



République Algérienne Démocratique & Populaire  
Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique



## Université Ziane Achour–Djelfa

Faculté des Sciences et de la Technologie

Département des Sciences de la Matière

**MSIL** *Materials Science and Informatics Laboratory*

N° d'Ordre :

# ETUDE THEORIQUE DU LASER A PUIITS QUANTIQUÉ $\text{GaAs}_{1-x}\text{N}_x/\text{GaAs}$

*Mémoire présenté par*  
**SABEK BOULERBAH**

*Pour l'obtention du grade de*

**Master**

*en : Physique photovoltaïque*

*Soutenu le : ..... devant la commission d'examen :*

Dr Djamel Rahou	Président	Université de Djelfa	_____
Prof. Ahmed Gueddime	Encadreur	Université de Djelfa	_____
Mr. Mohamed Lahlou	Co. Encadreur	Université de Djelfa	_____
Dr Abdelkrim Naas	Examineur	Université de Djelfa	_____
Dr Assia Bouraiou	Examineur	Université de Djelfa	_____

# *Remerciements*

Tous mes remerciements à monsieur le Mr. *Lahoual mohammed* pour m'avoir encadré, de la confiance qu'il m'a témoigné au cours de cette année et d'avoir dirigé mes travaux de mémoire.

J'exprime ma profonde et respectueuse gratitude à Monsieur **ahmed guddim, Professeur** à l'Université de Djelfa , qui m'a fait l'honneur de présider le jury de Mémoire.

J'exprime ma profonde reconnaissance à monsieur Dr. *Rahou djamel*, à l'université Djelfa, de me faire l'honneur de présider le jury de cette mémoire.

Je remercie vivement monsieur **Dr. Abdelkrim Naas**, maître de conférences à l'université de Djelfa, membre de mon jury pour m'avoir fait l'honneur d'examiner ce travail.

J'adresse mes respectueux remerciements à madame Dr **Assia Bouraiou**, maître de conférences à l'université de Djelfa, pour avoir accepté d'examiner mes travaux et d'être membre du jury de mon mémoire.

Un grand merci à toute ma famille qui a toujours été présente lorsque j'en ai eu besoin et tout les amies.

## Table des Matières

<b>Introduction générale</b> .....	1
<b>CHAPITRE I : puits quantique</b>	
<b>I.1.</b> introduction .....	4
<b>I.2.</b> equation de Schrödinger .....	4
<b>I.2.1.</b> résolution de l'équation de Schrödinger .....	4
<b>I.2.1.1.</b> séparation des variables .....	4
<b>I.2.1.2.</b> modélisation de potentiels réels .....	6
<b>I.2.1.3.</b> cas des potentiels pairs $V(x) = V(-x)$ .....	7
<b>I.2.1.4</b> conditions aux limites .....	7
<b>I.2.1.5.</b> états liés et états continus .....	8
<b>I.3.</b> puits quantique fini .....	8
<b>I.4.</b> conclusion .....	12
<b>CHPITRE II :les propriétés physiques des semi-conducteurs III-V</b>	
<b>II.1.</b> introduction .....	14
<b>II.2.</b> paramètres pour différents matériaux de la famille (III-V).....	14
<b>II.3.</b> propriétés cristalline .....	15
<b>II.4.</b> structure des bandes d'énergie .....	16
<b>II.5.</b> propriétés optiques .....	17
<b>II.5.1.</b> absorption .....	17
<b>II.5.2.</b> indice de réfraction.....	19
<b>II.5.3.</b> recombinaison des porteurs , transitions radiatives .....	20
<b>II.6.</b> propriétés électriques .....	22
<b>II.7.</b> conclusion .....	23

**CHPITRE III : calcul du gain optique**

<b>III.1.</b> introduction .....	25
<b>III.2.</b> Gain optique.....	25
<b>III.2.1.</b> Gain optique pour un puits quantique.....	26
<b>III.2.1.1.</b> Expression du gain optique.....	26
<b>III.2.1.2.</b> la variation de la bande interdite pour $x < 0.07$ .....	29
<b>III.2.1.3.</b> La densité d'état du système <b>GaAs<sub>0.97</sub>N<sub>0.03</sub>/GaAs</b> .....	34
<b>III.2.2.</b> Spectre du gain.....	34
<b>III.2.2.1.</b> Influence de largeur de puits.....	34
<b>III.2.2.2.</b> Influence de l'injection.....	35
<b>III.2.2.3.</b> Influence de la fraction molaire .....	35
<b>III.3.</b> conclusion .....	36
 <b>Conclusion Général</b> .....	 37

## Tableau de figure

<b>Figure I.1 . Model de potentiels réels</b>	(1-6)
<b>Figure I.2.puits carré de potentiel</b>	(1.8)
<b>Figure I.3.Détermination graphique des énergies des états liés D'une particule dans un puits carré de Potentiel</b>	(1.11)
<b>Fig.II.1. Largeur de bande interdite en fonction du paramètre cristallin pour les alliages III-V</b>	(2.15)
<b>Figure II-2 Réseau cristallin dans la structure Zinc-blende</b>	(2.16)
<b>FigII-3 Structure de bandes de GaAs</b>	(2.17)
<b>FigII-4 Spectre d'absorption de GaAs pour différentes températures</b>	(2.18)
<b>Figure II-5 Comparaison des structures de bandes du silicium (Si) et du phosphore d'indium (InP) dans le diagramme E (Energie) - k (vecteur d'onde</b>	(2.23)
<b>Figure III.1. Transition entre les sous-bandes de conduction et les sous-bandes de valence d'un puits quantique</b>	(3.27)
<b>Figure III.2. largeur de band conduction de GaAs<sub>1-x</sub>N<sub>x</sub> (ternair) à fonction band gap énergie</b>	(3.33)
<b>Figure III.3. la bande interdite E<sub>g</sub> en fonction de la fraction molaire (x)</b>	(3.33)
<b>FigureIII.4. La densité d'état du GaAs<sub>0.97</sub>N<sub>0.03</sub>/GaAs à T=300 K pour N= 4x10<sup>18</sup>cm<sup>-3</sup> et L<sub>p</sub>=6 nm</b>	(3.34)
<b>Figure III.5.Variation du gain optique en fonction de la largeur du puits quantique</b>	(3.34)
<b>Figure III.6. Spectre de gain pour différentes concentration de porteurs de charge à largeur de puits quantiques L<sub>p</sub> =06nm à température ambiante T=300K</b>	(3.35)
<b>Figure III.7. spectre de gain pour différentes fraction molaire x à largeur de puits quantiques L<sub>p</sub> =6nm et à température ambiante T=300K</b>	(3.36)

## Introduction général

Le principe de l'émission stimulée (ou émission induite) est décrit dès 1917 par Albert Einstein. Mais ce n'est qu'en 1954 que le premier maser (maser au gaz ammoniac) est conçu par J.P. Gordon, H.J. Zeiger et Ch.H. Townes. Au cours des six années suivantes, de nombreux scientifiques tels N.G. Bassov, A.M. Prokhorov, A.L.Schawlow et Ch.H. Townes ainsi qu'en France Alfred Kastler et Jean Brossel contribuent à adapter ces théories aux longueurs d'ondes du visible [1, 2,3]. En 1960, le physicien américain Théodore Maiman obtint pour la première fois une émission laser au moyen d'un cristal de rubis. Un an plus tard Ali Javan mit au point un laser au gaz (hélium et néon) puis en 1966, Peter Sorokin construisit le premier laser à colorant. Ironie de l'histoire, Townes, Bassov, Schawlow et Prokhorov reçurent un prix Nobel en 1964 pour leurs travaux en commun alors que Maiman, le véritable inventeur du laser, ne reçut aucun prix, car il ne travaillait pas dans un milieu académique [4].

Diode laser est utilisée dans de nombreuses industries et appareils que nous utilisons tous les jours, en particulier dans le domaine des communications en utilisant la fibre optique, et en particulier dans le rayonnement de domaine militaire dans l'infrarouge, qui a la capacité de pénétrer le brouillard et les nuages et la pluie [5].

Ce travail est une étude de la diode laser à puits quantique contraint GaAs/GaAs<sub>1-x</sub>N<sub>x</sub> qui permet une émission à 850 nm dans la région d'infrarouge dans le spectre électromagnétique.

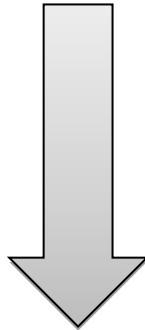
Nous avons utilisé le matériau ternaire GaAs<sub>1-x</sub>N<sub>x</sub> comme une zone active dans la diode laser à puits quantique contraint sur un substrat GaAs. Nous avons calculé le gain optique en fonction de la longueur d'onde en changeant la largeur de la zone active et la concentration des porteurs de charge ainsi que les valeurs optimales de la largeur de puits, la concentration des porteurs de charge et la fraction molaire ont été faite afin d'obtenir un gain optique maximale pour une émission dans l'infrarouge. Le spectre optique du gain est calculé en utilisant la méthode de Luttinger-Kohn en considérant le modèle parabolique de la bande de conduction et le couplage des sous bandes entre les trous lourds et les trous légers de la bande de conduction. L'influence de la contrainte sur les propriétés structurales et optiques, les énergies de quantification et de transition ont été calculées

Le travail est réparti en trois chapitres.

- **Le premier chapitre** présente la résolution de l'équation de Schrödinger et pour un puits quantique fini.
- **Le deuxième chapitre** nous présenterons les propriétés physiques des semi conducteurs III-V.

- **Le troisième chapitre** la simulation de la densité d'états et le calcul du gain optique d'un laser GaAs/GaAs<sub>1-x</sub>N<sub>x</sub> à puits quantique contraints d'une émission à 850nm.

# CHAPITRE I



ETUDE QUANTIQUE DU  
PUITS QUANTIQUE



## I.1.Introduction

Dans ce chapitre, nous faisons le calcul nécessaire pour tel structure ainsi que la discussion des solutions à l'équation de Schrödinger.

## I.2. Equation de Schrödinger :

En mécanique classique et lorsque les forces s'exerçant sur une particule, les courbes d'énergie potentielle constituent une approche élégante pour déterminer au moins de façon qualitative le mouvement de la particule et ses principales caractéristiques :

En particulier lorsque la particule se déplace suivant un axe  $\vec{OX}$  ou dans un champ de forces centrales, la connaissance des courbes  $V(r)$  nous permettent de décrire complètement le mouvement de cette particule sans résoudre l'équation fondamentale de la dynamique et donc sans faire appel à une mathématique élaborée.

Ainsi, l'analyse de ces courbes permet de déterminer les positions d'équilibre stables et instables qui correspondent aux extrema du potentiel, de fixer les limites du mouvement, d'en connaître les zones interdites, d'en déduire les principales caractéristiques et d'atteindre la nature des trajectoires correspondant à une énergie totale fixée.

En mécanique quantique, l'analyse des courbes de potentiel revêt également une importance capitale dans l'étude d'une particule en mouvement dans un champ de forces extérieur dérivant d'un potentiel indépendant du temps et fonction uniquement de la position. On verra en particulier que lorsque le potentiel  $V(\vec{r})$  présente des discontinuités et qu'il est constant entre ces discontinuités, la résolution de l'équation de Schrödinger se simplifie considérablement et ses solutions permettent d'avoir une vision simple de problèmes physiques réels dont la résolution exacte est complexe.

### I.2.1. Résolution de l'équation de Schrödinger :

On considère une particule de masse  $m$  se déplaçant dans un potentiel  $V(\vec{r})$  indépendant du temps et on se propose de déterminer sa fonction d'onde  $\psi(\vec{r}, t)$

#### I.2.1.1. Séparation des variables :

L'équation de Schrödinger s'écrit :

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{r}) \right] \psi(\vec{r}, t) \quad (1-1)$$

Comme les variables  $\vec{r}$  et  $t$  sont séparés dans les deux membres, on peut, de façon générale, chercher

des solutions de la forme d'un produit d'une fonction d'espace  $\varphi\left(\vec{r}\right)$  et d'une fonction dépendant du temps  $\chi(t)$ , soit :

$$\psi\left(\vec{r}, t\right) = \varphi\left(\vec{r}\right) \chi(t) \quad (1-2)$$

En portant cette expression dans l'équation de Schrödinger, il vient :

$$i\hbar\varphi \frac{d\chi}{dt} = -\frac{\hbar^2}{2m}\chi\Delta\varphi + V\varphi\chi \quad (1-3)$$

En divisant les deux membres de l'équation par le produit  $\varphi\chi$ , on obtient l'égalité :

$$i\hbar \frac{1}{\chi} \frac{d\chi}{dt} = \frac{\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V\right]\varphi}{\varphi} \quad (1-4)$$

Le membre de gauche est une fonction du temps tandis que le membre de droite est fonction uniquement de la position. Pour qu'il y ait égalité quelque soient  $\vec{r}$  et  $t$  il faut que les deux membres soient constants. Cette constante a les dimensions d'une énergie qu'on notera E. On aura alors les deux équations suivantes :

$$i\hbar \frac{d\chi}{\chi} = E dt \quad (1-5)$$

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V\right)\varphi = E\varphi \quad (1-6)$$

La première équation se résout simplement et a pour solution :

$$\chi(t) = \chi(0) e^{-i(E/\hbar)t}$$

Ce qui donne pour  $\psi\left(\vec{r}, t\right)$  :

$$\psi\left(\vec{r}, t\right) = \varphi\left(\vec{r}\right) e^{-i(E/\hbar)t} \quad (1-7)$$

La dépendance sinusoïdale indique que la particule a une énergie bien définie et que sa densité de probabilité de présence est indépendante du temps :

$$\left| \psi \left( \vec{r}, t \right) \right|^2 = \left| \varphi \left( \vec{r} \right) \right|^2 \quad (1-8)$$

On dit dans ce cas que la particule est dans des états stationnaires c'est à dire pour lesquels l'énergie  $E$  est constante. On obtient ces états en résolvant l'équation (1-7) qui s'écrit aussi sous la forme :

$$H \varphi = E \varphi \quad (1-9)$$

Ou ( $H$ ) est l'opérateur hamiltonien ( $H = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V$ )

Et  $\varphi$  tel que :

$$\iiint \left| \varphi \left( \vec{r} \right) \right|^2 d^3 r = 1 \quad (1-10)$$

Cette équation est appelée équation aux valeurs propres : C'est à dire pour des conditions imposées à  $\varphi \left( \vec{r} \right)$ , celle-ci n'existe que pour certaines valeurs de l'énergie  $E$ , appelées valeurs propres de  $H$ ,  $\varphi \left( \vec{r} \right)$  est alors appelée fonction propre correspondant à la valeur propre  $E$  [8].

### I.2.1.2. Modélisation de potentiels réels :

A part les cas où le potentiel est nul ou constant, la situation la plus simple est celle où  $V \left( \vec{r} \right)$  subit des discontinuités en restant constant entre deux discontinuités. La recherche des solutions pour de tels potentiels ne présente pas de difficultés mathématiques et cela permettra de modéliser des situations réelles qu'on peut approximer par de tels potentiels. La figure 1.1 montre quelques exemples qui se rencontrent souvent en mécanique quantique.

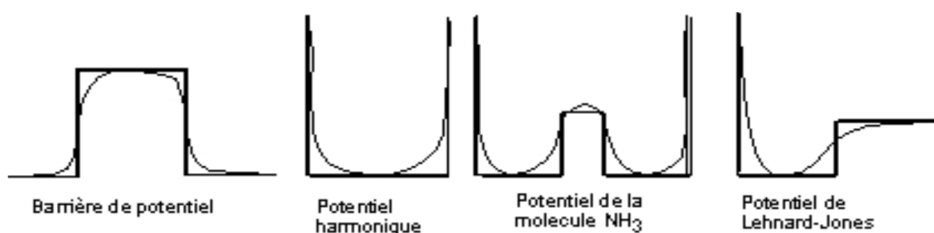


Figure I.1 : Model de potentiels réels

Pour simplifier le formalisme, on ne traitera dans la suite que des potentiels à une seule variable d'espace  $x$ .

### I.2.1.3. Cas des potentiels pairs $V(x) = V(-x)$ :

Ecrivons l'équation de Schrödinger pour  $x$  et pour  $-x$  :

On a :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\varphi(x)}{dx^2} + V(x)\varphi(x) = E\varphi(x) \quad (1-11)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\varphi(-x)}{dx^2} + V(x)\varphi(-x) = E\varphi(-x) \quad (1-12)$$

On remarque que  $\varphi(x)$  et  $\varphi(-x)$  sont solutions de la même équation différentielle linéaire ; elles sont donc identiques à un facteur multiplicatif près, soit :

$$\varphi(x) = \varepsilon\varphi(-x) \quad (1-13)$$

Cette relation est vraie pour toute valeur de  $x$  et en particulier lorsqu'on change  $x$  en  $-x$  donc :

$$\varphi(-x) = \varepsilon\varphi(x) \quad (1-14)$$

Si l'on combine les relations (1-13) et (1-14), il vient :

$$\varphi(x) = \varepsilon^2\varphi(x) \quad (1-15)$$

Ce qui implique que :  $\varepsilon = \pm 1$

$\varepsilon$  est appelée parité de la fonction :

- pour  $\varepsilon = 1$ , la fonction d'onde est une fonction paire, elle est dite symétrique.
- pour  $\varepsilon = -1$ , la fonction d'onde est une fonction impaire, elle est dite antisymétrique.

Ainsi, lorsque le potentiel est pair, l'ensemble des solutions possibles de l'équation de Schrödinger est constitué de deux systèmes : les solutions paires ou symétriques et les solutions impaires ou antisymétriques [9].

### I.2.1.4. Conditions aux limites

Nous avons vu que la probabilité de trouver la particule en un point de l'espace est proportionnelle au module au carré  $|\Psi|^2$  de la fonction d'onde. Cette quantité doit donc être une fonction continue partout et notamment aux discontinuités du potentiel. Si  $|\Psi|^2$  est continue il est logique de supposer que  $\Psi(x)$  l'est

aussi. Par ailleurs, l'existence d'une dérivée seconde dans l'équation de Schrödinger implique d'un point de vue mathématique que la fonction d'onde n'a pas de discontinuité et par conséquent que sa dérivée première  $\frac{d\psi(x)}{dx}$  est continue en tout point. On verra plus loin que cette condition peut également être déduite du courant de probabilité associé au mouvement de la particule. Pour déterminer les relations donnant la quantification de l'énergie de la particule, on applique donc à la discontinuité de potentiel les deux conditions suivantes :

- Continuité de la fonction d'onde.
- Continuité de la dérivée première de la fonction d'onde.

### I.2.1.5. états liés et états continus

Lorsque la particule reste confinée dans une région de l'espace, la Probabilité de la trouver à l'infini est nulle à tout moment. Sa fonction d'onde est donc normalisable et les valeurs de son énergie sont quantifiées : Le spectre en énergie de la particule est dans ce cas discontinu et on dit que la particule se trouve dans des états liés[10].

Si la particule n'est pas confinée dans une région donnée, elle peut explorer tout l'espace et se trouver même à l'infini. La fonction d'onde n'est plus normalisable et le spectre en énergie est continu. On dit alors que la particule se trouve dans des états non liés ou continus.

### I.3.Puits quantique fini :

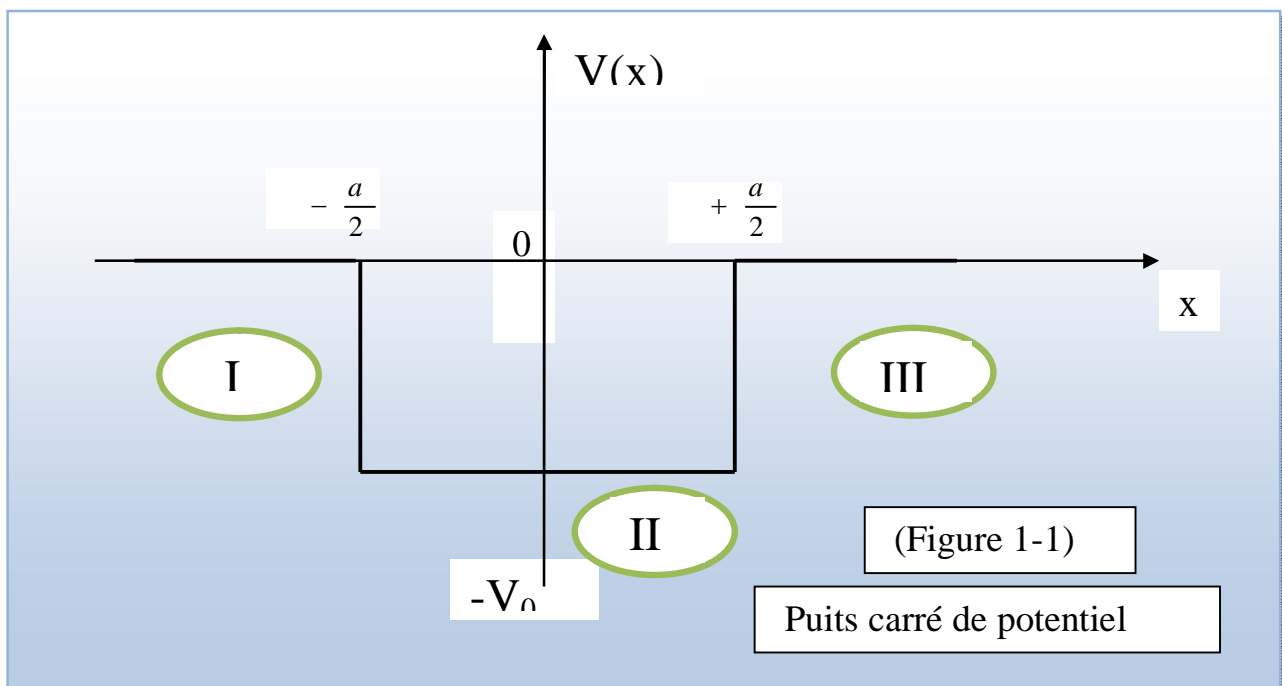


Figure I.2. puits carré de potentiel

Nous nous limiterons ici à l'étude du cas  $-V_0 < E < 0$ .

Dans les régions I ( $x < -\frac{a}{2}$ ); II ( $-\frac{a}{2} < x < \frac{a}{2}$ ); III ( $x > \frac{a}{2}$ ), on a respectivement :

$$\varphi_I(x) = B_1 e^{\rho x} + B_1' e^{-\rho x} \quad (1-16)$$

$$\varphi_{II}(x) = A_2 e^{ikx} + A_2' e^{-ikx} \quad (1-17)$$

$$\varphi_{III}(x) = B_3 e^{\rho x} + B_3' e^{-\rho x} \quad (1-18)$$

Avec :

$$\rho = \sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}} \quad (1-19)$$

$$k = \sqrt{\frac{2m(E + V_0)}{\hbar^2}} \quad (1-20)$$

Comme  $\varphi(x)$  doit être bornée dans la région I, il faut que :

$$B_1' = 0 \quad (1-21)$$

Les conditions de raccordement en  $\left(x = -\frac{a}{2}\right)$  donnent alors :

$$A_2 = e^{(-\rho+ik)a/2} \frac{\rho + ik}{2ik} B_1 \quad (1-22)$$

$$A_2' = -e^{(-\rho+ik)a/2} \frac{\rho + ik}{2ik} B_1 \quad (1-23)$$

Et celles de raccordement en  $\left(x = \frac{a}{2}\right)$  :

$$\frac{B_3}{B_1} = \frac{e^{-\rho a}}{4ik\rho} \left[ (\rho + ik)^2 e^{ika} - (\rho - ik)^2 e^{-ika} \right] \quad (1-24)$$

$$\frac{B_3'}{B_1} = \frac{\rho^2 + k^2}{2k\rho} \sin ka \quad (1-25)$$

Mais  $\varphi(x)$  doit être aussi bornée dans la région III. Il faut donc que  $B_3 = 0$ , c'est-à-dire :

$$\left( \frac{\rho - ik}{\rho + ik} \right)^2 = e^{2ika} \quad (1-26)$$

Comme  $\rho$  et  $k$  dépendent de  $E$ , l'équation (1-26) ne peut être satisfaite que pour certaines valeurs de  $E$ .

Le fait d'imposer à  $\varphi(x)$  d'être partout bornée entraîne donc la quantification de l'énergie.

De manière plus précise, deux cas sont possibles :

(i) si :

$$\frac{\rho - ik}{\rho + ik} = -e^{ika} \quad (1-27)$$

il vient :

$$\frac{\rho}{k} = \operatorname{tg} \left( \frac{ka}{2} \right) \quad (1-28)$$

Posons :

$$k_0 = \sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2}} = \sqrt{k^2 + \rho^2} \quad (1-29)$$

Nous obtenons alors :

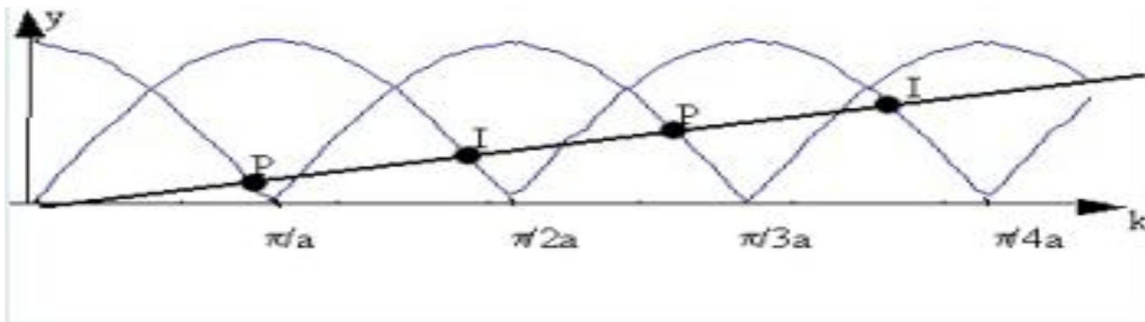
$$\frac{1}{\cos^2 \left( \frac{ka}{2} \right)} = 1 + \operatorname{tg}^2 \frac{ka}{2} = \frac{k^2 + \rho^2}{k^2} = \left( \frac{k_0}{k} \right)^2 \quad (1-30)$$

L'équation (2-12) est donc équivalente au système :

$$\begin{cases} \left| \cos\left(\frac{ka}{2}\right) \right| = \frac{k}{k_0} \dots\dots\dots(a) \\ \operatorname{tg}\left(\frac{ka}{2}\right) > 0 \dots\dots\dots(b) \end{cases} \quad (1-31)$$

Les niveaux d'énergie sont déterminés par l'intersection d'une droite, de pente  $\frac{1}{k_0}$  avec des arcs de sinusöide ( ces derniers sont représentés en tirets longs sur la figure I.2).

Nous obtenons ainsi un certain nombre de niveaux d'énergie, dont les fonction d'onde sont paires ; en effet, si l'on reporte (1-23) dans (1-25) et (1-27) ,il est aisé de vérifier que  $B_3' = B_1$  et que  $A_2' = A_2$  , de sort que  $\varphi(-x) = \varphi(x)$ .



(Figure I.3. Détermination graphique des énergies des états liés D'une particule dans un puits carré de potentiel).

(ii) si :

$$\frac{\rho - ik}{\rho + ik} = e^{ika} \quad (1-32)$$

Un calcul du même type conduit à :

$$\begin{cases} \left| \sin\left(\frac{ka}{2}\right) \right| = \frac{k}{k_0} \dots\dots\dots(a) \\ \operatorname{tg}\left(\frac{ka}{2}\right) < 0 \dots\dots\dots(b) \end{cases} \quad (1-33)$$

Les niveaux d'énergie sont alors déterminés par l'intersection de la même droite que plus haut avec d'autres arcs de sinusöide.



Les niveaux ainsi obtenus sont intercalés entre ceux trouvés en (i); on montre facilement que les fonctions d'onde correspondantes sont impaires.

### Remarque

Si  $k_0 \leq \frac{\pi}{a}$  c'est -à-dire si :

$$V_0 \leq V_1 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2 m a^2} \quad (1-34)$$

La figure 02 montre qu'il existe un seul état lié de la particule, de fonction d'onde paire. puis Si  $V_1 \leq V_0 < 4V_1$ , il apparait un premier niveaux impair, et ainsi de suite. Lorsque  $V_0$  augmente, il apparait alternativement des niveaux pairs et impaires.

Si  $V_0 \gg V_1$ , la pente  $1/k_0$  de la droite de la figureI-3 est très faible : pour les niveaux d'énergie les plus bas, on a pratiquement :

$$k = \frac{n\pi}{a} \quad (1-35)$$

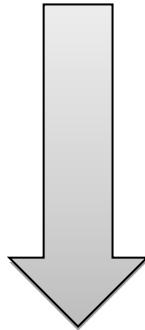
Ou n est un entier, et par suite :

$$E = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2 m a^2} - V_0 \quad (1-36)$$

### I.4.Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons résolu l'équation de Schrödinger pour le cas d'un puits quantique fini qui est indispensable pour comprendre les phénomènes physiques dans la structure du puits quantique.

# CHAPITRE II



LES PROPRIETES PHYSIQUES  
DES SEMI CONDUCTEURS III-V

## II.1.Introduction

Les matériaux semi-conducteurs III-V sont des composés formés à partir d'un élément de la 3<sup>e</sup> colonne et d'un élément de la 5<sup>e</sup> colonne de la classification périodique. L'étude de leurs propriétés, et en particulier la structure de bandes, montre que les éléments les plus légers donnent des composés à large bande interdite, dont les propriétés se rapprochent de celles des isolants, et une structure de bande indirecte. Les composés incluant du bore, de l'aluminium, ou de l'azote, et le phosphure de gallium GaP entrent dans cette catégorie ; ils ont en général peu d'intérêt pour l'électronique rapide [11], qui demande des semiconducteurs à forte mobilité de porteurs, ou pour l'optoélectronique où une structure de bande directe est nécessaire pour que les transitions optiques soient efficaces [12].

A l'autre extrémité, les éléments lourds comme le thallium ou le bismuth donnent des composés à caractère métallique.

## II.2. paramètres pour différents matériaux de la famille III-V

Le tableau II.1.Résume quelques paramètres pour différents matériaux de la famille III-V.

L'intérêt pratique des semi-conducteurs III-V est encore considérablement renforcé par la possibilité de réaliser des alliages par substitution partielle de l'un des éléments par un autre élément de la même colonne. On sait par exemple obtenir des alliages ternaires du type  $Ga_xAl_{1-x}As$ ,  $Ga_xIn_{1-x}As$ , ou quaternaires comme  $GaxIn_{1-x}As_yP_{1-y}$ . La figure 1 représente les variations de la largeur de bande interdite de l'alliage en fonction du paramètre cristallin, qui varie lui-même avec la composition. Ce diagramme montre qu'il est possible d'obtenir des matériaux dont la largeur de bande interdite, et donc les propriétés optiques, varient dans une large gamme. Il existe cependant une contrainte importante pour la fabrication de ces matériaux, qui sont réalisés en couches minces par croissance épitaxiale sur un substrat binaire : le paramètre cristallin doit être très proche de celui du substrat. Le diagramme de la figure II- 1 permet de connaître la composition de tout alliage ternaire susceptible d'être épitaxiale en couche mince sur les substrats binaires GaAs ou InP.

**Tableau II-1** - Paramètres caractéristiques pour les principaux composés III-V.  $E_g$  énergie de bande interdite;  $\lambda_g$  longueur d'onde du seuil d'absorption ;  $a_0$  paramètre de maille du cristal [13].

Composé III-V	$E_g$ (ev)	$\lambda_g$ ( $\mu\text{m}$ )	$a_0$ ( $\text{\AA}$ )	Structure de la bande interdite
BN	7.5	0.17	3.615	indirecte
AlP	2.45	0.51	5.463	
AlAs	2.16	0.57	5.661	
AlSb	1.58	0.75	6.138	
GaP	2.26	0.55	5.449	
GaAs	1.42	0.87	5.653	directe
GaSb	0.72	1.85	6.095	
InP	1.35	0.92	5.868	
InAs	0.36	3.44	6.058	
InSb	0.17	7.30	6.479	

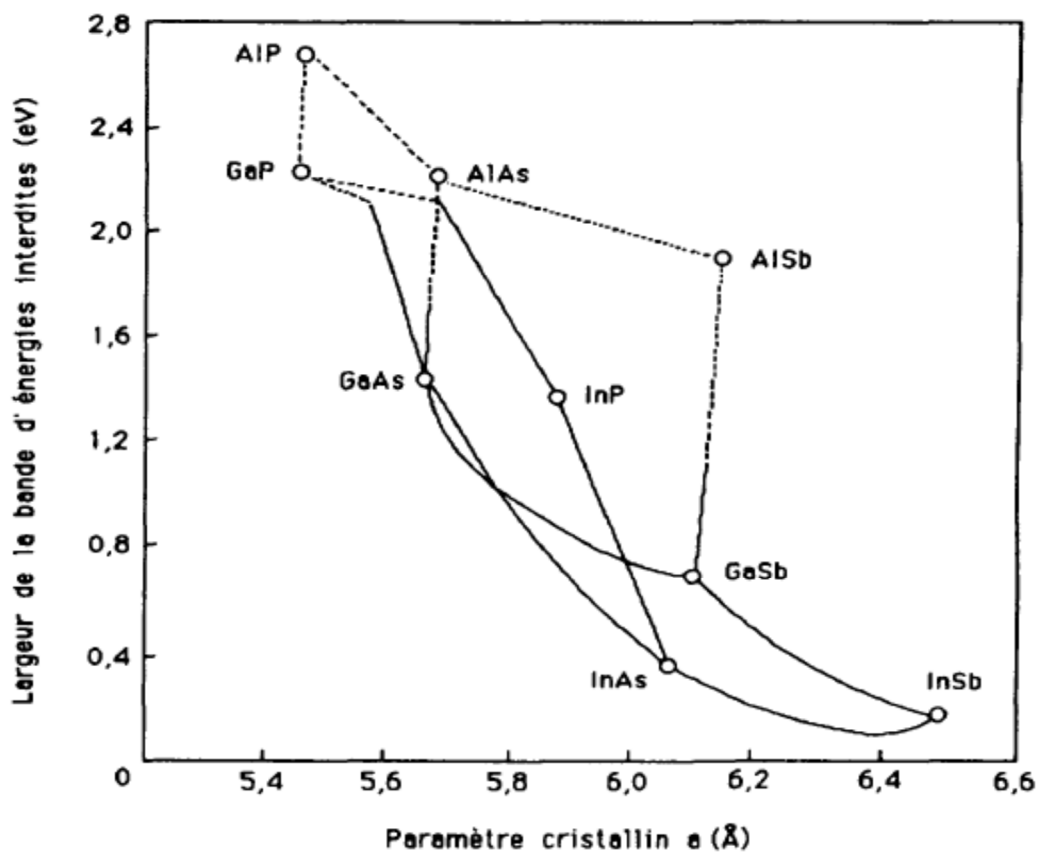


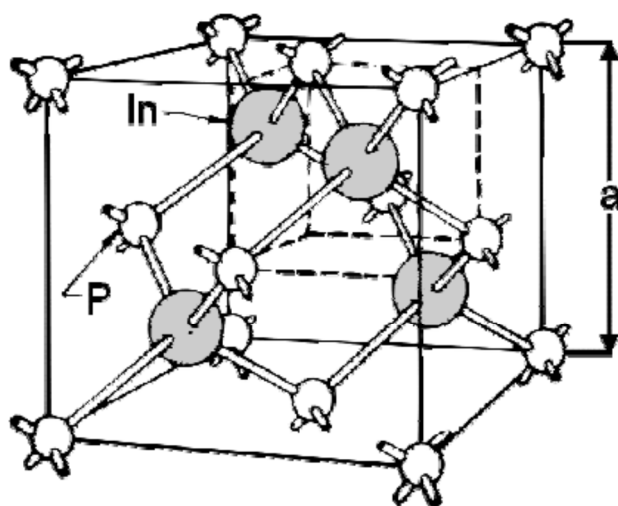
Fig.II.1. Largeur de bande interdite en fonction du paramètre cristallin pour les alliages III-V

### II.3. propriétés cristallines

La plupart des matériaux III-V se cristallisent dans la structure Zinc Blende présentée sur la figure (II-2). Cette structure, qui s'apparente à celle du diamant, est constituée de deux sous-réseaux cubiques à faces

centrées, l'un étant constitué des atomes de l'élément III, l'autre des atomes de l'élément V [2, 4, 5, 6,7]. 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.

De ce fait dans les matériaux III-V, les liaisons ne sont pas simplement covalentes comme dans le Silicium. Elles reposent sur le transfert d'électrons des atomes du groupe V sur ceux du groupe III. Cette répartition est à l'origine du caractère partiellement covalent des liaisons (semi-conducteur polaires). Cette composante ionique de la liaison est importante, elle se manifeste par la présence de moments dipolaires électriques qui interagissent avec le rayonnement électromagnétique de grande longueur d'onde, au même titre qu'il y a interaction entre les cristaux ioniques et la lumière infrarouge [14].



**Zinc Blende**  
(GaAs, InP, etc.)

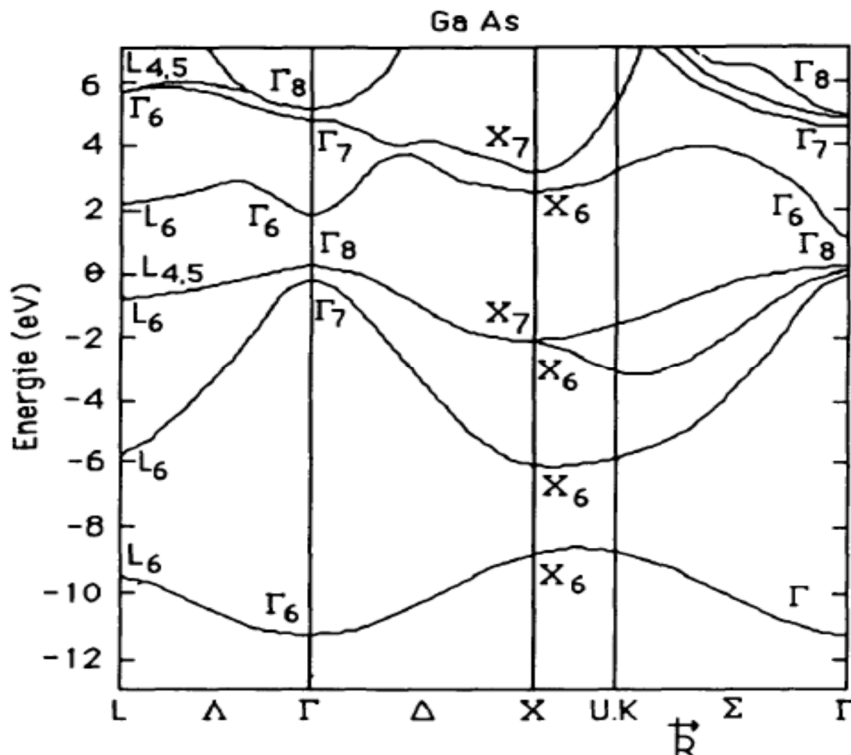
Figure II-2 Réseau cristallin dans la structure Zinc-blende

#### II.4. Structure des bandes d'énergie

Les bandes d'énergie donnent les états d'énergie possibles pour les électrons en fonction de leur vecteur d'onde. On les représente donc dans l'espace réciproque, et, pour simplifier, dans les directions de plus hautes symétries de la première zone de Brillouin décrites ci-dessus. Elles se décomposent en bandes de valence et bandes de conduction (Fig.II-3).

Ce sont la bande de valence la plus haute, la bande de conduction la plus basse, et la bande interdite qui les sépare qui déterminent principalement les propriétés du semiconducteur, et ce sont celles-ci que nous

considérons par la suite. L'allure générale des bandes est la même pour tous les composés III-V considérés [15], dont la structure de bande est directe, c'est-à-dire pour lesquels le maximum de la bande de valence et le minimum de la bande de conduction sont situés au centre de la zone de Brillouin, en  $k=0$ . Le minimum central de la bande de conduction correspond à des électrons de faible masse effective, donc très mobiles.



FigII-3 Structure de bandes de GaAs

## II.5. propriétés optiques

L'interaction d'un électron avec un photon se fait, comme toute interaction, avec conservation de l'énergie et du vecteur d'onde. Le vecteur d'onde du photon étant très inférieur à celui des Electrons, les transitions optiques directes entre la bande de valence et la bande de conduction apparaissent verticales dans le diagramme de bande des électrons.

### II.5.1. Absorption

Lorsqu'un photon d'énergie ( $h\nu$ ) supérieure à la largeur de bande interdite  $E_g$  est envoyé sur le semi-conducteur, il est absorbé en induisant la transition d'un électron de la bande de valence vers la bande de conduction, c'est-à-dire en créant une paire électron-trou [16].

Le coefficient d'absorption  $\alpha$  est proportionnel à la densité d'électrons dans l'état initial  $n_1$ , et à la densité de places disponibles dans l'état final  $n_2$  :

$$\alpha = A \sum P_{12} n_1 n_2 \tag{2-1}$$

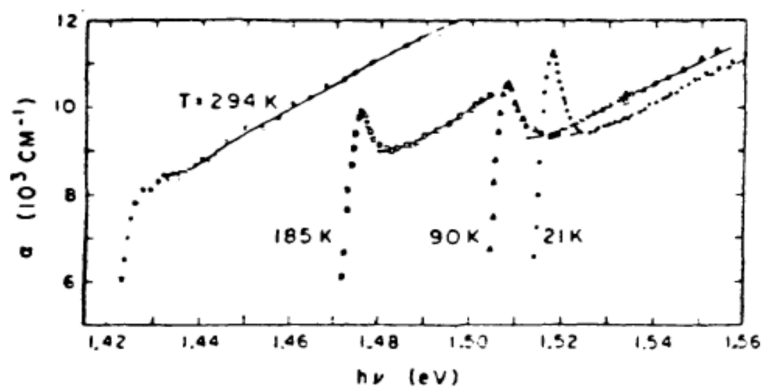
Où  $p_{12}$  est la probabilité de transition.

La transition associe un état de la bande de valence à un état de la bande de conduction de même vecteur d'onde  $\vec{k}$ . En supposant les bandes paraboliques, on a donc :

$$h\nu = E_g + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_t^*} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e^*} \tag{2-2}$$

Cette relation définit l'ensemble des états de vecteur d'onde  $\vec{k}$  qui interviennent sous l'excitation par un rayonnement de fréquence  $\nu$ , à partir du seuil d'absorption donné par l'énergie  $E_g$ . Sous fort éclairage à une longueur d'onde  $\lambda$  donnée, les états du bas de la bande de conduction se remplissent, la probabilité de transition à cette fréquence chute, et le matériau devient transparent: c'est le phénomène de saturation d'absorption, qui s'accompagne d'une augmentation de la largeur de bande interdite apparente. Plus l'énergie des photons incidents est supérieure au gap, plus il faut une densité d'énergie lumineuse élevée pour observer ce phénomène [17].

Pour des fréquences plus importantes, d'autres bandes peuvent intervenir, en particulier la bande de trous légers dite "split-off", se traduisant par des épaulements sur la courbe d'absorption en fonction de l'énergie des photons.



**FigII-4** Spectre d'absorption de GaAs pour différentes températures

Lorsque la bande de conduction contient des électrons, un photon incident peut être absorbé en leur communiquant de l'énergie. Cette absorption par les porteurs libres correspond à une transition intra-bande, qui nécessite une interaction avec un phonon pour la conservation du vecteur d'onde. Le coefficient d'absorption est proportionnel au carré de la longueur d'onde du rayonnement incident, et ce

phénomène est plus important aux grandes longueurs d'onde (IR). Par ailleurs, dans le domaine de l'infrarouge lointain, il apparait les bandes d'absorption associées aux modes de vibration du réseau cristallin. La largeur de la bande interdite étant fonction de la température, le seuil d'absorption en dépend également [18]. On voit par ailleurs apparaître a basse température un pic au voisinage du seuil, qui correspond a l'absorption excitonique (les excitons sont des paires électron-trou non encore dissociées, l'énergie de liaison entre les deux particules introduisant un niveau légèrement inférieur au bas de la bande de conduction [19]).

### II.5.2. Indice de réfraction

Dans un semiconducteur, le constant diélectrique s'écrit en fonction de la fréquence sous la forme :

$$\varepsilon = 1 + \frac{4\pi N e^2}{m^* (-\omega^2 - j\Gamma\omega)} \text{ avec } \omega = 2\pi\nu \quad (2-3)$$

Où  $\Gamma$  caractérise l'absorption du milieu.  $\varepsilon$  est une grandeur complexe.

De la même façon, l'indice de réfraction est complexe :

$$\tilde{n} = n - jX \quad (2-4)$$

ou  $\alpha$  est le coefficient d'extinction, relie au coefficient d'absorption  $\alpha$  par l'expression :

$$\alpha = \frac{4\pi\nu X}{c} \quad (2-5)$$

Les parties réelles et imaginaires de l'indice de réfraction sont liées par les relations de Kramers Kronig :

$$n(\omega) - 1 = \frac{2}{\pi} P \int_0^\infty \frac{\omega' X(\omega')}{\omega'^2 - \omega^2} d\omega' \quad (2-6)$$

(P = partie principale)

En haute fréquence, l'indice de réfraction est lie a la constante diélectrique par la relation :

$$n = \sqrt{\varepsilon}$$

Le coefficient de réflexion du matériau s'écrit :

$$R = \frac{(n-1)^2 + X^2}{(n+1)^2 + X^2} \quad (2-7)$$



Il faut remarquer que dans les alliages ternaires, l'indice de réfraction dépend de la composition, c'est-à-dire de la concentration en aluminium, et ceci est utilisé dans la réalisation des diodes laser en particulier.

### II.5.3. Recombinaison des porteurs, transitions radiatives

La recombinaison directe bande à bande se fait entre un électron du bas de la bande de conduction et un trou du sommet de la bande de valence, les porteurs étant thermalisés dans chaque bande. Si l'énergie correspondante est emportée par un photon ( $h\nu = E_g$ ), la transition est radiative, et son spectre est étroit.

Le taux de recombinaison est proportionnel à la densité de porteurs dans l'état haut  $n_2$ , et à la densité de places libres dans l'état bas  $n_1$  :

$$R_{21} = P_{21}n_2n_1 \quad (2-8)$$

$P_{21}$  état la probabilité de transition par porteur libre.

Le processus de recombinaison suppose que le système est initialement hors d'équilibre, ce qui peut être obtenu soit par excitation par un courant électrique conduisant à un phénomène de claquage pour l'électroluminescence, soit par excitation optique par des photons d'énergie supérieure au gap pour la photoluminescence, soit par un faisceau d'électrons pour la cathodoluminescence.

Les recombinaisons radiatives ne sont pas les seules possibles. En effet, l'énergie libérée par la recombinaison peut être communiquée à un autre porteur, qui passe à un niveau plus excité dans la bande (effet Auger). Par ailleurs, les niveaux profonds existant dans la bande interdite peuvent jouer le rôle de centres de recombinaison : l'électron et le trou ayant des probabilités voisines de venir peupler ce niveau se recombinent alors par son intermédiaire (transition indirecte). Certains de ces niveaux peuvent accepter préférentiellement un électron ou un trou, jouant le rôle de pièges qui modifient la durée de vie effective des porteurs en fonction du coefficient d'émission du niveau.

En régime permanent de déséquilibre, par exemple sous l'effet d'un éclairage continu, le nombre de porteurs en excès résulte de l'équilibre entre la génération  $G$  de paires électron-trou et la recombinaison :

$$G = P_{21}n_2n_1$$

Supposons un matériau de type n, on a :

$$n_2 = N + \Delta N$$

$$n_1 = \Delta P$$

ou  $\Delta N$  et  $\Delta P$  sont les nombres de porteurs en excès, et sont égaux si les phénomènes de piégeage sont négligeables. Il vient :

$$G = P_{21}(N + \Delta N)\Delta N \quad (2-9)$$

Si le nombre de porteurs en excès est faible par rapport au dopage ( $\Delta N \ll N_D$ ) il est proportionnel au taux de génération :

$$\Delta N = G\zeta \quad (2-10)$$

Où

$$\zeta = \frac{1}{P_{21}N_D}$$

Représente la durée de vie des porteurs.

Par contre, si le déséquilibre est important, pour  $\Delta N \gg N_D$ , on a :

$$\Delta N = \sqrt{\frac{G}{P_{21}}} \quad (2-11)$$

$\Delta N$  n'est plus proportionnel à  $G$ , et on ne peut pas dans ce cas-là définir une durée de vie significative puisqu'elle varie avec le taux de génération [20]. Ceci se traduit par exemple par une décroissance non exponentielle du photo courant après une impulsion lumineuse.

Dans la mesure où on peut définir des durées de vie  $\zeta$  et  $\zeta'$  respectivement pour les transitions radiatives et les transitions non radiatives, l'efficacité de recombinaison radiative est donnée par [20] :

$$\frac{R}{R_T} = \frac{1}{1 + \frac{\zeta'}{\zeta}} \quad (2-12)$$

L'émission dont il a été question ici est l'émission spontanée. Un photon incident peut également induire une transition radiative, avec émission d'un second photon ayant des caractéristiques identiques au premier ; c'est l'émission stimulée, qui est à la base du fonctionnement des lasers.

## II.6. Propriétés électriques

**Table II-3** Comparaison des propriétés électriques du silicium et des semi-conducteurs III-V[20]

Matériau	Si	GaAs	InP	GaN
Nature du gap	indirect	direct	direct	direct
Gap à 300K (eV)	1.11	1.42	1.35	3.36
Tension de claquage (V/cm)	$2.5 \times 10^5$	$3.0 \times 10^5$		$2.0 \times 10^6$
Vitesse de saturation (cm/s)	$10^7$	$10^7$	$10^7$	$2.0 \times 10^7$
Mobilité des électrons ( $\text{cm}^2/\text{V.s}$ )	1500	8500	4600	500-1000
Conductivité thermique ( $\text{W}/\text{cmC}^0$ )	1.5	0.55	0.68	1.3

Le tableau II-3 compare les propriétés électriques du silicium et de quelques semi-conducteurs III-V. Les constituants des composés III-V appartiennent, comme leur nom l'indique, aux colonnes III et V de la table périodique des éléments. L'arséniure de gallium (GaAs) et le phosphore d'indium (InP) forment les composés binaires de base et jouent le rôle de substrats, sur lesquels d'autres couches réalisées à partir de composés ternaires ou quaternaires peuvent être déposées par croissance cristalline. L'atout majeur des semi-conducteurs III-V est leur gap direct (contrairement au silicium) qui en fait des composants de choix pour les dispositifs optoélectroniques. La notion de gap direct et indirect est liée à la représentation énergétique d'un semi-conducteur, dans le diagramme E (Energie) - k (vecteur d'onde). Ce type de diagramme permet de définir spatialement les extrema des bandes de conduction (BC) et de valence (BV) du cristal qui représentent, à l'équilibre, les domaines énergétiques où les densités de porteurs type p et n sont importantes (figure II-5). Des diodes électroluminescentes (LEDs) infrarouge ou des cellules photovoltaïques. La famille des matériaux III-V s'est plus récemment agrandie avec l'arrivée d'un nouveau matériau, le nitrure de gallium (GaN). Egalement direct, le gap du GaN atteint 3,43 eV à 300 K. C'est donc un matériau à grand gap qui permet de couvrir toute la gamme spectrale du proche ultraviolet au visible. Dans les années 1990, le bleu, inaccessible aux autres semi-conducteurs, est devenu le domaine d'excellence du GaN.

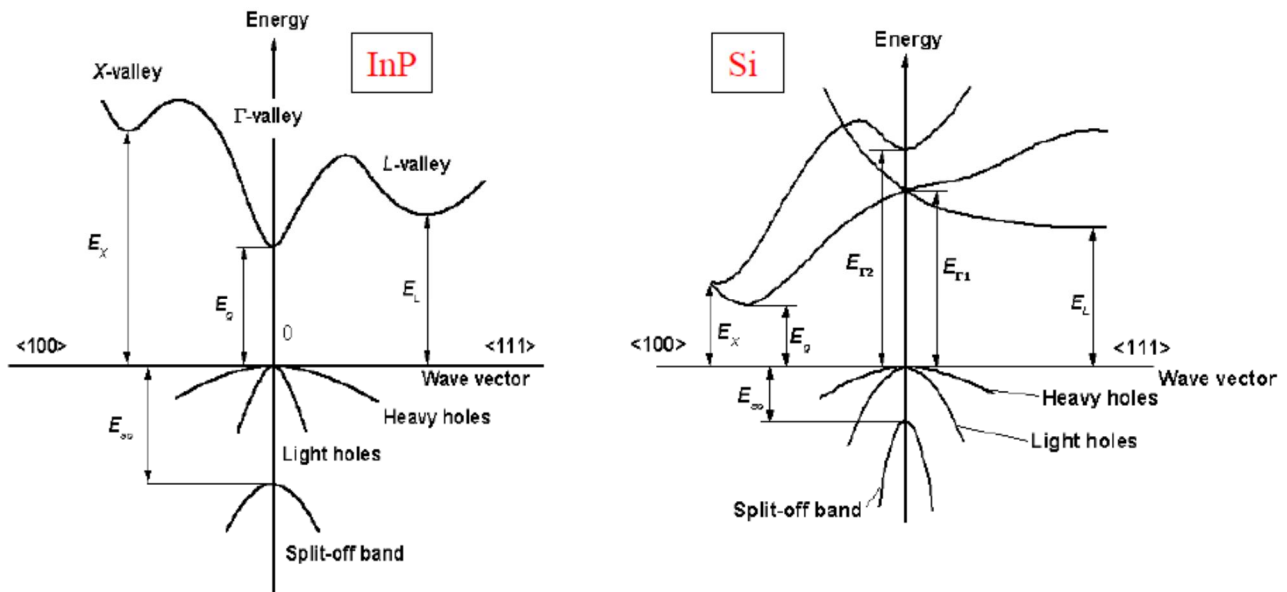


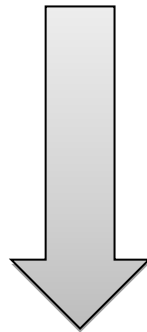
Figure II-5 Comparaison des structures de bandes du silicium (Si) et du phosphore d'indium (InP) dans le diagramme E (Energie) - k (vecteur d'onde).

Parmi les autres avantages des matériaux III-V sur le silicium, le GaAs et l'InP possèdent de grandes vitesses de saturation et des mobilités plus élevées, ce qui leur permet de fonctionner à des fréquences pouvant atteindre 250 GHz. De même, la tension de claquage des composés III-V est très élevée (10 fois supérieure à celle du silicium dans le cas du GaN), ce qui en fait d'excellents candidats pour l'électronique de puissance. Les semiconducteurs III-V présentent donc un fort potentiel pour les applications hyperfréquences de puissance, notamment pour les transistors bipolaires ou transistors à effet de champ (FET). Enfin, un atout supplémentaire est la possibilité de réaliser des alliages ternaires et quaternaires à partir des éléments Ga, As, Al, In, P ou N, en remplaçant l'un des éléments par un élément de la même colonne. Les matériaux III-V offrent ainsi une grande variété de compositions permettant de modifier leurs propriétés électriques.

## II.7. Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons pris un aperçu sur les propriétés optiques largement utilisées en optoélectronique des semi-conducteurs III-V qui sont à la base des composants photoniques moderne tel que le laser, les LED's et les photo détecteurs.

# CHAPITRE III



**CALCUL DU GAIN OPTIQUE**

### III.1. Introduction

Nous rappellerons tout d'abord la formulation de la probabilité de transition ainsi que l'expression générale du gain optique. Les hypothèses et les relations ainsi établies nous permettront de déterminer le gain optique dans le puits quantique [21]

### III.2. Gain optique

Si nous considérons une onde électromagnétique se propageant dans la direction  $z$ , alors l'augmentation nette du flux de photons par unité de longueur suivant  $z$  peut être écrite

$$\frac{d\Phi}{dz} = w_{c \rightarrow v} - w_{v \rightarrow c}, \quad (3-1)$$

Où  $\Phi$  est le flux de photons (en unités  $s^{-1} \cdot cm^{-2}$ ). Le gain optique du matériau est généralement défini comme l'incrément fractionnaire en photons par unité de longueur

$$g = \frac{1}{\Phi} \frac{d\Phi}{dz} = \frac{w_{c \rightarrow v} - w_{v \rightarrow c}}{\Phi} \quad (3-2)$$

Le gain est ainsi une fonction de l'énergie des photons. Pour un matériau massif, l'équation 3-2 nous permet d'établir tout ce qui est nécessaire pour estimer le gain spectral (en considérant un matériau non dopé seulement les transitions bande-à-bande sont importantes).

Dans un matériau à puits quantique, la situation est plus complexe à cause du nombre important des niveaux quantifiés à partir desquels se produisent les transitions.

Dans ce cas, la relation précédente pour le gain correspond au gain produit dans chaque transition de sous-bandes dans le puits. Le gain total pour l'énergie d'un photon particulier est obtenu en sommant sur tous les niveaux [22]

$$g(\hbar\omega) = \sum_{i=1}^m g_i(\hbar\omega) \quad m = 1, 2, \dots \dots \dots \quad (3-3)$$

La quantité qui nous intéresse particulièrement est appelée gain optique du matériau et est le paramètre qui permettra de définir le seuil laser. L'expression la plus générale du gain est :

$$g_i(E_{21}) = \frac{r_{21st}}{v_g P(E_{21})} \quad (3-4)$$

Cette expression peut être appliquée

- Au semi-conducteur massif

Dans ce cas, les densités d'états sont données par les expressions paraboliques habituelles

Dans la bande de conduction :

$$\rho_c(E) = \frac{1}{\pi^2} \left[ \frac{2m_c}{\hbar^2} \right]^{\frac{3}{2}} \sqrt{E} \quad (3-5)$$

Dans la bande de valence

$$\rho_v(E) = \frac{1}{\pi^2} \left[ \frac{2m_v}{\hbar^2} \right]^{\frac{3}{2}} \sqrt{E} \quad (3-6)$$

- Au puits quantique.

La densité d'états est une fonction en marche d'escalier et s'exprime en fonction de la largeur  $L_p$  du puits [23]

$$\rho(E) = \frac{m_e}{L_p \pi \hbar^2} \sum_{n=1}^M H(E - E_n) \quad (3-7)$$

Où  $H$  est la fonction de Heaviside

$$H(E - E_n) = \begin{cases} 1 & \text{si } E \geq E_n \\ 0 & \text{si } E < E_n \end{cases} \quad (3-8)$$

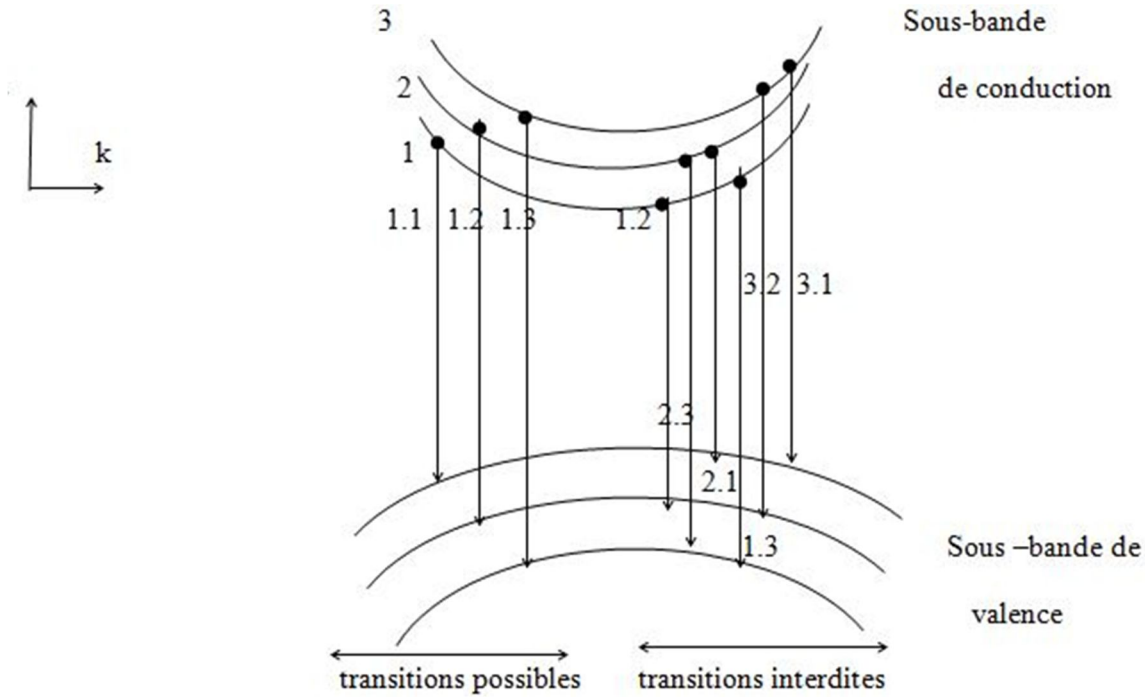
### III.2.1. Gain optique pour un puits quantique

Nous nous intéressons à présent à la quantité  $g(E) = -\alpha(E)$ . En effet, ce paramètre est la grandeur essentielle du fonctionnement des diodes laser, puisqu'il faudra non seulement qu'il soit positif pour que le milieu soit amplificateur de photons, mais encore qu'il atteigne une valeur telle que les pertes de la cavité soient compensées pour que l'émission laser apparaisse. Plusieurs auteurs ont proposé une méthode de détermination du gain optique des structures à puits quantique. Nous avons choisi un modèle qui tient en compte la règle de sélection des  $k$ . D'autre part, nous ne considérerons que les transitions faisant intervenir les trous lourds, car les trous légers présentent une masse faible, et par suite une densité d'états suffisamment faible pour que leur contribution reste négligeable.

#### III.2.1.1. Expression du gain optique

Si la règle de sélection est satisfaite, le fait de fixer l'énergie de transition  $E_{tr}$  détermine le niveau initial  $E_c$  et le niveau final  $E_v$ . En effet le vecteur d'onde devant être conservé, il n'existe qu'une seule paire d'états  $(E_c, E_v)$  qui satisfasse à la fois  $E_{tr} = E_c - E_v$  et  $k_c = k_v$ .

Dans ces conditions, on peut substituer au schéma habituel à deux bandes un schéma à une seule bande caractérisée par une masse réduite  $m_r$ .



**Figure III.1. Transition entre les sous-bandes de conduction et les sous-bandes de valence d'un puits quantique**

Dans un puits quantique avec M niveaux quantifiés la densité d'état s'écrit

$$\rho_r(E) = \frac{m_r}{\pi \hbar^2 L_p} \sum_{n=1}^M H(E - E_n) \tag{3-9}$$

Le gain s'écrit alors tout simplement

$$g_n(E_{tr}) = \frac{n}{c} B_{tr} \rho_r(E_{tr}) [f_c(E_c) - f_v(E_v)] \tag{3-10}$$

L'expression finale détaillée du gain optique pour un puits quantique s'écrit donc [23]

$$g(\omega) = \frac{\omega}{\pi \hbar^2 L_p} \sqrt{\frac{\mu}{\varepsilon} \frac{m_c m_v}{m_c + m_v}} \sum_{n=1}^M |M_p|^2 \cdot (f_c - f_v) \tag{3-11}$$

Où  $\omega$  est la fréquence angulaire, n l'indice de réfraction,  $\varepsilon$  la permittivité,  $\mu$  la perméabilité et les fonctions de distribution de Fermi-Dirac pour les bandes de conduction et de valence qui s'écrivent

$$f_c(E) = \frac{1}{\left[ 1 + \exp\left( \frac{E_{cn} + \frac{m_r}{m_e}(E - E_g) - E_{FC}}{k_b T} \right) \right]} \tag{3-12}$$

$$f_v(E) = \frac{1}{\left[ 1 + \exp\left( \frac{E_{vhn} + \frac{m_r}{m_{hh}}(E - E_g) - E_{Fv}}{k_b T} \right) \right]} \tag{3-13}$$

$m_{hh}$  est la masse effective des trous lourds,  $m_e$  la masse effective des électrons et  $m_r$  la masse réduite.

L'élément de la matrice optique est donnée par



$$|M_p|^2 = \frac{3}{4} \left[ 1 + \frac{E_{cn}}{\frac{m_r}{m_c}(E - E_g)} \right] |M|^2 \quad (3 - 14)$$

avec

$$|M|^2 = \frac{m_0 E_g (E_g + \Delta)}{12 m_e \left( E_g + \frac{2\Delta}{3} \right)} \quad (3 - 15)$$

Où  $E_g$  est l'énergie de la bande interdite,  $\Delta$  l'énergie de l'interaction spin-orbite,  $m_0$  la masse de l'électron dans le vide et  $m_e$  la masse effective de l'électron.

$$|M|^2 = 1.33. m_0. E_g \quad (3 - 16)$$

En utilisant l'expression du gain optique précédente, nous avons supposé qu'un électron dans une bande de conduction reste stable dans état s'il ne rentre pas en interaction avec des photons. En réalité, les interactions probables avec les phonons et d'autres électrons dispersent l'électron dans. Ainsi, la durée de vie d'un état donné n'est pas infinie. Il est actuellement admis qu'approximativement a cheque 0.1 ps, un électron ou un trou saute sur un nouvel état, et par conséquent nous obtenons un étalement d'énergie pour chaque état égal à

$\Delta E = \frac{\hbar}{w_{in}} = 0.7 meV$  de chaque coté de l'énergie. Ceci signifie qu'un photon incident avec une énergie n'entrera pas en interaction seulement avec des transitions données par  $E_{ev} = \hbar\omega$ , mais également avec des transitions à l'intérieur d'un étalement d'énergie  $E_{ev} = \hbar\omega \pm \Delta E$ .

Pour inclure l'élargissement spectral de chaque transition, nous convolons l'expression du gain optique avec une certaine fonction  $L(E_{tr})$  donnée par l'expression suivante

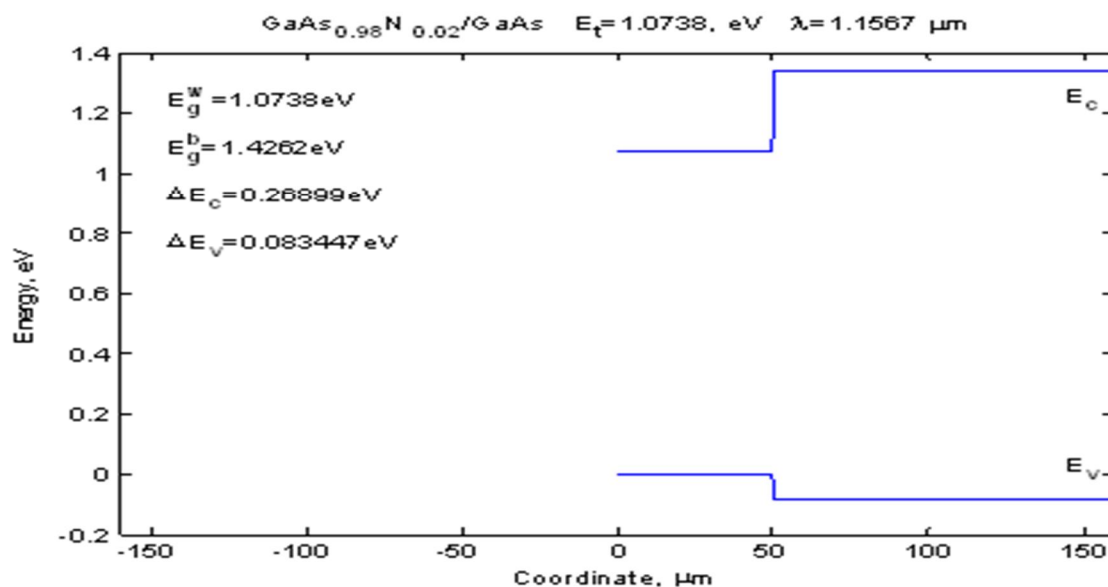
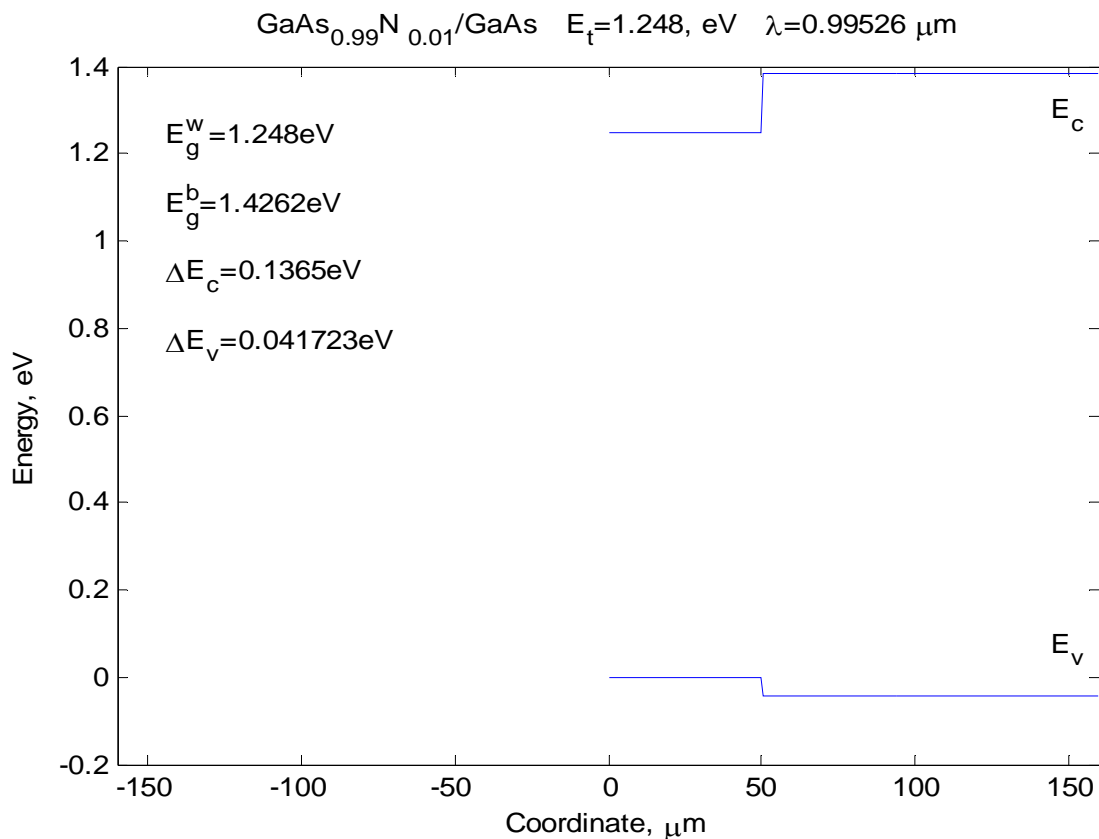
$$L(E_{eh}) = \frac{1}{\pi} \frac{\hbar/w_{in}}{(E_{eh} - \hbar\omega)^2 + \left(\hbar/w_{in}\right)^2} \quad (3 - 17)$$

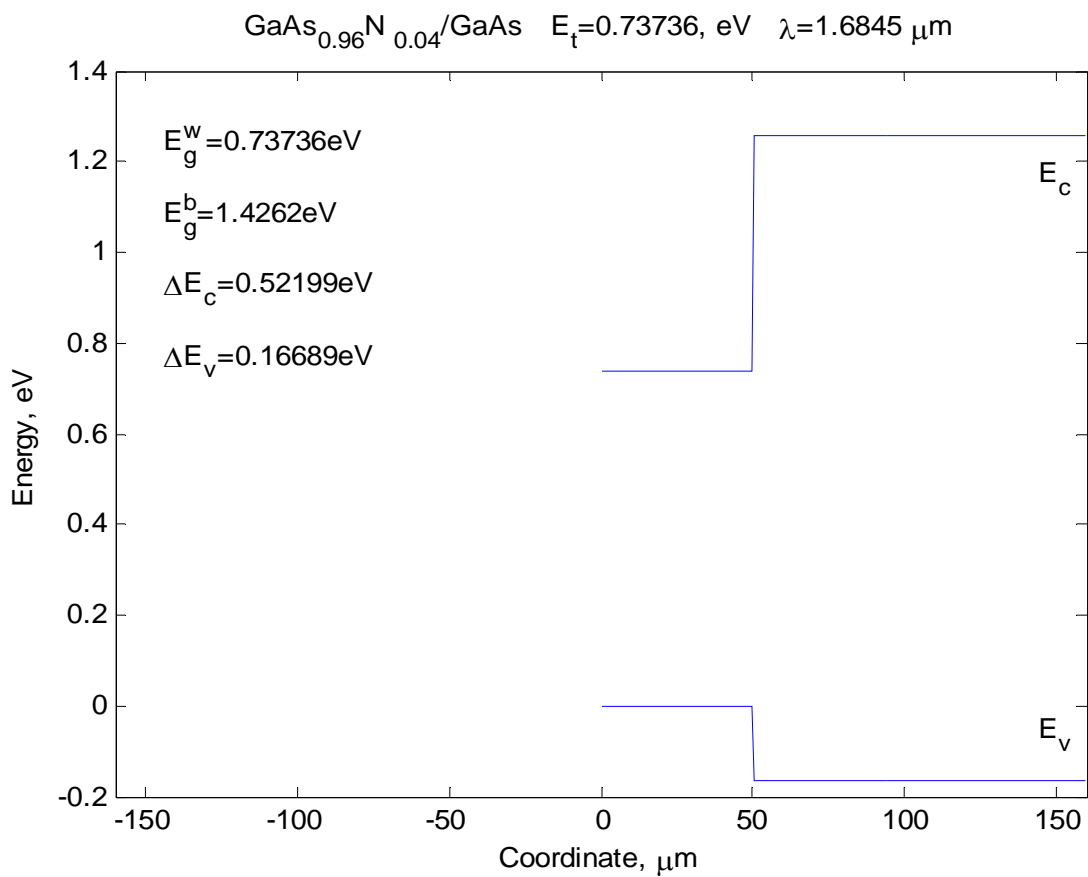
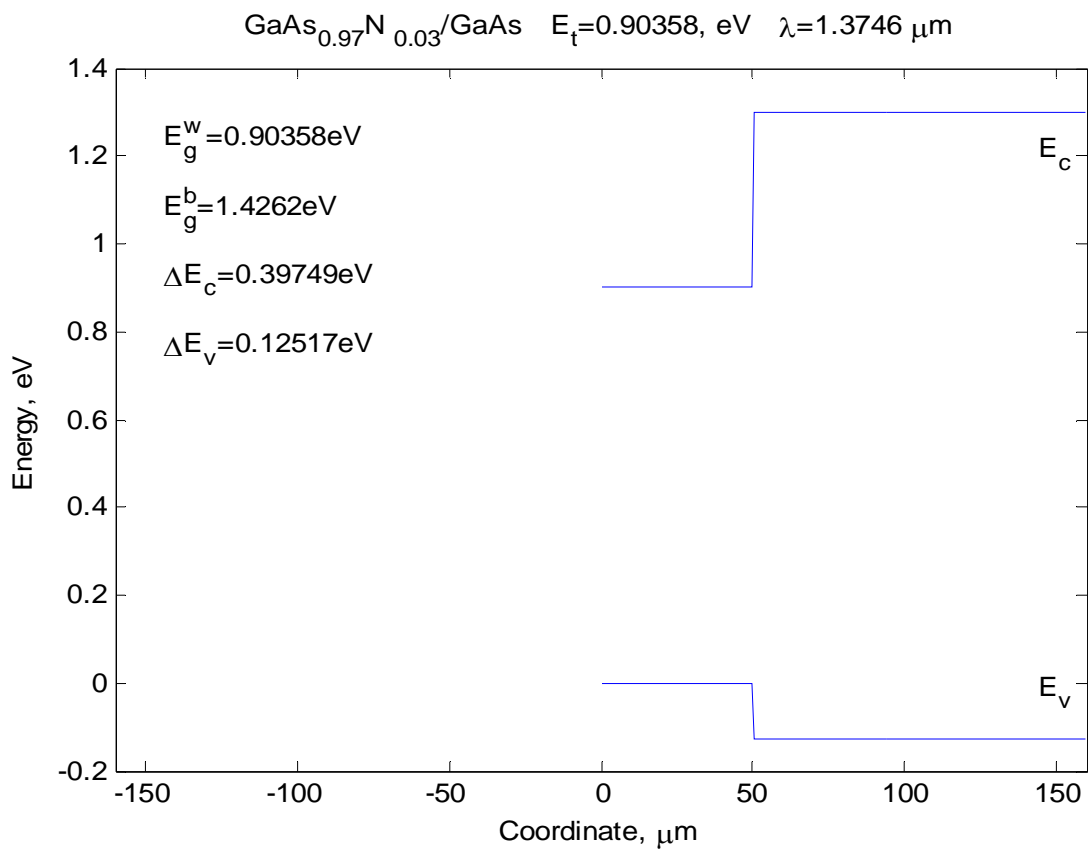
$$G(\hbar\omega) = \int g(\hbar\omega). L(E_{eh}) dE_{eh} \quad (3 - 18)$$

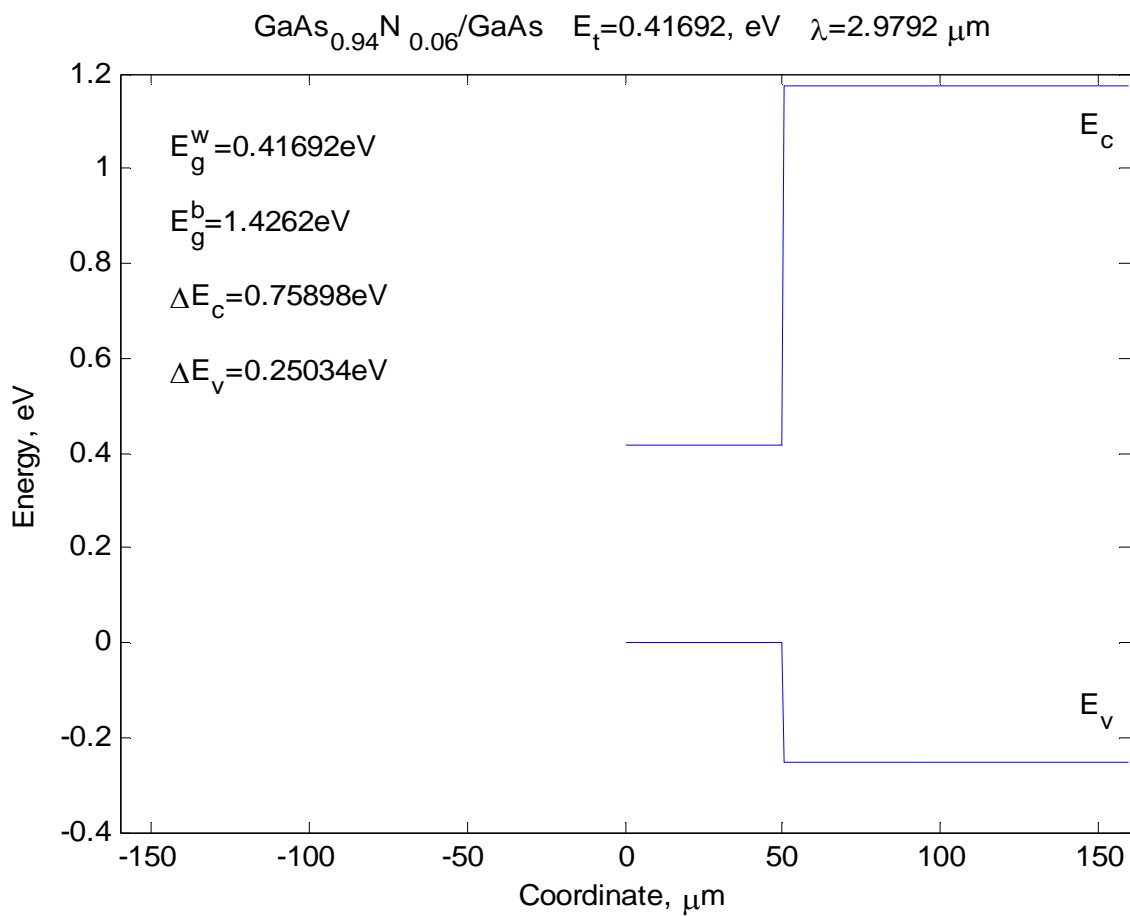
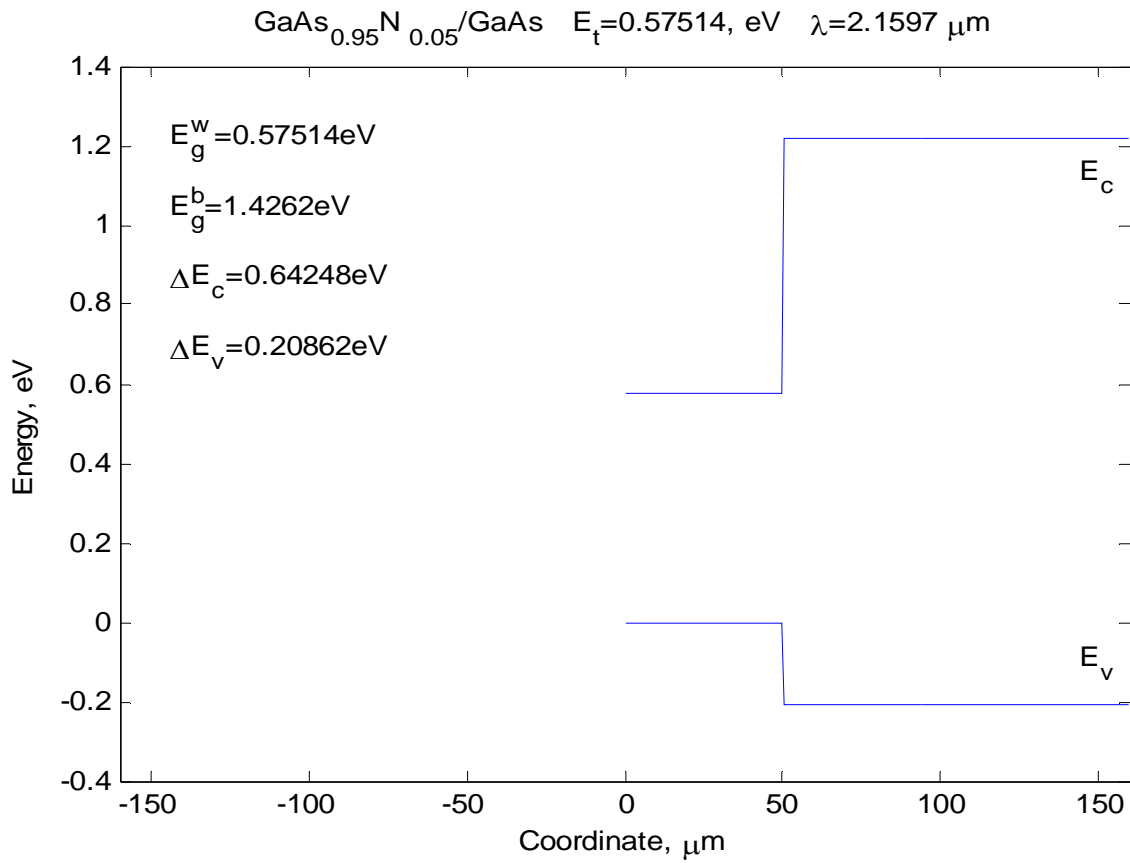
$L(E_{eh})$  est une fonction de forme Lorentzienne normalisée et est le temps de relaxation intra bande ou simplement la durée de vie de chaque état.  $G(\hbar\omega)$  Est maintenant le gain lissé spectralement. L'utilisation de la fonction Lorentzienne est communément utilisée. Plus récemment, cependant, des fonctions plus sophistiquées ont été établies. Plusieurs chercheurs ont suggéré que l'état régresse initialement plus long. La fonction correspondante a été extraite ces chercheurs et plus tard approximée par Chinn. Asada a aussi fait une analyse détaillée de la dispersion intrabande dans des puits quantiques, arrivant a une fonction asymétrique qui tend plus vite qu'une Lorentzienne du coté de plus faible énergie de transition [24].

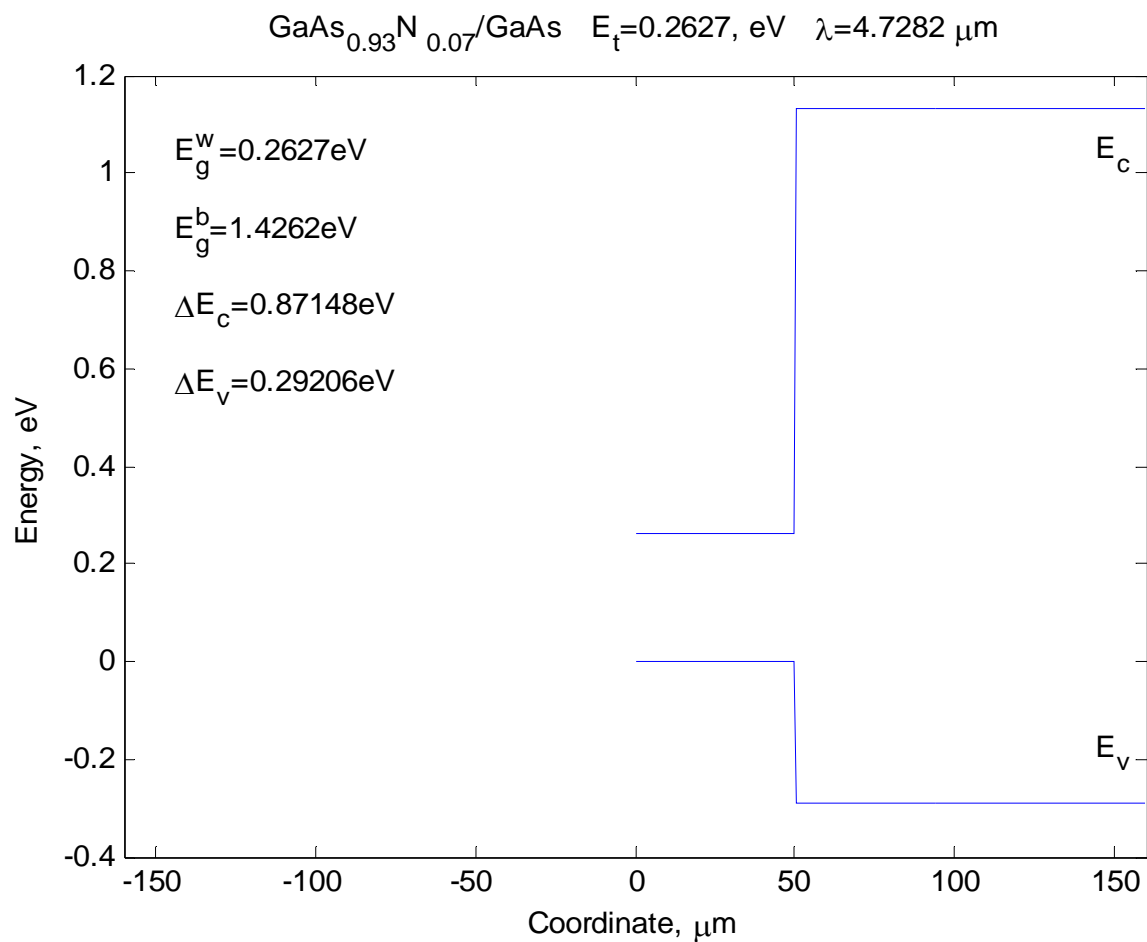
### III.2.1.2. La variation de la bande interdite pour $x < 0.07$

Pour que le puits quantique localise les porteurs de charge, il faut que la bande interdite  $E_g$  de  $\text{GaAs}_{1-x}\text{N}_x$  soit inférieure à la bande interdite  $E_g$  de GaAs c'est-à-dire  $E_{g\text{GaAsN}} < E_{g\text{GaAs}}$  mais suivant la loi de Vegard pour les matériaux III-V  $E_{g\text{GaAsN}} > E_{g\text{GaAs}}$ , la figure III-2 montre que pour les matériaux dilués ( $x < 0.07$ ) la bande interdite du matériau ternaire qui contient l'élément N diminue par rapport à GaAs au lieu d'augmenter et par conséquent ce système fonctionne impeccablement pour l'émission de la lumière.









### band gap energie de $\text{GaAs}_{1-x}\text{N}_x$ pour différentes concentrations

materiaux	Band gap energie (ev)	$\Delta E_c(\text{ev})$
GaAs	1.42	0
$\text{GaAs}_{0.99}\text{N}_{0.01}$	1.25	0.13
$\text{GaAs}_{0.98}\text{N}_{0.02}$	1.07	0.27
$\text{GaAs}_{0.97}\text{N}_{0.03}$	0.90	0.39
$\text{GaAs}_{0.96}\text{N}_{0.04}$	0.74	0.52
$\text{GaAs}_{0.95}\text{N}_{0.05}$	0.57	0.64
$\text{GaAs}_{0.94}\text{N}_{0.06}$	0.41	0.76
$\text{GaAs}_{0.93}\text{N}_{0.07}$	0.26	0.87

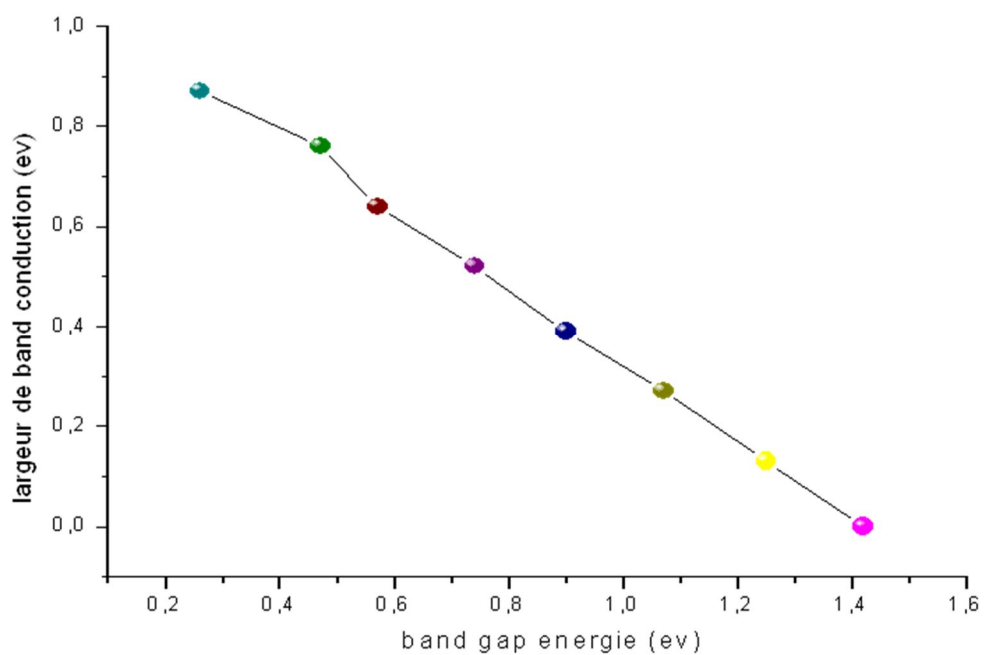


Figure III.2 Largeur de band conduction de  $\text{GaAs}_{1-x}\text{N}_x$  (ternair) à fonction band gap enrgie

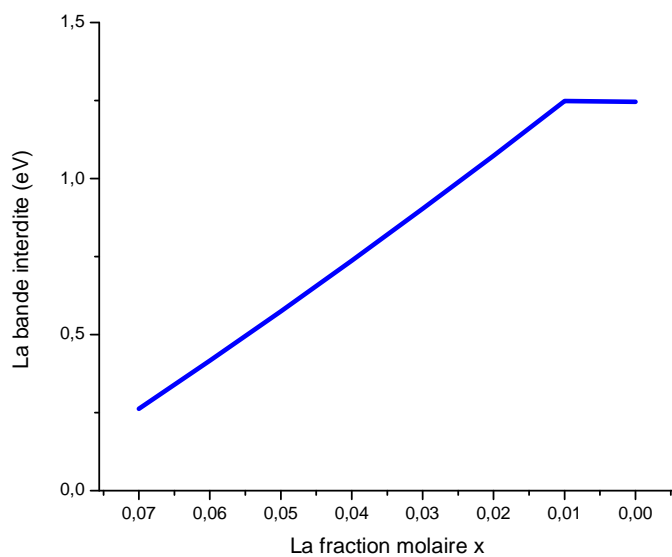
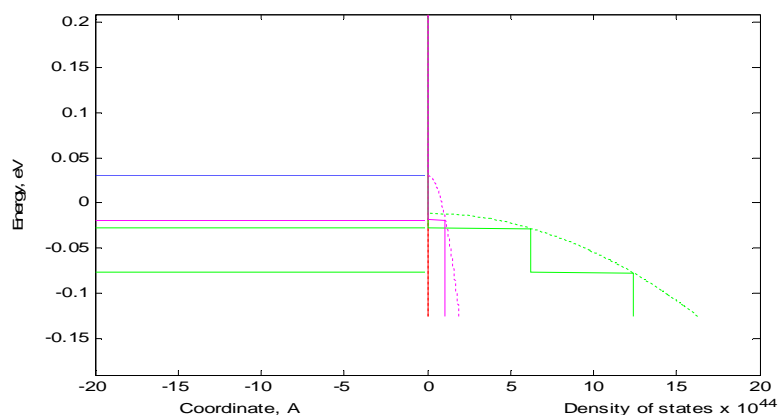


Figure III.3. La bande interdite  $E_g$  en fonction de la fraction molaire x

### III.2.1.3. La densité d'état du système GaAs<sub>0.97</sub>N<sub>0.03</sub>/GaAs

Sur la figure III.4. nous observons les marches de l'escalier de la densité d'état dans la bande de valence engendrer par le puits quantique de notre système pour une fraction molaire  $x=0.03$ , une température  $T=300$  K et une largeur de puits  $L_p=06$  nm.

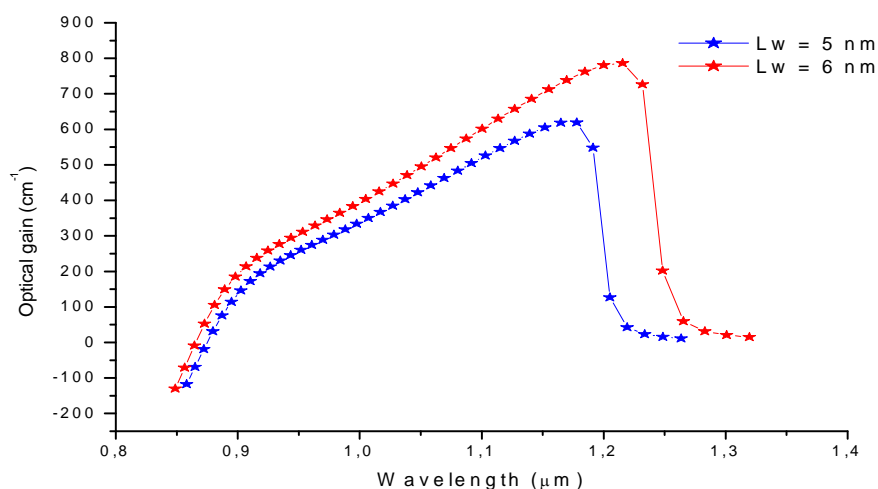


**Figure III.4.** La densité d'état du GaAs<sub>0.97</sub>N<sub>0.03</sub>/GaAs  
à  $T=300$  K pour  $N=4 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$  et  $L_p=6$  nm

## III.2.2. Spectre du gain

### III.2.2.1. Influence de la largeur de puits

L'influence de la largeur du puits pour deux valeurs  $L_p = 05$  nm et  $06$  nm en fonction de la longueur d'onde pour  $x=0.03$  est illustrée sur la figure III.5. On remarque que le gain optique augmente avec l'augmentation de la largeur du puits. On interprète cette diminution par le resserrement des bandes quantifiées.



**Figure III.5.** Variation du gain optique en fonction de la largeur du puits quantique

### III.2.2.2. Influence de l'injection

Sur la figure III.6. nous observons l'évolution du gain optique pour différentes concentrations des porteurs de charge  $N$  pour une largeur de puits  $L_p=06$  nm, nous observons que le gain maximum augmente avec l'augmentation de la concentration des porteurs de charge avec toutefois un changement vers le bas de la longueur d'onde correspondante.

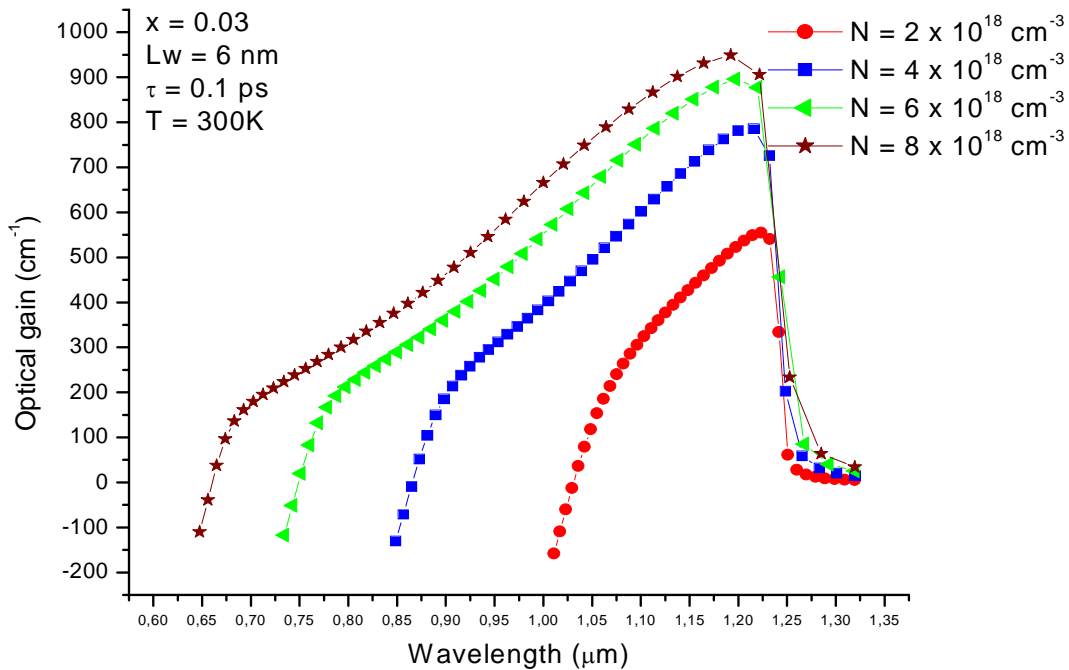
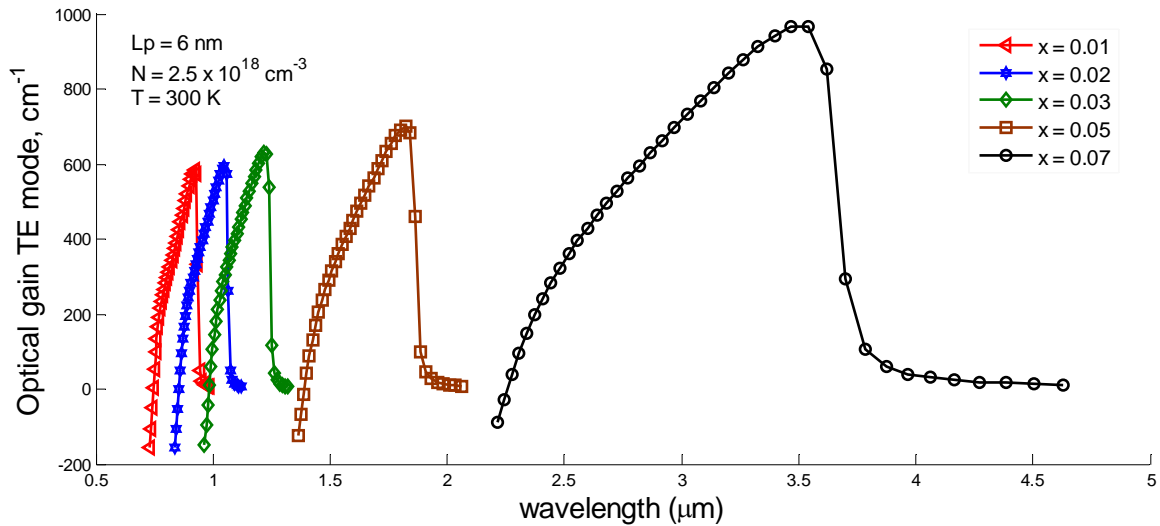


Figure III.6. : Spectre de gain pour différentes concentration de porteurs de charge à largeur de puits quantiques  $L_p = 06$  nm et à température ambiante  $T = 300$  K

### III.2.2.3 Influence de la fraction molaire

La figure III-7 montre que la variation de la fraction molaire  $x$  dans la gamme permise de nitrure dilué influe nettement sur la longueur d'onde d'émission et il augmente légèrement le gain optique.





**Figure III.7. Spectre de gain pour différentes fraction molaire  $x$  à largeur de puits quantiques  $L_p = 6 \text{ nm}$  et à température ambiante  $T = 300 \text{ K}$**

### III.3. conclusion

Le gain optique d'un laser à puits quantique  $\text{GaAs}_{0.97}\text{N}_{0.03}/\text{GaAs}$  a été examiné pour une composition de nitrure  $x=0.03$  avec la variation à la fois de la concentration des porteurs de charge et de la largeur du puits. L'on a remarqué que le gain optique maximal de notre système augmente avec la concentration des porteurs. Il augmente également avec l'augmentation de la largeur du puits. Pour la longueur d'onde émise, elle augmente lorsque la composition du nitrure augmente.

### conclusion général

Le gain optique d'un laser à puits quantique contraint GaAs<sub>1-x</sub>N<sub>x</sub>/GaAs a été examiné pour une seule composition  $x=0.03$  de nitrure avec la variation à la fois de la concentration des porteurs de charge et de la largeur du puits pour une émission dans l'infrarouge. L'on a remarqué que le gain optique maximal de notre système augmente avec la concentration des porteurs. Il augmente également avec l'augmentation de la largeur du puits. Pour la longueur d'onde émise, elle augmente lorsque la composition de nitrure augmente.

Nous avons résolu l'équation de Schrödinger numériquement et analytiquement pour le cas d'un puits quantique GaAs/GaAs<sub>1-x</sub>N<sub>x</sub>.

Dans ce travail, nous avons étudié l'effet de la concentration d'azote sur la bande gap énergie, où nous avons remarqué que l'augmentation de la concentration ( $x$ ) conduit à diminuer en valeur bande gap énergie.

Et aussi étudié l'effet Largeur de bande conduction ( $\Delta E_c$ ) sur bande gap énergie, où nous avons trouvé une augmentation ( $\Delta E_c$ ) conduit à une diminution de la valeur du (gap).

Il peut être utilisé puits quantique GaAs/GaAs<sub>1-x</sub>N<sub>x</sub> dans le domaine de laser ( $0 \leq x \leq 0.07$ )

## Bibliographie

- [1] Spruytte, S.G. (2001) MBE growth of nitride-arsenides for long-wavelength optoelectronics, *PhD Thesis*, Stanford University, April, 2001.
- [2] Riechert, H., Ramakrishnan, A. & Steinle, G. (2002) Development of InGaAsN-based 1.3  $\mu\text{m}$  VCSELs. *Semicond. Sci. Technol.*, 17, 892-897.
- [3] Mereuta, A., Saint-Girons, G., Bouchoule, S., Sagnes, I., Alexandre, F., Le Roux, G., Decobert, J. & Ougazzaden, A. (2001) (InGa)(NAs)/GaAs structures emitting in 1-1.6  $\mu\text{m}$  wavelength range. *Opt. Mater.*, 17, 185-188.
- [4] Hasse, A., Volz, K., Schaper, A.K., Koch, J., Hohnsdorf, F. & Stolz, W. (2000) TEM investigations of (Galn)(NAs)/GaAs multi-quantum wells grown by MOVPE. *C-st. Res. Technol.*, 787-792.
- [5] Fischer, M., Reinhardt, M. & Forchel, A. (2000) GaInAsN/GaAs laser diodes operating at 1.52  $\mu\text{m}$ . *Electron. Lett.*, 36, 1208-1209.
- [6] Kondow, M. (2004) GalnNAs long wavelength lasers for 1.3  $\mu\text{m}$  applications, in *Physics and Applications of Dilute Nitrides*, Eds. Buyanova, I. & Chen, W., Taylor & Francis, London.
- [7] M. Sugawara, "Optical gain process in wide-gap semiconductors: possibilities of blue-light bi-exciton lasing in quantum-well and quantum-dot lasers," *J. Cryst. Growth*, vol. 189-190, pp. 585-592, Jun. 1998.
- [8] Shimizu, H., Kumada, K., Uchiyama, S. & Kasukawa, A. (2001) Extremely large differential gain of 1.26 bum GaInNAsSb-SQW ridge lasers. *Electro. Lett.*, 37, 28-30.
- [9] Tansu, N., Yeh, J.Y. & Mawst, L.J. (2003) Low-threshold 1317-nm InGaAsN quantum-well lasers with GaAsN barriers. *Appl. Phys. Lett.*, 83, 2512-2514.
- [10] G. L. Bir and G. E. Pikus, *Symmetry and Strain-Induced Effects in Semiconductor* ~Wiley, New York, 1974.!
- [11] C. Chao and S. Chuang, "Spin-orbit-coupling effects on the valence-band structure of strained semiconductor quantum wells," *Phys. Rev. B*, vol. 46, no. 7, 1992.
- [12] J. Piprek, *Optoelectronic Devices*, Springer S. 2005.
- [13] S. Chuang, "Physics of optoelectronic devices," 1995.
- [14] W.j.fan, "Optical Gain in Zinc-blende GaN/Ga<sub>1-x</sub>Al<sub>x</sub>N Strained Quantum Well Laser," *Solid State Commun.*, vol. 98, no. 8, pp. 737-740, 1996.
- [15] Henry, C.H., Logan, R.A., Merritt, F.R. & Luongo, J.P. (1983) The effect of intervalence band absorption on the thermal behavior of InGaAsP lasers. *IEEE J. Quantum Electron.*, QE-19, 947-952.
- [16] Soda, H., Iga, K., Kitahara, C. & Suematsu, Y. (1979) GaInAsP/InP surface emitting injection lasers. *Jpn. J. Appl. Phys*, 18, 2329-2330.
- [17] Miller, D.A.B., Chemla, D.S., Damen, T.C., Gossard, A.C., Wiegmann, W., Wood, T.H. & Burrus, C.A. (1985) Electric field dependence of optical absorption near the band gap of quantum-well structures. *Phys. Rev. B*, 32, 1043-1060.
- [18] Kondow, M., Kitatani, T., Nakahara, K. & Tanaka, T. (1999) A 1.3-1 $\mu\text{m}$  GalnNAs laser diode with a lifetime of over 1000 hours. *Jim. J. Appl. Phys.*, 2 (38), L1355-L1356.
- [19] Goddard, L.L., Bank, S.R., Wistey, M.A., Yuen, H.B., Bae, H.P. & Harris, J.S. (2004) Reduced monomolecular recombination in GaInNAsSb/GaAs lasers at 1.5  $\mu\text{m}$ , LEOS 2004, Session MO 6.
- [20] Yokouchi, N., Yamanaka, N., Iwai, N., Nakahira, Y. & Kasukawa, A. (1996) Tensile-strained GalnAsP-InP quantum-well lasers emitting at 1.3  $\mu\text{m}$ . *IEEE J. Quantum Electron.*, 32, 2148-2155.

- [21] Livshits, D.A., Egorov, A.Y., Kochnev, I.Y., Kapinotov, V.A., Lantratov, V.A., Ledentsov, N.N., Nalyot, T.A. & Tarasov, I.S. (2001) Record power characteristics of InGaAs/AlGaAs/ GaAs heterostructure lasers. *Semiconductors*, 35, 365-369.
- [22] S.-A. Park, H.-J. Song, W.-T. Kim, H.-G. Kim, M.-S. Jin, C.-D. Kim, and C.-S. Yoon, "Photoluminescence properties of  $Mg_xZn_{1-x}Se$  single crystals," *J. Appl. Phys.*, vol. 83, no. 6, p. 3429, 1998.
- [23] I. Vurgaftman and J. R. Meyer, "Band parameters for III compound semiconductors and their alloys" *J. Appl. Phys.* 94, 3675, (2003).
- [24] C. Chao and S. Chuang, "Spin-orbit-coupling effects on the valence-band structure of strained semiconductor quantum wells," *Phys. Rev. B*, vol. 46, no. 7, 1992.

## Abstract

The optical gain of a strained  $\text{GaAs}_x\text{N}_{(1-x)}/\text{GaAs}$  quantum-well laser is studied theoretically, the electron, light-hole (lh), and heavy-hole (hh) subbands in the quantum well are determined by a solution of the Schrödinger equation in the envelope approximation using parabolic bands. It is found that well width alters the subband structures, the density of states and the optical gain of the quantum-well laser. The dependence of the optical gain on carrier density, well width is equally investigated. Numerical results clearly show that by increasing of carrier concentration and decreasing the wells width the optical gain increases.

## Résumé

Dans ce travail, nous avons fait l'étude théorique du gain optique pour le système  $\text{GaAs}_x\text{N}_{(1-x)}/\text{GaAs}$ , les bandes d'énergie de l'électron, trou lourd et trou léger dans le puits quantique sont déterminées par la solution de l'équation de schrodinger avec l'approximation envelope en utilisant les bandes paraboliques. Il a été trouvé que la largeur du puits altère la structure des bandes, la densité d'état et le gain optique du laser à puits quantique. La dépendance du gain optique avec la densité d'état, la largeur du puits est également étudiée. Les résultats numérique montre clairement que en augmentons la densité des porteurs de charge et en diminuant la largeur du puits le gain optique diminue.

## ملخص

في هذا العمل، قمنا بدراسة نظرية لتضخيم الضوئي لنظام الليزر المكون من المواد  $\text{GaAs}_x\text{N}_{(1-x)}/\text{GaAs}$  لبيئر كموني، بواسطة حل معادلة شرودينغر، شرائط الطاقة لكل من الإلكترون، الثقوب الثقيلة، الثقوب الخفيفة داخل البيئر الكموني تم ايجادها. ولقد تم ايجاد أن عرض البيئر يؤثر في بنية الشرائط، كثافة الحالة، والتضخيم الكموني الليزر ذو البيئر الكموني. ارتباط التضخيم الضوئي مع كثافة الحالة، عرض البيئرتم دراسته ايضا. تبين النتائج الرقمية بوضوح ان ارتفاع كثافة حاملة الشحنة وتقليل عرض البيئر، يؤدي إلى هبوط في التضخيم الضوئي.