bande interdite :

La figure II.7 montre l'influence de la température sur l'énergie de la bande interdite à 300K.

On remarque que l'énergie de la bande interdite diminue également avec l'augmentation de la concentration d'indium et la température.

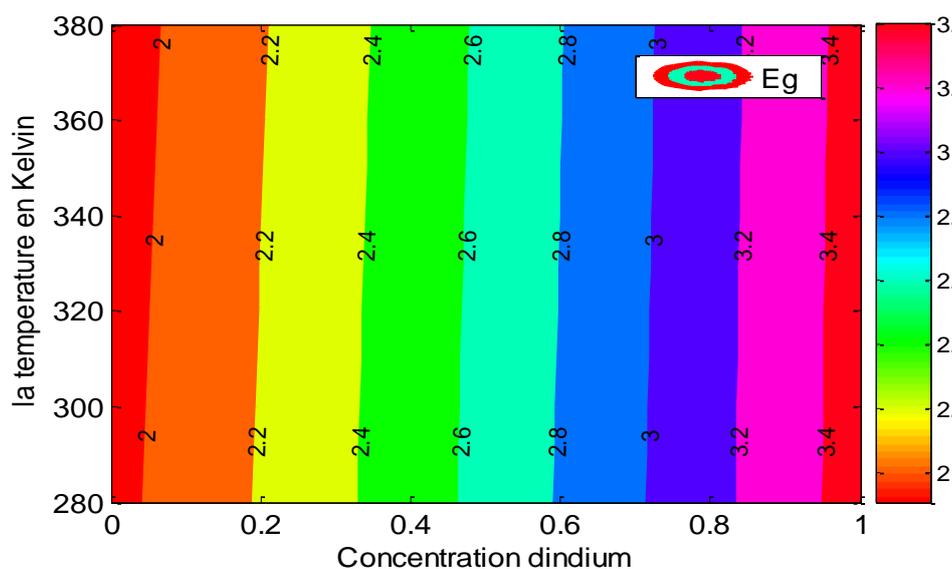


Figure II.7 L'influence de la température sur l'énergie de la bande interdite

VIII. L'absorption :

La figure II.8 montre l'absorption des trous lourds, on fait varier la température et la concentration d'indium.

Nous observons que l'absorption augmente avec la variation de la concentration d'indium (In). Nous constatons que pour l'application laser, il faut tenir en compte l'effet de l'absorption sur la performance de laser et plus précisément sur l'émission, donc on va travailler avec des conditions (x,T) dont lesquels l'absorption est faible.

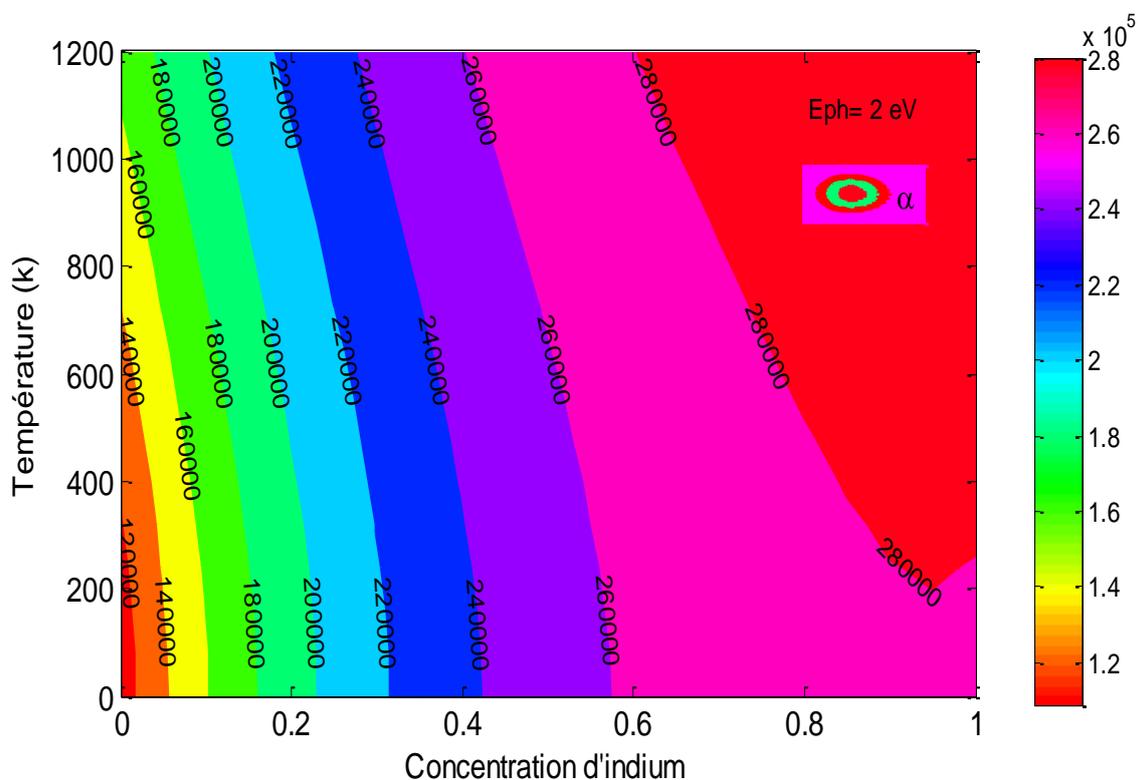


Figure II.8 : L'évolution de l'absorption des trous lourds en variant la température et la concentration d'indium.

IX. Taux de confinement :

La figure II.9 étudie le taux de confinement de la barrière de valence et de la conduction en fonction de la concentration d'indium à T=300K.

Dans notre étude, on voudrait que les porteurs soient confinés dans le puits pour qu'on puisse avoir les phénomènes désirés (l'émission stimulée dans notre cas).

On observe qu'il y a une relation inverse entre le confinement dans la bande de valence et la bande de conduction en fonction de la concentration d'indium, on remarque que il y'a une symétrie entre le confinement dans les deux bandes, tel que pour x=0 le confinement des

Chapitre II : Résultats et discussions

porteurs dans la bande de valence est de 33%, par contre dans la bande de conduction est de 67%, cela due à l'excitation des porteurs de la bande de valence vers la bande de conduction et c'est tout à fait, il suffit d'avoir une énergie du photon faible pour rester confiné à l'intérieur du puits. Nous constatons aussi, que le confinement dans la bande de valence augmente avec l'augmentation de la concentration d'indium, et diminue dans la bande de conduction avec l'augmentation de la concentration d'indium.

Afin d'avoir l'accord avec les résultats précédentes (désaccord de maille, le gap ...), et l'accord avec notre désir, pour des faibles concentrations d'indium par exemple : pour $x=0,3$ on a $Q_v = 34\%$; $Q_c = 66\%$.

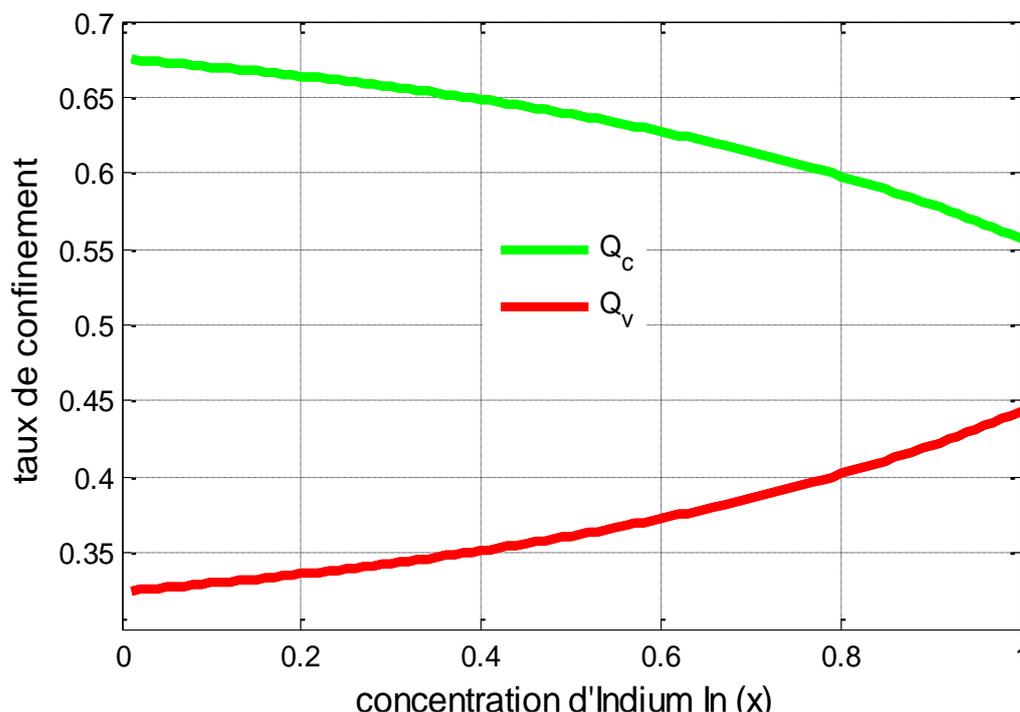


Figure II.9 : Taux de confinement de barrière de valence et de conduction en fonction de la concentration d'indium.

X. La mobilité :

XIII.1 La mobilité des électrons à 300K :

La figure II.10.a étudié la variation de la mobilité des électrons en fonction de la concentration des porteurs pour différentes valeurs de la concentration d'indium. On envisage que la mobilité des électrons diminue d'une façon non linéaire avec l'augmentation de la densité des porteurs pour différentes concentration d'indium à la température ambiante, et que la mobilité prend sa valeur maximale pour une concentration d'indium égale à 0,35 et sa valeur minimale pour une

Chapitre II : Résultats et discussions

concentration d'indium égale à 0,05 , par exemple pour $N_d=10^{14} \text{ cm}^{-3}$ et $x=0.35$, $\mu_n=1800 \text{ cm}^2/\text{V.s}$.En effet, nous constatons que les concentrations d'indium et la densité des électrons influent sur la mobilité, tel que pour des grandes concentrations d'indium et la densité des électrons baissent la mobilité, plus on augmente les concentrations, plus la mobilité diminue également. Maintenant, pour voir l'influence de la température sur la mobilité des électrons, on va fixer la concentration d'indium égale à 0,2, la figure (3, 8,2) montre les résultats obtenus. Nous remarquons que la mobilité des électrons diminue avec l'augmentation de la concentration des électrons pour différentes températures, pour $N_d=10^{14} \text{ cm}^{-3}$, $x=0.2$ à $T = 233$ et 500 K , les mobilités $\mu_n = 2250 \text{ cm}^2/\text{V.s}$, $\mu_n = 800 \text{ cm}^2/\text{V.s}$ respectivement. En effet, nous pouvons déduire que les concentrations des électrons N_d et la température influent sur la mobilité.

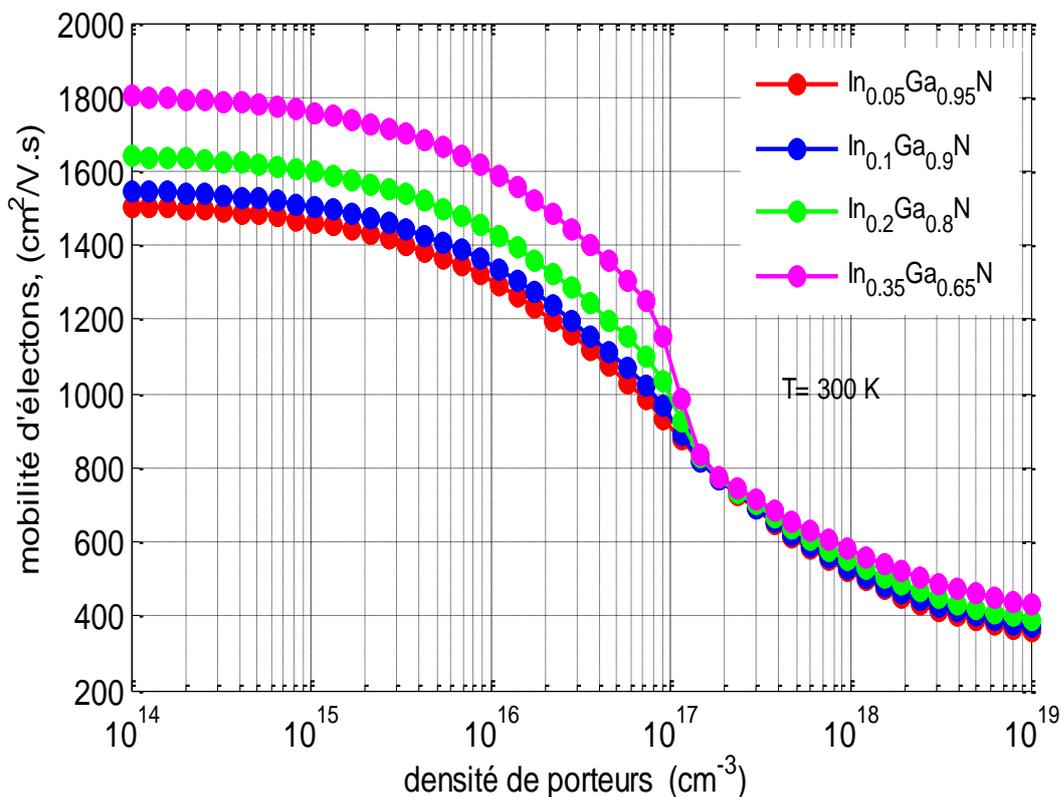


Figure II.10.a : variation de la mobilité des électrons en fonction de la concentration de porteurs pour différents concentrations d'indium à 300 k.

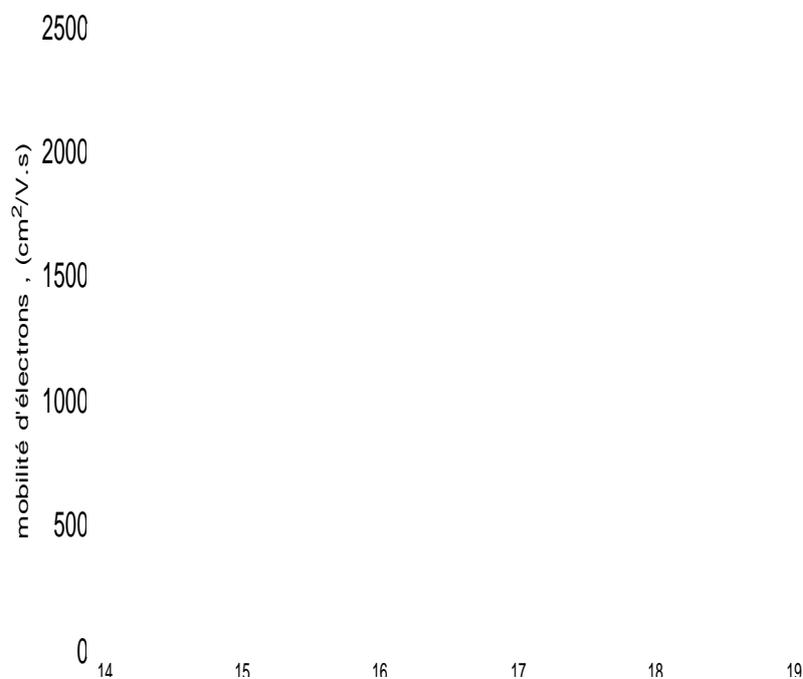


Figure II.10.b : La mobilité des électrons en fonction de la concentration des porteurs pour différentes températures.

XIII.2 La mobilité des trous à 300K :

Toujours dans le cadre de l'étude de la mobilité, cette fois nous allons étudier la mobilité des trous pour différentes concentration d'indium d'une part, et en variant la température d'autre part. Les figures ci-après illustrent les résultats :

On envisage que la mobilité des trous diminue avec l'augmentation de la densité des porteurs pour différentes concentration d'indium à la température ambiante, et que la mobilité prend sa valeur maximale pour une concentration d'indium égale à 0.35 et sa valeur minimale pour une

Chapitre II : Résultats et discussions

concentration d'indium égale à 0,05 , par exemple pour $N_d=10^{14} \text{ cm}^{-3}$ et $x=0.35$, $\mu_p=46 \text{ cm}^2/\text{V.s}$ et pour $x=0.05$, $\mu_p=31.5 \text{ cm}^2/\text{V.s}$

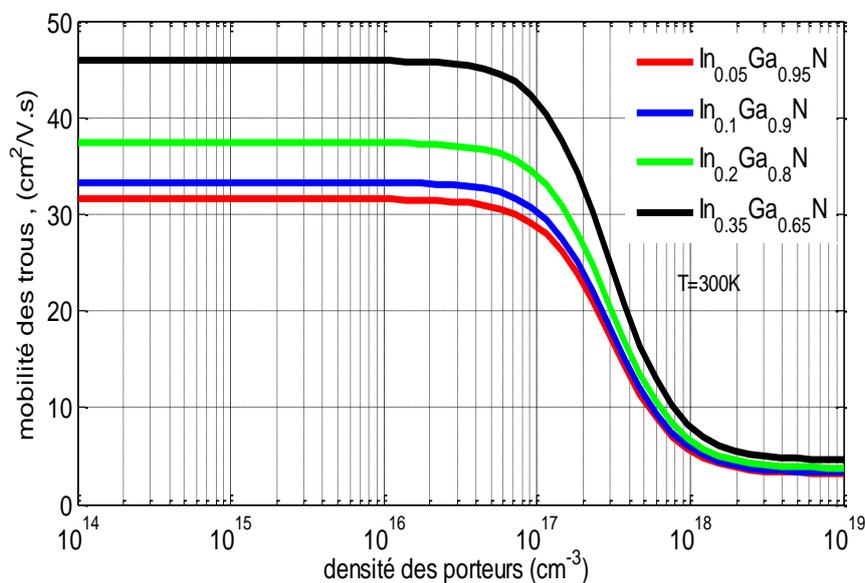
En effet, nous constatons que les concentrations d'indium et la densité des porteurs influent sur la mobilité, tel que pour des grandes concentrations d'indium et de porteurs baissent la mobilité, plus on augmente les concentrations, plus la mobilité diminue également.

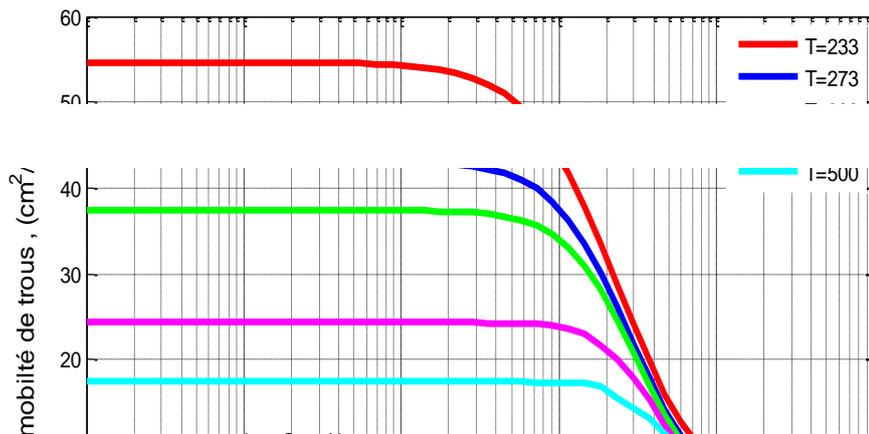
On fixe maintenant la concentration d'indium à 0,2 et nous varions la température, les résultats sont présentés dans la figure II,10,d suivante :

Nous remarquons que la mobilité des trous diminue avec l'augmentation de la densité des porteurs pour différentes températures, pour $N_d=10^{14} \text{ cm}^{-3}$, $x=0.2$ à $T = 233$ et 500 K , les mobilités $\mu_p= 55 \text{ cm}^2/\text{V.s}$, $\mu_n= 18 \text{ cm}^2/\text{V.s}$ respectivement.

En effet, nous pouvons déduire que la densité des électrons N_d et la température influent sur la mobilité. Nous concluons que :

- La température et la concentration d'indium influent sur la mobilité des électrons et des trous en fonction de la densité des porteurs.
- La mobilité des électrons est très importante à celle des trous :





XIV. B; Figure II.10.c : La mobilité des trous en fonction de la concentration des porteurs pour différentes concentration d'indium

La fig
condu

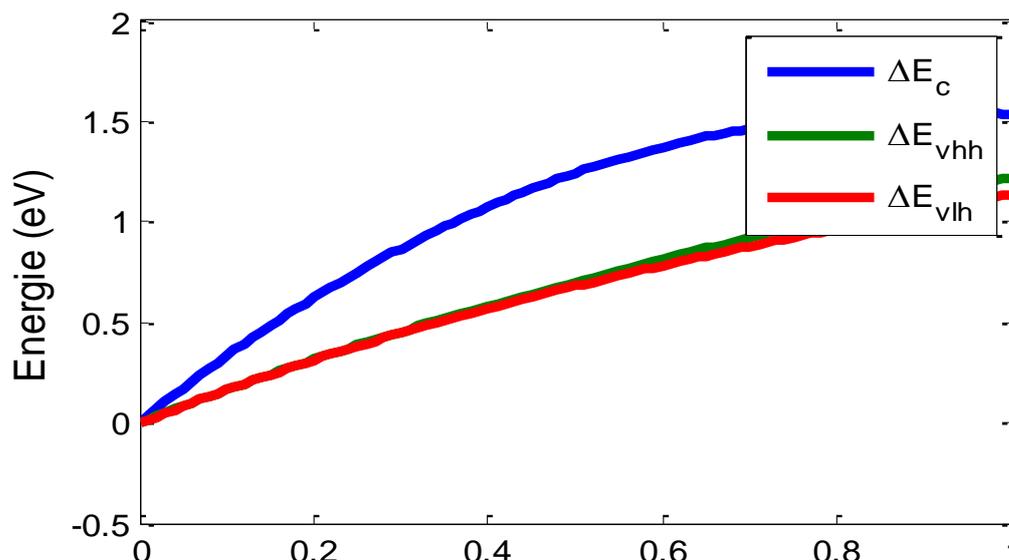
Nous remarquons qu'il y a une augmentation d'énergie en fonction de la concentration d'indium pour les deux bandes (valence et conduction).

La barrière du potentiel de la bande de conduction est importante à celle de la bande de valence pour les trous lourds et légers, par exemple pour $x=0,3$, $\Delta E_v = 0,44$ eV pour la bande de valence, et pour la bande de conduction on a $x=0,3$, $\Delta E_c = 0,86$.

Nous constatons également, que la barrière du potentiel de la bande de valence pour les trous lourds et légers au début sont superposés et isotropes, mais qu'à partir $x=0,3$, les deux barrières des trous lourds et légers commencent à se séparer et que la barrière du potentiel des trous légers est inférieure à celle des tous lourds, tel que :

$$0 < \Delta E_{v_{lh}} < \Delta E_{v_{hh}} < \Delta E_c$$

A partir de cette conclusion, on peut déduire la nature du puits qui est un puits quantique de type I.



XV. Quantification d'énergie :

XV. Figure II.11 : Barrière du potentiel des trous lourds et légers en fonction de la concentration d'indium.

méthode de Dichotomie dans notre cas), on peut déterminer les états propres ($\psi_{11}, \psi_{22}, \dots, \psi_n$) et les énergies propres (E_1, E_2, E_n) pour les porteurs électrons, trous.

XV.2 Quantification d'énergie pour les électrons :

Maintenant, afin de voir l'énergie de quantification en fonction de la largeur du puits, nous allons varier les concentrations d'indium en fonction de l'élargissement de la largeur du puits quantique pour les électrons et les trous (lourds et légers).

Les figures (II,12,a-II,12,e) montrent la quantification d'énergie des électrons en fonction de la largeur du puits à $T=300K$.

Les figures (II,12,a-II,12,e) représentent la variation de l'énergie de quantification en fonction de la largeur du puits.

Nous remarquons que l'énergie de quantification de l'électron diminue en fonction de la largeur du puits, car l'énergie est proportionnellement inverse avec la largeur du puits selon la relation suivante : $E_n = n^2 \cdot f(1/L^2)$. (2-1).

Nous remarquons aussi, que l'incorporation de l'indium induit l'apparition des nouveaux niveaux d'énergie.

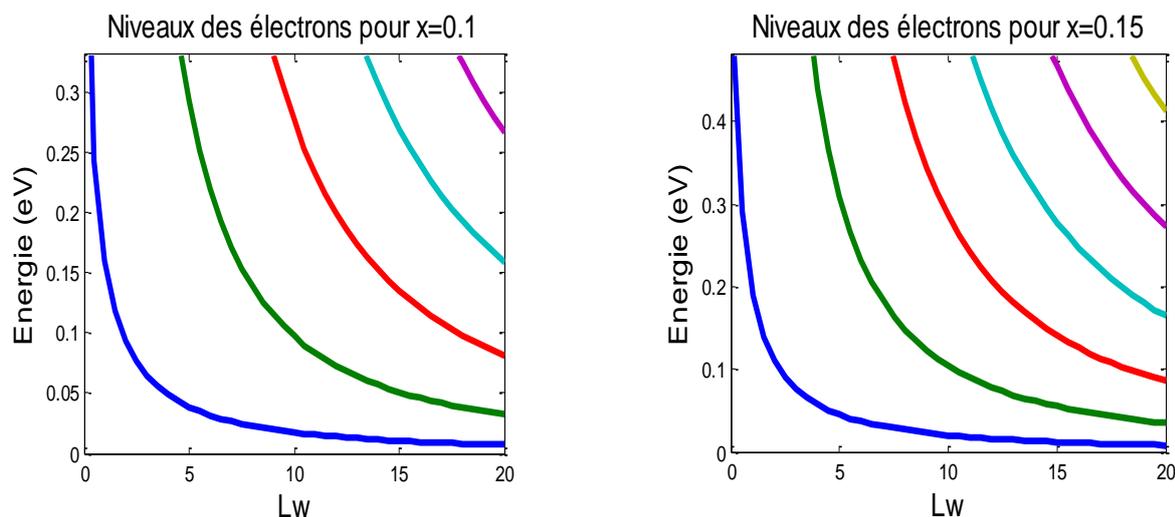


Figure : II,12,a

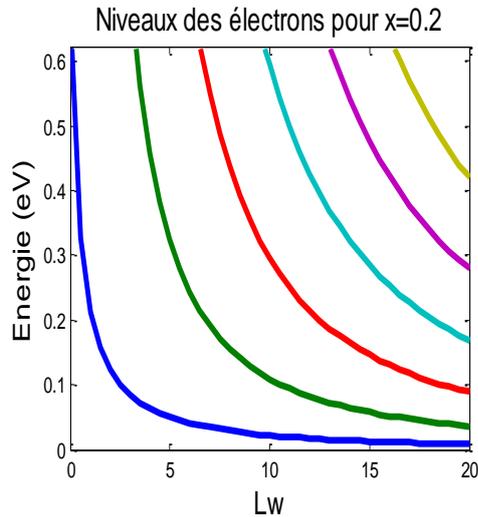


Figure :II,12,c

Figure : II :12,b

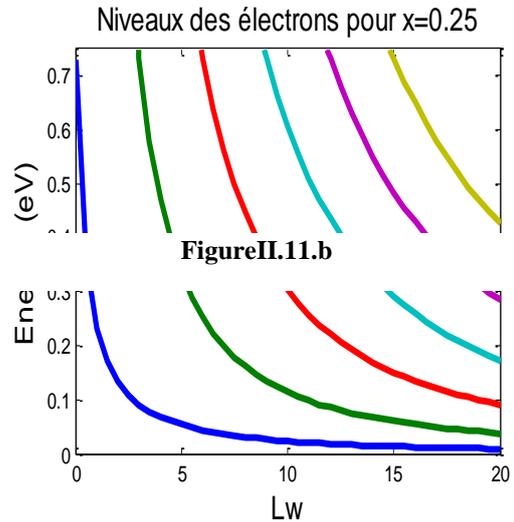


Figure :II,12,d

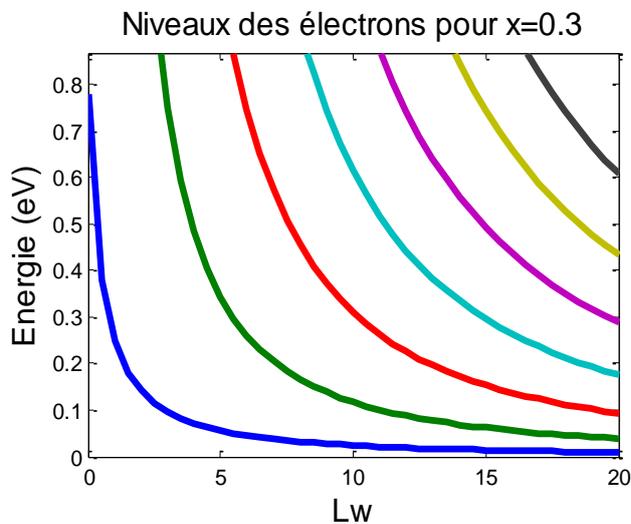


Figure :II.12,e

La variation d'énergie de quantification en fonction de la largeur du puits

XV.3 L'énergie de quantification des trous lourds :

Les figures (II,13,.a..b.c.d.e.f) montrent la variation de l'énergie de quantification en fonction de la largeur du puits à 300K.

Chapitre II : Résultats et discussions

Nous remarquons qu'il y a une diminution de l'énergie de quantification des trous lourds en fonction de l'élargissement de la largeur du puits et l'apparition des nouveaux niveaux d'énergie à cause de l'incorporation de l'indium.

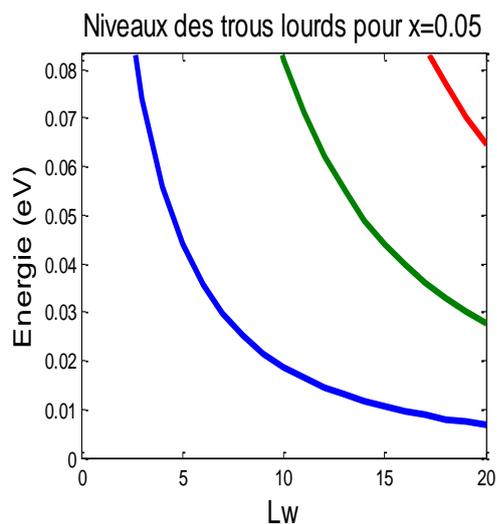


Figure :II,13,a

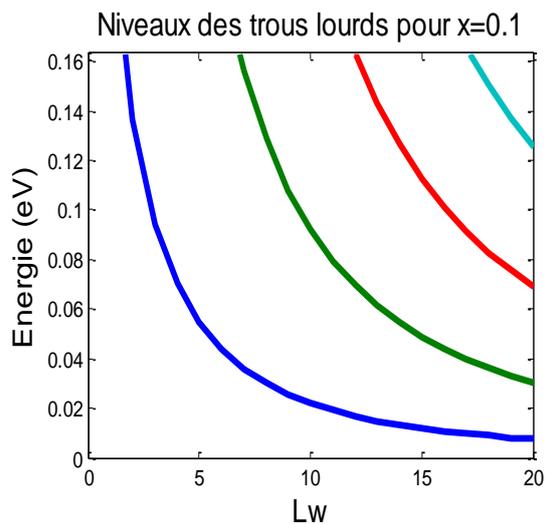


Figure :II,13,b

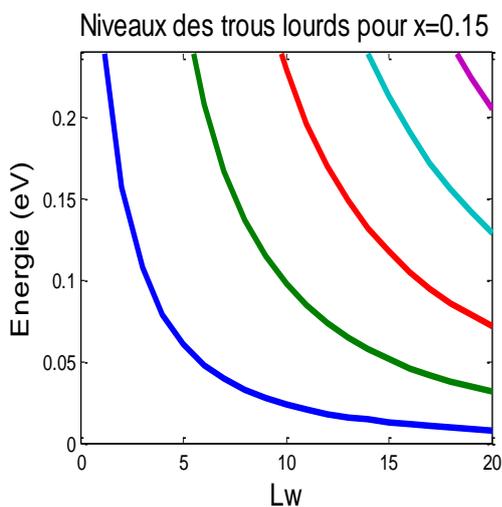


Figure :II,13,c

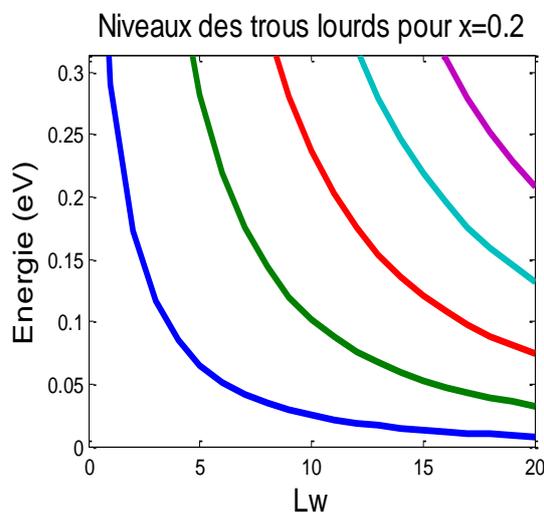
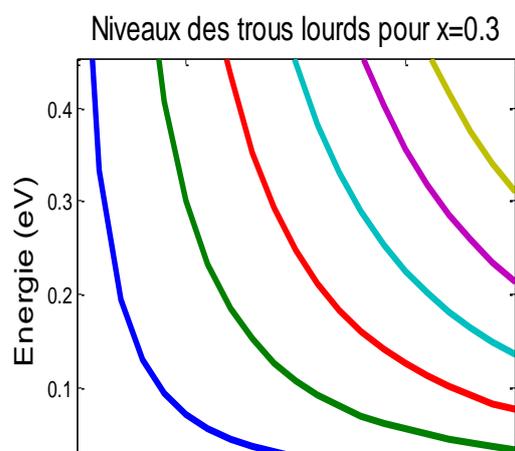
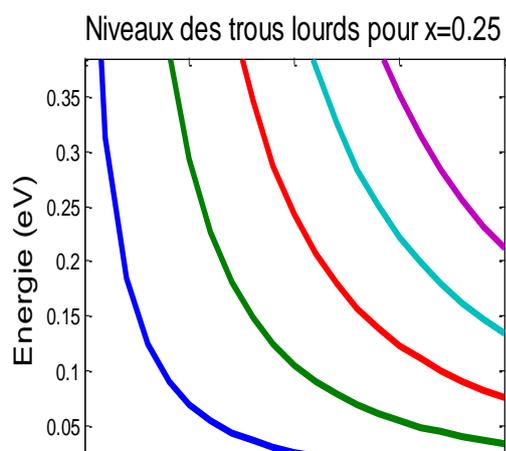


Figure :II,13,d



XV.4

Figure II.13,e

Figure II.13,f

Fig
de la largeur du puits à $T=300K$.

Nous remarquons que l'énergie de quantification des trous (lourds et légers) diminue en fonction de la largeur du puits, car l'énergie est proportionnelle inversement avec la largeur du puits selon la formule citée précédemment.

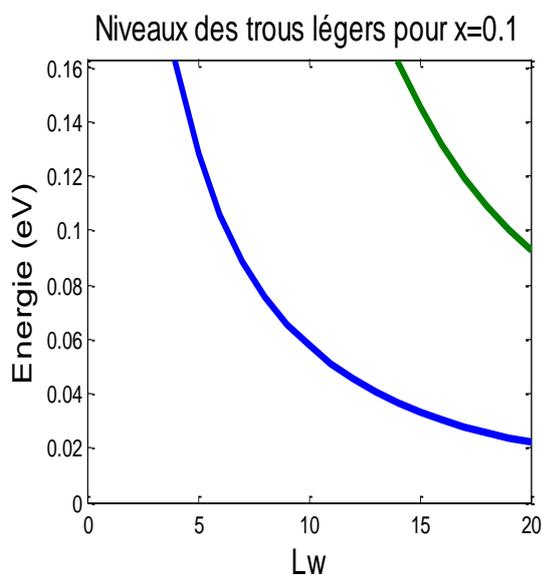


Figure II.14,a

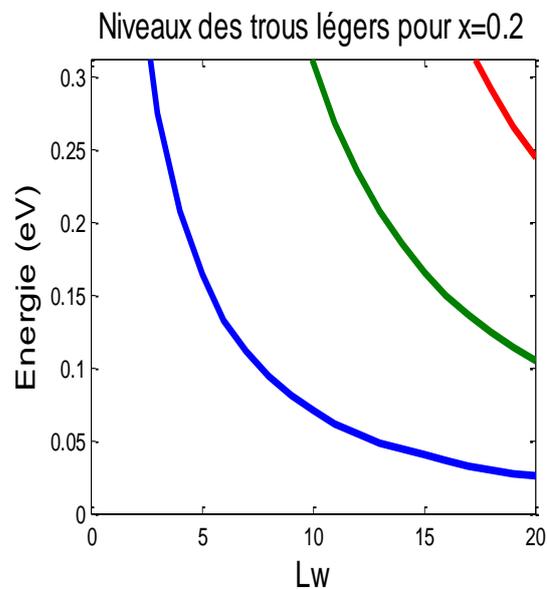


Figure II.14.b

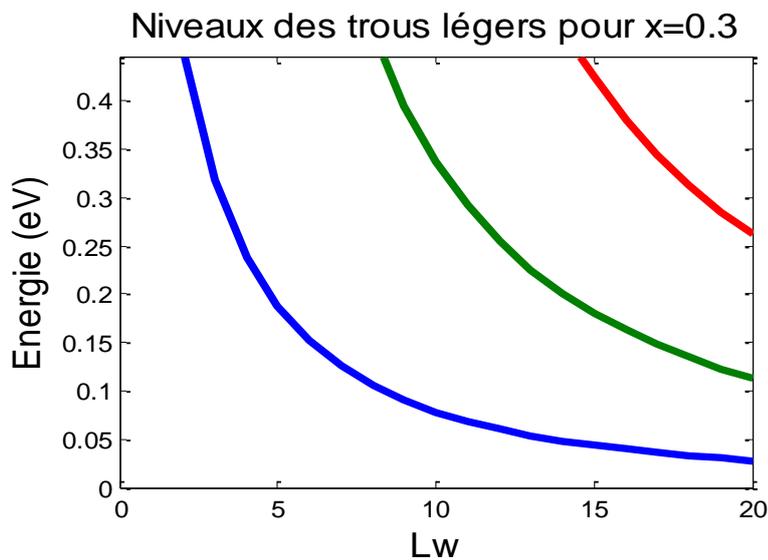


Figure II.14.c

XVI. Energie de transition :

XVI.1 Energie de transition des trous lourds :

Les figures (II.15.a.b.c.d.e.f) illustrent la variation de l'énergie de transition des trous lourds et des trous légers en fonction de la largeur du Puits quantique, pour différents transition (dans notre cas, on va s'intéresser à la transition vers le quatrième niveau de la bande de conduction) à $T=300K$.

On observe que l'énergie de transition diminue avec l'élargissement du puits quantique, et que Cette énergie est différente pour chaque transition de la bande trou lourd vers la bande de conduction. On voit également que la diminution de l'énergie de transition pour le dernier niveau reste importante par rapport à celle du premier.

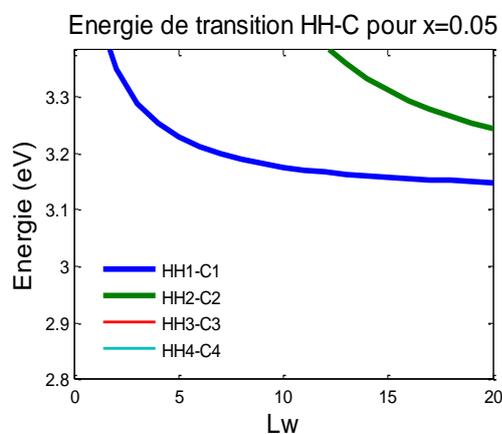
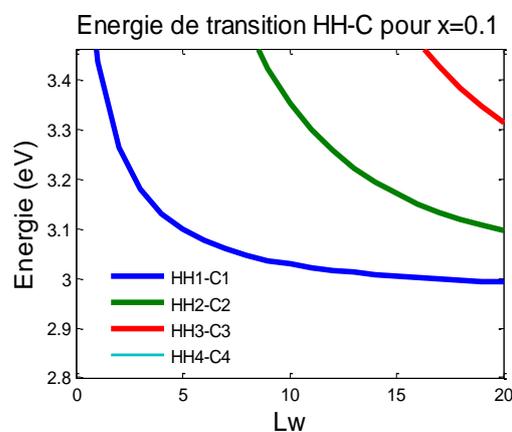


Figure II.15,a



FigureII,15,b

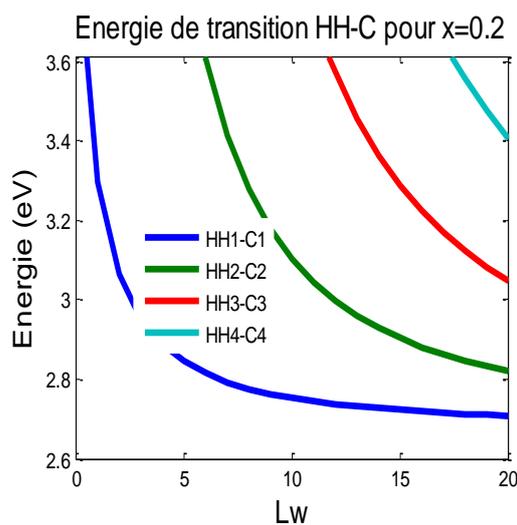
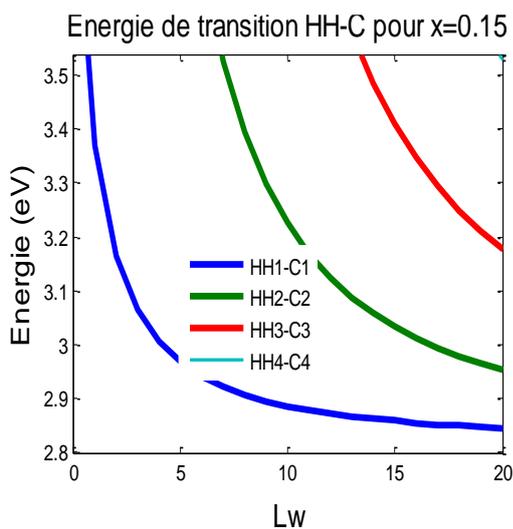


Figure II.15,c

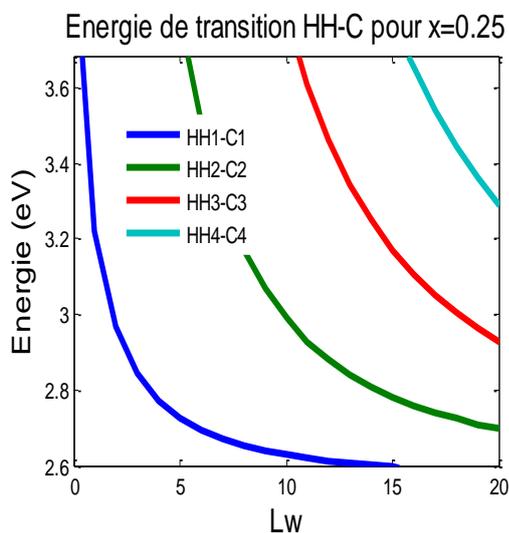


Figure II.15,e

figure II.15,d

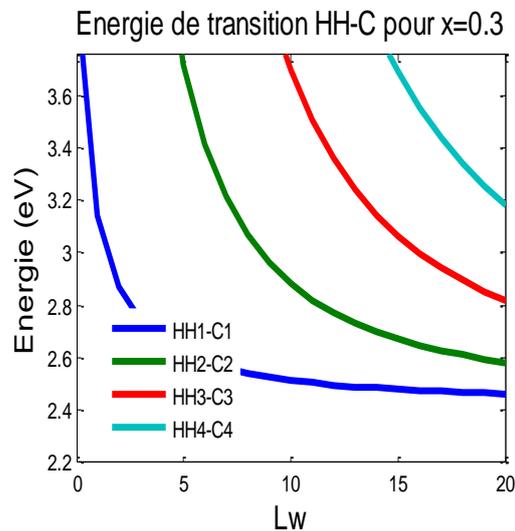


Figure II.15,f

Figures (II.15.a.b.c.d.e.f) : Variation de l'énergie de transition des trous lourds en fonction de la largeur du puits quantique pour différents incorporations d'indium.

XVI.2 Energie de transition pour les trous légers :

Les figures (II.14.a.b.c) représentent l'énergie de transition pour les Trous légers à 300K.

On a les mêmes observations précédentes pour les trous lourds, la seule nuance c'est que le nombre des niveaux d'énergies pour les trous lourds est supérieur à celui des trous légers, donc les transitions sont importantes pour les trous lourds pour cela selon l'intensité des trous lourds en expérience attire l'intention de favorisé les transitions vers les trous lourds.

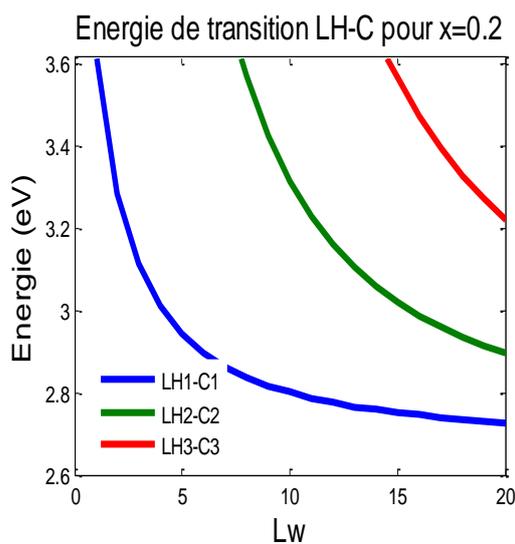
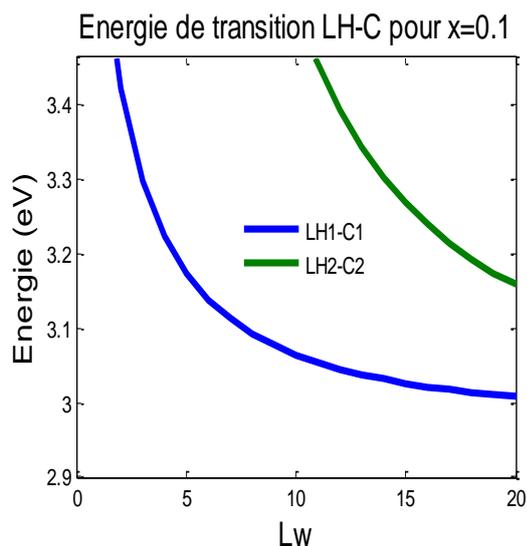


figure II.16.a

Figure II.16.b

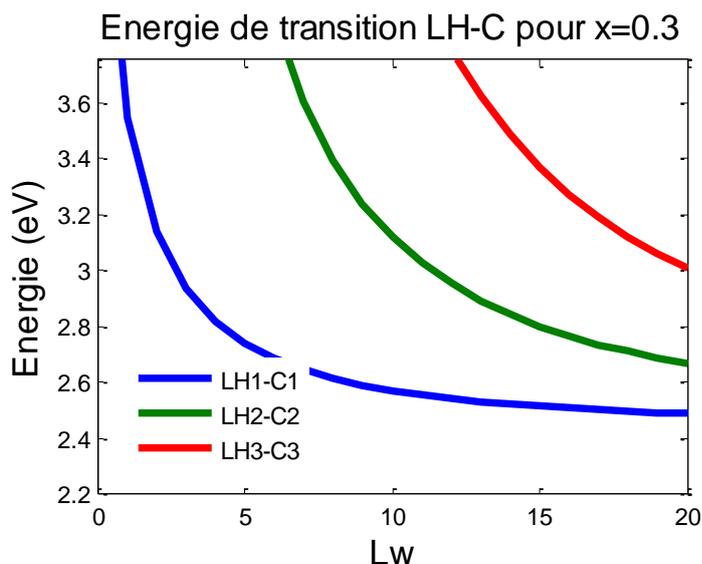


Figure :II,16,c

Figures (II.16.a.b.c) : Variation de l'énergie de transition des trous légers en fonction de l'élargissement du puits pour différentes incorporations de l'indium

XVII. Longueur d'onde d'émission :

XVII.1 Longueur d'onde d'émission pour les trous lourds :

Les figures (II.17.a.b.c.d.e.f) montrent la variation de la longueur d'onde d'émission pour les trous lourds à T=300K

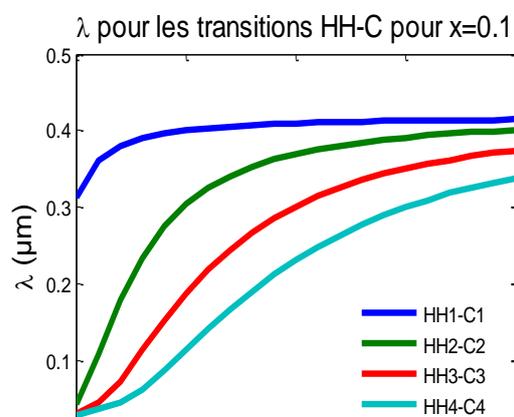
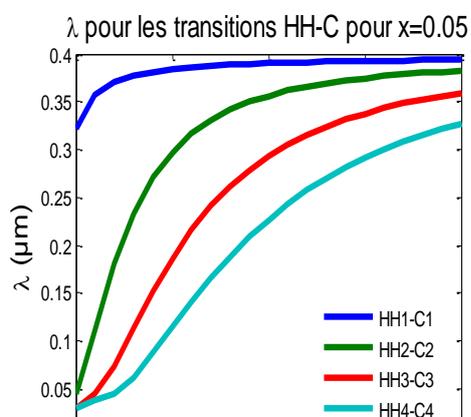


Figure II.17.a

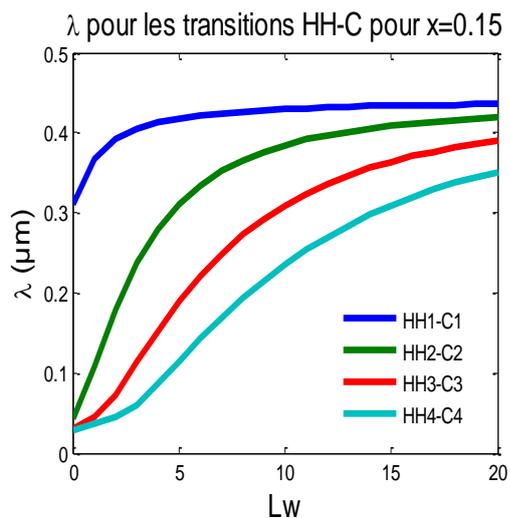


Figure II.17.c

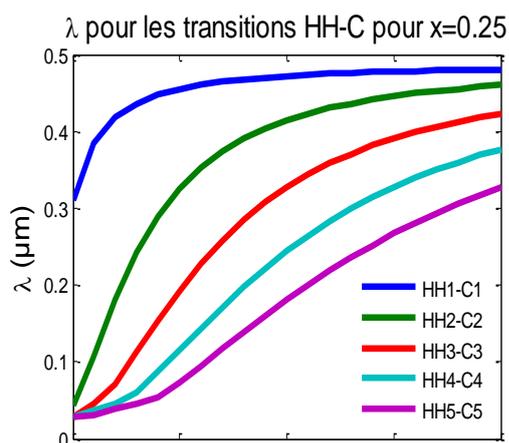


Figure II.17.e

Figure II.17.b

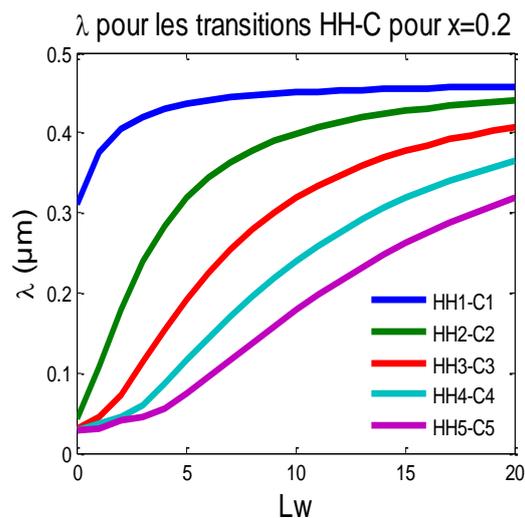


Figure II.17.d

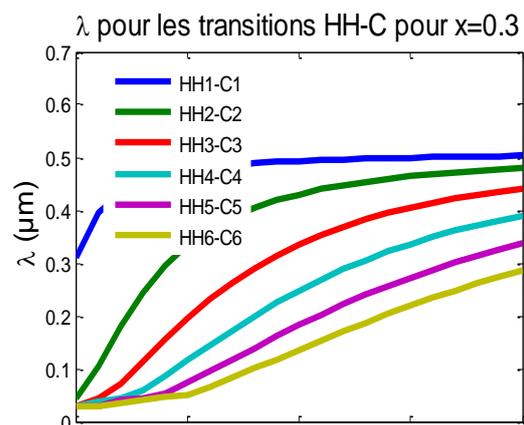


Figure II.17.f

XVII.2 Longueur d'onde d'émission des trous légers :

Il a été présenté sur les figures II.18.a.b.c que l'élargissement de puits réduit l'énergie de transition et comme $\lambda e = hv / E_{tr}$ donc ; plus l'énergie de transition E_{tr} est petite plus la

Chapitre II : Résultats et discussions

longueur d'onde d'émission λ_e devient plus grande. On atteint le $0.5 \mu\text{m}$ avec des $In= 30$ % donc l'émission dans le visible.

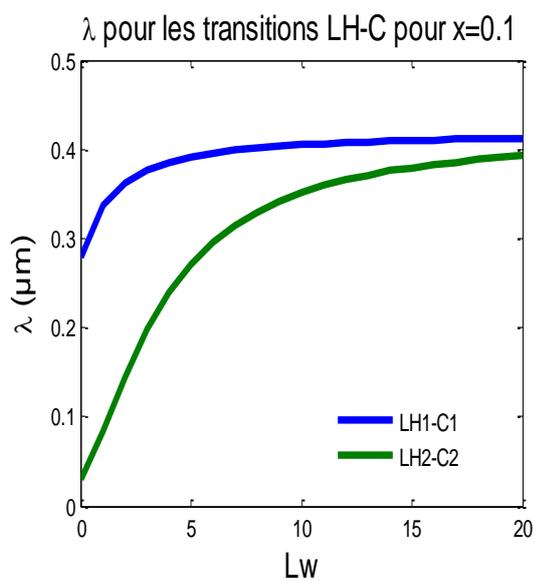


Figure II.18.a

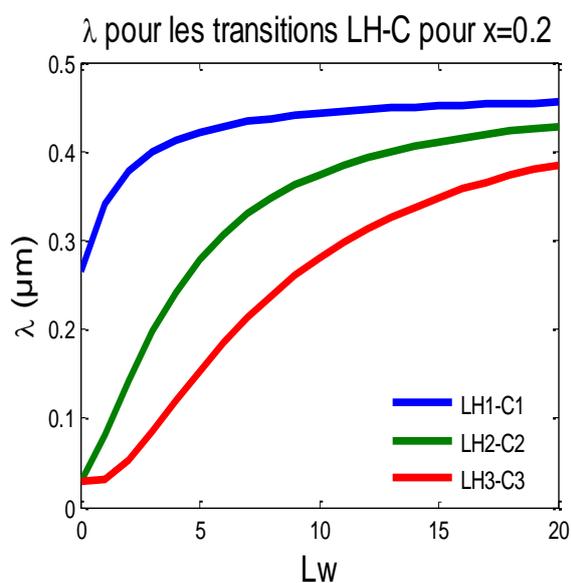


Figure II.18.b

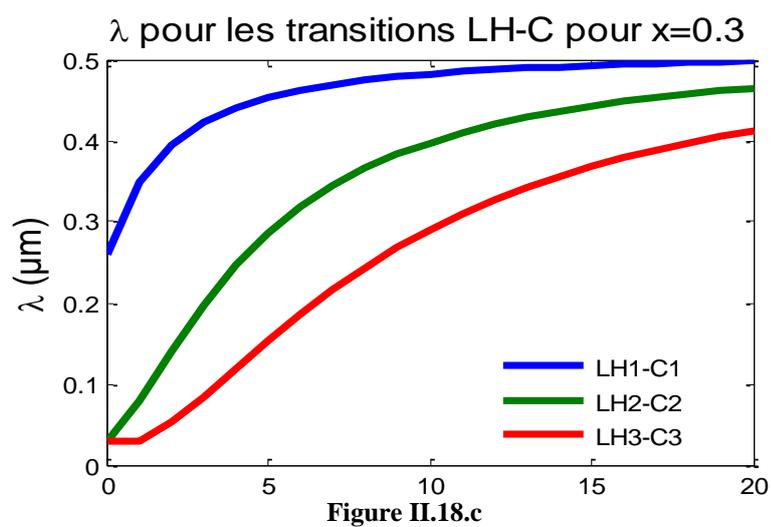


Figure II.18.c

Figures (II.18.a.b.c) : la longueur d'onde d'émission pour les trous légers en fonction de la largeur du puits quantique.

XVIII. Conclusion :

Dans ce qui a été illustré dans ce chapitre, la variation des paramètres du matériau semi-conducteur InGaN en fonction de la concentration de l'Indium, a eu pour objectif d'obtenir le plus faible désaccord paramétrique entre le substrat GaN, et la couche active (couche épitaxie) InGaN, aussi nous avons étudié l'effet de cette contrainte sur les bandes d'énergies, les barrières de potentiels et les niveaux de confinements (quantification), et ce pour déterminer leurs effets sur la longueur d'onde d'émission.

Avec l'incorporation de l'Indium dans la couche active InGaN on a eu une diminution de la contrainte, car pour toutes les concentrations de l'In on obtient toujours une contrainte en compression. Pour avoir une contrainte de 3% on a In=30 %.

Concernant la longueur d'onde, elle augmente avec l'élargissement du puits quantique et pour cause celui-ci réduit l'énergie de transition qui est inversement proportionnelle à la valeur de la longueur d'onde.

Pour certaines concentrations d'Indium notre matériau atteint la longueur d'onde du 0.5 μ m qui appartient au visible.

Finalement, concernant la mobilité des porteurs donc sont influencés par la température, la concentration d'indium et la concentration des porteurs et nous avons trouvées que la mobilité des électrons est très importante à celle des trous.

Conclusion générale

Dans le cadre de ce travail, nous nous sommes concentrés sur la structure $\text{In}_x\text{Ga}_{(1-x)}\text{N} / \text{Ga N}$ à puits quantique, appliqué aux systèmes de télécommunications.

En premier lieu, nous a abordé des généralités sur les composants optoélectroniques, les semi-conducteurs et en particulier les matériaux III-V et on a défini des différentes caractéristiques de ce dernier tel que : structure cristalline, énergie de la bande interdite a abordé la notion des émetteurs de la lumière pour parler de laser, son principe de fonctionnement et on a parlé aussi des puits quantiques avec des équations mathématiques.

La deuxième partie traite les interprétations des simulations Matlab, pour les paramètres de notre structure, à savoir le paramètre de maille, celui du désaccord de maille, l'épaisseur critique énergie de la bande interdite ,l'absorption, taux de confinement , l'influence de la température sur l'énergie de la bande interdite , tout cela en fonction de la concentration d'indium ,et puis on a simulé également l'énergie de quantification ,l'énergie de transition et on a fini par la longueur d'onde d'émission .

Cette dernière donne l'émission dans le visible alors des applications pour les L E D.

Nous recommandons de continuer les études par la simulation de la densité du courant de seuil, le gain seuil et la puissance rayonnée, Qui peuvent faire l'objet d'un autre projet, afin de finaliser le travail.

Annexe :

A : Caractéristique des matériaux massifs :

Il est nécessaire de connaître un certain nombre de paramètres physiques.

Paramètre	InN	GaN	GaAs	InAs
Paramètre de maille (Å)	4.98	4.5	5.6532	6.0583
Potentiel Hydrostatique de déformation de la bande de Conduction a_c (eV)	1.95	2.2	7.17	5.08
Potentiel de Déformation de Cisaillement : b (eV)	1.2	-2.2	-2.0	-1.8
Constante Élastique : c_{11} (GPa)	187	293	1221	832.9
Constante Élastique : C_{12} (GPa)	125	159	566	452.6
Masse Effective des Électrons m_e (m_0)	0.12	0.15	0.0632	0.026
L'énergie Spin orbite ξ_0 (eV)	0.006	0.017	0.341	0.39
Bande interdite à 300 K E_g (eV)	1.94	3.299	1.422	0.417

Tableau A. Paramètres physiques fondamentaux des principaux binaires III-V.

Bibliographie

- [1] : Tiphaine Dupont : ‘Réalisation sources laser III-V sur silicium’. Ecole Centrale de Lyon, 2011.
- [2] : Julien Maury ‘ Étude et caractérisation d'une fibre optique amplificatrice et compensatrice de dispersion chromatique ‘. Thèse de doctorat. Université de Limoges, 2003.
- [3] : Rebiai-Benahmed Saida :
- [4] : Benatmane Khaled :, ‘Etude de lasers à base de semi-conducteurs III-V ‘, Thèse de Magister, Université Elhadj Lakhdar Batna ;2011.
- [5] : Abdelmoumene Benahmed : ‘Etude et modélisation des structures à base des boîtes quantiques pour la conversion photovoltaïque’, Thèse de doctorat, Université de Blida 1, 2017.
- [6] : Khilifi Zahra & Mouaici Sarah : ‘Etude et simulation des boîtes quantiques à base de InAs/GaAs’, Université Saad Dahlab de Blida, 2013-2014.
- [7] : Jean-Yves Dubos : ‘ Matériaux semi-conducteurs à grand gap III-V à base de GaN ‘, Réf : E1995 v1 10 août 1999.
- [8] : Alain Chovet & Pascal Masson : ‘Cours de Physique des Semi-conducteurs’ École Polytechnique Universitaire de Marseille, IMT, Technopole de Château-Gombert, 13451 ,Marseille cedex 20 2004/2005.
- [9]: J.J. : Berzelius à Stockholm découvre Le silicium en 1824 .
- [10] : Le germanium est découvert par le savant allemand Clemens winkler en 1886.
- [11] : F. Tsui, He, L., Ma, L., Tkachuk, A., Chu, Y. S., Nakajima, K., And Chikyow, T Novel germanium-based magnetic semiconductors. Phys. Rev. Lett. 91, 17 (Oct 2003), 177203.
- [12] : H. Ohno, A. Shen, F. Matsukura, A. Oiwa, A. Endo, S. Katsumoto and Y. Iye, Appl. Phys. Lett., 69, p. 363, (1996). "(Ga, Mn) As : “A new diluted magnetic semiconductor based on GaAs
- [13] : John Bardeen, William Shockley et Walter Brattain découvrent l'effet transistor
- [14] : *"Milestones: Invention of the First Transistor at Bell Telephone Laboratories, Inc., 1947". IEEE Global History Network. IEEE. Retrieved December 7, 2014*
- [15] : « for their researches on semiconductors and their discovery of the transistor effect » in Personnel de rédaction, « *The Nobel Prize in Physics 1956* », Fondation Nobel, 2 010. Consulté le 16 juin 2010
- [16] : K.Gordon. Teal .and Little, John B. "Growth of Germanium Single Crystals," *Physical Review*, Vol. 78 (1950) p. 647

Bibliographie

- [17] : K. Gordon : Teal. "Methods of Producing Semiconductive Bodies," *U. S. Patent 2, 727,840* (Filed June 15, 1950. Issued December 20, 1955)
- [18]: A. RASKIN : 'Rappels atomistiques, structure des métaux, des alliages et des céramiques', Université Médicale Virtuelle Francophone , 2009-2010.
- [19] Gerald Bastard : Les éditions de physique, paris, 1988.
- [20]: J.S.Blakemore, : 'Semiconducting and other major properties of gallium Arsenide', *J. Appl. phys.* 53(10), October 1982.
- [21]: C. Kittel : 'Introduction à la physique de l'état solide', Dunod (1972).
- [22]: Cours de formation en sécurité laser université de sherbrooke Montréal.
- [23] Anonyme : Cours de formation en sécurité laser université de sherbrooke Montréal.
- [24]: D.A.B Miller: 'physical reasons for optical interconnecting'. *Optoelectronicx* (1997).
- [25] Damien BORDEL : 'Développement de nouveaux substrats compliant pour l'hétéro épitaxie de semiconducteurs Thèse de doctorat'. École centrale de Lyon 2007.
- [26]: B .Hadda : ' Modélisation et étude d'un puits quantique contraint à base de GaInAs/GaAs et calcul du courant de seuil ', Mémoire Magister, Université de Blida, juillet 2011.
- [27]: Hector Cotal, C. F., "III–V Multijunction Solar Cells for Concentrating Photovoltaics". *Energy & Environmental Science* , 174–192, (september 2008).
- [28] M. :El Gmili Youssef : Etude et caractérisations par cathodoluminescence de couches minces d'In Ga N pour le photovoltaïque . Thèse de doctorat . Université Sidi Mohamed Ben Abdellah-Fes,2013.
- [29] :M.Henini. Dilute nitrides semiconductors. Elsevier. 2004.
- [30] :I.Vurtgafman and J. R.Meyer, L.R.Ram-Mohan. *J. Appl.Phys.* Vo1.89, No.11, 1 June 2001.