

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 Master

Mention Physique  
Spécialité physique appliquée

Présenté par :

**BOUAICHA Insaf**

Thème :

**Etude et optimisation des structures à puits  
quantique à base d'InGaAs/GaAs et  
GaAs/AlGaAs pour le laser**

Proposé par :

**Pr. AISSAT Abdelkader**

Année Universitaire 2018-2019

Soutenu le 25 / 07 / 2019 devant :

AISSAT Abdelkader	Grade Professeur	Encadreur
OUIR Souad	Grade MCB	Présidente
Bounemri Ammar	Grade MAA	Examineur

بعد تحسين المكونات الإلكترونية أحد التحديات الرئيسية للإلكترونيات الضوئية لزيادة معدلات المعلومات في الألياف الضوئية وتقليل عوامل فقدها. في هذا العمل صببنا اهتمامنا على دراسة ومحاكاة لبنية InGaAs/GaAs, GaAs/AlGaAs للأشعة تحت الحمراء. هذا الخليط الثلاثي الذي هو مركب من أشباه النواقل III-V، ذو خصائص جد مهمة، ولهذا قمنا بدراسة المعايير الهيكلية المختلفة مثل (الشبكة المعلمة، خلاف الشبكة و سمك الحرجة) والإلكترونية مثل طاقة فجوته والطاقة الكمية والطاقة الانتقالية والتقلات (الإلكترونات والثقوب). قمنا كذلك بدراسة العوامل المختلفة التي تخص الليزر، التي استخدمناها في حساب طول الموجة المنبعثة من بئر كمومي بحل معادلة شرودنجر استخدمنا إحدى الطرق العددية التي وجدناها بتركيزات الإنديوم الأمثل (30%) أن هيكلنا يمكن أن يصل إلى الأطوال الموجية 0.85  $\mu\text{m}$  ، 1.3  $\mu\text{m}$  و 1.55  $\mu\text{m}$  المطبقة في الاتصالات. كلمات المفاتيح: شبه ناقل؛ ليزر؛ بئر كمومي؛ طول موجة الانبعاث.

## Résumé

L'amélioration des composants électroniques est l'un des défis majeurs de l'optoélectronique pour augmenter les débits d'information dans les fibres optiques et diminuer leurs facteurs de pertes.

Dans ce travail, nous avons concentré notre attention sur l'étude et optimisation de la structure InGaAs /GaAs, GaAs/AlGaAs de l'émission infrarouge. Ce mélange ternaire, qui est un composé de semi-conducteurs III-V, a des caractéristiques très importantes, pour cela nous avons étudiés les différents paramètres structuraux comme (paramètre de maille, désaccord de maille, épaisseur critique ...etc.) et électroniques comme l'énergie de son gap, l'énergie de quantification, l'énergie de transition et la mobilité (électrons, trous). Nous avons également étudié les différents facteurs liés au laser, que nous avons utilisé pour calculer la longueur d'onde émise à un puits quantique par la résolution de l'équation de Schrödinger en utilisant l'un des méthodes numériques. Nous avons trouvés à des concentrations d'indium optimales ( $x \leq 30\%$ ) que notre structure peu atteindre les longueurs d'ondes 0.85  $\mu\text{m}$ , 1.3  $\mu\text{m}$  et 1.55  $\mu\text{m}$  qui sont applicable dans le télécom.

**Mots clés :** semi-conducteur, laser, puits quantique, longueur d'onde d'émission.

## Abstract

The progress of electronic components is one of the main challenges of optoelectronics to increase data rates in optical fibres and reduce their loss factors. In this work we have focused our attention on studying and optimizing the InGaAs/ GaAs, GaAs/AlGaAs structure of infra-red emission. This triangular alloy, which is a compound of semi-conductors III-V, has a very important characteristic, that's why we have studied the different structural and electronic parameters as (Lattice constant, Strain et Critical thickness...) the energy of its gap, quantification energy, transition energy and mobility (electrons, holes). We also studied the various factors related to the laser, which we used to calculate the wavelength emitted from a quantum well by solving the Schrödinger equation using one of the numerical methods. We also found at optimal concentrations of indium that our structure can achieve the wavelengths 0.85  $\mu\text{m}$ , 1.3  $\mu\text{m}$  and 1.55  $\mu\text{m}$  which are applicable in the telecom.

**Keywords:** Semi-conductor, laser, quantum well, wavelength.

# Remerciements

---

Je tiens tout d'abord à remercier Dieu le tout puissant. Mes honorables parents pour leurs  
patiences et encouragements.

Je tiens tout d'abord à exprimer toute ma reconnaissance à mon promoteur Pr. Aissat  
Abdelkader pour sa contribution remarquable et son conseils fructueux et pour son suivi au  
bon déroulement de ce projet. Ainsi que mes honorables jury Mme la présidente Ouiz Souad et  
Mr Bounenri Annar.

J'adresse mes vifs remerciements à mes collègues de groupe d'optoélectronique: Hocine, Wafu,  
Abdelmoumen et Meriem qui m'ont permis de bénéficier de leurs aides consistantes et de  
partager leurs expériences acquises au cours de leurs travaux de recherche.

Je remercie toute personne contribuant à la réussite de ce projet. Et plus spécialement mon chef  
de département Mr. Mouzali Aziz, Mon chef d'option Mme Baba Ahmed Latifu ainsi  
que la responsable de Laboratoire Fundapl Mr Benamer Abdel Amine.

merci

A

Ma chère famille, ma chère maman, et mon adorable papa, Mes sœurs, ma princesse sœur Rafik  
surtout mes chers neveux Akrem, Abdelrahmene et Abdelmoumen. Ainsi qu'à mes amis et à  
toute personne qui m'a aidé.

---

## Table des matières

### Chapitre I

Introduction générale.....	1
1.1 Introduction.....	2
1.2 Généralités sur les semi-conducteurs .....	2
1.3 Les semi-conducteurs III-V .....	4
1.3.1 Définition.....	4
1.3.2 Propriétés des matériaux III-V .....	4
1.3.3 Structure cristalline.....	6
a- Structure cubique.....	6
b- Structure zinc blende.....	7
1.4 Structure atomique .....	8
1.4.1 Laser a diode semi-conducteur .....	8
1.4.2 Structure atomique .....	8
1.4.3 La structure de base d'un atome.....	8
1.4.4 Niveaux d'énergies.....	9
1.4.5 Electrons de valence.....	10
1.4.6 Ionisations.....	10
1.4.7 Propriétés électroniques de GaAs (Arséniure de gallium).....	10
1.4.8 Propriétés optiques de InGaAs/GaAs.....	11
1.5 Propriétés physico-chimique des éléments.....	11
1.5.1 Propriétés physico-chimique d'Indium .....	11
1.5.1.1 Propriétés physiques et chimiques.....	11
1.5.1.2 Composés à base d'indium.....	12
1.5.1.3 Alliages.....	12
1.5.1.4 Toxicité.....	12
1.5.2 Propriétés physico-chimique de l'Aluminium.....	13
1.5.2.1 Alliages.....	13
1.5.2.2 Ressources et abondances de l'aluminium .....	13
1.5.2.3 Propriétés physiques de l'aluminium .....	13
1.5.2.4 Propriétés chimiques de l'aluminium.....	14
1.5.2.5 Effets et applications .....	14
1.5.2.6 Effets et applications .....	14
1.5.3 Propriétés physico-chimiques d'Arsenic.....	14
1.5.3.1 Propriétés physiques et chimiques.....	14

1.5.3.2 Propriétés toxiques.....	14
1.5.4 Propriétés physico-chimiques de gallium.....	14
1.5.4.1 Propriétés physiques et chimiques.....	15
1.5.4.2 Alliages.....	15
1.5.4.3 Applications optoélectroniques.....	16
1.6 Structure de bande d'énergie d'un semi-conducteur.....	16
1.6.1 La bande d'énergie d'un semi-conducteur.....	17
1.6.2 Le gap direct et indirect.....	17
1.7 Hétérostructures.....	18
1.7.1 Notion d'épitaxie.....	18
1.8 Introduction sur les lasers.....	18
1.8.1 Définition du laser.....	18
1.8.2 Principe de laser.....	18
1.8.3 Avantages de laser.....	19
1.9 Applications des lasers à semi-conducteurs.....	19
1.9.1 Applications médicales.....	19
1.9.2 Applications des lasers télécom aux besoins militaires.....	20
1.9.3 Autres applications générales.....	20
2. Les nanostructures.....	21
2.1 Puits quantique.....	21
2.1.1 Définition d'un puits quantique.....	21
2.1.2 Les types de puits quantique.....	23
2.4 Les propriétés de l'absorption.....	24
2.5 L'étude des paramètres électroniques.....	24
2.5.1 Le paramètre de maille.....	25
2.5.2 La contrainte.....	25
2.5.3 Epaisseur critique.....	28
2.6 L'effet de la contrainte sur les bandes d'énergies.....	28
2.6.1 L'effet de la contrainte sur les bandes de conduction et de valence à deux composantes.....	29
2.7 Les états énergétiques dans un puits quantique.....	30
2.7.1 Puits quantique de profondeur finie.....	32
3- Le gain optique.....	34
4-Conclusion.....	35

## Chapitre II

II. Résultats et discussions des simulations.....	36
<b>II.1 La structure InGaAs/GaAs .....</b>	<b>36</b>
II.1.1 Introduction.....	36
II.1.1.1 Le paramètre de maille .....	37
II.1.1.2 La contrainte .....	37
II.1.1.3 Epaisseur critique.....	37
II.1.1.4 L'énergie de la bande interdite contrainte et non contrainte.....	38
II.1.1.5 La longueur d'onde d'émission.....	39
II.1.1.6 Le barrière de potentiel .....	39
II.1.1.7 Le taux de confinement.....	40
II.1.1.8 La mobilité d'InGaAs/GaAs.....	41
II.1.1.8.1 La mobilité des électrons.....	41
II.1.1.8.2 La mobilité des trous.....	41
II.1.2 Energie de quantification.....	42
II.1.3 Energies de transitions.....	43
II.1.3 Les longueurs d'ondes d'émission.....	44
II.1.4 Conclusion .....	46
<b>II.2 La structure GaAs/AlGaAs .....</b>	<b>47</b>
II.2.1 Introduction.....	47
II.2.1.1 Le paramètre de maille .....	47
II.2.1.2 La contrainte .....	48
II.2.1.3 L'épaisseur critique .....	48
II.2.1.4 L'énergie de la bande interdite.....	49
II.2.1.5 La mobilité de GaAs/AlGaAs.....	49
II.2.2 Comparaison des deux matériaux InGaAs/GaAs et GaAs/AlGaAs .....	50
II.2.2.1 La contrainte.....	50
II.2.2.2 Barrière de potentiel.....	51
II.2.2.3 L'énergie de la bande interdite .....	52
II.2.2.3 L'épaisseur critique.....	53
II.2.3 L'énergie de quantification.....	53
II.2.4 Energie de transition.....	55
II.2.5 La longueur d'onde d'émission.....	55
II.2.6 Le gain optique.....	56
II.2.7 Conclusion .....	58
Conclusion générale .....	59
Bibliographie.....	60

## Liste des tableaux et figures

<b>Tableau 1.1</b> Exemples des semi-conducteurs. ....	4
<b>Tableau 1.2</b> un extrait de la classification périodique des éléments.....	4
<b>Tableau 1.3</b> propriétés des principaux composés binaires III-V à 300 K.....	5
<b>Tableau 1.4</b> Caractéristiques des principaux composés binaires III-V à 300 K.....	5
<b>Figure 1.4</b> a) Cubique b) Cubique centré. c) Cubique face centré.....	6
<b>Figure 1.5</b> plans cristallographiques.....	7
<b>Figure 1.6</b> Structure zinc blende (a) Maille élémentaire (b) Vue de dessus.....	8
<b>Figure 1.6.1</b> Le modèle atomique de Bohr illustrant les électrons en orbite autour du noyau.....	9
<b>Figure 1.7</b> schéma de la structure de bandes d'énergies.....	16
<b>Figure 1.8</b> Transitions inter-bandes d'électron dans un semi-conducteur gap direct (b) gap indirect.....	17
<b>Figure 1.9</b> La technique PKR par un laser.....	20
<b>Figure 1.10</b> Géométrie de la structure du puits quantique (1) et (2) .....	22
<b>Figure 1.11</b> Structure d'un puits quantique de type I de InGaAs/GaAs.....	22
<b>Figure I.12</b> Profil de potentiel dans un puits quantique de type I et un puits quantique de type II.....	23
<b>Figure I.13</b> Représentation de trois niveaux possibles des électrons.....	24
<b>Figure I.14</b> Maille cristalline (a, b, c, $\alpha$ , $\beta$ , $\gamma$ ).....	25
<b>Figure I.15</b> Schéma montrant une couche contrainte en compression et Une couche contrainte relaxée.....	27
<b>Figure I.16</b> (a,b,c). Structure de bande d'un semi-conducteur à gap direct dans les trois cas (a) Non contraint (b) contraint en compression (c) contraint en tension.....	29
<b>Figure I.17</b> Puits quantique conventionnel.....	31
<b>Figure II.1</b> La variation du paramètre de maille en fonction de la concentration d'indium.....	36
<b>Figure II.2</b> La variation de la déformation en fonction de la concentration d'Indium.....	37
<b>Figure II.3</b> La variation de l'épaisseur critique en fonction de la concentration d'indium....	38
<b>Figure II.4</b> Variation de l'énergie de la bande interdite de la structure contrainte et non contrainte en fonction de la concentration de l'indium.....	38
<b>Figure II.5</b> Variation des longueurs d'ondes d'émissions de la structure contrainte et sans contrainte en fonction de l'Indium.....	39

<b>Figure II.6</b> Effet de la concentration d'indium sur le décalage des bandes d'énergie.....	40
<b>Figure II.7</b> La variation de taux de confinement en fonction de la concentration d'Indium.....	40
<b>Figure II.8 a)</b> La variation de la mobilité des électrons en fonction de la concentration d'Indium à différentes températures.....	41
<b>Figure II.8 b)</b> La variation de la mobilité des trous en fonction de la concentration d'Indium à différentes températures.....	41
<b>Figure II.9</b> La variation de l'énergie de quantification en fonction de la largeur de la zone active $L_w$ a) porteurs électrons pour $x=0.10$ b) porteurs électrons pour $x=0.30$ .....	42
<b>Figure II.10</b> La variation de l'énergie de quantification en fonction de la largeur de la zone active $L_w$ a) porteurs trous lourds pour $x=0.10$ b) porteurs trous lourds pour $x=0.30$ .....	43
<b>Figure II.11</b> La variation de l'énergie de transition en fonction de la largeur de la zone active $L_w$ a) pour $x=0.10$ , b) pour $x=0.30$ .....	44
<b>Figure II.12</b> L'évolution de la longueur d'onde d'émission de la structure en fonction de la largeur de la zone active $L_w$ a) pour $x=0.10$ , b) pour $x=0.30$ .....	45
<b>Figure II.13</b> variation de la zone active en fonction de la concentration d'indium pour la longueur d'onde d'émission d'une ligne de transmission par fibre optique.....	46

#### Figure de la structure GaAs/AlGaAs

<b>Figure II.1</b> La variation du paramètre de maille en fonction de la concentration d'Aluminium.....	47
<b>Figure II.2</b> La variation de la déformation en fonction de la concentration d'Aluminium.....	48
<b>Figure II.3</b> La variation de l'épaisseur critique en fonction de la concentration d'Aluminium.....	49
<b>Figure II.4</b> Variation de l'énergie de la bande interdite des trous lourds et légers en fonction de la concentration de l'Aluminium.....	49
<b>Figure II.5 (a,b)</b> a)La variation de la mobilité des électrons en fonction de la concentration d'Aluminium à différentes températures ,b) La variation de la mobilité des trous en fonction de la concentration d'Aluminium à différentes températures.....	50
<b>Figure II.6</b> Variation de la déformation en fonction de la composition d'alliage de deux structures InGaAs/GaAs et GaAs/AlGaAs.....	51

<b>Figure II.7</b> Effet de la concentration des alliages sur le décalage de bandes des structures InGaAs/GaAs et GaAs/AlGaAs.....	51
<b>Figure II.8</b> Evolution de l'énergie de la bande interdite des deux structures InGaAs/GaAs et GaAs/AlGaAs.....	52
<b>Figure II.9</b> Effet de la concentration de l'alliage sur les deux structures InGaAs/GaAs et GaAs/AlGaAs.....	53
<b>Figure II.10</b> comparaison des énergies de confinement des porteurs électrons de structures InGaAs/GaAs et GaAs/AlGaAs.....	54
<b>Figure II.11</b> comparaison des énergies de confinement des porteurs trous lourds de structures InGaAs/GaAs et GaAs/AlGaAs.....	54
<b>Figure II.12</b> Comparaison des énergies de transitions des structures InGaAs/GaAs et GaAs/AlGaAs.....	55
<b>Figure II.13</b> Evolution de la longueur d'émission des structures InGaAs/GaAs et GaAs/AlGaAs.....	56
<b>Figure II.14</b> variation du gain optique en fonction de la longueur d'onde pour différentes largeur de la zone active.....	56
<b>Figure II.15</b> variation du gain optique en fonction de la longueur d'onde pour différentes concentrations d'indium.....	56
<b>Figure II.16</b> variation du gain optique en fonction de la longueur d'onde pour différentes largeur de la zone active.....	57
<b>Figure II.17</b> variation du gain optique en fonction de la longueur d'onde pour différentes concentrations d'indium.....	58

---

## Liste des acronymes et abréviations

*In*: Indium.

*Ga*: Gallium.

*As*: Arsenic.

*Al*: Aluminium.

*x* : Concentration d'Indium et d'Aluminium.

*L<sub>w</sub>*: Largeur du puits quantique.

$\Delta\alpha$  : Désaccord paramétrique.

*E<sub>g</sub>* : Énergie de gap.

$\Delta_{so}$ : Bande spin orbite « split-off ».

*lh* : Trou léger (Light hole).

*hh*: Trou lourd (Heavy holes).

*E<sub>v</sub>*: Energie de la bande conduction.

*E<sub>c</sub>* : Energie de la bande valence.

BC: Bande de conduction.

BV : Bande de valence.

K: Vecteur d'onde.

*a* : Paramètre de maille.

*c*: Vitesse de la lumière dans le vide.

$\epsilon_0$ : La permittivité dans le vide.

$m_0$ : La masse effective de l'électron.

$b$  : Coefficient de courbure (Bowling).

$CfC$  : Cubique à face centrée.

$E_i$  : Niveaux d'énergies.

$h\nu$  : Énergie de photon.

$n_1$  : Le niveau fondamental.

$n_2$  : Le premier état excité.

$E_e$  : L'énergie des électrons.

$E_{n\hbar\hbar}$  : L'énème niveau d'énergie des trous lourds (l'énergie quantifiée).

$E_{n\hbar}$  : L'énème niveau d'énergie des trous légers (l'énergie quantifiée).

$\Delta E_{\hbar\hbar}$  : Décalage d'énergie de la bande de trous lourds.

$\Delta E_{\hbar}$  : Décalage d'énergie de la bande de trous légers.

$\lambda$  : Longueur d'onde.

$\lambda_B$  : La longueur d'onde De Broglie.

$m_e^*$  : Masse effective des électrons.

$KT$  : L'énergie thermique.

$E_n$  : L'énergie de quantification.

$\rho(E)$  : Densité d'états.

$E_{x,l}$  : Niveaux d'énergie discrets de confinement suivant  $x$ .

$E_{y,m}$  : Niveaux d'énergie discrets de confinement suivant  $y$ .

$E_{z,n}$  : Niveaux d'énergie discrets de confinement suivant  $z$ .

$m_{hh}$  : Masses effectives isotropes.

$m_{hh}^*$  : Masse effective supérieure (bande des trous lourds).

$m_{lh}^*$  : Masse effective inférieure (bande des trous légers).

$a_s$  : Le paramètre de maille de la couche épitaxiale (InGaAs).

$a_s$  : Le paramètre de maille du substrat (GaAs).

$\varepsilon$  : La déformation ou le désaccord de maille.

$C_{ij}$  : Les coefficients d'élasticité.

$\varepsilon_{||}$  ( $\varepsilon_{yy}$  ou  $\varepsilon_{zz}$ ) : Déformation biaxiale.

$\varepsilon_{\perp}$  ( $\varepsilon_{xx}$ ) : Déformation uni-axiale.

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

$m_s$  : la masse de l'électron

$E_{HH}$  : Energie de la bande de trous lourds.

$E_{LH}$  : Energie de la bande de trous légers.

$\Delta_{hh-lh}$  : Dégénérescence des états énergétiques entre trous lourds et trous légers en  $k = 0$ .

$E_{V,moy}^{hyd}$  : Énergie de centre de gravité de la bande de valence en  $k=0$  qui varient à la contrainte.

$E_c^{hyd}$  : Énergie de centre de gravité de la bande de  $v$  conduction en  $k=0$  qui varient à la contrainte

$\alpha_v$  : Potentiels hydrostatiques de déformation pour la bande de valence.

$\alpha_c$  : Potentiels hydrostatiques de déformation pour la bande de conduction.

$E_{hh}^{cisa}$  : Énergie induite par la contrainte de cisaillement avec la bande de trous lourds.

$E_{lh}^{cisa}$  : Énergie induite par la contrainte de cisaillement avec la bande de trous légers.

$E_{so}^{cisa}$  : Énergie induite par la contrainte de cisaillement avec la bande trous spin-splittée.

$b$ : Est le potentiel de déformation tétragonale.

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

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

$E_g^{cont}$ : Énergie de Gap sous contrainte.

$L_C$ : L'épaisseur critique.

$m_e$ : Masse de l'électron.

$h$  : Constante de Planck.

$E_{ghh}$  Et  $E_{g_{lh}}$ : L'énergie de la bande interdite gap trous lourds et trous légers.

$E_{tr}$ : L'énergie de transition.

$\lambda_e$ : La longueur d'onde d'émission.

$E_{ei}$ : Énergies de quantifications des électrons.

$E_{hi}$ : Énergies de quantifications des trous.

$E_n$ : Niveaux d'énergie dans la bande de conduction.

$E_m$ : Niveaux d'énergie dans la bande de valence.

$k$ : Constant de Boltzmann

$N_p$ : nombre de photons par unité de volume.

$dN_p$ : densité des photons.

$dz$ : direction dans le cristal.

$v_g$ : la vitesse de propagation .

## *Introduction générale*

### *Introduction générale*

Historiquement l'aventure du laser commence en 1917 quand Einstein découvre l'existence du processus d'émission stimulée, c'est-à-dire l'émission d'un photon commandé par un autre photon. En 1951 Weber et Twones aux Etats-Unis, et en 1954 Basov et Prokhrov en Union Soviétique, proposent d'utiliser l'émission stimulée pour amplifier les hyperfréquences.

En 1954 Twones réalise le premier MASER (Microwave Amplification by Stimulated Emission of Radiation). Les recherches se développent de plus en plus jusqu'au 1958 quand Aigrain émet l'hypothèse de l'utilisation des semi-conducteurs pour obtenir l'effet laser et le premier Laser semi-conducteur est réalisé à base de GaAs, en 1962 (Mathieu et coll, 1996) [1].

La microélectronique et l'optoélectronique sont deux domaines émergents, qui s'ouvrent largement aux diverses applications parmi lesquelles on cite la télécommunication par fibre optique. Ce dernier a pour but de transmettre les informations à distance et avec un haut débit en se basant sur des composants perfectionnés émettant dans la gamme de grandes longueurs d'onde. Puisque la silice est vastement omniprésente dans la croûte terrestre, le silicium (Si) a été considéré comme un élément de base pour la conception de la majorité des composants électroniques. Cependant, ce matériau présente une bande interdite indirecte ; ce qui lui rend moins efficace pour la fabrication des composants optoélectroniques de nature émettrice. Pour dépasser cette difficulté, la communauté scientifique s'est investie dans les alliages des semi-conducteurs III-V afin d'avoir des matériaux adaptés à la conception des émetteurs comme les diodes LASER et les diodes électroluminescentes (DEL) ainsi que les photodiodes et les cellules solaires. En ce qui a trait d'assurer l'efficacité de ces derniers, il faut qu'ils soient de haute pureté [1].

Les diodes laser sont apparues peu de temps après ce laser. Elles ont ouvert de nouvelles voies technologiques dans de nombreux domaines dont la plus importante est sans doute l'introduction de ces sources laser dans les télécommunications par fibres optiques. En effet, ces lasers présentent des avantages surtout dans le domaine de télécommunications. Ensuite l'évolution des lasers à semi-conducteurs devient de plus en plus considérable. En ces dernières années, les physiciens se tournaient vers les matériaux III-V qui sont largement imposés en tant que des matériaux de base pour la fabrication des diodes LASER émettant

## *Introduction générale*

dans les fenêtres de la fibre optique à  $0.85\mu\text{m}$ ,  $1.3\mu\text{m}$  et  $1.55\mu\text{m}$ . Les lasers semi-conducteurs à puits quantiques ont un intérêt particulier pour l'industrie et la recherche. On cherche alors de croître d'autres matériaux en accord de maille avec l'arséniure de gallium (GaAs) de faibles coûts et plus rapides. Notre objectif de ce mémoire est d'atteindre les longueurs d'ondes des fenêtres de la fibre optique ( $0.85\ \mu\text{m}$ ,  $1.3\ \mu\text{m}$  et  $1.55\ \mu\text{m}$ ) avec notre structures pour les appliquée aux systèmes de télécommunications [1].

Ce manuscrit sera structuré de trois chapitres précédés d'une introduction générale et clôturés d'une conclusion générale.

Le premier chapitre a pour but de présenter les éléments et les principes de base de la physique dans les semi-conducteurs et décrire leurs applications les plus courantes dans le domaine de la génération et de la détection de lumière.

Le deuxième chapitre nous examinons et discutons les résultats en utilisant des logiciels de simulation (Matlab et Origin) pour la structure laser à puits quantique InGaAs/GaAs pour différents paramètres ainsi que la quantification des énergies.

Enfin, dans le troisième chapitre, nous allons nous intéresser aux résultats et discussions en premier lieu à la structure GaAs/AlGaAs ainsi qu'une petite comparaison des deux matériaux InGaAs/GaAs et GaAs/AlGaAs pour laser.

# *Etude bibliographique de InGaAs/GaAs et GaAs/AlGaAs*

## **1.1 Introduction**

Nous allons aborder dans ce premier chapitre les caractéristiques et les notions fondamentales des semi-conducteurs et précisément les semi-conducteurs de type III-V, ainsi que les propriétés de l'InGaAs tant sur le plan structurel, qu'électronique, physique et optique.

Le but de ce chapitre est de présenter un rappel des principes de base de la physique permettant la modélisation de structures lasers à puits quantiques. En effet, l'étude de cette structure laser impose la connaissance de nombreux paramètres tels que le paramètre de maille, la contrainte, l'épaisseur critique ainsi que l'énergie de la bande interdite et la longueur d'onde d'émission. De plus, Nous verrons plus de détail au cours de ce chapitre sur l'énergie de quantification de structure laser à puits quantique. Enfin, nous avons élargi notre présentation aux différentes applications des lasers pour l'optoélectronique et la détection.

## **1.2 Généralités sur les semi-conducteurs**

Les semi-conducteurs ont acquis une importance considérable dans notre société, ils constituent une classe bien définie, avec des propriétés physique et optique particulières qui sont sources d'intérêt au plan de la connaissance fondamentale et d'applications. Les semi-conducteurs sont à la base de tous les composants électroniques et optoélectroniques qui entrent dans les dispositifs informatiques, de télécommunications ainsi que la détection.

En électronique rapide et en optoélectronique, les propriétés du silicium sont insuffisantes ayant une mobilité des porteurs relativement petite et transitions électroniques indirectes au seuil d'absorption optique. Dans de telles applications, Les composés semi-conducteurs III-V sont préférables. On citera par exemple quelques composés binaires et ternaires, GaAs, AlAs, InP, InAs, AlGaAs, InGaAs, InGaN..... les propriétés de ces matériaux sont très intéressantes pour les performances de ces dispositifs [2]. Le tableau 1.1 présente quelques exemples de composés semi-conducteurs en fonction des éléments qui les constituent dans le tableau de Mendeleïev.

Colonne	Semi-conducteur
IV	Si, Ge, SiC
III-V	GaAs, GaP, InAs, AlAs, InP
	AlGaAs, InGaAs, InGaN
	AlGaAsP
II-VI	CdS, CdSe, CdTe, ZnS, ZnSe
	CdHgTe

**Tableau 1.1** Exemples des semi-conducteurs [2].

### 1.3 Les semi-conducteurs III-V

#### 1.3.1 Définition

Les semi-conducteurs III-V sont des matériaux composés formés à partir d'un élément de la colonne III (Ga, Al et In) et d'un élément de la colonne V (As) de la classification périodique de Mendeleïev. Ils sont largement utilisés en électronique rapide et en optoélectronique pour réaliser des composants tels que des diodes, des transistors, des thyristors, des circuits intégrés ainsi que des lasers à semi-conducteur [2].

#### 1.3.2 Propriétés des matériaux III-V

Le tableau 1.2 regroupe un extrait de classification périodique des éléments (les chiffres en haut et en bas représentent respectivement le nombre atomique et la masse atomique) [2].

IIIb	VIb	Vb
$B_{10.811}^5$	$C_{12.011}^6$	$N_{14.007}^7$
$Al_{26.982}^{13}$	$Si_{28.086}^{14}$	$P_{30.974}^{15}$
$Ga_{69.723}^{31}$	$Ge_{72.64}^{32}$	$As_{74.922}^{33}$
$In_{114.82}^{49}$	$Sn_{118.71}^{50}$	$Sb_{121.76}^{51}$

**Tableau 1.2** un extrait de la classification périodique des éléments [2].

L'étude de leur structure de bandes montre toutefois, que les éléments les plus légers donnent des composés dont la bande interdite est large et indirecte, et dans laquelle la masse effective des électrons est élevée. Des matériaux, comme les composés contenant du bore, ou de l'aluminium, sont ainsi moins intéressants pour l'électronique rapide. Le tableau (1.3) résume cette situation en donnant quelques propriétés des principaux composés binaires III-V [3].

Composés III-V	$E_g$ (eV)	$m^*/m_0$	$\mu$ (cm <sup>2</sup> /V.S)	a (Å)	$\alpha$ ( $\Gamma$ ) (meV/K)
GaN	3.36	0.19	380	a=3.189 c=5.185	0.593
GaP	2.26	0.82	110	5.4512	0.5771
GaAs	1.42	0.067	8500	5.6533	0.5405
InP	1.35	0.077	4600	5.8686	0.363
InAs	0.36	0.023	33000	6.0584	0.276
AlAs	2.16			5.6605	0.885
InSb	0.17	0.0145	80000	6.4794	0.320

Tableau 1.3 Propriétés des principaux composés binaires III-V à 300 K [3].

Afin d'obtenir le schéma de bande il est nécessaire de connaître un certain nombre de paramètres physiques des matériaux considérés. Ces paramètres sont récapitulés pour les principaux binaires dans le tableau ci-dessous.

Matériau	GaAs	InAs	AlAs
a (nm)	0.56533	0.60584	0.56605
$E_G$ (eV)	1.42	0.36	2.16
$\Delta_{SO}$ (eV)	0.34	0.4	0.28
$E_P$ (eV)	25.7	22.2	21.1
$C_{11}$ (10 <sup>11</sup> dyn/cm <sup>2</sup> )	11.88	8.329	1250
$C_{12}$ (10 <sup>11</sup> dyn/cm <sup>2</sup> )	5.38	4.526	534
$dE_G/dP$ (10 <sup>-5</sup> eV/bar)	1.15	1	1.2
$a_v$ (eV)	2.7	2.5	2.47
$b_v$ (eV)	-1.7	-1.8	-2.3
$m_e$ ( $m_0$ )	0.067	0.023	0.15
$m_{hh}$ ( $m_0$ )	0.45	0.4	0.32
$m_{lh}$ ( $m_0$ )	0.082	0.026	0.97
$m_{so}$ ( $m_0$ )	0.0154	0.014	0.28

Tableau 1.4 Caractéristiques des principaux composés binaires III-V à 300 K [3].

### 1.3.3 Structure cristalline

Un cristal est un solide dont les constituants sont assemblés de manière régulière et périodique, formée d'un ensemble ordonné d'un grand nombre d'atomes, de molécules ou d'ions. Un cristal est constitué d'un assemblage périodique de particules. Il peut être décrit par translation suivant les trois directions de référence d'une entité de base qu'on appelle la maille. La description du cristal nécessite la connaissance du réseau et celle du motif. C'est Auguste Bravais qui établit dans la première moitié du XIX<sup>ème</sup> siècle un classement des différents types de cristaux. Il montra que les cristaux peuvent se répartir en sept systèmes cristallins, parmi lesquels le système cubique [3].

#### a- Structure cubique

La plupart des semi-conducteurs qui contiennent plus d'un type d'atomes (les composés binaires) ont souvent des structures cristallines reposant sur le système cristallin cubique, comme l'indique la figure 1.1 :

- Cubique simple : les atomes sont aux sommets du cube (figure (1.1.a)).
- Cubique centré : identique au cubique simple mais avec un atome au centre du cube (figure (1.1.b)).
- Cubique à faces centrées : identique au cubique simple mais avec un atome au centre de chaque face (figure (1.1.c)) [3].

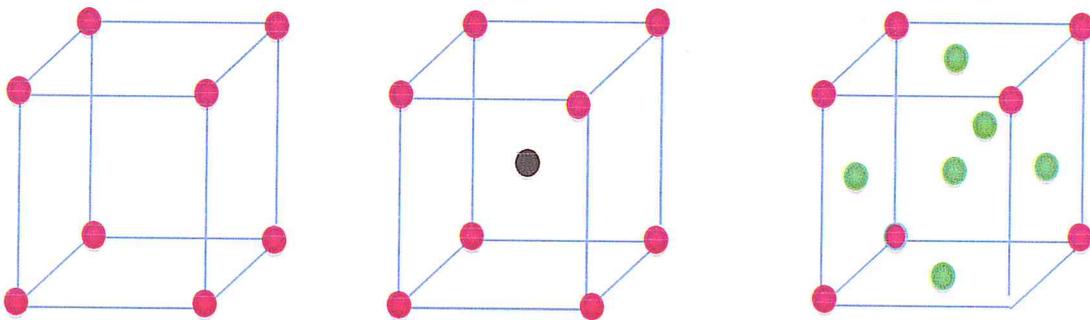


Figure 1.4 a) Cubique simple

b) Cubique centré.

c) Cubique faces centrées.

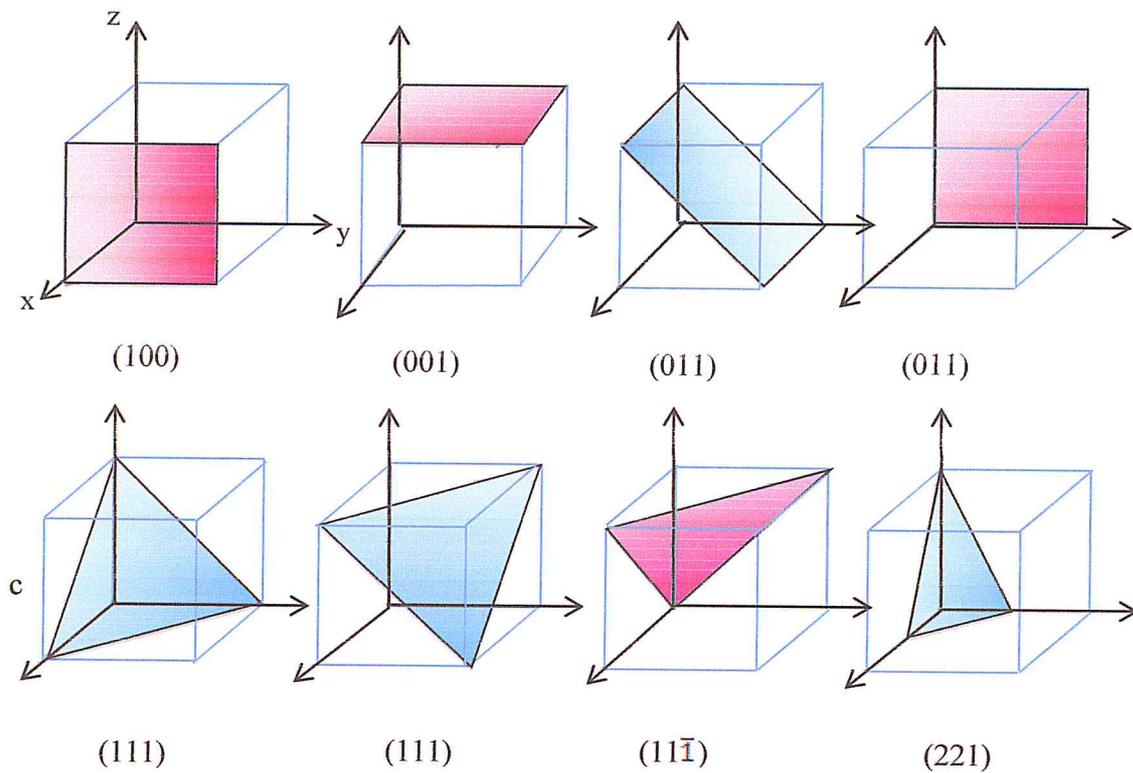


Figure 1.5 plans cristallographiques.

La figure 1.5 représente les indices d'une famille de plans réticulaires qui sont définies par 3 entiers notés  $(h\ k\ l)$  appelés Indices de Miller

### b- La structure Zinc blende

Il existe plusieurs types de structures uniques, tel que la structure cristalline zinc blende (également appelée sphalérite). Les semi-conducteurs III-V se cristallisent dans la structure Zinc blende, en deux sous-réseaux cubique face centrée, l'un formé par les éléments de la colonne III et l'autre par les éléments de la colonne V. Cette structure cristalline est illustrée à la figure 1.6 ci-dessous [4] :

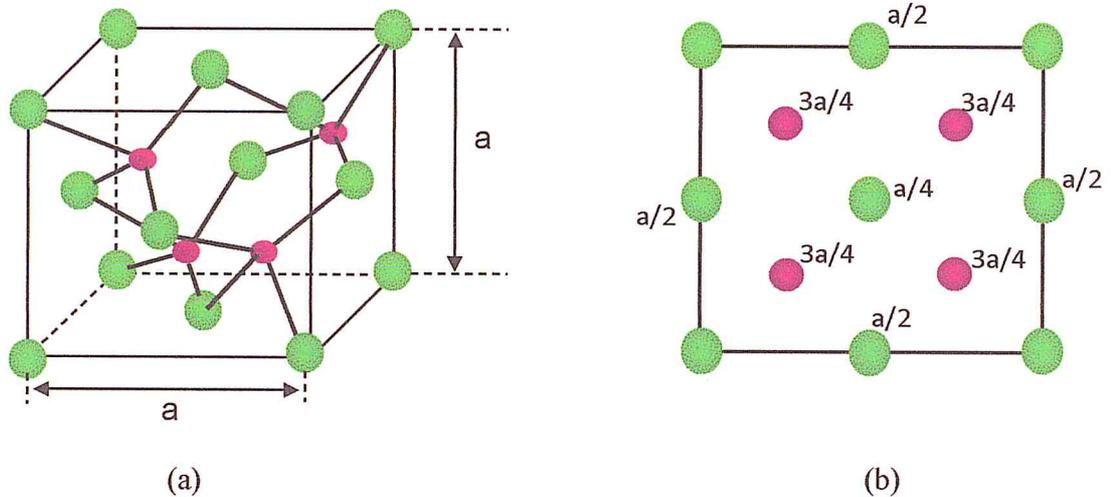


Figure 1.6 Structure zinc blende (a) Maille élémentaire de GaAs (b) Vue de dessus

## 1.4 La structure atomique

### 1.4.1 Laser a diode semi-conducteur

Les composants électroniques tels que les diodes, les transistors et les circuits intégrés sont fabriqués à partir d'un matériau semi-conducteur. Pour comprendre le fonctionnement de ces composants, nous devons posséder une connaissance de base de la structure des atomes et de l'interaction des particules qui les composent [5].

### 1.4.2 Structure atomique

Toute matière est composée d'atomes et tout atome est composé d'électrons, de protons et de neutrons. Dans cette section, il sera question de la structure de l'atome, numéro atomique, de la couche d'un électron et orbites, niveaux d'énergies, des électrons de valence et ionisations.

Le matériau semi-conducteur est important puisque la configuration de certains électrons dans un atome est le facteur clé qui détermine à quel point un matériau donné conduit le courant électrique.

### 1.4.3 La structure de base d'un atome

Un atome est la plus petite particule d'un élément qui possède les caractéristiques de cet élément. Chacun des 109 éléments connus possède des atomes différents de ceux des autres éléments. Ceci donne à chaque élément une structure atomique unique. Selon la théorie

classique de Bohr, les atomes possèdent une organisation de type planétaire avec un noyau au centre et des électrons en orbite autour de lui.

Le noyau est constitué de particules chargées positivement, qu'on appelle protons et de particules non chargées appelées neutrons. Les particules élémentaires qui portent la charge négative sont appelées électrons. Chaque type d'atome contient un certain nombre d'électrons et de protons qui le distinguent des atomes de tous les autres éléments [5].

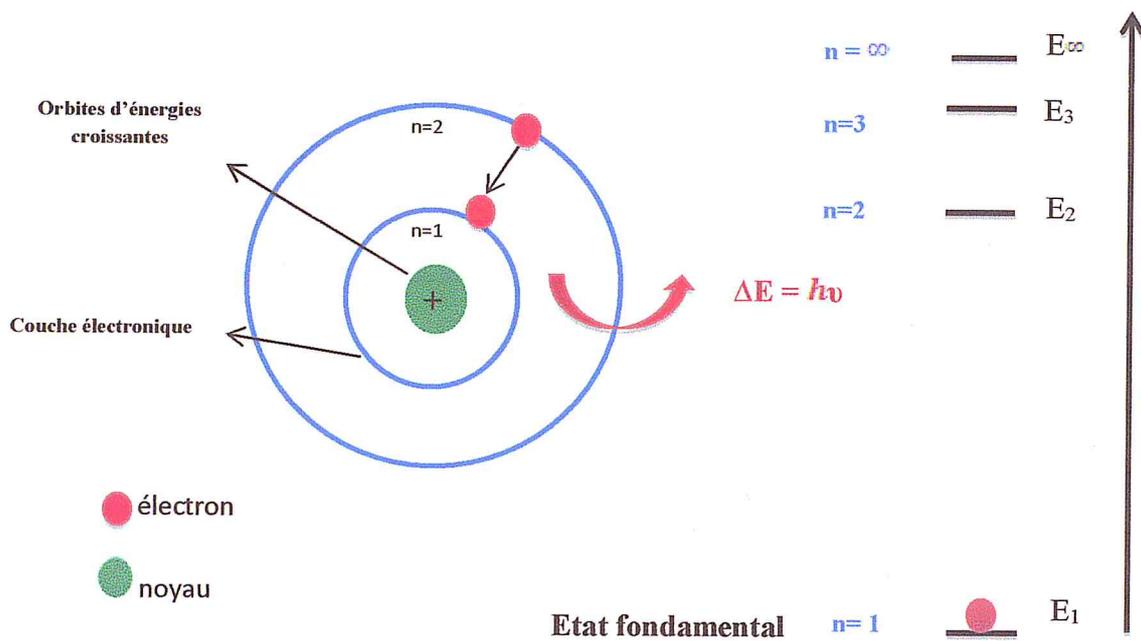


Figure 1.6.1 Le modèle atomique de Bohr illustrant les électrons en orbite autour du noyau.

#### 1.4.4 Niveaux d'énergies

À chaque éloignement distinct (orbite) du noyau correspond un certain niveau énergétique. Dans un atome, les orbites sont regroupées en bandes énergétiques appelées couches. Un atome donné possède un nombre fixe de couches. Chaque couche possède un nombre maximal fixe d'électrons pour des niveaux d'énergie admissibles (orbites). Les différences entre les niveaux d'énergie à l'intérieur d'une couche sont beaucoup plus petites que la différence d'énergie entre les couches. Les couches sont désignées K, L, M, N, et ainsi de suite, K étant celle la plus près du noyau [5].

### 1.4.5 Électrons de valence

Les électrons sur les orbites plus éloignées du noyau ont une énergie plus grande et sont moins fortement liés à l'atome que ceux situés plus près du noyau. Ceci s'explique du fait que la force d'attraction entre les charges positives du noyau et les charges négatives des électrons diminue à mesure qu'on s'éloigne du noyau. Les électrons avec les niveaux d'énergie les plus élevées existent dans la couche la plus éloignée d'un atome et sont relativement moins liés à cet atome. La couche la plus éloignée est connue sous le nom de couche de valence et les électrons dans cette couche sont appelés électrons de valence. Ces électrons de valence contribuent aux réactions chimiques et aux liaisons à l'intérieur de la structure d'un matériau, déterminant ses propriétés électriques [5].

### 1.4.6 Ionisation

Ionisation Lorsqu'un atome absorbe de l'énergie d'une source de chaleur ou de lumière, les niveaux énergétiques des électrons sont augmentés. Lorsqu'un électron acquiert de l'énergie, il se déplace vers une orbite plus éloignée du noyau. Puisque les électrons de valence possèdent plus d'énergie et qu'ils sont moins étroitement liés à l'atome que les électrons situés à proximité du noyau, ils peuvent bondir vers des orbites supérieures plus facilement lorsqu'une énergie externe est absorbée. Si un électron de valence reçoit une quantité suffisante d'énergie, il peut en fait s'échapper de la couche extérieure et de l'emprise de l'atome. Le départ d'un électron de valence laisse un atome, de charge neutre, avec un excédent de charge positive (plus de protons que d'électrons). Le processus de la perte d'un électron de valence est appelé ionisation, l'atome résultant de charge positive étant appelé ion positif [5].

### 1.4.7 Propriétés électroniques de GaAs (Arséniure de gallium)

L'arséniure de gallium est un semi-conducteur appartenant à la filière III-V, il est utilisé généralement comme substrat. Ce matériau est caractérisé par un gap optique direct et donc des propriétés optiques intéressantes.

Par ailleurs, le maximum de la bande de valence et le minimum de la bande de conduction sont situés au centre de la zone du Brillouin du réseau réciproque  $\Gamma$  en  $k=0$  avec  $k$  est le vecteur d'onde.

L'écart énergétique entre ces deux extrema est appelé gap optique ou énergie de la bande interdite notée  $E_g$  qui est directe permettant une probabilité de transitions radiatives plus importante que celle du matériau à gap indirect. La valeur de la bande interdite ( $E_g = 1.42$  eV à  $T=300^\circ$  K) présente un grand intérêt pour le domaine des télécommunications (Transmission par fibre optique dans l'infrarouge) [5].

#### 1.4.8 Propriétés optiques d'InGaAs/GaAs

Dans cette étude, on avait besoin des notions de bases telles que le paramètre de maille qui est l'un des paramètres importants afin de calculer la variation de l'énergie de la bande interdite de la structure ternaire étudiée dont le paramètre de maille s'écrit comme suit :

$$a_{InGaAs} = x \cdot a_{InAs} + (1 - x) \cdot a_{GaAs}$$

Les semi-conducteurs III-V présentent le plus souvent, une structure de bande à gap direct. La notion de la bande interdite est introduite dans les semi-conducteurs et les isolants dont la bande de conduction et celle de valence sont séparées par une bande interdite  $E_g$  [5].

Par ailleurs, l'énergie de la bande interdite de notre structure ternaire InGaAs/GaAs s'écrit sous la forme suivante :

$$E_g(x) = x \cdot E_{g\ InAs} + (1 - x) \cdot E_{g\ GaAs} + x \cdot (1 - x) \cdot b$$

$$\text{avec : } b_{InGaAs} = 0.477$$

### 1.5 Propriétés physico-chimique des éléments

#### 1.5.1 Propriétés physico-chimique d'Indium

L'indium est l'élément chimique de numéro atomique 49, de symbole In. Appartenant à la famille des métaux pauvres, l'indium est un métal gris brillant, malléable, il possède une chimie proche de celles de l'Aluminium et du Gallium. De plus, ses surfaces brillantes présentent de fortes réflectances proches de celle de l'argent métallique, justifiant son utilisation pour les différentes propriétés suivantes :

##### 1.5.1.1 Propriétés physiques et chimiques

Tout comme le gallium, qui présente le même aspect, l'indium est un métal qui ne réagit pas avec l'air ou l'eau, sauf en présence d'oxygène libre. Tandis que le point de fusion de

l'indium est de 157°C, son point d'ébullition est de 2027°C. Il résiste à la corrosion à température ordinaire. Il est rare et constitue une ressource non renouvelable.

Son électronégativité égale à 2 et son rayon atomique est de 0.162 nm. L'indium n'a aucun rôle biologique. On dit qu'il stimule le métabolisme s'il est à de petites doses [6].

### **1.5.1.2 Composés à base d'indium**

Il existe une grande variété d'alliages, conçus souvent pour des applications spécifiques.

L'arséniure d'indium, de formule InAs, est un composé utilisé dans les détecteurs infrarouges ainsi que dans les diodes laser.

L'antimoniure d'indium, de formule InSb, il est utilisé comme semi-conducteur dans des détecteurs infrarouges. L'oxyde d'indium, de formule In<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, peut se former par oxydation de l'indium à haute température par le dioxygène [7].

### **1.5.1.3 Alliages**

L'indium peut se combiner avec un certain nombre significatif de métaux et former des systèmes binaires ou ternaires. On distingue les alliages avec le bismuth (Bs), le cadmium (Cd), le plomb (Pb), l'étain (Sn) souvent utilisés dans les applications nécessitant un bas point de fusion ; ainsi que d'autres alliages plomb-argent-indium (Pb-Ag-In), plomb-étain-indium (Pb-Sb-In) et étain-indium (Sn-In) qui ont des points de fusion entre 100°C et sont utilisés dans les soudures. Ils offrent une importante résistance à la corrosion des alcalins.

L'indium existe également sous forme d'oxydes : In<sub>2</sub>O<sub>3</sub> , In<sub>2</sub>O, InO<sub>2</sub> [7].

L'indium peut également former des composés intermétalliques en se combinant avec des métaux précieux, le magnésium, le groupe du fer et les terres rares. Il peut s'associer à des éléments metalloïdes ou non-metalloïdes : InSb, InP, InAs. Ces composés constituent la famille la plus importante des composés semi-conducteurs à base d'indium [7].

### **1.5.1.4 Toxicité**

Même si la toxicité du métal peut paraître faible, les sels d'indium peuvent être de violents poison lorsqu'ils sont injectés par intraveineuse ou sous-cutanée. Ils perturbent alors le fonctionnement du cœur, du sang mais aussi du foie et des reins en altérant et même en détruisant de façon irréversible les organes si les sels sont administrés de façon chronique ou à des doses relativement forte, relevant du milligramme. Des composés d'indium sont rarement produits par la plupart des personnes. Tous les composés d'indium devraient être considérés

comme fortement toxiques. L'indium compose des dommages au cœur, au rein, et au foie... [7].

## 1.5.2 Propriétés physico-chimique de l'Aluminium

L'aluminium est l'élément chimique de numéro atomique 13, de symbole Al. Il appartient au groupe 13 du tableau périodique ainsi qu'à la famille des métaux pauvres.

L'aluminium pur est un métal malléable de couleur argent, qui présente une faible densité (léger par rapport à son volume) et qui ne s'altère pas (ne s'abîme pas) [7].

### 1.5.2.1 Alliages

L'Aluminium est le métal le plus utilisé après le fer, grâce à sa légèreté et sa bonne conductivité électrique et thermique. L'aluminium pur est mou et fragile et donc facilement déformable, mais avec des petites quantités de cuivre, magnésium, manganèse, silicium et d'autres éléments, il peut former des alliages aux propriétés variées [8].

### 1.5.2.2 Ressources et abondance en aluminium

L'aluminium est le troisième élément constitutif de l'écorce terrestre. Il représente près de 8 % de la composition de la lithosphère après l'oxygène (42 %) et le silicium (28 %). L'aluminium est rarement présent dans la nature sous sa forme pure car il est trop **réactif**, il ne se rencontre pas à l'état libre dans l'environnement et se combine à d'autres éléments pour former des composés : le plus souvent sous forme d'oxydes tels que dans le minerai de bauxite, mais aussi sous forme d'aluminosilicates comme dans l'argile, l'aluminium est alors insoluble dans l'eau. En revanche, en présence de matières organiques dissoutes, l'aluminium complexé aux nitrates, sulfates, chlorures est soluble dans l'eau. L'aluminium est un métal abondant sur Terre, c'est même **le plus abondant dans l'écorce terrestre**. Aujourd'hui, de nombreux procédés permettent son extraction, faisant de l'aluminium un métal **facile à obtenir** et donc bien moins coûteux qu'auparavant [8].

### 1.5.2.3 Propriétés physiques de l'aluminium

L'aluminium est un métal remarquable notamment de par sa **légèreté**, basse densité, grande **malléabilité** (il est mou), sa **résistance à la corrosion**, à la traction, etc. L'aluminium est un très bon conducteur. En revanche, s'il s'oxyde, il perd cette conductivité et devient

isolant. La densité de l'aluminium est trois fois plus faible que celle de l'acier ou du cuivre. Deuxième métal le plus malléable et sixième plus ductile, l'aluminium est facilement usiné ou moulé. Il est paramagnétique et ne provoque pas d'étincelles. L'aluminium devient transparent dans les ultraviolets extrêmes quand il est bombardé par un laser à électrons libres [8].

#### **1.5.2.4 Propriétés chimiques de l'aluminium**

Ce métal étant très réactif, cela en fait un bon **catalyseur** pour certaines réactions chimiques. Son électronégativité égale à 1.5 et son rayon atomique est de 0.143 nm. Tandis que le point de fusion de l'Aluminium est de 660.4°C, son point d'ébullition est de 2467°C.

#### **1.5.2.5 Effets et applications**

L'aluminium a des **effets neurotoxiques** de par ses conséquences sur le système nerveux central. De nos jours, l'utilisation de l'aluminium dans les services de dialyse est très encadré et les risques bien moins importants. Par ailleurs, les nombreuses propriétés physico-chimiques de l'aluminium en font un métal très utilisé pour des applications diverses et variées dans l'industrie du bâtiment, des transports, dans l'agroalimentaire (conservation, colorants, additifs, etc.), l'emballage (boîtes-boissons, barquettes alimentaires), la fabrication d'ustensiles de cuisine, en pharmacie (pansements gastriques, antiacides, adjuvants de vaccins, verre pharmaceutique), chirurgie (céramiques en chirurgie orthopédique et dentaire, alliages dans les implants orthopédiques), en cosmétologie (antiperspirants, produits de maquillage...) ainsi que dans le traitement des eaux d'alimentation [8].

### **1.5.3 Propriétés physico-chimiques d'Arsenic**

L'arsenic est l'élément chimique de numéro atomique 33, noté par le symbole As. Le corps simple correspondant est un solide cristallin argenté. Son électronégativité égale à 2.18 et son rayon atomique est de 115 pm. La majorité de l'arsenic est produit par métallurgie à partir du Cuivre, du Plomb, du Zinc, du Cobalt, de l'Or... [9].

#### **1.5.3.1 Propriétés physiques et chimiques**

L'arsenic existe sous trois formes allotropiques : La forme allotropique jaune  $As_4$ , la forme allotropique grise et la forme allotropique Semi-métallique  $As_{noir}$  (C'est la forme la plus stable

de l'arsenic, de couleur gris métallisée. Elle est utilisée pour ses propriétés conductrices de l'électricité et de la chaleur) [10]. On le produit beaucoup en alliages, que ce soit avec du cuivre, du plomb, de l'or, afin d'augmenter sa dureté. Il entre dans la composition de beaucoup d'éléments électroniques comme les Batteries, Toner pour imprimantes, Lumières à LED, Cellules photovoltaïques et les Cartes à puces [10].

### **1.5.3.2 Propriétés toxiques**

La toxicité de l'arsenic dépend de sa forme. Dans sa forme inorganique (pur ou lié à l'oxygène, au soufre ou au chlore) il se révèle extrêmement toxique, même en faible dose. Dans sa forme organique (lié au carbone ou à l'hydrogène) il est toxique si ingéré en grande quantité mais bénéfique à petite dose. Les besoins de l'homme sont d'environ 15 µg par jour [11].

### **1.5.4 Propriétés physico-chimique de Gallium**

Le gallium est l'élément chimique de numéro atomique 31, de symbole Ga. Il appartient au groupe 13 (ou IIIA) du tableau périodique ainsi qu'à la famille des métaux pauvres. Le gallium pur a un aspect argenté et il se brise sous forme solide de la même manière que le verre [12]. Le volume du gallium augmente de 3,1 % lorsqu'il se solidifie et pour cette raison ne doit pas être stocké dans un récipient en verre ou en métal. Il peut ronger les autres métaux par diffusion dans leur réseau métallique [12]

#### **1.5.4.1 Propriétés physiques et chimiques**

Le gallium est un métal amphotère c'est-à-dire qu'il a un comportement tantôt acide, tantôt basique. Il se dissout dans les solutions alcalines, pour donner des gallates et dans les acides minéraux, à l'exception de  $\text{HNO}_3$  qui le passive. Le gallium peut y être maintenu liquide grâce au phénomène de surfusion, il en va de même pour le mercure, le césium et le rubidium.

On peut citer aussi d'autres propriétés comme Son électronégativité qui est égale à 1.81 ainsi que son rayon atomique qui est de 0.161 nm. Il a aussi une structure cristalline orthorhombique. Tandis que le point de fusion de gallium est de 29.8°C et son point d'ébullition est de 2070°C.

### 1.5.4.2 Alliage

Le gallium s'allie avec de nombreux autres métaux. On ne le rencontre jamais à l'état libre dans la nature. Il est toujours en association soit avec le Zinc et le germanium, soit avec l'Aluminium, ses voisins dans le tableau périodique. Il est en effet utilisé dans diverses technologies de pointe telles que les technologies de l'information et de la communication ou les nanotechnologies [12].

### 1.5.4.3 Applications optoélectroniques

Les appareils optoélectroniques tels que les diodes lasers, LED et les photo-détecteurs. Dans ces applications, c'est principalement sous forme d'arséniure (GaAs), un semi-conducteur très utilisé en optoélectronique ou de nitrure (GaN) que le gallium intervient. Cependant, d'autres alliages, comme le phosphure de gallium (GaP) ou (GaSb) sont aussi utilisés [13].

## 1.6 Structure de bande d'énergie d'un semi-conducteur

### 1.6.1 La bande d'énergie d'un semi-conducteur

Dans un solide, les niveaux d'énergie permis sont confinés dans une bande dont la largeur, de l'ordre de l'électronvolt, dépend du cristal et du recouvrement des orbitales atomique. Les électrons d'un atome isolé prenant des niveaux discrets d'énergie, qui sont en fait constituées de sous-niveaux. En étendant ce raisonnement à  $N$  atomes, cette dégénérescence fait apparaître des bandes d'énergies permises, qui peuvent s'interpréter et se séparer à nouveau lorsque la distance interatomique diminue, donnant des bandes d'énergies interdite de largeur  $E_g$  dite « Gap ». Les solides ont une structure de bandes ; on distingue les bandes d'énergie permises, et les bandes d'énergie interdites. Les bandes d'énergie se remplissent selon la loi statistique de Fermi : on montre qu'à 0 K, les électrons occupent tous les niveaux d'énergie inférieure à l'énergie de Fermi, ou niveau de Fermi. Sa valeur est caractéristique du cristal considéré. On met alors en évidence la bande de valence et la bande de conduction comme le montre la figure 1.7 [22].

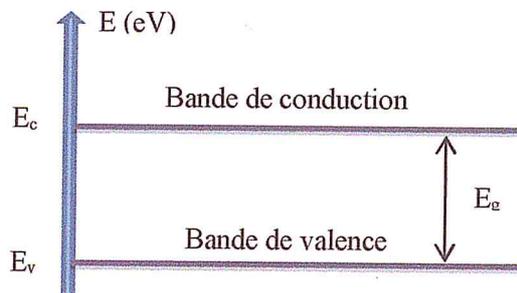


Figure 1.7 schéma de la structure de bandes d'énergies.

La figure 1.7 illustre un schéma simplifié de la structure de bande d'énergie. La bande supérieure est appelée « bande de conduction » et à 0 K, ne contient pas d'électrons contrairement à la bande inférieure appelée « bande de valence ». Entre ces deux bandes se trouve une zone de largeur  $E_g$  (eV) interdite aux électrons et appelée « bande interdite » ou « Gap ». Le fait que ces deux bandes (BC ou BV) soient entièrement pleines ou vides implique que la conduction électrique.

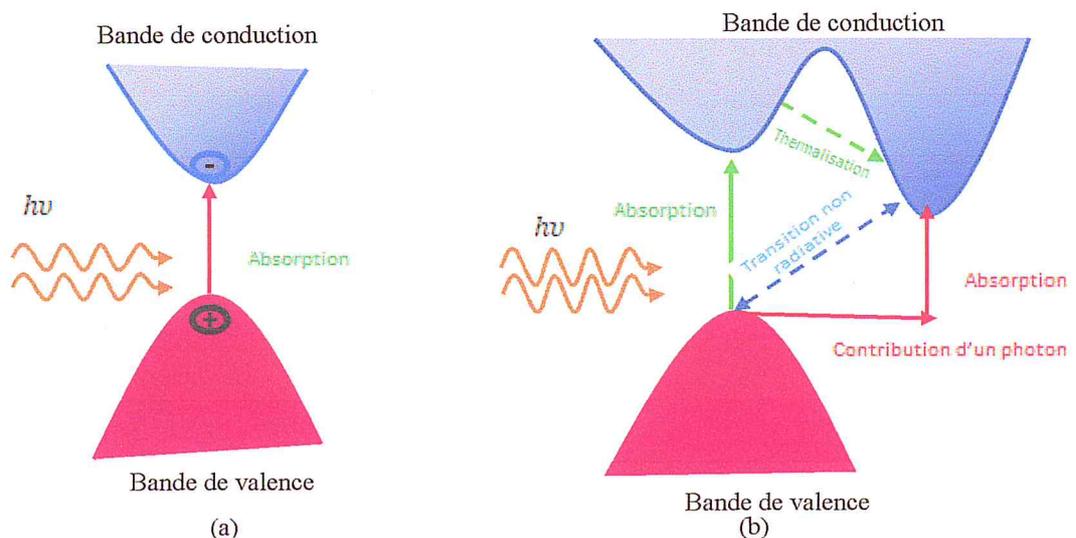
## 1.6.2 Le gap direct et indirect

### 1.6.2.1 Semi-conducteur à gap direct

Un semi-conducteur est dit à bande interdite direct quand le minimum de la bande de conduction et le maximum de la bande de valence sont acquis pour une même valeur du vecteur d'onde  $\vec{k}$ . Cela signifie que les énergies des deux bandes sont localisées au centre de la zone de Brillouin. Ceci a des conséquences importantes de point de vue des propriétés électroniques et optiques. Les transitions inter-bandes s'effectuent verticalement et sont donc radiatives (figure 1.8 (a))

### 1.6.2.2 Semi-conducteur à gap indirect

Dans le cas d'un semi-conducteur à bande interdite indirect, le minimum de la bande de conduction est déplacé par rapport au maximum de la bande de valence dans l'espace  $\vec{k}$ . Les transitions entre les extrema des bandes sont obliques et impliquent un changement du vecteur d'onde de l'électron, donc non radiatives (figure 1.8 (b)).



**Figure 1.8** Transitions inter-bandes d'électron dans un semi-conducteur gap direct (b) gap indirect

## **1.7 Hétérostructure**

### **1.7.1 Notion d'épitaxie**

L'épitaxie est un processus de croissance cristalline, couche par couche. Elle est souvent réalisée entre deux matériaux de structure cristalline identique. Cette opération qui consiste à faire croître une couche de matériau Semi-conducteur sur un substrat, cette couche ayant la même orientation cristalline que le substrat. On utilise cette propriété d'orientation mutuelle pour fabriquer des dispositifs électroniques à semi-conducteur. L'épitaxie est généralement nécessaire dans les structures à semi-conducteurs pour moduler les propriétés des matériaux support, telles que dopage par des éléments donneurs ou accepteurs d'électrons ou largeur de bande interdite [14].

## **1.8 Introduction sur les lasers**

L'évolution de la technologie des composants photoniques a un impact direct sur les développements des systèmes optiques courants. Les systèmes de transmission par fibre optique ne cessent de se développer avec un débit élevé. L'amélioration de la qualité des circuits photoniques est l'un des défis majeurs de la microélectronique. De nouvelles techniques de fabrication des dispositifs optoélectronique sont mises en application et de nouveaux matériaux tels que les matériaux III-V à semi-conducteurs ainsi que les hétérostructures à puits quantiques car ils offrent plusieurs propriétés optiques et électriques très intéressants du point de vue de la diminution de perte [14].

### **1.8.1 Définition du laser**

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. Où ondes et photons associés se propagent en phase, au lieu d'être arbitrairement distribués. Cette propriété rend la lumière laser extrêmement directionnelle et d'une grande pureté spectrale.

### **1.8.2 Principe de laser**

Le laser consiste en un milieu amplificateur placé dans une cavité résonante qui fournit un rayonnement d'ondes cohérentes et monochromatiques par émission stimulée. Le milieu actif est un milieu dans lequel les rayons lumineux sont produits. Pour faire cela, il faut stimuler le

milieu actif à l'aide d'un système de pompage, qui va permettre de provoquer l'émission des rayons lumineux. L'excitation du milieu permet d'obtenir l'inversion de population, occupation anormale de niveaux d'énergie élevés, qui favorise l'émission stimulée par rapport à l'émission aléatoire spontanée (dans des proportions décrites par les coefficients d'Einstein). La cavité permet, en effet, de réfléchir au sein du milieu les photons émis, de manière à ce qu'ils provoquent à leur tour une émission stimulée (production de photons de même fréquence, de même phase et de même direction de propagation que ceux du rayonnement stimulateur). La longueur d'onde d'émission doit correspondre à un mode propre de la cavité (résonateur) pour que puisse s'y installer un système d'ondes stationnaires. Le gain de l'ensemble milieu amplificateur-cavité doit être supérieur à ses pertes.

### 1.8.3 Avantages de laser

Les progrès significatifs pour les télécommunications datent seulement de la fin des années 1990. Leurs avantages sur les diodes classiques sont [22] :

- faible seuil, fort rendement (>50%).
- peu sensible à la température - haute fréquence de modulation (10GHz).
- faisceau monomode circulaire.
- facilement structurable en matrice.
- processus de fabrication collectif et donc peu cher.

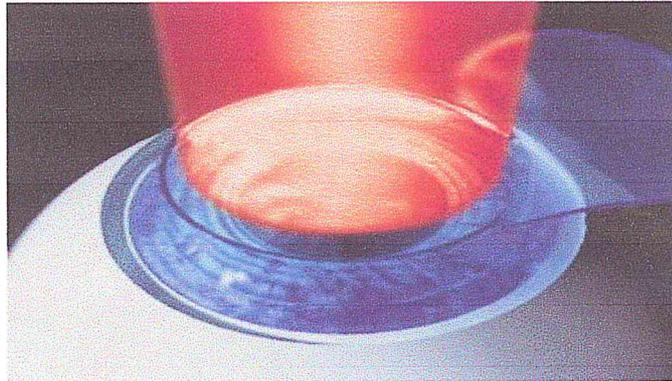
## 1.9 Applications des lasers à semi-conducteurs

Les particularités de la lumière laser sont aujourd'hui utilisées pour des applications extrêmement variées. Dans l'industrie, on utilise les lasers pour leur puissance et leur précision dans différentes opérations. Contrairement à des outils classiques, ils ont pour avantage de ne pas s'user. En informatique et dans le domaine audiovisuel, les diodes laser permettent la lecture et l'enregistrement des données sur des supports optiques numériques comme les DVD et les CD. Les lasers sont également employés dans le domaine des Télécommunications via les réseaux de Fibre optique. Il est assez difficile d'en donner une liste exhaustive tant les applications du laser sont multiples [15].

### 1.9.1 Applications médicales

Les lasers ont de nombreuses applications médicales en ophtalmologie (traitement de la Myopie et de la cataracte), en dermatologie (épilation et détatouage), en dentisterie (soins des gencives et traitement des caries) et en phlébologie (traitement des varices) Cette

technique est généralement beaucoup moins traumatisante que les techniques chirurgicales classiques. Pour la technique PKR le laser est directement appliquée sur la surface de la cornée comme la montre l'image :



**Figure 1.9** La technique PKR par un laser [15].

### **1.9.2 Applications des lasers télécom aux besoins militaires**

Les sources lasers développées pour les télécommunications sur fibre optique ont considérablement évolué depuis une décennie. La cause est le formidable marché potentiel des télécommunications à haut débit lié au téléphone, aux réseaux câblés et à l'Internet. Les qualités exigées pour ces sources sont leur qualité spatiale et spectrale, ainsi que leurs performances en modulation. Les différentes technologies des sources employées sont les leds, les diodes laser, les micros lasers, les amplificateurs optiques (semi-conducteurs ou à fibre optique dopée), les lasers fibrés... Et afin d'amplifier le rayonnement issu d'une diode laser on aura besoin des amplificateurs à semi-conducteurs, ainsi que des applications militaires comme Les communications espace libre, Les lidars (Light Detection and Ranging) cohérents (radars laser), La télémétrie et l'imagerie laser, La spectrométrie des gaz... etc [22].

### **1.9.3 Autres applications générales**

#### Télémétrie:

C'est un procédé technique permettant de calculer ou de mesurer la distance d'un objet lointain par utilisation d'éléments optiques, acoustiques ou radioélectriques (un télémètre laser, par exemple de calculer la distance terre lune, en posant des réflecteurs sur la lune qui renvoie le rayon laser sur terre. Ce système appelé télémétrie et maintenant utilisé par les force de l'ordre pour calculer les vitesses avec des radars laser (ou jumelle). Il sert aussi à la transmission d'informations entre les satellites [16].

## Fibre optique et laser :

La fibre optique est un moyen de transmettre des informations par câble en verre ou en plastique qui conduit la lumière (en signaux électriques) à un débit nettement supérieur à celui des câbles utilisés durant ces dernières années. De plus l'utilisation d'un laser comme source de cette lumière permet de limiter les pertes pendant le trajet. En effet, le laser est une source de lumière monochromatique sa largeur spectrale lui offre un pouvoir de dispersion bien plus faible que la normale [16].

## **2. Les nanostructures**

### **2.1 Puits quantique**

L'amélioration des performances des dispositifs optoélectroniques a été la conséquence de l'apparition des puits quantiques sous contraintes qui ont contribué à la conception de nouveaux dispositifs optoélectroniques plus performants en étudiant les effets de la contrainte sur les propriétés physiques, électroniques et optiques de ces semi-conducteurs.

#### **2.1.1 Définition d'un puits quantique**

Une structure à puits quantique de type I est obtenue en faisant croître une couche fine de quelques nm d'un matériau semi-conducteur de faible gap entourée de deux couches d'un autre matériau semi-conducteur de grand gap. La discontinuité entre les bandes d'énergies dans les deux matériaux crée une barrière de potentiel qui confine les porteurs (électron-trous) dans le puits quantique. 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 [17] (figure 1.10 (a,b,c), figure 1.11). Lorsque l'épaisseur de la couche active devient comparable à la longueur d'onde de De Broglie  $\lambda_F$  donnée par :

$$\lambda_F = \frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2m_e^*E_F}} \quad (1.1)$$

$E_F$  : Niveau de Fermi.

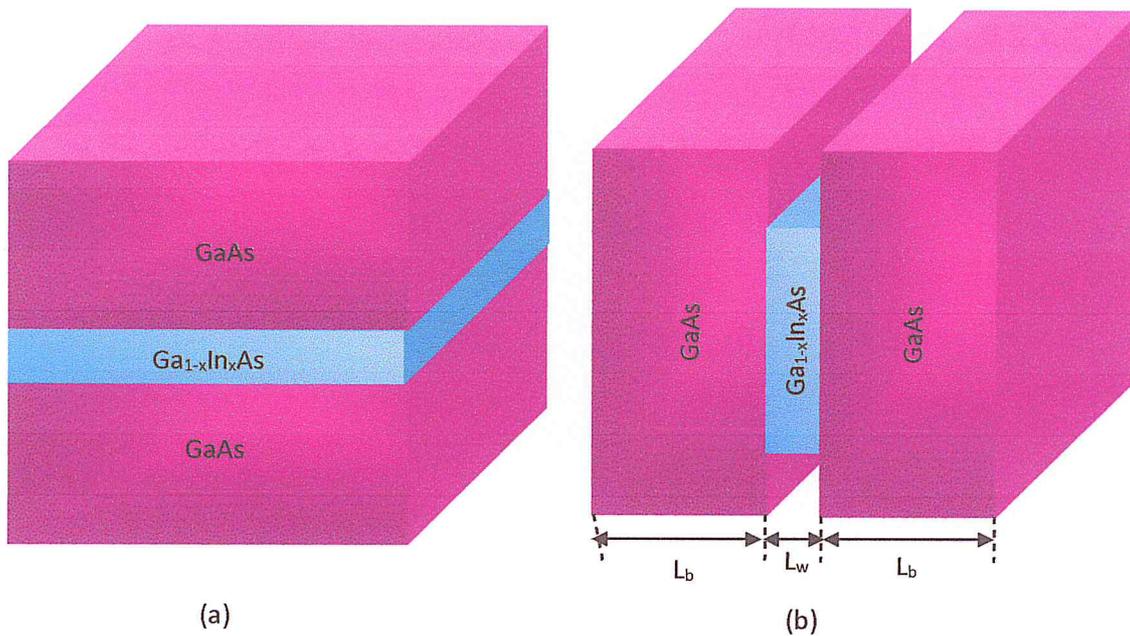


Figure 1.10 (a,b) Géométrie de la structure du puits quantique.

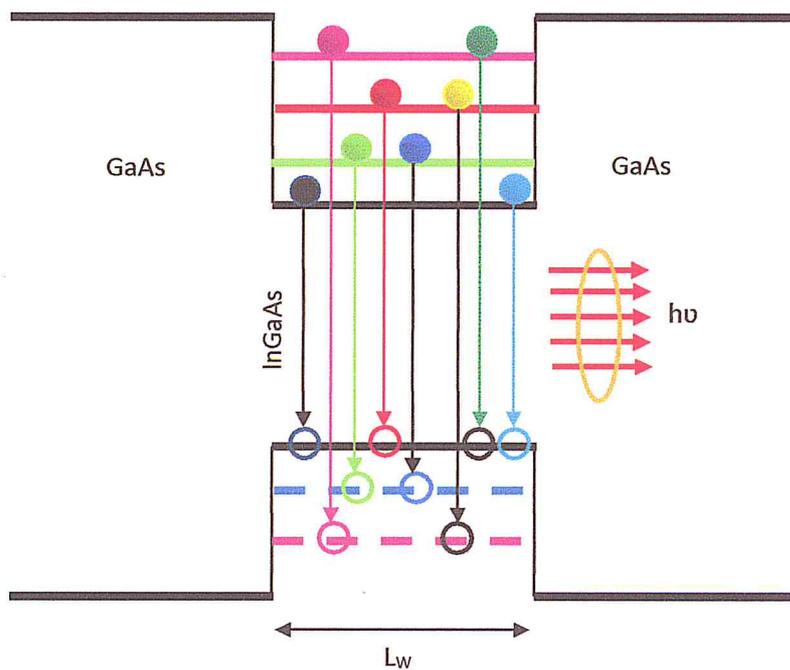


Figure 1.11 Structure d'un puits quantique de type I de InGaAs/GaAs.

## 2.1.2 Les types de puits quantique

Selon la nature de la discontinuité de bande interdite à l'interface puits-barrière, on distingue deux types de puits quantiques :

Profil de potentiel dans un puits quantique de type I et un puits quantique de type II.

### 2.1.2.1 Puits quantique de type I

Les Puits quantiques de type-I sont des puits où les électrons et les trous sont confinés dans le même matériau constituant le puits.

### 2.1.2.2 Puits quantique de type II

Les Puits quantiques de type-II sont des puits où les électrons et les trous sont confinés séparément dans le puits et la barrière, respectivement.

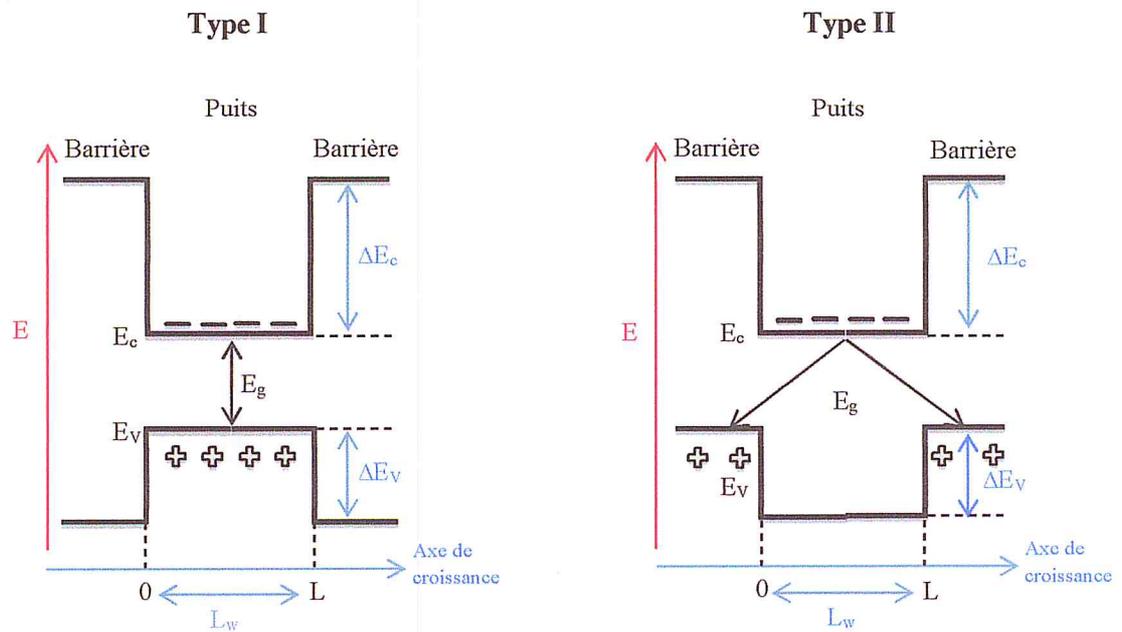


Figure I.12 Profil de potentiel dans un puits quantique de type I et un puits quantique de type II.

## 2.4 Les propriétés de l'absorption

Considérons deux niveaux d'énergie d'un atome (état fondamental et état excité) et voyons les transitions possibles entre ces deux états. Les photons peuvent réagir avec la matière de trois manières différentes :

- ✓ L'absorption.
- ✓ L'émission spontanée.
- ✓ L'émission stimulée.

Dans le premier cas, un atome stable absorbe l'énergie de photon pour passer à un niveau d'énergie supérieur (état excité). Contrairement au deuxième cas, un atome initialement excité retombe spontanément à un niveau d'énergie inférieur en émettant un photon.

Dans le dernier cas, La présence de lumière lors de la désexcitation d'un atome provoque l'émission d'autres photons qui ont par la suite les mêmes caractéristiques que celui qui était présent au départ. Pour que l'émission stimulée puisse avoir lieu, il faut qu'il y ait plus d'atomes excités que d'atomes dans le niveau inférieur. On parle alors d'une inversion de population [18].

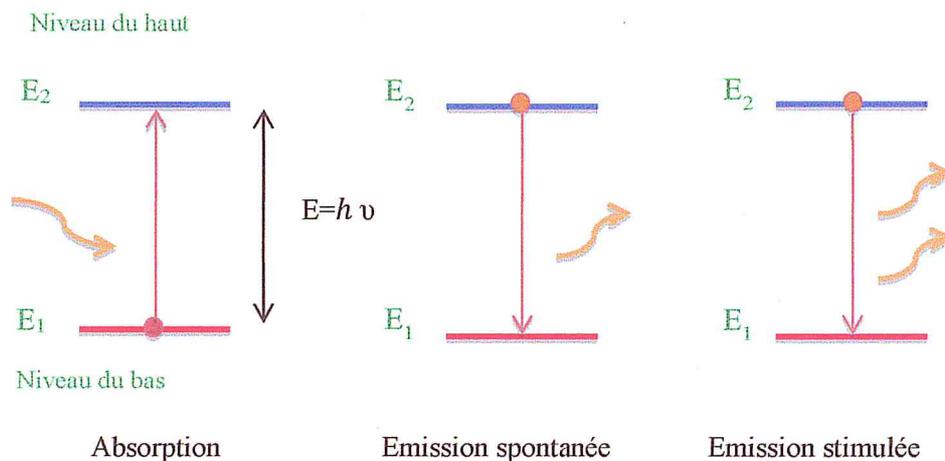


Figure I.13 Représentation de trois niveaux possibles des électrons.

## 2.5 L'étude des paramètres électroniques

La loi de Vegard est une loi empirique indiquant que les valeurs des propriétés d'un alliage (énergie de la bande interdite, paramètre de maille, constantes élastiques, etc.) peuvent être déterminés par une interpolation linéaire des valeurs des propriétés de ses composants.

### 2.5.1 Le paramètre de maille

Du point de vue géométrique, à deux dimension, la maille est le plus petit parallélogramme qui suffit à décrire le plan, cette maille est définie par les vecteurs  $a$  et  $b$  et l'angle compris entre ces deux vecteurs. A trois dimensions, Une maille cristalline quelconque (triclinique :  $a \neq b \neq c$  et  $\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$ ) est définie par six paramètres cristallographiques, à savoir les paramètres linéaires (trois vecteurs  $a$ ,  $b$  et  $c$ ) et les paramètres angulaires (trois angles  $\alpha$ ,  $\beta$  et  $\gamma$ ). La position occupée par un atome dans la maille s'appelle un nœud [19].

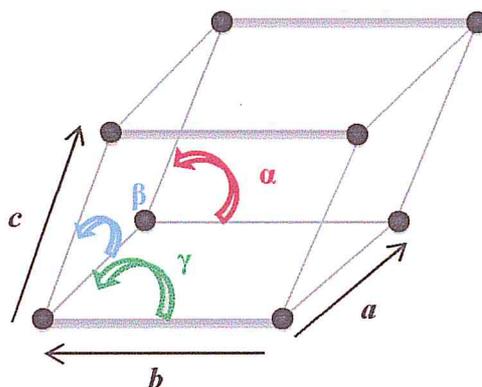


Figure I.14 Maille cristalline ( $a$ ,  $b$ ,  $c$ ,  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$ )

### 2.5.2 La contrainte

L'épitaxie des matériaux semi-conducteurs désaccordés est aujourd'hui bien maîtrisée. En effet, l'utilisation des hétéro-structures contraintes permet de varier l'énergie de la bande interdite du matériau par le changement des positions en énergie des bandes de valence et de conduction. Lorsque les paramètres de maille des deux matériaux sont différents, le matériau formant la couche la plus épaisse dans l'hétérojonction impose sa maille à la deuxième couche ; ceci entraîne l'existence d'une contrainte biaxiale dans le matériau de faible épaisseur. La figure I.15 illustre la structure de deux semi-conducteurs SC1 et SC2 ayant des paramètres de mailles différents. Dans le cas où la maille du substrat  $a_s$  est supérieure à celle de la couche épitaxie  $a_e$ , la contrainte est en tension et dans le cas contraire, elle est en compression. Après le dépôt, la couche épitaxie se déforme pour rattraper le désaccord de maille, soit  $\vec{x} = (x, y, z)$ , la position d'un atome dans le semi-conducteur A avant épitaxie ; sa

nouvelle position est  $\vec{X}'' = \vec{\bar{e}}\vec{X}$  où  $\vec{\bar{e}} = \begin{pmatrix} \varepsilon_{xx} & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon_{yy} & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon_{zz} \end{pmatrix}$  tenseur de déformation de cristal

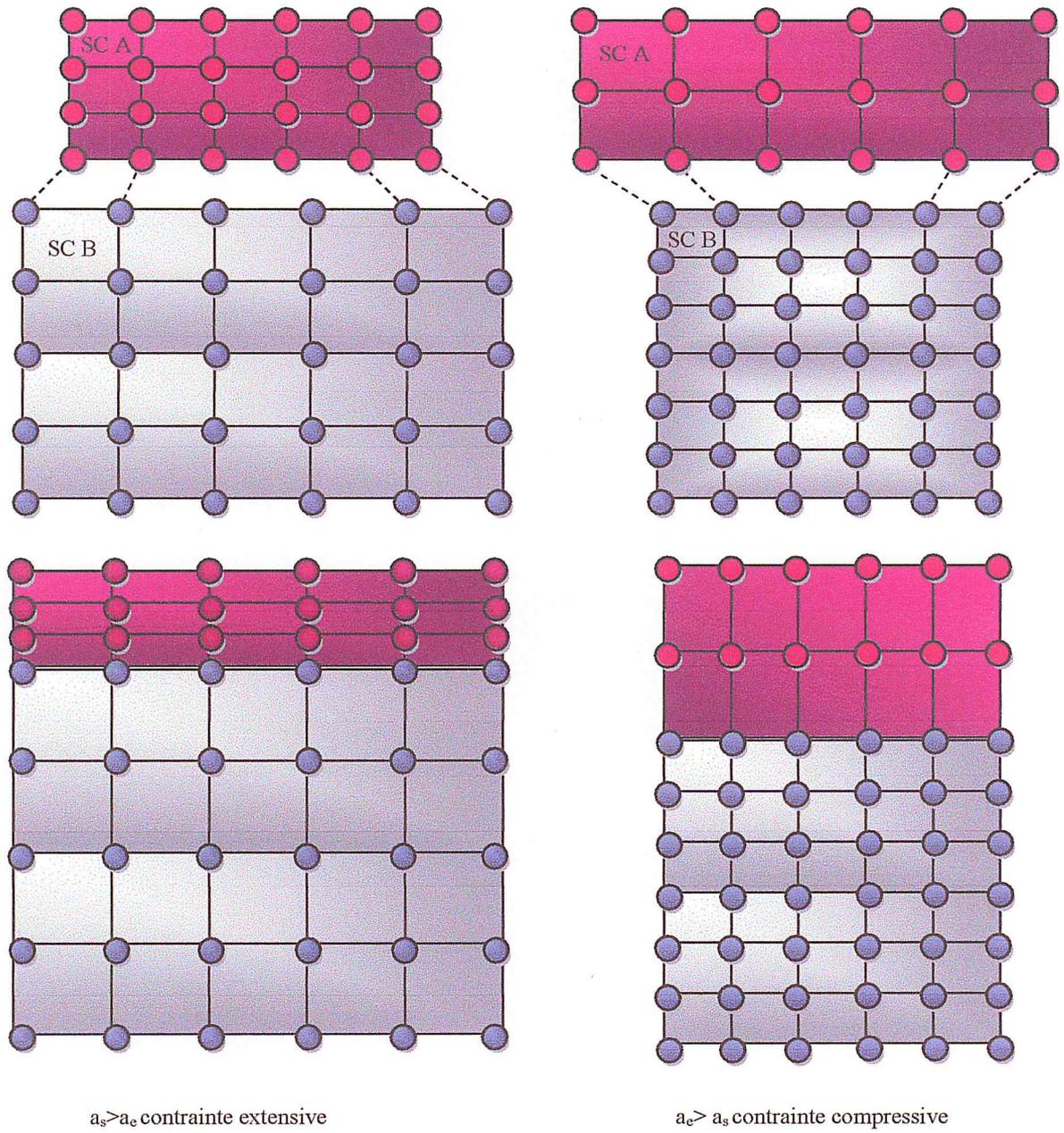
dans le cas d'une déformation biaxiale.

$$\varepsilon = \varepsilon_{xx} = \varepsilon_{yy} = \frac{\alpha_s - \alpha_g}{\alpha_g} \quad (1.2)$$

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

$$\varepsilon_{zz} = -2 \frac{c_{12}}{c_{11}} \varepsilon_{xx} \quad (1.3)$$

Prenons le cas des deux cristaux comme le montre la figure I.15.



**Figure I.15** Schéma montrant une couche contrainte en compression et Une couche contrainte relaxée

### 2.5.3 Epaisseur critique

Pour acquérir un puits quantique adéquat, il est nécessaire que la couche épitaxiale soit d'excellente qualité cristalline. Cette couche doit être complètement contrainte et ne faut pas présenter des dislocations qui forment des centres de recombinaison efficace. La croissance typique d'une hétéroépitaxie n'est réalisable que si l'épaisseur de la couche épitaxiale ne dépasse pas une certaine épaisseur limite appelé épaisseur critique  $L_c$  [20]. Au-delà de cette épaisseur la contrainte devient trop importante et le matériau épitaxiale rattrape ce désaccord de maille par le biais de dislocations. K. Koksal et B. Gonul [21] présente un modèle qui permet le calcul de l'épaisseur critique en fonction des concentrations de l'alliage :

$$h_c = \frac{\alpha_s}{k\sqrt{2}\pi\epsilon_{xx}} \times \frac{1-(0.25\gamma)}{(1+\gamma)} \times \ln\left(\frac{h_c\sqrt{2}}{\alpha_s} + 1\right) \quad (1.4)$$

$\epsilon_{xx}$ : Désaccord paramétrique.

$k$ : Coefficient égal à 1 dans le cas d'un super-réseau ; à 2 pour un puits quantique ; 4 dans le cas d'une couche unique.

$\gamma$ : Coefficient de poisson

$$\gamma = \frac{C_{22}}{C_{11} + C_{22}} \quad (1.5)$$

$C_{ij}$  sont les Coefficients d'élasticités

### 2.6 Effet de la contrainte sur les bandes d'énergie

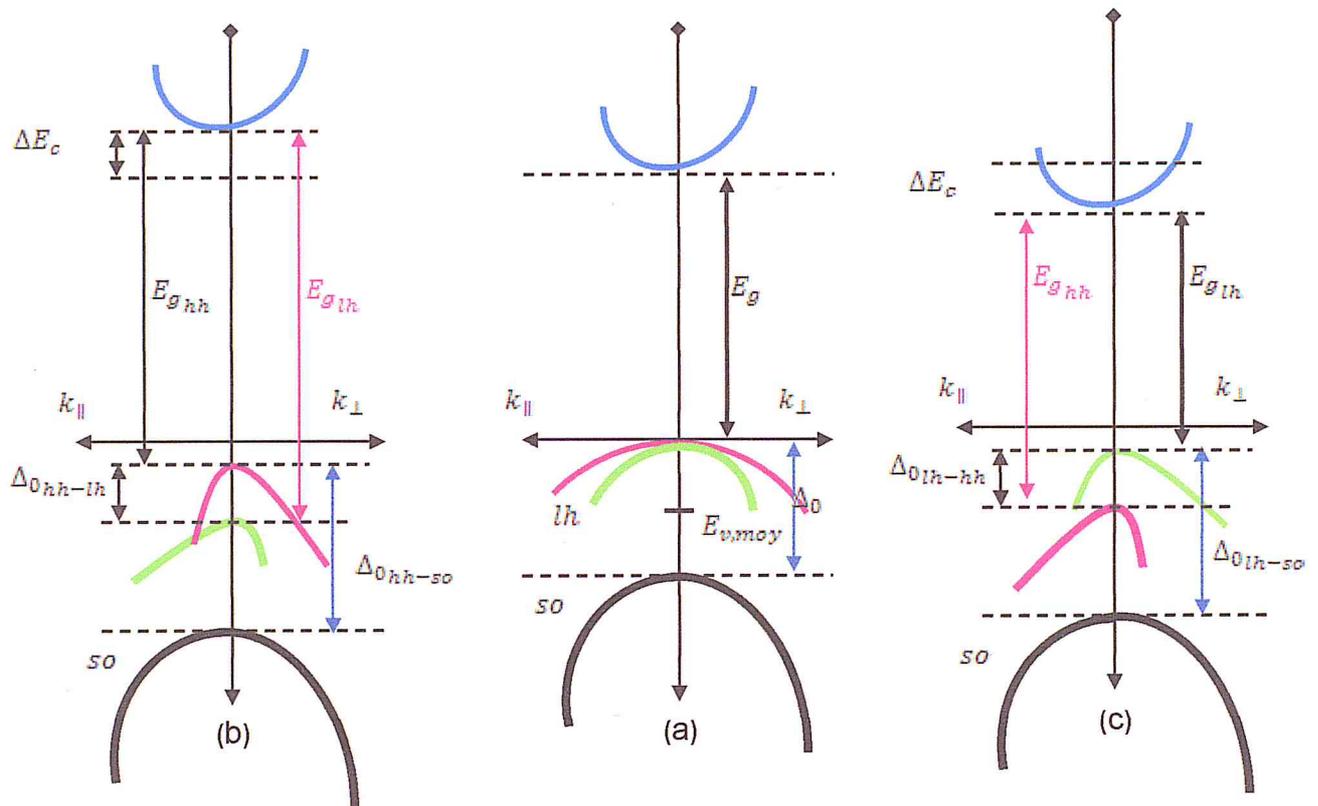
En accord de maille ( $a_c = a_s$ ), les bandes de trous lourds et trous légers sont isotropes et dégénérées au centre de la zone de Brillouin  $\Gamma=0$ , la bande des spin-splittée étant située à une énergie  $\Delta_0$  en dessous de ces deux bandes (figure 1.16 (a,b,c)). Le centre de gravité de la bande de valence d'énergie moyenne  $E_{v_{moy}}$  se trouve par conséquent à  $\Delta_0/3$  au dessous du haut de la bande de valence en  $k = 0$  [21].

$$E_{v_{moy}} = \frac{E_{hh} + E_{lh} + \Delta_0}{3} \quad (1.6)$$

$E_{hh}$ : L'énergie de la bande des trous lourds.

$E_{lh}$ : L'énergie de la bande des trous légers.

$\Delta_0$ : L'énergie de décalage des bandes des trous spin-splittée



**Figure I.16** (a,b,c). Structure de bande d'un semi-conducteur à gap direct dans les trois cas (a) Non contraint (b) contraint en compression (c) contraint en tension.

### 2.6.1 L'effet de la contrainte sur les bandes de conduction et de valence à deux composantes

- La composante hydrostatique liée à la déformation selon l'axe de croissance  $oz$ , provoque un décalage du centre de gravité de la bande de valence ainsi que le centre de gravité de la bande de conduction.
- La composante de cisaillement liée à la déformation selon les axes  $ox$  et  $oy$ , provoque la dégénérescence des états énergétiques des trous lourds et trous légers.

Pour une couche soumise à une contrainte biaxiale de compression (figure I.16 .b), la composante hydrostatique change le centre de gravité de la structure de bande; la contrainte de cisaillement rend les bandes de valence strictement anisotropes; la bande de plus haute

énergie devient lourde selon  $\vec{k}_\perp$  et légère selon  $\vec{k}_\parallel$  (bande de trous lourds). La bande d'énergie inférieure devient légère selon  $k_\perp$  et lourde selon  $k_\parallel$  (bande de trous légers).

Les décalages énergétiques des centres de gravité des bandes de conduction et de valence en  $k = 0$  issues par la contrainte hydrostatique changent partiellement à la contrainte [20] :

$$\Delta E_c^{hyd} = a_c(2\varepsilon_\parallel + \varepsilon_\perp) \quad (1.7)$$

$$\Delta E_{v,moy}^{hyd} = a_v(2\varepsilon_\parallel + \varepsilon_\perp) \quad (1.8)$$

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

On peut déterminer l'équation du gap contraint  $E_g^c$  :

$$E_g^c = E_c - E_v \quad (1.9)$$

$$E_c = E_{v,moy} + \frac{\Delta_0}{3} + E_g + \Delta E_c^{hyd} \quad (1.10)$$

$$E_v = E_{v,moy} + \frac{\Delta_0}{3} + \Delta E_{v,moy}^{cisa} + \max(\Delta E_{hh}^{cisa}, \Delta E_{lh}^{cisa}) \quad (1.11)$$

- Dans le cas d'une couche épitaxie soumise à une contrainte en compression :

$$\max(\Delta E_{hh}^{cisa}, \Delta E_{lh}^{cisa}) = \Delta E_{hh}^{cisa} \quad (1.12)$$

- dans le cas où la couche épitaxie est soumise à une contrainte en tension :

$$\max(\Delta E_{hh}^{cisa}, \Delta E_{lh}^{cisa}) = \Delta E_{lh}^{cisa} \quad (1.13)$$

$$\Delta E_{hh}^{cisa} = -\frac{\delta E^{cisa}}{2} \quad (1.14)$$

$$\Delta E_{lh}^{cisa} = -\frac{\Delta_0}{2} + \frac{\delta E^{cisa}}{4} + \frac{1}{2} \sqrt{\Delta_0^2 + \Delta_0 \delta E^{cisa} + \frac{9}{4} (\delta E^{cisa})^2} \quad (1.15)$$

$$\delta E^{cisa,100} = 2b(\varepsilon_\parallel + \varepsilon_\perp) \quad (1.16)$$

Où  $b$  est le potentiel de déformation tétragonale.

On peut définir l'énergie du haut de la bande de valence  $E_v$ , ainsi que l'énergie du bas de la bande conduction  $E_c$  comme suit :

$$E_v = E_{v,moy} + \frac{\Delta_0}{3} + \Delta E_{v,moy}^{cisa} + \max(\Delta E_{hh}^{cisa}, \Delta E_{lh}^{cisa}) \quad (1.17)$$

$$E_c = E_{v,moy} + \frac{\Delta_0}{3} + E_g + \Delta E_c^{hyd} \quad (1.18)$$

L'expression du gap s'écrit :

$$E_{g_{hh}} = E_g + \Delta E_c^{hyd} - \Delta E_{v,moy}^{cisa} - \Delta E_{hh}^{cisa} \quad (1.19)$$

$$E_{g_{lh}} = E_g + \Delta E_c^{hyd} - \Delta E_{v,moy}^{cisa} - \Delta E_{lh}^{cisa} \quad (1.20)$$

## 2.7 Les états énergétiques dans un puits quantique

Dans un puits quantique de type I, les porteurs de charge sont confinés dans le même matériau constituant le puits à des niveaux énergétiques différents et pour définir ces valeurs propres d'énergie, nous utilisons et développons l'équation de Schrödinger. La résolution numérique de l'équation de Schrödinger reste un problème très important intervenant dans de nombreux calculs de physique. Les phénomènes sont décrits par la fonction d'onde qui contient toutes les informations sur les particules d'un système ainsi que l'étude du comportement d'une particule confinés dans un puits de potentiel unidimensionnel et d'une largeur  $L_w$ . Ce travail suit l'équation de Schrödinger indépendante du temps à une dimension s'écrit [21]:

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2 \varphi(x)}{dx^2} + V(x) \varphi(x) = E \varphi(x) \quad (1.21)$$

avec :  $\hbar = \frac{h}{2\pi}$

$h$  : La constante de Planck.

$m^*$  : La masse effective.

$\varphi$  : La fonction d'onde.

$V(x)$  : L'énergie potentielle.

$E_n$  : L'énergie totale de l'électron.

On peut l'écrire sous la forme :

$$\left[ -\left( \frac{\hbar^2}{8\pi m^*} \right) \Delta + V \right] \varphi(x) = E_n \varphi(x) \quad (1.22)$$

$$H^i \varphi = E^i \varphi \quad (1.23)$$

Où  $H$  : L'opérateur Hamiltonien.

$\Delta$  : Le Laplacien.

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & x < 0, \quad x > L_w \\ 0 & 0 < x < L_w \end{cases}$$

avec  $V_0 = Q_c \Delta E_c$

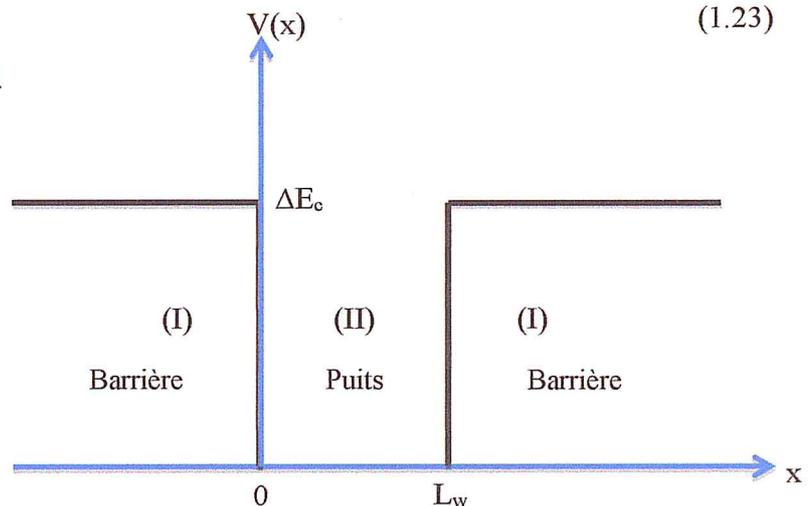


Figure I.17 Puits quantique conventionnel

## 2.7.1 Puits quantique de profondeur finie

Pour une particule dans un puits de profondeur finie de largeur  $L_w$ . Où le potentiel est nul à l'intérieur du puits, quel que soit l'énergie de cette particule, elle reste confinée dans le puits.

Dans le cas où  $V(x)=0$  l'équation de Schrödinger stationnaire à une dimension devient :

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2 \varphi(x)}{dx^2} = E_n \varphi(x) \quad (1.24)$$

La solution générale est :

$$\varphi = A e^{ik_1 x} + B e^{-ik_2 x} \quad (1.25)$$

Où : A et B sont des constantes.

En mécanique classique, l'énergie mécanique en l'absence d'énergie potentielle  $V(x)=0$  est donc :

$$E = E_T = \frac{p^2}{2m^*} \quad \text{alors} \quad E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \quad (1.26)$$

Selon la relation de De Broglie, l'impulsion P de la particule s'écrit :

$$P = \hbar k$$

On trouve les 3 régions (I) ( $x < 0$ ), (II) ( $0 < x < L_w$ ), (I) ( $x > L_w$ ) comme suit :

$$\frac{d^2 \varphi_I(x)}{dx^2} - \frac{2m^*}{\hbar^2} (V_0 - E_n) \varphi(x) = 0 \quad (1.27)$$

$$\frac{d^2 \varphi_{II}(x)}{dx^2} - \frac{2m^*}{\hbar^2} E_n \varphi(x) = 0 \quad (1.28)$$

$$\frac{d^2 \varphi_I(x)}{dx^2} - \frac{2m^*}{\hbar^2} (V_0 - E_n) \varphi(x) = 0 \quad (1.29)$$

Donc la solution de l'équation après la condition limite de chaque région s'écrit :

Région I :

$$\varphi_I(x) = A e^{k_1 x} + B e^{-k_2 x} \quad (1.30)$$

Sachant que la condition aux limites  $\varphi_I(x \rightarrow -\infty) = 0$  entraîne  $A' = 0$ , la fonction d'onde

$$\text{s'écrit :} \quad \varphi_I(x) = A e^{k_1 x} \quad \text{avec :} \quad k_1 = \sqrt{2m^*(V_0 - E_n)}/\hbar \quad (1.31)$$

$$\text{Région II :} \quad \varphi_{II}(x) = B \sin(k_2 x + \phi) \quad \text{avec :} \quad k_1 = \sqrt{2m^* E_n}/\hbar \quad (1.32)$$

$$\text{Région I : } \quad \varphi_I(x) = C' e^{k_2 x} + C e^{-k_2 x} \quad (1.33)$$

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

$$\varphi_I(x) = C e^{-k_2 x} \quad (1.34)$$

Pour la détermination des constantes, pour cela on utilise la continuité des fonctions d'ondes à l'interface puits-barrière en  $x = 0$ .

Dans ce cas les conditions aux limites sont données par :

$$\varphi_I(0) = \varphi_{II}(0) \rightarrow A = B \sin \varphi \quad (1.35)$$

La continuité des probabilités de courant de courant à l'interface puits-barrière en  $x = 0$ .

La fonction d'onde est dérivable :

$$\frac{1}{m_b^*} \varphi_I(0) = \frac{1}{m_w^*} \varphi_{II}(0) \rightarrow A \frac{k_2}{m_b^*} = B \frac{k_2}{m_w^*} \cos \varphi \quad (1.36)$$

$$\varphi_{II}(L_w) = \varphi_I(L_w) \rightarrow B \sin(k_2 L_w + \varphi) = C e^{-k_2 L_w} \quad (1.37)$$

$$\frac{1}{m_w^*} \varphi_{II}(L_w) = \frac{1}{m_b^*} \varphi_I(0) \rightarrow B \frac{k_2}{m_w^*} \cos(k_2 L_w + \varphi) = -C \frac{k_2}{m_b^*} C e^{-k_2 L_w} \quad (1.38)$$

En divisant les équations (2.16) sur (2.17) et (2.18) sur (2.19) on obtient respectivement :

$$\tan \varphi = \frac{k_2 m_b^*}{k_2 m_w^*} \quad (1.39)$$

$$\tan(k_2 L_w + \varphi) = -\frac{k_2 m_b^*}{k_2 m_w^*} \quad (1.40)$$

Compte tenu de la relation :

$$\sin^2 \alpha = \frac{1}{\left(1 + \frac{z}{\tan^2 \alpha}\right)} \quad (1.41)$$

L'expression (2.20) donne :

$$\sin \varphi = \frac{\frac{k_2}{m_w}}{\sqrt{\frac{k_2^2}{m_w^2} + \frac{k_2^2}{m_b^2}}} \quad (1.42)$$

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

$$\text{Où } n \text{ est un nombre entier } \quad k_2 L_w = n\pi - 2\varphi \quad (1.43)$$

Soit, en précisant  $\varphi$ ,  $k_1$  et  $k_2$  en (1.23) :

$$\frac{\sqrt{2m_w^* E_n}}{\hbar} = n\pi - 2 \arcsin \sqrt{\frac{E_n}{V_0 m_w^* + E_n \left(1 - \frac{m_w^*}{m_b^*}\right)}} \quad (1.44)$$

Si  $E \ll V_0$  on voit immédiatement que  $q \gg K$ , et les conditions de quantifications deviennent pour les deux cas symétrique et antisymétrique respectivement :

$$\tan \frac{KL}{2} \rightarrow \infty \quad \text{donc} \quad \cos \frac{KL}{2} \rightarrow 0 \quad \text{soit} \quad K_n = \frac{(2n+1)\pi}{L}, \quad n > 0 \quad (1.45)$$

$$\text{Cotg} \frac{KL}{2} \rightarrow \infty \quad \text{donc} \quad \sin \frac{KL}{2} \rightarrow 0 \quad \text{soit} \quad K_n = \frac{2n\pi}{L}, \quad n > 0 \quad (1.46)$$

Ces deux conditions se réunissent en une seule, à savoir :

$$K_n = \frac{n\pi}{L}, \quad n > 0 \quad \text{d'où} \quad E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} n^2 = \frac{\hbar^2}{8mL^2} n^2 \quad (1.47)$$

On retrouve les mêmes niveaux d'énergies que pour le puits infini.

### 3- Le gain optique

Le gain d'un matériau par unité de longueur est défini par le taux de croissance de la densité des photons pendant leurs propagations suivant une direction dans le cristal [21].

$$G = \frac{1}{N_p} \frac{dN_p}{dz} = \frac{1}{v_g N_p} \frac{dN_p}{dt} = \frac{1}{v_g N_p} (R_{Est} - R_{Ast}) \quad (1.48)$$

où :  $N_p$  : nombre de photons par unité de volume.

$dN_p$  : densité des photons.

$dz$  : direction dans le cristal.

$v_g$  : la vitesse de propagation .

$$R_{Est} : \text{l'émission stimulée} : \quad R_r f_2(h\omega)(1 - f_1(h\omega)) \quad (1.49)$$

$$R_{Ast} = R_r f_1(h\omega)(1 - f_2(h\omega)) \quad (1.50)$$

Avec  $R_r(h\omega)$  : Probabilité de transition par unité de volume par seconde d'un matériau actif.

$$R_r(h\omega) = \frac{1}{2} \frac{\epsilon_0^2 \lambda N_p}{c \epsilon_0 m_0^2 n^2} |M_T(h\omega)|^2 \rho_j^{pq}(h\omega) \quad (1.51)$$

On aura une équation du gain optique :

$$g(h\omega) = \sum_n \sum_m \left( \frac{q^2 \hbar}{2m_0^2 \varepsilon_0 n_r c} \right) \left( \frac{1}{\hbar v} \right) |M(E_{i,j})|^2 D_r(E_{i,j}) (f_j - f_i) \quad (1.52)$$

$c$  : vitesse de la lumière dans le vide.

$\varepsilon_0$  : la permittivité du vide.

$m_0$  : la masse effective de l'électron dans le vide.

$n$  : indice de refraction.

$\lambda$  : longueur d'onde.

$\rho_j^{pq}(h\omega)$  : densités d'états finale.

$f_{ij}$  : densité de probabilité des électrons et trous.

#### 4. Conclusion

Cette présentation de l'état de l'art des composants laser en télécommunication nous amène à regrouper quelques notions fondamentales des lasers à semi-conducteurs III-V. Nous avons décrit les différents paramètres et les phénomènes physiques qui rentrent en jeu. Nous avons vu que pour décrire le comportement de l'électron, il faut utiliser le concept de la fonction d'onde. Puis, nous nous sommes penchés sur l'étude des propriétés des puits quantiques qui découlent des hétérostructures et plus particulièrement les puits quantiques sous contrainte.

# Chapitre II

## Résultats et discussions des deux structures InGaAs/GaAs et GaAs/AlGaAs

## II.1 La structure InGaAs/GaAs

### II.1.1 Introduction

Dans ce chapitre, nous allons présenter les résultats de simulation sur les structures ternaires à puits quantique InGaAs/GaAs et GaAs/AlGaAs. Nous nous intéressons dans un premier temps à l'effet de la contrainte créée entre le substrat et la couche active sur les différents paramètres comme le paramètre de maille, la bande interdite, l'épaisseur critique, la longueur d'onde d'émission.

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

#### II.1.1.1 Le paramètre de maille

La figure II.1 montre l'évolution du paramètre de maille InGaAs/GaAs en fonction de la concentration d'Indium. On note que l'augmentation de la concentration de l'indium  $x$  induit une augmentation considérable du paramètre de maille. Par exemple pour  $x=0.10$  on a  $a_{\text{InGaAs}}=5.694 \text{ \AA}$ , si on varie la concentration de 0.10 à 0.70 le paramètre de maille atteint la valeur  $5.937 \text{ \AA}$ , c'est-à-dire on a une augmentation de  $\Delta a=0,243 \text{ \AA}$ . Cette étude nous permet d'optimiser la couche épitaxiale afin d'éviter l'instabilité de la structure à puits quantique.

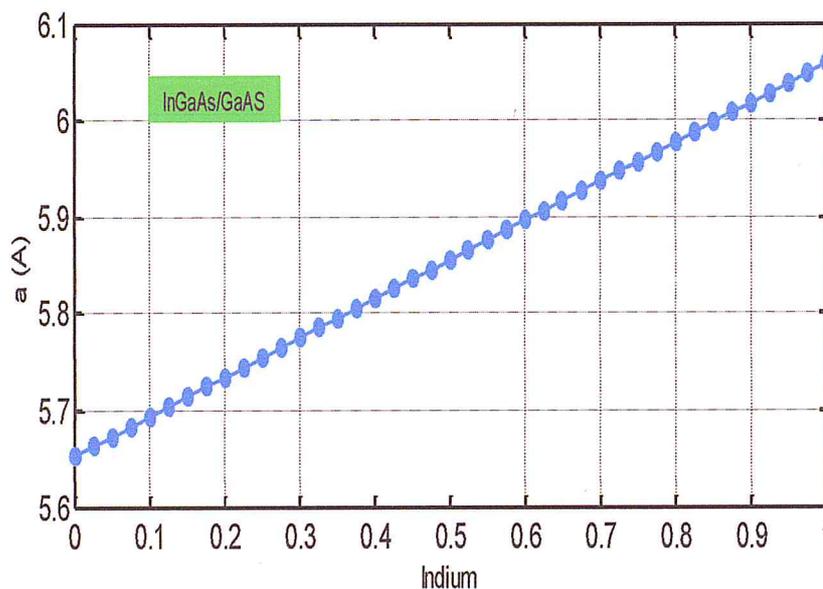


Figure II.1 La variation du paramètre de maille en fonction de la concentration d'indium

### II.1.1.2 La contrainte

La figure II.2 décrit la variation de la déformation en fonction de  $x$ . On observe que la déformation sur l'interface entre les deux couches actives et substrat croît avec l'augmentation de la concentration d'indium. Dans notre structure la contrainte est compressive car le paramètre de la couche active est supérieur au paramètre de maille du substrat. On peut fixer la concentration  $x$  pour avoir une déformation minimale afin d'augmenter la performance de la structure.

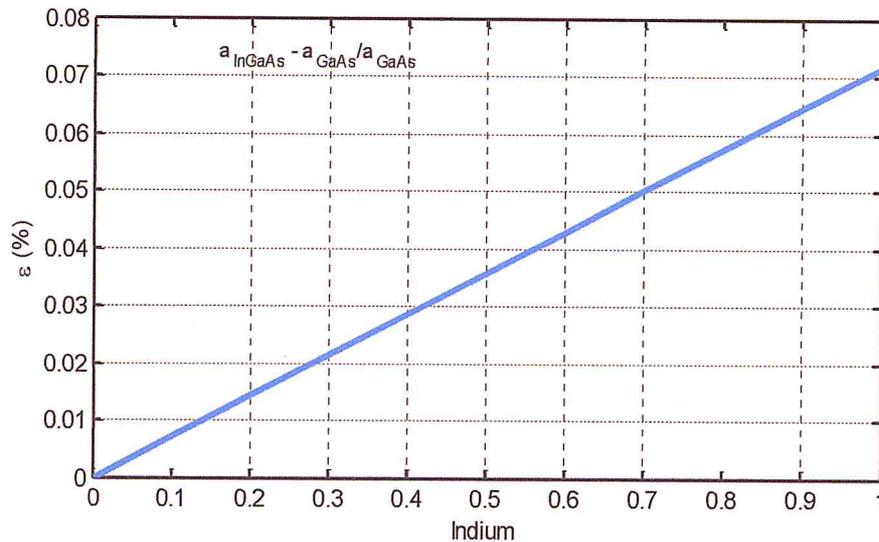
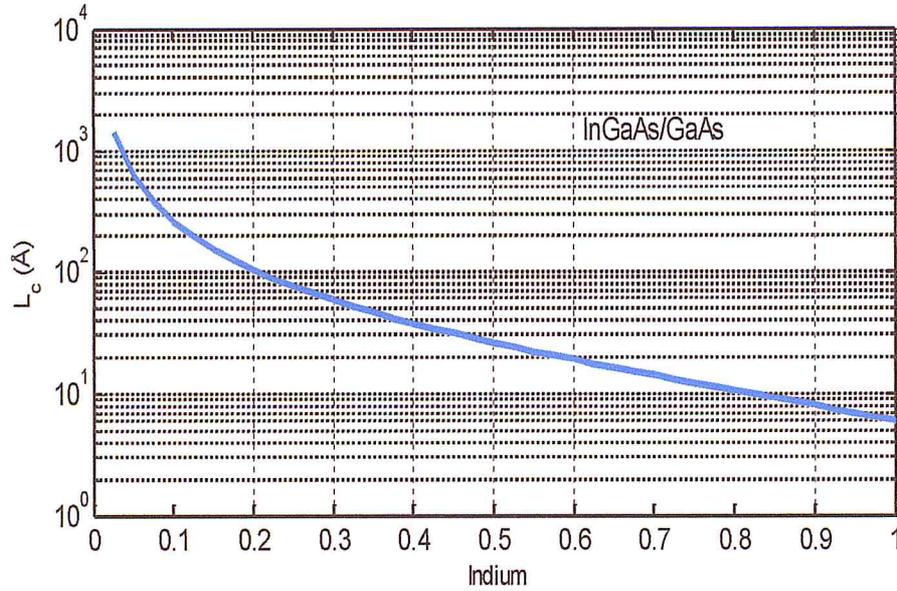


Figure II.2 La variation de la déformation en fonction de la concentration d'Indium

La figure II.2 décrit la variation de l'épaisseur critique de la structure InGaAs/GaAs en fonction de concentration d'Indium. Lorsque la concentration d'indium varie de 0 à 1 on constate une diminution importante. Si la concentration d'indium dépasse 0.50 l'épaisseur critique tend vers  $26.07\text{\AA}$ . Pour le choix de l'épaisseur de la couche active on doit réaliser la condition  $L_w < L_c$  afin de minimiser la dislocation de la structure. Pour avoir une structure à puits quantique stable et fiable il faut que la concentration d'indium ne dépasse pas 0.30.

### II.1.1.3 L'épaisseur critique

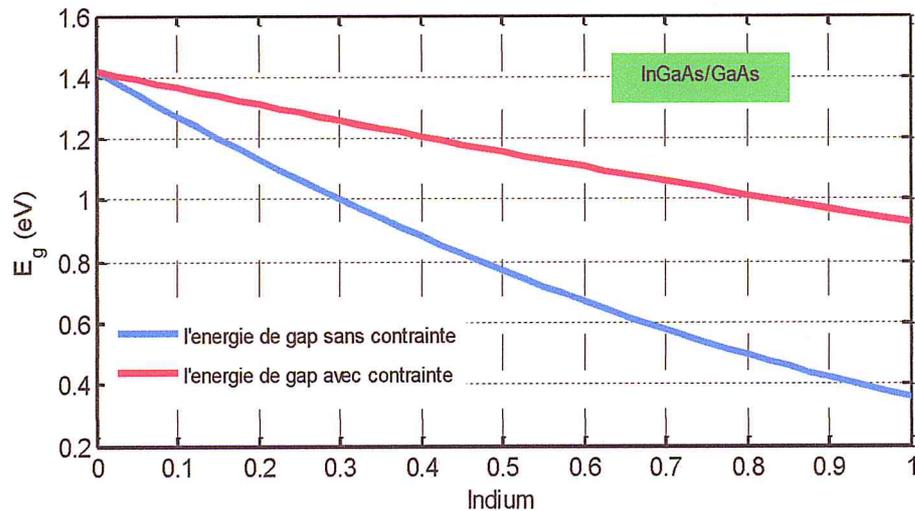
La figure II.3 illustre la variation de l'épaisseur critique en fonction de la concentration d'indium. On constate que si on fait augmenter la concentration d'Indium l'épaisseur critique entamera une diminution atteignant  $58.4\text{\AA}$  pour une concentration d'Indium de 30%. Et cela pour une contrainte de 2%.



**Figure II.3** La variation de l'épaisseur critique en fonction de la concentration d'indium

#### II.1.1.4 L'énergie de la bande interdite contrainte et non contrainte

Figure II.4 représente la variation de l'énergie de la bande interdite (gap) de la structure InGaAs contraint et non contraint sur un substrat de GaAs. Afin d'étudier et d'optimiser le phénomène des transitions des porteurs (électrons, trous) entre les deux bandes de conduction et de valence nous avons simulé l'effet de la concentration d'indium sur l'énergie de la bande interdite (figure II.4).

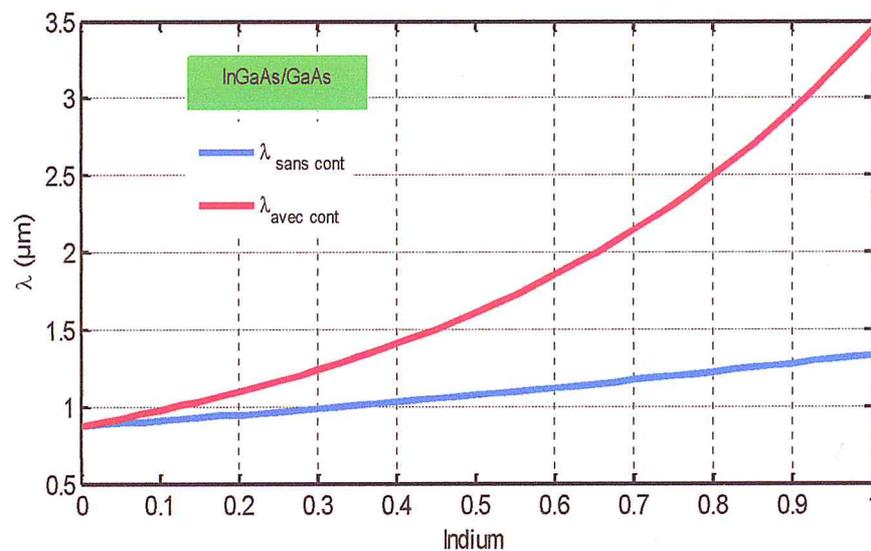


**Figure II.4** Variation de l'énergie de la bande interdite de la structure contrainte et non contrainte en fonction de la concentration de l'indium

Cette figure nous montre l'influence de la concentration d'indium sur l'énergie de la bande interdite dans les deux cas non contraint et contraint. On remarque que l'accroissement de la concentration d'indium provoque une diminution considérable de l'énergie de la bande interdite. Sachant que :  $E_{g_{cont}} > E_{g_{non-cont}}$ . Alors cette simulation nous donne la possibilité de choisir l'alliage qui nous permet de trouver la meilleure structure qui nous donne la probabilité maximale de recombinaison entre les porteurs.

### II.1.1.5 La longueur d'onde d'émission

La Figure II.5 montre la variation de la longueur d'onde en fonction de la concentration d'indium dans le cas où les transitions se font entre le minimum de la bande de conduction et le maximum de la bande de valence c'est-à-dire  $\lambda_{e-h} = 1.24/E_g$ . On note que la contrainte croît considérablement la longueur d'onde de 1 à 3  $\mu\text{m}$ . Alors on peut avoir la gamme de l'infrarouge proche et le moyen infrarouge.



**Figure II.5** Variation des longueurs d'ondes d'émissions de la structure contrainte et sans contrainte en fonction de l'Indium

### II.1.1.6 Barrière de potentiel

La figure II.6 présente l'effet de la concentration d'indium sur le décalage des bandes d'énergie. Dans notre travail nous avons besoin d'optimiser la structure à puits quantique (PQ). On doit simuler la profondeur du puits c'est-à-dire étudier et calculer la profondeur du puits quantique  $\Delta E_c$  et  $\Delta E_{vh}$ . La figure II.6 présente l'effet de la concentration d'indium sur les deux décalages de bandes de conduction et de valence. On constate que l'augmentation de l'Indium induit une augmentation de l'énergie  $\Delta E_c$  par contre une diminution de  $\Delta E_{vh}$  ce

qui implique un puits quantique de type II car ( $\Delta E_c > 0$  et  $\Delta E_v < 0$ ). Dans ce cas, les électrons et les trous sont confinés séparément dans le puits et la barrière, respectivement. On déduit qu'à partir de l'alliage on peut augmenter le confinement des porteurs.

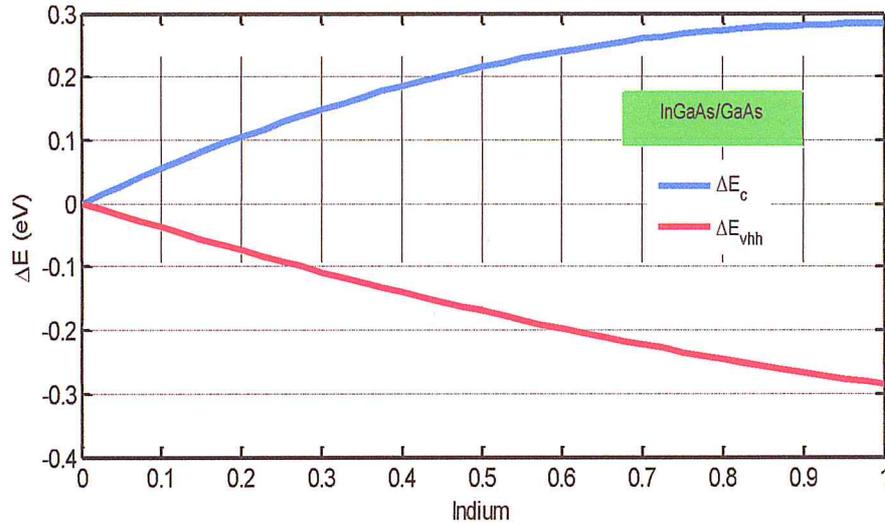


Figure II.6 Effet de la concentration d'indium sur le décalage des bandes d'énergie

### II.1.1.7 Le taux de confinement

La figure II.7 montre la variation de taux de confinement en fonction de la concentration de l'indium. Avec l'augmentation de la concentration de l'indium, on remarque qu'il y a une diminution de taux de confinements  $Q_c$  et  $Q_v$  (pour la bande de conduction et valence). Par exemple, pour  $x=0.3$   $Q_v=11\%$  et  $Q_c=89\%$ , donc les porteurs (électrons, trous) sont confinés avec ces valeurs.

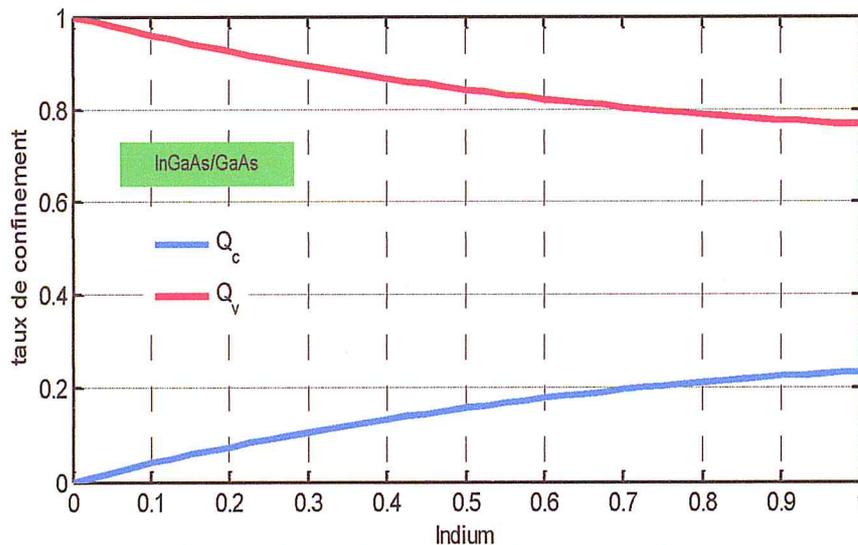


Figure II.7 La variation de taux de confinement en fonction de la concentration d'Indium

## II.1.1.8 La mobilité d'InGaAs/GaAs

### La mobilité des électrons et des trous lourds

Les figures II.8 (a,b) décrivent la variation de la mobilité des porteurs électrons et trous en fonction de la concentration d'Indium pour différentes températures. On remarque que l'augmentation de la concentration d'Aluminium induit une augmentation de la mobilité des porteurs. Si On varie aussi la température, on constate aussi une évolution importante de mobilité des électrons.

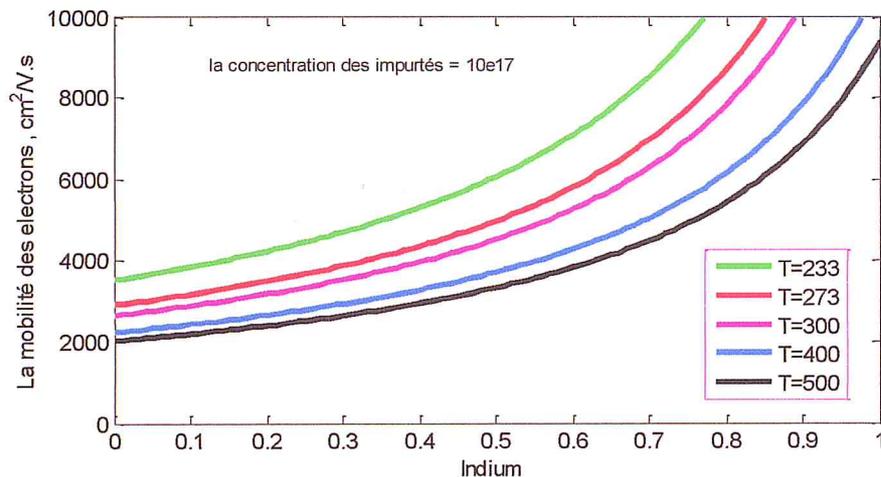


Figure II.8 a) La variation de la mobilité des électrons en fonction de la concentration d'Indium pour différentes températures

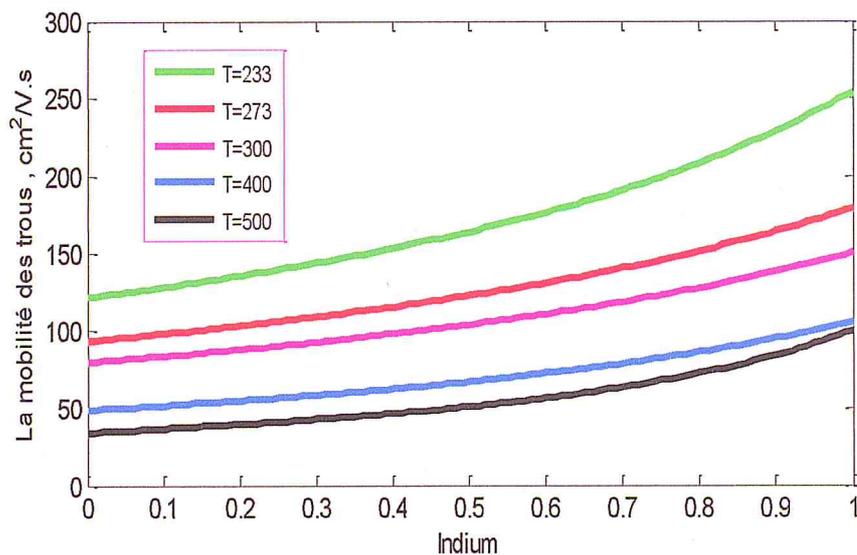
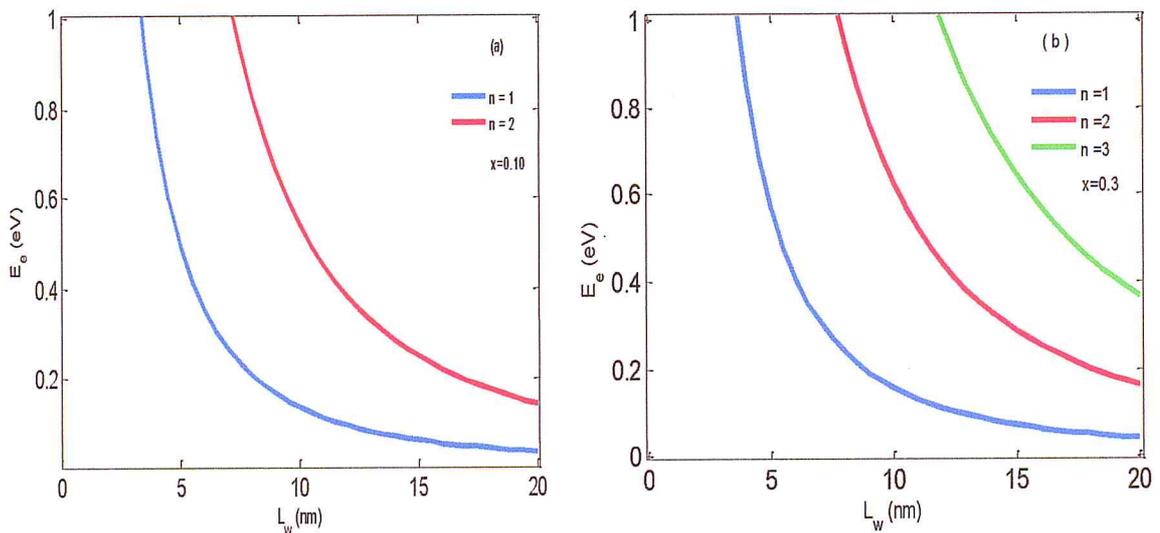


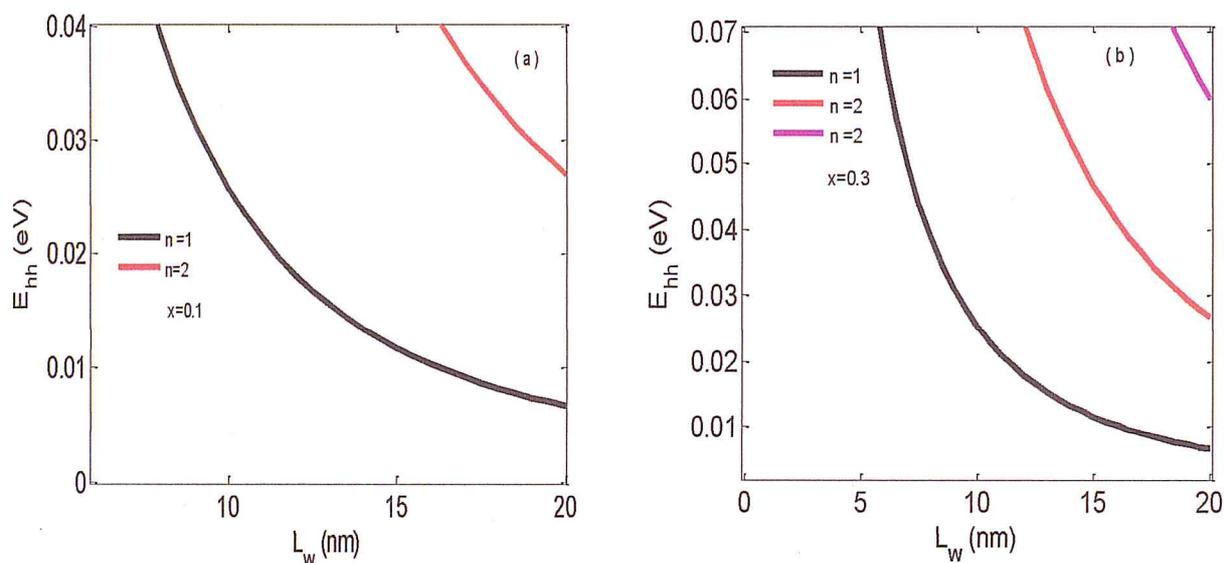
Figure II.8 b) La variation de la mobilité des trous en fonction de la concentration d'Indium pour différentes températures

## II.1.2 Energies de quantifications

La résolution de l'équation aux valeurs propres par la méthode de Dichotomie nous donne l'évolution de l'énergie de quantification des porteurs électrons et trous lourds dans le puits quantique. Nous avons simulé le phénomène de confinement des porteurs dans la bande de conduction et la bande de valence. La figure II.9 (a,b) montre l'effet de la largeur de la zone active et de la concentration de l'indium sur l'énergie de confinement des porteurs dans les deux bandes de conduction et de valence. On signale que l'augmentation de la largeur de la zone active provoque une diminution de l'énergie de confinement dans le puits quantique et à partir d'épaisseur  $L_w=20\text{nm}$  le confinement des porteurs déclenche à tendre vers zéro c'est-à-dire on perd la quantification des porteurs. En revanche, l'accroissement de la concentration d'alliage aboutisse à une augmentation de nombre de niveaux de quantification c'est-à-dire la probabilité des transitions entre les électrons et les trous lourds deviennent importants. Le problème qu'on ne peut pas dépasser le 30% de l'alliage car la contrainte devient considérable et la structure commence à déstabilisé et la dislocation apparaît progressivement qui influe sur la performance et la durée de vie de la structure. Cette simulation nous permet d'optimiser la largeur de la zone active  $L_w$  et la concentration d'indium afin de réaliser le composant optoélectronique, Diode électroluminescente, diode laser et les détecteur. Dans ce travail nous pouvons aussi changer la méthode numérique pour minimiser l'erreur de calcul exemple méthodes (éléments finis, transfert, différences finies,..... Galerkin).



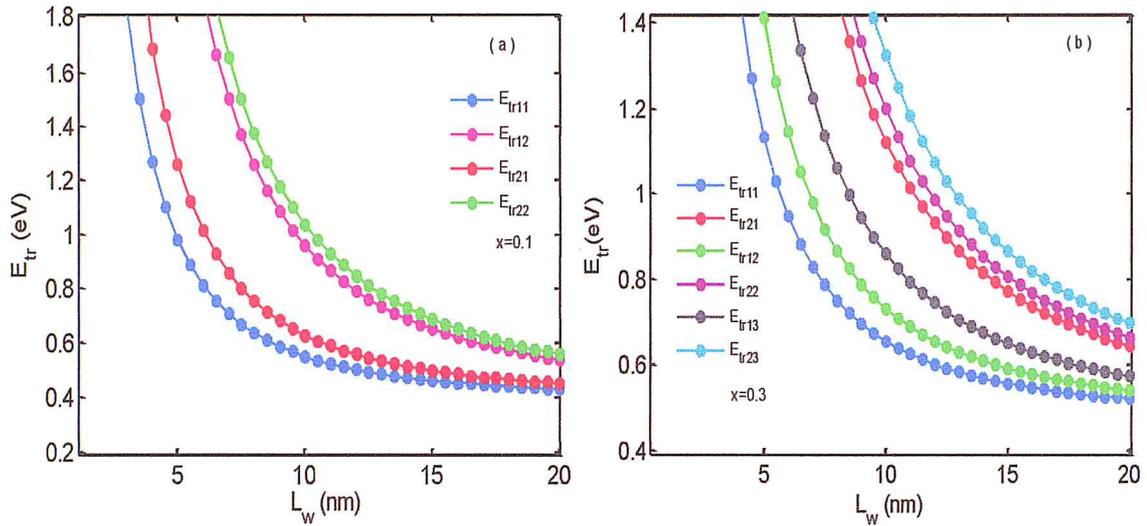
**Figure II.9** La variation de l'énergie de quantification en fonction de la largeur de la zone active  $L_w$  a) porteurs électrons pour  $x=0.10$  b) porteurs électrons pour  $x=0.30$



**Figure II.10** La variation de l'énergie de quantification en fonction de la largeur de la zone active  $L_w$  a) porteurs trous lourds pour  $x=0.10$  b) porteurs trous lourds pour  $x=0.30$

### II.1.3 Energies de transitions

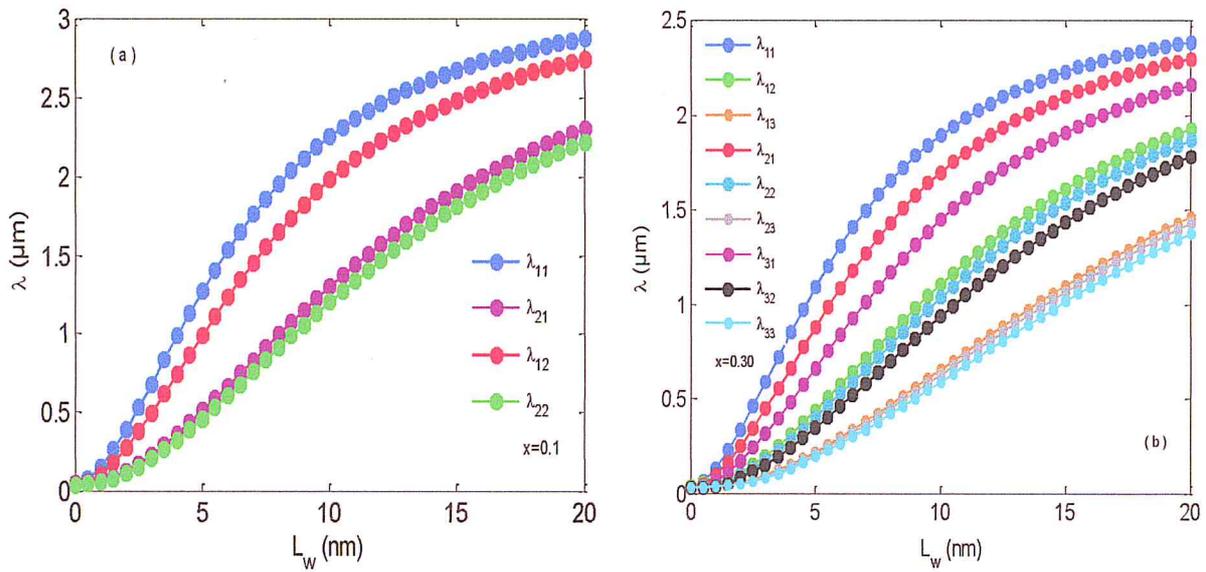
Dans le but d'optimiser la longueur d'onde d'émission de la structure à puits quantique on est obligé d'étudier et simuler les transitions possibles entre les porteurs électrons-trous. On a représenté sur la figure II.11 (a,b) l'évolution de l'énergies de transitions possibles des porteurs électrons -trous en fonction de la largeur du puits pour plusieurs compositions d'indium. L'augmentation de la largeur de zone active  $L_w$  induit une diminution importante de l'énergie de transition. On constate que l'énergie de transition la plus intéressante est l'énergie de recombinaison entre les deux premiers des électrons et trous lourds ( $E_{tr11}$ ). Dans cette étude on a varié la concentration de l'indium afin d'optimiser la probabilité d'existence des transitions entre les porteur électrons-trous lourds. On observe que l'augmentation de la concentration d'indium influe positivement sur le nombre des transitions. Par exemple pour  $x=0.10$  le nombre des transitions vaut quatre niveaux de transitions  $E_{i,j}$  ( $i=1 \dots ,4$  ;  $j=1 \dots 4$ ), si on augmente la concentration de l'indium jusqu'à 0.30 le nombre des transitions croit considérablement. Cette simulation nous admet de choisir les transitions possibles pour déterminer les longueurs d'émission de la structure à puits quantique pour des applications en télécommunications par fibre optique et aussi pour la détection (exemple détection des gaz...). Pour avoir les longues longueurs d'ondes d'émissions on est intéressé aux transitions aux premiers niveaux d'énergies de transitions.



**Figure II.11** La variation de l'énergie de transition en fonction de la largeur de la zone active  $L_w$  a) pour  $x=0.10$ , b) pour  $x=0.30$

### II.1.4 Longueurs d'ondes d'émission

L'objectif de notre travail est d'étudier et optimiser la largeur de la zone active et de la concentration de l'indium sur la longueur d'onde d'émission de la structure à base de InGaAs sur le substrat GaAs. Dans la figure II.12 on a représenté la variation de la longueur d'onde d'émission d'un le puits quantique pour différentes concentration d'indium  $x$ . Lorsqu'on croit la largeur de la zone active jusqu'à  $L_w=20\text{nm}$ , la longueur d'onde atteint  $3\mu\text{m}$  pour les transitions des premiers niveaux des porteurs électrons-trous lourds. On observe que l'augmentation de la concentration d'indium provoque une augmentation de nombre de transitions entre les niveaux dans le puits quantique. On peut jouer sur la largeur de la zone active et la concentration d'indium  $x$  pour obtenir les longueurs d'ondes d'émission pour les télécommunications par fibre optique à base de la silice  $\text{SiO}_2$ . Pour la structure  $\text{In}_{0.10}\text{Ga}_{0.90}\text{As}/\text{GaAs}$  on obtient la meilleure fenêtre de la fibre ( $\text{SiO}_2$ )  $1.55\mu\text{m}$  c'est-à-dire une faible atténuation de l'amplitude de l'onde avec une largeur de la zone active qui ne dépasse pas  $5\text{nm}$ . En revanche, si on utilise la structure  $\text{In}_{0.30}\text{Ga}_{0.70}\text{As}/\text{GaAs}$  on atteint la fenêtre  $1.55\mu\text{m}$  avec  $L_w=7\text{nm}$ .



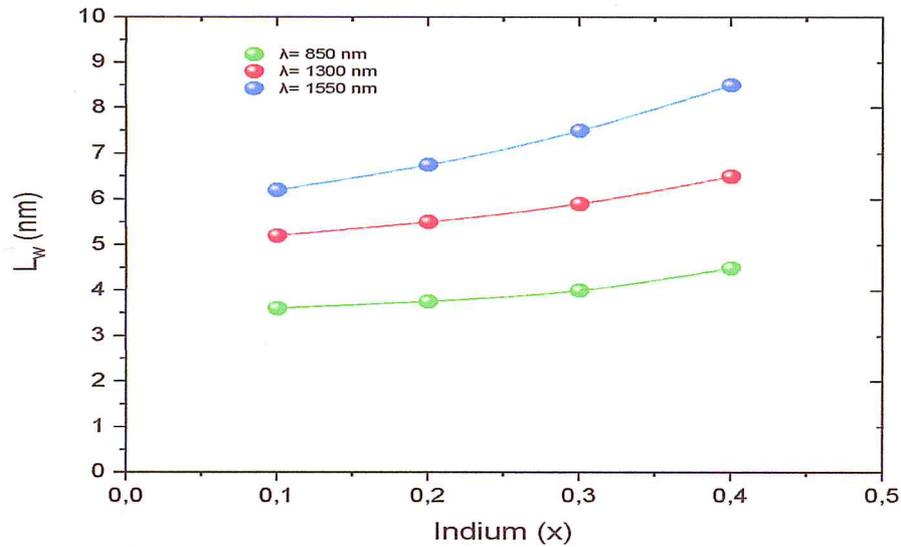
**Figure II.12** L'évolution de la longueur d'onde d'émission de la structure en fonction de la largeur de la zone active  $L_w$  a) pour  $x=0.10$ , b) pour  $x=0.30$

Afin de découvrir des structures à puits quantique contraint et fiable émettant dans les fenêtres des télécommunications par fibres optiques, nous avons fait l'ingénierie de la largeur de puits quantique en fonction de la concentration d'indium  $x$  (figure II.13) qui coïncident à la longueur d'onde  $0.85, 1.3$  et  $1.55\mu\text{m}$ .

Afin de faire notre choix d'une structure fiable, il faut prendre en compte plusieurs paramètres, en premier on doit s'assurer que la largeur de puits ne dépassera pas l'épaisseur critique, sinon on aura dislocation du matériau et la structure perdra ses caractéristiques, aussi on a vu dans notre travail que l'augmentation du pourcentage d'indium accentue la contrainte, pour cette raison la fraction d'indium ne doit pas dépasser 30% afin de maintenir une déformation convenable, diversement dit sans relaxation des couches.

En respectant ces critères on peut choisir des structures à puits quantique adéquates pour l'émission dans les fenêtres de télécommunications par fibres optiques. On a aussi pris en compte l'effet du taux de confinement dans les deux bandes de conduction et de valence  $Q_{c,v}$ .

On a varié la concentration d'indium pour avoir les fenêtres de la fibre optique à base de la silice. Ces résultats nous permettent de choisir les structures fiables afin d'envoyer des informations à grand débit et à grande vitesse.



**Figure III.13** Variation de la zone active en fonction de la concentration d'indium pour la longueur d'onde d'émission d'une ligne de transmission par fibre optique

## II.1.5 Conclusion

L'objectif de notre travail était d'obtenir des structures à puits quantique contraint pour réaliser des lasers à semi-conducteurs émettant dans fenêtres de télécommunications par fibres optiques à base de la silice.

Dans ce chapitre nous avons étudié et simulé particulièrement le phénomène de quantification et de transition des porteurs électrons-trous lourds dans la structure à puits quantique InGaAs/GaAs. Dans un premier temps on a calculé les énergies de quantifications et de transition dans le puits, quantique ainsi que leurs évolutions en fonction la largeur de la zone active et de la concentration d'indium  $x$ . On a simulé l'évolution de la longueur d'onde d'émission en fonction de la largeur de la zone active et l'effet de la concentration de l'indium sur la longueur d'onde d'émission. Nous avons par la suite essayé de trouver un compromis, et choisir les structures optimales, et les mieux adaptées à l'utilisation dans la transmission par guide d'onde circulaire optique.

## II.2 La structure GaAs/AlGaAs

### II.2.1 Introduction

Dans ce chapitre nous allons effectuer des simulations sur la structure ternaire à puits quantique GaAs/AlGaAs. Des simulations ont été faites afin d'étudier l'effet de la contrainte créée entre le substrat et la couche active sur les différents paramètres qui rentrent en jeu. Ensuite, on va comparer les deux structures à puits quantique InGaAs/GaAs et GaAs/AlGaAs pour les autres paramètres ainsi que l'énergie de quantification des porteurs électrons-trous lourds dans le puits quantique.

#### II.2.1.1 Le paramètre de maille

La figure II.1 représente la variation du paramètre de maille en fonction de la concentration d'Aluminium. On remarque que pour toute évolution de  $x$  on a une augmentation de  $a$ . La concentration d'Aluminium a un effet important sur le paramètre de maille. Ce dernier varie de  $a_{\text{AlGaAs}} = 5.653 \text{ \AA}$  pour  $x=0$  jusqu'à  $a_{\text{AlGaAs}} = 5.66 \text{ \AA}$  pour  $x=1$ . Pour déterminer l'effet de l'Aluminium sur le paramètre de la structure GaAs/AlGaAs. On constate que le paramètre de maille  $a$  varie de manière constante par rapport à la concentration d'Aluminium ( $x$ ). Par exemple si on varie la concentration de  $x=0$  à  $x=1$  on a une augmentation de :  $\Delta a = 0.007 \text{ \AA}$ . On note que l'effet de la concentration d'Indium sur le paramètre de maille est faible.

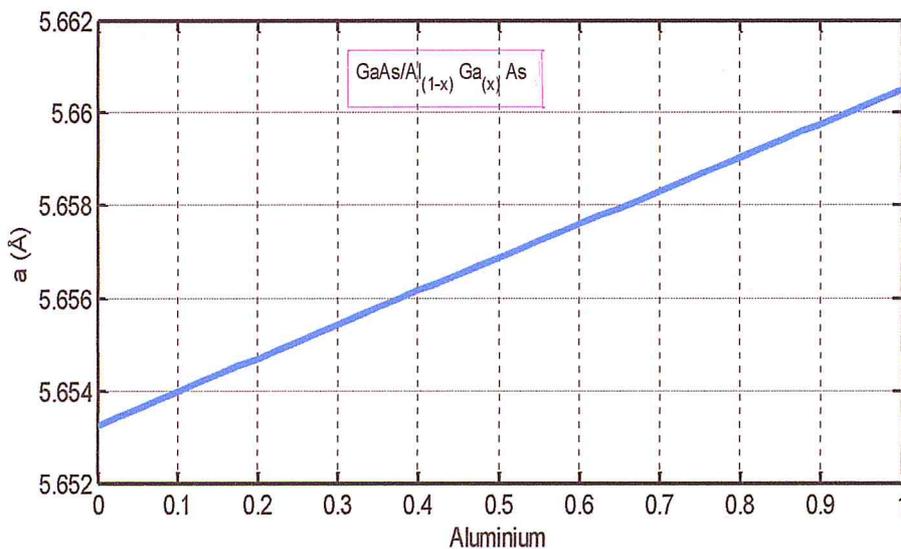


Figure II.1 La variation du paramètre de maille en fonction de la concentration d'Aluminium

### II.2.1.2 La contrainte

La figure II.2 illustre la variation des déformations d'interface  $\epsilon_{xx}$ , perpendiculaire  $\epsilon_{zz}$  et totale  $\epsilon_{tot}$  en fonction de la concentration d'Aluminium  $x$ . A partir de cette simulation on peut choisir la concentration  $x$  qui nous donne une structure à puits quantique fiable. On constate que l'augmentation de la concentration provoque la diminution de la déformation  $\epsilon$ . Pour  $x=10\%$  (Extension) la déformation est de  $0.10\%$ , lorsque  $x$  atteint  $90\%$  la déformation vaut  $-0.035\%$  (Compression) et pour  $x=70\%$  on a une déformation de  $\epsilon=0\%$  (accord de maille). Pour éviter l'instabilité de la structure on ne doit pas dépasser une déformation de  $\epsilon=1\%$ .

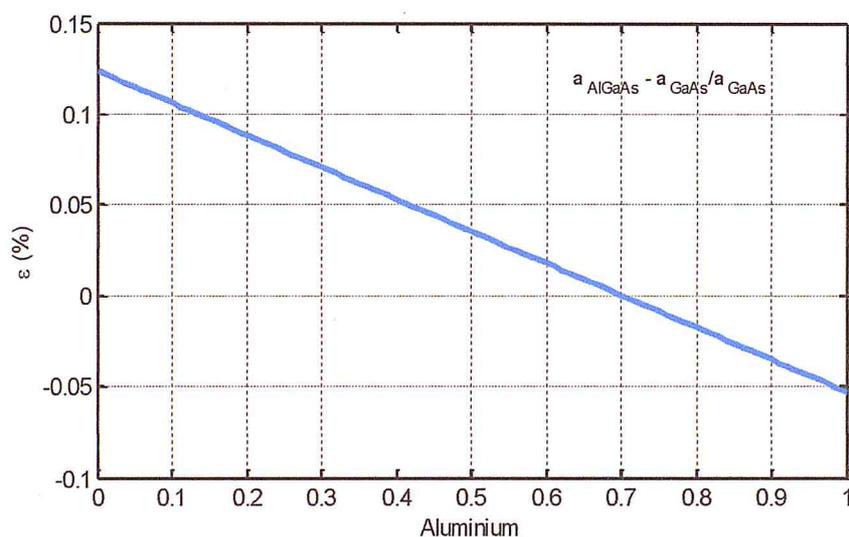
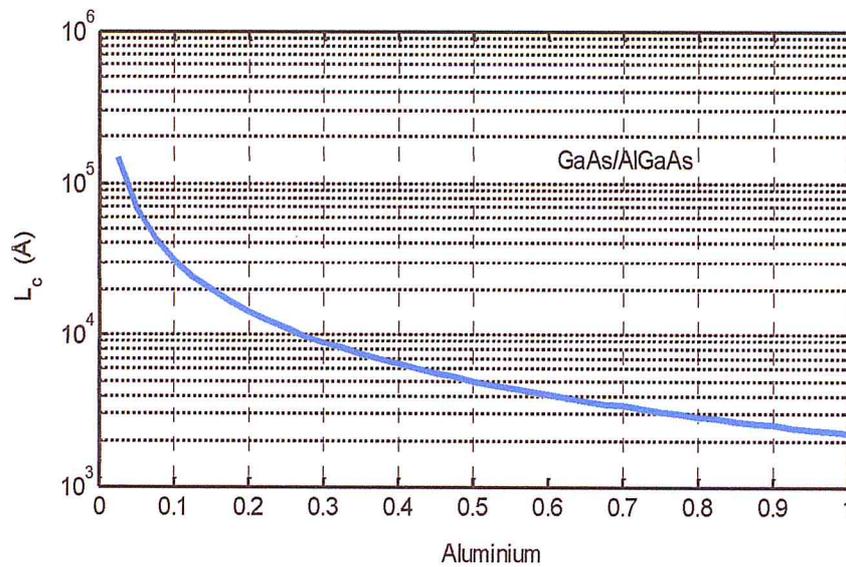


Figure II.2 La variation de la déformation en fonction de la concentration d'Aluminium

### II.2.1.3 L'épaisseur critique

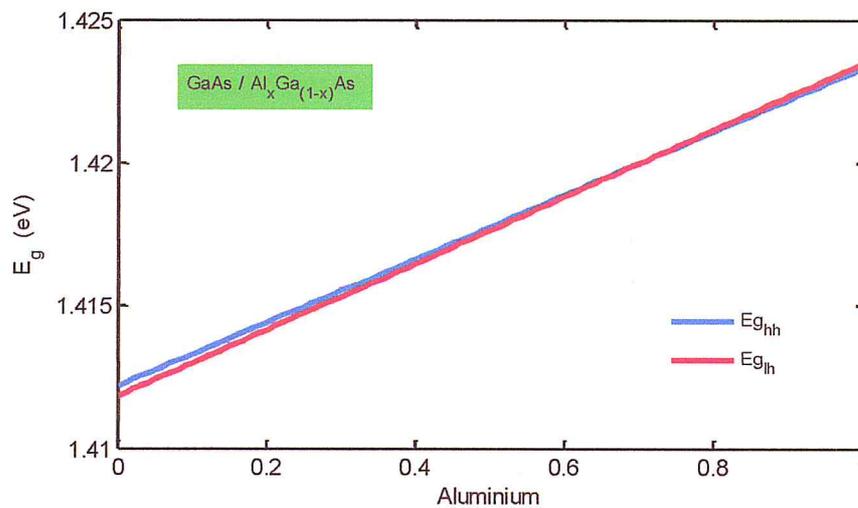
La figure II.3 présente la variation de l'épaisseur critique de la structure AlGaAs/GaAs en fonction de concentration d'Aluminium. Pour une concentration d'Aluminium  $x=10\%$  l'épaisseur critique vaut  $L_c=3.11.10^4 \text{ \AA}$  et en augmentant la concentration jusqu'à atteindre  $x=90\%$  L'épaisseur critique est de  $L_c=2534 \text{ \AA}$ . Alors, on déduit que l'augmentation de la concentration d'Aluminium cause une diminution de l'épaisseur critique.



**Figure II.3** La variation de l'épaisseur critique en fonction de la concentration d'Aluminium

#### II.2.1.4 L'énergie de la bande interdite

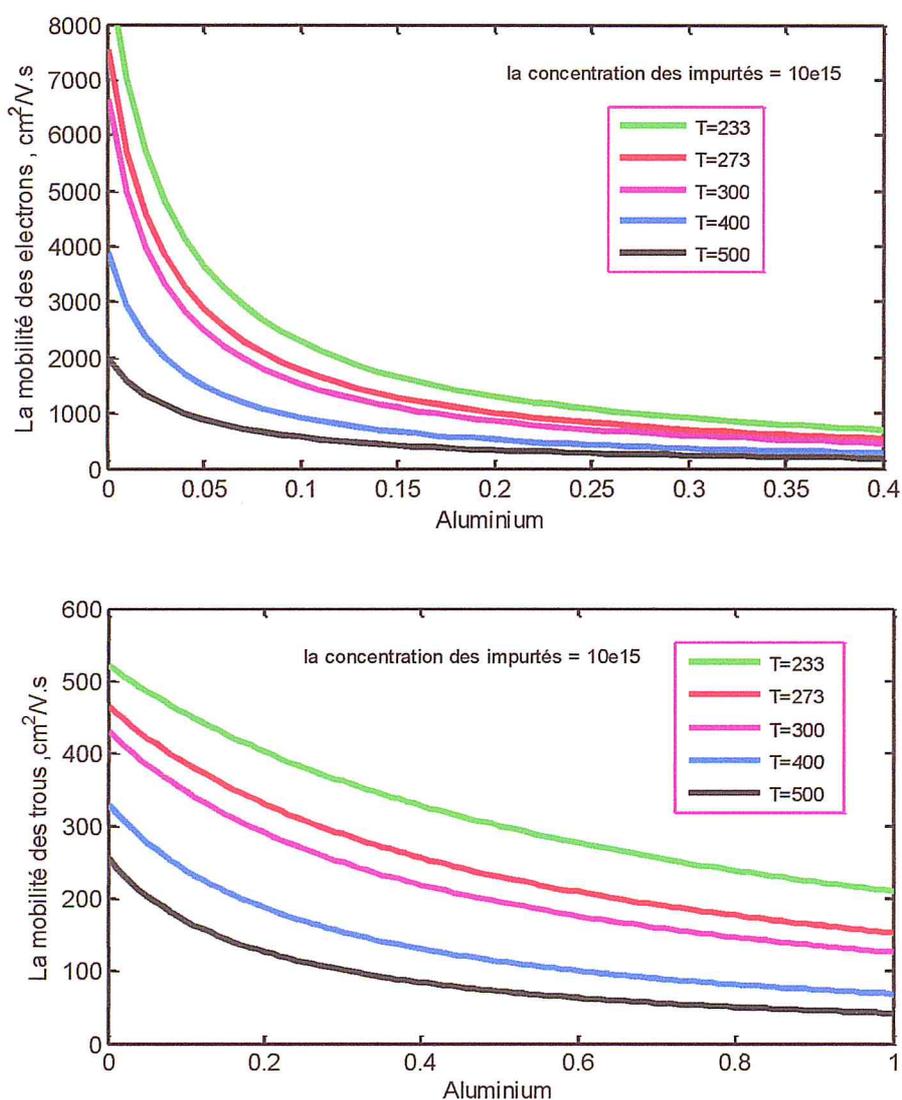
La figure II.4 représente l'évolution de l'énergie de la bande interdite pour les porteurs trous lourds et trous légers ( $E_{g_{hh}}$  et  $E_{g_{lh}}$ ) en fonction de la concentration d'Indium. La figure montre l'influence de concentration d'In. Par exemple, pour  $x = 0.3$  la valeur de bande interdite est de 1.416eV, en augmentant  $x$  à 0.5, la bande interdite augmente jusqu'à 1.418 eV, on constate une augmentation légère de l'énergie de la bande interdite avec  $\Delta E_g = 0.008$  eV.



**Figure II.4** Variation de l'énergie de la bande interdite des trous lourds et légers en fonction de la concentration de l'Aluminium

## II.2.1.5 La mobilité de GaAs/AlGaAs

Les figures II.5 (a,b) décrivent la variation de la mobilité des porteurs électrons et trous en fonction de la concentration d'Aluminium pour différentes températures. On remarque que l'augmentation de la concentration d'Aluminium provoque la diminution de la mobilité des porteurs. Nous avons aussi étudié l'effet thermique sur la mobilité des porteurs. On note que l'accroissement de la température induit une diminution importante de la mobilité des porteurs. Cette étude nous permet d'optimiser la meilleure structure pour réaliser un composant fiable.



**Figure II.5 (a,b)** a) La variation de la mobilité des électrons en fonction de la concentration d'Aluminium à différentes températures, b) La variation de la mobilité des trous en fonction de la concentration d'Aluminium pour différentes températures

## II.2.2 Comparaison entre les deux structures InGaAs/GaAs et GaAs/AlGaAs

### II.2.2.1 La contrainte

La figure II.6 illustre la variation de la déformation en fonction de la composition de l'alliage des deux structures InGaAs/GaAs et GaAs/AlGaAs. Cette étude nous permet de choisir la structure la plus performante et la plus stable pour des applications en optoélectronique. Par exemple pour une concentration de In/Al on a une déformation  $\varepsilon_{//}=0.07\%$  et 10% respectivement. La figure III.6 nous montre l'effet de la concentration de l'alliage sur l'écart d'énergie des bandes de conduction et de valence. On peut optimiser la structure de puits quantique contraint pour réaliser des composants optoélectroniques fiables.

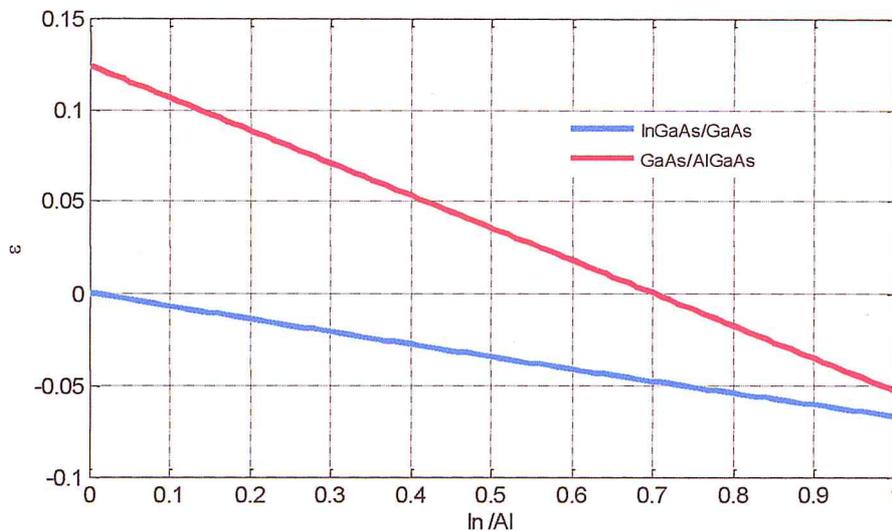
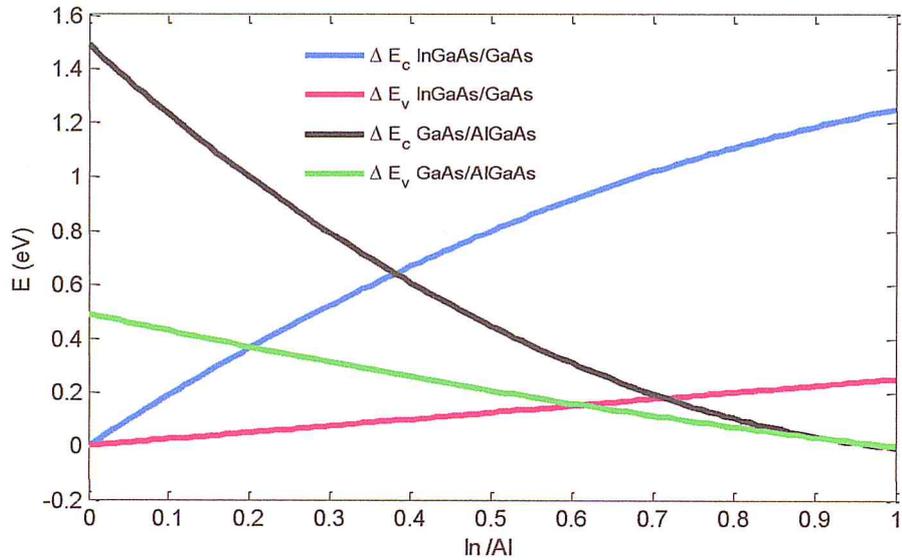


Figure II.6 Variation de la déformation en fonction de la composition d'alliage de deux structures InGaAs/GaAs et GaAs/AlGaAs

### II.2.2.2 Barrière de potentiel

La figure II.7 illustre présente La différence de variation d'énergie ( $\Delta E_c$ ,  $\Delta E_v$ ) de la barrière de potentiel en fonction de la concentration d'Indium et Aluminium. Pour la structure InGaAs/GaAs, On constate que l'augmentation de l'Indium induit une augmentation de l'énergie  $\Delta E_c$  par contre une diminution de  $\Delta E_v$  ce qui implique un puits quantique de type II car ( $\Delta E_c > 0$  et  $\Delta E_v < 0$ ). Dans ce cas, les électrons et les trous sont confinés séparément dans le puits et la barrière, respectivement.

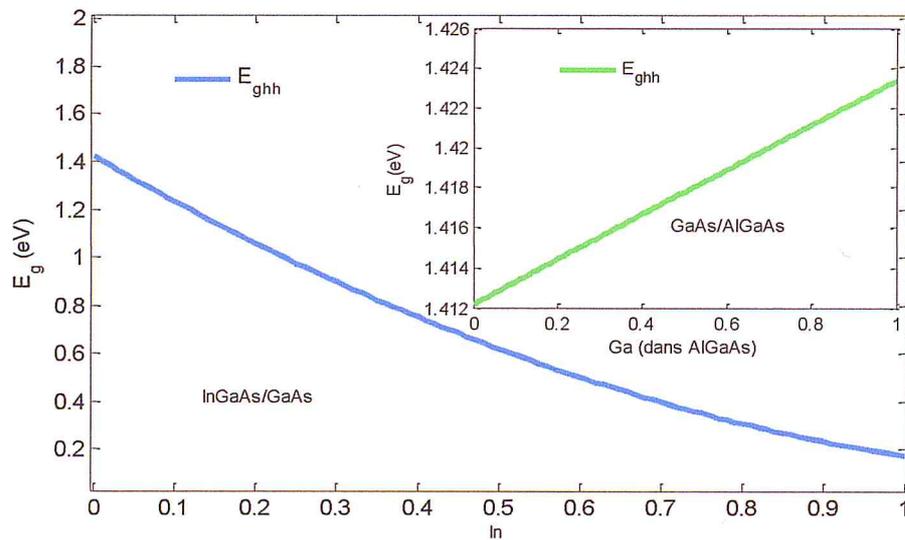
En revanche, pour la seconde structure GaAs/AlGaAs. On remarque que l'augmentation de l'Aluminium provoque une diminution d'énergie des deux barrières  $\Delta E_c$  et  $\Delta E_v$ .



**Figure II.7** Effet de la concentration des alliages sur le décalage de bandes des structures InGaAs/GaAs et GaAs/AlGaAs

### II.2.2.3 L'énergie de la bande interdite

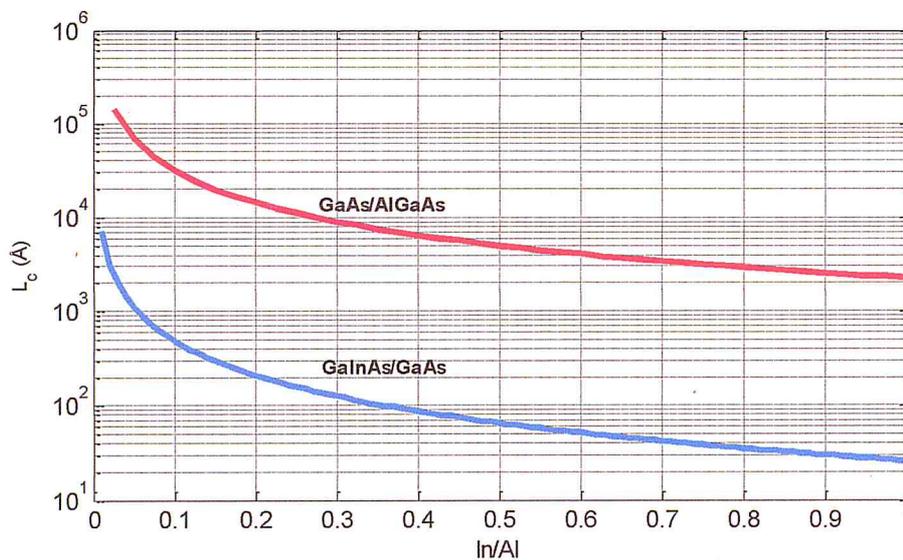
La figure II.8 présente la variation de l'énergie de la bande interdite en fonction de la concentration d'alliage de deux structures InGaAs/GaAs et GaAs/AlGaAs. Pour les applications en télécommunications nous avons besoin des matériaux rapides c'est-à-dire des matériaux semi-conducteurs qui ont une bande interdite directe et inférieure à 1.35 eV. Alors notre simulation nous donne la possibilité de trouver l'énergie de la bande interdite afin de détecter les longueurs d'ondes d'émissions pour la fibre optique en silice (SiO<sub>2</sub>).



**Figure II.8** Evolution de l'énergie de la bande interdite des deux structures InGaAs/GaAs et GaAs/AlGaAs

### II.2.2.4 L'épaisseur critique

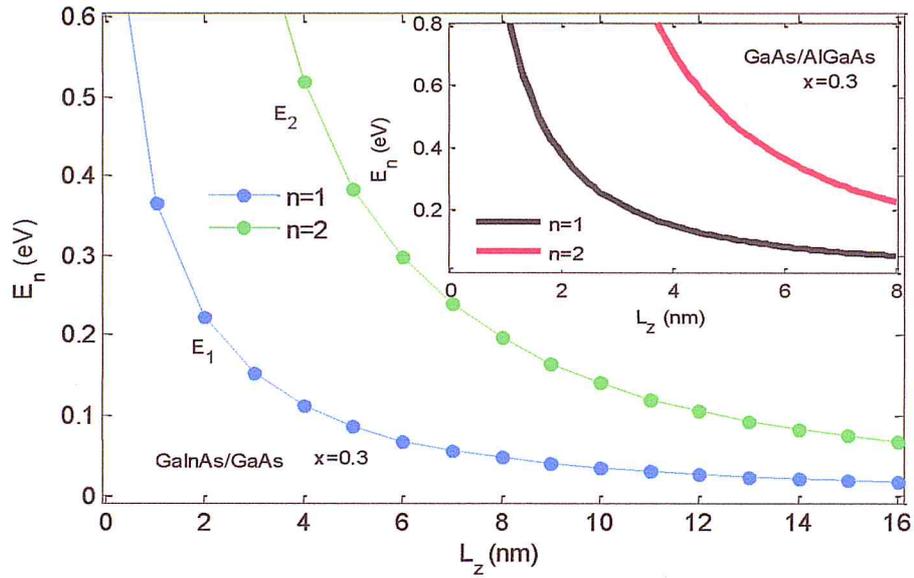
Dans la figure II.9 nous avons étudié l'influence de la concentration d'alliage sur l'épaisseur critique  $L_c$ . On peut fixer la concentration d'alliage afin de déterminer l'épaisseur critique. Alors on peut éviter l'instabilité de la structure c'est-à-dire on détermine la gamme de l'épaisseur de la zone active pour une structure à puits quantique contrainte adéquate.



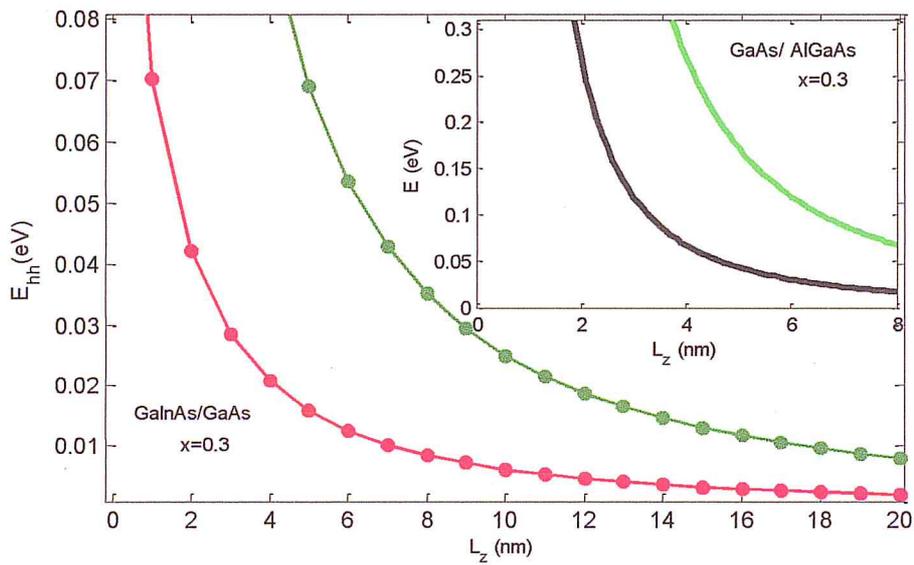
**Figure II.9** Effet de la concentration de l'alliage sur les deux structures InGaAs/GaAs et GaAs/AlGaAs

### II.2.3 Energie de quantification

Les figures II.10 et III.11 montrent la variation des énergies de confinement des porteurs électrons-trous lourds en fonction de la largeur de la zone active des deux structures avec une concentration de 30%. On a comparé les énergies de confinements de structures InGaAs/GaAs et GaAs/AlGaAs. Cette étude nous donne une idée sur l'application de la structure. Aussi on peut déterminer l'énergie de transition et la probabilité d'existence de nombres de niveaux de confinement. Nous avons comparé l'énergie de confinement des porteurs électrons et trous lourds. Nous avons choisi les structures avec une concentration d'alliage de 30%. Alors nous pouvons déterminer l'application de laser réalisé et sa fiabilité, il suffit d'avoir les matériels nécessaires pour la conception et la caractérisation.



**Figure II.10** comparaison des énergies de confinement des porteurs électrons de structures InGaAs/GaAs et GaAs/AlGaAs



**Figure II.11** comparaison des énergies de confinement des porteurs trous lourds de structures InGaAs/GaAs et GaAs/AlGaAs

## II.2.4 Energie de transition

Les figure II.12 illustre la comparaison des énergies de transitions des structures InGaAs/GaAs et GaAs/AlGaAs dans le puits quantique en fonction de la largeur du puits. On remarque que l'augmentation de la largeur du puits  $L_z$  cause la diminution de l'énergie de transition des deux niveaux ( $C_1-hh_1$  et  $C_2-hh_2$ ).

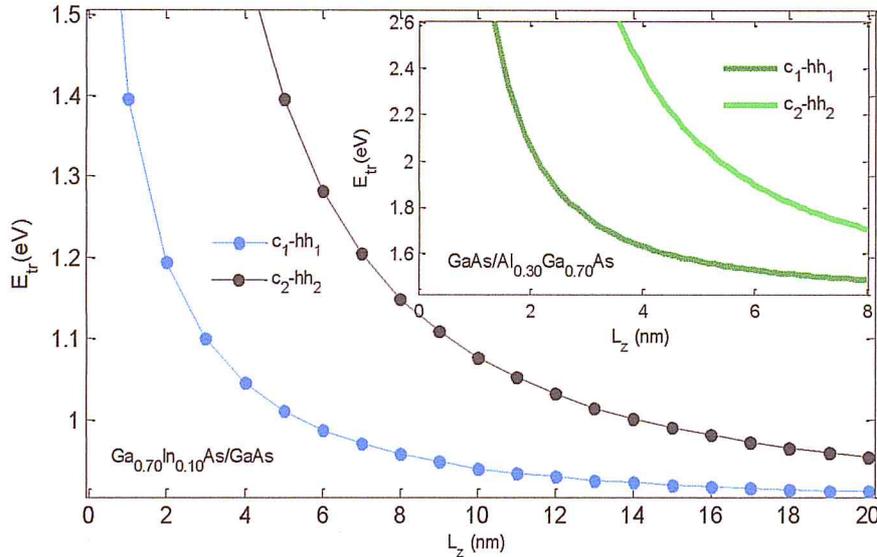


Figure II.12 Comparaison des énergies de transitions des structures InGaAs/GaAs et GaAs/AlGaAs

## II.2.5 Longueur d'onde d'émission

La figure II.13 nous montre l'effet de l'épaisseur de la zone active sur la longueur d'onde d'émission de la structure. On peut déterminer des structures émettant dans les fenêtres de la fibre optique à base de la silice pour la télécommunication optique. Aussi, on peut détecter d'autres applications en optoélectronique et en détection exemple détection des gaz dans la gamme de l'infrarouge moyen. En conclusion on peut changer l'alliage, la largeur de la zone active et le matériau afin de déterminer des applications en télécommunication, détection et optoélectronique.

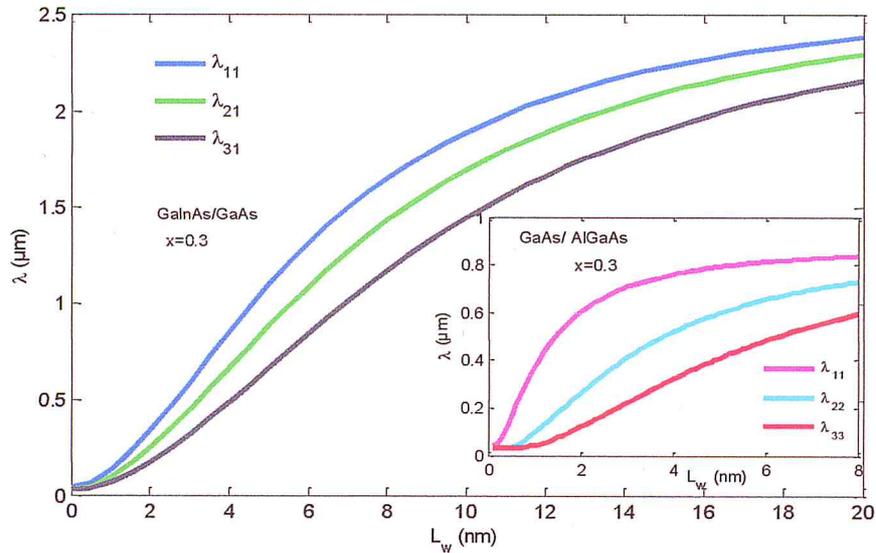


Figure II.13 Evolution de la longueur d'émission des structures InGaAs/GaAs et GaAs/AlGaAs

## II.2.6 Le gain optique

La figure II.15 représente la variation du gain optique en fonction de la longueur d'onde pour différentes densités des porteurs injectés pour une largeur de puits égale à 20 nm et de concentration de 20% d'Indium pris à une température de  $T=300K$ .

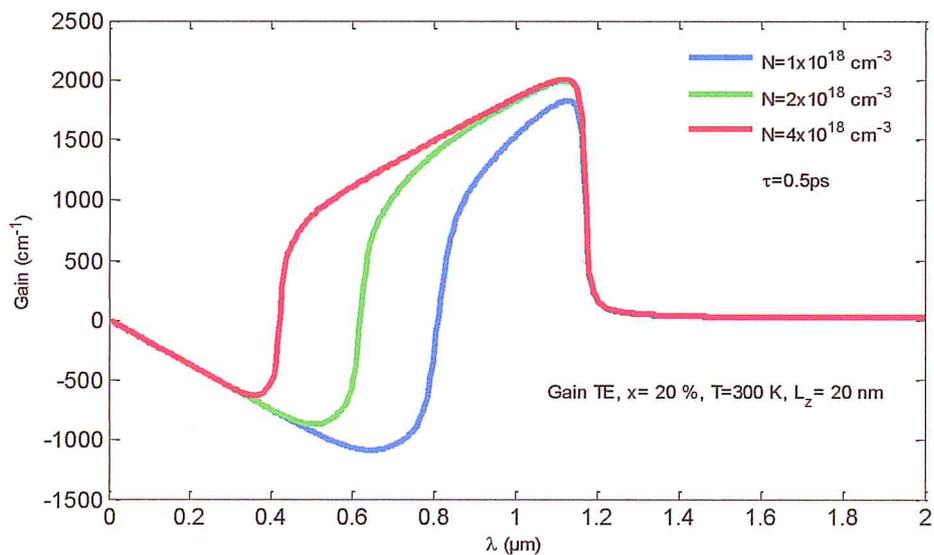
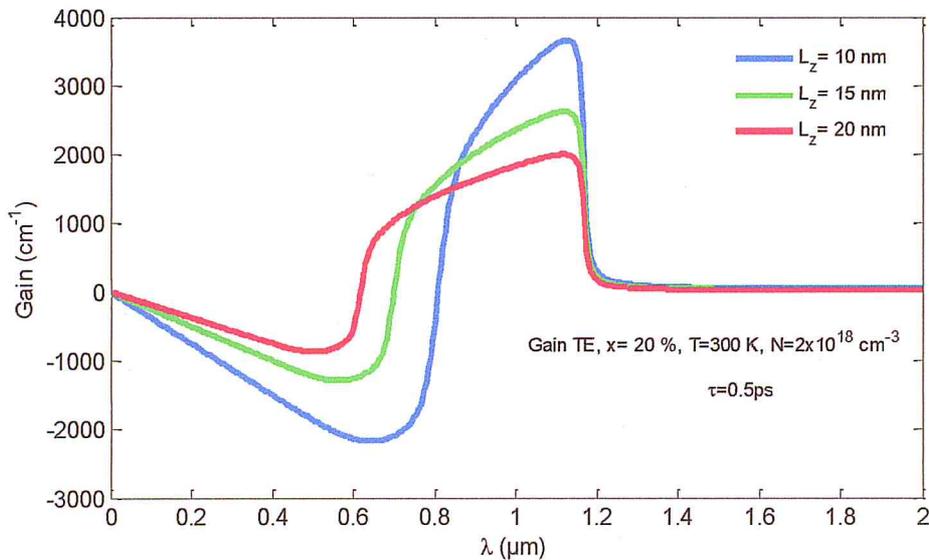


Figure II.15 variation du gain optique en fonction de la longueur d'onde pour différentes densités des électrons

On remarque que le gain optique s'accroît avec l'augmentation de la densité des porteurs injectés. Plus l'injection est importante plus la gamme d'émission du gain s'élargie avec un décalage vers des petites longueurs d'ondes d'émissions. Car, l'augmentation de la densité des porteurs engendre des largeurs spectrales très grandes. Et ça contredise notre but d'avoir un gain maximal avec une petite largeur spectrale.

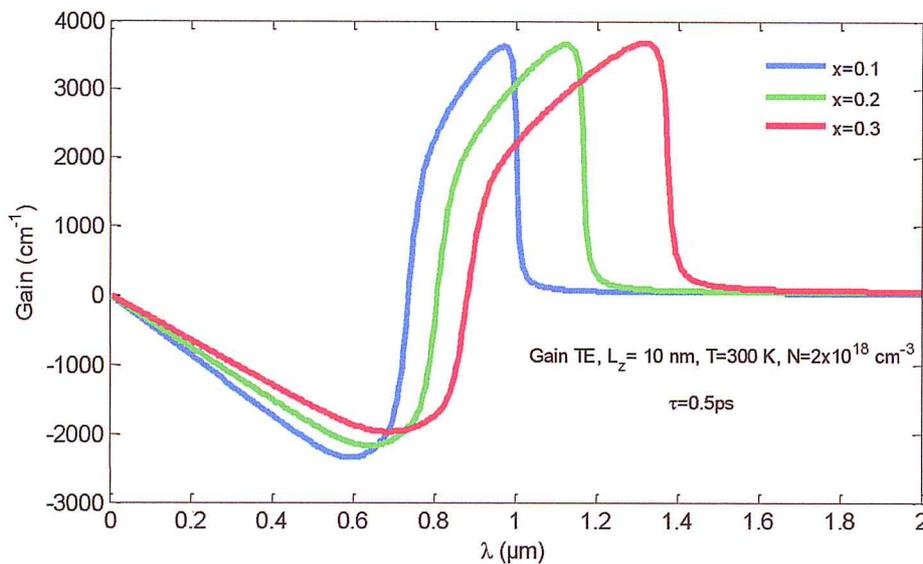
La figure II.16 montre la variation du gain optique en fonction de la longueur d'onde pour différentes largeurs de la zone active  $L_z$ . Comme il a été montré dans les simulations précédentes, les niveaux de confinements diminuent avec l'élargissement du puits quantique, ce qui provoque une réduction des énergies de transitions. Cette réduction énergétique entraîne à la fois une atténuation importante de l'amplitude du gain optique et un élargissement de la gamme d'émission car elle permet des transitions à partir des niveaux de confinements supérieurs. Par exemple, on prend le cas où  $L_z = 10$  nm où on obtient un gain maximal qui correspond à une longueur d'onde égale à 1.15  $\mu\text{m}$  et avec une petite largeur spectrale.



**Figure II.16** variation du gain optique en fonction de la longueur d'onde pour différentes largeurs de la zone active.

La figure II.17 illustre la variation du gain optique en fonction de la longueur d'onde pour différentes concentrations d'indium. L'augmentation de la concentration de l'Indium dans la couche active provoque une réduction de l'énergie de la bande interdite de cette dernière, donc l'énergie de transition diminue. Plus la concentration d'Indium est importante plus la

longueur d'onde d'émission devient plus importante avec un décalage important vers les grandes longueurs d'ondes. Par exemple, Pour  $x=20\%$  on a un gain maximal de  $3700\text{cm}^{-1}$  qui correspond à une longueur d'onde égale à  $1.1\ \mu\text{m}$ . Et pour  $x=30\%$  on aura toujours le même gain optique maximal mais avec une grande longueur d'onde d'émission. Plus la concentration augmente, la longueur d'onde d'émission tend vers des grandes longueurs d'ondes avec une augmentation importante de la largeur spectrale  $\Delta\lambda$ . Afin d'optimiser le gain optique de la structure on doit trouver un compromis entre les trois paramètres  $N$ ,  $L_z$  et la concentration d'indium.



**Figure II.17** variation du gain optique en fonction de la longueur d'onde pour différentes concentrations d'indium.

## II.2.7 Conclusion

Dans ce troisième chapitre, on a étudié les résultats de la simulation de matériau GaAs/AlGaAs. Ainsi qu'une petite comparaison des résultats obtenus entre la structure InGaAs/GaAs et la deuxième structure GaAs/AlGaAs. Enfin, notre simulation nous donne la possibilité de trouver l'énergie de la bande interdite afin de atteindre les longueurs d'ondes d'émissions  $0.85$ ,  $1.3$  et  $1.55\ \mu\text{m}$ , exploitables dans les fenêtres de fibre optique à base de la silice avec faible pertes. Ce travail nous permet de déterminer le gain optique maximal en fonction de la longueur d'onde d'émission de la structure à simple puits quantique symétrique.

## Conclusion générale

Ce travail de fin d'étude a été consacré à l'étude des propriétés physiques, électroniques et optiques de la structure InGaAs/GaAs ainsi que la structure GaAs/AlGaAs appliquée aux systèmes de télécommunications optique.

Dans le premier chapitre, nous avons présenté une revue bibliographique sur ces deux structures illustrant ses propriétés optoélectroniques. En outre, nous avons justifié le choix de la gamme des longueurs d'onde de télécommunication optique,  $0,85 - 1,3 - 1,55 \mu m$ . Nous avons vu des généralités sur les semi-conducteurs, lasers et les différents paramètres qui rentrent en jeu qui caractérise les diodes laser à semi-conducteurs. Nous avons détaillé par la suite quelques définitions du puits quantique.

Une résolution de l'équation de Schrödinger est menée afin de simuler la structure d'un puits quantique en mettant en évidence l'effet de confinement suite à la variation de la largeur du puits.

A propos du dernier chapitre, nous avons présenté les résultats de simulations décrivant l'effet d'indium sur le comportement énergétique de nos structures.

Ensuite, la dernière partie de ce chapitre est consacré pour faire une comparaison des deux structures InGaAs/GaAs et GaAs/AlGaAs ainsi que l'étude du gain optique en fonction de la longueur d'onde d'émission.

Notre simulation nous donne la possibilité de trouver l'énergie de la bande interdite afin de déterminer les longueurs d'ondes d'émissions pour la fibre optique en silice. Comme perspectives, nous pouvons continuer ce travail en utilisant d'autres matériaux afin d'améliorer les propriétés physiques, chimiques et optiques pour les composants optoélectroniques. Afin d'améliorer les performances de ces composants optoélectroniques, nous pouvons utiliser d'autres nanostructures comme les nano-fils et les boites quantiques. Cette étude nous permet de traiter le phénomène d'absorption dans les matériaux III-V afin de d'optimiser et réaliser des cellules solaires de haut rendement.

## Bibliographie

- [1] Imene Arfaoui, développement de la fabrication des dispositifs lasers pour les télécommunications, (Québec) Canada (1999).
- [2] R. Planel, Propriétés optiques des semi-conducteurs et de leurs hétéro-structures, Laboratoire des Technologies de la Microélectronique (LTM-CNRS),(31 janvier 2017).
- [3] Jean-Jacques Rousseau, Alain Gibaud, Cristallographie géométrique et radiocristallographie, 3<sup>e</sup> éd, Québec, 2007, pp 76-79.
- [4] Marc Haelterman, physique des semi-conducteurs II, 3<sup>e</sup> éd, Université Libre de Bruxelles, 1998, pp 46-50.
- [5] P. Lorenzini, Physique des Semiconducteurs, 4<sup>ème</sup> éd, Nice (France), 2014.
- [6] Patricia Frot, et al, Radioprotection : radionucléides, Indium-111, (2013).
- [7] H. Mathieu, Physique des semi-conducteurs et des composants électroniques, du nod, 5<sup>e</sup>ed,2004, pp 52-68.
- [8] C. Kittel, physique de l'état solide, 5<sup>e</sup>éd, Québec (université trois rivières),1983, pp 26-32.
- [9] Véronique Lenoble, Elimination de l'arsenic pour la production d'eau potable (2003).
- [10] C. Michel, F. Battaglia Brunet, pollution des eaux par l'arsenic et acceptabilité des procédés de bio-traitement, (2009).
- [11] Antoine Pierrot, transfert hospitalier du radio-marquage au gallium, 61-68 (2016).
- [12] Marc Degrez, Le gallium, impacts et enjeux environnementaux, (2011-2012).
- [13] Hugo P. Van Landergem, Métallurgie à l'azote (2012).
- [14] Cassandre Gaudnik, Impacts des dépôts d'azote atmosphérique sur la végétation des prairies acides du domaine atlantique français (2011).
- [15] Legér Lefevre, Applications industrielles Transmission par fibre optique 2<sup>e</sup> éd, (2015).
- [16] H. Y. Fan, Temperature Dependence of the Energy Gap in Semiconductors, Phys. Rev., vol. 82, p. 900, 1951.
- [17] Joël Bleuse et Vincent Bouchiat, Nanofils semi-conducteurs et Nanotubes de carbone : une approche commune, 2004.
- [18] Andrey PANKRATOV, Propriétés des boîtes quantiques GaAs/AlGaAs obtenues par remplissage des nanotrous, 2017.
- [19] C. Chauvin, J. Math : Les ondelettes comme fonctions de base dans le calcul de structures électroniques, I. N. Pol. De Grenobl, 2005.
- [20] Band parameters for III-V compound semiconductors and their alloys'', American Institute of Physics, J. Appl. Phys. 89, 5815 (2001).

[21] Yan Zhang, YongqiangNing, Lisen Zhang, Jinsheng Zhang, Jianwei Zhang, Zhenfu Wang, Jian Zhang, YugangZeng, and Lijun Wang, Design and comparison of GaAs, GaAsP and InGaAlAs quantum-well active regions for 808-nm VCSELs, Vol. 19, No. 13, Optics Express (2011).

[22] Photonics West. Proceedings of SPIE Vol. 4278. Light-Emitting Diodes: Research, Manufacturing, and Applications.