

République Algérienne démocratique et populaire  
Ministère de l'enseignement supérieur et de la recherche scientifique

UNIVERSITE DE BLIDA1

Faculté des Sciences  
Département de Physique



MEMOIRE DE MASTER

En physique

Spécialité : Matériaux et composants

OPTIMISATION D'UNE STRUCTURE A Puits  
QUANTIQUE CONTRAINT A BASE DE InSbBi/InSb  
ET GaAsBi/AlAs POUR L'OPTOELECTRONIQUE

Présentés par

OUAZENE TAOUS

MOKHNACHA KARIMA

Devant le jury composé de :

- |              |                        |             |
|--------------|------------------------|-------------|
| • A.Bounemri | M.A. U. de Blida       | Président.  |
| • M.Elbey    | M.A.U. de Blida        | Examineur.  |
| • A .Aissat  | Professeur. U.de Blida | Rapporteur. |

Blida, octobre 2016

## *Remerciements*

*Avant tout, nous remercions Allah le tout puissant qui nous a données la force pour réaliser cet ouvrage que nous souhaitons qu'il atteindra nos aspirations, si Dieu le veut.*

*Nous tenons à exprimer notre profonde gratitude au Pr AISSAT Abdelkader Professeur à l'université de BLIDA notre encadreur, qui par ses enseignements et ses conseils a été un guide précieux dans l'élaboration de ce mémoire.*

*Nous remercions chaleureux sont aussi adressés au Chef de département de physique Madame OUIR de l'Université Saad Dahlab.*

*Un grand merci à tout les autres membres du laboratoire « LASICOM » : Dr. F. BOUAMRA, Dr. A. BOUMEDIENNE, M. B. BOUTAÏRAOUI, Dr B. Rekik et Monsieur M. DERBAL docteur, du laboratoire LASICOM à l'Université de Blida1.*

*Nous remercions les plus vifs s'adressent aussi aux messieurs le président et les membres de jury d'avoir accepté d'examiner et d'évaluer ce travail.*

*Enfin, nous tenons à remercier tous ceux qui ont contribué de près ou de loin à nos vifs remerciements.*

## ملخص

هذا العمل يحتوي على دراسة لبنية متكونة من بئر كمومي مضغوط متكون من منطقة نشطة على الركيزة  $\text{InSbBi/InSb}$  و  $\text{GaAsBi/AlAs}$ , من أجل الحصول على طول موجة للوصلة الضوئية. هذا الخليط الثلاثي الذي هو من أشباه النواقل III-V, يمثل خصائص جد مهمة. هذا بفعل إدخال البزموت على الركيزة  $\text{InSbBi}$  و  $\text{GaAsBi}$ , لقد قمنا بدراسة تأثير البزموت على تقلص البنية الطاقوية, الفجوة, الطاقة التي تمر بمرحلة انتقالية, والطاقة من تكميم, وحساب طول الموجة بدلالة عرض البئر في لمنطقة النشطة و نسبة البزموت.

**كلمات المفاتيح:** اشباه النواقل, البزموت, , المنطقة النشطة, بئر كمومي, طول الموجة.

## Résumé

Ce travail porte sur l'étude d'une structure laser à base d'un puits quantique qui est composé d'une zone active sur le substrat InSbBi/InSb et GaAsBi/AlAs en vue de l'obtention de la longueur d'onde d'une fibre optique. Cet alliage ternaire qui est un semi-conducteur III-V présente des caractéristiques importantes.

D'une manière drastique due à l'incorporation de Bismuth dans le substrat, nous avons étudié l'effet de bismuth sur la contrainte, la structure de bande, l'énergie de transition, l'énergie de quantification et nous avons calculé la longueur d'onde en fonction de la largeur du puits à la zone active ainsi que la concentration de bismuth.

**Mots clés :** Semi-conducteur, Bismuth, Zone active, Puits quantique, Longueur d'onde.

## **Abstract**

This work focuses on the study of a base of a quantum well laser structure comprises an active region on the InSbBi/ InSb and GaAsBi/AlAs substrate in order to obtain the wavelength of fibre optique .

This alloy which is a quaternary III-V semiconductor has important characteristics. a drastically due to the incorporation of bismuth in the substrate. We studied the effect of bismuth on coercion, the band structure, transition energy, energy quantization and calculate the wavelength depending on the width of the well to the active area and the concentration of indium and bismuth.

**Keywords:** Semiconductor, Bismuth, Active zone, Quantum well, wavelength.

## Listes des acronymes et abréviations

$E$  : Énergie de photon.

$h$  : Constante de Planck.

$C$  : Vitesse de la lumière dans le vide.

$h\nu$  : Énergie photon

$\lambda_s$  : Longueur d'onde seuil.

$\lambda$  : Longueur d'onde.

$m_e$  : Mass effective.

$m$  : La masse de la particule.

$In$  : Indium

$Sb$  : Antimoine

$Ga$  : Gallium.

$As$  : Arsenic

$Al$  : Aluminium.

$Bi$  : Bismuth.

$BC$  : Bande de conduction.

$BV$  : Bande de valence.

$q$  : Charge élémentaire.

$K$  : Constante de Boltzmann.

$n$  : Coefficient d'idéalité.

$L$  : Longueur de puits.

$L_c$  : Épaisseur critique

$E_g$  : Énergie de gap.

$\varepsilon$  : Déformation hydrostatique.

$a_s$  : Paramètre de maille du substrat.

$a_e$  : Paramètre de maille de la couche active.

$\gamma$  : Coefficient de poisson.

$\Delta_a$  : Désaccord paramétrique.

$\Delta_0$  : Énergie de décalage des bandes des trous spin-splittée.

$C_{ij}$  : Tenseur d'élasticité.

$h_c$  : Épaisseur critique.

$C_{Bi}$  : Paramètre de couplage.

$E_{Bi}$  : L'énergie de localisation du bismuth.

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

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

$a_v$  : Potentiel de déformation dans la bande de valence.

$a_c$  : Potentiel de déformation dans la bande de conduction.

$b$  : Potentiel de déformation tétragonale.

$E_{v,moy}$  : Centre de gravité de la bande de valence.

$\Delta E_{sh}$  : Décalage énergétique induit par la contrainte de cisaillement.

$\Delta E_{lh}$  : Décalage d'énergie de la bande de trou lourd.

$\Delta E_{hh}$  : Décalage d'énergie de la bande de trou léger.

$E_{gcont}$  : Énergie de gap contraint.

$E_{gncont}$  : Énergie de gap non contraint.

$E_{tr}$  : Énergie de transition.

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

$\varphi$  : La fonction d'onde.

$E_{ni}$  : Niveaux d'énergie dans la bande de conduction.

$E_{hj}$  : Niveaux d'énergie dans la bande de valence

$S_0$  : Niveaux d'énergie spin orbite

# TABLE DES MATIERE

<b>INTRODUCTION GENERAL .....</b>	<b>1</b>
<b>CHAPITRE 1 : L'ETAT DE L'ART .....</b>	<b>3</b>
1.1 Introduction.....	3
1.2 Définition général pour les semi conducteur.....	3
1.2.1 Les bandes d'énergies .....	4
1.2.2 Différents types de semi conducteurs.....	5
1.2.2.1 Semi conducteur intrinsèque .....	5
1.2.2.2 semi conducteur extrinsèque.....	5
a) Type n .....	5
b) Type p .....	6
1.3 Les semi conducteur III-V.....	7
1.3.1 Propriétés physiques des semi-conducteurs III-V .....	7
1.3.1.1 Structure cristalline .....	7
1.3.1.2 Zone de Brillouin.....	8
1.3.1.3 Groupe de symétrie .....	9
1.3.2 Propriétés électroniques.....	10
1.3.3 Le gap direct et indirect .....	10
1.3.3.1 Semi-conducteur à gap direct.....	10
1.3.3.2. Semi-conducteur à gap indirect.....	10
1.3.4 Structure des bandes d'énergie.....	11
1.4 Rappel sur les lasers.....	12
1.4.1 Qu'est ce qu'un laser ?.....	12
1.4.2 Les principes de base du laser :.....	12
a) le milieu amplificateur.....	13
b) La source de pompage.....	14
c) La cavité résonante .....	14
1.4.3 Laser à semi conducteur .....	15
1.4.4 Les puits quantiques.....	16
1.5 Conclusion.....	17

<b>CHAPITRE 2 : ETUDE DES MATERIAUX HÉTÉROJONCTION À BASE BISMUTH .....</b>	<b>18</b>
2.1. Introduction.....	18
2. 2. Les alliages ternaires à base de Bi.....	18
2.3. L'étude des paramètres électroniques.....	19
2.3.1. Le paramètre de maille.....	19
2.4. La contrainte.....	19
2.5. Épaisseur critique.....	21
2.6. Effet de la contrainte .....	22
2.6.1. Effet de la contrainte sur le gap.....	22
2.7. Les états énergétiques dans un puits quantique .....	25
2.8. Énergie de transition : .....	29
2.9. Conclusion :.....	29
<b>CHAPITRE 3 : SIMULATION ET RESULTATS .....</b>	<b>30</b>
3.1 Introduction :.....	30
3.2 L'étude de paramètre de maille:.....	30
3.3 Désaccord paramétrique .....	31
3.4 Épaisseur critique.....	33
3.5 Éclatement de la bande de valence : .....	33
3.6 L'énergie de la bande interdite : .....	34
3.7 Barrières de potentiel : .....	36
3.8 Taux de confinement .....	37
3.9 Quantification des niveaux d'électrons dans le puits .....	39
3.10 Quantification des niveaux des trous dans le puits.....	40
3.11 Energies de transition dans le puits .....	40
3.12 Longueur d'onde d'émission.....	42
3.13 Conclusion :.....	43
<b>CONCLUSION GENERAL.....</b>	<b>44</b>
<b>ANNEXE .....</b>	<b>46</b>
<b>REFERENCES .....</b>	<b>47</b>

## LISTE DES FIGURES

<b>CHAPITRE 1 : L'ETAT DE L'ART</b> .....	<b>03</b>
<u>Figure 1.1 : Dopage n : Impuretés donneuses</u> .....	06
<u>Figure 1.2 : Dopagep :Impuretés accepteur</u> .....	06
<u>Figure 1. 3 : Réseau cristallin de la structure zinc-blende</u> .....	08
<u>Figure 1.4: la première zone de Brillouin</u> .....	09
<u>Figure 1.5 : La structure de bonde schématique d'un s-c à gap direct (a) et à gap indirect(b)</u> .....	11
<u>Figure 1.6 : structure de bandes dans l'InSb au centre de la zone de Brillouin</u> .....	13
<u>Figure 1.7 : Schéma d'un système laser</u> .....	13
<u>Figure 1.8 : Schéma de bases diode laser</u> .....	15
<u>Figure 1.9 : Schéma synoptique (a) disposition des couches semi conducteurs A et B (b) barrière de potentiel crée entre les semi conducteur A et B</u> .....	16
<u>Figure 1.10: Schéma des bandes énergétiques (a) dans un puits des type I et (b) de type II</u> .....	17
<b>CHAPITRE 2 : ETUDE DES MATERIAUX HÉTÉROJONCTION À BASE BISMUTH</b> .....	<b>18</b>
<u>Figure 2.1 : les deux types de déformation tension et compression</u> .....	20
<u>Figure 2.2 : Structure de bande d'un semi-conducteur à gap directe.</u> a) non contraint b) en compression c) en tension.....	23
<u>Figure 2.3 : puits de potentiel rectangulaire infiniment profond</u> .....	25
<u>Figure 2.4 : Énergie de transition dans le puits quantique</u> .....	29

## **CHAPITRE 3 : SIMULATION ET RESULTATS..... 30**

<b><u>Figure 3.1</u> :variation des paramètres de maille en fonction de concentration bismuth .....</b>	<b>31</b>
<b><u>Figure 3.2a</u> : Variation du désaccord paramétrique en fonction de la concentration de Bi de InSbBi/InSb.....</b>	<b>32</b>
<b><u>Figure 3.2b</u> : Variation du désaccord paramétrique en fonction de la concentration de Bi de GaAsBi/AlAs .....</b>	<b>32</b>
<b><u>Figure 3.3</u> : Épaisseur critique en fonction de la concentration de bismuth_ .....</b>	<b>33</b>
<b><u>Figure 3.4</u> : éclatement de la bande de valence en fonction de la concentration de bismuth_ .....</b>	<b>34</b>
<b><u>Figure 3.5a</u> : Variation de la bande interdite de l'alliage InSbBi contraint sur InSb en fonction de la concentration de Bi_.....</b>	<b>35</b>
<b><u>Figure 3.5b</u> : Variation de la bande interdite de l'alliage GaAsBi contraint sur AlAs en fonction de la concentration de Bi_.....</b>	<b>35</b>
<b><u>Figure 3.6a</u> :Variation des barrières de potentiel de la structure InSbBi/InSb en fonction de la concentration de Bi. ....</b>	<b>36</b>
<b><u>Figure 3.6b</u> : Variation des barrières de potentiel de la structure InSbBi/InSb en fonction de la concentration de Bi. ....</b>	<b>37</b>
<b><u>Figure 3.7a</u> : Variation de <math>Q_c</math> et <math>Q_v</math> dans l'alliage GaAsBi en fonction de la concentration de Bi. ....</b>	<b>38</b>
<b><u>Figure 3.7b</u> : Variation de <math>Q_c</math> et <math>Q_v</math> dans l'alliage InSbBi en fonction de la concentration de Bi. ....</b>	<b>38</b>
<b><u>Figure 3.8</u> :Variation des niveaux énergétiques des électrons dans le puits en fonction de sa largeur L pour plusieurs concentrations de Bi_.....</b>	<b>39</b>
<b><u>Figure 3.9</u> .Variation des niveaux énergétiques des électrons dans le puits en fonction de sa largeur L pour plusieurs concentrations de Bi.....</b>	<b>40</b>

Figure 3.10 (a.b.c) : Variation des énergies de transition dans le puits en fonction de sa largeur L pour plusieurs concentrations de Bi..... 41

Figure 3.11. :Variation de la longueur d'onde d'émission en fonction de L pour plusieurs concentrations de Bi ..... 43

## LISTE DES TABLEAUX

<u>Tableau 1.1</u> : Exemples de semi-conducteurs_.....	4
<u>Tableau 1.2</u> : Largeur de la bande interdite et seuil d'absorption à température ambient pour quelques semi- conducteurs_.....	5
<u>Tableau 1.3</u> : : Extrait de la classification périodique des éléments_.....	7
<u>Tableau 3.1</u> : Longueurs d'émission pour application télécom_.....	42

## Introduction générale

Dans le cadre du développement L'homme d'aujourd'hui utilise quotidiennement des technologies exceptionnelles, qu'il est souvent loin de soupçonner, qui lui permettent d'améliorer considérablement son niveau de vie et qui font avancer la recherche et la technologie à une vitesse fulgurante.

Les lasers à semi-conducteur se sont imposés dans le domaine des télécommunications et sont devenues les éléments clefs dans un nombre croissant d'applications principalement dans la communication par fibre optique et le stockage de données.

Les lasers à puits quantique ont des caractéristiques d'émission (longueur d'onde, largeur de raie et intensité d'émission) qui dépendent fondamentalement de la composition et de l'épaisseur des puits et de barrières ainsi que des contraintes internes dues notamment aux désaccords paramétriques un des enjeux majeurs de la recherche en optoélectronique [1]

Aujourd'hui, les logiciels de simulations jouent un rôle très important dans tous les domaines de l'électronique générale. En effet, avant la fabrication d'un composant électronique, on procède à une simulation. Cette simulation est définit dans le cas général comme une technique permettant de reproduire de façon virtuelle le comportement d'un phénomène réel, et dans le cas, du les résultats obtenus sont très satisfaisantes.

La simulation gagne en termes de cout et de temps par rapport à la fabrication. [2]

Ce travail porte sur l'étude du puits quantique à base de InSbBi/InSb et GaAsBi/, utilisé dans les diodes laser en vue de l'obtention d'une l'émission à 1.55 et 0.85  $\mu\text{m}$ , correspondant à une fenêtre de transmission des fibres optiques en silice ( $\text{SiO}_2$ ).

Ce mémoire s'articule donc ainsi :

- Le premier chapitre sera consacré aux notions fondamentales des matériaux Semi-conducteurs III-V et des généralités sur les lasers.
  
- Le deuxième chapitre, est consacré à la description des différents modèles mathématique qui permettent la détermination de l'effet de la concentration de bismuth sur les paramètres physique et les paramètres électrique de l'alliage InSbBi et GaAsBi contraint sur les substrats de respectivement InSb et AlAs.
  
- Le troisième chapitre, comprend les interprétations des différents résultats obtenus à l'optimisation des concentrations de Bi et la longueur de puits afin d'avoir des longueurs d'onde d'émission exploitables par la télécommunication optique.

# Chapitre 1

## État de l'art

### 1.1 Introduction

Dans ce chapitre, nous allons donner des généralités sur des semi conducteurs, les composants des semi conducteurs III-V sont considérés comme une classe importante des matériaux et cela grâce à l'ajustement de leur paramètre du réseau. Le gap énergétique, les constantes optiques et diélectriques sont des paramètres importants et jouent un rôle considérable dans les composants optoélectroniques.

### 1.2 Définition générale pour les semi conducteur

un semi-conducteur est un matériau se situant entre le conducteur et l'isolant dont la résistivité varie est de  $10^{-3}$  à  $10^4$   $\Omega\text{cm}$  ou plus [3]. Le semi-conducteur peut être soit pur auquel cas il est dit « intrinsèque », soit dopé par des impuretés qui permettent de contrôler sa résistivité auquel cas il est dit « extrinsèque » [4].

Des matériaux semi-conducteurs, le plus couramment utilisé est le silicium, qui appartient au groupe IV; il contribue grâce à son faible coût, sa grande disponibilité et à sa bonne conductivité thermique, D'Ailleurs, la majorité des composants électroniques base sur le silicium; cependant, ses propriétés sont insuffisantes (mobilités des porteurs relativement petites et transitions électroniques indirectes au seuil d'absorption optique) [5].

La famille des semi-conducteurs est très vaste puisqu'elle va des éléments de la colonne IV du tableau périodique, Si et Ge aux composés de plusieurs colonnes tels que : binaires, ternaires, et quaternaires [6].

Le tableau 1.1 donne des exemples de matériaux ou de composés semi-conducteurs en fonction des éléments qui les constitue et de la position de ces éléments dans le tableau périodique de Mendeleïev.

Colonne	semi-conducteur
IV	Ge, Si
III-V	GaAs , GaP, GaSb, InP, InSb
	$Al_xGa_{1-x}As$ , $Ga_yAs_{1-y}P$
	$Al_xGa_{1-x}As_yP_{1-y}$
II-VI	CdS , HgTe, CdTe, ZnTe,
	$Cd_xHg_{1-x}Te$

Tableau 1.1 : Exemples des semi-conducteurs [4]

### 1.2.1 Les bandes d'énergies

Les trois types de matériaux (**isolant, semi conducteur et métal**) sont constitués d'une bande basse d'énergie appelée bande de valence et d'une bande haute d'énergie appelée bande de conduction. La différence entre les trois matériaux est la distance entre la bande de conduction de la bande valence appelée bande interdite ou " bande gap". [7]

Les matériaux qui nous intéressent sont les semi conducteurs. Dans ces matériaux, le gap est beaucoup plus petit que dans le cas d'isolants et donne ainsi des photons par les transitions d'électrons de la bande de conduction vers la bande de valence ; en général les gaps des semi-conducteurs sont compris entre 1et 3eV. [8]

Le tableau 1.2 indique la valeur de la largeur de la bande interdite à 300K pour quelques semi-conducteurs, ainsi que la longueur d'onde  $\lambda_e$  émise due aux passages d'électrons de la bande de conduction vers la bande de valence [9].

	Si	Ge	GaAs	CdTe	PbS	Se	CdS	Hgl2	Pbl2
$E_g$ (ev)	1,11	0,70	1,52	1,46	0,35	1,8	2,42	2,13	2,30
$\lambda_e$ (um)	1,11	1,77	0,81	0,85	3,54	0,69	0,51	0,58	0,54

**Tableau 1.2:** gaps et longueur d'ondes d'émission à température ambiante pour quelques semi- conducteurs [9].

## 1.2.2 Différents types de semi conducteurs

### 1.2.2.1 Semi conducteur intrinsèque

Ce sont des semi-conducteurs très purs et très bien cristallisés (présentant un réseau cristallin parfaitement périodique) et ayant un taux d'impuretés très faible (moins de 1 atome d'impureté pour  $10^{13}$  atomes de l'élément semi-conducteur). Ils se comportent comme des isolants à très basse température et leur conductivité augmente avec la température. [10]

### 1.2.2.2 semi conducteur extrinsèque

Lorsqu'on dope un semi-conducteur avec des atomes d'impuretés, on modifie de façon remarquable les propriétés de sa conductivité. Si par exemple on ajoute dans un cristal de silicium 1 atome de bore pour  $10^5$  atomes de silicium, on multiplie sa conductivité par 1000. [10]

#### a) Type n

Les atomes de silicium ou de germanium cristallisent dans une structure où chaque atome est relié à 4 atomes voisins par des liaisons covalentes impliquant 2 électrons pour chaque liaison. Si on introduit un atome ayant 5 électrons de valence (phosphore, arsenic ou antimoine), cet atome prend la place d'un atome du cristal : 4 des électrons de l'impureté participeront aux 4 liaisons avec les 4 atomes voisins du cristal, le 5<sup>ème</sup> électron restera célibataire. A cet atome d'impureté est associé un niveau d'énergie appelé niveau donneur qui se situe juste en dessous de la bande de conduction. L'écart entre ce niveau et la bande de conduction étant faible,

un électron d'un niveau donneur peut facilement passer dans la bande de conduction sous l'action de l'agitation thermique et augmente la conductivité électrique.

A température ambiante, presque toutes les impuretés sont ionisées et la conductivité devient une conductivité de type n lorsqu'on augmente le dopage.

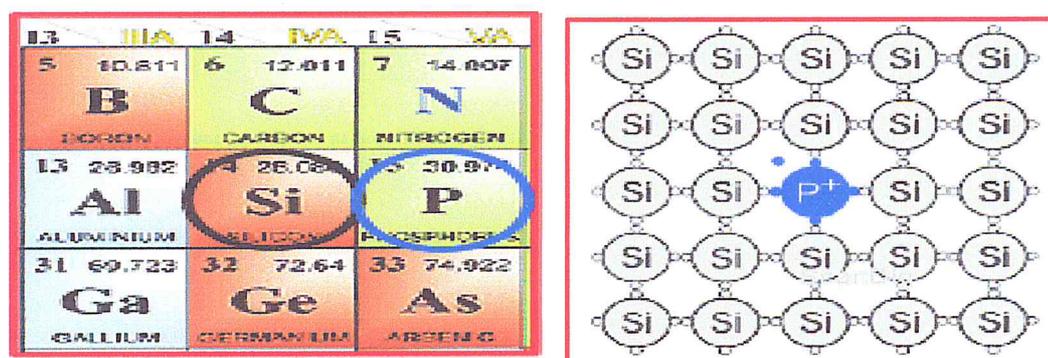


Figure 1.1 : Dopage n Impuretés donneurs

#### b) Type p

Si on introduit un atome d'impureté trivalent (bore, aluminium ou gallium), cet atome en se plaçant dans le réseau ne peut saturer que 3 liaisons sur 4. Il manque donc une liaison par atome d'impureté auquel correspond un niveau d'énergie situé juste au dessus de la bande de valence. Ce niveau est appelé niveau accepteur. Au zéro absolu, ces niveaux accepteurs sont vides ; lorsqu'on augmente la température, ils peuvent être occupés par des électrons provenant de la bande de valence. Les niveaux libres de cette dernière engendrent des trous et la conductivité devient de type p lorsqu'on augmente le dopage [8].

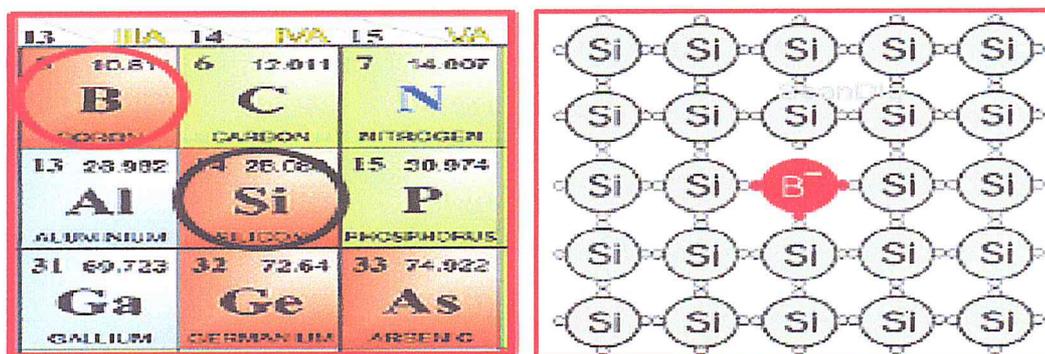


Figure 1.2 : Dopage p Impuretés accepteurs

### 1.3 Les semi conducteur III-V

Les semi-conducteurs III-V, sont formés à partir d'un élément de la colonne III et d'un autre élément de la colonne V de la classification périodique, ils sont en majorité à gap direct et plus utilisés surtout dans le domaine de l'optoélectronique et les lasers semi conducteurs. [11]

Le tableau 1.3 représente la table de Mendeleïev, dite tableau périodique des éléments, contenant des matériaux semi-conducteurs.

III	IV	V	VI
B	C	N	O
Al	Si	P	S
Ga	Ge	As	Se
In	Sn	Sb	Te
Tl	Pb	Bi	Po

Tableau 1.3 : Extrait de la classification périodique des éléments [11]

#### 1.3.1 Propriétés physiques des semi-conducteurs III-V

##### 1.3.1.1 Structure cristalline

Presque tous les matériaux III-V se cristallisent dans la structure sphalérite dite "Zinc Blende" présentée sur la figure (1.3). Cette structure, qui s'apparente à celle du diamant, est constituée de deux sous-réseaux cubiques à face centrées (CFC), l'un étant constitué des atomes de l'élément III, l'autre des atomes de l'élément V .

[12, 13,14].

Ces deux sous-réseaux sont décalés l'un par rapport à l'autre le long de la diagonale du cube, d'une quantité  $(a_0/4, a_0/4, a_0/4)$ ,  $a_0$  étant le paramètre cristallin, c'est-à-dire la longueur de l'arête du cube élémentaire.

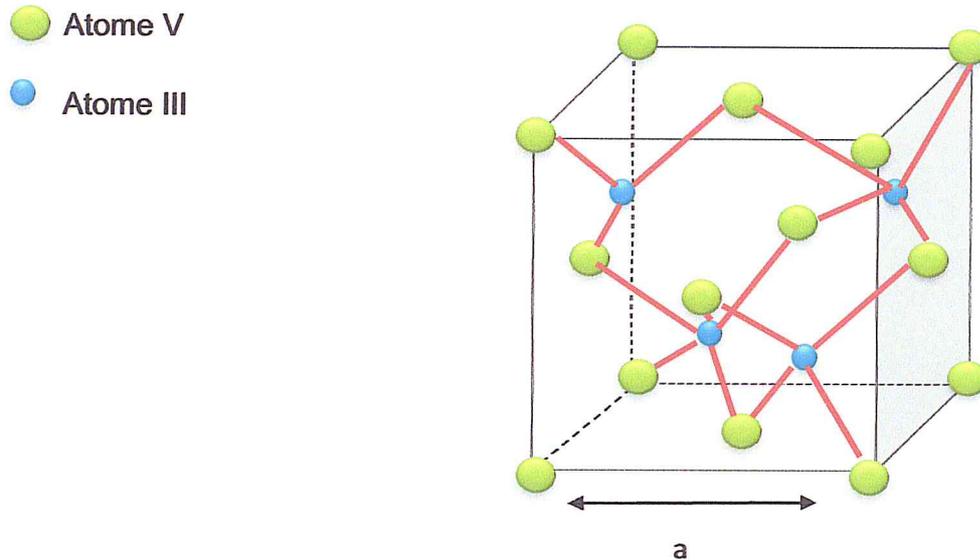


Figure 1.3: Réseau cristallin de la structure Zinc- Blende.

### 1.3.1.2 Zone de Brillouin

Le réseau réciproque du réseau de bravais correspondant à la structure zinc-blende est un réseau cubique centré. La première zone de Brillouin du réseau réciproque a la forme octaèdre tronqué (voir la figure 1.4) par les six faces d'un cube. Elle présente un centre de symétrie à l'origine noté  $\Gamma$  et les directions de symétrie  $\Delta$ ,  $\lambda$ , et  $\gamma$ . Les points de croisement de chacun de ces axes avec les frontières de la zone de Brillouin sont les points de haute symétrie, et ils jouent un rôle primordial dans la structure de bande [15].

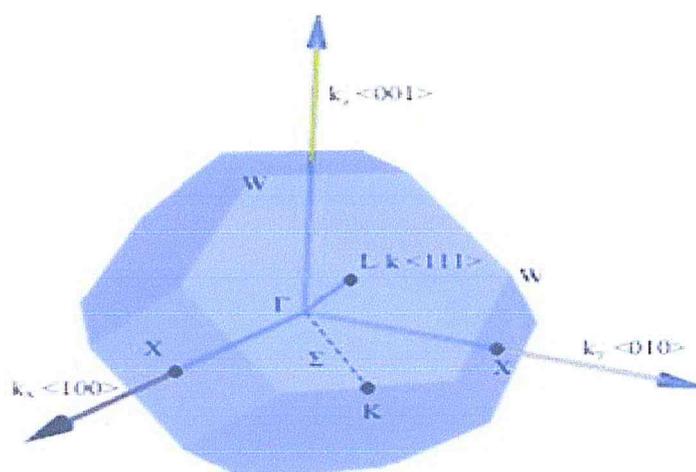


Figure 1.4 : La première zone de Brillouin

La forme et le volume de la zone de Brillouin ne dépendent que de la géométrie du réseau de Bravais, sans égard à la composition chimique ou au nombre d'atomes dans la cellule unitaires. La zone de Brillouin est une cellule unitaire primitive de réseau réciproque d'importance fondamentale pour l'étude des propriétés électroniques des cristaux, en particulier dans les semi-conducteurs [16,17].

### 1.3.1.3 Groupes de symétrie

Le groupe de symétrie ponctuel de la structure du zinc blende ne comporte pas tous les éléments du groupe de symétrie  $O_h$  ( $m\bar{3}m$ ) ponctuel du réseau à faces centrées, 24 éléments seulement assurent l'invariance du tétraèdre, ils sont  $\{E, C_4^2, C_3(8), IC_2(6), C_2(6)\}$ , le groupe ponctuel du tétraèdre est  $T_d$ , qui ne comporte pas de centre d'inversion, le groupe spatial du réseau de la zinc blende est  $T_d^2$  ou  $F\bar{4}3m$ , ils ne comporte pas de translations et comporte des rotations avec réflexion par rapport à un plan [18].

### 1.3.2 Propriétés électroniques

Les matériaux semi-conducteurs III-V ont huit électrons par cellule unitaire contribuant aux liaisons chimiques. Les autres électrons n'interviennent pas dans les propriétés optiques des hétérostructures. Les orbitales de type  $s$  et de type  $p$  de chaque atome de gallium Ga s'hybrident avec les orbitales des atomes d'arséniure As, et forment des liaisons covalentes tétraédriques de type  $sp^3$  : 4 orbitales liantes

et 4 orbitales anti liantes. Les quatre orbitales liantes donnent lieu à quatre bandes d'énergie, chacune deux fois dégénérée de spin, et forment la bande de valence. Cette bande est pleinement occupée par des électrons à  $T = 0K$ , pour un semi-conducteur parfait. Les quatre autres orbitales antiliantes donnent naissance à quatre bandes supérieures, et forment la bande de conduction qui est inoccupée et est séparée de celle précédente par une bande d'énergie interdite de largeur  $E_g$  (band gap en anglais). Pour les semi-conducteurs à gap direct, le maximum de la bande de valence et le minimum de la bande de conduction sont au point  $\Gamma$  [15].

### 1.3.3 Le gap direct et indirect

#### 1.3.3.1 Semi-conducteur à gap direct

Dans les semi-conducteurs à gap direct le maximum de la bande de valence et le minimum de la bande de conduction sont au même point (même vecteur d'onde  $\vec{k}$ ) dans la zone de Brillouin (ZB), figure 1.5. La transition électronique entre le haut de la bande de valence (BV) et le bas de la bande de conduction (BC) conserve le vecteur d'onde ( $\Delta\vec{k} = \vec{0}$ ) [19].

#### 1.3.3.2. Semi-conducteur à gap indirect

Dans le cas des semi-conducteurs à gap indirect le minimum de la bande de conduction est situé à une distance ( $\Delta\vec{k} \neq \vec{0}$ ) du maximum de la bande de valence dans la zone de Brillouin (ZB), figure 1.4

La transition électronique entre le haut de la bande de valence (BV) et le bas de la bande de conduction (BC) est accompagnée par le changement de la quantité de mouvement, c'est à-dire le vecteur d'onde n'est pas conservé [19].

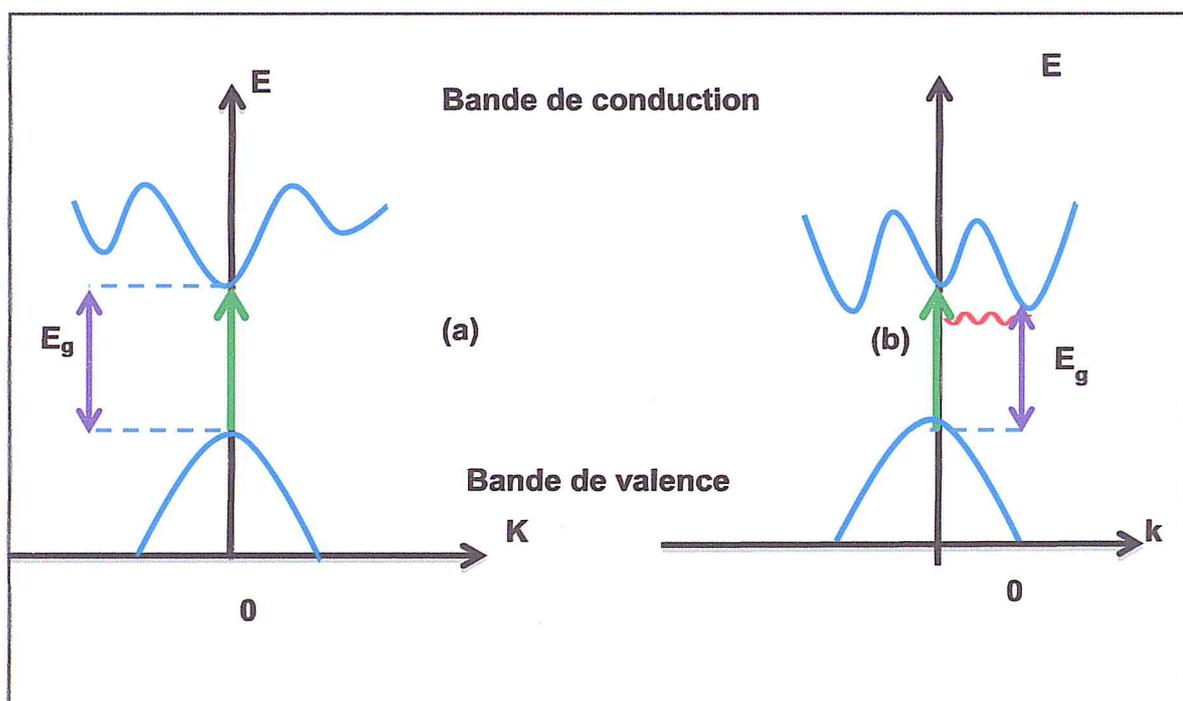


Figure 1.5 : La Structure de bande schématique d'un s-c à gap direct (a) et à gap indirect (b) [20].

### 1.3.4 Structure des bandes d'énergie

La description de la structure des bandes d'énergie s'effectue dans l'espace des vecteurs d'onde  $\vec{k}$  c'est-à-dire l'espace réciproque. On considère les variations de l'énergie  $E$  en fonction de  $\vec{k}$  que selon les directions de plus haute symétrie et en se limitant à la première zone de Brillouin. La structure des bandes dans les composés III-V est représentée dans les figures (1.5) avec un exemple pour l'InSb :

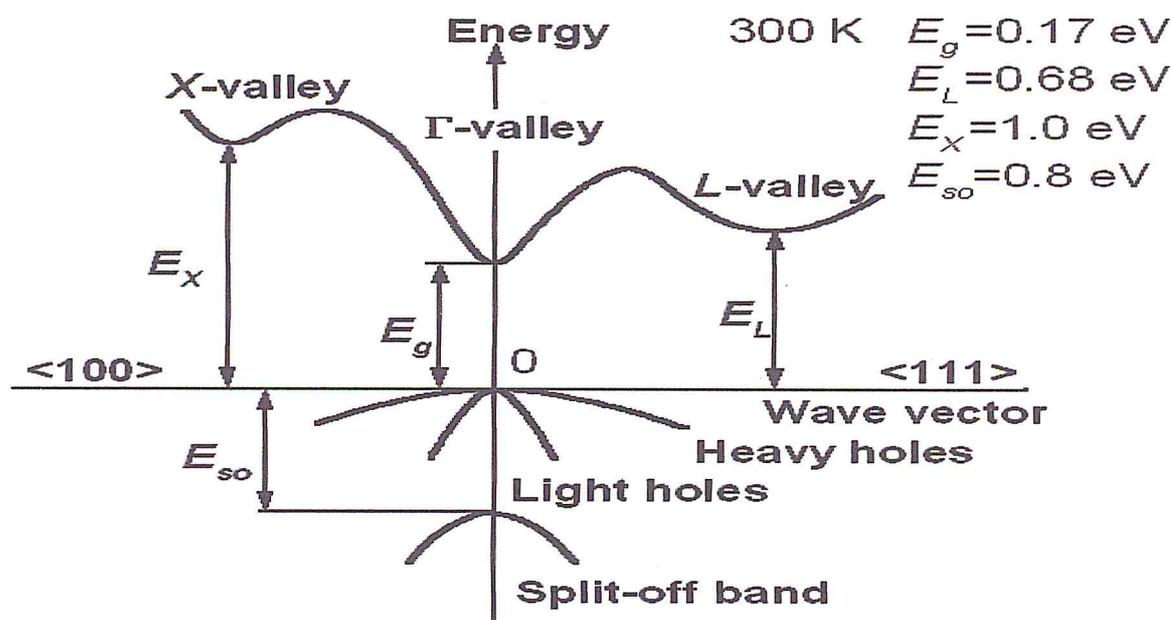


Figure 1.6 : structure de bandes dans l'InSb au centre de la zone de Brillouin [20]

Elles se décomposent en bandes de conduction et bandes de valences et bande interdite qui les sépare, l'énergie de la bande interdite est une mesure de la quantité d'énergie qu'il faut donner à un électron pour transiter du haut de la bande de valence au bas de la bande de conduction sous l'effet d'une excitation. La largeur de la bande interdite fixe la température critique c'est-à-dire la température maximale pour laquelle le matériau fonctionne normalement et que si on la dépasse, le matériau est détérioré [22].

## 1.4 Rappel sur les lasers

### 1.4.1 Qu'est ce qu'un laser ?

Le terme laser est d'ailleurs l'acronyme anglais de **Light Amplification by Stimulated Emission of Radiation** (amplification de lumière par émission stimulée d'un rayonnement).

Le laser est un générateur de rayonnement électromagnétique cohérent dans les domaines spectraux UV – Visible – IR .Il est obtenu par l'association d'un amplificateur à un oscillateur, il est fonde sur l'émission induite (stimulée) d'un système d'atomes, d'ions et molécule qui constituent le milieu amplificateur [23]

## 1.4.2 Les principes de base du laser :

Un system laser peut être schématisé de la façon suivante :

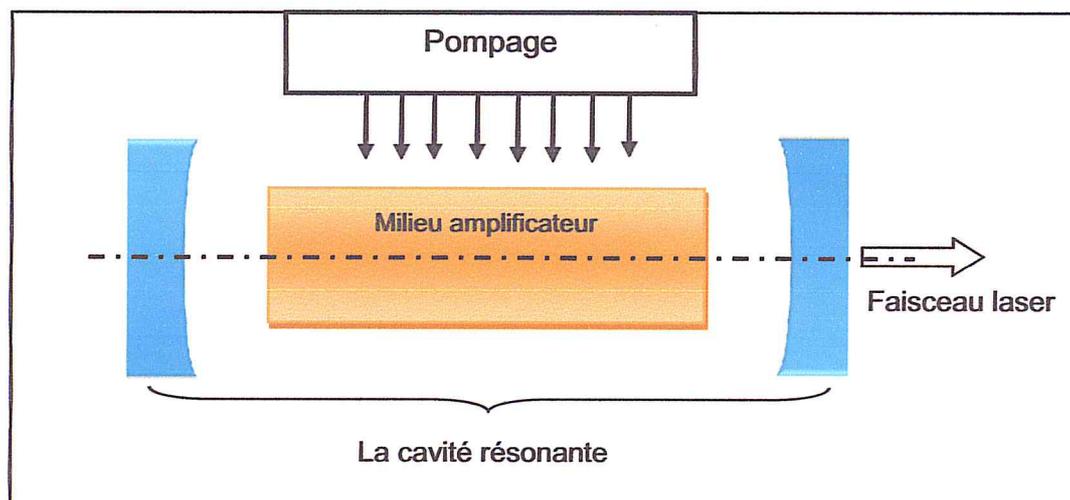


Figure 1.7 : Schéma d'un système laser [24]

Les trois principales composantes d'un laser sont les suivantes :

- Le milieu amplificateur.
- La source de pompage.
- La cavité résonante.

### a) le milieu amplificateur

Considérons deux niveaux d'énergie d'un atome (état fondamental et état excité) et voyons les transitions possibles entre ces deux états [25] :

#### ➤ Absorption :

L'électron absorbe l'énergie du photon pour passer à l'état excité.



### ➤ Émission spontanée

Un atome excité est dans un état instable et peut donc revenir à son état fondamental en émettant un photon.



### ➤ Émission stimulée

Lorsqu'un photon incident induit la recombinaison radiative d'une paire électron-trou. Le photon émis a même phase et même direction que le photon incident



## b) La source de pompage

Le pompage permet d'amener une majorité de particules à l'état excité (Excitation optique, Décharge électrique, ...). Il ya ensuite accumulation d'électrons sur le niveau métastable, c'est l'inversion de population. Celle-ci favorise l'émission stimulée. [26 ,27]

## c) La cavité résonante

Le résonateur est constitué de deux miroirs parallèles entre lesquels est placé le milieu actif. Le premier miroir, le réflecteur, est totalement réfléchissant alors que le second, le coupleur, est semi-transparent. Il permet ainsi a la lumière de sortir de la cavité, le résonateur contribue en grande partie a l'amplification de la lumière dans le laser.

Les photons en étant réfléchis par les miroirs, peuvent traverser plusieurs fois le milieu actif et provoquer l'émission stimulée d'un plus grand nombre de photons [28].

### 1.4.3 Laser à semi conducteur

Le laser à semi-conducteur s'appelle également laser à injection ou diode laser.

Dans la diode laser, le milieu amplificateur est un matériau semi-conducteur à gap direct (dans lequel les recombinaisons électron-trou sont de type radiatif). Le pompage est obtenu par injection de courant dans une jonction P-N (figure 1.8). Polarisée en direct. Un courant circulant peut former des paires électrons –trous, lorsqu'une paire se recombine, émet un photon qui peut à son tour l'émission stimulé d'autres photons La structure résonante peut être une cavité de Fabry-Pérot ou autre types [28].

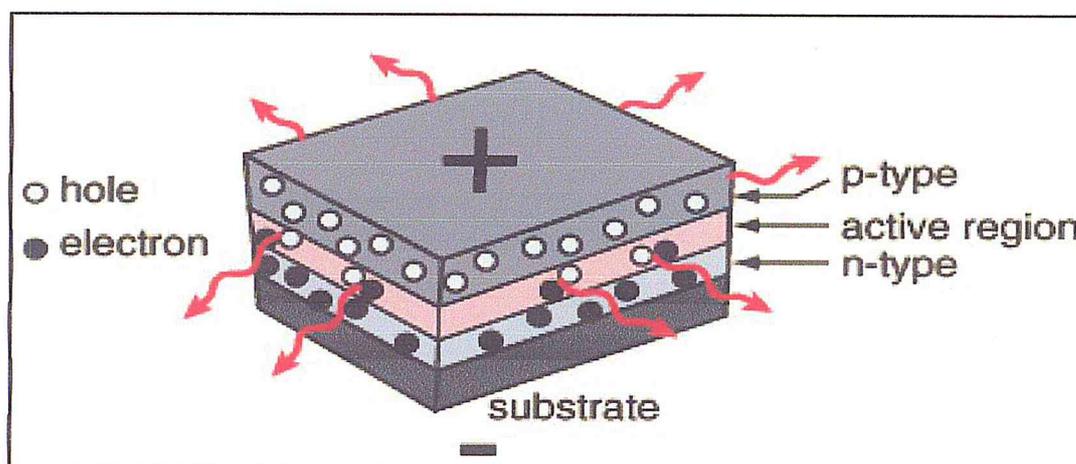


Figure 1.8 : Schéma de bases diode laser [28].

### 1.4.4 Les puits quantiques

Le puits quantique est une couche d'épaisseur  $L_z$  de semi conducteur, comprise entre deux couches d'isolants parfaits avec un semi conducteur A à faible largeur de bande interdite qui joue le rôle de puits quantique et un deuxième semi conducteur B à forte largeur de bande interdite qui joue le rôle de barrière , La discontinuité entre les bandes d'énergie des semi conducteurs A et B crée une barrière de potentiel qui confine les porteurs de charges dans la couche active[29 ].



**Figure 1.9** : Schéma synoptique (a) disposition des couches semi conducteurs A et B (b) barrière de potentiel créée entre les semi conducteurs A et B [29].

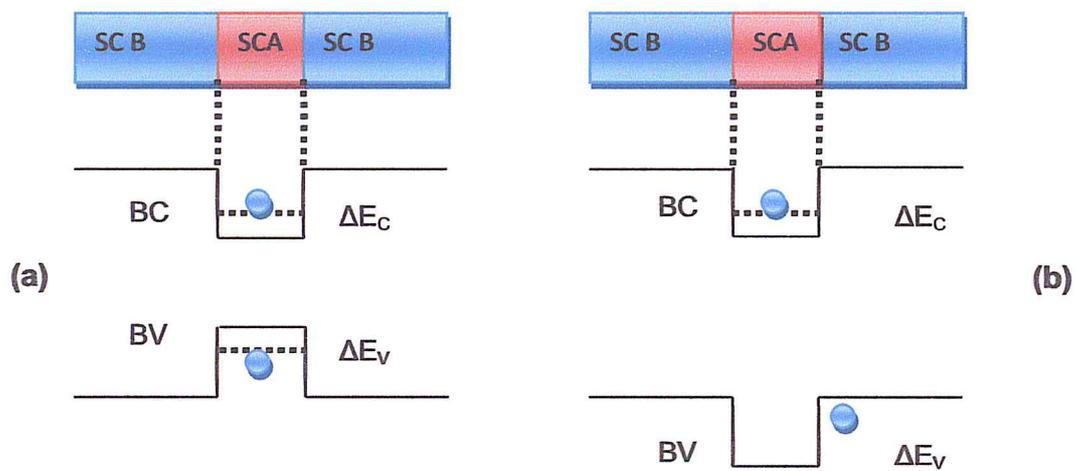
Selon la discontinuité des bandes d'énergie  $\Delta E_c$  et  $\Delta E_v$  à l'interface de contact des semi conducteurs, on peut distinguer deux types de puits quantiques (figure 1.10)

➤ **Puits 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. L'énergie du photon dépend des énergies de confinement des porteurs et du gap du matériau du puits.

➤ **Puits type II**

Les puits quantiques de type-II sont des puits où les porteurs sont confinés dans deux matériaux adjacents. Dans ce cas, l'énergie du photon est fonction des énergies de confinement des porteurs mais aussi des gaps des deux matériaux formant l'hétérostructure .



**Figure 1.10** : Schéma des bandes énergétiques (a) dans un puits du type I et (b) du type II [29].

## 1.5 Conclusion

Dans ce premier chapitre, nous avons regroupé quelques propriétés générales des matériaux semi conducteurs III-V (propriétés physique et propriétés électronique).

Après nous avons mentionné les notions fondamentales de laser le milieu amplificateur, la source de pompage et la cavité résonante et aussi définira le laser à semi conducteur et les puits quantique.

Dans le chapitre suivants on commence l'étude du matériaux ternaire **InSbBi** et **GaAsBi**

## Chapitre 2

### Étude des matériaux hétérojonction

#### À BASE BISMUTH

#### 2.1. Introduction

L'alliage ternaire dans la zone active de certains composants optoélectroniques et en particulier les diodes lasers représentent une avancée technologique importante.

#### 2. 2. Les alliages ternaires à base de Bi

Les matériaux III-V sont d'intérêt pratique particulier qui est renforcé par la possibilité de fabriquer des alliages ternaires et quaternaires par substitution partielle de l'un des éléments par un élément de la même colonne. En d'autres termes, nous arrivons de le comprendre, les composés III-V permettent de balayer une large plage de valeurs du gap, ce qui offre la possibilité de couvrir un large spectre de longueurs d'ondes, constituant ainsi, une propriété très importante du point de vue optique.

Le bismuth (Bi) et l'antimoine (Sb) sont des éléments très lourds du groupe-V l'introduction de ces éléments quand une petite quantité des atomes de Bi est contenu en commun dans quelques composés III-V, par exemple, des arséniures et antimonides, les états de l'impureté de Bi seront formés près du bord de bande de valence du semi-conducteur de l'hôte. On s'attend à ce que l'interaction entre la bande de valence et les états de Bi pour mener à une grande réduction d'écart de bande d'énergie [30,31] et l'orbite de tournoiement forte divisant [32].L'influence de Bi sur la structure de bande arrive seulement dans la bande de valence si on n'estime pas de tension. Ceci fournit un nouveau degré de liberté à fin de réaliser la structure de bande de semi-conducteurs pour le potentiel électronique et optoélectronique.

## 2.3. L'étude des paramètres électroniques

La loi de Végard est une loi empirique indiquant que les valeurs des propriétés d'un alliage (gap d'énergie, paramètre de maille, constantes élastiques, etc.) peuvent être déterminées par une interpolation linéaire des valeurs des propriétés de ses composants [33]

$$\rho(x) = x * p(AC) + (1 - x) * p(AB) \quad (2.1)$$

### 2.3.1. Le paramètre de maille

Le paramètre de maille « a » est égal à la distance entre deux atomes dans un cristal. Lorsqu'un atome étranger est introduit dans le réseau cristallin, il provoque en général une variation du paramètre cristallin qui se traduit par une expansion ou une contraction du réseau, fonction de la taille des atomes. On dit que la variation de « a » obéit à la loi de Végard si elle est linéaire avec le taux de substitution x [34]

Nous avons utilisé la loi de Végard donnée par l'équation (2.1) pour le calcul du paramètre de maille de l'épitaxie :

$$a_e(x) = x * a(AC) + (1 - x) * a(AB) \quad (2.2)$$

## 2.4. La contrainte

les matériaux épitaxies ont des paramètres différents, mais pas trop éloignés. Lors de la croissance d'une couche semi-conductrice de paramètre de maille  $a_e$  différent de celui du substrat (plus épais)  $a_s$ , c'est le matériau support qui impose son paramètre de maille dans le plan de la couche. Par conséquent, la couche épitaxie devient le siège de contraintes en compression si ( $a_e > a_s$ ) ou en tension si ( $a_e < a_s$ ) entraînant ainsi une déformation tétragonale de sa maille :

**Bi axiale** : dans le plan de croissance [35].

$$\varepsilon_{//} = \varepsilon_{xx}(x) = \varepsilon_{yy}(x) = \frac{a_s - a_e(x)}{a_e(x)} \quad (2.3)$$

Uni axiale : dans la direction de croissance [35].

$$\varepsilon_{\perp} = \varepsilon_{zz}(x) = -2 \frac{c_{12}(x)}{c_{11}(x)} \varepsilon_{//} \quad (2.4)$$

où :

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

$a_s$  : Le paramètre de maille du substrat (DE)

$a_e$  : Le paramètre de maille de la couche épitaxiale (ABC).

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

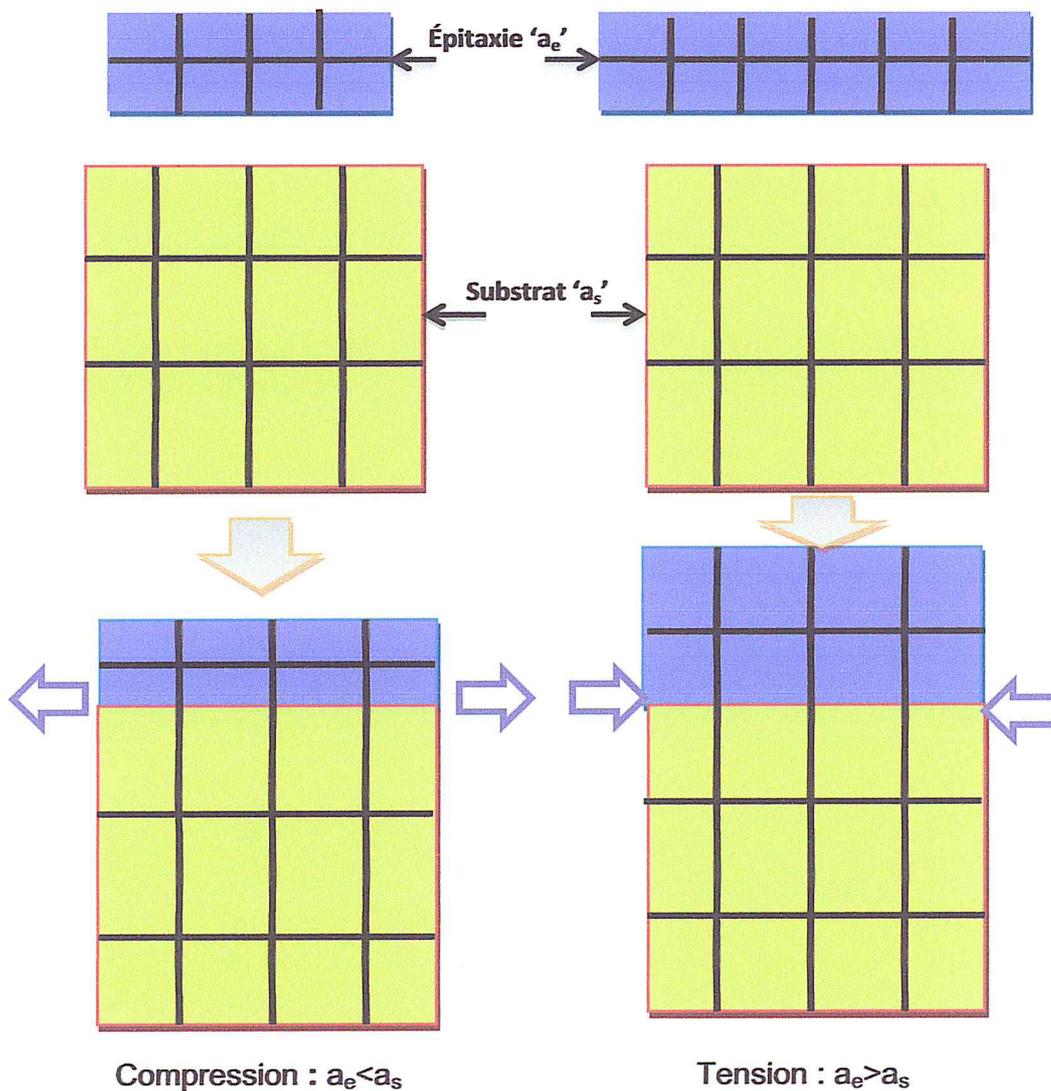


Figure 2.1 : les deux types de déformation tension et compression.

## 2.5. Épaisseur critique

Lors de l'épitaxie d'un matériau sur un substrat de paramètre de maille différent, les couches de contraintes commencent à se relaxer, et génèrent des dislocations qui se propagent de l'interface de contact vers le quaternaire, et qui s'accompagnent d'une accumulation d'énergie élastique. Cette épaisseur limite est appelée épaisseur critique.

Pour une épaisseur épitaxiée supérieure à l'épaisseur critique, on peut observer un phénomène dit de relaxation. Ce phénomène peut être de deux types.

Donc deux cas peuvent se présenter : [18]

- Si  $L < L_c$ , l'épaisseur de la couche active est inférieure à une certaine épaisseur  $L_c$  appelée l'épaisseur critique. Le paramètre de maille du matériau couche épitaxie peut s'adapter à celui du substrat dans le plan de croissance grâce à une déformation élastique tétragonale de sa maille cristalline.
- Si  $L > L_c$ , des dislocations s'introduisent, on a une relaxation partielle.

Dans notre calcul, on a utilisé le modèle le plus classique, celui de K. Köksal et al [36]. La valeur de l'épaisseur critique  $h_c$  qui en résulte dans le cas d'un matériau de structure sphalérite (zinc blende) épitaxiée sur la surface (001) est donnée par l'équation suivante [37] :

$$h_c = \frac{a_e}{k \cdot \sqrt{2} \cdot \pi \cdot \Delta_a} \times \frac{1 - (0.25 \cdot \gamma)}{(1 + \gamma)} \times \ln \left( \frac{h_c \cdot \sqrt{2}}{a_e} + 1 \right)$$

Avec :

$\Delta_a$ : Le désaccord paramétrique qui est donné par : 
$$\Delta = \frac{a_s - a_e}{a_s}$$

$\gamma$ : Le coefficient de poisson qui est donné par : 
$$\gamma = \frac{c_{12}}{c_{11} + c_{12}}$$

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

$a_e$  : Paramètre de maille de la couche relaxée.

$k$  : C'est un 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.

## 2.6. Effet de la contrainte

### 2.6.1. Effet de la contrainte sur le gap

Pour la description du rôle de la contrainte sur la structure de bandes nous avons suivi le modèle de van walle, et utilisé le formalisme de Krijn.[38]. Les deux composantes parallèle et perpendiculaire du tenseur de la déformation peuvent être définies de la manière suivante [39] dans l'équation (2.3) et (2.4).

Le rôle de la contrainte biaxiale sur la structure de bandes de la couche épitaxiée est schématisé sur la **figure 2.2**. Celle-ci présente la structure de bande d'un semi-conducteur à gap direct en l'absence de contrainte (**figure 2.2-a**), soumis à une compression biaxiale (**figure 2.2-b**) et soumis à une contrainte biaxiale de tension (**figure 2.2-c**).

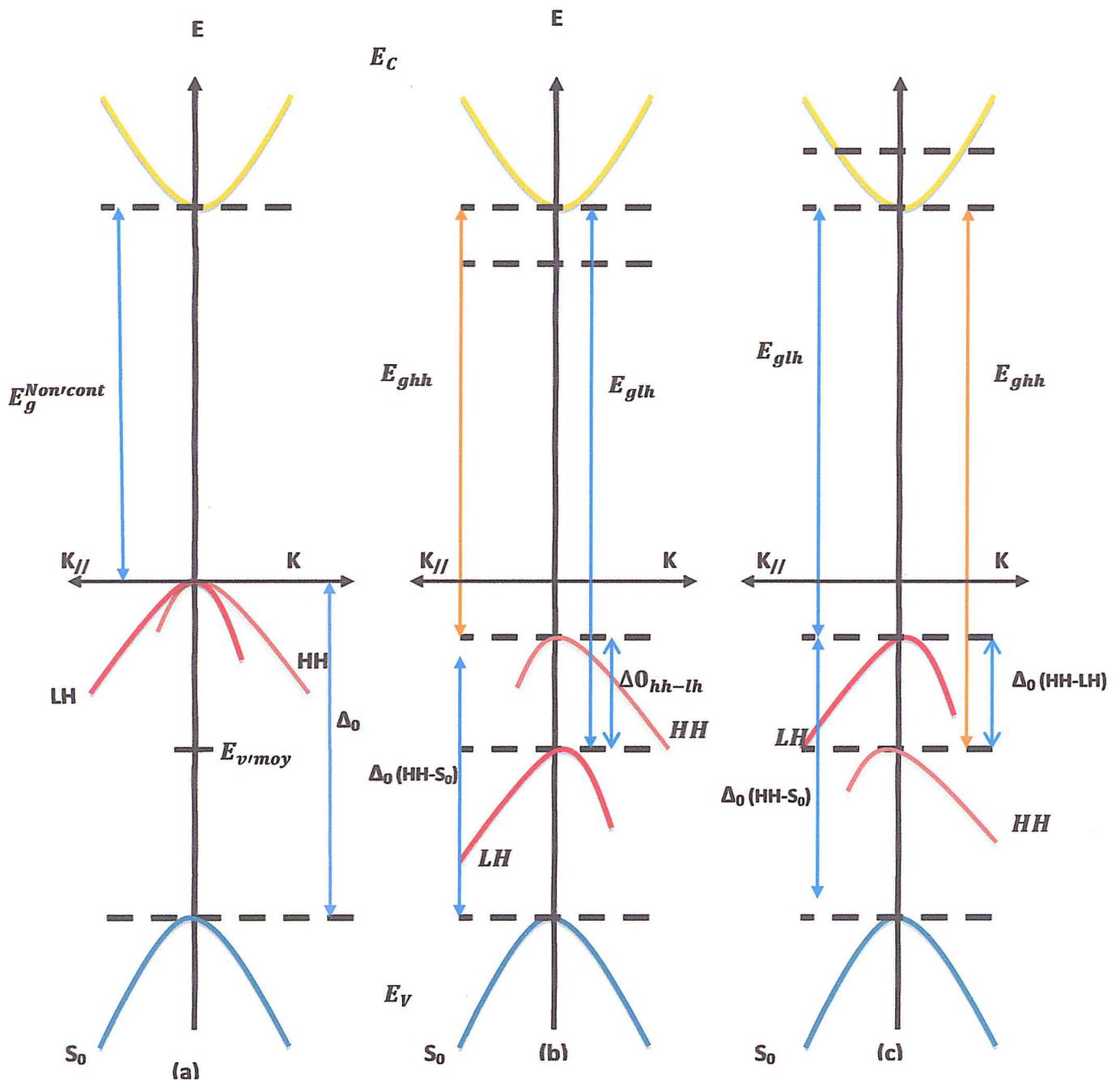


Figure 2.2 : Structure de bande d'un semi-conducteur à gap direct.

a) non contraint b) en compression c) en tension [40]

En l'absence de contrainte les bandes de trous lourds et trous légers sont isotropes et dégénérées au centre de la zone de Brillouin, et la bande de trous spin-splittée est située à une énergie  $\Delta_0$  en dessous de ces deux bandes **figure2.2**

$$E_{V,moy} = \frac{E_{HH} + E_{LH} + \Delta_0}{3} \quad (2.6)$$

Avec :

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

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

$\Delta_0$ : Energie de décalage des bandes des trous spin-splittée.

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

- **La composante hydrostatique** : Liée à la déformation selon l'axe de croissance (Oz), provoque un décalage du centre de gravité de la bande de valence ainsi que du centre de gravité de la bande de conduction.
- **La contrainte de cisaillement** : Qui lève la dégénérescence des états énergétique des trous lourds et des trous légers en  $k = 0$  (typiquement d'une valeur  $\Delta_{0(hh-lh)}$  de 60 – 80 meV pour un désaccord paramétrique de 1%).

Pour une couche soumise à une contrainte bi axiale de compression, la composante hydrostatique augmente le gap moyen entre les bandes de conduction et de valence, alors que la composante de cisaillement rend les bandes de valence fortement anisotropes [39] , la bande de plus haute énergie (improprement appelée (bande HH) devient "lourde" selon  $k_{\perp}$  et " légère " selon  $k_{\parallel}$ . La bande d'énergie inférieure (improprement appelée bande LH) devient elle " légère " selon  $k_{\perp}$  et "lourde" selon  $k_{\parallel}$ . (Figure 2.2.b).

Si la couche est soumise à une contrainte bi-axiale de tension (figure 2.2.c), le gap moyen diminue et les bandes de valences sont inversées par rapport à celles d'une couche en compression ; la bande de plus haute énergie (bande LH) restant légère selon  $k_{\perp}$  et lourde selon  $k_{\parallel}$ .

Les décalages en énergie des centres de gravité de la bande de valence et de la bande de conduction en  $k=0$  varient proportionnellement à la contrainte [39]:

$$\Delta E_{V,moy}^{hyd} = a_v(2\varepsilon_{\parallel} + \varepsilon_{\perp}) \quad (2.7)$$

$$\Delta E_c^{hyd} = a_c(2\varepsilon_{\parallel} + \varepsilon_{\perp}) \quad (2.8)$$

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

Les décalages énergétiques induits par la contrainte de cisaillement pour chacune des bandes constituant la bande de valence sont les suivants [38]:

$$\Delta E_{hh}^{cisa} = -\frac{1}{2} \times \delta E^{cisa} \quad (2.9)$$

$$\Delta E_{lh}^{cisa} = -\frac{1}{2} \Delta_0 + \frac{1}{4} \delta E^{cisa} + \frac{1}{2} \cdot \sqrt{\Delta_0^2 + \Delta_0 \delta E^{cisa} + \frac{9}{4} (\delta E^{cisa})^2} \quad (2.10)$$

$$\Delta E_{so}^{cisa} = -\frac{1}{2} \Delta_0 + \frac{1}{4} \delta E^{cisa} - \frac{1}{2} \cdot \sqrt{\Delta_0^2 + \Delta_0 \delta E^{cisa} + \frac{9}{4} (\delta E^{cisa})^2} \quad (2.11)$$

Avec :

$$\delta E^{cisa} = 2 \cdot b \cdot (\varepsilon_{\parallel} + \varepsilon_{\perp}) \quad (2.12)$$

Où  $b$  est le potentiel de déformation tétragone.

## 2.7. Les états énergétiques dans un puits quantique

Dans un puits quantique, les porteurs de charge sont confinés à des niveaux énergétiques différents et pour définir ces valeurs propres d'énergie, on étudie le comportement d'une particule confinée dans un puits de potentiel unidimensionnel et d'une largeur  $L$  selon la direction de l'axe  $x$ . L'équation de Schrödinger indépendante du temps peut être écrite [38]

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \varphi(x)}{dx^2} + V(x) \varphi(x) = E \varphi(x) \quad (2.13)$$

Avec :

$$\hbar = \frac{h}{2\pi} \quad (2.14)$$

$h$  : Constante de Planck

$m$  : La masse de la particule.

$\varphi$  : La fonction d'onde.

$V(x)$  : Fonction décrivant le potentiel pour chaque valeur de  $x$ .

$E$  : L'énergie

Pour une particule dans un puits infiniment profond de longueur  $L$  (figure 2.3), ou le potentiel est nul à l'intérieur du puits et vaut l'infini à l'extérieur, quelque soit l'énergie de cette dernière elle reste confinée dans le puits.

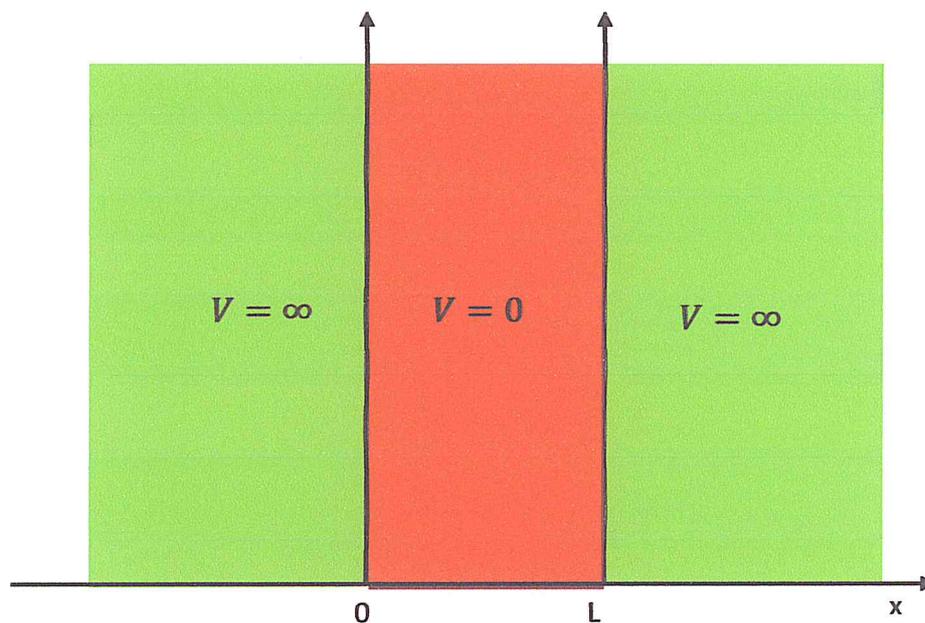


Figure 2.3 : puits de potentiel rectangulaire infiniment profond

La particule ne peut pas se trouver dans la région où  $V$  est infini, car celle aurait alors une énergie infinie, et pour que l'équation de Schrödinger soit vérifiée à l'extérieur de puits (ou  $V = \infty$ ), le produit  $V(x)\varphi(x)$  doit être nul et cela n'est possible que pour  $\varphi(x) = 0$ .

Dans le puits ( $0 < x < L$ ), le potentiel est nul, l'équation (2.13) devient

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\varphi(x)}{dx^2} = E\varphi(x) \quad (2.15)$$

Les solutions de cette équation différentielle sont de la forme :

$$\varphi(x) = \sin kx \quad (2.16)$$

$$\varphi(x) = \cos kx$$

Avec :

$$k = \sqrt{2mE}/\hbar$$

L'équation (2.22) a comme solution générale :

$$\varphi(x) = A \sin kx + B \cos kx$$

Et pour déterminer A et B, on introduit les conditions aux limites (0 et L)

- Première barrière :

➤ Au point 0 (coté V infini)

$$\varphi(0) = 0 \quad (a1)$$

➤ Au point 0 (coté V nul)

$$\varphi(0) = A \sin 0 + B \cos 0 = B \quad (a2)$$

Donc des équations a1 et a2 on obtient

$$B = 0$$

- deuxième barrière :

➤ Au point L (coté V infini)

$$\varphi(L) = 0 \quad (b1)$$

➤ Au point L (coté V nul)

$$\varphi(L) = A \sin kL + B \cos kL$$

Et comme  $B=0$  on obtient :

$$\varphi(L) = A \sin kL \quad (b2)$$

$$\varphi(L) = A \sin \frac{n\pi}{L} L$$

$$\varphi(x) = A \sin k_n = A \sin \frac{n\pi}{L} x$$

Normalisation de la fonction b2 :

$$\int_0^L (\varphi(x))^2 dx = 1$$

$$\int_0^L (\varphi(x))^2 dx = A^2 \frac{L}{2} = 1$$

$$\text{Donc : } A = \sqrt{\frac{2}{L}}$$

De b1 et b2, on aura :

$$A \sin kL = 0$$

$A$  ne peut pas être nul, si on suppose  $A = 0$ , la fonction d'onde sera nulle, sur tout l'espace  $x$ , ce qui n'est pas juste avec la présence d'une particule, donc la solution est  $\sin kL = 0$

$$\sin kL = 0 \Rightarrow k = k_n = \frac{n\pi}{L} \quad n = 1, 2, \dots, \infty$$

Et comme  $k = \sqrt{2mE}/\hbar$  on aura :

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \frac{\hbar^2 n^2 \pi^2}{2mL^2} ; n = 1, 2, \dots, \infty \quad (2.17)$$

L'énergie est quantifiée, l'état d'énergie le plus bas dans le puits appelé état fondamental pour  $n=1$ , et les états d'énergie pour  $n>1$  sont appelés états excités.

## 2.8. Énergie de transition :

Dans un puits quantique, les niveaux énergétiques sont quantifiés et l'énergie nécessaire pour qu'un électron passe de la bande de valence vers la bande de conduction appelée l'énergie de transition (Figure 2.4) donnée par la relation suivant :

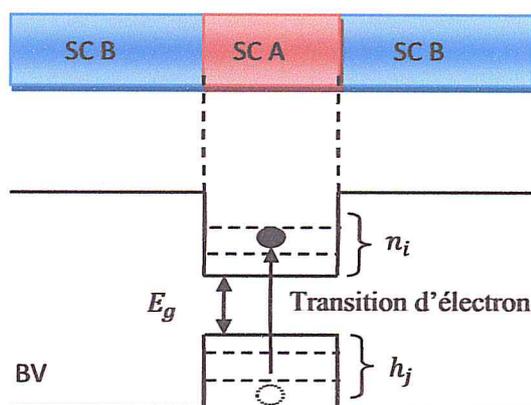


Figure 2.4 : Énergie de transition dans le puits quantique.

$$E_{tr_{i,j}} = E_g + E_{n_i} + E_{h_j} ; i = 1,2, \dots, \infty , j = 1,2, \dots, \infty \quad (2.18)$$

Avec

$E_{n_i}$  : Niveaux d'énergie dans la bande de conduction.

$E_{h_j}$  : Niveaux d'énergie dans la bande de valence.

## 2.9. Conclusion :

Dans ce chapitre, nous avons examiné de nombreux modèles de calcul des paramètres de la structure à puits quantique, comme le paramètre de maille, la contrainte, l'épaisseur critique.

## Chapitre 3

### Simulation et discussion

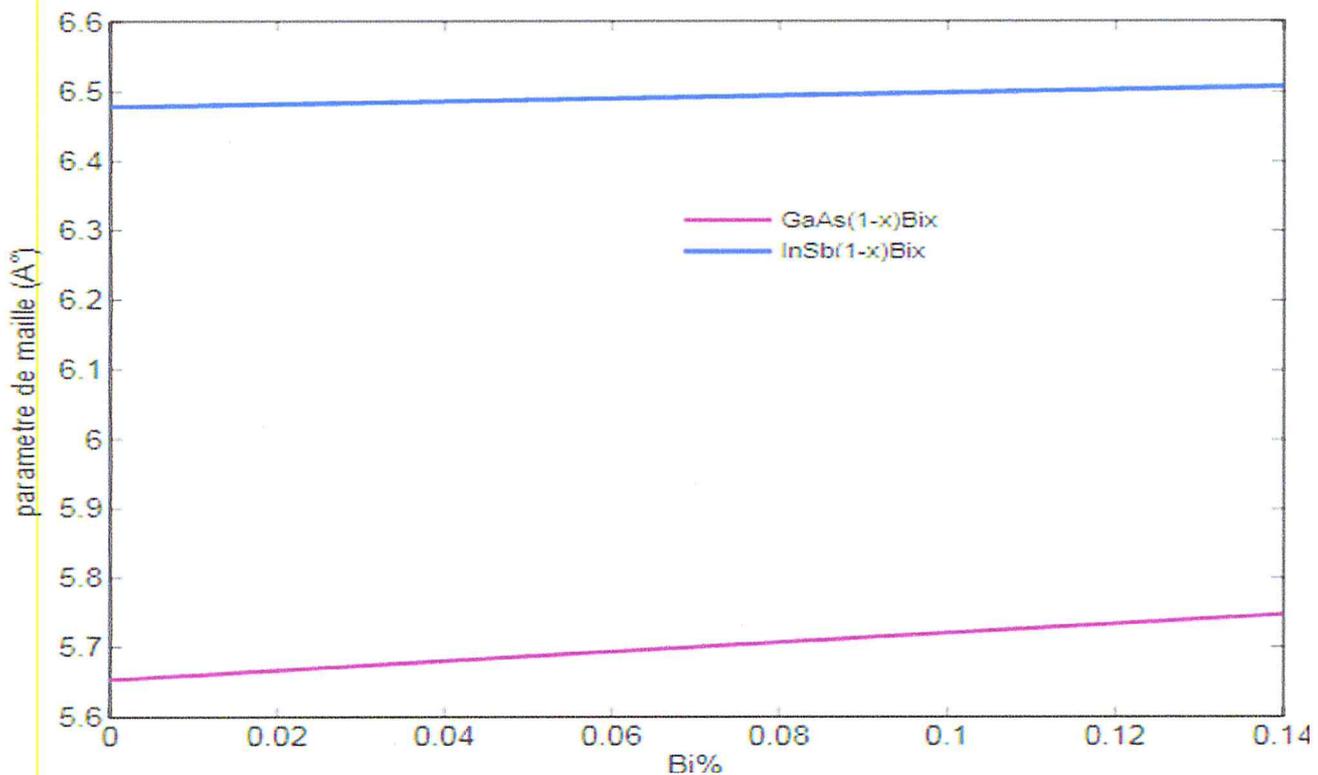
#### 3.1 Introduction :

Le but de ce chapitre, est de présenter et interpréter les résultats obtenus par simulation des structures à puits quantique GaAsBi/AlAs et InSbBi/InSb pour déterminer les concentrations optimales de bismuth qui résultent des longueurs d'onde d'émission exploitable dans les fibres optiques comme 0.85, 1.33 et 1.55  $\mu\text{m}$  à partir des différentes relations théoriques et des simulations faites sous logiciel MATLAB

Pour cela des simulations ont été faites afin d'étudier les effets de la contrainte et la concentration de Bi sur les différents paramètres comme le gap, la barrière de potentiel, l'énergie de quantification et l'énergie de transition des puits quantiques.

#### 3.2 L'étude de paramètre de maille:

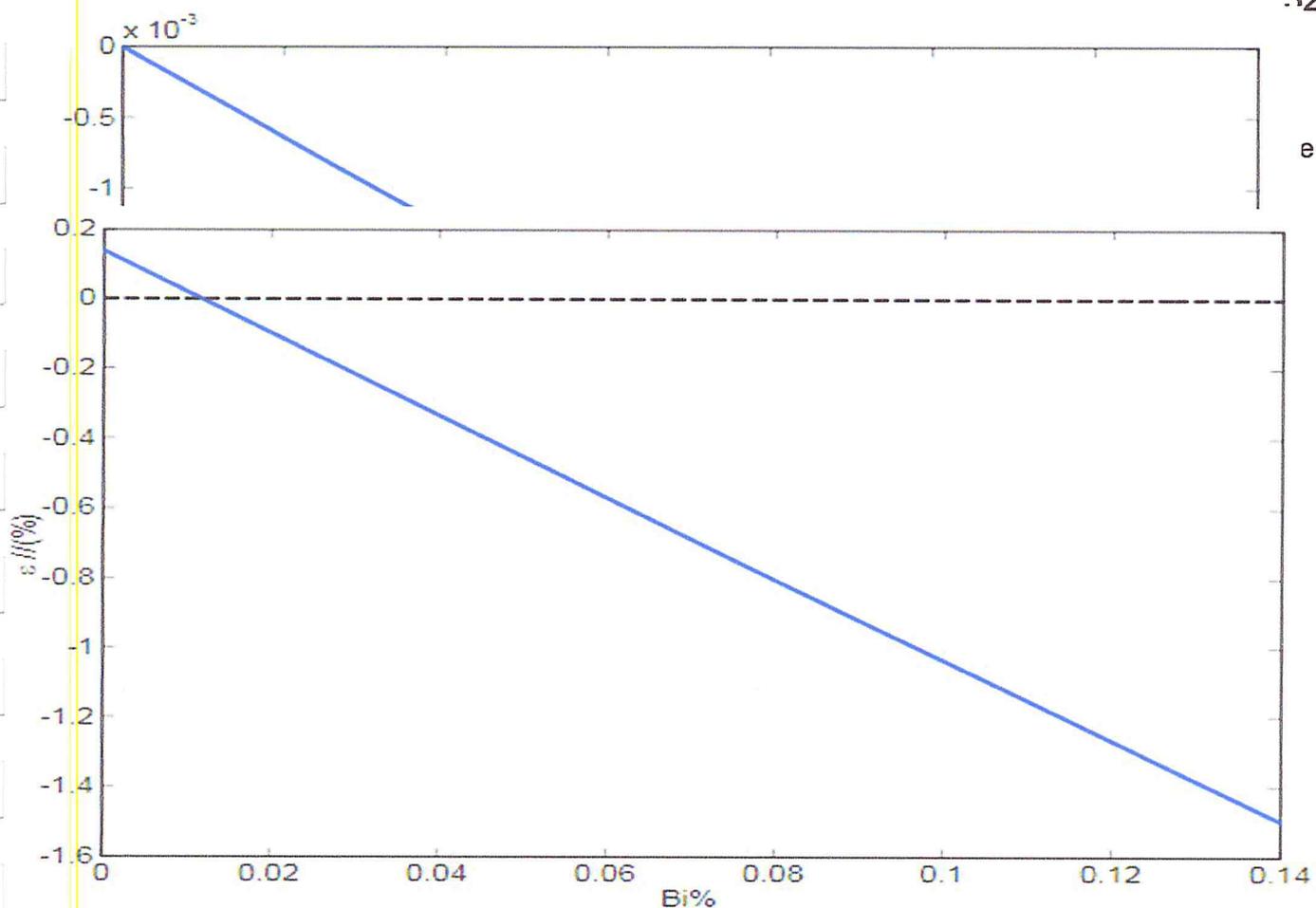
La figure 3.1, représente les variations des paramètres de maille des alliages ternaires InSbBi et GaAsBi en fonction de la concentration de bismuth. Dans les deux alliages le paramètre de maille s'accroît avec l'insertion de Bi ; pour InSbBi le paramètre de maille varie d'InSb à l'InBi soit de 6.48 Å. à 6.67Å; pour le GaAsBi le paramètre de maille varie entre 5.65Å et 6.32Å. A partir de cette simulation, on remarque que le GaAsBi offre un large choix des matériaux pour le substrat par grande gamme de variation de paramètre de maille, contrairement à l'InSbBi qui est d'environ 6.5 Å.



**Figure 3.1:** variation des paramètres de maille en fonction de concentration bismuth.

### 3.3 Désaccord paramétrique

La figure 3.2 illustre la contrainte créée entre InSbBi et InSb ainsi que celle de GaAsBi/AlAs : pour InSbBi/InSb (figure 3.2.a) la contrainte est en compression quelque soit la concentration de Bi ( $\varepsilon < 0$ ) . Pour le GaAsBi/AlAs (figure 3.2.b) on a deux contrainte une en tension pour  $0 < x < 0.012$  et compression pour  $0.012 < x < 0.14$  et un accord de maille ( $a_e = a_s$ ) pour  $x = 0.012$ . On remarque aussi que la contrainte établie entre InSbBi et InSb est plus inférieure à celle du GaAsBi/AlAs. Donc on peut dire que InSbBi résulte une parfaite croissance sur le substrat InSb.



**Figure 3.2.b :** Variation du désaccord paramétrique en fonction de la concentration de Bi de GaAsBi/AlAs

### 3.4 Épaisseur critique

La figure 3.3, illustre la variation de l'épaisseur critique des deux structures InSbBi/InSb et GaAsBi/AlAs. Pour la première structure l'épaisseur critique est infini à  $x=0$  car on a la structure InSbBi/InSb avec l'augmentation de Bi cette valeur elle diminue pour atteindre  $1\ 031\text{Å}$  à  $x=0.14$ , pour la deuxième structure et dans la partie où la contrainte est en compression, l'épaisseur critique augmente jusqu'elle atteigne l'infini pour  $x=0.012$ , au-delà de cette valeur on remarque une réduction de l'épaisseur critique pour qu'elle donne  $190\text{Å}$  à  $x=0.14$ . Si on compare les deux épaisseurs on observe que l'épaisseur de la structure InSbBi/InSb est supérieure à celle de la structure GaAsBi/AlAs dans une grande partie de l'intervalle de variation de Bi.

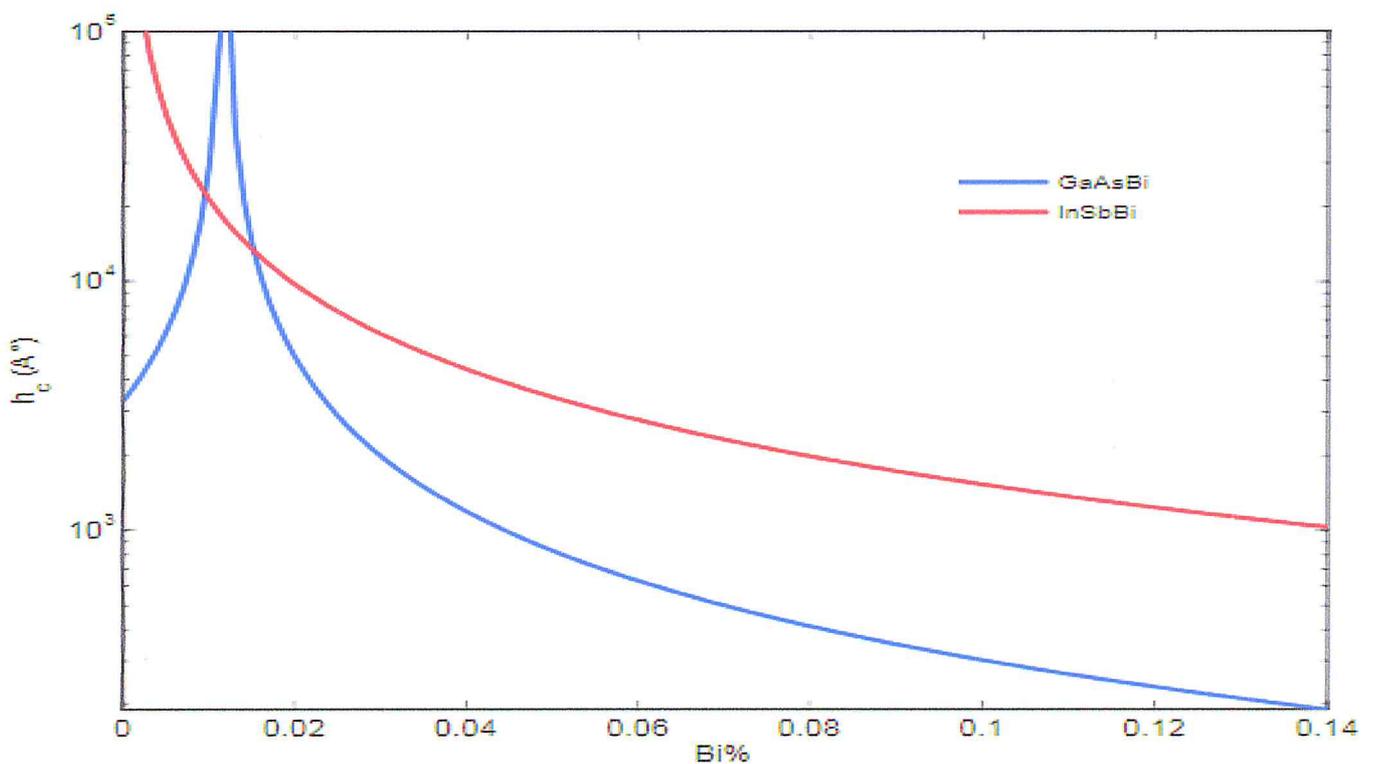
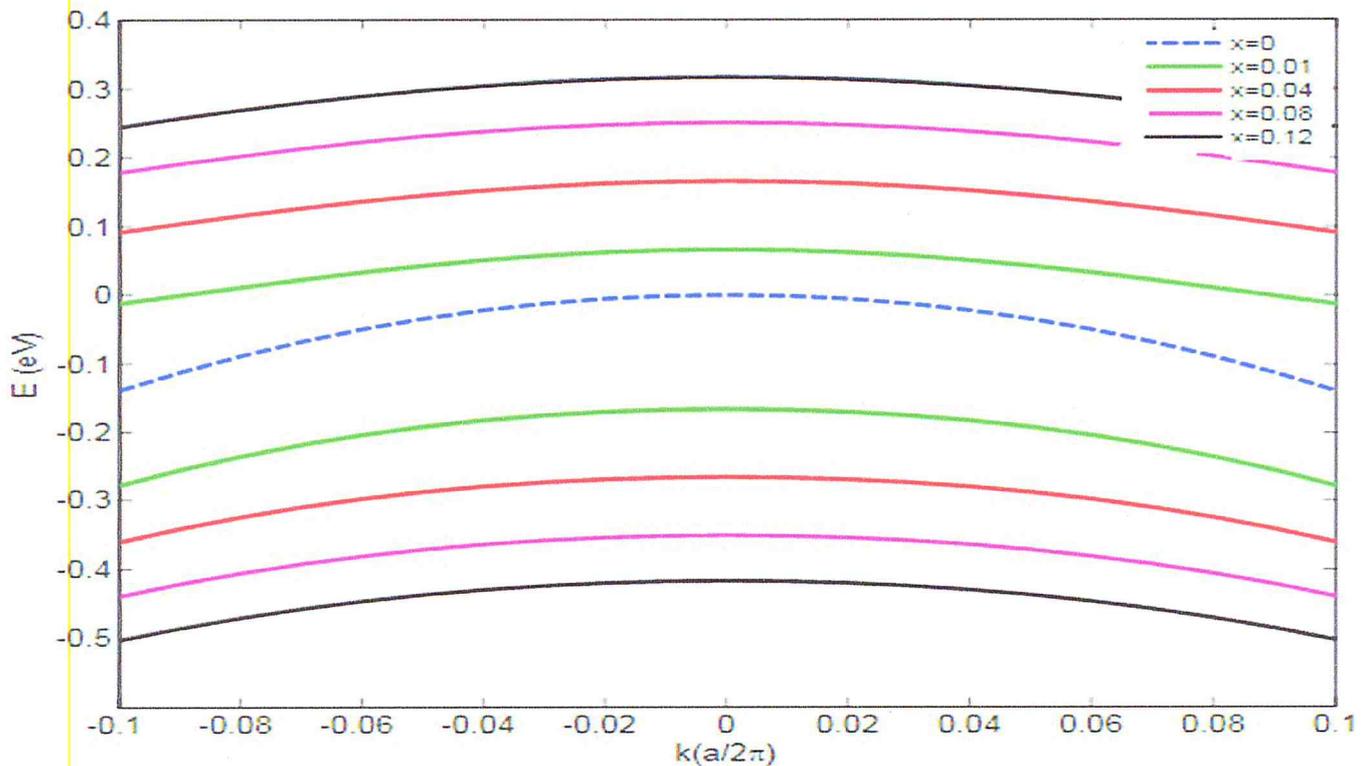


Figure 3.3 : Épaisseur critique en fonction de la concentration de bismuth.

### 3.5 Éclatement de la bande de valence :

La figure 3.4, montre l'effet de l'incorporation de Bi sur la bande de valence, en fait le bismuth induit un éclatement de la bande de valence en deux sous bandes ce qui induira une réduction de la bande interdite du matériau en fonction de la concentration de Bi. Soit pour  $\Delta x = 0.11$  on a une réduction de 0.25 eV.



**Figure 3.4 :** L'effet de la concentration de bismuth sur la bande de valence.

### 3.6 L'énergie de la bande interdite :

Les figures 3.5.a et 3.5.b, montrent respectivement la variation des bandes interdites des alliages InSbBi et GaAsBi en fonction de la concentration de bismuth. Dans les deux simulations on remarque que le gap diminue en avec l'augmentation de la concentration de Bi. Pour la structure InSbBi/InSb et comme la contrainte est en compression ; le gap des trous lourds est toujours inférieur à celui des trous légers alors que dans la deuxième structure GaAsBi/AlAs le gap des trous légers est l'égerment supérieure a celui des trous lourds dans la partie où la contrainte est en tension puis il devient supérieur au gap des trous lourds dans le reste de l'intervalle de Bi (contrainte en compression) et l'élargissement entre ces deux gaps accroît avec l'augmentation de Bi (augmentation de la contrainte).

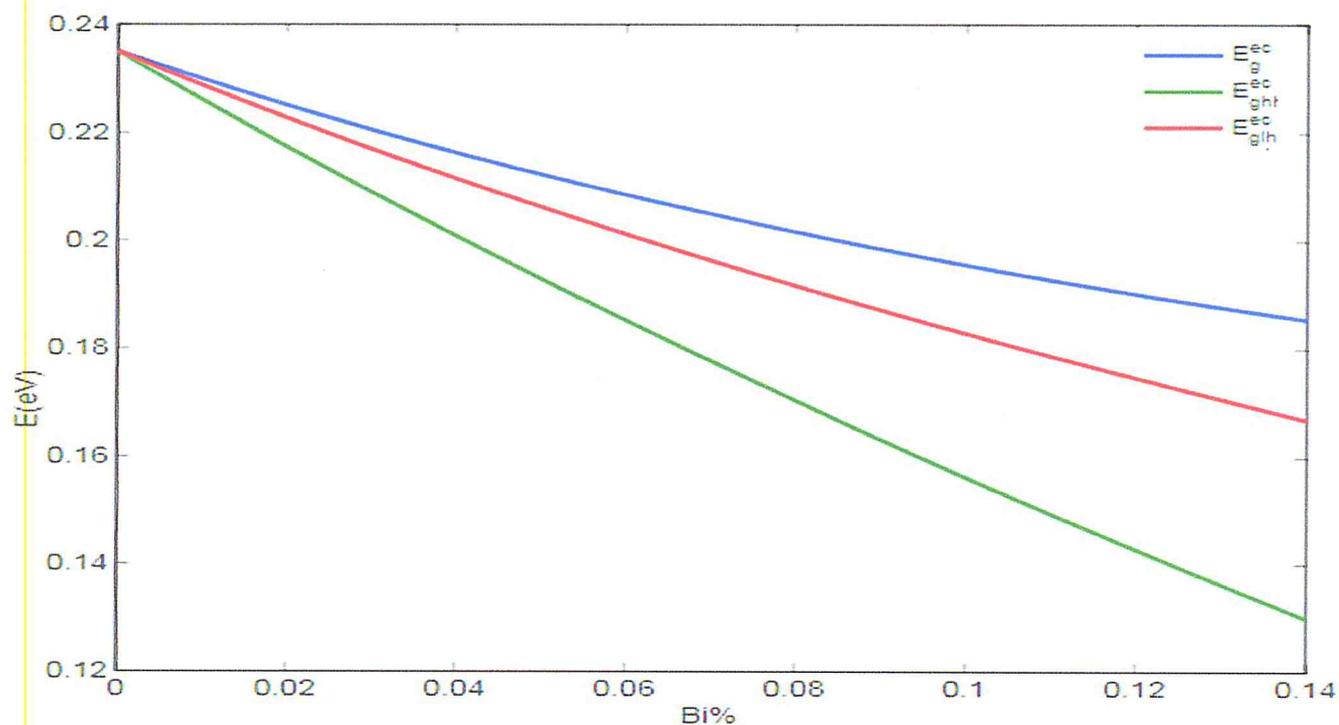


Figure 3.5.a : Variation de la bande interdite de l'alliage InSbBi contraint sur InSb en fonction de la concentration de Bi.

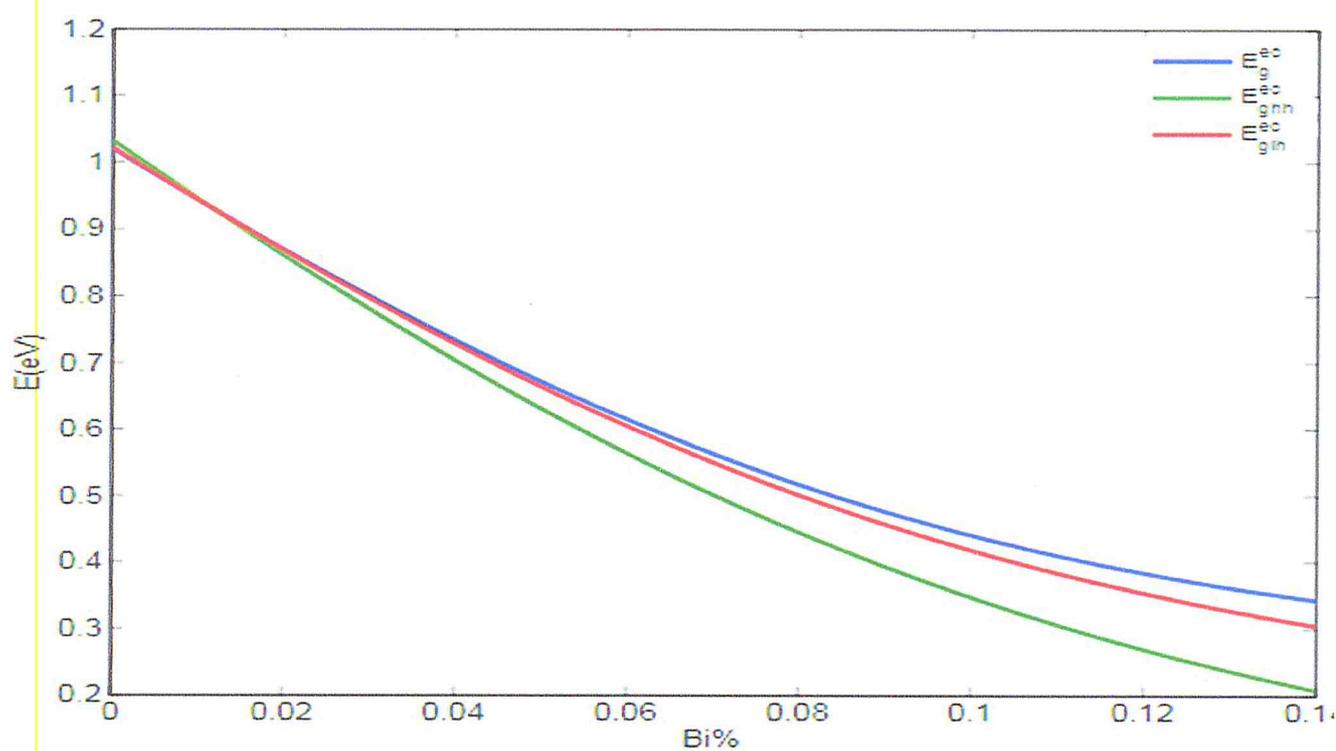
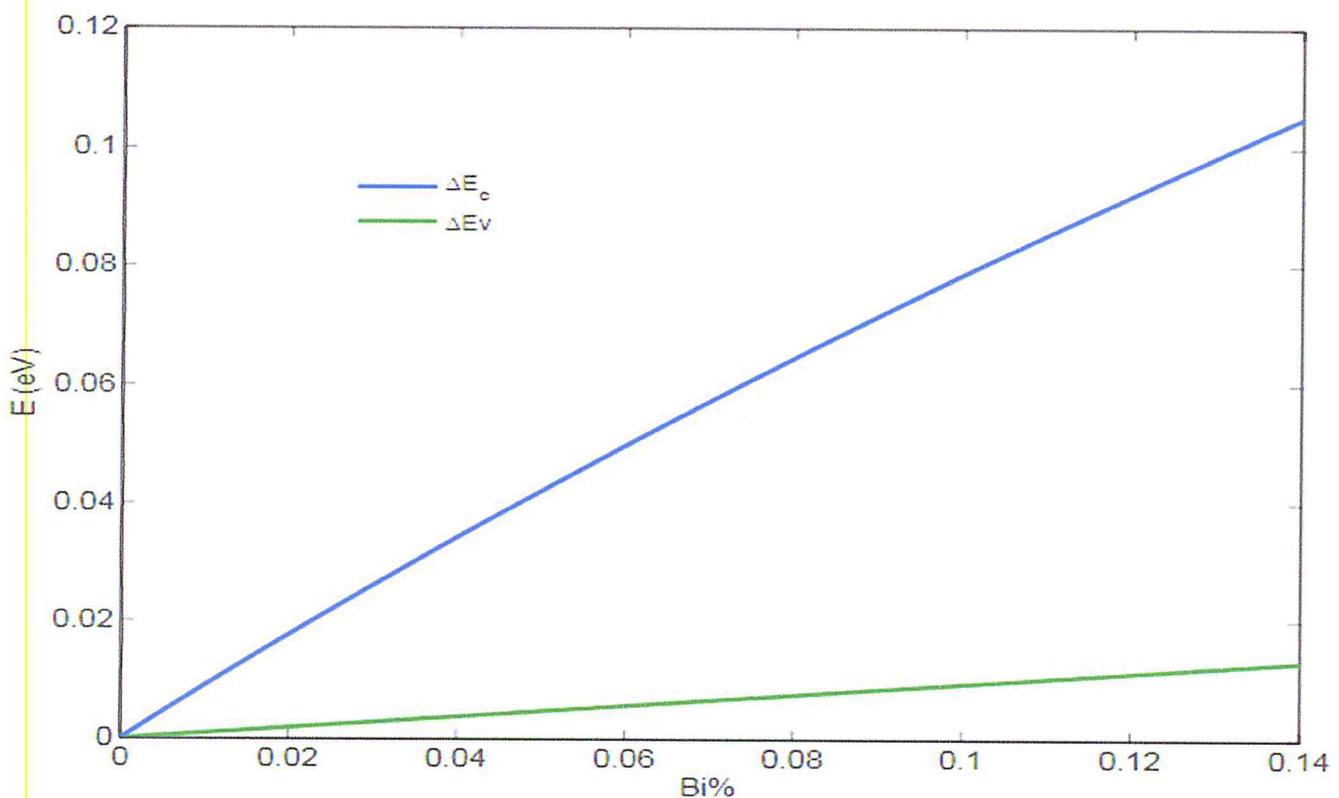


Figure 3.5.b : Variation de la bande interdite de l'alliage GaAsBi contraint sur AlAs en fonction de la concentration de Bi.

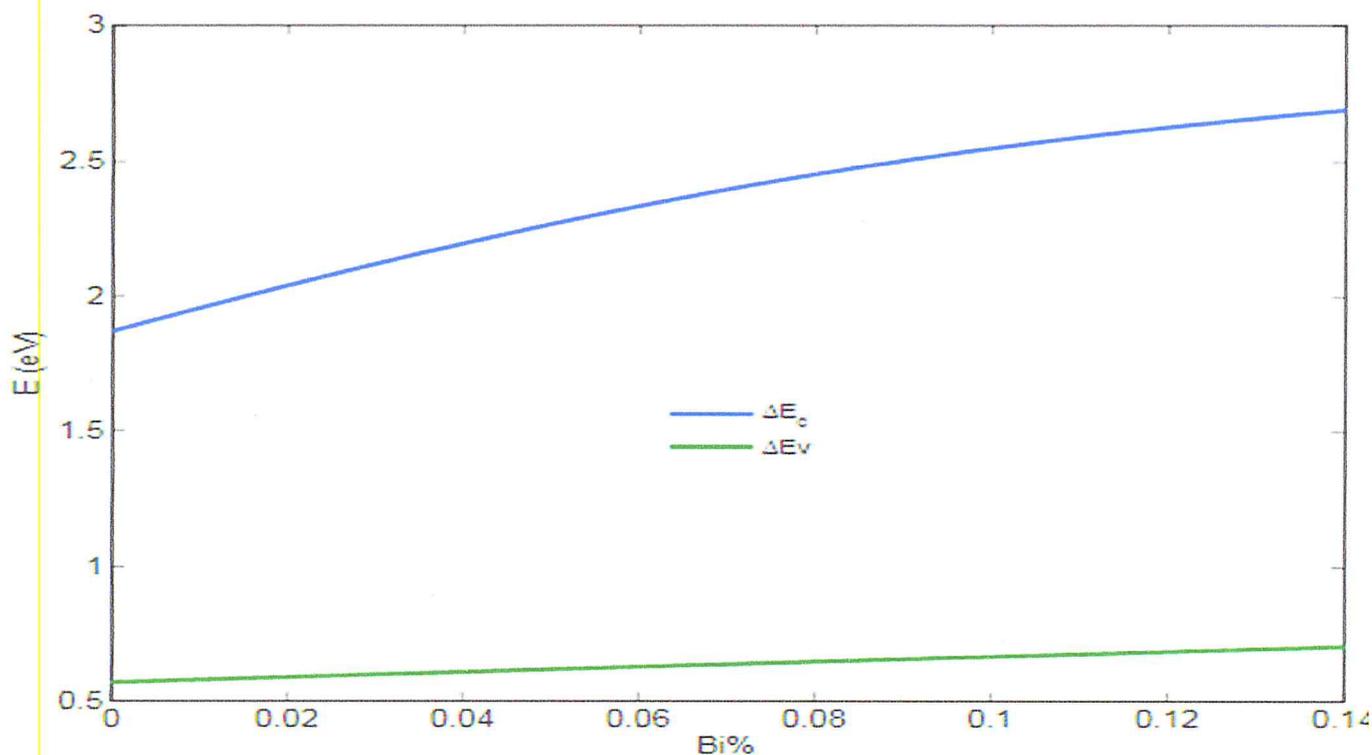
### 3.7 Barrières de potentiel :

La figure 3.6, montre la variation des barrières de potentiel créées entre les alliages ternaires et leurs substrats ; dans les deux simulations la valeur de la barrière augment en fonction de la concentration de Bi cela est du a la réduction de la bande interdite présenté dans le titre précédent.

Dans la première structure (InSbBi/InSb) à  $x=0$  les deux barrières (valence est conduction) sont à 0 eV car on a InSb/InSb et avec l'augmentation de  $x$  cette différence de potentiel entre l'alliage ternaire et le substrat augment pour atteindre 0.1 dans la bande de conduction et 0.14 dans la bande de valence ; ces barrière sont très faible pour créer un effet de confinement de porteurs. Alor que dans la deuxième structure les barrières de potentiel sont plus importantes (2.7 pour la bande de conduction et 0.7 pour la bande de valence) ce qui induit à un effet de confinement dans l'alliage GaAsBi donc un puits quantique.



**Figure 3.6.a :** Variation des barrières de potentiel de la structure InSbBi/InSb en fonction de la concentration de Bi.



**Figure 3.6.b :** Variation des barrières de potentiel de la structure GaAsBi/AlAs en fonction de la concentration de Bi.

### 3.8 Taux de confinement

La figure 3.7, illustre la variation des taux de confinement des porteurs dans la bande de conduction en bleu et dans la bande de valence en vert dans les puits GaAsBi/AlAs et InSbBi/AlAs. Pour la bande de conduction de (GaAsBi/AlAs) où la barrière de potentiel est importante le taux est d'environ 76% alors que dans la bande de valence ce taux est à 23%. Et pour la bande de conduction de (InSbBi/AlAs) où le taux est d'environ 90% alors que dans la bande de valence ce taux est à 10%. Avec l'augmentation de la concentration de Bi la barrière de conduction augmente rapidement et leur taux de confinement augmente avec ; cette augmentation entraîne une légère réduction dans le taux de la bande de valence pour qu'elle résulte une somme égale à 100%,

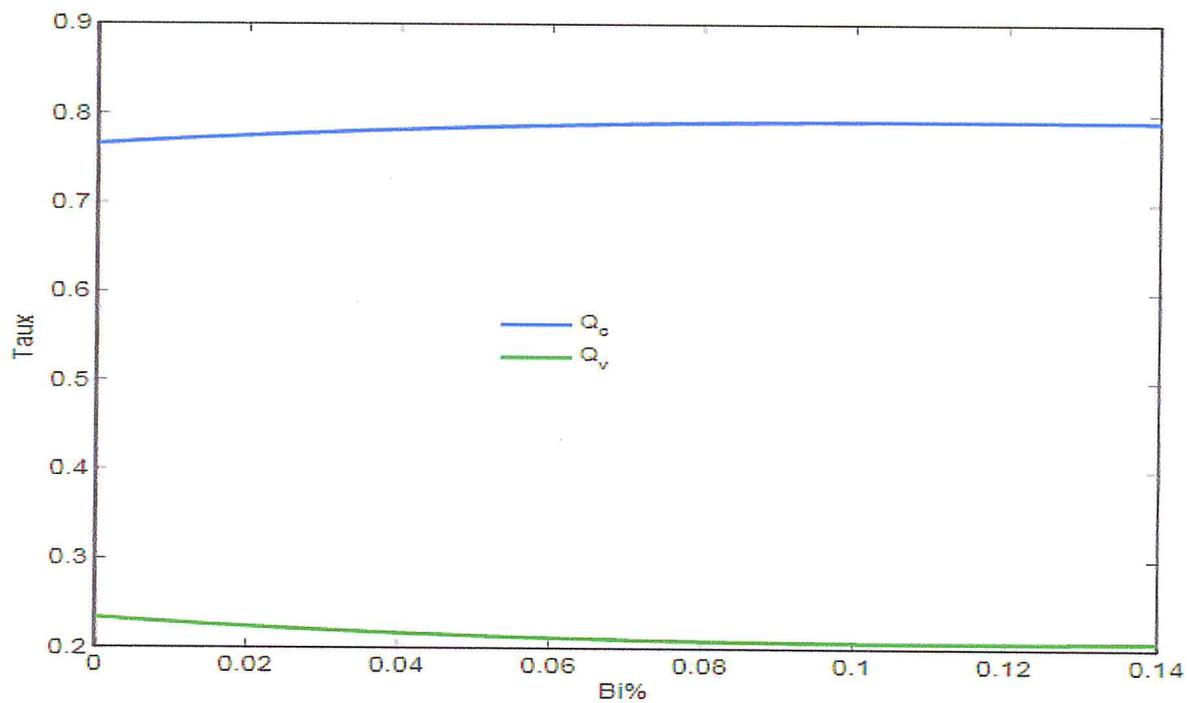


Figure 3.7 a : Variation de  $Q_c$  et  $Q_v$  dans l'alliage GaAsBi en fonction de la concentration de Bi.

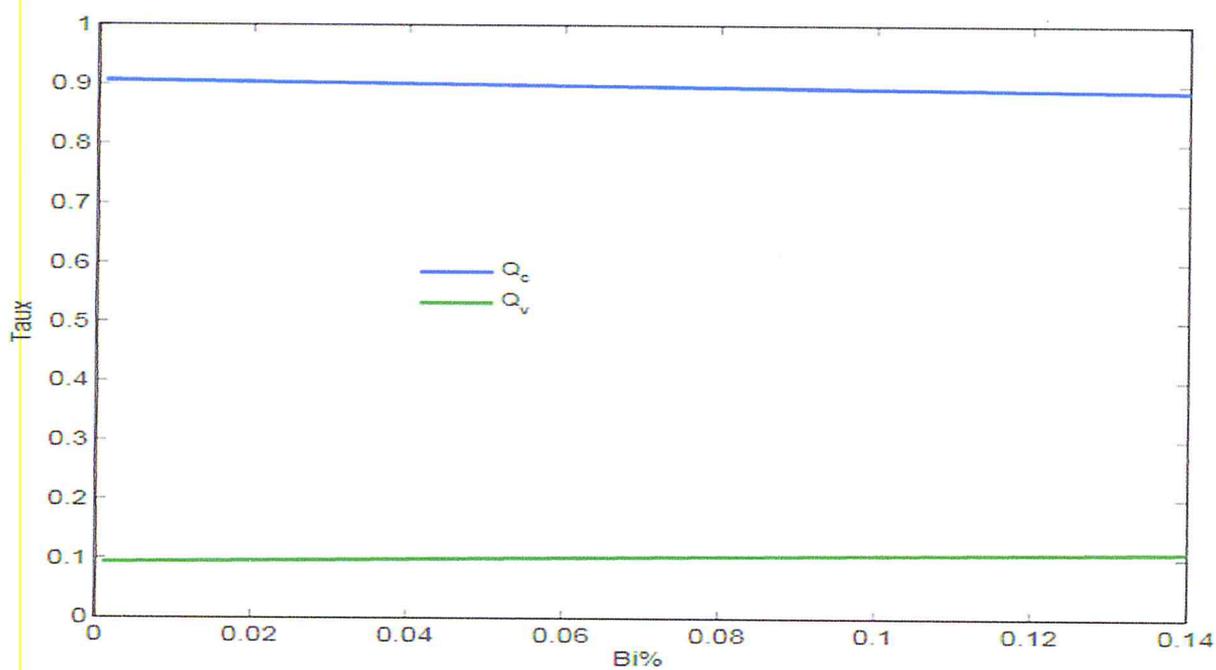


Figure 3.7 b : Variation de  $Q_c$  et  $Q_v$  dans l'alliage InSbBi en fonction de la concentration de Bi.

### 3.9 Quantification des niveaux d'électrons dans le puits

Pour la simulation des niveaux des porteur dans le puits quantique ont a utilisé le modèle d'un puits de potentiel infini décrit dans le chapitre précédent. La figure 3.8 illustre la variation des niveaux énergétiques des électrons dans le puits quantique en fonction de sa largeur  $L$  pour plusieurs concentrations de Bismuth.

Dans cette simulation, on remarque que les niveaux d'électron diminuent avec l'élargissement du puits quantique et pour des valeurs de  $L$  supérieures à 65 nm il apparait un deuxième niveau de confinement. Avec l'augmentation de la concentration de Bi les niveaux de confinements augmente aussi.

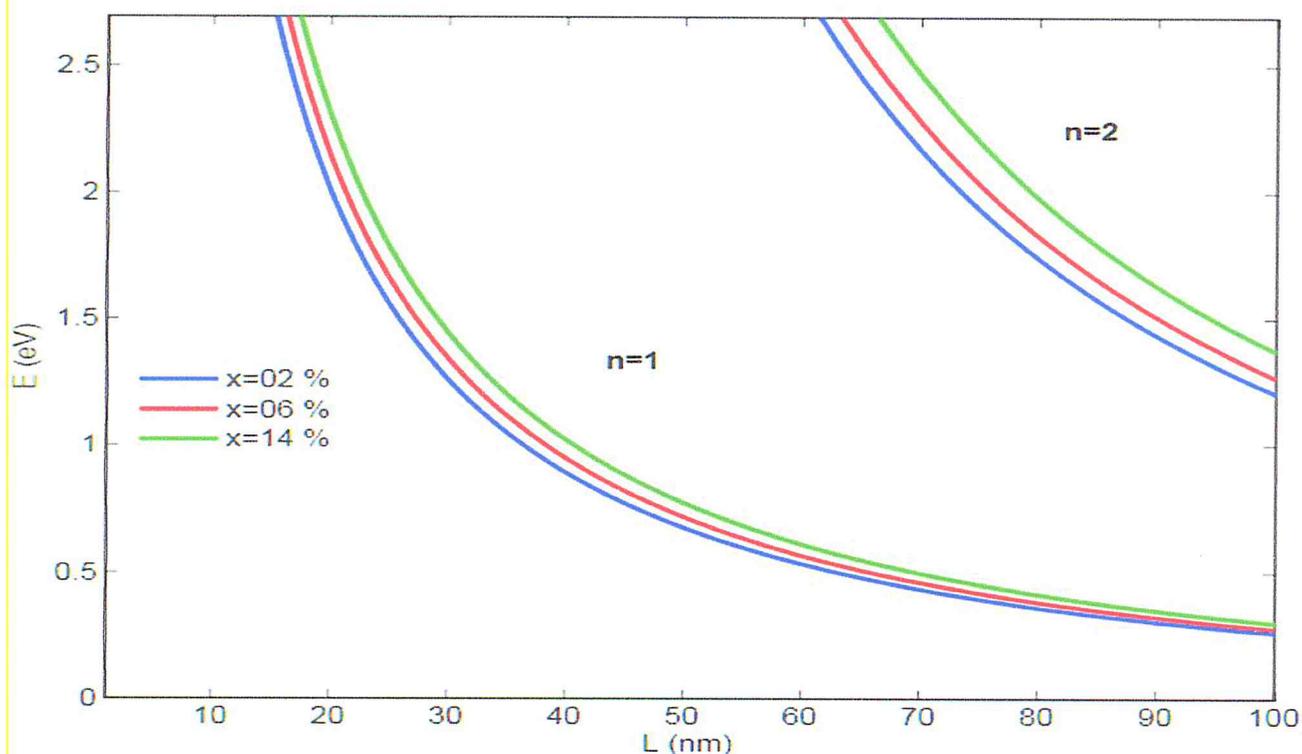


Figure 3.8 : Variation des niveaux énergétiques des électrons dans le puits en fonction de sa largeur  $L$  pour plusieurs concentrations de Bi

### 3.10 Quantification des niveaux des trous dans le puits

La figure 3.9, illustre la variation des niveaux énergétiques des trous dans le puits quantique GaAsBi/AlAs en fonction de sa largeur et pour plusieurs concentrations de Bi. On remarque que les niveaux des trous diminuent avec l'élargissement du puits quantique et pour des valeurs de  $L$  supérieures à 60 nm il apparaît un deuxième niveau de confinement. Avec l'augmentation de la concentration de Bi une légère augmentation dans les niveaux de confinement est observée.

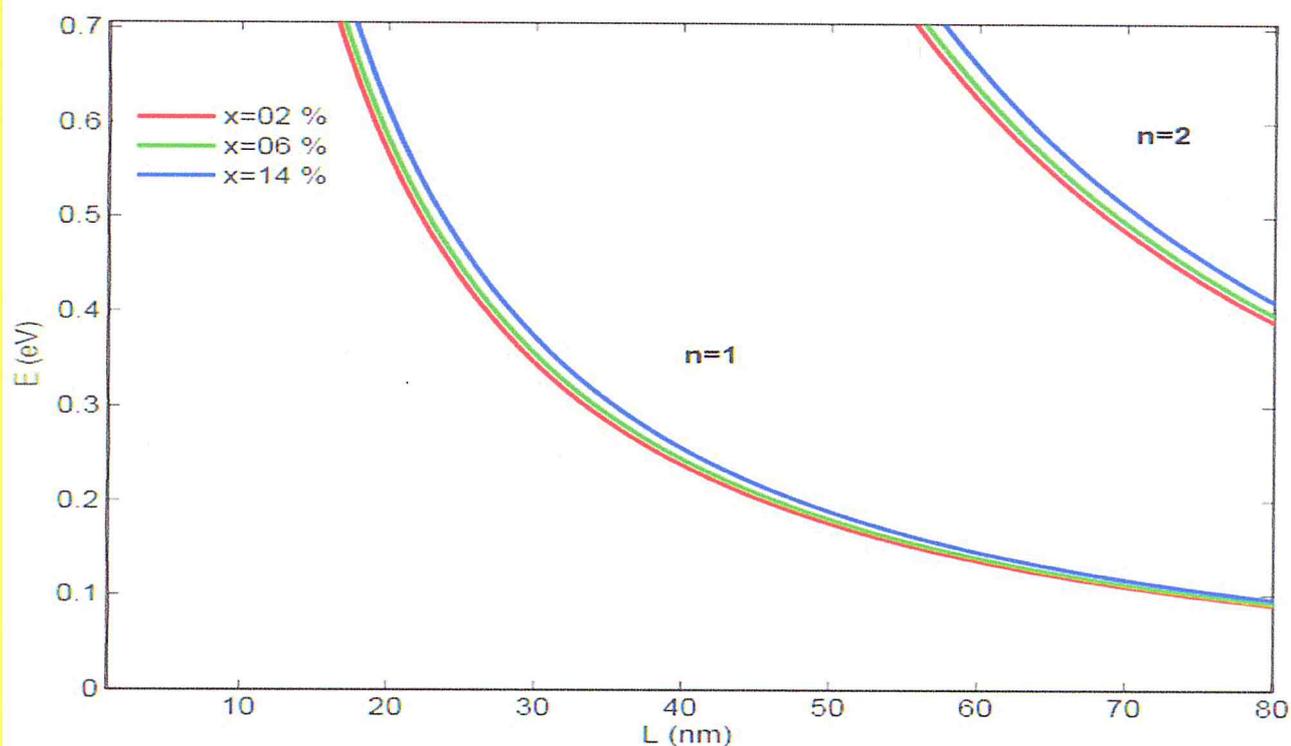
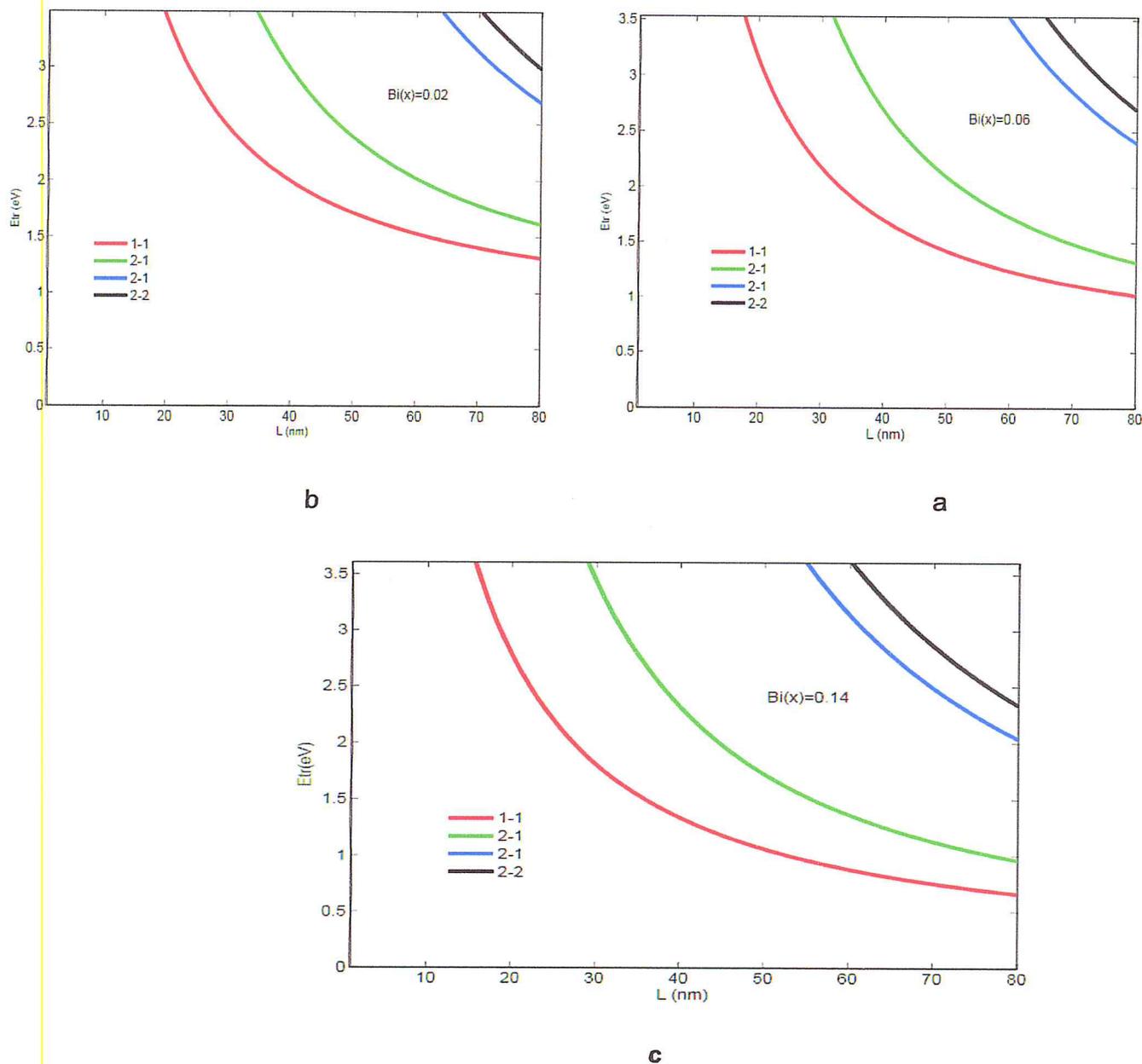


Figure 3.9 : Variation des niveaux énergétiques des électrons dans le puits en fonction de sa largeur  $L$  pour plusieurs concentrations de Bi

### 3.11 Énergies de transition dans le puits

La somme des niveaux de confinement des électrons, les trous et la l'énergie de la bande interdite du ternaire donne la valeur de l'énergie libérée par la transition de l'électron de la bande de conduction vers la bande de valence. Les figures suivante représente les variations des cette énergies en fonction de la largeur de puits quantique pour trois concentrations de Bi ;  $x=0.02$ ,  $x=0.06$  et  $x=0.$ . On remarque que les niveaux de transition diminuent avec l'élargissement de puits et l'énergie libérée devienne importante pour les transitions ente des niveaux plus éloignés (1-

1<1-2 et 2-1<2-2 ... etc.). Les énergies des transitions pour  $x=0.14$  sont faibles par rapport aux énergies données à  $x=0.06$  et  $0.02$  ; cette différence est due à la l'éclatement de la bande de valence et à la réduction de gap en fonction de l'augmentation de la concentration de Bismuth dans l'alliage GaAsBi.



**Figure 3.10. (a.b.c):** Variation des énergies de transition dans le puits en fonction de sa largeur  $L$  pour plusieurs concentrations de Bi.

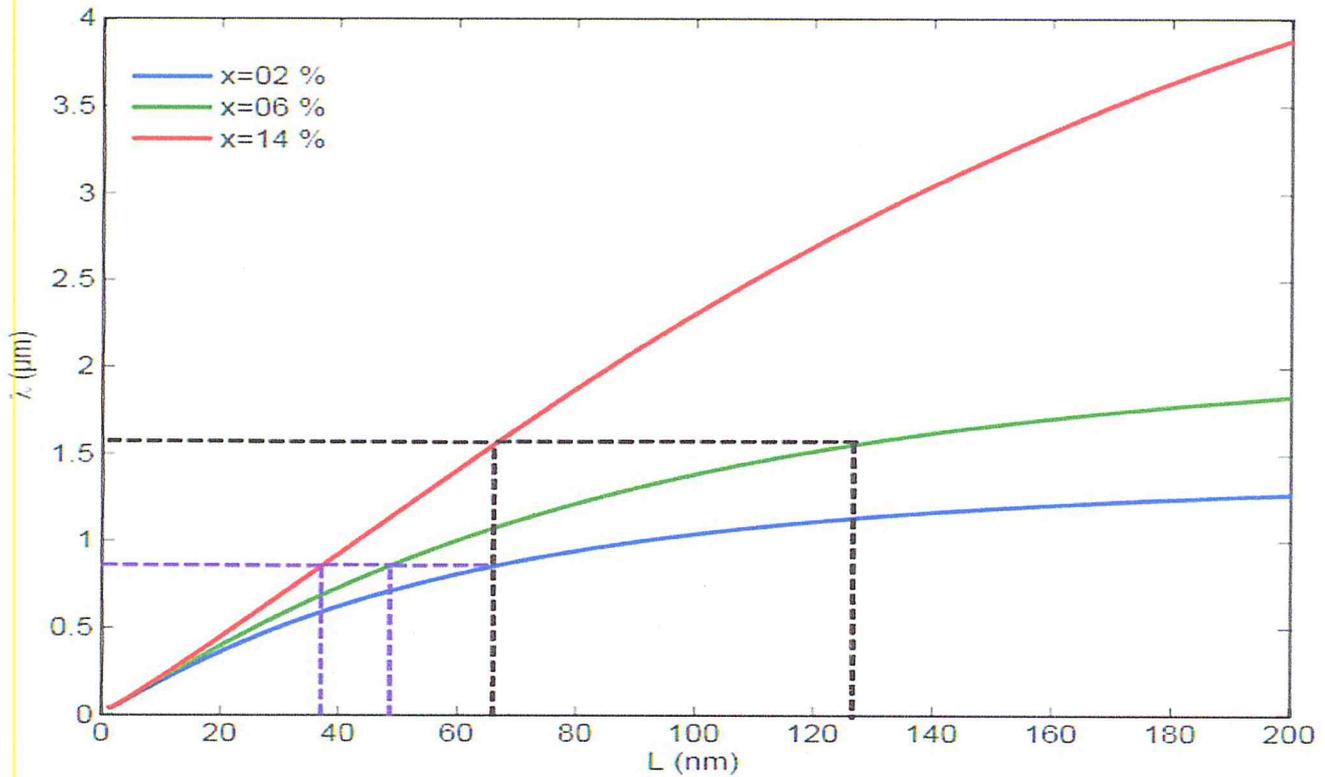
### 3.12 Longueur d'onde d'émission

$$\lambda = \frac{1.24}{E_{tr}[\text{Mev}]} \quad (3.1)$$

La figure 3.11, représente la variation de la longueur d'onde d'émission en fonction du largeur de puits L pour plusieurs concentrations de Bi. La longueur d'onde augmente avec l'élargissement de puits et aussi avec l'augmentation de la concentration de Bi dans le puits. Pour  $x= 0.14$  la longueur d'onde 1.55  $\mu\text{m}$  est obtenue pour  $L= 66$  nm alors qu'avec  $x=0.06$  cette valeur est donnée un puits plus large  $L= 126$  nm. Le tableau suivant résume les différentes configurations des permettent d'avoir des longueurs d'onde appliqué dans le domaine de la télécommunication par fibre optique.

$\lambda$	x(%)	14	06	02
1.55 $\mu\text{m}$		66 nm	126 nm	-
0.85 $\mu\text{m}$		37 nm	48 nm	66 nm

**Tableau 3.1** : Longueurs d'émission pour les applications en télécommunication.



**Figure 3.11:** Variation de la longueur d'onde d'émission en fonction de L pour plusieurs concentrations de Bi

### 3.13 Conclusion :

Dans ce chapitre, nous nous sommes intéressés à l'optimisation des concentrations de Bi et la longueur de puits quantique afin d'avoir des longueurs d'onde d'émission exploitables par la télécommunication optique.

## Conclusion générale

Dans le cadre de ce travail, nous avons simulés la structure à base de puits quantique InSbBi/InSb et GaAsBi/AlAs pour une émission laser.

Pour cela, nous avons commencé par présenter dans le premier chapitre les propriétés générales des matériaux semi conducteurs III V (propriétés physique et propriétés électronique). Après nous avons mentionné les notions fondamentales de laser : milieu amplificateur, source de pompage et la cavité résonante et aussi définira le laser à semi conducteur et les puits quantique.

Dans le deuxième chapitre, nous avons examiné de nombreux modèles de calcul des paramètres de la structure a puits quantique InSbBi/InSb et GaAsBi/AlAs, comme le paramètre de maille, la contrainte et l'épaisseur critique.

Dans la première partie du chapitre trois, nous avons étudié l'effet de l'insertion du bismuth sur les propriétés physique des deux structures InSbBi/InSb et GaAsBi/AlAs ; la contrainte créée dans la première structure est très importante que celle existée dans la deuxième structure ce qui résulte une épaisseur critique faible.

La simulation des barrières de potentiel dans les deux structures montre que InSbBi/InSb ne présente pas un confinement de porteurs contrairement au GaAsBi/AlAs qui a des barrières de potentiel plus importantes ce qui donne un confinement de porteurs dans la couche active InSbBi.

Dans la deuxième partie, on a procédé à la quantification des niveaux énergétiques des électrons et des trous ainsi que le calcul de la bande interdite, l'effet de l'incorporation de Bismuth sur la bande de valence qui réduit la valeur de la bande interdite ; la somme des niveaux quantiques des électrons, des trous et de la bande interdite du matériau actif (GaAsBi) donne l'énergie de transition (énergie libéré pour les transitions inter sous bande de conduction et de valence).

Finalement ; les longueurs d'onde 1.55 et 0.85  $\mu\text{m}$  ont été obtenu pour des couples (x, L) et récapitulées dans le tableau 3.1 ; on constate que si on augment la concentration de Bi les longueurs (1.55 ,0.85  $\mu\text{m}$ ) sont obtenus pour des largeurs faibles, alors que si on réduit la concentration de Bi ces longueurs vont êtres

remportés avec des largeurs de puits plus importantes ce qui augmente de coût du dispositif.

Perspective : Ce serait de poursuivre notre étude et de calculer le gain optique et le courant de seuil afin de réaliser un composant laser fiable et émettant une longueur d'onde  $1.55\mu\text{m}$ . On peut aussi faire d'autres structures comme les multi puits quantiques et les boites quantiques.

# Annexe

## A.1 Tableau périodique

The figure shows a standard periodic table with the following structure:

- Columns (Groups):** 1 (IA), 2 (IIA), 3 (IIIB), 4 (IVB), 5 (VB), 6 (VIB), 7 (VIIB), 8 (VIIIB), 9 (VIIIB), 10 (VIIIB), 11 (IB), 12 (IIB), 13 (IIIA), 14 (IIIB), 15 (VA), 16 (VIA), 17 (VIIA), 18 (VIIIA).
- Rows (Periods):** 1 to 7.
- Inset Tables:**
  - LANTHANIDES:** A row of 14 elements from La (57) to Lu (71).
  - ACTINIDES:** A row of 14 elements from Ac (89) to Lr (103).

Figure A.1 : Tableau périodique des éléments.

## A.2 Expression des paramètres

Pour les alliages ternaires ou quaternaires, les paramètres  $a$ ,  $E_g$ ,  $ac$ ,  $av$ ,  $\delta_0$ ,  $b$ ,  $C_{11}$ ,  $C_{12}$ ,  $m_e$ ,  $\gamma_1$ ,  $\gamma_2$  sont déterminés à partir de la loi de Vegard (2.1).

Pour déterminer les masses des trous lourds et des trous légers on utilise ces relations :

$$m_{hh} = \frac{1}{v_1 - 2 \cdot v_2} \tag{A.1}$$

$$m_{lh} = \frac{1}{v_1 + 2 \cdot v_2} \tag{A.2}$$

### References:

- [1] T. S. Kim, J. Y. Park, T. V. Cuong, C. H. Hong, "Optical property of  $\text{In}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{As}/\text{GaAs}$  Strained multiple Quantum-wells grown by using MOCVD ", journal of crystal Growth 268, pp. 59-63 (2004)
- [2] EL OUCHDI Ahmed Amine, «Caractérisation du phénomène de transport électronique dans les matériaux composés ternaires : Application au matériau  $\text{GaIn}_{1-x}\text{Sb}$  », thèse, Université Abou Bakr Belkaïd - TLEMCEM - (2011).
- [3] Dr. AH. SOUCI, E-mail : [abdelhafid.souici@univ-bejaia.dz](mailto:abdelhafid.souici@univ-bejaia.dz) : « Groupe de Cristallographie et Simulation des Matériaux », Laboratoire de Physico-Chimie des Matériaux et Catalyse, Faculté des Sciences Exactes, Université de Béjaia, Algérie, (2013-2014).
- [4] A.Chovet et P.Masson : « physique des semi-conducteurs », ECOLE POLYTECHNIQUE UNIVERSITAIRE DE MARSEILLE, page 11, (2004/2005).
- [5] R.Castagné et all: « Circuits intégrés en arséniure de de Gallium. Physique, technologie et règles de conception », Masson et CINET ENST Paris, (1989).
- [6] <http://www.pveducation.org/pvcdrom/pn-junction/semiconductor-materials>.
- [7] Dimitri galayko. Unité d'enseignement Elec-info, 2005.
- [8] Fadi Aldeek. Université de Nancy, 2010.
- [9] Rappel sur les semi-conducteurs.
- [10] « Semi-conducteurs –rappels théoriques-4» plate forme condensée et cristallographie(MCC) --- C.E.S.I.R.E. Université J. Fourier Grenble.
- [11] Mme Hachemi Naima Née Sebbati : « Etude des performances d'un transistor Pseudomorphique à base de  $\text{AlGaAs}/\text{InGaAs}/\text{GaAs}$  (PHEMT) » thèse magister, Université Abou-Bakr Belkaïd-Tlemcen, Juillet 2014
- [12] Gerald Bastard : « Wave mechanics applied to semiconductor heterostructures», les éditions de physique, paris, (1988).
- [13] C. Kittel : « Introduction a la physique de l'état solide», Dunode (1972)

- [14] J.S.Blakemore: « Semiconducting and other major properties of gallium Arsenide», J. Appl. Phys. 53(10), October (1982).
- [15] BENATMANE Kaled : « Etude de lasers à base de semi-conducteur III-V », thèse magister, université El-Hadj Lakhder - Batna .2011.
- [16] J.S.Blakemore: « Semiconducting and other major properties of gallium arsenide».J.Appl.phys.53(10) .October (1982).
- [17] Francis Levy : « Traité des matériaux (18), Physique et technologie des semi-conducteurs» Presses Polyphoniques et Universitaires Romandes(1995).
- [18] Bouaied Hadda : «Modélisation et étude d'un puits quantique contraint à base de  $GaxIn_{1-x}As/GaAs$  et calcul du courant de seuil», Mémoire magister, Université Saad Dahlab de Blida, juillet 2011.
- [19] Slimani Amel : « Étude et modélisation des hétérostructures à puits quantique contraints  $GaInAs/InP$  », Thèse, Département de physique, université de Blida, (2001).
- [20] Jérôme Fais : « Introduction à la Physique des Semi-conducteurs», Université de Neuchatel ,(2001)
- [21] J.S.Blakemore: « Semiconducting and other major properties of gallium arsenide».J.Appl.phys.53(10) .October (1982).
- [22]Francis Levy : « Traité des matériaux (18), Physique et technologie des semi-conducteurs» Presses Polychniques et Universitaires Romandes(1995).
- [23]« Le laser et son application en interférométrie pour des mesures dimensionnelles», Lycée Denis-De-Rougement de Neuchâtel sous la direction de Michel Favez, Bulletin de la Société des Enseignants Neuchâtelois de Sciences, (2005).
- [24] D. Dangoisse, D. Hennequin et V. Zehnlé-Dhaoui :« Les lasers», Dunod, (2004).
- [25] M.AISSAT Abdelkader : « Modélisation et calcul du gain optique et du contrainst de seuil d'un laser a puits quantique contraint a base de  $Ga_xIn_{1-x}As/InP$ », mémoire magister, Université de Blida, (1998/1999)

- [26] ROMAIN MACIEJKO, Optoélectronique, Montréal, Presse internationale Polytechnique, (2002).
- [27] Luc DETTWILLER : « Les lasers et leurs applications », Paris, ellipses, (1998).
- [28] DEHIMI Said : « Étude de lasers à base des composés semi-conducteurs (InP, GaAs, GaP) », Mémoire magister, Université El-Hadj Lakhder – Batna, (2011)
- [29] Ali Lanacer : « Étude des propriétés optiques de puits quantiques contraints ultra-minces d'InAs/InP », Thèse présentée à la Faculté des études supérieures en vue de l'obtention du grade de Philosophiæ Docteur (Ph.D.) en Physique, Université de Montréal, (2006).
- [30] Fujishima, A., Honda, K.: « Electrochemical photolysis of water at a semiconductor electrode », Nature 238, 37–38 (1972)
- [31] Asahi, R., Morikawa, T., Ohwaki, T., Aoki, K., Taga, Y.: « Visible light photocatalysis in nitrogen doped titanium oxides », Science 293, 269–271 (2001)
- [32] Zou, Z.G., Ye, J.H., Sayama, K., Arakawa, H.: « Direct splitting of water under visible light irradiation with an oxide semiconductor photocatalyst », Nature 414, 625–627 (2001)
- [33] Anthony R. West: « Solid State Chemistry and Its Applications », J.Wiley & Sons, 1991 (ISBN 0471908746, p. 367)
- [34] S.NAIMI : « Etude et optimisation des paramètres physiques de la diode laser GaAsSbN/GaAs », mémoire de MAGISTERE, Université Djillali liabès de Sidi bel abas, 2011.
- [35] A. Aissat, S.Nacer, M.Seghilani, J.P.Vilcot : « Effect of on band alignment of compressively strained Ga(1-x)In(x)N(y)As(1-y-z)Sb(z)/GaAs quantum well structures », Physica E 43 (2010) 40–44, pp 01.
- [36] Kerkar Fouzia : « Etude et calcul des propriétés de la structure à puits quantique Ga<sub>x</sub>In<sub>1-x</sub>N<sub>y</sub>As<sub>1-y</sub>/GaAs en vue de son utilisation dans les diodes lasers émettant autour de 1.3 μm », Université Saad Dahled de Blida, janvier (2008).
- [37] K.Koksal, B. G. "Critical Layer Thickness of GaIn(n)As(sb) qws on GaAs and InP Substrates for (001) and (111) Orientations". the European Physical Journal( 5 may 2009), 211–218.

[38] Ghione, G: « Semiconductor Devices for High-Speed Optoelectronics », Politecnico Ditorino,Italy,Cambridge University Press,(2009).

[39] Bediar, M., "Caracteristiques des Structures Laseres a Puits Quantiques Contraints", Universite de Bataba,(2007).

[40] A.MOKHTAROVA : « Puits quantique de composés Nitrures InGaN/GaN pour le photovoltaïque », Thèse de doctorat, physique/Nanophysique, 2016, Université de Grenoble. .