

## RESUME

Dans cette thèse, nous avons utilisé la méthode des différences finie pour calculer les états électroniques du puits quantique GaN/AlInN avec 17.7% d'Indium dans le cas de la bande de conduction parabolique et le cas de la bande de conduction non-parabolique. Nous avons calculé les niveaux d'énergie et identifié les transitions énergétiques possibles. Nous avons calculé par la suite, la force d'oscillation de chaque transition et le coefficient d'absorption intersousbande. Cette thèse présente des résultats qui peuvent être très intéressants pour élaboration des structures physiques à base de semi-conducteurs utilisé dans le domaine optoélectronique. Ensuite, nous avons extrapolé ces études pour les puits quantique non contraints à base de ZnO pour faire une comparaison, et tire les géométries convenable pour emmitre des ondes térahertzique et des ondes pour la télécommunication par fibre optique.

**Mots-clés** : Puits quantique, confinement, énergies de transitions, force d'oscillation, amélioration de l'absorption.

## ABSTRACT

In this thesis, we used the finite difference method to calculate the electronic states of the GaN/AlInN quantum well with 17.7% Indium in the case of the parabolic conduction band and the case of the non-parabolic conduction band. We calculated energy levels and identified possible energy transitions. We then calculated the oscillation strength of each transition and the intersubband absorption coefficient. This thesis presents results that can be very interesting for the development of physical structures based on semiconductors used in the optoelectronic field. Then, we extrapolated these studies for unconstrained quantum wells based on ZnO to make a comparison, and derive the suitable geometries to emit terahertz waves and waves for optical fiber telecommunication.

**Keywords**: Quantum well, confinement, transitions energies, oscillation force, Absorption improvement.

N°dordre : 438/22

«Confinement quantique unipolaire dans les hétérostructures asymétriques GaN/AlInN et ZnO/MgZnO pour l'émission térahertzique et des applications en télécommunication»

MOUDOU L'houcine

Centre d'Études Doctorales : Sciences et Techniques

 Formation Doctorale : **Mathématiques et Physique Appliquée**
**THÈSE**

Présentée par

**L'houcine MOUDOU**

Pour l'obtention du grade de

**DOCTEUR**

 Discipline : **Physique**

 Spécialité : **Physique des matériaux et Energie**


---

 «Confinement quantique unipolaire dans les hétérostructures asymétriques GaN/AlInN et ZnO/MgZnO pour l'émission térahertzique et des applications en télécommunication»
 

---

Soutenue le Mardi 28 Juin 2022 à 10h devant la commission d'examen:

Pr. Anouar JORIO	Faculté des Sciences Dhar El Mahraz, Fès.	Président
Pr. Lhoucine OUFNI	Faculté des Sciences et techniques, Béni-Mellal.	Rapporteur
Pr. Ahmed SALI	Faculté des Sciences Dhar El Mahraz, Fès.	Rapporteur
Pr. Karoum Limame	Centre Régional des Métiers de l'Éducation et de la Formation (CRMEF), Fès-Meknès.	Rapporteur
Pr. Youssef LACHTIOUI	Faculté des Sciences et techniques, Béni-Mellal.	Examineur
Pr. Haddou EL GHAZI	Ecole Nationale d'Arts et Métiers, Casablanca.	Examineur
Pr. Mustapha BOULGHALLAT	Faculté des Sciences et techniques, Béni-Mellal.	Co-encadrant
Pr. Khalid RAHMANI	Faculté Poly-disciplinaire, Béni-Mellal.	Directeur de Thèse

## Remerciements

Ce travail de thèse a été effectué au sein du laboratoire de recherche en physique et science pour l'ingénieur(LRPSI) de la Faculté Poly-disciplinaire de Béni-Mellal, et le laboratoire du développement durable (LDD) de la Faculté des sciences et techniques de Béni-Mellal. Je remercie ALLAH le Tout-puissant de m'avoir donné le courage, la volonté et la patience de terminer ce travail.

Je tiens tout d'abord à remercier mon directeur de thèse le Professeur **KHALID RAHMANI** de m'avoir accueilli au sein de son laboratoire et de mettre à ma disposition ses ressources matérielles et financières, puis pour son aide, ses conseils ainsi que la gentillesse et la patience qu'il a manifesté à mon égard durant cette thèse. Je le prie de trouver ici l'expression de ma très profonde gratitude. Mes remerciements vont également à mon co-directeur de thèse le Professeur **BOULGHALLAT Moustapha** de la Faculté des Sciences et Techniques de Béni Mellal de m'avoir confié des thèmes scientifiques d'actualité. Je tiens à le remercier de m'avoir guidé, encouragé, conseillé et surtout de me faire bénéficier à la fois de ses compétences scientifiques et de sa grande disponibilité. Je lui exprime toute ma reconnaissance pour le grand intérêt qu'il a toujours manifesté pour mes recherches.

Je remercie ensuite l'ensemble des membres du jury, qui m'ont fait l'honneur de bien vouloir examiner avec attention mon travail.

Je tiens à remercier Monsieur **Anouar JORIO**, Professeur à la Faculté des Sciences Dhar El Mahraz, Fès, pour l'intérêt qu'il a manifesté pour mon travail et pour avoir assuré la tâche de la présidence de jury.

Que messieurs, **Lhoucine OUFNI**, Professeur à la Faculté des Sciences et Techniques de Béni Mellal, **Ahmed SALI**, Professeur à la Faculté des Sciences Dhar El Mahraz, Fès, et **Karoum LIMAME**, Professeur au Centre Régional des Métiers de l'Education et de la Formation (CRMEF), Fès-Meknès, qui ont évalué le présent travail et m'ont fait l'honneur de le rapporter. Je tiens à leurs exprimer ici mes vifs remerciements.

J'adresse mes vifs remerciements à Monsieur **Youssef LACHTIOUI**, Professeur à la Faculté des Sciences et Techniques de Béni Mellal, et Monsieur **Haddou EL GHAZI**

Professeur à l'Ecole Nationale d'Arts et Métiers, Casablanca. Qui trouvent ici le témoignage de ma gratitude pour m'avoir fait l'honneur de participer au jury de cette thèse en tant qu'examineurs.

Mes remerciements s'imposent également pour tous les membres du laboratoire (LRPSI) et particulièrement les membres de l'équipe PhyMA de Béni Mellal et surtout **Mohamed Alhattab** pour son aide qu'il m'a apporté en me faisant profiter de ses compétences scientifiques et ses longues expériences. Nous étions en action mutuelle. Ses remarques et suggestions m'étaient d'un grand aide lors des interprétations des résultats et la mise en forme des publications. L'esprit d'équipe entre doctorants a favorisé considérablement les échanges constructifs. Pour leurs encouragements et leurs assistances aussi bien matérielles que morale qui m'ont permis de faire cette thèse dans de bonnes conditions.

Je remercie chaleureusement mes très chers parents, ma chère sœur, mes chers frères un par un, ainsi que toute ma famille et tous mes amis.

## Liste des publications

- 1) **L. MOUDOU**, M. AL-HATTAB, K. RAHMANI, M. KHENFOUCH, M. BOULGHALLAT (2022). Quantum confinement in GaInN/AlInN asymmetric quantum wells. Journal of Physics: Conference IOP. Accepté.
- 2) M. AL-HATTAB, **L. MOUDOU**, M. KHENFOUCH, O. BAJJOU, K. RAHMANI, (2022). DFT study of the electronic and elastic properties of  $\epsilon$  – GaSe and  $\beta$  – GaSe lamellar materials. Journal of Physics: Conference IOP. Accepté.
- 3) **Moudou, L.**, Mohamed, A. H., Bajjou, O., Boulghallat, M., Khenfouch, M., & Rahmani, K. (2022). Improvement of intersubband absorption in asymmetric quantum wells based on GaN/AlInN. Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures, 115168.
- 4) Mohamed Al-Hattab, **Lhoucine Moudou**, Youness Chrafi, Mohammed Khenfouch, Omar Bajjou and Khalid Rahmani. Numerical simulation of a new heterostructure CIGS/GaSe solar cell system using SCAPS-1D software Solar Energy / 31/08/ 2021. <https://doi.org/10.1016/j.solener.2021.08.084>.
- 5) Mohamed Al-Hattab, **Lhoucine Moudou**, Youness Chrafi, Mohammed Khenfouch, Omar Bajjou and Khalid Rahmani. First-principles calculation of the structural, electronic and optical properties of GaSe<sub>(1-x)</sub>S<sub>x</sub> (x = 0, 0.25, 0.5 and 1) compounds. Advances in Materials and Processing Technologies / 21/07/ 2021. <https://doi.org/10.1080/2374068X.2021.1939991>.

- 6) M. Al-Hattab, **L. Moudou**, Y. Chrafi, M. Khenfouch, O. Bajjou, and K. Rahmani. The anisotropic optical properties of different polytypes ( $\epsilon$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$ ,  $\delta$ ) of GaSe lamellar materials. Eur. Phys. J. Appl. Phys. 91, 30102 (2020) DOI: 10.1051/epjap/2020200136
  
- 7) Younes Chrafi, **Lhoucine Moudou**, Khalid Rahmani, Izeddine Zorkani, Mohammed Khenfouch, and Sanae Janati Edrissi, GaAs quantum well in the non-parabolic case: the effect of hydrostatic pressure on the intersubband absorption coefficient and the refractive index. 2019. Eur. Phys. J. Appl. Phys. 86, 20101. [https://DOI:10.1051/epjap/2019190035](https://doi.org/10.1051/epjap/2019190035).
  
- 8) **L.Moudou**, Y.Chrafi, K. Rahmani , I.Zorkani , 2018. Effect of conduction band non-parabolicity on the intersubband transitions in ZnO/MgxZn1-xO quantum well heterostructures. Journal of Physics: Conference Series 984, 012002. <https://doi.org/10.1088/1742-6596/984/1/012002>.

## Liste des figures

**Figure 1.1** : Structure hexagonale würtzite idéale de GaN.

**Figure 1.2** : Structure de bande de GaN würtzite selon les lignes de haute symétrie dans la zone de Brillouin.

**Figure 1.3** : Contribution des différents moments dipolaires pour la génération de la polarisation spontanée.

**Figure 1.4** : Polarités gallium et azote dans GaN hexagonal.

**Figure 1.5** : Génération d'un champ électrique E et de la charge surfacique par la polarisation spontanée dans un cristal GaN würtzite polarité gallium.

**Figure 1.6** : Effet de contrainte sur la polarisation et la charge surfacique d'une couche GaN polarité gallium.

**Figure 1.7** : Empilement alterné et périodique de deux semi-conducteurs A et B.

**Figure 1.8** : Energie de la bande interdite des alliages III-N recommandée par **Vurgaftman** en fonction du paramètre de maille a.

**Figure 1.9** : Mise en évidence de la formation du 2DEG à l'interface AlInN /GaN.

**Figure 2.1** : Structure d'un puits quantique.

**Figure 2.2** : Différentes configurations de puits quantiques.

**Figure 2.3** : A : les trois premiers niveaux et fonctions d'onde associées pour une particule dans un puits infiniment profond. L'unité d'énergie est  $\varepsilon = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m^* L^2}$  B : les densités de probabilité associées.

**Figure 2.4** : Puits quantique carré de largeur L et de hauteur  $V_0$ .

**Figure 2.5 :** Solutions graphiques des équations séculaires. Les solutions paires et impaires correspondent à l'intersection de l'ellipse avec les fonctions tangente (à gauche) et cotangente (à droite) respectivement.

**Figure 2.6 :** Profil de la bande de conduction d'une hétérostructure

**Figure 2.7 :** Solutions graphiques : les points d'intersections

**Figure 2.8 :** Fonctions enveloppes associées aux trois niveaux confinés

**Figure 2.9 :** Solutions graphiques : les points d'intersections

**Figure 2.10 :** Fonctions enveloppes associées aux trois niveaux confinés

**Figure 2.11 :** Elargissements des minibandes en fonction de la largeur de la barrière

**Figure 2.12 :** Résolution graphique de  $F(E)=\cos(qd)$

**Figure 2.13 :** Dispersion des minibandes du superréseau (4 minibandes).

**Figure 2.14 :** Energie de la bande interdite des alliages III-N recommandée par **Vurgaftman** en fonction du paramètre de maille  $a$ .

**Figure 2.15 :** Configurations de l'état de contrainte et de la densité de charges surfaciques de l'hétérostructure AlInN/GaInN dans la polarité gallium.

**Figure 2.16 -** (à gauche) Polarisation spontanée et piézoélectrique dans une hétérostructure de GaN/AlInN contrainte dans la polarité gallium. Et (à droite) Profil de potentiel de bande de conduction correspondant.

**Figure 2.17 :** Profil de potentiel de la bande de conduction.

**Figure 2.18 :** Structure est découpée en  $n+1$  couches de même épaisseur  $\Delta z$ , dans lesquelles le potentiel  $U_n$ , la masse  $m_n$  et la fonction enveloppe  $\chi_n$  sont constants.

**Figure 2.19 :** Profil de la BC, les positions des niveaux confinés et les fonctions enveloppes associées pour  $L_w=25 \text{ \AA}$  et  $L_b=60 \text{ \AA}$ .

**Figure 2.20** : Profil de la BC, la position des niveaux confinés et leurs fonctions enveloppes associées pour  $L_w=45 \text{ \AA}$  et  $L_b=60 \text{ \AA}$ .

**Figure 3.1** : Transition lié – lié (a) et lié – libre (b).

**Figure 3.2** : Minibandes de la transition lié-lié.

**Figure 3.3** : Minibandes dans une transition lié-libre.

**Figure 3.4** : Evolution des niveaux confinés en fonction la largeur de la barrière pour une largeur du puits 2.5nm.

**Figure 3.5** : Evolution des niveaux confinés (à gauche) et énergies de transitions (à droite) en fonction la largeur du puits pour une hauteur de barrière de 6nm.

**Figure 3.6** : Profil de la BC, la position des niveaux confinés et leurs fonctions enveloppes associées pour  $L_w=15 \text{ \AA}$  et  $L_b=60 \text{ \AA}$ .

**Figure 3.7** : Energies de transitions  $E_{i4}$  de et vers le quatrième niveau en fonction la largeur du puits pour une largeur du la barrière égale 6nm.

**Figure 3.8** : Profil de la BC, les positions des niveaux confinés et les fonctions enveloppes associées pour  $L_w=25 \text{ \AA}$  et  $L_b=60 \text{ \AA}$ .

**Figure 3.9** : Profil de la BC, la position des niveaux confinés et leurs fonctions enveloppes associées pour  $L_w=45 \text{ \AA}$  et  $L_b=60 \text{ \AA}$ .

**Figure 3.10** : Evolution du niveau de Fermi en fonction de la température.

**Figure 3.11** : Evolution des densités surfaciques des électrons  $n_i$  en fonction de la température.

**Figure 3.12** : (A gauche) : profil de bande de conduction et les niveaux confinés ainsi que les fonctions d'onde associées (u.a) pour  $L_w=3.5\text{nm}$ . (À droite) le coefficient d'absorption intersousbande en fonction de l'énergie.

**Figure 3.13 :** Coefficient d'absorption intersousbande en fonction de l'énergie. Pour  $L_w = 2.5 \text{ nm}$ , pour une densité  $n_s = 5.10^{11} \text{ cm}^{-2}$  et pour  $T=300\text{K}$ . (À gauche) le cas parabolique. (A droite) le cas non parabolique.

**Figure 3.14 :** Coefficient d'absorption intersousbande en fonction de l'énergie. Pour  $L_w = 2.5 \text{ nm}$ , pour une densité  $n_s = 5.10^{11} \text{ cm}^{-2}$  et pour  $T=400\text{K}$ . (À gauche) le cas parabolique. (A droite) le cas non parabolique.

**Figure 3.15 :** Evolution des maxima des pics d'absorption en fonction de la température.

**Figure 4.1 :** Arrangement cristallographique de la wurtzite pour le cristal ZnO.

**Figure 4.2 :** Arrangement cristallographique Zn et O et l'orientation de la polarisation spontanée.

**Figure 4.3 :** Structure de bande de la wurtzite de ZnO.

**Figure 4.4:** variation de la bande interdite en fonction du paramètre de maille pour différents semiconducteurs en phase wurtzite.

**Figure 4.5:** Profil de potentiel de la bande de conduction.

**Figure 4.6:** Evolution en fonction la largeur du puits pour  $L_b=8\text{nm}$ , (a) des niveaux confinés, (b) Les transitions énergétiques.

**Figure 4.7:** Fréquences de la transition  $E_{23}$ .

**Figure 4.8:** Profil de la BC, les positions des niveaux confinés et les fonctions enveloppes associées pour  $L_w=15 \text{ \AA}$  et  $L_b=80 \text{ \AA}$ .

**Figure 4.9 :** Profil de la BC, les positions des niveaux confinés et les fonctions enveloppes associées pour  $L_w=60 \text{ \AA}$  et  $L_b=80 \text{ \AA}$ .

**Figure 4.10:** Structure de barrière de potentiel.

**Figure 4.11 :** Coefficient de transmission d'une couche simple de MgZnO à 20% de Mg selon l'épaisseur de la couche avec  $V_b = 0.26 \text{ eV}$ .

**Figure 4.12 :** Coefficient de transmission d'une simple couche de MgZnO, épaisseur  $L_b=8$  nm selon la fraction  $x$  de Mg.

**Figure 4.13 :** Coefficient de transmission dans les cas parabolique et non parabolique,  $L_b = 8$  nm et  $V_b = 0,526$  eV.

**Figure 4.14 :** Evolution du niveau de Fermi en fonction de la température. A gauche : Effet de la non parabolicité de bande. A droite : Effet de la largeur de puits. Pour une barrière  $L_b = 6$  nm.

**Figure 4.15 :** Evolution des densités surfaciques des électrons  $n_i$  en fonction de la température pour les deux géométries de puits. (A gauche) : 6/6/6nm. (A droite) : 6/1.5/6nm.

**Figure 4.16 :** Variation du coefficient d'absorption intersousbande en fonction de l'énergie (u.a) pour les deux géométries de puits. A gauche : 6/6/6nm. A droite : 6/1.5/6nm.

**Figure 4.17 :** Coefficient d'absorption intersousbande de la transition  $E_{13}$  en fonction de l'énergie. Pour  $L_w = 6$  nm, pour une densité  $n_s = 5.10^{11}$   $\text{cm}^{-2}$ .

## Liste des tableaux

**Tableau 1.1.** Paramètres de maille des hétérostructures à base de nitrures

**Tableau 1.2.** Caractéristiques des substrats les plus employés pour la croissance du GaN [16].

**Tableau 1.3 :** Paramètres de maille, la polarisation spontanée, les constantes piézoélectriques et les constantes élastiques de GaN, d'alliage  $\text{Al}_{1-y}\text{In}_y\text{N}$ , d'InN et d'AlN

**Tableau 2.1 :** Eléments de la base  $\{U_{\ell,0}(\vec{r})\}_{1 \leq \ell \leq 8}$

**Tableau 2.2 :** Intersections, nombres d'onde et valeurs des énergies confinées

**Tableau 2.3 :** Intersections, nombres d'onde et valeurs des énergies confinées

**Tableau 2.4 :** Valeurs des énergies confinées aux points de haute symétrie  $\Gamma$  et  $X$ , et élargissements des minibandes correspondantes

**Tableau 2.5 :** Masse effective, énergie interdit et permittivité relative de GaN et  $\text{GaN}/\text{Al}_{0.823}\text{In}_{0.177}\text{N}$

**Tableau 2.6 :** Evolution des niveaux confinés et des énergies de transitions en fonction de la largeur du puits pour une largeur de la barrière fixe à 6nm

**Tableau 3.1:** Forces d'oscillations des différentes transitions [18].

**Tableau 4.1 :** Valeur des énergies de bande interdite et des coefficients de Varshni pour la structure wurtzite de ZnO. Les valeurs utilisées sont libres mais les différentes valeurs trouvées dans la littérature sont mises entre parenthèses.

**Tableau 4.2:** Masse effective et énergie interdit de ZnO et  $\text{Mg}_{0.2}\text{Zn}_{0.8}\text{O}$

**Tableau 4.3:** Evolution des niveaux confinés en fonction de la largeur du puits pour une largeur de la barrière fixe à 8nm

**Tableau 4.4:** Forces d'oscillations des différentes transitions pour  $L_w = 6\text{nm}$

**Tableau 4.5:** Forces d'oscillations des différentes transitions pour  $L_w = 1.5\text{nm}$

## Liste des abréviations et des symboles

UV : Ultra-violet.

MBE : Épitaxie par jets moléculaire.

MOCVD : Dépôt chimique en phase vapeur d'organométalliques.

QWIP : Photo-détecteur infrarouges à puits quantiques.

QCL : Laser à cascade quantique.

BC : Bande de conduction.

IR : Infra-rouge.

HD-DVD : Disque numérique polyvalent de haute densité.

CD : Disque compact.

EPVH : Epitaxie en Phase Vapeur aux Hydrures.

$a$ ,  $a_0$ ,  $c$  : Paramètres de maille.

$e_{ij}$  : Constantes piézoélectriques.

$C_{ij}$  : Constantes élastiques.

$E_g$  : Énergie de la bande interdite.

$E_c$  : Énergie du minimum de la bande de conduction.

2DEG : Gaz bidimensionnel d'électrons.

$m_0$  : Masse de l'électron.

$m^*$ ,  $m_w$ ,  $m_b$  : Masse effective de l'électron, dans le puits et dans la barrière.

$b$  : Paramètre de bowing.

DEL : Diode électroluminescente.

LD : Diode laser.

$E_i$  : Energie de niveau confiné  $i$ .

$E_{ij}$  : Energie de transition entre les deux niveaux  $i$  et  $j$ .

$L, L_w$  : Largeur du puits.

$L_b$  : Largeur de la barrière.

$E_F$  : niveau de Fermi.

$n_i$  : densité de porteurs.

QW : Puits quantique.

$H, H_0$  : Hamiltonien de l'électron.

$V_0, V(z)$  : Potentiel ressenti par l'électron.

$\hbar$  : Constante de Planck.

$\psi$  : Fonction d'onde de la particule.

$\varphi$  : Fonction d'onde de la particule dans le plan des couches.

$\chi$  : Fonction d'onde de la particule dans la direction de croissance  $z$ .

$k_i$  : Vecteur d'onde dans la direction  $i$ .

$U_F(\vec{r})$  : Fonction de Bloch au bas de la bande de conduction.

$f(\vec{r})$  : Fonction enveloppe lentement variable à l'échelle atomique.

$Y_i$  : Fonctions de Heaviside dans la couche  $i$ .

$\epsilon_0$  : Constante diélectrique du vide.

$\epsilon_w, \epsilon_b$  : Constante diélectrique relative du puits (barrière).

$\sigma$  : Densité de charges surfaciques.

$P_w, P_b$  : Polarisation macroscopique totale dans le puits, (la barrière).

$F_w, F_b$  : Champ électriques interne dans le puits, (la barrière).

$D$  : Vecteur déplacement électrique.

$U_H(z)$  : Potentiel de la bande de conduction.

$V_s = \Delta E_c$  : Discontinuité de la bande de conduction entre  $E_c$  du puits et celle de la barrière.

$f_{ij}$  : Force d'oscillation de la transition entre les deux niveaux  $i$  et  $j$ .

$\alpha(w)$  : Coefficient d'absorption.

## Résumé

Dans cette thèse, nous avons utilisé la méthode des différences finie pour calculer les états électroniques du puits quantique GaN/AlInN avec 17.7% d'Indium dans le cas de la bande de conduction parabolique et le cas de la bande de conduction non-parabolique. Nous avons calculé les niveaux d'énergie et identifié les transitions énergétiques possibles. Nous avons calculé par la suite, la force d'oscillation de chaque transition et le coefficient d'absorption intersousbande. Cette thèse présente des résultats qui peuvent être très intéressants pour élaboration des structures physiques à base de semi-conducteurs utilisé dans le domaine optoélectronique. Ensuite, nous avons extrapolé ces études pour les puits quantique non contraints à base de ZnO pour faire une comparaison, et tirer les géométries convenables pour emmettre des ondes térahertzique et des ondes pour la télécommunication par fibre optique.

**Mots clés :** Puits quantique, confinement, énergies de transitions, force d'oscillation, amélioration de l'absorption.

## Abstract

In this thesis, we used the finite difference method to calculate the electronic states of the GaN/AlInN quantum well with 17.7% Indium in the case of the parabolic conduction band and the case of the non-parabolic conduction band. We calculated energy levels and identified possible energy transitions. We then calculated the oscillation strength of each transition and the intersubband absorption coefficient. This thesis presents results that can be very interesting for the development of physical structures based on semiconductors used in the optoelectronic field. Then, we extrapolated these studies for unconstrained quantum wells based on ZnO to make a comparison, and derive the suitable geometries to emit terahertz waves and waves for optical fiber telecommunication.

**Keywords :** Quantum well, confinement, transitions energies, oscillation force, Absorption improvement.

# Tables des matières

<b>Remerciements</b> .....	<b>i</b>
<b>Liste des publications</b> .....	<b>iii</b>
<b>Liste des figures</b> .....	<b>v</b>
<b>Liste des tableaux</b> .....	<b>x</b>
<b>Liste des abréviations et des symboles</b> .....	<b>xi</b>
<b>Résumé</b> .....	<b>xiv</b>
<b>Abstract</b> .....	<b>xiv</b>
<b>Tables des matières</b> .....	<b>xv</b>
<b>Introduction générale</b> .....	<b>1</b>
Références .....	4
<b>Chapitre 1 : Généralités sur les hétérostructures à base de GaN/AlInN</b> .....	<b>5</b>
Introduction .....	5
1.1. Les nitrures de gallium GaN.....	5
1.1.1 L'évolution des nitrures d'élément III.....	5
1.1.2 Structure cristalline.....	7
1.1.3. Méthodes de croissance de l'hétérostructure.....	8
1.1.4 Structure de bande .....	11
1.1.5 Densité de porteurs.....	12
1.1.6 Effet de polarisation .....	12
1.2. Hétérostructure AlInN/GaN .....	16
1.2.1. Définition d'une hétérostructure .....	16
1.2.2. Alliage $Al_{1-y}In_yN$ .....	17
1.2.3. Gaz bidimensionnel d'électrons : Mécanisme de formation .....	19
1.3. Applications à base d'hétérostructures de nitrures .....	20

Conclusion .....	21
Références .....	22
<b>Chapitre 2 : Etats électroniques dans les hétérostructures</b>	
<b>GaN/AlInN .....</b>	<b>25</b>
Introduction .....	25
2.1. Le puits quantique .....	25
2.2. Etats électroniques dans un puits quantique .....	27
2.2.1. Cas d'un potentiel infini .....	28
2.2.2. Cas d'un potentiel fini .....	30
2.3. Etats électroniques dans les super-réseaux .....	34
2.3.1. Approximation de la fonction enveloppe .....	34
2.3.2. Détermination des énergies propres $\mathcal{E}(q)$ .....	39
2.3.3. Fonctions d'onde propres aux points de haute symétrie.....	40
2.4. Application au cas d'un puits quantique symétrique : Exemple GaAs/AlGaAs ..	43
2.4.1. Puits quantique simple.....	43
2.4.2. Super réseau GaAs/AlGaAs .....	49
2.5. Application au cas de puits quantique asymétrique GaInN/AlInN .....	52
2.5.1. Description du système GaInN/AlInN .....	52
2.5.2. État de contrainte.....	53
2.5.3. Répartition du champ .....	54
2.5.4. Profil de potentiel de conduction.....	56
2.5.5. Méthode du calcul numérique (méthode des différences finies) .....	57
2.5.6. Etats électroniques dans les puits quantiques GaN/Al <sub>0,823</sub> In <sub>0,177</sub> N.....	60
Conclusion .....	62
Références .....	64
<b>Chapitre 3 : Transitions et absorption intersousbandes dans les puits</b>	
<b>quantiques asymétriques GaN/AlInN .....</b>	<b>66</b>
Introduction .....	66
3.1. Hamiltonien de l'interaction électron onde électromagnétique.....	67

3.1.1. Expression du coefficient d'absorption $\alpha(\omega)$ .....	68
3.1.2. Transitions optiques dans des structures à puits quantiques : Règles de sélection .....	70
3.2. Coefficient d'absorption intersousbande .....	71
3.3. Forces d'oscillateurs .....	72
3.4. Transitions optiques entre deux niveaux : lié-lié et lié-libre .....	74
3.4.1. Transition entre deux niveaux liés.....	74
3.4.2. Transition lié-libre.....	77
3.5. États électroniques et énergies de transitions dans le puits quantique asymétrique GaN/AlInN .....	78
3.5.1. Puits quantique asymétrique GaN/AlInN non contraint.....	78
3.5.2. Effet de la hauteur de la barrière les niveaux confinés.....	79
3.5.3. Effet de la largeur du puits sur les niveaux confinés et transitions associées.....	80
3.6. Absorption optique dans le puits quantique asymétrique GaN/AlInN .....	85
3.6.1. Effet de la température sur la position du niveau de Fermi.....	86
3.6.2. Densités d'électrons .....	87
3.6.3. Force d'oscillateur.....	88
3.6.4. Coefficient d'absorption.....	89
3.6.5. Effet de la température sur le coefficient d'absorption .....	90
Conclusion .....	93
Références .....	94
<b>Chapitre 4 : Absorption intersousbande dans les puits quantiques asymétriques ZnO/MgZnO pour les applications en télécommunications et l'émission Térahertzique .....</b>	<b>96</b>
Introduction .....	96
4.1. Généralités sur l'oxyde de zinc ZnO. ....	96
4.1.1. Structures cristallines et polarisation spontanée.....	96
4.1.2. Structure de bande .....	99
4.1.3. Energie de bande interdite.....	100

4.2. Puits quantique asymétrique ZnO/MgZnO.....	101
4.2.1. Description du système ZnO/MgZnO .....	101
4.2.2. Répartition du champ .....	102
4.2.3. Profil du potentiel de conduction .....	103
4.2.4. Etats électroniques dans les puits quantiques ZnO/MgZnO.....	104
4.3. Transmission dans le puits quantique ZnO/Mg <sub>x</sub> Zn <sub>1-x</sub> O.....	110
4.4. Absorption optique dans le puits quantique asymétrique ZnO/MgZnO.....	113
4.4.1. Effet de la température sur la position du niveau de Fermi.....	113
4.4.2. Densités d'électrons .....	114
4.4.3. Force d'oscillateur.....	115
4.4.4. Coefficient d'absorption.....	116
4.4.5. Effet de la température sur le coefficient d'absorption .....	117
4.5. Comparaison entre les deux puits non contraints ZnO/MgZnO et GaN/AlInN	118
4.5.1. Propriétés physiques des deux puits .....	118
4.5.2. Emission dans l'IR .....	120
Conclusion.....	121
Références .....	123
<b>Conclusion générale .....</b>	<b>125</b>

# Introduction générale

## Introduction générale

Au cours des dernières années, les composés III-V du tableau périodique et particulièrement les hétérostructures associées ont connu un développement spectaculaire grâce à leurs propriétés plus performantes par rapport à celles des semi-conducteurs classiques. Certains de ces semi-conducteurs possèdent une bande interdite directe favorisant les transitions optiques efficaces, ce qui explique leurs vastes champs d'utilisations comme des émetteurs et des récepteurs optiques dans plusieurs domaines du spectre électromagnétique allant de l'UV jusqu'au domaine térahertzique passant par le visible et l'infra-rouge [1]. Tout récemment de nouveaux dispositifs à base de ces hétérostructures ont vu le jour. Ces dispositifs basés sur les transitions intersousbandes sont appelés unipolaires. C'est grâce à l'amélioration des techniques de croissance à savoir l'épitaxie par jets moléculaire (MBE) et le dépôt chimique en phase vapeur d'organométallique (MOCVD) que les premières observations des transitions intersousbandes dans les hétérostructures à base des matériaux III-V ont été possibles. De nouvelles générations de photodétecteurs et de lasers, à base de ces dispositifs, sont actuellement commercialisées, notamment les QWIPs (Quantum Well Infrared Photodetectors) et les QCL (Quantum Cascade Laser). La manufacture de tels dispositifs pour atteindre les courtes longueurs d'onde et notamment le domaine spectral 1,33 – 1,55  $\mu\text{m}$ , utilisé pour la transmission de l'information par fibre optique reste encore un défi majeur. Nous avons besoin d'hétérostructures présentant une discontinuité de potentiel beaucoup plus élevée que celle des composés III-V, GaAs/AlGaAs (le plus fréquemment utilisé) à gap direct (0,35 eV) [2]. Les nitrures d'éléments III sont les candidats les plus sérieux pour répondre à ce besoin. La discontinuité de potentiel dans la bande de conduction atteint 1,75 eV pour GaN/AlN (supérieure au gap de GaAs !), est de l'ordre de 1 eV pour la structure non contrainte GaN/AlInN, ce qui serait suffisant pour accorder les transitions intersousbandes à 1,3 – 1,55  $\mu\text{m}$  [3]. Ainsi, on extrapole la même étude pour les structures asymétriques ZnO/MgZnO qui sont semblables aux structures à base de GaN/AlGaAs pour faire une comparaison et sortir les avantages de chaque structure [4].

L'objectif de notre travail est de déterminer les énergies de transitions dans les hétérostructures bidimensionnelles à base de nitrures d'éléments III et de ZnO, et d'identifier ensuite les géométries qui permettraient d'atteindre le domaine des longueurs d'onde pour des applications en télécommunications. Nous nous sommes également intéressés pour ces mêmes matériaux au domaine térahertzique.

Le présent travail constitue une contribution théorique à l'étude des transitions intersousbandes. Il comporte deux parties différentes par rapport aux matériaux étudiés, ces deux parties s'articulent autour des transitions intersousbandes.

La première partie traite les transitions intersousbandes dans le système GaN/AlGaIn. Elle est constituée de trois chapitres. Le premier chapitre a pour but de rappeler les notions fondamentales sur les semi-conducteurs nitrures d'éléments III et leurs hétérostructures. Ces notions s'appuient sur une connaissance approfondie de la structure de bande des matériaux, la structure cristalline et les substrats pour l'épitaxie. Puis nous exposons les méthodes de croissance les plus employées actuellement pour ces matériaux. Le dernier paragraphe de ce chapitre est réservé aux applications à base des nitrures.

Dans le deuxième chapitre nous présentons la proche théorique utilisée pour calculer les états électroniques dans les puits quantiques, ainsi que les fonctions d'onde associées, en se basant sur l'approximation de la fonction enveloppe, pour montrer les paramètres qui influent sur le nombre des niveaux d'énergies confinés. Nous avons calculé ces états dans deux cas différents, puits quantique infini et puits quantique fini. A la fin de ce chapitre nous avons développé les programmes de simulation numérique pour calculer les états électroniques dans le puits quantique asymétrique GaN/Al<sub>1-y</sub>In<sub>y</sub>N non contrainte ( $y = 0.177$  [5]). Celle-ci présente un profil de potentiel asymétrique, déformé par les champs électriques internes. Nous présentons ensuite les résultats de nos calculs concernant l'évolution des transitions intersousbandes (au sein de la bande de conduction BC) en fonction des largeurs de la barrière et du puits.

Le dernier chapitre de cette partie met l'accent sur l'absorption optique dans les puits quantiques GaN/AlInN non contrainte. Après l'extraction de l'expression générale du coefficient d'absorption, l'étude théorique concernant les deux puits (6/2.5/6nm et 6/3.5/6nm) sera présentée.

La deuxième partie (chapitre quatre), s'intéresse aux courtes longueurs d'ondes dans l'I.R à base des transitions intersousbandes utilisant les matériaux ZnO/MgZnO avec un pourcentage de Mg dans la barrière de 20% sans tenir compte de la contrainte due au désaccord paramétrique. On présentera ensuite l'évolution des transitions intersousbandes (au sein de la bande de conduction BC) ainsi le coefficient d'absorption. L'étude théorique concernant les deux puits (6/1.5/6nm et 6/6/6nm) sera exposée. On finira par mettre en exergue les différentes particularités et comparaison de ces transitions avec les semi-conducteurs à base de GaN/AlInN traitées dans la première partie.

## Références

- [1] Haowen Hou, Zhihong Liu, Jing Hua Teng, Tomás Palacio, Soo-Jin Chua, *Procedia Engineering* 141 ( 2016 ) 98 – 102
- [2] L. C. West, et S. J. Eglash, *Appl. Phys. Lett.* 46, 1156 (1985).
- [3] Moudou, L., Mohamed, A. H., Bajjou, O., Boulghallat, M., Khenfouch, M., & Rahmani, K. (2022). Improvement of intersubband absorption in asymmetric quantum wells based on GaN/AlInN. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, 115168.
- [4] L. Moudou, Y. Chrafih, K Rahmani, I. Zorkani, *J. Phys. Conf. Ser.* 984, 012002 (2018)
- [5] R. Kudrawiec, M. Motyka, G. Cywinski, M. Siekacz, C. Skierbiszewski, L. Nevou, L. Doyennette, M. Tchernycheva, F. H. Julien, J. Misiewicz, *Phys. Stat. Sol. (c)* 5, 503 (2008).

Chapitre 1 :  
Généralités sur les  
hétérostructures à base  
de GaN/AlInN

# Chapitre 1 : Généralités sur les hétérostructures à base de GaN/AlInN

## Introduction

Depuis les années 1970, les matériaux nitrures d'éléments III : GaN, AlN, InN et leurs alliages ont été présentés comme des semiconducteurs intéressants pour le développement de dispositifs optoélectroniques dans un très large domaine de longueurs d'onde. La recherche dans ces matériaux a été déclenchée en observant particulièrement certaines de leurs caractéristiques : leur large bande interdite directe, leur haute conductivité thermique, le champ de claquage assez élevé, leur grande stabilité mécanique, leur résistance aux radiations etc. Leur bande interdite est originellement l'une des propriétés les plus attrayantes. En effet, elle varie entre  $\sim 0.7$  eV pour l'InN et 6.2 eV pour l'AlN couvrant ainsi une gamme de longueurs d'onde unique concernant les semi-conducteurs, de l'infrarouge proche jusqu'à l'ultraviolet lointain.

Ce chapitre est un aperçu sur les notions fondamentales des semi-conducteurs nitrurés et leurs hétérostructures. Ces notions s'appuient sur une connaissance approfondie des techniques d'épitaxie les plus employées actuellement de ces matériaux, de la structure cristalline, de la structure de bande des matériaux, et les substrats pour l'épitaxie. On présentera aussi quelques applications à base des nitrures.

## 1.1. Les nitrures de gallium GaN

### 1.1.1 Évolution des nitrures d'élément III

Les nitrures d'éléments III AlN, GaN, InN et leurs alliages ont des gaps directs allant de 6.2 à 0.7 eV, ce qui en fait une famille de matériaux très prometteurs pour différentes applications en optoélectronique.

Les premiers composés à base de nitrure ont été synthétisés dans les années 1930 par Johnson et al [1]. Il a fallu attendre les années 70 pour que Pankove et al. [2,3] fabriquent les

premiers monocristaux de GaN sur le substrat saphir qui ont permis la mesure du gap de GaN [4]. Le premier dispositif électroluminescent à base de GaN voit ainsi le jour [3].

L'absence de substrat adapté en maille de GaN pose des difficultés majeures pour l'épitaxie, puisqu'il conduit à des taux de dislocations élevés. La difficulté d'obtenir un dopage de type p efficace, et un dopage résiduel n trop élevé sont responsables du ralentissement du développement de dispositifs à base de nitrures. Cependant, l'amélioration des techniques de croissance va permettre de réduire ces problèmes. En effet, grâce à la technique d'épitaxie en phase vapeur par précurseurs organométalliques MOCVD (Metal-Organic Chemical Vapor Deposition), Yoshida et al. [5] synthétisent, en 1983, les premières couches de GaN de bonne qualité. À l'heure actuelle, la MOCVD devient la technique de choix pour la fabrication des dispositifs optoélectroniques commercialisables.

En 1989, le dopage p devient possible, en utilisant le magnésium activé par irradiation électronique ou recuit thermique, et sera amélioré par S. Nakamura et al [6] Ainsi, les premières diodes électroluminescentes à base de GaN émettant dans le bleu et dans l'UV ont été développées par Amano et al. [7]. Leur commercialisation, commencée en 1993.

En 1997 naissent les premières diodes laser [6]. Dès lors, les hétérostructures à base de nitrures trouvent de nombreuses applications dans le domaine de l'optoélectronique telles que le format Blue-Ray ou encore le HD-DVD offrant une plus grande capacité de stockage comparativement au CD et au DVD (les longueurs d'onde utilisées étaient de 780 et 635 nm pour le CD et le DVD). En effet, comme le matériau GaN émet dans le bleu, les limites de gravure dues aux phénomènes de diffraction sont repoussées. Il devient alors possible de concevoir des dispositifs à base de semiconducteurs nitrurés capables de stocker plus de données sur une même surface. Puis, depuis 2004, les premières diodes lasers à puits quantiques d'InGaN ont été fabriquées par MBE (MBE pour Molecular Beam Epitaxy) [8]. Toutes ces applications font appel aux transitions interbandes.

D'autre part, les hétérostructures de nitrures présentent une discontinuité de potentiel en bande de conduction élevée, ce qui en fait de très bons candidats pour la réalisation des dispositifs optoélectroniques intersousbandes qui émettent les longueurs d'onde de télécommunications 1,3 – 1,55  $\mu\text{m}$  pour fibre optique [9].

Aujourd'hui les hétérostructures de nitrures sont à la base de nombreuses applications optoélectroniques comme les émetteurs de lumière dans le bleu et dans l'UV, les photodétecteurs ultraviolets aveugles à la lumière visible (solar blind), les transistors de puissance... [10].

### 1.1.2 Structure cristalline

Les nitrures d'élément III sont des matériaux semi-conducteurs formés d'éléments de la colonne III du tableau périodique des éléments (Gallium (Ga), Aluminium (Al), Indium (In)) associés à l'élément azote (N) de la colonne V. Les matériaux III-N GaN, AlN, InN et leurs alliages, cristallisent suivant deux types de structures :

- Cubique blende de zinc (ZnS), notée c-GaN ou  $\beta$ -GaN ;
- Hexagonale würtzite, notée h-GaN ou  $\alpha$ -GaN

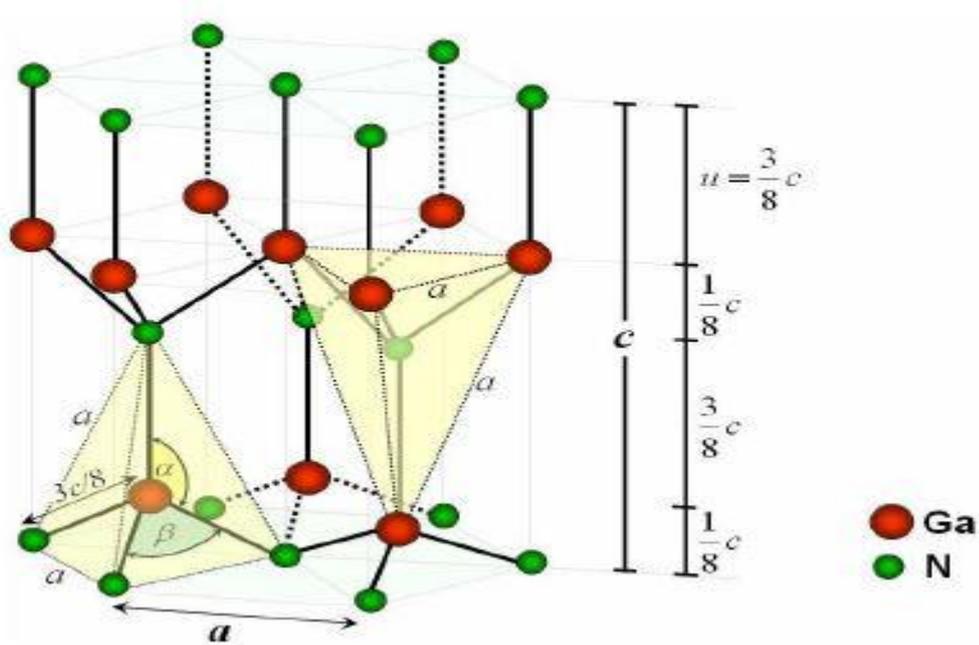
La forte ionicité des liaisons qui lient l'élément III avec l'élément N fait que la phase *würtzite* est la plus stable thermodynamiquement. On s'intéresse ainsi à cette phase.

La structure de type hexagonale würtzite se compose de deux sous réseaux hexagonaux compacts, interpénétrés et décalés de  $u.c$  suivant l'axe  $c$ , l'un contenant les atomes de gallium (Ga) et l'autre les atomes d'azote (N). La structure est idéale quand elle est composée de

tétraèdres réguliers (Figure1-1), ce qui est le cas lorsque, le rapport  $\frac{c}{a} = \sqrt{\frac{8}{3}} = 1.633$  et  $u = \frac{3}{8} = 0.375$ .

Les cristaux würtzites réels sont stables si  $\frac{c}{a} \leq 1.633$ . Pour  $\frac{c}{a} = 1.633$  le paramètre  $u$  est donné par [11]:  $u = \frac{1}{3} \frac{a^2}{c^2} + \frac{1}{4}$  cela signifie que : quand  $\frac{c}{a}$  diminue,  $u$  augmente de sorte que les longueurs des quatre liaisons tétraédriques soient égales. Mais cette interaction entraîne une distorsion pour les angles entre les liaisons.

Différentes valeurs des paramètres de maille  $a$  et  $c$  des nitrures massifs sont reportées dans la littérature, celles reportées dans le tableau 1-1 sont les plus utilisées [12].



**Figure 1.1** : Structure hexagonale würtzite idéale de GaN [11].

**Tableau 1.1.** Paramètres de maille des hétérostructures à base de nitrures

Paramètre	GaN	AlN	InN
a (Å)	3.189	3.112	3.545
c (Å)	5.185	4.982	5.703
c/a	1.626	1.601	1.608
u/c	0.377	0.382	0.375

### 1.1.3. Méthodes de croissance de l'hétérostructure

Plusieurs techniques s'en trouvent pour l'élaboration des nitrures (MOCVD, EPVH pour Epitaxie en Phase Vapeur aux Hydrures ou MBE). Nous nous consacrons à la description de l'épitaxie par MOCVD et MBE, les techniques les plus utilisées pour la réalisation des hétérostructures quantiques. Toutes ces techniques sont basées sur l'épitaxie, ce sont des techniques de croissance entre deux cristaux possédant un certain nombre d'éléments de symétrie communs dans leurs réseaux cristallins. L'épitaxie est utilisée pour faire croître des couches minces, de quelques nanomètres d'épaisseur. Pour cela des atomes

sont déposés sur la surface parfaitement polie d'un monocristal substrat. Le substrat est choisi de façon à avoir des paramètres de maille proches de ceux du cristal qu'on souhaite déposer.

### **1.1.3.1. Epitaxie en phase vapeur aux organométalliques (MOCVD)**

L'épitaxie MOCVD (pour Metal-Organic Chemical Vapor Deposition, aussi connue sous le nom EPVOM : L'épitaxie en phase vapeur aux organométalliques) est une technique de croissance cristalline dans laquelle les éléments à déposer, sous forme d'organométalliques ou d'hydrures, sont amenés vers le substrat monocristallin par un gaz vecteur.

La caractéristique principale de ce procédé est que la couche que l'on fait croître est monocristalline (une seule orientation cristalline dans tout son volume) et reproduit l'orientation du substrat, lui-même monocristallin; c'est ce qu'évoque le nom épitaxie.

Le substrat est chauffé et balayé par un gaz vecteur (le plus souvent l'hydrogène, et parfois l'azote [13]). Contrairement à l'épitaxie par jet moléculaire (MBE), qui se réalise en ultra-vide, la MOCVD nécessite un gaz vecteur, ce dernier permet d'amener les éléments à épitaxier sur le substrat. Les éléments à épitaxier sont sous forme de molécules, appelées précurseurs (le Gallium, l'Aluminium et l'Indium). Les températures de croissance sont de l'ordre de 800°C pour les nitrures d'éléments III, [13].

### **1.1.3.2. Epitaxie par Jets Moléculaires (MBE)**

L'épitaxie MBE consiste à faire croître un matériau dans une enceinte dans laquelle règne une très faible pression par l'interaction d'un flux d'atomes ou de molécules avec la surface de l'échantillon. L'environnement ultravide permet parallèlement à la croissance l'utilisation de techniques de caractérisation et de contrôle de la croissance (des expériences de diffraction d'électrons de haute énergie en incidence rasante (RHEED) ou encore de microscopie à effet tunnel) [14].

Cette technique de croissance a été pendant des années en retard par rapport à MOCVD dans la fabrication des dispositifs optoélectroniques à base des nitrures. Néanmoins elle s'avère très avantageuse par rapport aux autres techniques de croissance comme la MOCVD pour la croissance de couches dont les épaisseurs sont supérieures à quelques microns, ceci justement en raison de la faible vitesse de croissance [15].

Les éléments Ga, Al et In sont fournis par des cellules à effusion de type Knudsen et l'azote est apporté soit par craquage de l'ammoniac soit par une cellule à plasma radiofréquence qui dissocie les molécules de N<sub>2</sub> en phase gazeuse [14]. La MBE présente l'avantage de pouvoir travailler avec des vitesses de croissance lentes afin de laisser le temps aux atomes arrivant à la surface de migrer par diffusion vers les sites cristallographiques [15].

### 1.1.3.3. Substrats pour l'hétéro-épitaxie

Le problème rencontré pour l'épitaxie du nitrure de gallium est qu'il n'existe pas de substrat en accord de maille. Les substrats les plus utilisés à l'heure actuelle sont le saphir (Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>), le carbure de silicium (SiC) et le silicium (Si). Leurs caractéristiques relatives à l'épitaxie sont reportées dans le Tableau I-2.

**Tableau 1.2.** Caractéristiques des substrats les plus employés pour la croissance du GaN [16].

Substrat	Paramètres de maille (Å)	Coefficient d'expansion thermique (10 <sup>-6</sup> K <sup>-1</sup> )	Conductivité thermique (W.K <sup>-1</sup> .cm <sup>-1</sup> )
Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	a=4.758	7.5	0.5
	c=12.99	8.5	
SiC	a=3.08	4.2	4.9
	c=15.12	4.68	
Si	5.430	3.59	1.5
Pseudosubstrat	a=3.189	5.59	1.3
GaN	c=5.18	3.17	

Les premiers résultats significatifs pour la croissance de GaN ont été obtenus sur saphir [17] (diodes électroluminescentes, 1994, S. Nakamura, Nichia Chemicals). Ce substrat est aujourd'hui le plus couramment utilisé, même si sa faible conductivité thermique limite son emploi pour les dispositifs de puissance. Cependant, le substrat SiC présente une très bonne conductivité thermique et électrique. De plus le paramètre de maille de SiC est relativement proche de celui du GaN comparé au saphir et au silicium. Néanmoins, son prix reste prohibitif et son coefficient de dilatation thermique plus faible que celui du GaN induit une contrainte

extensive lors du refroidissement et donc l'apparition de fissures pour des couches épaisses (>3-5  $\mu\text{m}$ ).

Le silicium présente un attrait important par :

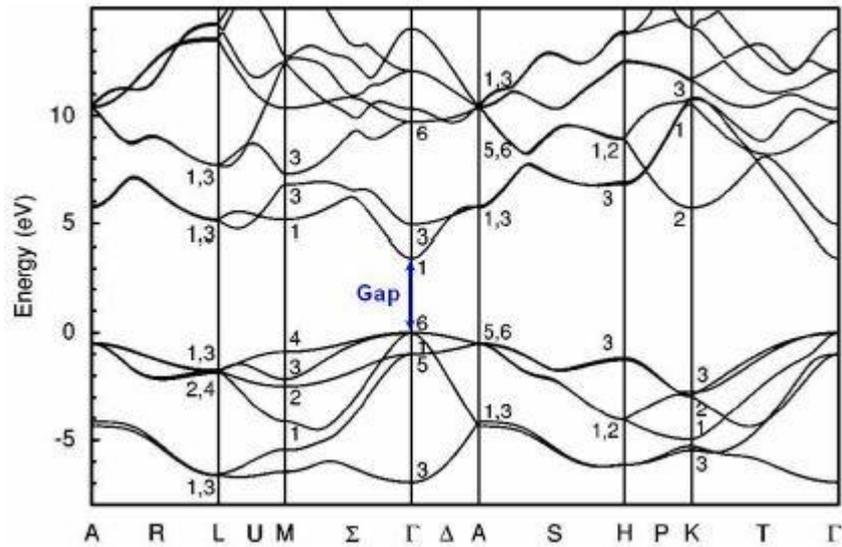
- ◆ Son prix beaucoup plus faible que celui des deux matériaux cités précédemment.
- ◆ Sa bonne conductivité thermique qui en fait un candidat de choix pour les composants de puissance.

De plus, la croissance de GaN sur silicium pourrait permettre l'intégration de dispositifs à base de nitrures d'éléments III avec les nombreuses technologies de la filière silicium. Enfin, la possibilité de graver chimiquement le substrat silicium permet la réalisation de traitements technologiques en face arrière (connections électriques, drains thermiques, etc), ou encore l'obtention de couches autosupportées de GaN pouvant éventuellement être transférées sur d'autres substrats d'accueil. Cependant, le silicium présente un fort désaccord paramétrique et une différence de coefficient de dilatation thermique importante avec le GaN. La contrainte extensive générée au cours du refroidissement reste un point critique pour la croissance de couches non fissurées d'épaisseur supérieure à 3  $\mu\text{m}$  [17].

Le choix d'un tel substrat est le compromis entre le fonctionnement du dispositif et son coût. Le problème du désaccord de maille peut être réduit par les couches tampons, on parle de pseudosubstrat. Ce qui va nous permettre d'en parler sur notre structure.

#### **1.1.4 Structure de bande**

La figure 1-2 représente le diagramme de bandes du GaN würtzite suivant des lignes de haute symétrie de la zone irréductible de Brillouin calculé par la méthode empirique du pseudo-potentiel. Le minimum de la bande de conduction et le maximum de la bande de valence sont situés au centre de la zone de Brillouin. Ce qui montre la nature directe du gap du GaN würtzite. À température ambiante, l'énergie du gap généralement admise est autour de 3,4 eV [18].



**Figure 1.2** : Structure de bande de GaN wurtzite selon les lignes de haute symétrie dans la zone de Brillouin [18].

### 1.1.5 Densité de porteurs

Théoriquement, avec un gap de 3,4eV, la densité de porteurs intrinsèque dans le matériau GaN est extrêmement faible ( $\sim 10^6 \text{cm}^{-3}$ ) à température ambiante, et il se trouve toujours de type n. Suivant les modes et les conditions de croissance, les densités électroniques évoluant de  $10^{16}$  à  $10^{19} \text{cm}^{-3}$ , résultant de défauts survenant durant la croissance (l'incorporation d'impuretés, lacunes de gallium ou d'azote ...) [19].

On peut également, d'une manière contrôlée, dopé intentionnellement le GaN. Plusieurs atomes dopants de type n (Si, Ge, O) sont, à ce jour, efficaces. Le plus couramment retenu est le silicium, dont le niveau donneur se situe à 30 meV sous la bande de conduction. Ainsi, on peut obtenir des dopages aussi élevés que  $10^{19} \text{cm}^{-3}$  [19].

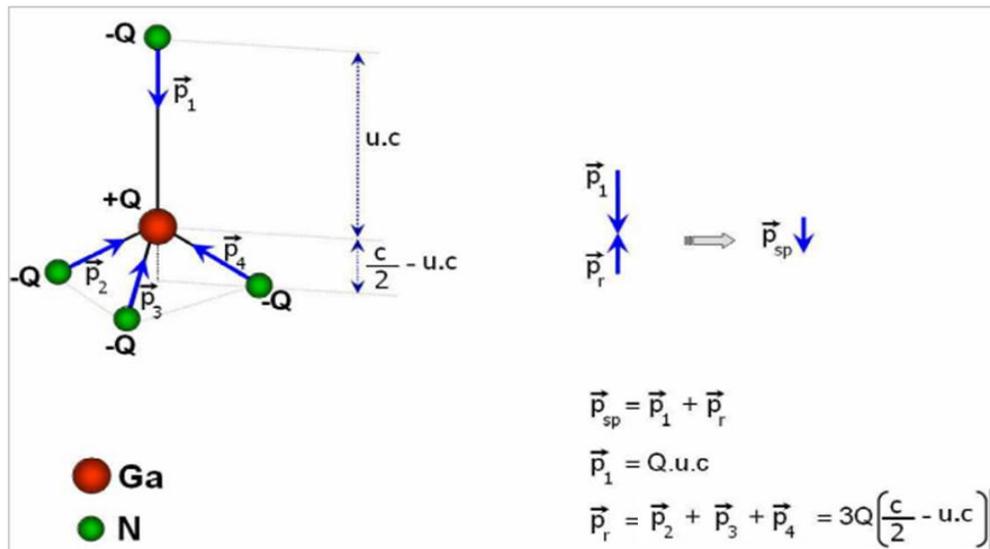
Le dopage de type p est en revanche beaucoup plus difficile à réaliser. L'élément le plus approprié à ce dopage est le magnésium (Mg). En effet, il est extrêmement difficile d'obtenir des couches avec des densités de trous supérieures à  $10^{18} \text{cm}^{-3}$  [20].

### 1.1.6 Effet de polarisation

#### 1.1.6.1 Polarisation spontanée

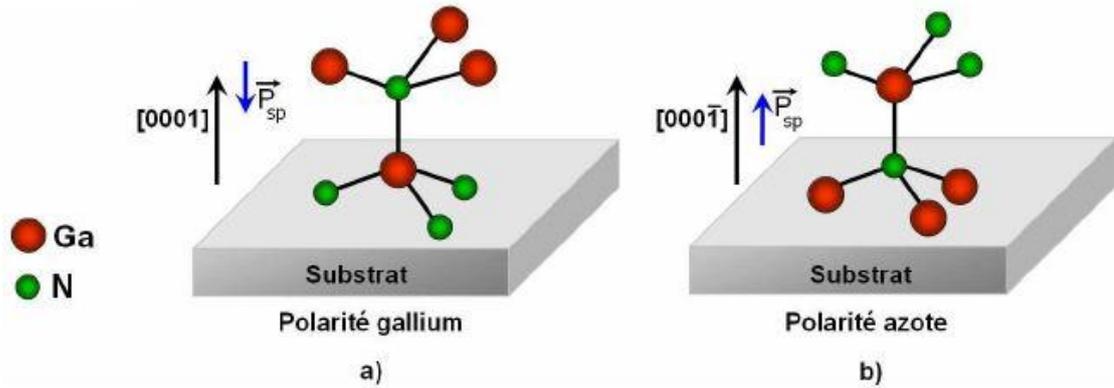
Il existe, dans le GaN de type würtzite, une polarisation macroscopique non nulle. Elle est appelée polarisation spontanée : résultat de la non superposition des barycentres de charges positives et négatives.

En effet, l'électronégativité de l'azote est plus importante que celle du gallium. La répartition du nuage électronique le long d'une liaison Ga-N est donc dirigée vers l'atome d'azote. On peut considérer que l'atome d'azote présente une charge  $-Q$  et l'atome gallium une charge  $+Q$ . Chaque liaison GaN présente donc un moment dipolaire. La figure 1-3 présente la contribution des différents moments dipolaires autour d'un atome de gallium. Leur somme est non nulle à cause de la non idéalité de la structure Würtzite GaN ( $\frac{c}{a} = \frac{8}{3}$ ) [11]. Cette liaison forme un dipôle élémentaire parallèle à l'axe  $c$  et orienté de l'atome d'azote vers l'atome de gallium.



**Figure 1.3 :** Contribution des différents moments dipolaires pour la génération de la polarisation spontanée

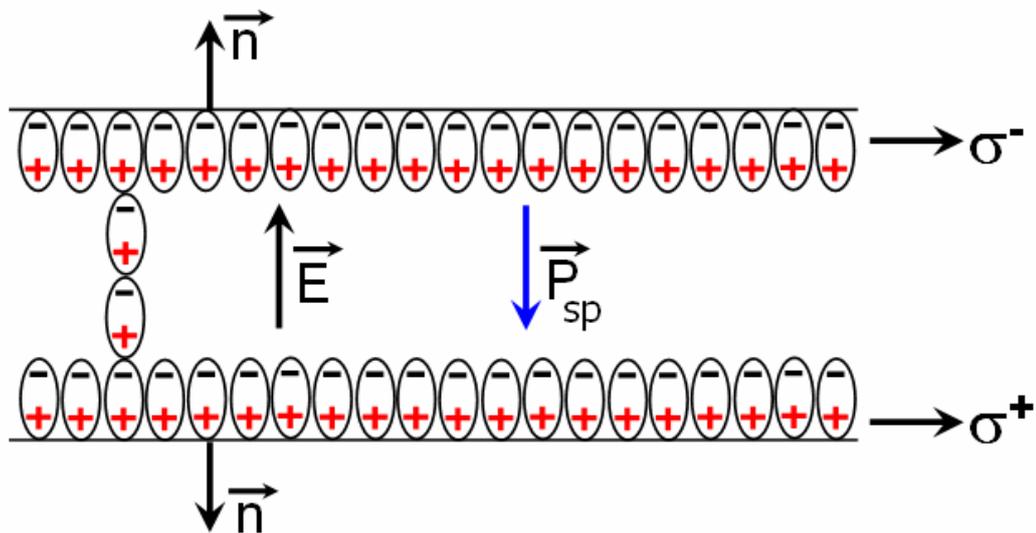
Dans les structure würtzite, les directions  $(0001)$  et  $(000\bar{1})$  ne sont pas équivalentes car les plans  $(0001)$  ne sont pas des plans de symétrie. En effet, pour le nitrure de gallium, il existe deux arrangements possibles des atomes de gallium et d'azote lors de la croissance. Dans le cas où la liaison orientée Ga-N pointe vers la surface, on dit que l'on a une polarité gallium ou face Ga (Figure 1.4a). Dans le cas contraire, on a une polarité azote ou face N (Figure 1.4b).



**Figure 1.4 :** *Polarités gallium et azote dans GaN hexagonal*

Il convient de noter que la polarité d'une couche ne présage pas de la nature des atomes en surface. Par exemple, une couche à polarité gallium peut aussi bien se terminer par des atomes de gallium que par des atomes d'azote en surface [21].

A l'intérieur du matériau, les charges liées se compensent. Mais, à la surface, la périodicité du cristal se brise, et la séparation des charges du dernier plan de dipôle n'est plus compensée, ce qui entraîne l'apparition des plans de charges de signe opposé d'un côté et de l'autre du cristal [21]. La figure I-5 donne une illustration :



**Figure 1.5 :** *Génération d'un champ électrique  $E$  et de la charge surfacique par la polarisation spontanée dans un cristal GaN wurtzite polarité gallium.*

Une polarisation  $\vec{P}$  quelle que soit son origine, induit à la surface du cristal une densité surfacique de charge  $\sigma$  donnée par :

$$\sigma = \vec{P} \cdot \vec{n} \quad (1.1)$$

Où  $\vec{n}$  est le vecteur unitaire normal à la surface et orienté vers l'extérieur.

La valeur de la polarisation spontanée du GaN en polarisation gallium est estimée à  $-0,029 \text{Cm}^{-2}$  [22], ce qui correspond à un champ électrique de l'ordre  $3 \text{MV/cm}$  et une densité surfacique de charge de  $1,8 \cdot 10^{13} \text{cm}^{-2}$ .

### 1.1.6.2 Polarisation piézoélectrique

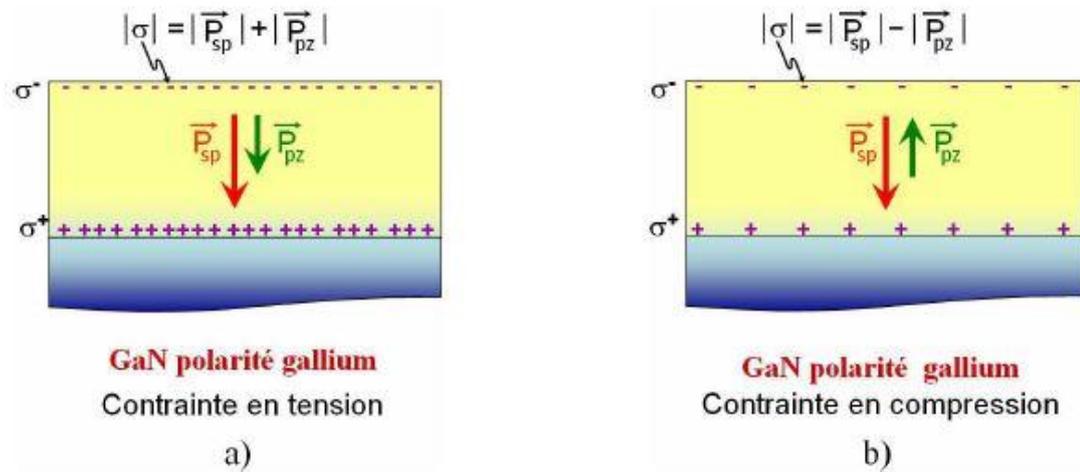
Le GaN est souvent élaboré sur saphir, SiC ou Silicium. Le GaN et son substrat présentent un désaccord de maille qui impose une contrainte (extension ou compression) dans le GaN. La déformation de la maille du GaN entraîne un déplacement des barycentres des charges et donc une modification de la polarisation spontanée. Cet effet peut être considéré comme l'apparition d'une polarisation dite : piézoélectrique ( $\vec{P}_{pz}$ ) qui renforce ou affaiblit la polarisation spontanée.

Dans le cas du GaN polarité gallium, lorsque le matériau subit une déformation en tension biaxiale dans le plan perpendiculaire à l'axe de croissance, le vecteur polarisation piézoélectrique est orienté dans le même sens que le vecteur polarisation spontanée. La polarisation dans le cristal et la charge surfacique augmentent (Figure 1.6a). En revanche, si le matériau subit une déformation en compression biaxiale dans le plan perpendiculaire à l'axe de croissance, le vecteur polarisation piézoélectrique est orienté dans le sens opposé du vecteur de polarisation spontanée. La polarisation dans le cristal et la charge surfacique diminuent (Figure 1.6b). Ceci sera opposé pour les deux cas de polarité si on a une compression [23].

La polarisation piézoélectrique  $P_{pz}$  dépend linéairement de la déformation du paramètre de maille  $a$  et s'exprime par la relation suivante [24]:

$$P_{pz}^{GaN} = 2 \frac{a - a_0}{a_0} \left( e_{31} - e_{33} \frac{C_{13}}{C_{33}} \right) \quad (1.2)$$

Où  $a_0$  et  $a$  sont les paramètres de maille du matériau relaxé et en contrainte respectivement;  $e_{31}$ ,  $e_{33}$  sont les constantes piézoélectriques ;  $C_{13}$ ,  $C_{33}$  sont les constantes élastiques.



**Figure 1.6 :** Effet de contrainte sur la polarisation et la charge surfacique d'une couche GaN polarité gallium.

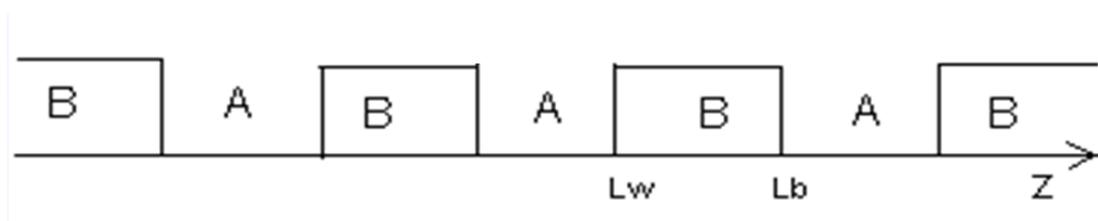
Les avantages de ces polarisations sont:

- La possibilité de créer un gaz bidimensionnel d'électrons (2DEG) de très forte densité et à mobilité élevée à l'interface d'une hétérostructure
- La modification du profil de potentiel influençant les énergies des transitions intersousbandes

## 1.2. Hétérostructure AlInN/GaN

### 1.2.1. Définition d'une hétérostructure

Une hétérostructure est l'association alternée entre deux semi-conducteurs A et B de natures différentes. Dans notre cas A présente le nitrure de gallium et B représente l'alliage AlInN, la figure 1.7 en donne un exemple constitué d'un superréseau :



**Figure 1.7 :** Empilement alterné et périodique de deux semi-conducteurs A et B

L'intérêt principal de ce type de structure est le confinement des porteurs dans le puits quantique suivant la direction de croissance, ce qui donne une discrétisation des niveaux énergétiques accessibles aux porteurs et l'éclatement entre ces niveaux déterminera l'énergie des différentes transitions (interbandes et intersousbandes).

L'énergie et le nombre des niveaux confinés dépendent de différents paramètres à savoir :

- La largeur du puits ;
- La hauteur de la barrière ;
- Les énergies de gap de chaque matériau ;
- Décalage énergétique (offset) entre les bandes de conduction du puits et de la barrière.

### 1.2.2. Alliage $Al_{1-y}In_yN$

Pour calculer les effets de la polarisation dans l'alliage  $Al_{1-y}In_yN$  nous avons besoin des valeurs des paramètres de maille, de la polarisation spontanée, des constantes piézoélectriques et des constantes élastiques d' $Al_{1-y}In_yN$ . Ces valeurs sont estimées à partir de la loi de Vegard (interpolation linéaire entre les valeurs de GaN et AlN) qui s'écrit sous la forme [24,25] :

$$X_{Al_{1-y}In_yN}(y) = y.X_{InN} + (1-y).X_{AlN} \quad (1.3)$$

Les valeurs de ces paramètres sont regroupées dans le Tableau I-3 ci-dessous [26].

**Tableau 1.3** : Paramètres de maille, la polarisation spontanée, les constantes piézoélectriques et les constantes élastiques de GaN, d'alliage  $Al_{1-y}In_yN$ , d'InN et d'AlN

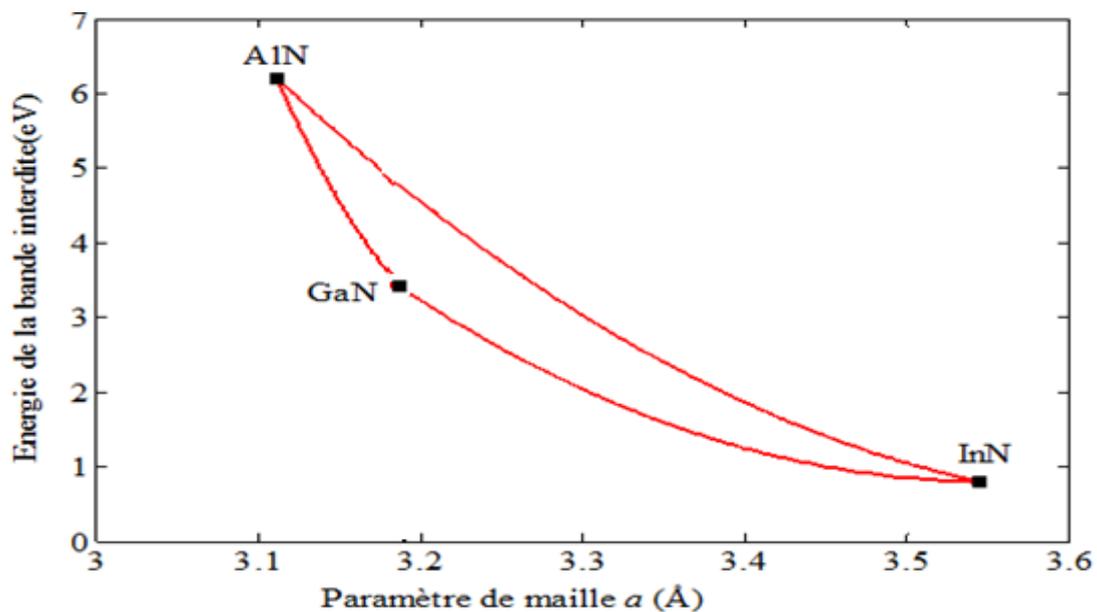
300K	GaN	InN	$Al_{1-y}In_yN$	AlN
a (Å)	3.189	3.545	$3.112+0.433y$	3.112
c (Å)	5.185	5.718	$4.982+0.196y$	4.982
Psp (C/m <sup>2</sup> )	-0.029	-0.032	$-0.081+0.049y$	-0.081
e31 (C/m <sup>2</sup> )	-0.35	-0.57	$-0.5-0.07y$	-0.5
e33 (C/m <sup>2</sup> )	1.27	1.97	$1.79+0.18y$	1.79

C31 (GPa)	106	92	108-16y	108
C33 (GPa)	398	224	373-149y	373
$m^*/m_0$	0.22	0.11	0.29-0.18y	0.29
$\epsilon_r$	9.5	15.3	9.14+6.16y	9.15

L'alliage  $Al_{1-y}In_yN$  est un semi-conducteur à gap direct quel que soit le taux d'aluminium. Par contre, la variation de la largeur de bande interdite de l'alliage  $Al_{1-y}In_yN$  en fonction de  $y$  n'est pas tout à fait linéaire. Elle s'exprime par [24]:

$$E_{Al_{1-y}In_yN}^g(y) = y.E_{InN}^g + (1-y).E_{AlN}^g - y.(1-y).b \quad (1.4)$$

Où  $E_{Al_{1-y}In_yN}^g, E_{AlN}^g, E_{InN}^g$  sont respectivement les largeurs de bande interdite de l'alliage  $Al_{1-y}In_yN$ , d'AlN et d'InN ;  $b$  le paramètre de bowing, un terme de non linéarité qui représente la déviation par rapport à la loi linéaire de type Vegard. La diversité de valeurs de  $b$  rapportées dans la littérature s'explique par une grande dispersion dans la qualité des couches épitaxiées et par la difficulté à séparer les effets dus aux contraintes et aux fluctuations de composition d'alliage [26]. En analysant les valeurs théoriques et expérimentales, on considère  $b = 3.326$  eV pour l'alliage AlInN wurtzite. L'énergie de la bande interdite des alliages III-N recommandée par Vurgaftman en fonction du paramètre de maille  $a$  est présentée dans la Figure 1.8.



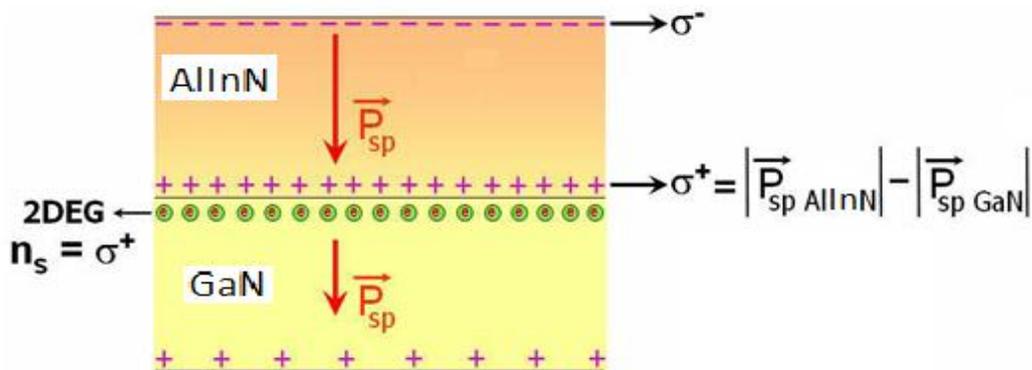
**Figure 1.8** : Energie de la bande interdite des alliages III-N recommandée par *Vurgaftman* en fonction du paramètre de maille  $a$  [26].

La Figure 1.8 montre un des intérêts des nitrures d'éléments III. C'est la possibilité de couvrir un large spectre de longueur d'onde allant du très proche infrarouge (1,55  $\mu\text{m}$  avec InN) à l'ultraviolet profond (200 nm avec AlN) par variation du taux des éléments III dans l'alliage. On notera cependant que cette variation du gap s'accompagne d'une large variation du paramètre de maille (de 3.112 à 3.545 Å), ce qui complique encore plus les difficultés d'épitaxie de ces matériaux.

### 1.2.3. Gaz bidimensionnel d'électrons : Mécanisme de formation

Considérons une couche d'AlInN sur une couche GaN sans contraintes. Toutes les deux sont de polarité gallium.

Les vecteurs de polarisation dans ces deux couches et les charges surfaciques sont présentés dans la Figure 1.9.



**Figure 1.9** : Mise en évidence de la formation du 2DEG à l'interface AlInN/GaN [23].

Dans ce cas, on obtient une densité de charges fixes positives à l'interface telle que :

$$\sigma^+ = \left| P_{AlInN}^{sp} \right| - \left| P_{GaN}^{sp} \right| \quad (1.5)$$

Cette charge positive est compensée par la présence d'électrons à l'interface formant un gaz confiné à cette interface qu'on appelle gaz bidimensionnel d'électrons (ou Two

Dimensional Electron Gaz (2DEG)). La couche AlInN est appelée barrière et la couche GaN où se trouvent les électrons à l'interface est appelée puits. Les électrons sont confinés à l'interface par le fort champ électrique de polarisation.

### **1.3. Applications à base d'hétérostructures de nitrures**

Le développement rapide des technologies de croissance épitaxiale de semi-conducteurs III-V induit un développement aussi rapide des applications de ces matériaux. Les applications à base des nitrures sont diverses, basées sur les dispositifs tels que les diodes électroluminescentes (DEL) qui émettent dans le violet, le bleu, le vert... La société japonaise NICHIA a été la première à lancer la production en masse des LED bleues à partir de 1993 [6]. Ce qui a déclenché la fabrication des DEL blanches à haut rendement énergétique. Actuellement, dans OSRAN Opto Semi-conductor à Rogensburg en Allemagne, un tel développement est en cours [26]. Un développement parallèle et rapide, est celui des diodes lasers (LD) [27,28].

La stabilité chimique, la résistance aux effets des radiations, la bonne conductivité thermique et essentiellement leur grande bande interdite font que les nitrures présentent un grand intérêt dans la réalisation de dispositifs de détection dans l'ultraviolet (les photodétecteurs dans l'ultraviolet). Ces caractéristiques les rendent aussi des bons matériaux pour la réalisation des composantes électroniques de puissance [29], à savoir les différentes structures de transistor à effet de champs (HEMT, MESFET, JFET) [30].

Concernant les transitions intersousbandes, il existe de nombreux composants optoélectroniques basés sur ces transitions, à titre d'exemple les détecteurs infrarouges à puits quantiques, les modulateurs, les absorbants saturables, les émetteurs de la lumière (lasers à cascade quantique). La discontinuité de potentiel entre les semiconducteurs constituant l'hétérostructure détermine le nombre de niveaux confinés ainsi que les énergies des transitions intersousbandes.

## **Conclusion**

A l'issue de ce chapitre, nous avons présenté des généralités concernant les propriétés structurales et optiques des nitrures d'éléments III en phase wurtzite. Ce sont des semiconducteurs intéressants pour le développement de dispositifs optoélectroniques dans un très large domaine de longueurs d'onde, grâce aux leurs caractéristiques : leur large bande interdite directe, leur haute conductivité thermique, le champ de claquage assez élevé, leur grande stabilité mécanique, leur résistance aux radiations etc. Nous avons aussi présenté les deux techniques de croissance des nitrures les plus utilisées à savoir la MOCVD et la MBE. Nous avons exposé quelques applications à base d'hétérostructures GaN/Al<sub>1-y</sub>In<sub>y</sub>N et qui ont connu un fort développement au cours des dernières années.

## Références

- [1] Warren C. Johnson, James B. Parsons, and M. C. Crew, *J. Phys. Chem.* 36, 2651 (1932).
- [2] J. I. Pankove, E. A. Miller, D. Richman and J. E. Berkeyheiser, *Journal of Luminescence*, 4, 63 (1971).
- [3] J. I. Pankove, E. A. Miller and J. E. Berkeyheiser, *Journal of Luminescence*, 5, 84, (1972)
- [4] M. Ilegems, R. Dingle, R. A. Logan, *J. Appl. Phys.* 43, 3797 (1972).
- [5] S. Yoshida, S. Misawa, et S. Gonda, *Appl. Phys. Lett.* 42, 427 (1983).
- [6] S. Nakamura, G. Fasol, “The Blue Laser Diode” Springer, Berlin, (1997).
- [7] H. Amano, M. Kito, K. Hiramatsu and I. Akasaki, *Jpn. J. Appl. Phys* 28, L2112 (1989).
- [8] S. E. Hooper, M. Kauer, V. Bousquet, K. Johnson, J. M. Barnes, et J. Heffernan, *Electronics Letters* 40 (2004).
- [9] C. Gmachl, H. M. Ng, S. N. G. Chu, et A. Y. Cho, *Appl. Phys. Lett.* 77, 3722 (2000).
- [10] J.Y. Duboz, et J. C. Garcia, “GaN or the history of a scientific explosion driven by applications and markets”, dans “Low-dimensional nitride semiconductors”, édité par B. Gil, Oxford University Press (2002).
- [11] Heinz Schulz and K.H. Thiemann, *Solid State Commun.* 23, 815 (1977).
- [12] I. Vurgaftman, J. R. Meyer, et L. R. Ram-Mohan, *J. Appl. Phys.* 89, 5815 (2001).
- [13] Gerald B. Stringfellow “Organometallic Vapor-Phase Epitaxy: Theory and Practice” (2nd ed.). Academic Press ([ISBN 0-12-673842-4](https://doi.org/10.1016/C01213-02-00000-0)) (1999). .
- [14] M. Tchernycheva, « Physique des transitions intersousbandes des hétérostructures de GaN/AlN pour l’optoélectronique à  $\lambda = 1,3 - 1,55 \mu\text{m}$  », Thèse présentée à l’Université Paris Sud XI (2005), p:17,19.
- [15] S. C. Jain, M. Willander, J. Narayan, et R. Van Overstraeten, *J. Appl. Phys* 87, 965 (2000).

- [16] H. Morkoç, S. Strite, G. B. Gao, M. E. Lin, B. Sverdlov, and M. Burns, *J. Appl. Phys.*, 76, 1363 (1994).
- [17] Nicolas BARON, “Optimisation de l’épitanie sous jets moléculaires d’hétérostructures à base de GaN : application aux transistors à haute mobilité d’électrons sur substrat silicium” Thèse de doctorat de l’Université de Nice-Sophia Antipolis, France, (2009), p.18-20.
- [18] Daniel Fritsch, Heidemarie Schmidt, and Marius Grundmann, *Phys. Rev. B* 67, 235205 (2003).
- [19] Nicolas DEFRANCE, “Caractérisation et modélisation de dispositifs de la filière nitrure pour la conception de circuits intégrés de puissance hyperfréquences” Thèse de doctorat de l’Université des Sciences et Technologies de Lille, France (2007), p.21,23.
- [20] Xin-he Jiang, Jun-jie Shi, Min Zhang, Hong-xia Zhong, Pu Huang, Yi-min Ding, Meng Wu, Xiong Cao, Xin Ronga, Xinqiang Wang. *J. Alloys.Compd.* 686, 484–488, (2016).
- [21] Thi Dak Ha Nguyen « Réalisation et caractérisation de HEMTs AlGaIn/GaN sur silicium pour applications à haute tension » Université Paris Sud - Paris XI, (2013), p : 16,17.
- [22] Fabio Bernardini and Vincenzo Fiorentini, *Phys. Rev. B* 56, 10024 (1997).
- [23] Nicolas Vellas, “Etudes Expérimentales de Transistors HFET de la Filière Nitrure de Gallium pour des Application de Puissance Hyperfréquences” Thèse de doctorat del’Université de Lille, France, (2003), p.40-62.
- [24] O. Ambacher, J. Smart, J. R. Shealy, N. G. Weimann, K. Chu, M. Murphy, W. J. Schaff, L. F. Eastman, R. Dimitrov, L. Wittmer, and M. Stutzmann, W. Rieger and J. Hilsenbeck,” *J. Appl. Phys.* 85, 3222 (1999).
- [25] L. Vegard, Die Konstitution der Mischkristalle und die Raumfüllung der Atome, *Z. Für Phys.* 5, 1921 (1921)
- [26] I. Vurgaftman, et J. R. Meyer, *J. Appl. Phys.* 94, 3675 (2003).
- [27] <http://philippelopes.free.fr/DiodesElectroluminescentes.htm>.

- [28] S. Nakamura, M. Senoh, S. I. Nagahama, N. Iwasa, T. Yamada, T. Matsushita, H. Kiyoku, Y. Sugimoto, T. Kozaki, H. Umemoto, M. Sano, K. Chocho, *J. Appl. Phys.* 36, 1568 (1997).
- [29] S. J. Pearton, F. Ren, A. P. Zhang, K. P. Lee, *Materials Science & Engineering R: Reports* R30, 55 (2000).
- [30] J. Burm, GaN-based transistors, dans “Gallium nitride and related semiconductors” Vol. 23, Ed. J. H. Edgar, S. Strite, I. Akasaki, H. Amano, C. Wetzel (IEE, London, 1999), p.567.

Chapitre 2 : Etats  
électroniques dans les  
hétérostructures  
GaN/AlInN

## Chapitre 2 : Etats électroniques dans les hétérostructures GaN/AlInN

### Introduction

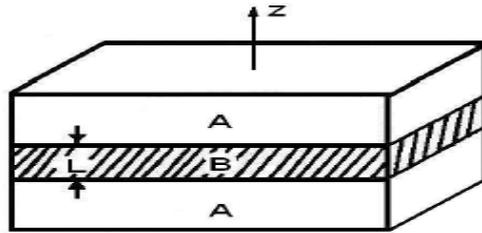
Dans ce chapitre nous présentons le modèle de résolution de l'équation de Schrödinger pour le calcul des états propres d'une hétérostructure quantique à deux dimensions. Ce modèle dit de la fonction enveloppe est basé sur le modèle de Kane à 8 bandes. Dans ce cadre nous présentons dans un premier temps les résultats du confinement des porteurs dans le cas de puits quantiques simples de barrières infinie et finie, pour montrer les paramètres qui influencent sur le nombre des niveaux d'énergies confinés. Dans un deuxième temps, on considère une structure d'un superréseau pour laquelle on étudie l'effet de la largeur de la barrière sur l'élargissement des minibandes de chaque niveau confiné afin d'identifier celle permettant d'avoir un effet tunnel important. Puis, on calcule les états électroniques et les fonctions d'ondes associées pour un puits quantique asymétrique à base de GaN/AlInN. Nos résultats de calcul, concernant ces systèmes, résultent d'une résolution numérique graphique.

### 2.1. Le puits quantique

Un puits quantique (QW) est formé de deux hétérojonctions obtenues en faisant croître une couche d'un matériau semi-conducteur B entre deux couches d'un autre matériau semi-conducteur A (figure 2.1) dont le gap est inférieur à celui du matériau A. Cela conduit à une discontinuité des bandes d'énergie de valence et de conduction des deux matériaux. Ce qui a l'origine de la création d'un puits de potentiel aussi bien pour les trous que pour les électrons. Une telle structure confine les porteurs dans la direction de croissance.

Dans ce cas, les états électroniques ne se situent plus ni au sommet de la bande de valence ni au minimum de la bande de conduction mais sont quantifiés en niveaux d'énergie discrets.

Selon la nature de la discontinuité de bandes interdites à l'interface puits-barrière, on distingue trois types de puits quantiques comme l'illustre la figure 2.2 [1] :

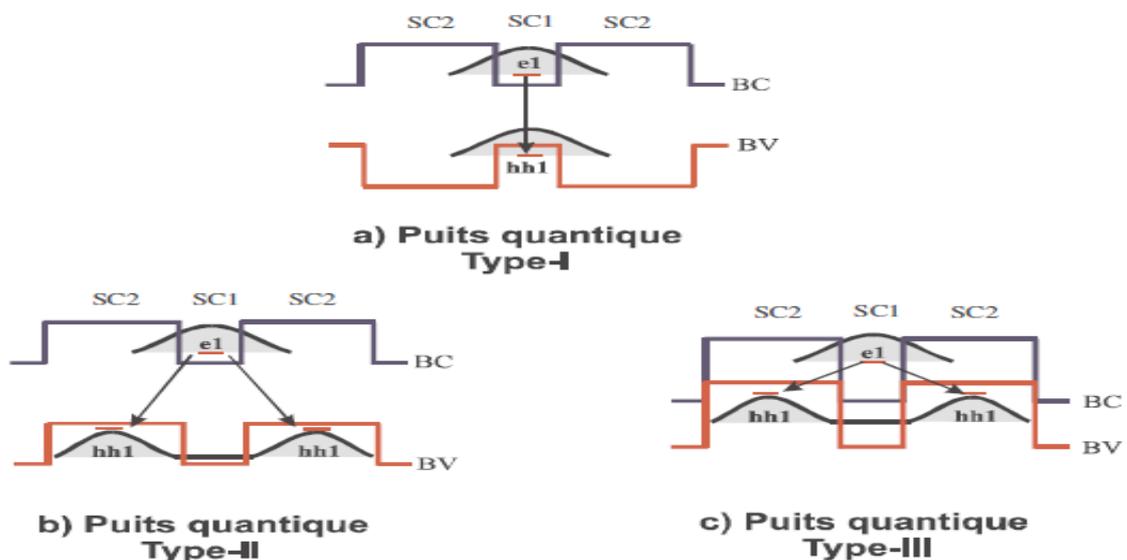


**Figure 2.1** : Structure d'un puits quantique [1].

a) Puits quantique de type-I : les porteurs de charge (électrons et trous) sont confinés dans le même matériau constituant le puits. Ainsi, l'énergie émise ou absorbée ne dépend que des énergies de confinement des porteurs et du gap du matériau puits.

b) Puits quantiques de type-II : les électrons et les trous sont confinés séparément dans les deux matériaux puits et barrière respectivement. Dans ce cas, l'énergie émise dépend des énergies de confinement des porteurs et aussi des gaps des deux matériaux formant l'hétérostructure.

c) Puits quantiques de type- III : (ex : système GaSb/InAs) c'est un cas particulier du puits quantiques type -II : le bas de la bande de conduction du matériau puits (puits des électrons) est situé en dessous du haut de la bande de valence de matériau constitue la barrière. Dans cette configuration, dite aussi semi-métallique, l'énergie du photon émis n'est fonction que des énergies de confinement des électrons et des trous, c'est-à-dire, de l'épaisseur des couches puits et barrière.



**Figure 2.2** : Différentes configurations de puits quantiques [1]

## 2.2. Etats électroniques dans un puits quantique

L'équation de Schrödinger en l'absence d'une interaction électron-trou s'écrit :

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 + V(z) \right] \psi(x, y, z) = E \psi(x, y, z) \quad (2.1)$$

Où  $m^*$  est la masse effective de la particule (électron ou trou),  $E$  et  $\psi$  sont, respectivement, la valeur propre de l'énergie et la fonction d'onde de la particule.

Dans un puits quantique, le potentiel  $V$  est supposé être fonction de la coordonnée  $z$  seulement, donc, le confinement des porteurs se fait uniquement suivant cette direction de croissance  $z$ . Dans les directions du plan  $(x,y)$ , la particule est libre. Dans ce cas, les fonctions  $\psi(x, y, z)$  se mettent sous forme d'un produit de deux fonctions : les  $\varphi(x, y) = e^{ik_{\perp}r_{\perp}}$  décrivant le mouvement dans le plan des couches et les  $\chi(z)$  dans la direction de croissance  $z$

$$\psi(x, y, z) = \varphi(x, y) \cdot \chi(z) \quad (2.2)$$

L'énergie de la particule est la somme de deux termes et s'écrit :

$$E(n, k_x, k_y) = E_z^n + \frac{\hbar^2 (k_x^2 + k_y^2)}{2m} \quad (2.3)$$

Le premier terme  $E_z^n$  est l'énergie de la particule dans la direction  $z$  et le deuxième désigne son énergie cinétique dans le plan  $(x,y)$  où la particule est libre. Le confinement étant dans la direction  $z$ , soit :

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + V(z) - E \right) \chi_n(z) = 0 \quad (2.4)$$

C.à.d.

$$\frac{\partial^2}{\partial z^2} \chi_n(z) + K^2 \chi_n(z) = 0 \quad (2.5)$$

$$\text{Avec } K^2 = \frac{2m^*(E - V(z))}{\hbar^2} \quad \text{donc } K = K(z)$$

Pour la résolution de cette équation, deux cas de figures qui se présentent :

### 2.2.1. Cas d'un potentiel infini

Soit une particule piégée dans un puits de potentiel dont l'allure est donnée par :

$$V(z) = \begin{cases} +\infty & \text{si } z < 0 \\ 0 & \text{si } 0 \leq z \leq L \\ +\infty & \text{si } z > L \end{cases} \quad (2.6)$$

La particule est donc entièrement confinée entre  $z = 0$  et  $z = L$  : sa fonction d'onde est nulle en dehors de cet intervalle [2].

Les conditions aux limites dans ce cas sont :  $\chi(z=0) = 0$  et  $\chi(z=L) = 0$

Pour  $0 \leq z \leq L$ ,  $\chi$  est solution de l'équation différentielle

$$\frac{\partial^2}{\partial z^2} \chi_n(z) + \frac{2m^*E}{\hbar^2} \chi_n(z) = 0 \quad (2.7)$$

- Etant  $E > 0$ , la solution est de type :  $\chi(z) = A \cos(Kz) + B \sin(Kz)$

$$\text{Avec } k = \sqrt{\frac{2m^*E}{\hbar^2}}$$

Les conditions aux limites conduisent à :

$$A = 0, \text{ puis } B \cdot \sin(KL) = 0 \implies kL = n\pi \text{ avec } n \text{ entier.}$$

La valeur  $n = 0$  est exclue, car elle conduit à une fonction d'onde nulle partout.

Les fonctions d'onde cherchées sont donc de la forme :

$$\chi(z) = B \sin\left(n \frac{\pi z}{L}\right) \quad (2.8)$$

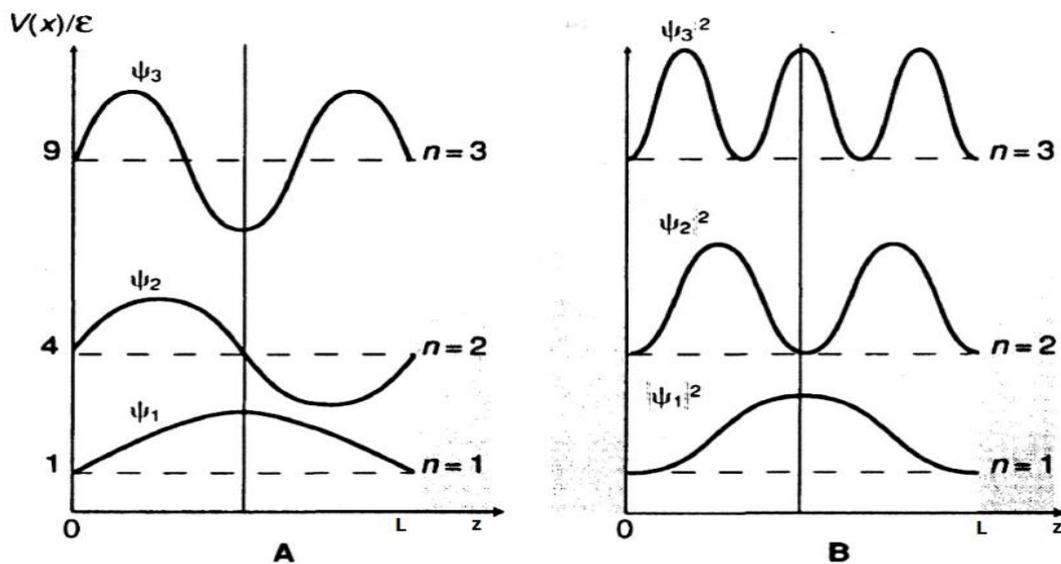
Après la normalisation de cette fonction d'onde on obtient :  $B = \sqrt{\frac{2}{L}}$

soit :

$$\chi(z) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(n \frac{\pi z}{L}\right) \quad (2.9)$$

La quantification des valeurs de k induit une quantification de l'énergie de la particule, avec pour le niveau n :  $E_n = \frac{\hbar^2 K^2}{2m^*} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m^* L^2} n^2$  avec  $n \geq 1$

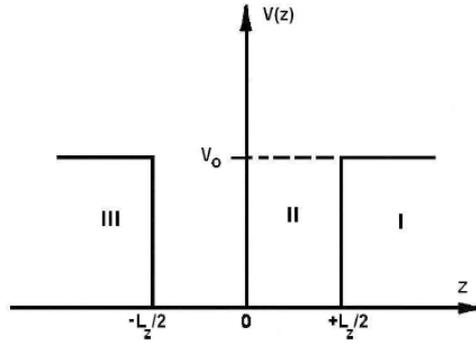
La figure suivante montre les trois premiers niveaux ainsi que les fonctions stationnaires associées et la densité de probabilité  $|\chi_n|^2$  de la particule sur chacun de ces niveaux.



**Figure 2.3 :** A : les trois premiers niveaux et fonctions d'onde associées pour une particule dans un puits infiniment profond. L'unité d'énergie est  $\epsilon = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m^* L^2}$  B : les densités de probabilité associées. [3]

### 2.2.2. Cas d'un potentiel fini

La figure 2.4 ci-dessous schématise le profil de potentiel d'un QW carré de profondeur finie  $V_0$  et de largeur  $L$  [2].



**Figure 2.4 :** Puits quantique carré de largeur  $L$  et de hauteur  $V_0$ .

Le potentiel  $V(z)$  est défini par la relation :

$$V(z) = \begin{cases} 0 & \text{si } |z| \leq \frac{L}{2} \\ V_0 & \text{si } |z| > \frac{L}{2} \end{cases} \quad (2.10)$$

• Si  $E > V_0$ , la solution  $\chi(z) = Ae^{iKz} + Be^{-iKz}$  la particule est oscillante dans les trois régions.

$$\text{Avec } K^2 = \begin{cases} \frac{2m_b^*(E - V_0)}{\hbar^2} & \text{région I et III} \\ \frac{2m_w^*E}{\hbar^2} & \text{région II} \end{cases}$$

• Si  $E < V_0$ , Dans les régions I et III, on a  $V(z) = V_0$ , ce qui donne  $K^2 < 0$

$$\text{Soit } K_b \text{ réel tel que } K_b = iK \text{ donc } K_b^2 = \frac{2m_b^*(V_0 - E)}{\hbar^2}$$

Et dans la région II, on a  $V(z) = 0$ , ce qui donne  $K^2 > 0$  soit  $K_w$  tel que

$$K_w^2 = K^2 = \frac{2m_w^*E}{\hbar^2}$$

Avec :  $m_w^*$  et  $m_b^*$  étant les masses effectives de la particule dans le puits et la barrière respectivement.

La fonction d'onde dans toutes les régions s'écrit comme suivant :

$$\begin{cases} \chi_I(z) = A_1 e^{-K_b z} + A_1' e^{K_b z} & \text{si } z \in \left] -\infty, -\frac{L}{2} \right[ \\ \chi_{II}(z) = A_2 e^{iK_w z} + A_2' e^{-iK_w z} & \text{si } z \in \left[ -\frac{L}{2}, \frac{L}{2} \right] \\ \chi_{III}(z) = A_3 e^{-K_b z} + A_3' e^{K_b z} & \text{si } z \in \left] \frac{L}{2}, +\infty \right[ \end{cases} \quad (2.11)$$

Les conditions aux limites  $\lim_{|z| \rightarrow \infty} |\chi(z)| = 0$ , nous donnent  $A_1 = A_3' = 0$

Les conditions de raccordement imposent à la fonction d'onde et à sa dérivée d'être continues partout, en particulier aux points de discontinuité du potentiel :

$$\begin{cases} \chi_I\left(-\frac{L}{2}\right) = \chi_{II}\left(-\frac{L}{2}\right) \\ \frac{1}{m_b^*} \chi_I'\left(-\frac{L}{2}\right) = \frac{1}{m_w^*} \chi_{II}'\left(-\frac{L}{2}\right) \end{cases} \quad (2.12)$$

$$\begin{cases} \chi_{II}\left(\frac{L}{2}\right) = \chi_{III}\left(\frac{L}{2}\right) \\ \frac{1}{m_w^*} \chi_{II}'\left(\frac{L}{2}\right) = \frac{1}{m_b^*} \chi_{III}'\left(\frac{L}{2}\right) \end{cases} \quad (2.13)$$

On obtient 4 équations qui sont linéairement dépendantes. Mais, on a comme propriété le fait que dans un potentiel symétrique et borné, les fonctions d'onde ont une parité bien déterminée. Alors, nous avons :

$$\begin{cases} \chi_I(z) = A_1' e^{K_b z} & \text{si } z \in \left] -\infty, -\frac{L}{2} \right[ \\ \chi_{II}(z) = A_2 e^{iK_w z} + A_2' e^{-iK_w z} & \text{si } z \in \left[ -\frac{L}{2}, \frac{L}{2} \right] \\ \chi_{III}(z) = A_3 e^{-K_b z} & \text{si } z \in \left] \frac{L}{2}, +\infty \right[ \end{cases} \quad (2.14)$$

• Pour les fonctions paires (symétriques) : on a  $\chi(-z) = \chi(z)$  donc :

$$\begin{cases} \chi_I(z) = \chi_{III}(-z) & \text{soit } A_1' = A_3 = B \\ \chi_{II}(z) = \chi_{II}(-z) & \text{soit } A_2' = A_2 = \frac{A}{2} \end{cases} \quad (2.15)$$

$$\chi(z) = \begin{cases} A \cos(K_w z) & \text{si } |z| \leq L_z/2 \\ B \exp(\pm K_b z) & \text{si } |z| > L_z/2 \end{cases} \quad (2.16)$$

• Pour les fonctions impaires (antisymétriques) : on a  $\chi(-z) = -\chi(z)$  donc :

$$\begin{cases} \chi_I(z) = -\chi_{III}(-z) & \text{soit } A_1' = -A_3 = B \\ \chi_{II}(z) = -\chi_{II}(-z) & \text{soit } A_2 = -A_2' = \frac{A}{2i} \end{cases} \quad (2.17)$$

$$\chi(z) = \begin{cases} A \sin(K_w z) & \text{si } |z| \leq L_z/2 \\ \pm B \exp(\pm K_b z) & \text{si } |z| > L_z/2 \end{cases} \quad (2.18)$$

La continuité de la fonction d'ondes nous permet d'établir une relation entre les constantes A et B dans chacun des deux cas (pair et impair). La condition de normalisation complète les calculs.

Au point  $z = L/2$ , la dérivée de la fonction d'onde est continue :

$$\frac{1}{m_b^*} \chi_{III}'\left(\frac{L}{2}\right) = \frac{1}{m_w^*} \chi_{II}'\left(\frac{L}{2}\right) \quad (2.19)$$

Ce qui nous donne les équations suivantes :

$$\begin{aligned} \tan\left[\sqrt{\frac{m_w^* E_z^n}{2\hbar^2}} L_z\right] &= \frac{m_w^*}{m_b^*} \sqrt{\frac{V_0 - E_z^n}{E_z^n}} & \text{si } n \text{ est pair} \\ \cot\left[\sqrt{\frac{m_w^* E_z^n}{2\hbar^2}} L_z\right] &= -\frac{m_w^*}{m_b^*} \sqrt{\frac{V_0 - E_z^n}{E_z^n}} & \text{si } n \text{ est impair} \end{aligned} \quad (2.20)$$

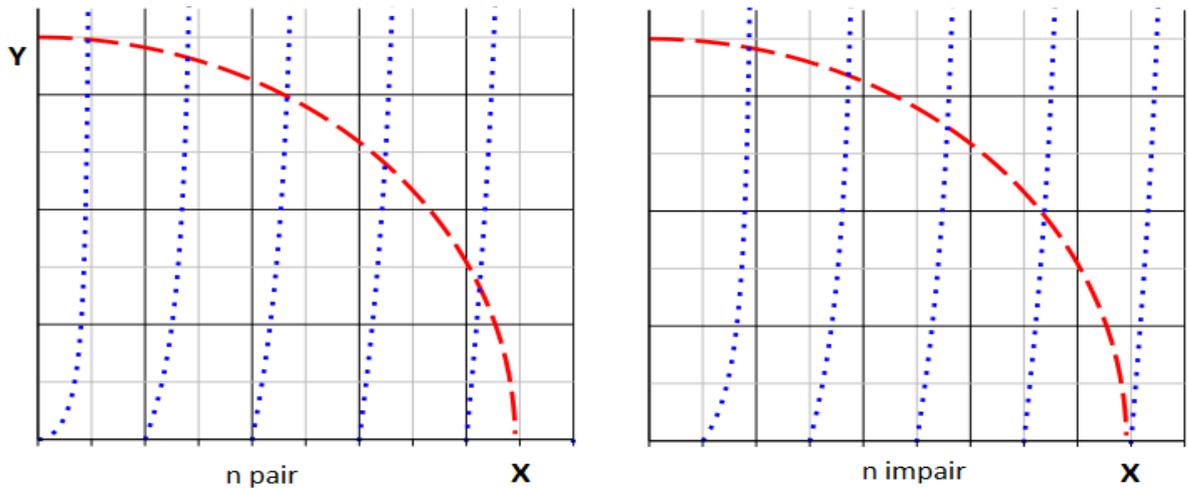
On pose :

$$\begin{cases} X = K_w \frac{L}{2} = \sqrt{\frac{m_w^* E_z^n}{2\hbar^2}} L_z \\ Y = K_b \frac{L}{2} = \sqrt{\frac{m_b^* (V_0 - E_z^n)}{2\hbar^2}} L_z \\ R = \sqrt{\frac{V_0}{2\hbar^2}} L_z \end{cases} \quad (2.21)$$

On obtient l'équation suivante caractéristique d'une ellipse si les deux masses effectives sont différentes, et d'un cercle si les deux masses effectives sont égales :

$$\left\{ \frac{X^2}{m_w^*} + \frac{Y^2}{m_b^*} = R^2 \right. \quad (2.22)$$

Il n'y a pas de solution analytique pour ces équations, leur résolution se fait graphiquement ou numériquement ; on obtient ainsi les valeurs propres de l'énergie  $E_z^n$  comme c'est illustré à travers la figure 2-5.



**Figure 2.5 :** Solutions graphiques des équations séculaires. Les solutions paires et impaires correspondent à l'intersection de l'ellipse avec les fonctions tangente (à gauche) et cotangente (à droite) respectivement.

Les  $X_n = \sqrt{\frac{m_w^* E_z^n}{2\hbar^2}} L_z$  correspondent aux points d'intersections de l'ellipse avec les fonctions séculaires (tan et cotg), ils varient donc d'une manière discrète. Ainsi, les énergies  $E_z^n = \frac{2\hbar^2}{m_w^* L_z^2} X_n^2$  de la particule dans le puits sont quantifiées.

Le nombre d'états confinés à l'intérieur d'un puits quantique est complètement défini par la géométrie du puits. Il dépend de R ; donc de  $V_0$  et de  $L_z$  mais aussi de la particule à travers sa masse : plus la largeur du puits et/ou la masse est grande et/ou le potentiel est petit, les niveaux s'approchent du bas du puits, l'effet quantique diminue.

En effet, en faisant varier la largeur du puits et/ou la hauteur des barrières de potentiel et/ou la masse de particule, il est possible de déplacer les niveaux confinés et d'en changer leur nombre.

### 2.3. Etats électroniques dans les super-réseaux

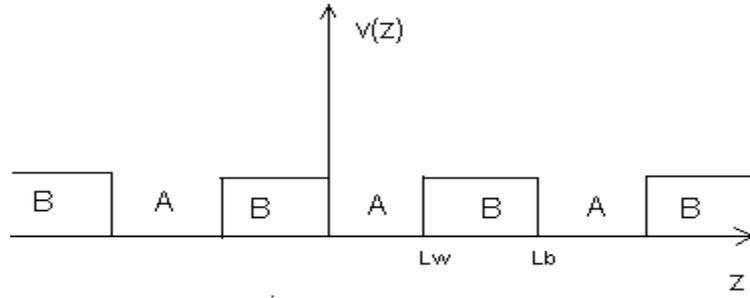
Dans cette partie, nous introduisons les notions fondamentales concernant le confinement quantique des électrons dans un puits de potentiel. Le but n'est pas de décrire en détail les modèles utilisés mais de donner les bases nécessaires au calcul des niveaux d'énergie.

#### 2.3.1. Approximation de la fonction enveloppe

Les états électroniques sont déterminés dans le cadre du formalisme de la fonction enveloppe [1]. Considérons le mouvement de l'électron dans une seule bande (la bande de conduction). La fonction d'onde  $\psi(\mathbf{r})$  de l'électron s'écrit comme le produit de la fonction de Bloch au bas de la bande de conduction  $U_{\Gamma}(\vec{r})$  par une fonction enveloppe  $f(\mathbf{r})$ , lentement variable à l'échelle atomique :

$$\psi(\vec{r}) = f(\vec{r})U_{\Gamma}(\vec{r}) \quad (2.23)$$

La fonction enveloppe permet de décrire la structure d'une hétérostructure à des locaux autres que en voisinage de l'extrémum  $k_0$ , c'est une fonction lentement variable à l'échelle atomique [1].



**Figure 2.6 :** Profil de la bande de conduction d'une hétérostructure [1]

L'hypothèse de base de la fonction enveloppe est de prendre les fonctions de Bloch rapidement variables identiques dans les deux matériaux c à d :

$$U_{l,k_0}^A(r) = U_{l,k_0}^B(r) , \text{ avec } 1 \leq l \leq 8 \quad (2.24)$$

Les  $U_{l,k_0}(r)$  sont supposées connues et forment la base de calcul.

$$\Psi(r) = \sum_{l=1}^8 f_l^A(k_A, r) U_{l,k_0}(r) \quad \text{Si } \in A \text{ (dans la région A)} \quad (2.25)$$

$$\Psi(r) = \sum_{l=1}^8 f_l^B(k_B, r) U_{l,k_0}(r) \quad \text{Si } \in B \text{ (dans la région B)} \quad (2.26)$$

$f_l^{A,B}(k_{A,B}, r)$  sont les fonctions enveloppe qui décrivent le comportement des électrons dans le superréseau.

L'hamiltonien de l'hétérostructure est donné par :

$$H = \frac{P^2}{2m} + V_A(r)Y_A + V_B(r)Y_B \quad (2.27)$$

$Y_A$  et  $Y_B$  sont les fonctions de Heaviside.

Puisque les électrons sont libres dans le plan (x, y) et confinés dans la direction de croissance z, la fonction enveloppe devient :  $f_l^{(A,B)}(r) = \frac{1}{\sqrt{S}} e^{ik_{\perp}r_{\perp}} \chi_l^{(A,B)}(z)$

Ainsi

$$\Psi^{(A,B)}(r) = \frac{1}{\sqrt{S}} e^{ik_{\perp}r_{\perp}} \sum_{l=1}^8 \chi_l^{(A,B)}(z) U_{l,0}(r) \quad (2.28)$$

En diagonalisant la matrice de H, on aboutit à un système d'équations dans lequel les  $\chi_l^{(A,B)}(z)$  obéissent à l'équation :  $D^0(z, \frac{\partial}{\partial z})\chi = \epsilon\chi$

Où  $D^0$  est une matrice  $8 \times 8$  (8 étant le nombre de bandes prises en considération dans les calculs de bande de chacun des matériaux).  $\tilde{\chi}$  est le vecteur de dimension 8 constitué des composantes de  $\psi$  dans la base des  $\{U_{\ell,0}(\vec{r})\}_{1 \leq \ell \leq 8}$ .

Les éléments de la matrice  $D^0$  sont donnés par :

$$D_{\ell,m}^0(z, \frac{\partial}{\partial z}) = \left[ \epsilon_{\ell,0}^{(A)} + V_{\ell}(z) + \frac{\hbar^2 k_{\perp}^2}{2m_0} - \frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right] \delta_{\ell,m} + \frac{\hbar \vec{k}_{\perp}}{m_0} \langle \ell | \vec{P}_{\perp} | m \rangle - \frac{i\hbar}{m_0} \langle \ell | P_z | m \rangle \frac{\partial}{\partial z} \quad (2.29)$$

$$\text{Avec} \quad V_{\ell}(z) = 0 \text{ si } z \in A \quad \text{et} \quad V_{\ell}(z) = \epsilon_{\ell,0}^{(B)} - \epsilon_{\ell,0}^{(A)} = V_{\ell} \text{ si } z \in B$$

Ainsi les fonctions enveloppes  $\chi_{\ell}(z)$  sont solutions du système différentiel du second ordre ( $8 \times 8$ ) :

$$\sum_{m=\ell}^8 \left\{ \left[ \epsilon_{m,0}^{(A)} + V_m(z) + \frac{\hbar^2 k_{\perp}^2}{2m_0} - \frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right] \delta_{\ell,m} - \frac{i\hbar}{2m_0} \langle \ell | P_z | m \rangle \frac{\partial}{\partial z} + \frac{\hbar \vec{k}_{\perp}}{m_0} \langle \ell | \vec{P}_{\perp} | m \rangle \right\} = \epsilon \chi_{\ell} \quad (2.30)$$

$$\text{Où} \quad 1 \leq \ell \leq 8.$$

La résolution (diagonalisation) de ce système (matrice  $8 \times 8$ ) est très complexe. Mais dans le cas où les mouvements dans le plan et suivant la direction de croissance sont découplés (non corrélés), on s'intéresse uniquement au mouvement dans la direction de croissance. On pourra, ainsi, faire les calculs en prenant  $\vec{k}_{\perp} = \vec{0}$ .

Le choix particulier de la base des  $U_{\ell,0}$  est fait à partir d'une combinaison linéaire des états de Bloch  $|S\rangle, |X\rangle, |Y\rangle$  et  $|Z\rangle$  (formés à partir des états atomiques s et p). Le tableau II.1 regroupe les éléments de la base  $\{U_{\ell,0}(\vec{r})\}_{1 \leq \ell \leq 8}$  donnés par [4] :

**Tableau 2.1** : Eléments de la base  $\{U_{\ell,0}(\vec{r})\}_{1 \leq \ell \leq 8}$ 

	$U_{\ell,0}$	Notations $ J, J_z\rangle$
$\Gamma_6$	$U_1 =  iS \uparrow\rangle$ $U_2 =  iS \downarrow\rangle$	$ S, 1/2, 1/2\rangle$ $ S, 1/2, -1/2\rangle$
$\Gamma_8^{\text{lourd}}$	$U_3 = \sqrt{1/2}  X + iY \uparrow\rangle$ $U_4 = \sqrt{1/2}  X - iY \downarrow\rangle$	$ P, 3/2, 3/2\rangle$ $ P, 3/2, -3/2\rangle$
$\Gamma_8^{\text{léger}}$	$U_5 = -\sqrt{2/3}  Z \uparrow\rangle + \sqrt{1/6}  X + iY \downarrow\rangle$ $U_6 = -\sqrt{2/3}  Z \downarrow\rangle - \sqrt{1/6}  X - iY \uparrow\rangle$	$ P, 3/2, 1/2\rangle$ $ P, 3/2, -1/2\rangle$
$\Gamma_7^{so}$	$U_7 = \sqrt{1/3}  Z \uparrow\rangle + \sqrt{1/3}  X + iY \downarrow\rangle$ $U_8 = \sqrt{1/3}  Z \downarrow\rangle - \sqrt{1/3}  X + iY \uparrow\rangle$	$ P, 1/2, 1/2\rangle$ $ P, 1/2, -1/2\rangle$

En réordonnant les éléments de la base  $\{U_{\ell,0}(\vec{r})\}_{1 \leq \ell \leq 8}$ , le système différentiel donnant l'équation du mouvement  $D\tilde{\chi} = \varepsilon\tilde{\chi}$  se simplifie sous la forme :

$$\begin{bmatrix} D^+ & 0 \\ 0 & D^- \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \chi_+ \\ \chi_- \end{bmatrix} = \varepsilon \begin{bmatrix} \chi_+ \\ \chi_- \end{bmatrix} \quad (2.31)$$

Où  $D^+$  et  $\chi_+$  ( $D^-$  et  $\chi_-$ ) sont respectivement la matrice et le vecteur dans la base  $U_{10}; U_{30}; U_{50}; U_{70}$  (dans la base  $U_{20}; U_{40}; U_{60}; U_{80}$ ).  $D^+$  et  $D^-$  étant identiques, leur diagonalisation donnera des énergies doublement dégénérées.

Dans la matrice  $D^+(z, \frac{\partial}{\partial z})$ , les états relatifs aux trous lourds  $|P, \frac{3}{2}, \frac{3}{2}\rangle$  sont maintenant découplés des états relatifs aux particules légères  $|S, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle$ ,  $|P, \frac{3}{2}, \frac{1}{2}\rangle$  et  $|P, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle$ . Leur mouvement est ainsi décrit par l'équation différentielle suivante :

$$\left[ -\varepsilon_A + V_P(z) - \frac{1}{2m_0} P_Z (\gamma_1 - 2\gamma_2) P_Z \right] \chi_3(z) = \varepsilon \chi_3(z) \quad (2.32)$$

En ce qui concerne les particules légères, on aura alors une matrice 3×3 à travers laquelle on peut exprimer  $\chi_5$  et  $\chi_7$  en fonction des différentielles de  $\chi_1$  [4] de sorte que le mouvement des particules légères est régit par l'équation suivante :

$$\left\{ \frac{P^2}{3} P_z \left[ \frac{2}{\varepsilon_A + \varepsilon - V_p(z)} + \frac{2}{\varepsilon_A + \varepsilon + \Delta_A - V_\delta(z)} \right] P_z + V_s(z) \right\} \chi_1(z) = \varepsilon \chi_1(z) \quad (2.33)$$

Où  $V_s(z)$ ,  $V_p(z)$  et  $V_\delta(z)$  sont respectivement les offsets des bandes  $\Gamma_6$ ,  $\Gamma_8$  et  $\Gamma_7$ .

Dans le matériau A (puits) dans lequel l'origine des énergies est prise confondue avec le minimum de la bande de conduction, précédente entraîne :

$$\frac{P^2}{3} \left( \frac{2}{\varepsilon_A + \varepsilon} + \frac{1}{\varepsilon_A + \varepsilon + \Delta_A} \right) P_z^2 \chi_1(z) = \varepsilon \chi_1(z) \quad (2.34)$$

Ce qui revient à écrire :

$$\frac{\partial^2}{\partial z^2} \chi_1(z) + k_A^2 \chi_1(z) = 0 \quad (2.25)$$

$$\text{Avec } P_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial z} \quad \text{et} \quad k_A^2 = \frac{\varepsilon(\varepsilon + \varepsilon_A)(\varepsilon + \varepsilon_A + \Delta_A)}{P^2 \hbar^2 (\varepsilon + \varepsilon_A + \frac{2\Delta_A}{3})}$$

Pour les électrons de conduction (6), on aura :

$$\varepsilon = \frac{\hbar^2 k_A^2}{2m_{\Gamma_6}^*(\varepsilon)} \quad (2.36)$$

Avec :

$$\frac{1}{m_{\Gamma_6}^*(\varepsilon)} = \frac{2P^2 (\varepsilon + \varepsilon_A + \frac{2\Delta_A}{3})}{\varepsilon(\varepsilon + \varepsilon_A + \Delta_A)} \quad (2.37)$$

$m_{\Gamma_6}^*(\varepsilon)$  est une fonction de  $\varepsilon$  donc fonction de  $\vec{k}$ , c'est l'effet de la non parabolicité.

Dans le matériau B (barrière), il suffit de translater l'origine, c'est-à-dire de prendre  $\varepsilon - V_s$  au lieu de  $\varepsilon$  et de remplacer  $\varepsilon_A$  et  $\Delta_A$  par  $\varepsilon_B$  et  $\Delta_B$  respectivement.

### 2.3.2. Détermination des énergies propres $\mathcal{E}(q)$

Les états électroniques seront donc donnés par :

$$\begin{aligned}\chi_1(z) &= \alpha e^{ik_A z} + \beta e^{-ik_A z} ; & z \in A \\ \chi_1(z) &= \gamma e^{iK_B z} + \lambda e^{-iK_B z} ; & z \in B\end{aligned}\quad (2.38)$$

$$\varepsilon(\varepsilon + \varepsilon_A)(\varepsilon + \varepsilon_A + \Delta_A) = \hbar^2 k_A^2 P^2(\varepsilon + \varepsilon_A + \frac{2\Delta_A}{3}) \quad (2.39)$$

$$(\varepsilon - V_s)(\varepsilon - V_s + \varepsilon_B)(\varepsilon - V_s + \varepsilon_B + \Delta_B) = \hbar^2 k_B^2 P^2(\varepsilon - V_s + \varepsilon_B + \frac{2\Delta_B}{3}) \quad (2.40)$$

Pour un superréseau de type I tel que  $V_s > 0$ ,  $V_p < 0$  et  $V_\delta < 0$  et pour les énergies telles que :  $0 \leq \varepsilon \leq V_s$  ;  $V_p - \varepsilon_A \leq \varepsilon \leq -\varepsilon_A$  ;  $V_\delta - \varepsilon_A - \Delta_A \leq \varepsilon \leq -\varepsilon_A - \Delta_A$

$k_A$  est réel et  $K_B$  est imaginaire pur. Ainsi  $k_B$  peut donc s'écrire sous la forme  $k_B = iK_B$  ( $k_B^2 = -K_B^2$ )

Dans ce cas les fonctions d'onde sont données par :

$$\begin{aligned}\chi_1^A(z) &= \alpha \cos(k_A z) + \beta \sin(k_A z) \\ \chi_1^B(z) &= \gamma \exp(k_B z) + \lambda \exp(-k_B z)\end{aligned}\quad (2.41)$$

et  $\alpha, \beta, \gamma, et \lambda$  sont des constantes à déterminer à partir de :

La continuité de la fonction d'onde à l'interface  $L_A$  :

$$\chi_1^A(z = L_A) = \chi_1^B(z = L_A) \quad (2.42)$$

La continuité de la densité de probabilité en  $L_A$  :

$$\frac{1}{m_A^*} \frac{\partial \chi_1^A(z)}{\partial z} \Big|_{z=L_A} = \frac{1}{m_B^*} \frac{\partial \chi_1^B(z)}{\partial z} \Big|_{z=L_A} \quad (2.43)$$

La périodicité dans le superréseau ( $d = L_w + L_b = L_A + L_B$ )  $\chi(z+d) = e^{iqd}\chi(z)$  :

$$\chi_1^B(d) = e^{iqd}\chi_1^A(0) \quad (2.44)$$

$$\frac{1}{m_B^*} \frac{\partial \chi_1^B(z)}{\partial z} \Big|_{z=d} = e^{iqd} \frac{1}{m_A^*} \frac{\partial \chi_1^A(z)}{\partial z} \Big|_{z=0} \quad (2.45)$$

On a donc quatre équations à quatre inconnues. Pour avoir une solution non triviale, ces équations doivent obligatoirement être linéairement dépendantes ; ceci entraîne que le déterminant du système formé à partir des quatre équations est nul. Alors après la simplification du problème, on obtient l'équation de la structure de bande de notre super réseau donnant par la relation suivante :

$$\cos(qd) = \cos(k_A L_A) \cosh(k_B L_B) - \frac{1}{2} \left( \xi - \frac{1}{\xi} \right) \sin(k_A L_A) \sinh(k_B L_B) = F(\varepsilon) \quad (2.46)$$

$$\text{Où : } k_A^2 = \frac{2m_A^* E}{\hbar^2}, k_B^2 = \frac{2m_B^* (V_0 - E)}{\hbar^2} \text{ et } \xi = \frac{m_B^* k_A}{m_A^* k_B}$$

$F(\varepsilon)$  est une fonction oscillatoire atténuée qui dépend de  $\varepsilon$ . Son intersection avec le segment  $[-1,1]$  donne les minibandes d'énergies  $\mathcal{E}(q)$  du superréseau. La relation  $\mathcal{E}(q)$  traduit la relation de dispersion des électrons dans la direction ( $z$ ) de croissance du superréseau. Une intersection de  $F(\varepsilon)$  avec le segment au point  $1(-1)$  correspond à une valeur de l'énergie en centre (en bord) de la zone de Brillouin du superréseau. En effet,  $\cos(qd) = 1$  et  $\cos(qd) = -1$  donnent respectivement :  $q = 0$  (point  $\Gamma$ ) et  $q = \frac{\pi}{d}$  (point X).

### 2.3.3. Fonctions d'onde propres aux points de haute symétrie

#### • Au points $\Gamma(q=0)$

Les relations de continuité de la fonction d'onde à l'interface, de continuité de la densité de probabilité et de périodicité dans le superréseau donnent :

$$\begin{aligned}
 \alpha \cos(k_A L_A) + \beta \sin(k_A L_A) &= \gamma \exp(-K_B L_A) + \lambda \exp(K_B L_A) \\
 \frac{k_A}{m_A} (-\alpha \sin(k_A L_A) + \beta \cos(k_A L_A)) &= \frac{K_B}{m_B} (-\gamma \exp(-K_B L_A) + \lambda \exp(K_B L_A)) \\
 \gamma \exp(-K_B d) + \lambda \exp(K_B d) &= \alpha \\
 \frac{k_A}{m_A} \beta &= \frac{K_B}{m_B} (-\gamma \exp(-K_B d) + \lambda \exp(K_B d))
 \end{aligned} \tag{2.47}$$

En sommant les deux premières équations, membre à membre nous obtenons :

$$\begin{aligned}
 \lambda &= \left( \frac{\alpha + \beta \tilde{\xi}}{2} \right) \exp(-K_B d) \\
 \gamma &= \left( \frac{\alpha - \beta \tilde{\xi}}{2} \right) \exp(K_B d)
 \end{aligned} \tag{2.48}$$

En remplaçant ensuite dans les deux qui restent, nous trouvons que :

$$\begin{aligned}
 \beta &= \alpha \left( \frac{ch(K_B L_B) - \cos(k_A L_A)}{\tilde{\xi} sh(K_B L_B) + \sin(k_A L_A)} \right) \\
 \lambda &= \frac{\alpha}{2} \left[ 1 + \tilde{\xi} \left( \frac{ch(K_B L_B) - \cos(k_A L_A)}{\tilde{\xi} sh(K_B L_B) + \sin(k_A L_A)} \right) \right] \exp(-K_B d) \\
 \gamma &= \frac{\alpha}{2} \left[ 1 - \tilde{\xi} \left( \frac{ch(K_B L_B) - \cos(k_A L_A)}{\tilde{\xi} sh(K_B L_B) + \sin(k_A L_A)} \right) \right] \exp(K_B d)
 \end{aligned} \tag{2.49}$$

Nous avons ainsi exprimé les trois paramètres  $\beta$ ,  $\lambda$  et  $\gamma$  en fonction du quatrième  $\alpha$ , qui est déterminé à partir de la condition de normalisation. Pour une fonction d'onde donnée  $\chi(z)$ , la valeur de  $\alpha$  calculée sur une période  $d$  est donnée par :

$$\int_0^d |\chi(z)|^2 dz = 1 = \int_0^{L_w} |\chi^A(z)|^2 dz + \int_{L_w}^{L_b} |\chi^B(z)|^2 dz \tag{2.50}$$

• Au point X( $q=\pi/d$ )

Les relations de continuité de la fonction d'onde à l'interface, de continuité de la densité de probabilité et de périodicité dans le superréseau donnent :

$$\begin{aligned}
 \alpha \cos(k_A L_A) + \beta \sin(k_A L_A) &= \gamma \exp(-K_B L_A) + \lambda \exp(K_B L_A) \\
 \frac{k_A}{m_A^*} (-\alpha \sin(k_A L_A) + \beta \cos(k_A L_A)) &= \frac{K_B}{m_B^*} (-\gamma \exp(-K_B L_A) + \lambda \exp(K_B L_A)) \\
 \gamma \exp(-K_B d) + \lambda \exp(K_B d) &= -\alpha \\
 \frac{k_A}{m_A^*} \beta &= -\frac{K_B}{m_B^*} (-\gamma \exp(-K_B d) + \lambda \exp(K_B d))
 \end{aligned} \tag{2.51}$$

Ce qui nous donne :

$$\begin{aligned}
 \beta &= \alpha \left( \frac{ch(K_B L_B) - \cos(k_A L_A)}{\tilde{\xi} sh(K_B L_B) + \sin(k_A L_A)} \right) \\
 \lambda &= -\frac{\alpha}{2} \left[ 1 + \zeta \left( \frac{ch(K_B L_B) - \cos(k_A L_A)}{\tilde{\xi} sh(K_B L_B) + \sin(k_A L_A)} \right) \right] \exp(-K_B d) \\
 \gamma &= -\frac{\alpha}{2} \left[ 1 - \zeta \left( \frac{ch(K_B L_B) - \cos(k_A L_A)}{\tilde{\xi} sh(K_B L_B) + \sin(k_A L_A)} \right) \right] \exp(K_B d)
 \end{aligned} \tag{2.52}$$

Où  $\alpha$  est une constante, déterminée par la condition de normalisation.

• **En un point q dans l'intervalle [0,  $\pi/d$ ]**

De la même façon, les relations de continuité de la fonction d'onde à l'interface, de continuité de la densité de probabilité et de périodicité dans le superréseau donnent :

$$\begin{aligned}
 \alpha \cos(k_A L_A) + \beta \sin(k_A L_A) &= \gamma \exp(-K_B L_A) + \lambda \exp(K_B L_A) \\
 \tilde{\xi} (-\alpha \sin(k_A L_A) + \beta \cos(k_A L_A)) &= (-\gamma \exp(-K_B L_A) + \lambda \exp(K_B L_A)) \\
 \gamma \exp(-K_B d) + \lambda \exp(K_B d) &= \alpha e^{iqd} \\
 (-\gamma \exp(-K_B d) + \lambda \exp(K_B d)) &= \beta \tilde{\xi} e^{iqd}
 \end{aligned} \tag{2.53}$$

Les mêmes développements que le paragraphe précédent donnent :

$$\begin{aligned}
 \beta &= \alpha \left( \frac{e^{iqd} ch(K_B L_B) - \cos(k_A L_A)}{\tilde{\xi} e^{iqd} sh(K_B L_B) + \sin(k_A L_A)} \right) \\
 \lambda &= \frac{\alpha}{2} e^{iqd} \left[ 1 + \tilde{\xi} \left( \frac{ch(K_B L_B) - \cos(k_A L_A)}{\xi sh(K_B L_B) + \sin(k_A L_A)} \right) \right] \exp(-K_B d) \\
 \gamma &= \frac{\alpha}{2} e^{iqd} \left[ 1 - \tilde{\xi} \left( \frac{ch(K_B L_B) - \cos(k_A L_A)}{\xi sh(K_B L_B) + \sin(k_A L_A)} \right) \right] \exp(K_B d)
 \end{aligned} \tag{2.54}$$

Et  $\alpha$  est toujours une constante, déterminée par la condition de normalisation.

## 2.4. Application au cas d'un puits quantique symétrique : Exemple GaAs/AlGaAs

Dans le but de valider nos programmes de calcul des états électroniques, nous débutons par des structures relativement simples à savoir un puits quantique simple et un superréseau à base de GaAs-AlGaAs pour une composition d'Aluminium  $x=42\%$ .

### 2.4.1. Puits quantique simple

#### 2.4.1.1. Cas 1 : Le puits et la barrière ont les mêmes masses effectives

Paramètres géométriques :

$$\begin{aligned} L_w &= 50 \text{ \AA} & ; & & V_0 &= 368 \text{ meV} \\ m_w^* &= 0.067m_0 & ; & & m_b^* &= m_w^* = m^* \end{aligned}$$

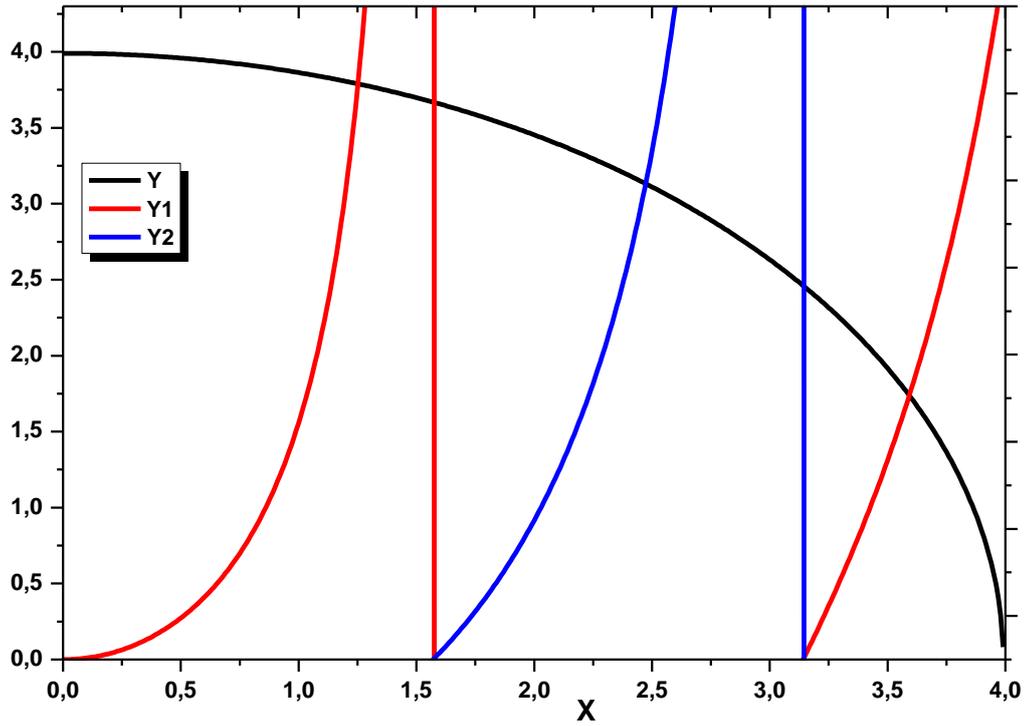
L'équation des fonctions symétriques :  $Y1 = X \cdot \tan(X)$

L'équation des fonctions antisymétriques :  $Y2 = -X \cdot \cot(X)$

L'équation de cercle  $X^2 + Y^2 = R^2$

La figure 2.7 donne la solution graphique :

Alors d'après la figure ci-dessus, on a trois intersections de l'équation de cercle avec les deux fonctions. Et puisque :  $E_i = \frac{\hbar^2 X_i^2}{2m_w L_w^2}$  on peut calculer les énergies confinées dans le puits quantique.



**Figure 2.7 :** Solutions graphiques (points d'intersections)

Les résultats obtenus sont regroupés dans le tableau II-2 :

**Tableau 2.2 :** Intersections, nombres d'onde et valeurs des énergies confinées

i	Intersections $X_i$	$K_w$ ( $A^{-1}$ )	$K_b$ ( $A^{-1}$ )	$E_i$ (meV)
Niveau i=1	1.25	0.025	0.0758	35.317
Niveau i=2	2.47	0.0494	0.0627	137.900
Niveau i=3	3.59	0.0718	0.0349	291.314

D'après ces propriétés géométriques on obtient trois niveaux des énergies confinées. Les fonctions d'ondes propres puisque le potentiel est borné, ont une parité bien déterminée. Ainsi les solutions paires et impaires sont respectivement :

$$\chi_{paire}(z) = A \begin{cases} \cos(k_w L_w) e^{k_b(z+L_w)} & \text{pour } z \leq -L_w \\ \cos(k_w z) & \text{pour } -L_w \leq z \leq L_w \\ \cos(k_w L_w) e^{-k_b(z-L_w)} & \text{pour } z \geq L_w \end{cases} \quad (2.55)$$

$$\chi_{\text{impaire}}(z) = B \begin{cases} \sin(k_w L_w) e^{k_b(z+L_w)} & \text{pour } z \leq -L_w \\ \sin(k_w z) & \text{pour } -L_w \leq z \leq L_w \\ \sin(k_w L_w) e^{-k_b(z-L_w)} & \text{pour } z \geq L_w \end{cases} \quad (2.56)$$

Avec A et B sont des constantes déterminées par les conditions de normalisations.

$$\text{Et } k_w = \sqrt{\frac{2m^* E_i}{\hbar^2}} \text{ et } k_b = \sqrt{\frac{2m^* (V_0 - E_i)}{\hbar^2}}$$

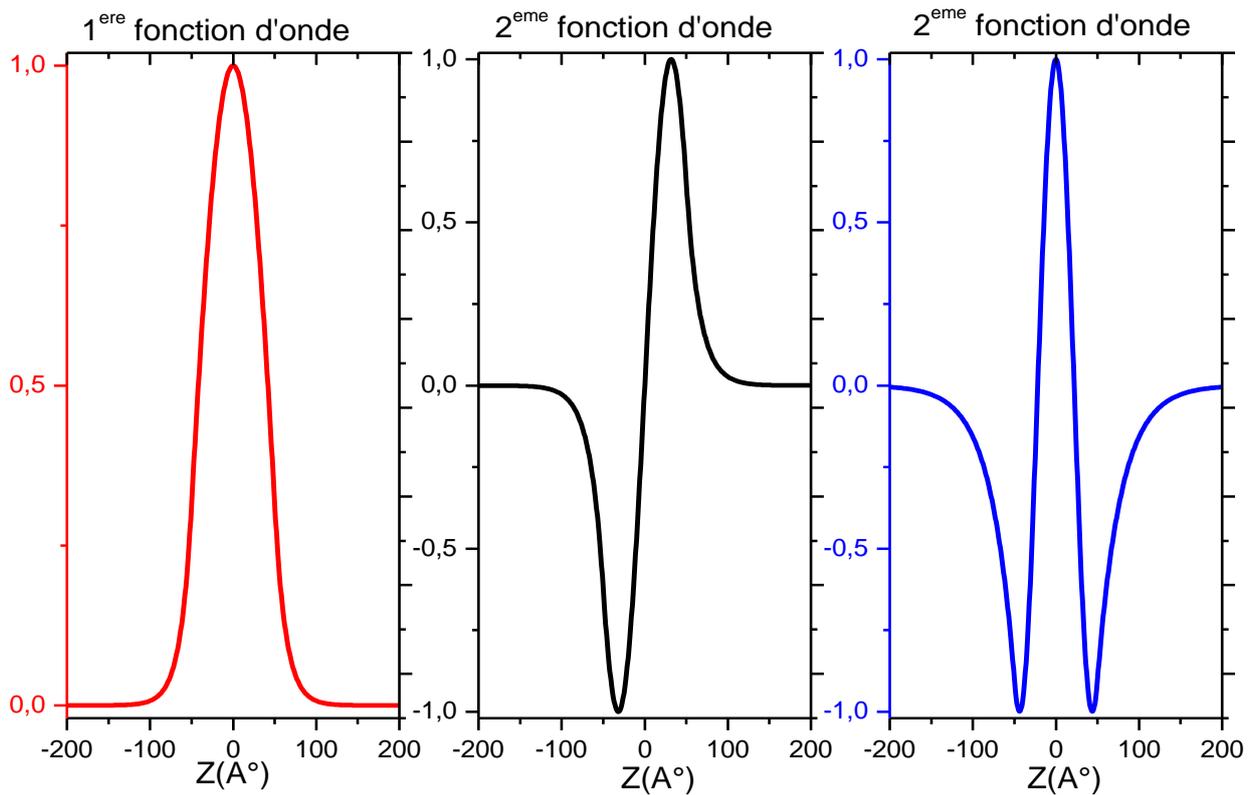
Alors pour ces trois niveaux d'énergie, les fonctions d'onde associées sont données respectivement par :

$$\chi_1(z) = A \begin{cases} \cos(1.253) e^{0.0758(z+50)} & \text{pour } z \leq -L_w \\ \cos(0.025z) & \text{pour } -L_w \leq z \leq L_w \\ \cos(1.253) e^{-0.0758(z-50)} & \text{pour } z \geq L_w \end{cases} \quad (2.57)$$

$$\chi_2(z) = B \begin{cases} -\sin(2.471) e^{0.0623(z+50)} & \text{pour } z \leq -L_w \\ \sin(0.0494z) & \text{pour } -L_w \leq z \leq L_w \\ \sin(2.471) e^{-0.0623(z-50)} & \text{pour } z \geq L_w \end{cases} \quad (2.58)$$

$$\chi_3(z) = A \begin{cases} \cos(3.587) e^{0.0349(z+50)} & \text{pour } z \leq -L_w \\ \cos(0.0718z) & \text{pour } -L_w \leq z \leq L_w \\ \cos(3.587) e^{-0.0349(z-50)} & \text{pour } z \geq L_w \end{cases} \quad (2.59)$$

Avec A et B sont des constantes déterminées par les conditions de normalisations et z en (Å).



**Figure 2.8 :** Fonctions enveloppes associées aux trois niveaux confinés

Maintenant on va passer à l'étude de l'effet de masse sur le nombre des niveaux confinés :

**2.4.1.2. Cas 2 : Le puits et la barrière ont des masses effectives différentes (souvent le cas)**

Paramètres géométriques : avec  $c = \frac{m_b^*}{m_w^*}$

$$L_w = 50 \text{ \AA} \quad ; \quad V_0 = 368 \text{ meV}$$

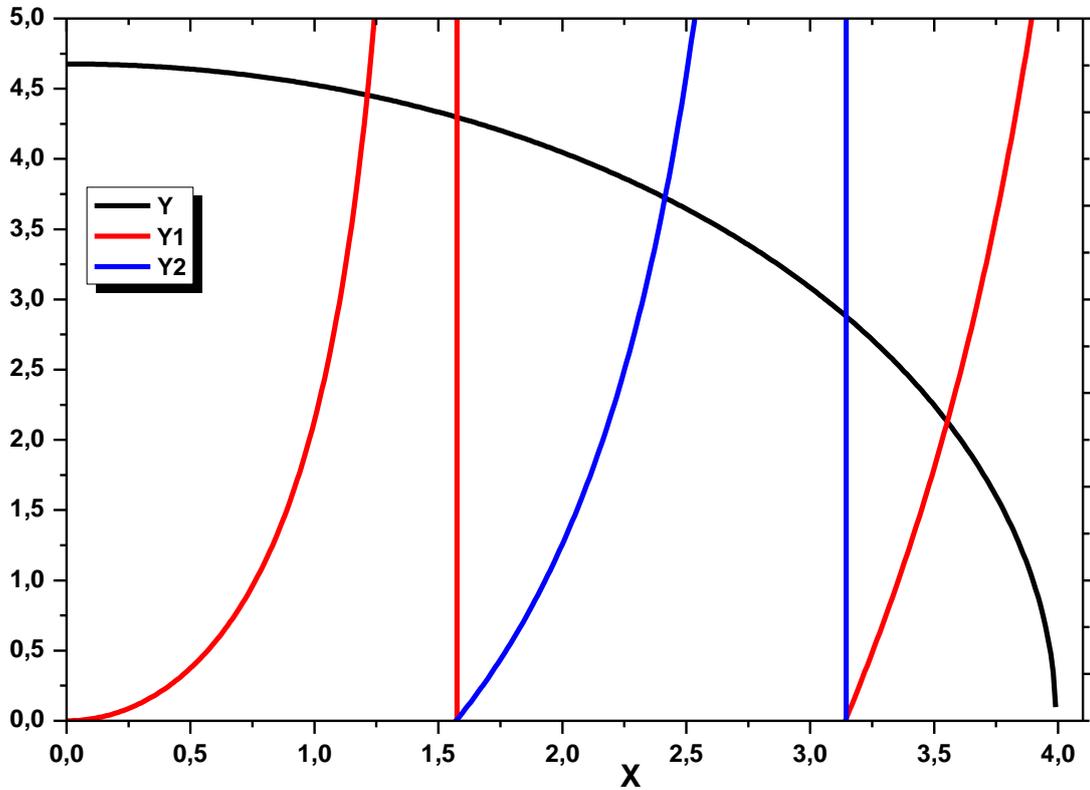
$$m_w^* = 0.067m_0 \quad ; \quad m_b^* = 0.092m_0$$

L'équation des fonctions symétriques :  $Y1 = c.X.\tan(X)$

L'équation des fonctions antisymétriques :  $Y2 = -c.X.\cot(X)$

L'équation d'ellipse 
$$X^2 + \frac{1}{c}Y^2 = R^2$$

On obtient la figure suivant :



**Figure 2.9 :** Solutions graphiques (points d'intersections)

On a trois intersections et donc trois niveaux confinés comme le cas d'un puits simple à masses effectives égales. Les résultats obtenus sont donnés au tableau II-3:

**Tableau 2.3 :** Les intersections, les nombres d'onde et les valeurs des énergies confinées

i	Intersections $X_i$	$K_w (A^{-1})$	$K_b (A^{-1})$	$E_i (meV)$
Niveau i=1	1.22	0.0244	0.0701	33.642
Niveau i=2	2.42	0.0484	0.0757	132.374
Niveau i=3	3.57	0.0714	0.0441	288.077

L'effet des masses effectives différentes apparaît comme une diminution des énergies des niveaux confinés qui est généralement négligeable par rapport au puits quantique ayant des masses effectives égales.

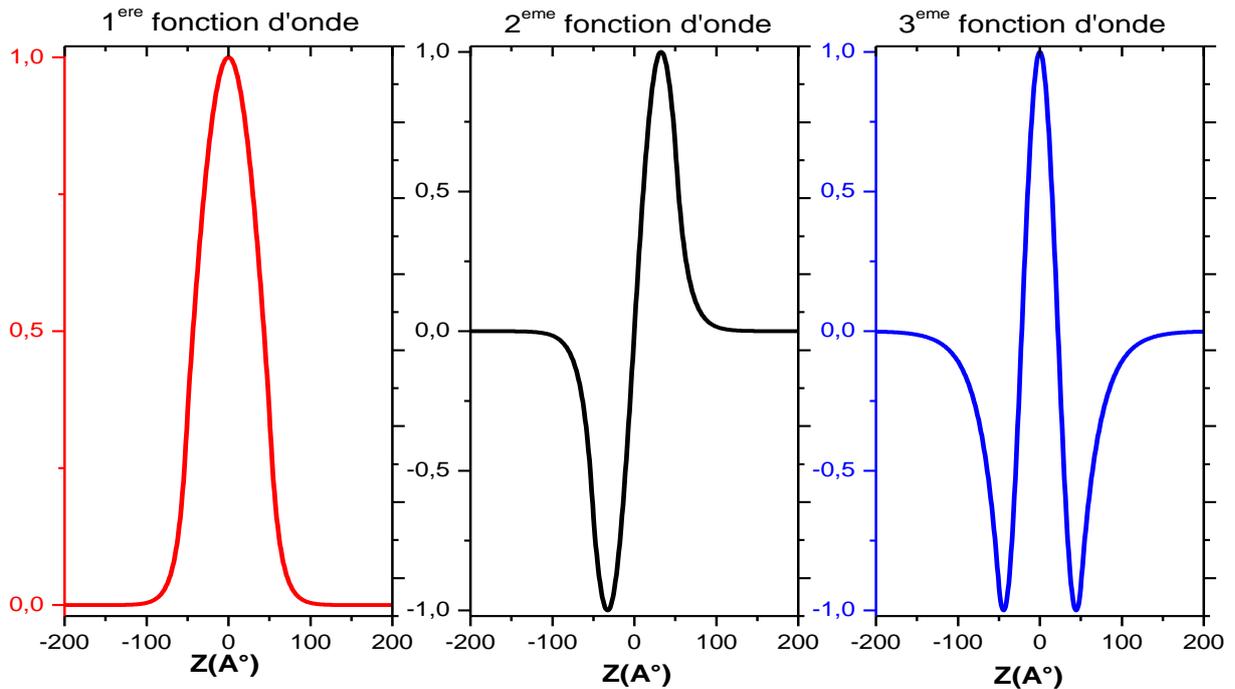
Les fonctions d'ondes associées sont :

$$\chi_1(z) = A \begin{cases} \cos(1.22)e^{0.090\kappa(z+50)} & \text{pour } z \leq -L_w \\ \cos(0.0244z) & \text{pour } -L_w \leq z \leq L_w \\ \cos(1.22)e^{-0.090\kappa(z-50)} & \text{pour } z \geq L_w \end{cases} \quad (2.60)$$

$$\chi_2(z) = B \begin{cases} -\sin(2.405)e^{0.0757\kappa(z+50)} & \text{pour } z \leq -L_w \\ \sin(0.0484z) & \text{pour } -L_w \leq z \leq L_w \\ \sin(2.405)e^{-0.0757\kappa(z-50)} & \text{pour } z \geq L_w \end{cases} \quad (2.61)$$

$$\chi_3(z) = A \begin{cases} \cos(3.57)e^{0.044\kappa(z+50)} & \text{pour } z \leq -L_w \\ \cos(0.0714z) & \text{pour } -L_w \leq z \leq L_w \\ \cos(3.57)e^{-0.044\kappa(z-50)} & \text{pour } z \geq L_w \end{cases} \quad (2.62)$$

Avec A et B sont des constantes déterminées par les conditions de normalisations et z en (Å).



**Figure 2.10** : Fonctions enveloppes associées aux trois niveaux confinés

## 2.4.2. Super réseau GaAs/AlGaAs

### 2.4.2.1. Définition

En physique des semi-conducteurs, un superréseau est un empilement périodique de couches de faibles épaisseurs (typiquement quelques nanomètres). Si ces couches sont suffisamment fines, un couplage quantique est possible. Les énergies des minibandes résultant sont dépendantes de l'épaisseur et de la composition des couches utilisées.

### 2.4.2.2. Multi-puits et superréseau

Pour voir la différence entre un multi-puits et un superréseau, on calcul la variation de l'élargissement des minibandes en fonction de la largeur de barrière  $L_b$ .

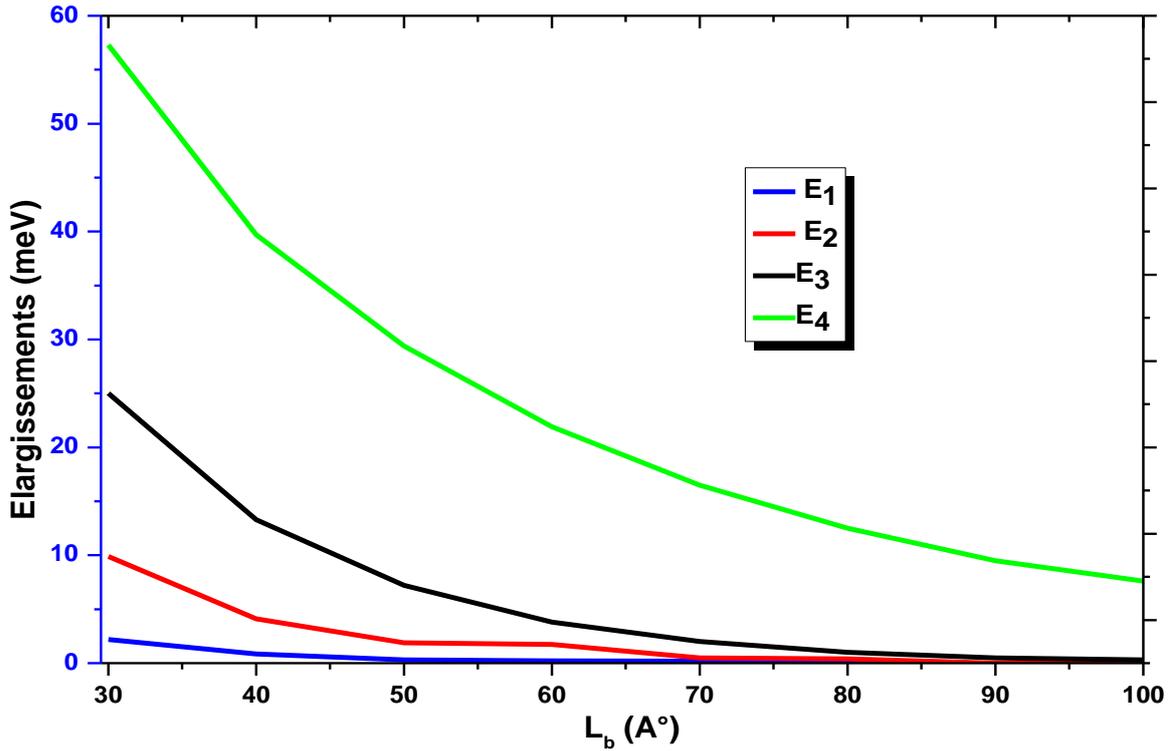
Pour une composition de l'aluminium  $x=42\%$ , les paramètres du superréseau sont :

$$\begin{aligned} L_w &= 125 \text{ \AA} & ; & & V_0 &= 368 \text{ meV} \\ m_w^* &= 0.067m_0 & ; & & m_b^* &= 0.092m_0 \end{aligned}$$

On obtient les résultats représentés sur la figure 2.11:

D'après la figure 2.11, on constate que l'effet de la longueur  $L_b$  sur l'élargissement des minibandes diffère d'un niveau confiné à l'autre.

Concernant le niveau fondamental, l'élargissement est très faible pour  $L_b$  inférieur à 50 Å et au-delà l'élargissement s'annule et dans ce cas il n'est plus une minibande. Par contre l'élargissement est plus important pour les niveaux excités, il devient plus important en allant du premier niveau excité au dernier. Et au-delà d'une certaine valeur de la largeur de la barrière, lorsque l'élargissement est nul pour tous les niveaux qui perdent le caractère d'être des minibandes, la structure devient un multipuits. La structure se comporte comme un ensemble de puits isolés.



**Figure 2.11 :** Elargissements des minibandes en fonction de la largeur de la barrière

L'équation de la structure de bande de notre superréseau est donnée par la relation suivante :

$$\cos(qd) = \cos(k_A L_A) \cosh(k_B L_B) - \frac{1}{2} \left( \xi - \frac{1}{\xi} \right) \sin(k_A L_A) \sinh(k_B L_B) = F(\varepsilon) \quad (2.63)$$

Son tracé détermine les énergies permises pour  $|F(\varepsilon)| \leq 1$  et celles interdites pour  $|F(\varepsilon)| > 1$ . Concernant le cas où  $L_b = 50 \text{ \AA}$ , on obtient les résultats suivants :

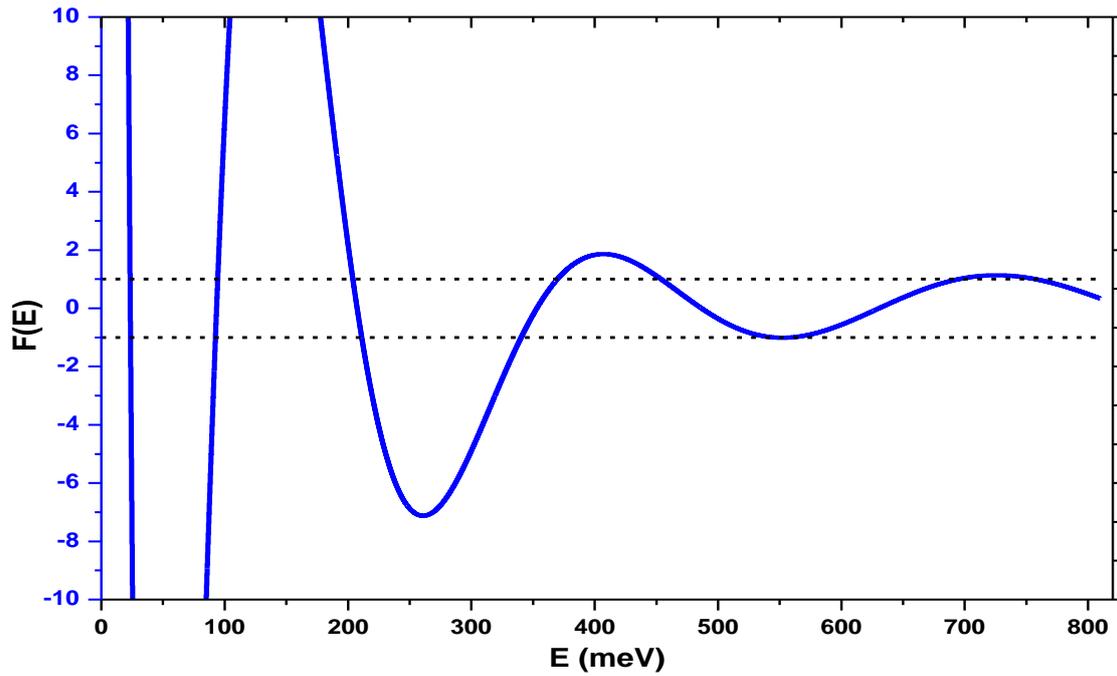


Figure 2.12 : Résolution graphique de  $F(E)=\cos(qd)$

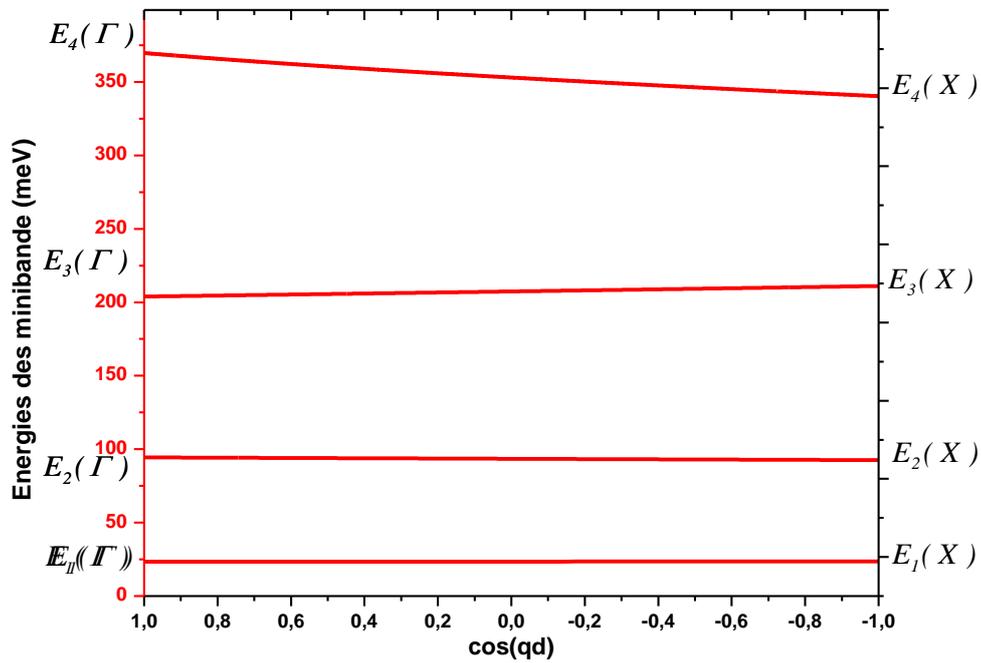


Figure 2.13 : Dispersion des minibandes du superréseau (4 minibandes)

Donc, dans le superréseau considéré, on a quatre minibandes qui traduisent la dispersion de l'électron  $e_i(q = k_z)$  avec  $i=1,2,3,4$ , dans la direction de croissance.

Les valeurs des énergies propres aux extrema, et les élargissements des minibandes dans le superréseau sont présentées dans le tableau 2.4:

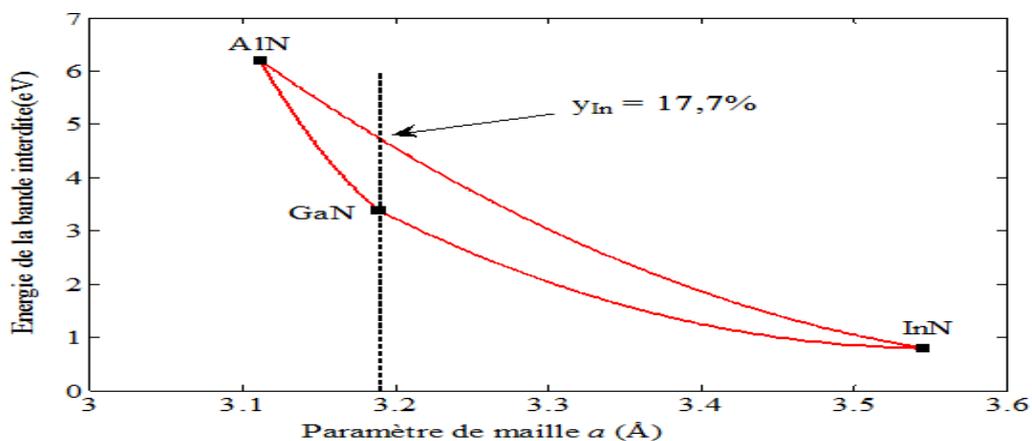
**Tableau 2.4 :** Valeurs des énergies confinées aux points de haute symétrie  $\Gamma$  et  $X$ , et élargissements des minibandes correspondantes

Minibande		$E_1$	$E_2$	$E_3$	$E_4$
E (meV)	Point ( $\Gamma$ )	23.30	94.39	203.90	369.67
	Point ( $X$ )	23.64	92.54	211.09	340.31
Elargissement $ E_\Gamma - E_X $ (meV)		0.34	1.85	7.19	29.36

## 2.5. Application au cas de puits quantique asymétrique GaInN/AlInN

### 2.5.1. Description du système GaInN/AlInN

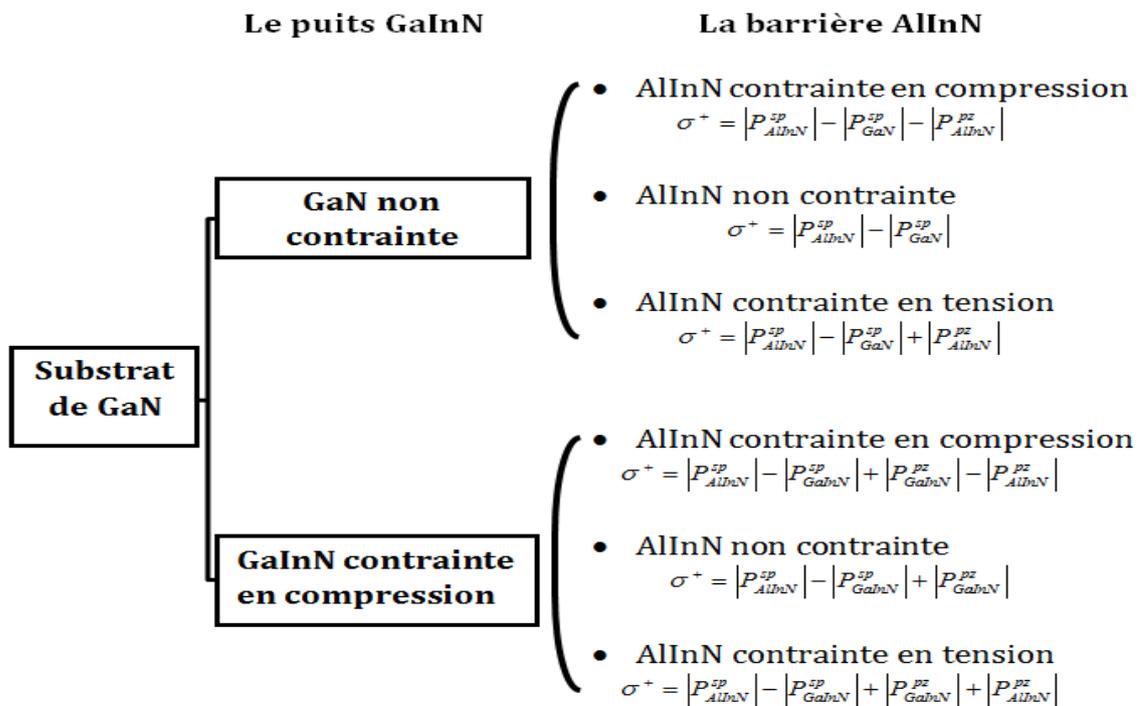
Le système GaInN-AlInN est une hétérojonction dans laquelle le matériau GaInN joue le rôle de puits et le matériau AlInN représente la barrière. Grâce aux performances des techniques de croissances, le système GaInN-AlInN est bien réalisé et donne des interfaces de bonne qualité (quasi-abruptes). La qualité de ce système est gagée par l'accord/désaccord paramétrique de maille de deux matériaux puits et barrière. Cependant, le désaccord peut atteindre jusqu'à 2.5% lorsqu'on passe de GaN à AlN, et selon la fraction molaire d'indium on peut avoir des structures moins contraintes aussi bien que des structures non contraintes. La Figure 2.14 indique l'énergie de la bande interdite des alliages III-N en fonction de leur paramètre de maille.



**Figure 2.14** : Energie de la bande interdite des alliages III-N recommandée par **Vurgaftman** en fonction du paramètre de maille  $a$  [5].

### 2.5.2. État de contrainte

Les vecteurs de polarisation spontanée ne changent pas avec la contrainte. Il n'y a que les vecteurs de polarisation piézoélectrique qui sont influencés par la contrainte. Nous avons deux possibilités pour la contrainte de la couche GaInN sur le pseudo-substrat de GaN : sans contrainte et contrainte en compression. Chaque cas impose trois états de contrainte pour la couche d'AlInN et ainsi une densité de charge positive à l'interface, tout en conservant le matériau GaInN comme puits et le AlInN comme barrière (Figure 2-15).



**Figure 2.15** : Configurations de l'état de contrainte et de la densité de charges surfaciques de l'hétérostructure AlInN/GaInN dans la polarité gallium [6]

Dans le premier cas, la contrainte est entièrement dans le matériau barrière, c'est le cas où on a un puits GaN non contraint. Il n'y a donc que la contribution de polarisation spontanée. Si la fraction de In dans la barrière AlInN est de l'ordre de  $y=0.177$ , on aura une structure non contrainte, et la polarisation piézoélectrique s'annule que ce soit dans le puits ou dans la barrière. Nous ne nous intéressons à ce cas dans la suite de ce travail. La discontinuité

de polarisation qui créera la densité de charge au niveau de l'interface se calcule à partir de la différence entre les deux polarisations spontanées propres à chaque matériau puits et barrière.

Dans le deuxième cas, la contrainte est partagée entre le puits et la barrière, selon le niveau de contrainte en compression de la couche de GaInN. La polarisation piézoélectrique dans l'AlInN peut diminuer, s'annuler ou changer de signe.

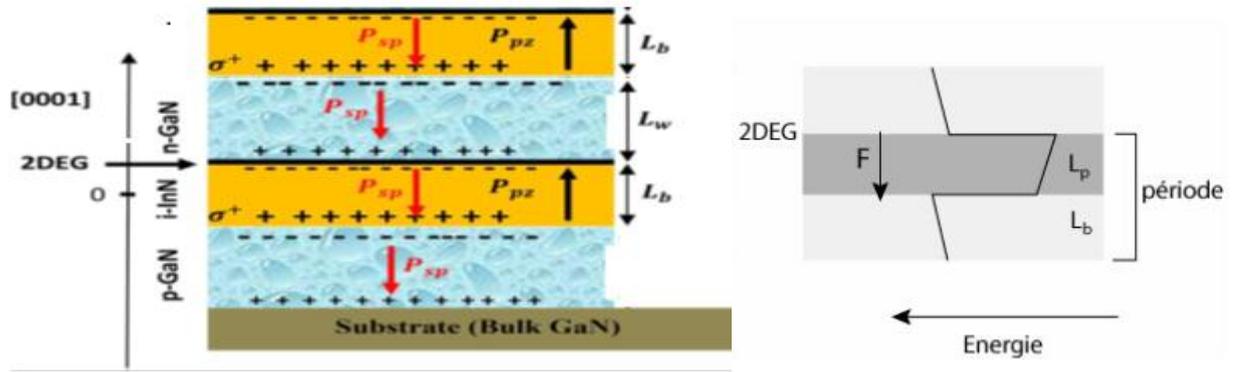
Pour la polarité azote, les densités de charges à l'interface suivent les mêmes évolutions que celles obtenues pour la polarité de gallium à la différence qu'elles sont négatives. Ceci implique la présence d'un gaz de trous à l'interface AlInN/GaInN. Cependant, comme j'ai déjà cité dans le premier chapitre, notre matériau dans la polarité azote devient très réactif, et la mobilité des trous est largement plus faible que celle des électrons [7] ce qui justifie son utilité importance pour la fabrication des transistors. C'est pourquoi nous ne nous intéressons qu'à la structure AlInN/GaInN de polarisation gallium.

### 2.5.3. Répartition du champ

La présence du champ électrique interne, ou plus scientifiquement l'effet Stark confiné quantique [8], dans les puits quantiques à base des nitrures, a un rôle très important sur les propriétés. Nous avons vu dans le premier chapitre que les structures wurtzite sont naturellement l'objet d'une polarisation. La juxtaposition de deux matériaux nitrure en phase wurtzite différents, l'un constitue le puits  $w$  (well) et l'autre la barrière  $b$ , résulte une discontinuité de la polarisation macroscopique totale  $P$  (somme des deux contributions de polarisation, spontanée et piézoélectrique) entre ces deux matériaux, ce qui crée un plan de charges résiduelles fixes à l'interface entre les matériaux puits/barrière (**Figure 2-16**) :

$$\sigma = (P_b - P_w)n \quad (2.64)$$

$n$  : est le vecteur suivant la direction de croissance. Cette accumulation de charges aux interfaces des structures quantiques correspond à la présence d'un champ électrique interne macroscopique  $F$ , différent dans chaque matériau.



**Figure 2.16** - (à gauche) Polarisation spontanée et piézoélectrique dans une hétérostructure de GaN/AlInN contrainte dans la polarité galium. Et (à droite) Profil de potentiel de bande de conduction correspondant [9].

Dans le cas d'une hétérostructure, la composante normale du vecteur déplacement électrique est continue à travers l'interface [10]:

$$D = \varepsilon F + P \Leftrightarrow \varepsilon_w \varepsilon_0 F_w + P_w = \varepsilon_b \varepsilon_0 F_b + P_b \quad (2.65)$$

$\varepsilon_w$  ( $\varepsilon_b$ ) est la constante diélectrique relative du puits (barrière).

La deuxième condition, communément utilisée pour les structures périodiques, traduit une chute de potentiel nulle aux bornes de chaque période [11]. Elle s'exprime par la relation suivante :

$$-e(L_w F_w + L_b F_b) = 0 \quad (2.66)$$

Ces deux relations permettent d'exprimer analytiquement les champs électriques internes dans le puits et la barrière, résultants de la discontinuité des polarisations totales à leur interface :

$$\begin{aligned} F_w &= \frac{(P_b - P_w)L_b}{\varepsilon_0(\varepsilon_w L_w + \varepsilon_b L_b)} \\ F_b &= \frac{-(P_b - P_w)L_w}{\varepsilon_0(\varepsilon_w L_w + \varepsilon_b L_b)} = -F_w \frac{L_w}{L_b} \end{aligned} \quad (2.67)$$

Dans l'hypothèse où  $\varepsilon_A \cong \varepsilon_B$  on obtient :

$$F_w = \frac{(P_b - P_w)}{\epsilon_0 \epsilon_w} \frac{L_b}{(L_w + L_b)} \quad (2.68)$$

Dans le puits, le champ électrique est une fonction décroissante (croissante) de la largeur de puits (barrière) [12], et inversement dans la barrière. On peut donc faire varier le champ électrique dans le puits (barrière) en jouant sur les compositions et les largeurs des matériaux puits et barrières.

Les deux contributions des polarisations participent de façon significative aux valeurs des champs électriques internes. Le champ électrique résulte à moitié de la composante spontanée de la polarisation dans le cas de GaN/AlN [9,12] alors qu'il résulte plutôt de la composante piézoélectrique dans le cas de GaN/InN [9,13]. En effet la différence de polarisation spontanée est grande dans le premier cas alors qu'elle est faible dans le second.

#### 2.5.4. Profil de potentiel de conduction

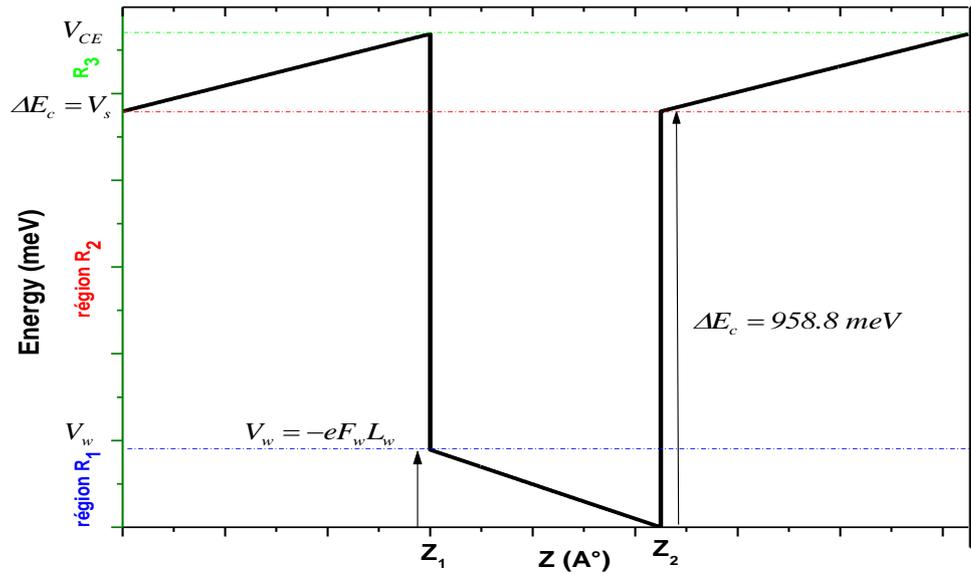
Le potentiel  $U_H(z)$  d'une hétérostructure résulte fréquemment de la discontinuité de bande ( $\Delta E_c$ : offset) à l'interface des deux matériaux à cause de la différence des positions des bandes de conduction. Mais, cette fois ci, la présence de champs électriques internes ( $F_w$  et  $F_b$ ) dans chacun des deux matériaux va l'influencer. La variation du potentiel de la bande de conduction le long de la structure est donnée par :

$$U_H(z) = \begin{cases} eF_b(z - z_1) - eF_w(z_2 - z_1) + \Delta E_c & z < z_1 \\ eF_w(z - z_2) & z_1 \leq z \leq z_2 \\ eF_b(z - z_2) + \Delta E_c & z > z_2 \end{cases} \quad (2.69)$$

Et plus facilement, en employant la condition où la chute de potentiel aux bornes de chaque période est nulle, on obtient :

$$U_H(z) = \begin{cases} eF_b z + \Delta E_c & z < z_1 \\ eF_w(z - z_2) & z_1 \leq z \leq z_2 \\ eF_b(z - z_2) + \Delta E_c & z > z_2 \end{cases} \quad (2.70)$$

$z_1$  et  $z_2$  déterminent les positions de la barrière et du puits :  $z_1 = L_b$  et  $z_2 = L_b + L_w$  comme c'est illustré sur la **Figure 2-17** La position  $z_2$  est prise comme origine des potentiels.



**Figure 2.17** : Profil de potentiel de la bande de conduction

Le profil de la bande de conduction est en forme de dents de scie : c'est une fonction linéaire par morceaux ayant des sauts aux interfaces de l'hétérostructure (on admet que les interfaces sont abruptes et que leurs effets sur le potentiel se traduisent par une discontinuité de potentiel dont la valeur est un paramètre caractéristique de l'hétérostructure). Les champs électriques internes dans  $\text{Ga}_{1-x}\text{In}_x\text{N}/\text{Al}_{1-y}\text{In}_y\text{N}$  peuvent avoir des valeurs importantes (de quelques MV/cm). Les champs dans le puits et dans les barrières sont de signes opposés.

Pour la suite, on distinguera trois régions énergétiques sur ce profil: de 0 à  $-eF_w L_w = V_w$  ( $R_1$ ); de  $V_w$  à  $V_s = \Delta E_c$  ( $R_2$ ) et de  $\Delta E_c$  à  $V_{CE}$  ( $R_3$ ).

### 2.5.5. Méthode du calcul numérique (méthode des différences finies)

Dans le cadre du modèle de la fonction enveloppe, l'équation de Schrödinger se ramène à la résolution de l'équation différentielle suivante :

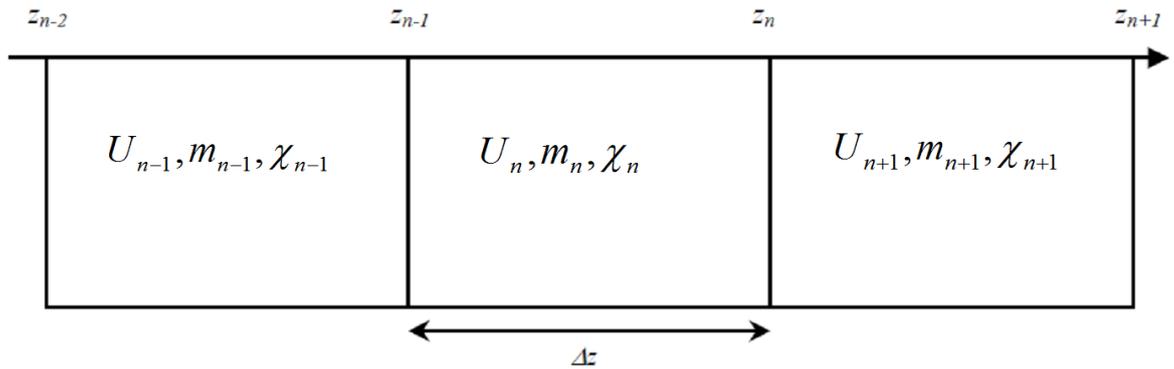
$$\left( \frac{-\hbar^2}{2} \frac{d}{dz} \left( \frac{1}{m^*(z)} \frac{d}{dz} \right) + U_H(z) \right) \chi_i(z) = E_i \chi_i(z) \quad (2.71)$$

La détermination des énergies et fonctions enveloppes propres solution de l'équation de Schrödinger est réalisée à travers une méthode de résolution numérique différente de celle, graphique, utilisée pour les superréseaux ou puits quantiques carrés. Cette méthode est basée sur la méthode des différences finies, particulièrement adaptée aux profils de potentiels

asymétriques, mais pour des structures de dimensions géométriques réduites. Il est à signaler qu'à cause des variations linéaires dans le potentiel  $U_H(z)$ , l'équation différentielle du mouvement des électrons de conduction, dans la direction de croissance, admet des solutions explicites sous forme de fonctions d'Airy [14]. Cependant, les équations traduisant les conditions de raccordement entre les régions ne se résolvent que numériquement et nous empêchent d'obtenir la solution globale sous la forme analytique. Nous avons ainsi décidé d'utiliser la méthode des différences finies.

A travers cette méthode on considère la structure comme une succession de  $(n+1)$  couches de largeurs identiques très faibles égales à  $\Delta z$ . Dans chaque couche, la masse  $m_n$ , le potentiel  $U_n$  et la fonction enveloppe  $\chi_n$  sont constants (**Figure 2-18**) de sorte que l'équation du mouvement des électrons dans chaque couche est décrite par :

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dz} \frac{1}{m_n} \frac{d}{dz} + U_n - E\right) \chi_n(z) = 0 \quad (2.72)$$



**Figure 2.18 :** Structure est découpée en  $n+1$  couches de même épaisseur  $\Delta z$ , dans lesquelles le potentiel  $U_n$ , la masse  $m_n$  et la fonction enveloppe  $\chi_n$  sont constants.

Nous définissons la région  $n$  comme l'intervalle  $[z_{n-1}, z_n]$ . La quantité  $\frac{d}{dz} \frac{1}{m_n} \frac{d}{dz} \chi_n(z)$  peut s'écrire comme suit :

$$\frac{d}{dz} \left( \frac{1}{m_n} \frac{d}{dz} \chi_n \right) = \lim_{\Delta z \rightarrow 0} \left[ \frac{\frac{1}{m(z_n)} \left( \frac{d\chi_n}{dz} \right)_{z_n} - \frac{1}{m(z_{n-1})} \left( \frac{d\chi_n}{dz} \right)_{z_{n-1}}}{\Delta z} \right] \quad (2.73)$$

D'après la convention que nous avons prise :

$$\frac{d}{dz} \left( \frac{1}{m_n} \frac{d}{dz} \chi_n \right) = \lim_{\Delta z \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta z} \left( \frac{1}{m_n} \left( \frac{d\chi_n}{dz} \right)_{z_n} - \frac{1}{m_{n-1}} \left( \frac{d\chi_n}{dz} \right)_{z_{n-1}} \right)$$

$$\frac{d}{dz} \left( \frac{1}{m_n} \frac{d}{dz} \chi_n \right) = \lim_{\Delta z \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta z^2} \left[ \frac{\chi \left( z_n + \frac{\Delta z}{2} \right) - \chi \left( z_n - \frac{\Delta z}{2} \right)}{m_n} - \frac{\chi \left( z_{n-1} + \frac{\Delta z}{2} \right) - \chi \left( z_{n-1} - \frac{\Delta z}{2} \right)}{m_{n-1}} \right]$$

$$\frac{d}{dz} \left( \frac{1}{m_n} \frac{d}{dz} \chi_n \right) = \lim_{\Delta z \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta z^2} \left[ \frac{\chi_{n+1} - \chi_n}{m_n} - \frac{\chi_n - \chi_{n-1}}{m_{n-1}} \right]$$

Finalement, en injectant cette expression dans l'équation de la masse effective on obtient :

$$\frac{\chi_{n+1}}{m_n} - \chi_n \left( \frac{1}{m_n} + \frac{1}{m_{n-1}} + 2 \frac{\Delta z^2}{\hbar^2} (U_n - E) \right) + \frac{\chi_{n-1}}{m_{n-1}} = 0 \quad (2.74)$$

Posant  $2 \frac{m_n (U_n - E)}{\hbar^2} = k_n^2$ , on exprime la valeur de la fonction enveloppe dans la région (n+1) en fonction de la valeur dans les régions n et (n-1).

$$\chi_{n+1} = \chi_n \left( \Delta z^2 k_n^2 + \frac{m_n}{m_{n-1}} + 1 \right) - \frac{m_n}{m_{n-1}} \chi_{n-1} \quad (2.75)$$

Partant du principe que  $\chi$  est nulle en  $\pm\infty$ , on fixe  $\chi_1 = \chi_2 \approx 0$  : on ne doit pas poser réellement ces valeurs égales à 0 au départ sinon tous les  $\chi_n$  sont nuls. On donne à  $\chi_1$  et  $\chi_2$  une valeur très petite (en pratique  $\sim 10^{-10}$ ) de l'ordre de grandeur de la précision numérique du langage de programmation utilisé. Ensuite, on calcule  $\chi_{n+1}$  pour déterminer les énergies propres de la façon suivante : comme  $\chi_{n+1}$  est fonction de l'énergie E, nous cherchons les énergies  $E_i$  ( $i = 1, 2, \dots$ ) pour lesquelles  $\chi_{n+1} = 0$ . Les énergies ainsi trouvées sont les énergies des niveaux confinés dans le puits, les fonctions d'onde propres associées  $\chi_i$  sont ensuite déterminées.

### 2.5.6. Etats électroniques dans les puits quantiques GaN/Al<sub>0,823</sub>In<sub>0,177</sub>N

On va s'intéresser aux deux structures, non contrainte de GaN/AlInN, de largeur de la barrière  $L_b=60 \text{ \AA}$ , et de largeur de puits  $L_w=25 \text{ \AA}$  et  $L_w=45 \text{ \AA}$  respectivement.

La masse effective, la permittivité relative sont calculées à partir de la loi de Vegard (interpolation linéaire entre les valeurs de AlN et InN) et le gap varie avec la composition selon la loi quadratique :

$$E_{Al_{1-y}In_yN}^g(y) = y.E_{InN}^g + (1-y).E_{AlN}^g - y.(1-y).b \quad (2.76)$$

Où le paramètre de bowing  $b$  comme j'ai déjà cité dans le premier chapitre a pour valeur  $b = 3.326 \text{ eV}$  pour l'alliage  $Al_{1-y}In_yN$ .

Pour la structure non contrainte : le puits GaN et la barrière  $Al_{0,823}In_{0,177}N$  ont pour valeur :

**Tableau 2.5** : Masse effective, énergie interdit et permittivité relative de GaN et GaN/Al<sub>0,823</sub>In<sub>0,177</sub>N

A 300K	GaN	Al <sub>0,823</sub> In <sub>0,177</sub> N
$m^*/m_0$	0.22	0.26
$E_g$ (eV)	3.39	4.7597
$\epsilon_r$	9.5	10.23

Puis, qu'on prend comme deuxième approximation pour simplifier, les permittivités relatives sont égales et égale à celle de la barrière. La discontinuité de polarisation calculée pour la structure non contrainte a pour valeur [15]:

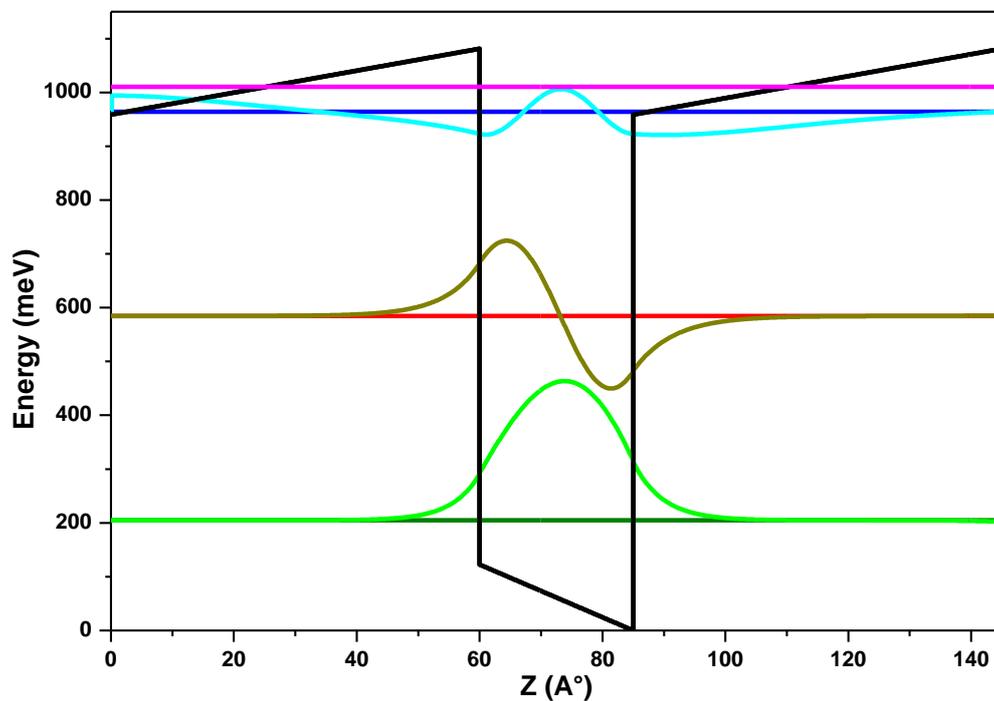
$$\epsilon_r^{puits} = \epsilon_r^{barrière} \text{ et } \Delta E_c = 958.8 \text{ meV} \quad \frac{\Delta P}{\epsilon_0 \epsilon_r} = 0.6946 \text{ MV.cm}^{-1} \quad (2.77)$$

Il est à signaler que les variations d'énergie des différents niveaux sont globalement faibles au-delà de  $L_b=60 \text{ \AA}$  pour une largeur de puits donné. On obtient Alors :

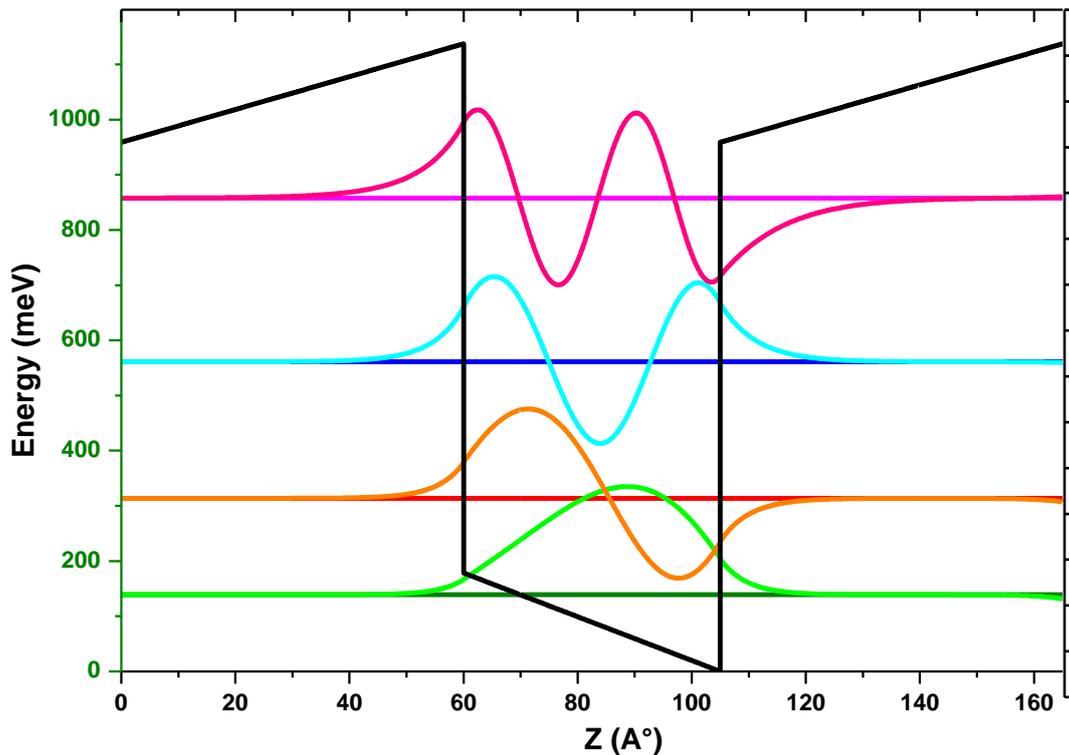
**Tableau 2.6** : Evolution des niveaux confinés et des énergies de transitions en fonction de la largeur du puits pour une largeur de la barrière fixe à 6nm

$L_w$ (Å)	Les niveaux confinés en (meV)			
	$E_1$	$E_2$	$E_3$	$E_4$
10	457,9	984,6		
15	320,3	963,5	992,2	
20	245,4	772,8	995,5	1048
25	202	610,8	999,2	1040
30	175,4	496,8	949,5	1003
35	158,1	417,2	807,4	1006
40	146,5	360,6	687,8	1008
45	138,2	319,6	594,6	942
50	131,9	289,2	522,4	830,9
55	127	266,4	466	735,8
60	123	248,9	421,6	657,4

Sur les figures suivantes, sont représentés le profil, les positions énergétiques et les fonctions enveloppes propres, relatifs à ces deux géométries.



**Figure 2.19** : Profil de la BC, les positions des niveaux confinés et les fonctions enveloppes associées pour  $L_w=25$  Å et  $L_b=60$  Å



**Figure 2.20** : Profil de la BC, la position des niveaux confinés et leurs fonctions enveloppes associées pour  $L_w=45 \text{ \AA}$  et  $L_b=60 \text{ \AA}$

Au-delà de  $L_w=40 \text{ \AA}$ , le quatrième niveau a une énergie  $E_4 < V_s$  (région  $R_2$ ), et voit son énergie descend fortement. Pour la géométrie  $L_w=25 \text{ \AA}$ , trois niveaux sont confinés. Tandis que dans la géométrie  $L_w=45 \text{ \AA}$ , on a quatre niveaux. Il est claires que ces fonctions d'ondes sont visuellement très proche d'avoir une parité bien déterminées comme ceux du puits symétrique, mais à cause de puits qui n'est plus asymétrique, ces fonctions n'ont pas une parité bien précise, mais sont proche.

### Conclusion

Dans ce deuxième chapitre, Après un rappel rapide de certaines modèles et/ou méthodes de calcul du confinement quantique des porteurs, en particulier l'approximation de la fonction enveloppe dans le cadre du modèle de Kane. Nous avons étudié comme un exemple un puits quantique symétrique,  $(\text{GaAs}/\text{Al}_{0.42}\text{Ga}_{0.58}\text{As})$ , l'un des systèmes à base de GaAs à fortes concentrations en Al qui sont à la base de réalisation de QCL émettant dans le moyen infrarouge. Les énergies et fonctions enveloppes propres sont déterminées grâce à une

résolution graphique et numérique. Quatre minibandes sont confinées dont l'élargissement est croissant allant du niveau fondamental au dernier niveau excité. Ceci traduit davantage de dispersion, dans la direction de croissance, pour les niveaux les plus excités pour lesquels le couplage des fonctions enveloppe est plus important. Pour l'exemple d'un puits quantique asymétrique, on a considéré le système GaN/Al<sub>0.823</sub>In<sub>0.177</sub>N, ça dépend de la largeur du puits et/ou barrière, il présente différents niveaux confinés, dont les fonctions d'onde n'ont plus une parité bien déterminées.

### Références

- [1] H. Akabli, «Etude des transitions intersousbandes dans les superréseaux GaAs/AlGaAs et dans les puits quantiques GaInN/AlInN pour l'optoélectronique infrarouge », Thèse de l'Université CADI AYYAD (2011).
- [2] Henry Mathieu & Harvé fanet, « physique des semi-conducteurs et des composants électroniques », Dunod 4e édition, 2001.
- [3] <http://sites.unice.fr/site/doya/sem6/2015-2016/PagesWeb/PT/Mecanique/images/Evolution.pdf>.
- [4] G.Bastard, « Wave Mechanics Applied to Semiconductor Heterostructures » les éditions de Physique, Paris, 1988.
- [5] R. Kudrawiec, M. Motyka, G. Cywinski, M. Siekacz, C. Skierbiszewski, L. Nevou, L. Doyennette, M. Tchernycheva, F. H. Julien, J. Misiewicz, Phys. Stat. Sol. (c) 5, 503 (2008).
- [6] Nicolas Vellas, “Etudes Expérimentales de Transistors HFET de la Filière Nitrure de Gallium pour des Application de Puissance Hyperfréquences” Thèse de doctorat de l'Université de Lille, France, le 18 décembre 2003, p.40-62.
- [7] Nicolas Vellas, “Etudes Expérimentales de Transistors HFET de la Filière Nitrure de Gallium pour des Application de Puissance Hyperfréquences” Thèse de doctorat de l'Université de Lille, France, le 18 décembre 2003, p.40-62.
- [8] G.Bastard, « Wave Mechanics Applied to Semiconductor Heterostructures » les éditions de Physique, Paris, (1988).
- [9] A. Helman, «Puits et boites quantiques de GaN/AlN pour les applications en optoélectronique à  $\lambda \approx 1.55 \mu\text{m}$  », Thèse de l'Univercité Paris VI Orsay (2004).
- [10] M. Leroux, N. Grandjean, M. Laügt, J. Massies, B. Gil, P. Lefebvre, P. Bigenwald, Phys. Rev. B 58, R13371 (1998).

- [11] V. Fiorentini, F. Bernardini, F. Della-Sala, A. Di-Carlo, P. Lugli, Effects of macroscopic polarization in III-V nitride multiple quantum wells, *Phys. Rev. B* 60, 8849-58 (1999).
- [12] N. Grandjean, B. Damilano, S. Dalmaso, M. Leroux, M. Lügt, J. Massies, *J. Appl. Phys.* 86, 3714(1999).
- [13] T. Takeuchi, S. Sota, M. Katsuragawa, M. Komori, H. Takeuchi, H. Amano, I. Akasaki, *J. Appl. Phys.* 36, L382(1997).
- [14] L. Nevou, «Emission et modulation intersousbande dans les nanostructures de nitrures », Thèse de l'Université Paris Sud XI (2008).
- [15] H Mathieu and Hervet Fanet « Physique des semiconducteurs et des composants électroniques » 6ème édition, DUNOD (2009).

**Chapitre 3 :**  
**Transitions et**  
**absorption**  
**intersousbandes dans**  
**les puits quantiques**  
**asymétriques**  
**GaN/AlInN**

## Chapitre 3 : Transitions et absorption intersousbandes dans les puits quantiques asymétriques GaN/AlInN

### Introduction

Les hétérostructures à base de puits quantiques sont les constituants de base de la majeure partie des dispositifs optoélectroniques. L'intérêt principal de ce type de structure est le confinement des porteurs dans le puits quantique suivant la direction de croissance, ce qui donne une discrétisation des niveaux énergétiques accessible aux porteurs. L'éclatement entre ces niveaux déterminera l'énergie des différentes transitions (interbandes et intersousbandes). L'énergie et le nombre des niveaux confinés dépendent de différents paramètres définissant la structure à savoir : L'épaisseur du puits, l'épaisseur de la barrière, l'énergie de gap, le dopage et l'offset : le décalage énergétique entre les différentes bandes du puits et de la barrière [1,2]. Dans certaines conditions, le confinement des électrons et des trous dans une même région d'espace entraîne des rendements quantique et optique très importants. Les dispositifs résultants (Led's, LD, QWIPs [3,4], QCL [5,6]...) sont utilisés dans divers domaines d'applications (Médecine, Télécoms, sécurité, militaire, astronomie...). Ainsi, on s'intéresse aux sources de rayonnement infrarouge moyen et térahertz [2,7,8]. Cependant, ce sont souvent des émetteurs faibles. Des concepts innovants sont alors nécessaires pour détecter les signaux faibles résultants. Une bonne sensibilité a été démontrée dans un détecteur quadratique à deux photons, montrant une non-linéarité optique pour un rayonnement avec une puissance aussi faible que  $0,1 \text{ W/cm}^2$  [9]. Ces détecteurs quadratiques sont principalement basés sur des structures de puits quantiques à trois niveaux et nécessitent des transitions d'énergie égale.

Ainsi, nous commencerons ce chapitre par un rappel de l'Hamiltonien de l'interaction électron-onde électromagnétique menant à l'expression générale du coefficient d'absorption optique intersousbande en passant par les règles de sélection des transitions optiques. Le coefficient d'absorption intersousbande est fonction des positions des niveaux d'énergies, des moments dipolaires électriques et des densités surfaciques d'électrons.

Nous explorons ensuite l'hétérostructure GaN / AlInN ayant trois niveaux confinés et étudions le comportement des transitions résultantes. La composition d'Indium a été prise égale à 17.7% qui donne une hétérostructure non contrainte [10]. Nos calculs d'états électroniques, prédisent l'existence d'une géométrie spécifique pour laquelle les deux transitions permises coïncident en énergie. Dans une telle géométrie et pour cette énergie, l'absorption optique pourrait augmenter considérablement.

### 3.1. Hamiltonien de l'interaction électron onde électromagnétique

L'Hamiltonien d'une particule de charge  $q$  et de masse  $m$ , placée dans un potentiel statique  $V(\vec{r})$  a pour expression :

$$H_0 = \frac{p^2}{2m} + V(\vec{r}). \quad (3.1)$$

Considérons une onde électromagnétique monochromatique (O.E.M) polarisée rectilignement, son champ électrique est donné par :

$$\vec{F}(\vec{r}, t) = F\vec{\epsilon} \cos(\omega t - \vec{q}\vec{r}) \quad (3.2)$$

Où  $\vec{q}$  est le vecteur d'onde de l'O.E.M plane et  $\vec{\epsilon}$  son vecteur de polarisation.

L'Hamiltonien de la particule quand elle est placée dans le champ électromagnétique est :

$$H = \frac{1}{2m} \left( \vec{p} - \frac{q}{c} \vec{A}(\vec{r}, t) \right)^2 + V(\vec{r}) + qU(\vec{r}, t) \quad (3.3)$$

Où  $A(\vec{r}, t)$  et  $U(\vec{r}, t)$  sont les potentiels vecteur et scalaire respectivement, de l'O.E.M. Dans le cas de la jauge de Coulomb (bien adaptée pour décrire l'hamiltonien d'interaction avec une O.E.M. plane monochromatique) et dans la limite linéaire,  $H$  devient :

$$H = H_0 - \frac{q}{mc} \vec{A}(\vec{r}, t) \cdot \vec{p} \quad (3.4)$$

Ceci est le cas d'un électron dans le potentiel statique d'un puits quantique sous excitation d'un champ électromagnétique.

L'hamiltonien perturbatif résultant de l'interaction électron- O.E.M est :

$$V(t) = H - H_0 = \frac{e}{m.c} \vec{A}(\vec{r}, t) \cdot \vec{p} \quad (3.5)$$

Cette perturbation dépendante du temps peut induire des transitions entre les états stationnaires de l'électron relatifs à  $H_0$ .

En utilisant la propriété de la jauge de Coulomb  $\vec{F} = \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{A}}{\partial t} = F \vec{\epsilon} \cos(\omega t - \vec{q} \cdot \vec{r})$  et dans le cadre de l'approximation dipolaire électrique, on montre que :

$$V = \frac{ieF}{2m\omega} \vec{\epsilon} \cdot \vec{p} \quad (3.6)$$

### 3.1.1. Expression du coefficient d'absorption $\alpha(\omega)$

Le calcul de la probabilité par unité de temps pour qu'un électron fasse la transition de l'état  $|i\rangle$  à l'état  $|f\rangle$  sous l'action de  $V = H - H_0$ , ou d'une manière équivalente pour qu'un photon disparaisse, est donné par la règle d'or de Fermi [11]. Soit :

$$\tilde{P}_{if} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle f | V | i \rangle|^2 \delta(E_f - E_i - \hbar\omega) \quad (3.7)$$

Il est impossible pour qu'une transition se fasse d'un niveau vide ou bien vers un niveau plein, alors il faudra tenir compte de la statistique d'occupation des niveaux  $|i\rangle$  et  $|f\rangle$ . Ainsi la probabilité par unité de temps pour qu'un électron fasse la transition  $|i\rangle \rightarrow |f\rangle$  est égale à :

$$P_{if} = \tilde{P}_{if} f(\varepsilon_i) [1 - f(\varepsilon_f)] \quad (3.8)$$

Où  $f(\varepsilon_i)$  et  $f(\varepsilon_f)$  sont respectivement les occupations moyennes des états  $|i\rangle$  et  $|f\rangle$ .

$$f(\varepsilon_i) = \{1 + \exp[\beta(\varepsilon_i - \mu)]\}^{-1} \quad (3.9)$$

Où  $\beta = (k_B T)^{-1}$ , T la température et  $\mu$  est le potentiel chimique des électrons.

\* La transition électronique de  $|i\rangle$  à  $|f\rangle$ , fait ainsi perdre de l'énergie à l'O.E.M d'une quantité égale à  $\hbar\omega\tilde{P}_{if} dt$  ceci pendant le temps  $dt$ .

\* la transition électronique  $|f\rangle \rightarrow |i\rangle$  peut aussi être induite par l'O.E.M (émission stimulée) avec un taux de transition.

$$\tilde{P}_{if} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle i | \mathbf{V} | f \rangle|^2 \delta(E_f - E_i - \hbar\omega) \quad (3.10)$$

Entrainant une création de photon d'une quantité :

$$P_{fi} = \tilde{P}_{fi} f(\varepsilon_f) [1 - f(\varepsilon_i)] \quad (3.11)$$

La perte nette d'énergie de l'O.E.M par unité de temps associée à la transition  $|i\rangle \leftrightarrow |f\rangle$  est donc égale [11,12] :

$$\hbar\omega [P_{if} - P_{fi}] \quad (3.12)$$

En sommant sur tous les états  $|i\rangle$  et  $|f\rangle$ , on obtient la diminution de l'énergie de l'onde par unité de temps.

$$P(\omega) = \frac{2\pi}{\hbar} \frac{e^2 F^2}{4m^2 \omega^2} \hbar\omega \sum_{i,f} \delta(E_f - E_i - \hbar\omega) |\langle f | \vec{\varepsilon} \cdot \vec{p} | i \rangle|^2 (f(E_i) - f(E_f)) \quad (3.13)$$

Le coefficient d'absorption est dérivé de l'expression de  $P(\omega)$  et vaut :

$$\alpha(\omega) = \frac{4\pi^2 e^2}{ncm \omega \Omega \varepsilon_0} \frac{1}{\sum_{i,f}} \frac{1}{m} |\vec{\varepsilon} \cdot \vec{p}_{if}|^2 \delta(E_f - E_i - \hbar\omega) (f(E_i) - f(E_f)) \quad (3.14)$$

Avec

- $n$  : l'indice de réfraction de l'hétérostructure.
- $m$  : la masse de l'électron.
- $c$  : la célérité de la lumière.

- $\bar{P}_{if} = \langle i | \bar{p} | f \rangle$  : L'élément de matrice dipolaire.
- $\Omega$  : Volume de l'échantillon.
- $\bar{\epsilon} \cdot \bar{p}_{if}$  : gouverne les règles de sélection des transitions optiques dans l'hétérostructure.

### 3.1.2. Transitions optiques dans des structures à puits quantiques : Règles de sélection

Les transitions optiques dans un puits quantiques peuvent être :

- **Transitions interbandes** : Ce sont des transitions entre des bandes différentes
- **Transitions intrabandes** : Dites aux transitions à l'intérieur d'une même bande. Ces dernières sont de 2 types :

- Transitions **intersousbandes** : les transitions qui s'effectuent entre deux sousbandes. Ce sont les transitions qui font l'objet de notre étude.
- Transitions **intrasousbande** : Ce sont les transitions à l'intérieur d'une même sousbande.

La fonction d'onde d'un état de l'électron dans le puits quantique est donnée à travers le formalisme de la fonction enveloppe développé dans le deuxième chapitre. Pour l'état initial  $|i\rangle$  on a :

$$F_i(\vec{r}) = \langle \vec{r} | i \rangle = u_{v,0}(\vec{r}) f_i^v(\vec{r}) \quad \text{avec} \quad f_i^v(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{S}} \chi_i^v(z) \exp(i(\vec{k}_\perp \cdot \vec{r}_\perp)) \quad (3.15)$$

Pour chaque bande et pour chaque type de porteur ( $v$  : e, hh, lh, so) le poids d'un élément de base  $u_{v,0}(\vec{r})$  est dominant. Idem pour l'état final  $|f\rangle$ .

Le calcul du coefficient d'absorption nécessite le calcul de  $|\bar{\epsilon} \cdot \bar{p}_{if}|^2$ . Avec :

$$\bar{\epsilon} \cdot \bar{p}_{if} = \bar{\epsilon} \cdot \int_{\Omega} F_i^*(\vec{r}) \cdot \bar{p} \cdot F_f(\vec{r}) d^3\vec{r} \quad (3.16)$$

En utilisant les propriétés des fonctions enveloppes : lentement variables à l'échelle de la cellule unitaire, on montre que :

$$\vec{\varepsilon} \cdot \vec{p}_{if} \approx \vec{\varepsilon} \cdot \langle u_{v_0} | \vec{p} | u_{v'_0} \rangle \cdot \int f_i^{v^*}(\vec{r}) f_f^{v'}(\vec{r}) d^3 \vec{r} + \delta_{v,v'} \vec{\varepsilon} \cdot \int_{\Omega} f_i^{v^*}(\vec{r}) \vec{p} f_f^{v'}(\vec{r}) d^3 \vec{r} \quad (3.17)$$

A l'intérieur d'une même bande  $v = v'$  on a  $\langle u_{v_0} | \vec{p} | u_{v'_0} \rangle = 0$  et  $\delta_{v,v'} = 1$ , ainsi le premier terme de l'équation (3.17) est nul, le second caractérise donc les transitions intrabandes.

Contrairement, pour deux bandes différentes  $v \neq v'$  et  $\delta_{v,v'} = 0$  : le second terme est nul. Ainsi, le premier terme est donc celui qui caractérise les transitions interbandes.

Dans notre étude, on s'intéresse aux transitions à l'intérieur de la bande de conduction de notre hétérostructure et seul le terme suivant fera l'objet de notre étude.

$$\vec{\varepsilon} \cdot \vec{p}_{if} = \vec{\varepsilon} \cdot \int_{\Omega} f_i^{v^*}(\vec{r}) \vec{p} f_f^{v'}(\vec{r}) d^3 \vec{r} = \langle f_i | \vec{\varepsilon} \cdot \vec{p} | f_f \rangle \quad (3.18)$$

Ainsi, en utilisant les expressions des fonctions enveloppes :

$$f_{i,f}^v(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{S}} \chi_{i,f}^v(z) \exp(i \vec{k}_{\perp} \cdot \vec{r}_{\perp}) \quad (3.19)$$

On montre que :

$$\langle f_i | \vec{\varepsilon} \cdot \vec{p} | f_f \rangle = \delta_{\vec{k}_{\perp}, \vec{k}'_{\perp}} \langle \chi_i | \chi_f \rangle (\varepsilon_x \hbar k'_x + \varepsilon_y \hbar k'_y) + \delta_{\vec{k}_{\perp}, \vec{k}'_{\perp}} \cdot \varepsilon_z \langle \chi_i | p_z | \chi_f \rangle \quad (3.20)$$

Comme les fonctions enveloppes étant orthogonales, le premier terme de l'équation (3.20) est caractéristique des transitions intrasousbandes alors que le second terme est relatif aux transitions intersousbandes.

Les transitions doivent être verticales en  $\vec{k}_{\perp}$ , par contre la polarisation de la lumière joue un rôle considérable pour la mise en évidence du type de transition. Une onde incidente normalement au plan de l'hétérostructure ne pourra induire de transitions intersousbandes,  $\varepsilon_z$  étant nul. Il est clair que l'observation des transitions intersousbandes, impose une configuration géométrique expérimentale particulière.

### 3.2. Coefficient d'absorption intersousbande

Dans le cas où on se restreint uniquement aux transitions optiques intersousbandes, l'élément de matrice  $\vec{\epsilon} \cdot \vec{p}_{if}$  correspondant est donné par :  $\vec{\epsilon} \cdot \vec{p}_{if} = \epsilon_z \langle \chi_i | p_z | \chi_f \rangle$ , ainsi le coefficient d'absorption correspondant s'explique comme suit:

$$\alpha(\omega) = \frac{4\pi^2 e^2}{ncm\omega\Omega} \frac{1}{\epsilon_0} \sum_{i,f} \frac{1}{m} \epsilon_z^2 \left| \langle \chi_i | p_z | \chi_f \rangle \right|^2 \delta(E_f - E_i - \hbar\omega) (f(E_i) - f(E_f)) \quad (3.21)$$

En utilisant les propriétés du commutateur  $[z, p_z]$ , on montre que :

$$\langle \chi_i | p_z | \chi_f \rangle = \frac{m}{i\hbar} \langle i | [z, H_0] | f \rangle = \frac{m}{i\hbar} (E_f - E_i) \mu_{if} \quad (3.22)$$

Où  $\mu_{if} = \langle \chi_i | z | \chi_f \rangle$  est le moment dipolaire électrique intersousbandes

Le coefficient intersousbandes est ainsi donné par :

$$\alpha(\omega) = \frac{4\pi^2 e^2}{nc\epsilon_0\omega\Omega} \epsilon_z^2 \sum_{i,f} \omega_{if}^2 \mu_{if}^2 \delta(E_f - E_i - \hbar\omega) (f(E_i) - f(E_f)) \quad (3.23)$$

### 3.3. Forces d'oscillateurs

La force d'oscillateur est une grandeur physique qui caractérise la probabilité pour qu'une transition optique se produise entre deux niveaux énergétiques, elle traduit la force de couplage quantique entre les deux niveaux dû à la perturbation électromagnétique. Pour une transition de l'état  $|i\rangle$  à l'état  $|f\rangle$ , elle est exprimée par [12]:

$$f_{fi} = \frac{2}{m\hbar\omega_{fi}} \left| \langle i | \vec{\epsilon} \cdot \vec{p} | f \rangle \right|^2 \quad (3.24)$$

Dans le cas d'une transition intersousbande, elle vaut :

$$f_{fi} = \frac{2}{\hbar m \omega_{fi}} \epsilon_z^2 \left| \langle \chi_i | p_z | \chi_f \rangle \right|^2 = \frac{2\omega_{fi} m}{\hbar} \epsilon_z^2 \mu_{if}^2 \quad (3.25)$$

Le coefficient d'absorption est finalement exprimé en fonction de ces grandeurs par :

$$\alpha(\omega) = \frac{2\pi e^2 \hbar \omega_{ji}}{ncm\varepsilon_0 \omega \Omega} \sum_{i,f} f_{fi} \omega_{fi} \delta(E_f - E_i - \hbar\omega) (f(E_i) - f(E_f)) \quad (3.26)$$

Au voisinage d'une fréquence de résonance  $\omega \approx \omega_{fi}$ , le coefficient d'absorption subit de fortes variations, à condition que la force d'oscillateur  $f_{fi}$  soit non nulle. En analysant l'expression de la force d'oscillateur, on peut relever quelques remarques :

- Pour  $\varepsilon_z = 0$  nous aurons  $f_{fi} = 0 \quad \forall i, f$  quel que soient  $i$  et  $f$ . Une onde incidente normalement ne peut induire couplage optique intersousbandes.
- Dans le cas d'un puits symétrique une transition intersousbandes ne peut se produire qu'entre deux états de parités différentes.
- La force d'oscillateur est calculée numériquement en utilisant les fonctions enveloppes normées déterminées par le formalisme de la fonction enveloppe du calcul des états électronique de l'hétérostructure.

Il est important de dire que l'expression théorique du coefficient d'absorption, ne tient pas compte de la largeur de la raie d'absorption, en réalité plusieurs processus font que la transition  $(E_f - E_i)$  n'est pas un Dirac à cause des différents élargissements de la transition.

Les origines physiques de ces élargissements sont de différentes natures. On peut les regrouper en trois catégories [13] :

- Origines microscopiques : Elles existent même dans un puits parfait. Ce sont les effets de la non parabolicité, qui augmentent avec le nombre de porteurs. Et ceux de la température dus aux collisions avec les phonons.
- Origines mésoscopiques : Quelle que soit la qualité de l'épitaxie, les dimensions ne sont jamais mieux définies qu'à une monocouche atomique près. On a donc des risques de marches sur la surface, de formations d'îlots ou de rugosité des barrières.
- Origines macroscopiques : Les structures comprennent souvent une centaine de puits qui peuvent présenter une certaine inhomogénéité d'épaisseur ou de composition suivant l'axe de croissance ou suivant le plan des couches.

On remplace la distribution de Dirac, par une Lorentzienne (de largeur à mi-hauteur  $2\Gamma_{ij}$ ), le coefficient intersousbande intersousbandes s'exprime ainsi par :

$$\alpha(\omega) = \frac{2\pi e^2 \hbar}{ncm\epsilon_0 \omega \Omega} \sum_{i,f} f_{fi} \omega_{fi} (f(E_i) - f(E_f)) \frac{\hbar \Gamma_{if}}{(E_f - E_i - \hbar\omega)^2 + (\hbar \Gamma_{if})^2} \quad (3.27)$$

### 3.4. Transitions optiques entre deux niveaux : lié-lié et lié-libre

Les niveaux d'énergie situés en dessous des barrières sont appelés niveaux liés et ceux qui sont au-dessus sont des niveaux libres puisque l'électron peut s'y propager librement. On peut envisager des transitions entre deux états liés (transitions lié-lié) ou d'un état lié vers un état libre (transition lié-libre). Ces deux types de transitions sont représentés sur la figure 3.1 :

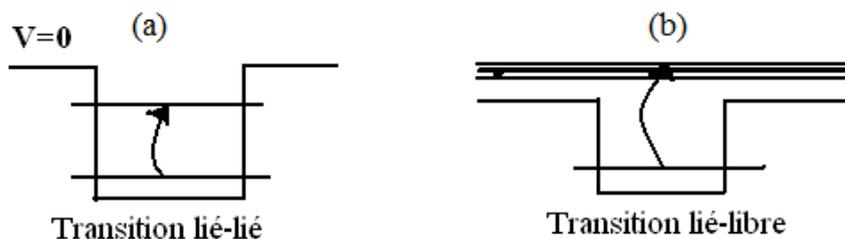


Figure 3.1 : Transition lié – lié (a) et lié – libre (b).

#### 3.4.1. Transition entre deux niveaux liés

Dans le cas d'une transition entre deux sousbandes liées  $E_1(\vec{k})$  et  $E_2(\vec{k})$ , l'expression du coefficient d'absorption, fonction du moment dipolaire électrique, est donnée par :

$$\alpha(\omega) = \frac{4\pi e^2 \epsilon_z^2}{nc\omega \epsilon_0 \Omega} \sum_{i,f,k} \omega_{if}^2 \mu_{if}^2 (f(E_i^{(k)}) - f(E_f^{(k)})) \frac{\hbar \Gamma_{if}}{(E_f - E_i - \hbar\omega)^2 + (\hbar \Gamma_{if})^2} \quad (3.28)$$

Dans notre cas :  $E_i = E_1(k) = \epsilon_1 + \frac{\hbar^2 \vec{k}_\perp^2}{2m^*} = E_1^k$  et  $E_f = E_2(k) = \epsilon_2 + \frac{\hbar^2 \vec{k}_\perp^2}{2m^*} = E_2^k$

Avec  $\epsilon_1$  et  $\epsilon_2$  : Energie de confinement de l'électron dans la direction z correspondant respectivement à l'état fondamental  $\chi_1(z)$  à l'état excité  $\chi_2(z)$ .

Où on a procédé à la notation  $k = k_\perp$ . La sommation dans  $\alpha(\omega)$ , doit porter sur k (car on doit tenir compte de toutes les transitions possibles comme l'illustre la figure 3.2.

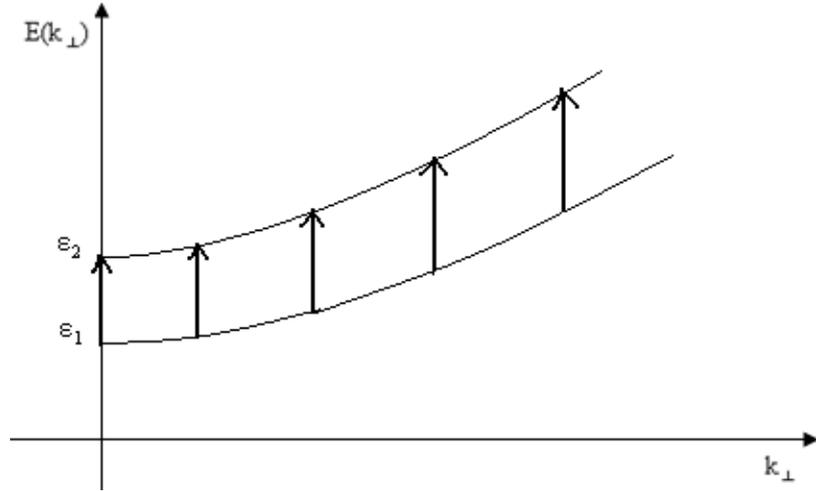


Figure 3.2 : Minibandes de la transition lié-lié

D'où :

$$\alpha(\omega) = \frac{4\pi e^2 \varepsilon_z^2}{nc\omega \varepsilon_0 \Omega} \sum_k \omega_{12}^2 \mu_{12}^2 (f(E_1^{(k)}) - f(E_2^{(k)})) \frac{\hbar \Gamma_{12}}{(\varepsilon_2 - \varepsilon_1 - \hbar\omega)^2 + (\hbar \Gamma_{12})^2} \quad (3.29)$$

Or  $E_2 - E_1 = \varepsilon_2 - \varepsilon_1$  est indépendant de  $k$  et si on suppose que  $\Gamma_{12}$  est également indépendant de  $k$ , l'expression devient :

$$\alpha(\omega) = \frac{4\pi e^2 \varepsilon_z^2 \omega_{12}^2 \mu_{12}^2}{nc\omega \varepsilon_0 \Omega} \frac{\hbar \Gamma_{12}}{(\varepsilon_2 - \varepsilon_1 - \hbar\omega)^2 + (\hbar \Gamma_{12})^2} \left( \sum_k (f(E_1^k) - f(E_2^k)) \right) \quad (3.30)$$

En utilisant, la règle d'équivalence entre la sommation sur  $k$ , l'intégrale sur  $k$  ainsi que l'intégrale sur l'énergie  $E$  [14] :

$$2 \sum_{k \in Z_B} \leftrightarrow \int_k \rho(\vec{k}) d\vec{k} \leftrightarrow \int_E \rho(E) dE \quad (3.31)$$

$\rho(\vec{k})$  étant la densité d'états dans l'espace des  $\vec{k}$  et  $\rho(E)$  la densité d'états en énergie ( $eV^{-1}$ ). Dans notre cas l'hétérostructure est considérée quasi-2D, ainsi :

$$\sum_k f(E_1(k)) = \int_{\varepsilon_1}^{+\infty} \rho_{2D}(E_1) f(E_1(k)) dE_1. \quad (3.32)$$

$E_1^k$  variant de  $\varepsilon_1$  à  $+\infty$  (minibande 1) et  $\rho_{2D}(E_1) = S \frac{m^*}{\hbar\pi^2}$  est la densité d'états en énergie pour la sousbande  $E_1(\vec{k})$  et  $S=L_xL_y$ .

On obtient alors  $\sum_k f(E_1(k)) = N_1$  : Le nombre d'électrons dans la sousbande 1.

De même  $\sum_k f(E_2(k)) = N_2$  : Le nombre d'électrons dans la sousbande 2.

$N_1+N_2=N_S$  est le nombre total d'électrons.

Alors le coefficient d'absorption intersousbande devient :

$$\alpha(\omega) = \frac{4\pi e^2 \mu_{12}^2 \omega_{12}^2 \varepsilon_z^2}{nc\omega \varepsilon_0 L} \frac{\hbar\Gamma_{12}}{(\varepsilon_2 - \varepsilon_1 - \hbar\omega)^2 + (\hbar\Gamma_{12})^2} (n_1 - n_2) \quad (3.33)$$

Avec  $n_1=N_1/S$  ;  $n_2=N_2/S$  sont les densités surfaciques des électrons respectivement dans les sousbandes  $E_1^k$  et  $E_2^k$ .

$$n_1 = \frac{N_1}{S} = \int_0^{+\infty} \frac{m^*}{\pi\hbar^2} \theta(\varepsilon - \varepsilon_1) \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E - E_f}{K_B T}\right)} dE \quad (3.34)$$

De même

$$n_2 = \frac{N_2}{S} = \int_0^{+\infty} \frac{m^*}{\pi\hbar^2} \theta(\varepsilon - \varepsilon_2) \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E - E_f}{K_B T}\right)} dE \quad (3.35)$$

Où  $\theta$  est la fonction de Heaviside

On vérifie que  $n_1 + n_2 = n_S$  : densité surfacique totale des électrons.

Il est à signaler que le paramètre d'élargissement  $\Gamma_{ij}$  est spécifique à la transition  $E_{ij}$ . Il est probable que  $\Gamma_{ij}$  augmente quand  $i$  ou  $j$  augmentent car la probabilité de présence au voisinage de l'interface augmente, entraînant une plus forte diffusion par les défauts qui y

sont présents et par conséquent une augmentation de  $\Gamma_{ij}$ . Ce paramètre est également affecté par l'effet de la température.

### 3.4.2. Transition lié-libre

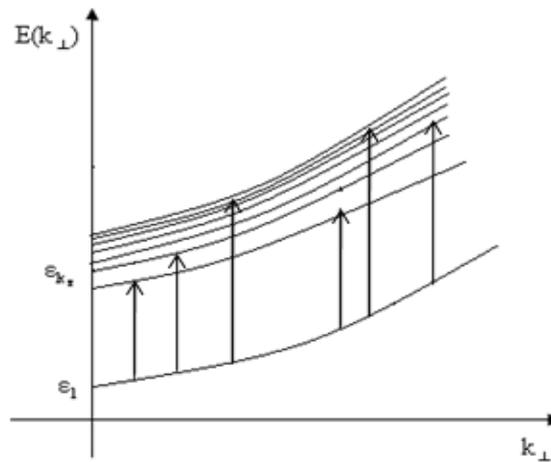
Dans le cas de transitions entre le niveau fondamental et le 1<sup>er</sup> état excité (situé dans le continuum).

On a pour l'état fondamental :

$$E_i = E_1^k = \varepsilon_1 + \frac{\hbar^2 k_{\perp}^2}{2m^*} \rightarrow F_i(\vec{r}) = \chi_i(z) \exp(i\vec{k}_{\perp} \cdot \vec{r}_{\perp}) \quad (3.36)$$

Et pour l'état final :

$$E_f = E_2(k_{\perp}, k_z) = \varepsilon_{k_z} + \frac{\hbar^2 k_{\perp}^2}{2m^*} \quad \text{avec} \quad \begin{cases} \varepsilon_{k_z} = V_s + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m^*} \\ \psi_{k_{\perp}, k_z}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \zeta_{k_z}(z) \exp(i\vec{k}_{\perp} \cdot \vec{r}_{\perp}) u_{c_0}(\vec{r}) \end{cases} \quad (3.37)$$



**Figure 3.3 :** Minibandes dans une transition lié-libre

Où  $\zeta_{k_z}(z)$  représente la fonction d'onde dans la direction  $z$  associée au niveau excité situé dans le continuum (figure 3.3).

Dans le cas où on peut considérer ce niveau relativement profond dans le continuum, il correspond à un état se propageant sans réflexion au niveau des barrières, ce qui correspond à une

$$E_f - E_i - \hbar\omega = E_2(k, k_z) - E_1(k) - \hbar\omega \quad (\text{où on reprend la notation } k_{\perp} = k)$$

propagation libre.

$$\begin{aligned} &= \varepsilon_{k_z} - \varepsilon_1 - \hbar\omega \\ &= \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m^*} + V_s - \varepsilon_1 - \hbar\omega \end{aligned}$$

Ainsi dans  $\alpha(\omega)$  la sommation va porter sur  $k_z$  et sur  $k$  :

$$\alpha(\omega) = \frac{4\pi^2 e^2 \cos^2(\theta)}{ncm^2 \omega \varepsilon_0 \Omega} \int \sum_{k_z, k} \left| \langle \chi_1 | P_z | \zeta_{k_z} \rangle \right|^2 \delta \left( \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m^*} + V_s - \varepsilon_1 - \hbar\omega \right) \left( f(E_1^k) - f(E_2^k) \right) \frac{L_z}{\pi} dk_z \quad (3.38)$$

Dans le cas pratique,  $E_f$  n'est pas peuplé de sorte que  $f(E_f) = 0$ , et en utilisant la règle d'équivalence entre la sommation sur  $k$ , l'expression du coefficient d'absorption devient :

$$\alpha(\omega) = \frac{4\pi e^2 \varepsilon_z^2}{ncm^2 \omega \varepsilon_0} n_1 \int_{k_z} \left| \langle \chi_1 | P_z | \zeta_{k_z} \rangle \right|^2 \cdot \delta \left( \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m^*} + V_s - \varepsilon_1 - \hbar\omega \right) dk_z \quad (3.39)$$

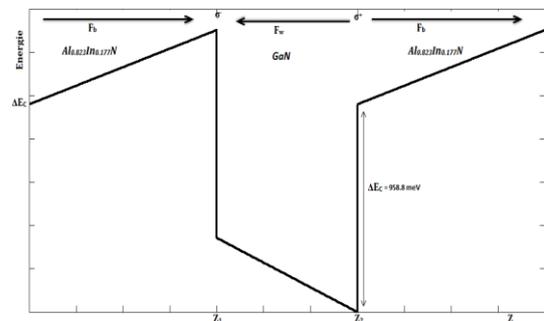
### 3.5. États électroniques et énergies de transitions dans le puits quantique asymétrique GaN/AlInN

#### 3.5.1. Puits quantique asymétrique GaN/AlInN non contraint

Le potentiel de la bande de conduction du puits asymétrique de GaN/Al<sub>0.823</sub>In<sub>0.177</sub>N est de la forme suivante :

$$U_H(z) = \begin{cases} eF_b z + \Delta E_c & z < z_1 \\ eF_w(z - z_2) & z_1 \leq z \leq z_2 \\ eF_b(z - z_2) + \Delta E_c & z > z_2 \end{cases} \quad (3.40)$$

Avec  $z_1 = L_b$  et  $z_2 = L_b + L_w$ .



La masse effective, la permittivité relative sont calculées à partir de la loi de Vegard (interpolation linéaire entre les valeurs de AlN et InN) et le gap varie avec la composition selon la loi quadratique :

$$E_{Al_{1-y}In_yN}^g(y) = y.E_{InN}^g + (1-y).E_{AlN}^g - y.(1-y).b \quad (3.41)$$

Où le paramètre de bowing  $b$  comme nous avons déjà cité dans le premier chapitre a pour valeur  $b = 3,326 \text{ eV}$  pour l'alliage  $Al_{1-y}In_yN$ . Pour la structure non contrainte : le puits GaN et la barrière  $Al_{0.823}In_{0.177}N$ . Depuis le chapitre 2, la discontinuité de la bande de conduction et de polarisation calculée pour cette structure non contrainte ont pour valeurs respectivement [15] :

$$V_s = \Delta E_c = 0,7\Delta E_g = 958.8 \text{ meV} \quad \text{et} \quad \frac{\Delta P}{\epsilon_0 \epsilon_r} = 0.6946 \text{ MV.cm}^{-1} \quad (3.42)$$

Les calculs sont développés dans l'approximation parabolique d'une part, et en prenant en compte les effets de non parabolicité de la bande de conduction d'autre part. La résolution numérique est basée sur la méthode des différences finies. Il considère la structure comme une succession de  $n+1$  couches d'épaisseurs très petites mais égales,  $\Delta z$ . Dans chaque couche, la masse ( $m_n$ ), le potentiel ( $U_n$ ) et les fonctions d'enveloppe ( $\chi_n$ ) sont considérés comme des constantes. Les fonctions d'enveloppe dans les différentes couches, au sein de ce modèle, sont liées entre elles par:

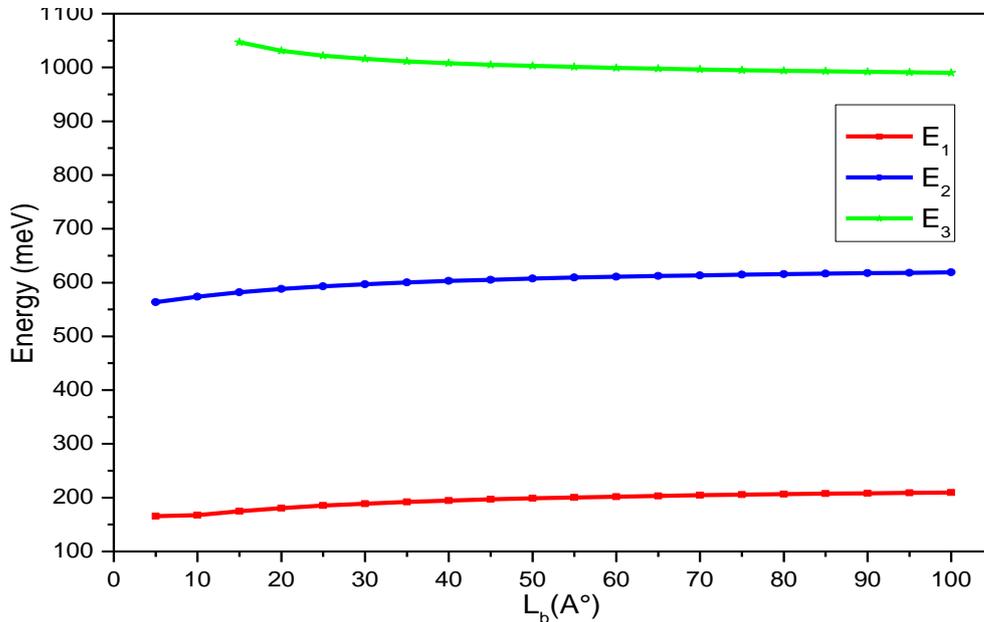
$$\chi_{n+1} = \chi_n \left( \Delta z^2 k_n^2 + \frac{m_n}{m_{n-1}} + 1 \right) - \frac{m_n}{m_{n-1}} \chi_{n-1} \quad (3.43)$$

avec  $2 \frac{m_n (U_n - E)}{\hbar^2} = k_n^2$

Les énergies propres confinées et les fonctions d'enveloppe correspondantes sont déterminées en exprimant les conditions aux limites.

### 3.5.2. Effet de la hauteur de la barrière les niveaux confinés

On fixe la largeur du puits à  $L_w=25 \text{ \AA}$  et on fait varier la hauteur de la barrière  $L_b$  pour évaluer la hauteur au-delà de laquelle les positions des niveaux confinés varient peu conformément à des conditions aux limites physiquement acceptables. Les calculs donnent :



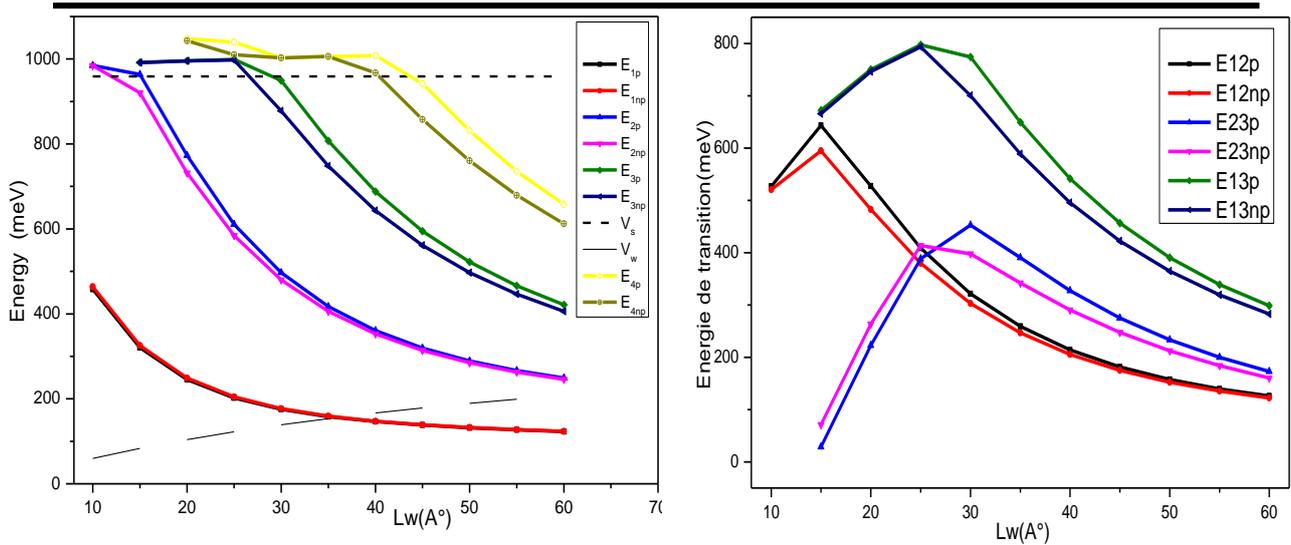
**Figure 3.4 :** Evolution des niveaux confinés en fonction la largeur de la barrière pour une largeur du puits 2.5nm [2]

Les niveaux confinés sont relativement sensibles à la variation de la largeur de la barrière en particulier pour les faibles  $L_b$ . Les positions du niveau fondamental et du premier niveau excité, situés dans le domaine énergétique R2 déjà définie dans le chapitre 2, augmentent lorsqu'on élargi la barrière. Au contraire, ceux situés dans R3 descendent en énergie. De plus le potentiel  $V_{CE}$  augmente avec  $L_b$ , ce qui entraine l'apparition d'autres niveaux excités.

Il est à signaler que ces variations d'énergie sont globalement faibles au-delà de  $L_b=60 \text{ \AA}$ . On considérera, ainsi, cette valeur de  $L_b$  pour étudier l'effet de la largeur du puits.

### 3.5.3. Effet de la largeur du puits sur les niveaux confinés et transitions associées

L'évolution en fonction de la largeur du puits,  $L_w$ , des différents niveaux confinés pour les cas paraboliques et non paraboliques est rapportée dans la figure suivante :



**Figure 3.5 :** Evolution des niveaux confinés (à gauche) et énergies de transitions (à droite) en fonction la largeur du puits pour une hauteur de barrière de 6nm [2]

D'après cette courbe, on constate que lorsque la largeur du puits diminue les niveaux confinés augmentent en énergie. Lorsqu'un niveau dépasse l'offset  $V_s$  sa position subit un ralentissement dû à l'effet combiné du continuum et du champ confinant de la barrière. En effet, les niveaux au-dessus de  $V_s$  entrent dans la barrière et s'approchent du continuum ressentent l'effet du blocage par celui-ci.

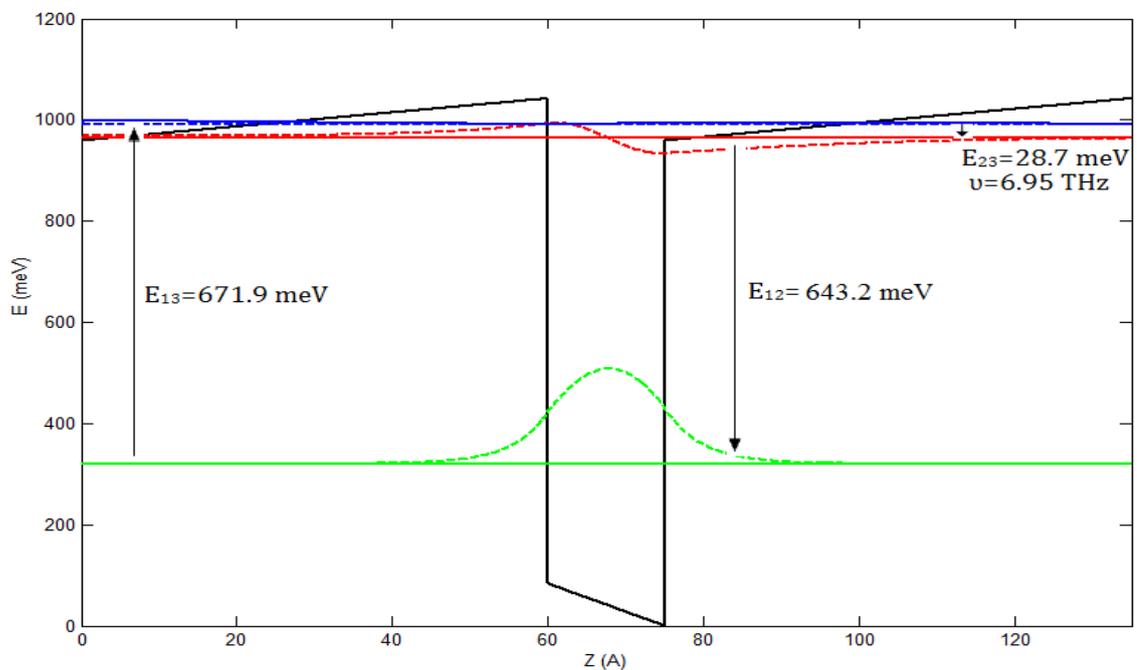
Dans l'approximation parabolique ( $E_{i,p}$ ), le niveau  $E_3$  augmente mais ralentit avant de rejoindre le continuum des États ( $E_3$  n'est plus confiné en dessous de  $L_w = 1.5$  nm). Cependant, les résultats montrent que l'inclusion des bandes de non parabolicité a pour effet d'abaisser les positions des niveaux excités ( $E_2$  et  $E_3$ ) qui atteignent le continuum pour des largeurs de puits inférieures (par rapport au cas parabolique).

Pour les transitions, on remarque qu'elles possèdent deux régions de variation, une où la transition croît avec  $L_w$ , et l'autre où elle décroît. Dans la première région, le niveau haut situé au-dessus de  $V_s$  se déplace lentement, contrairement au niveau en dessous de  $V_s$  qui décroît fortement, entraînant une augmentation de l'énergie de transition. Dans la deuxième région, les deux niveaux ont des positions inférieures à l'offset, l'évolution de l'énergie de transition a un comportement habituel correspondant à une diminution. Pour les grands  $L_w$ , la transition énergétique  $E_{23}$  reste supérieure à celle de  $E_{12}$ . Ce comportement est maintenu, dans le cas parabolique. L'énergie de la transition  $E_{23}$  se rapproche de celle  $E_{12}$  quand  $E_3$  est proche de

Vs. L'inclusion du non parabolicité a pour effet de diminuer les énergies de transition lors de la diminution de  $L_w$  qui devient plus prononcé en passant par leurs maximums.

Ainsi ces transitions présentent un maximum. La transition  $E_{13}$  présente le plus élevé,  $E_{13}=797.2$  meV pour  $L_w=25$  Å. Cependant cette transition n'atteint pas le domaine des longueurs d'ondes des télécommunications. Concernant le domaine térahertzique, la transition  $E_{23}$  nous permet cette émission pour  $L_w=15$  Å, soit  $E_{23}=28.7$  meV, c.à.d. une fréquence  $\nu=6.95$  THz.

Sur la figure suivante sont représentés le profil, les positions énergétiques et les fonctions enveloppes propres, relatifs à cette dernière géométrie.



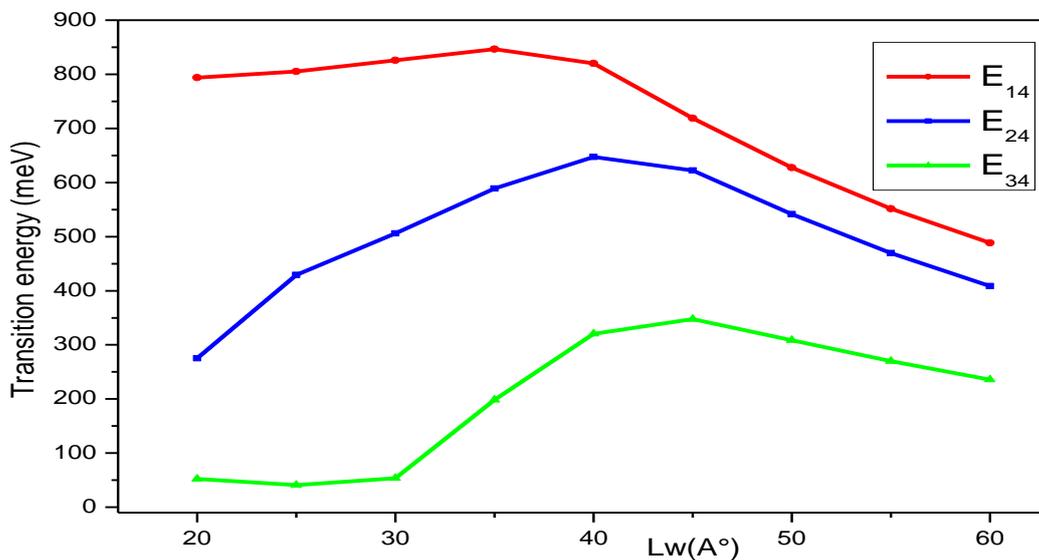
**Figure 3.6 :** Profil de la BC, la position des niveaux confinés et leurs fonctions enveloppes associées pour  $L_w=15$  Å et  $L_b=60$  Å [2]

Un autre résultat important qui peut caractériser ces structures est le croisement clair entre les transitions  $E_{12}$  et  $E_{23}$ , qui se produit pour  $L_w = 2,5$  nm. Ce phénomène singulier offre l'augmentation de l'absorption d'un rayonnement ayant une fréquence appropriée telle que  $h\nu = E_{12} = E_{23}$  soit  $\lambda = 3.2$   $\mu m$ . Ceci est à la base du principe des détecteurs quadratiques qui présenteraient un fort intérêt pour la détection des faibles signaux.

Pour quantifier ce phénomène, nous proposons de calculer le coefficient d'absorption pour deux géométries différentes. La première, pour  $L_w = 3.5$  nm, où les deux transitions ont des énergies distinctes, offre la possibilité d'absorber simultanément les deux fréquences correspondantes. La seconde, pour  $L_w = 2,5$  nm, où les énergies de transition coïncident, une meilleure absorption peut se produire pour un rayonnement avec la fréquence appropriée [16].

Il ressort de ce qui précède, que la valeur minimale de la longueur d'onde  $\lambda_{12}$  que nous pouvons atteindre est de l'ordre de  $1.92 \mu\text{m}$  pour le système  $6/1.5/6$  nm. Le domaine des télécommunications n'est pas atteint. La structure de puits n'étant plus symétrique, il n'y a à priori pas de règles sélectives concernant les différentes transitions possibles, mais on verra que la force d'oscillations pour ces transitions (interdites dans le cas symétrique) reste proche de zéro. Nous nous sommes ainsi intéressés aux autres niveaux excités. La figure 3.5 (à droite) montre que la longueur d'onde minimale mettant en jeu le deuxième niveau excité est  $\lambda_{13} = 1.56 \mu\text{m}$  pour la géométrie  $6/2.5/6$  nm. Nous abordons le domaine souhaité.

Regardons si on peut aller en dessous en considérant le troisième niveau excité. Les transitions,  $E_{i4}$ , mettant en jeu ce niveau sont présentées dans la figure suivante :

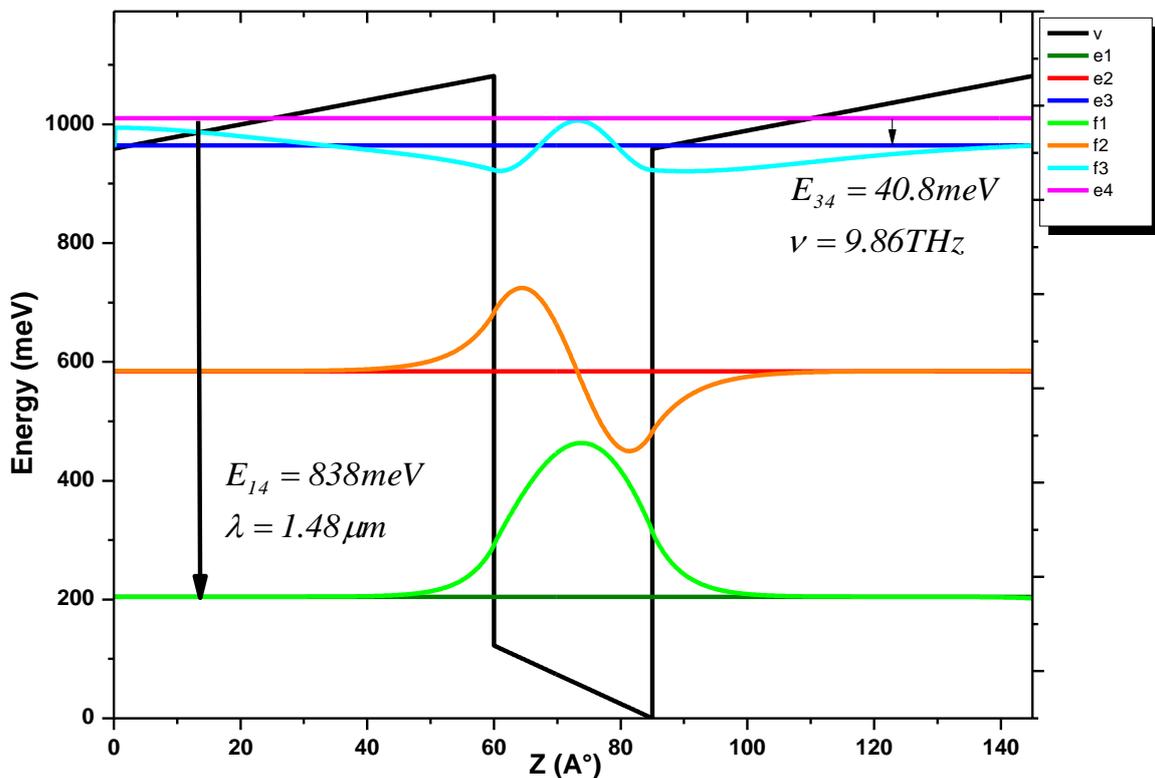


**Figure 3.7 :** Energies de transitions  $E_{i4}$  de et vers le quatrième niveau en fonction la largeur du puits pour une largeur du la barrière égale 6nm [2]

Le quatrième niveau n'apparaît qu'à partir d'une largeur du puits supérieur à  $20 \text{ \AA}$ .

La transition  $E_{34}$  présente, en fonction de la largeur du puits, trois régions. Dans la première, entre  $L_w=20-30 \text{ \AA}$ , l'énergie de transition reste pratiquement constante. En effet, les deux niveaux sont situés au-dessus de  $V_s$ , où le déplacement des niveaux est faible, avec une variation quasi similaire. Puis, quand le 3<sup>ème</sup> niveau se situe au-dessous de  $V_s$ , il descend fortement, contrairement, au quatrième niveau qui reste au-dessus, cela entraîne une forte augmentation de  $E_{34}$ , c'est la deuxième région. Après, dans la troisième région, au-delà de  $L_w=45 \text{ \AA}$ , le quatrième niveau tombe à son tour dans le puits et descend fortement avec l'augmentation de  $L_w$  (avec une plus forte décroissance que le troisième) ce qui explique la diminution de  $E_{34}$ .

Cette transition d'énergie  $E_{34}=40.8 \text{ meV}$ , pour  $L_w=25 \text{ \AA}$ , correspond à une fréquence  $\nu=9.86 \text{ THz}$  à la frontière du domaine térahertzique.

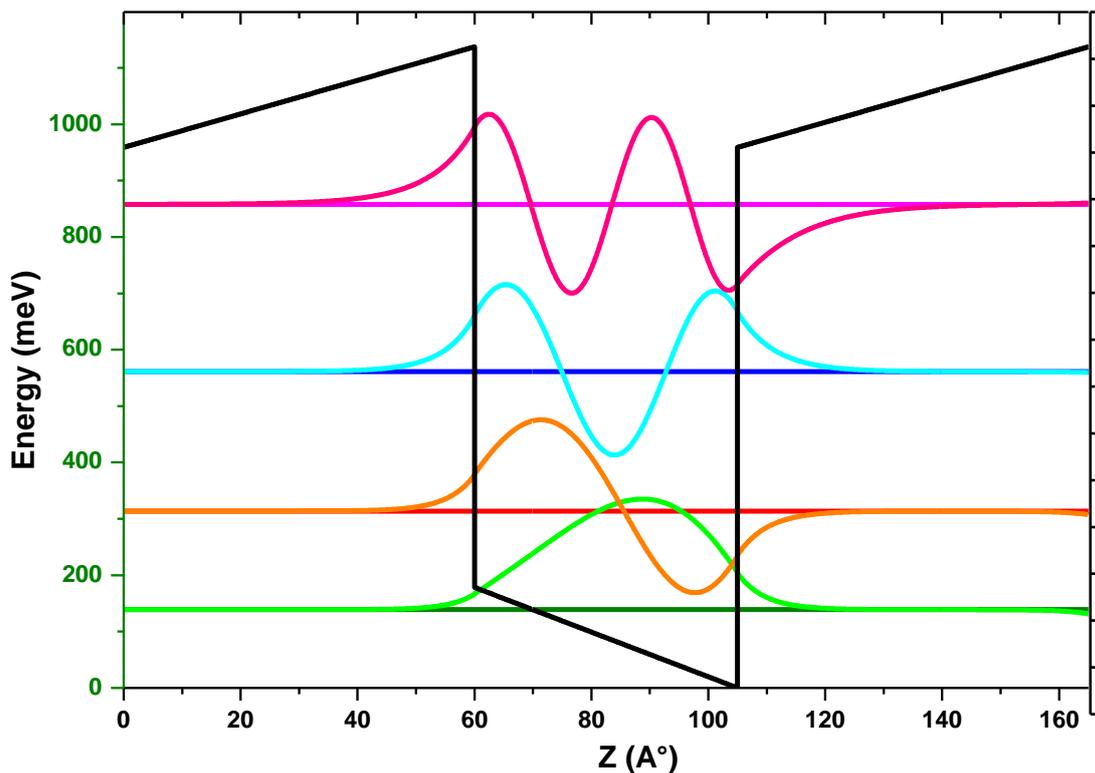


**Figure 3.8 :** Profil de la BC, les positions des niveaux confinés et les fonctions enveloppes associées pour  $L_w=25 \text{ \AA}$  et  $L_b=60 \text{ \AA}$  [2]

Contrairement à la transition  $E_{34}$ , les transitions  $E_{14}$  et  $E_{24}$  présentent deux régions au cours de leurs variations avec l'augmentation de la largeur du puits. Ainsi, pour la transition  $E_{14}$ , on constate, pour des largeurs du puits  $L_w=20-40 \text{ \AA}$ , qu'elle est faiblement variable, dû au

fait que le quatrième niveau situé dans la barrière et le premier est très profond dans le puits. Les deux, selon l'effet du champ, vont descendre d'une manière faible lorsqu'on élargie le puits, et bien évidemment, la transition restera pratiquement constante. Elle prend des valeurs  $E_{14}=802.6-861.5$  meV, correspondant à des longueurs d'onde  $\lambda=1.44-1.54$   $\mu\text{m}$  qui sont exactement celles bien adaptées aux applications en télécommunication par fibre optique. De plus, on note bien que la géométrie, la largeur du puits  $L_w=25$   $\text{\AA}$ , satisfait les deux besoins ; soit  $\nu=9.86\text{THz}$  pour la transition  $E_{34}$  et  $\lambda=1.48$   $\mu\text{m}$  pour la transition  $E_{14}$ , pour ceci, on la nomme la géométrie critique.

Au-delà de  $L_w=40$   $\text{\AA}$ , le quatrième niveau a une énergie  $E_4 < V_s$  qui descend fortement au fur et à mesure qu'on élargie le puits, ce qui permet la baisse de la transition  $E_{14}$ . Le profil de la BC et la position des niveaux confinés, ainsi que leurs fonctions d'ondes associées dans ce cas sont présentés dans la figure qui suit:



**Figure 3.9 :** Profil de la BC, la position des niveaux confinés et leurs fonctions enveloppes associées pour  $L_w=45$   $\text{\AA}$  et  $L_b=60$   $\text{\AA}$  [2]

### 3.6. Absorption optique dans le puits quantique asymétrique GaN/AlInN

L'expression (3.33) établie dans le cas de deux niveaux liés peut être généralisée au cas où plusieurs niveaux sont confinés dans le puits quantique. Dans notre hétérostructures, où on ne considère que trois niveaux qui sont confinés, le coefficient d'absorption est donné par :

$$\alpha(\omega) = \frac{4\pi e^2 \varepsilon_z^2}{nc\omega c_0 L} \left[ \sum_{\substack{i,j=1,\dots,4 \\ (i+j)\text{ impair}}} (n_i - n_j) \mu_{ij}^2 \omega_{ij}^2 \frac{\hbar \Gamma_{ij}}{(\varepsilon_j - \varepsilon_i - \hbar\omega)^2 + (\hbar \Gamma_{ij})^2} \right] \quad (3.44)$$

Les paramètres qui interviennent dans cette expression ont été déjà définis. Nous pouvons constater que le coefficient d'absorption est essentiellement régi par les positions des niveaux d'énergie, le moment dynamique dipolaire et la densité d'électrons libres dans chaque niveau. Ainsi, la détermination des paramètres que sont les moments dipolaires  $\mu_{ij}$ , les densités électroniques surfaciques d'électrons  $n_i$  sont indispensables. Les densités électroniques sont fonctions, à travers le niveau de Fermi, de la température et du niveau de dopage.

Nous allons commencer donc par étudier le niveau de Fermi en fonction de la température.

### 3.6.1. Effet de la température sur la position du niveau de Fermi

Pour cela nous avons fixé la densité totale des électrons libres à une valeur typique de l'ordre de  $n_s = 5 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2}$  [4]. Dans le cas de notre structure assimilée à un système quasi-2D, la densité des électrons est donnée par:

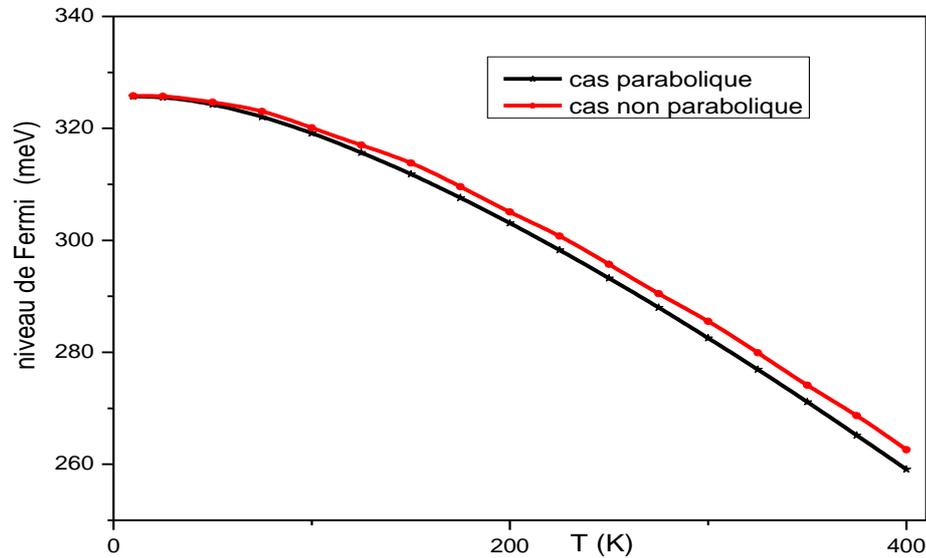
$$n_s = \int_0^{+\infty} N_{2D}(E) f(E) dE \quad (3.45)$$

Où  $N_{2D}(E)$  est la densité d'états à 2 dimensions et  $f(E)$  est la distribution de Fermi-Dirac. Ainsi, la densité des électrons peut se mettre sous la forme :

$$n_s = \frac{m^*}{\pi \hbar^2} \left[ \int_{\varepsilon_1}^{+\infty} \frac{dE}{1 + \exp\left(\frac{E - E_f}{k_B T}\right)} + \int_{\varepsilon_2}^{+\infty} \frac{dE}{1 + \exp\left(\frac{E - E_f}{k_B T}\right)} + \int_{\varepsilon_3}^{+\infty} \frac{dE}{1 + \exp\left(\frac{E - E_f}{k_B T}\right)} \right] \quad (3.46)$$

Pour une valeur fixe de  $n_s$  et une température donnée, nous déterminons la valeur  $E_f$  du niveau de Fermi qui permet la résolution numérique de cette équation [16,17].

Dans la figure 3.10, on présente les résultats de calculs sur notre structure GaN/AlInN, en fonction de la température, d'évolution de la position du niveau de Fermi par rapport au minimum de la bande de conduction, ces calculs sont effectués dans les deux cas, parabolique et non parabolique.

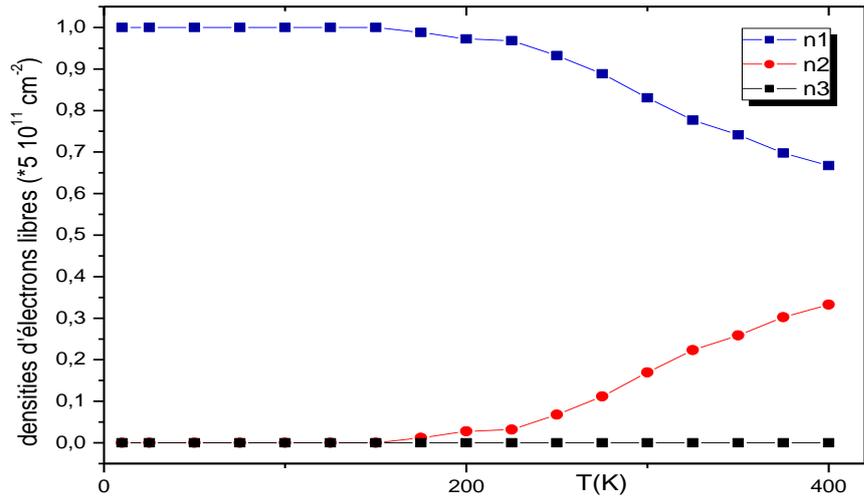


**Figure 3.10 :** Evolution du niveau de Fermi en fonction de la température [18]

La figure 3.10 montre, en accord avec [17], que la position du niveau de Fermi soit dans le cas parabolique ou dans le cas non parabolique, décroît lorsque la température augmente. Aux basses températures, il est situé entre le niveau fondamental ( $E_1 \approx 200$  meV) et le premier niveau excité ( $E_2 \approx 580$  meV). Au fur et à mesure que la température augmente, il se déplace vers les basses énergies. La non parabolicité de la bande de conduction n'a pas d'effet appréciable sur le comportement du niveau de Fermi vis-à-vis de la température.

### 3.6.2. Densités d'électrons

Une fois la position du niveau de Fermi est déterminée, pour une telle température, on peut déduire la population des différentes sousbandes, pour cette même température. Ainsi, la figure 3.11 regroupe Les densités des électrons libres  $n_i$  dans chaque sousbande.



**Figure 3.11 :** Evolution des densités surfaciques des électrons  $n_i$  en fonction de la température [18]

Aux basses températures ( $T < 100K$ ), le seul niveau peuplé est le niveau fondamental. Les autres niveaux excités sont dépeuplés. Ils ne commencent à être remplis que pour des températures élevées. Lorsque la température augmente ( $T > 150K$ ), le premier niveau excité  $E_2$  commence à être peuplé par des électrons provenant du niveau fondamental. Ce dernier voit sa densité électronique diminuée. Tandis que, le niveau  $E_3$  reste toujours dépeuplé dans la plage des températures considérée, il ne commence à être rempli que pour des températures assez élevées.

### 3.6.3. Force d'oscillateur

Une grandeur, dont dépend le coefficient d'absorption, et qui permet d'estimer la probabilité de couplage entre deux états, par l'onde électromagnétique, est la force d'oscillateur. Elle est fonction du moment dipolaire électrique. Nous avons vu précédemment que dans le cas d'une transition intersousbandes dans une hétérostructure, elle est donnée par :

$$f_{ji} = \frac{2}{\hbar^2 m^* \omega_{ji}} \epsilon_z^2 \left| \langle \chi_i | p_z | \chi_j \rangle \right|^2 = \frac{2\omega_{ji} m^*}{\hbar^2} \epsilon_z^2 \left| \langle \chi_i | z | \chi_j \rangle \right|^2 \quad (3.47)$$

Les calculs dans les deux cas parabolique et non parabolique montrent :

Force d'oscillateur $f_{ij}$	Approximation parabolique	Approximation non parabolique
------------------------------	---------------------------	-------------------------------

$f_{12}$	0.893	0.8296
$f_{13}$ (presque interdite)	0.0144	0.0137
$f_{23}$	0.1601	0.1565

**Tableau 3.1:** Forces d'oscillations des différentes transitions [18]

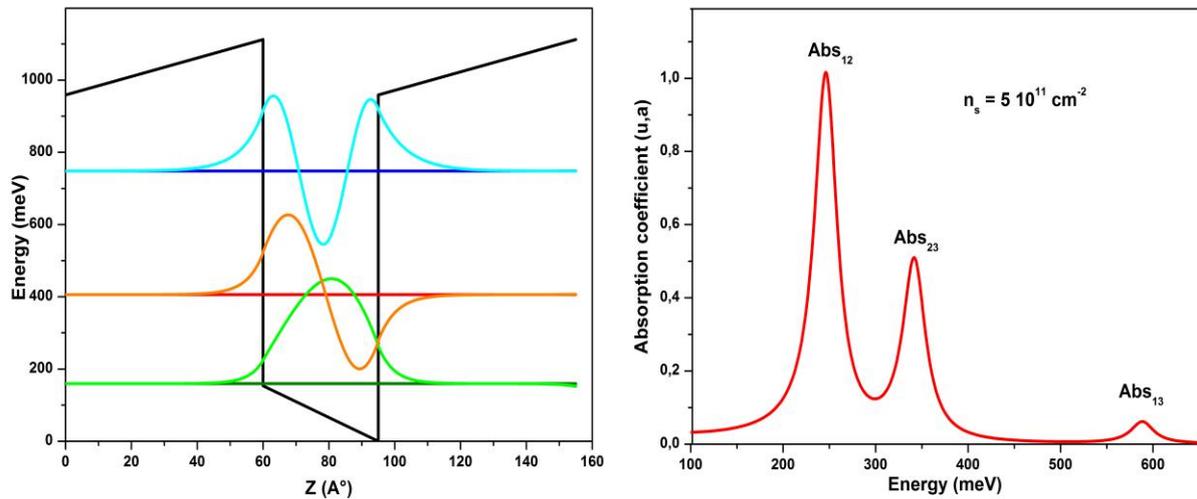
Comme c'était prévu, la transition qui a le coefficient d'absorption important, est la transition  $E_{12}$  vue sa valeur de force d'oscillateur  $f_{12}$  qui est proche de l'unité, c'est donc la transition la plus probable. La force d'oscillateur  $f_{13}$  est presque nulle. Ceci est expliqué par le fait que les transitions entre les états électroniques de même parité sont interdites par les règles de sélections dans les puits carrés. Ici le puits est déformé par rapport au puits carré. Cette déformation est dû au champs interne créée par la polarisation entre les plans de charge [11,19,20] ce qui engendre des fonctions d'ondes de parité légèrement écartées par rapport aux fonctions sinusoïdales pures. Donc le couplage  $\mu_{if} = \langle \chi_i | z | \chi_f \rangle$  n'est pas nul mais proche de zéro pour ces transition. Il traduit le résultat d'un faible recouvrement des fonctions d'onde correspondantes. On ne s'intéresse plus à cette transition dans le calcul du coefficient d'absorption. La transition  $E_{23}$ , (entre le premier et le deuxième, niveaux excités), a une force d'oscillateur moins prononcée par rapport à celle de la transition  $E_{12}$  parce que les densités électroniques des porteurs associées sont très faible, voir le troisième niveau vide dans les plages des températures étudiés [21]. On signale que pour toutes les transitions, la non parabolicité de la bande de conduction, en accord avec [17], a pour effet de diminuer les valeurs des forces.

#### 3.6.4. Coefficient d'absorption

Une fois les états électroniques et les densités surfaciques d'électrons  $n_i(T)$  sont calculés, il reste à calculer le coefficient d'absorption intersousbande. La figure 3.12 à droite, présente le coefficient d'absorption en fonction de l'énergie.

Dans cette structure, il est clair que les transitions ont des énergies distinctes, ce qui offre la possibilité d'absorber simultanément les différentes fréquences correspondantes.

Dans l'expression du coefficient d'absorption intersousbande calculé, le paramètre d'élargissement  $\Gamma_{12}$  a été estimé sur la base des valeurs expérimentales données dans la littérature [11,22].



**Figure 3.12 :** (A gauche) : profil de bande de conduction et les niveaux confinés ainsi que les fonctions d'onde associées (u.a) pour  $L_w=3.5\text{nm}$ . (À droite) le coefficient d'absorption intersousbande en fonction de l'énergie [18].

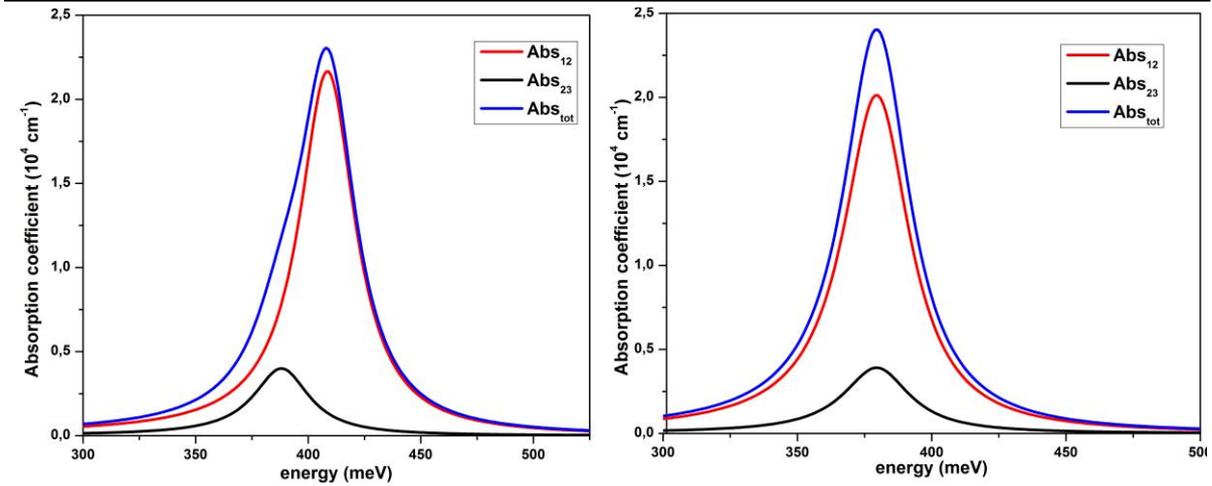
Pour les autres transitions, les paramètres d'élargissements ont été pris arbitrairement mais plus élevés que  $\Gamma_{12}$ , et allant croissant pour les transitions de niveaux d'énergies plus élevées. Ceci peut être justifié par le fait, que les fonctions d'onde des états excités étant étalées le long de la structure, voient plus les défauts d'interface.

D'autre part, il est possible de faire contribuer toutes les porteuses à l'absorption d'une même fréquence. En effet, la figure 3.5 (à droite) prédit la traversée de transitions  $E_{12}$  et  $E_{23}$  pour une géométrie spécifique ( $L_w = 2.5 \text{ nm}$ ). Ainsi on présente par la suite les résultats des calculs de coefficient d'absorption pour cette structure où les deux transitions distinctes correspondent à la même énergie (environ 390 meV), dans le domaine infrarouge moyen.

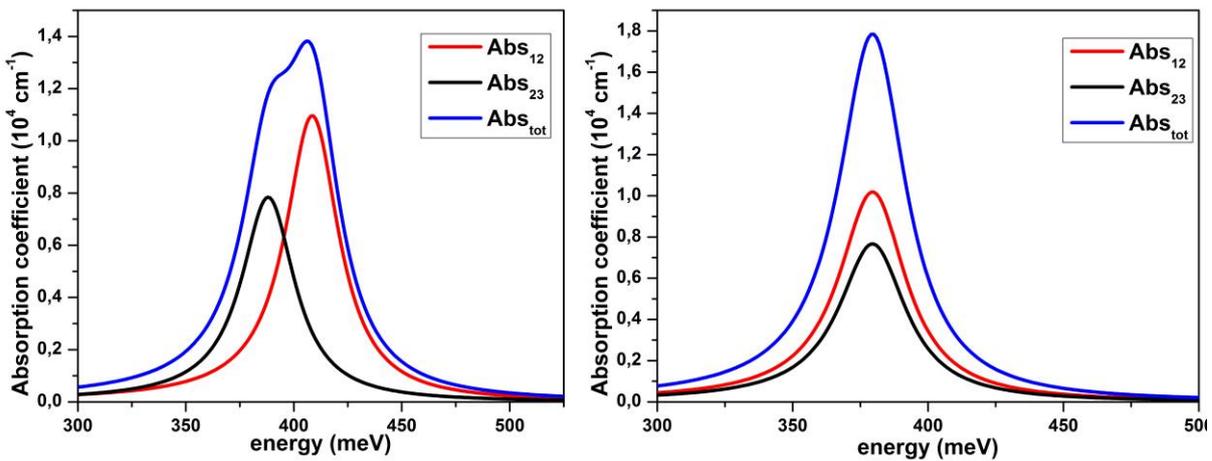
### 3.6.5. Effet de la température sur le coefficient d'absorption

On trace le coefficient d'absorption à deux températures différentes  $T = 300\text{K}$  et  $400\text{K}$  :

On remarque une augmentation d'amplitude totale du coefficient d'absorption ( $\alpha_{\text{tot}}$ ), par rapport à celle de chaque transition individuelle. Cette structure particulière pourrait alors conduire à une meilleure détection des radiations de faibles intensités. De telles structures peuvent être potentiellement utiles dans des dispositifs tels que les détecteurs quadratiques à deux photons [7].



**Figure 3.13 :** Coefficient d'absorption intersousbande en fonction de l'énergie. Pour  $L_w = 2.5$  nm, pour une densité  $n_s = 5.10^{11}$   $\text{cm}^{-2}$  et pour  $T=300\text{K}$ . (À gauche) le cas parabolique. (A droite) le cas non parabolique [18].

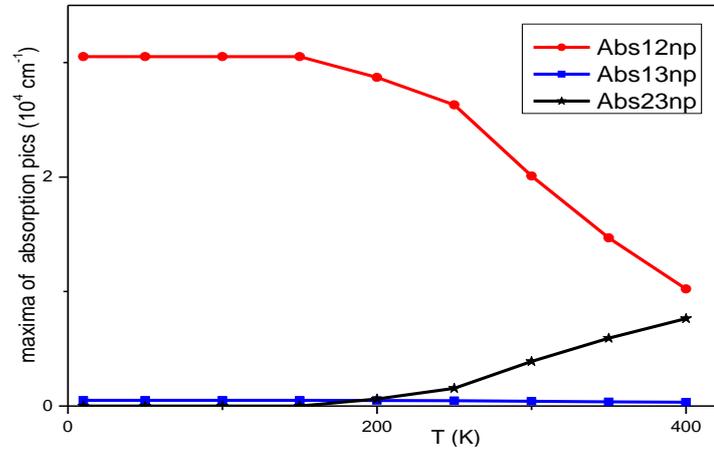


**Figure 3.14 :** Coefficient d'absorption intersousbande en fonction de l'énergie. Pour  $L_w = 2.5$  nm, pour une densité  $n_s = 5.10^{11}$   $\text{cm}^{-2}$  et pour  $T=400\text{K}$ . (À gauche) le cas parabolique. (A droite) le cas non parabolique [18].

Pour cette géométrie spécifique, les transitions  $E_{12}$  et  $E_{23}$  sont égales surtout dans le cas non parabolique, pour le cas parabolique ces deux transition sont très voisins du fait que les positions des niveaux dépendent de nature des bandes. La non parabolicité a pour effet de décaler les transitions vers les faibles fréquences.

En augmentant la température, la densité des porteurs dans le niveau excité  $E_2$  augmente, ce qui abaisse progressivement le coefficient d'absorption  $\alpha_{12}$  et parallèlement le

coefficient d'absorption  $\alpha_{23}$  augmente, pour bien illustré cette dépendance en température, la figure 3.15 présente la variation des maximums des pics d'absorption en fonction de la température.



**Figure 3.15 :** Evolution des maxima des pics d'absorption en fonction de la température [18].

Aux basses températures ( $T < 150K$ ) où le seul niveau peuplé est le niveau fondamental, le pic d'absorption de la transition  $E_{12}$  est le seul à considérer; due au bon recouvrement des fonctions d'onde de  $E_1$  et  $E_2$ . Lorsque la température augmente ( $T > 150K$ ), on observe une diminution du pic d'absorption de la transition  $E_{12}$  à l'avantage du pic de  $E_{23}$ . Ainsi, aux températures élevées, la transition  $E_{23}$  ayant une importante majeure peut donner lieu à une détection supplémentaire à la longueur d'onde correspondante pour les qui fonctionnent aux hauts températures. Le pic de  $E_{13}$  reste pratiquement nul et invariant, vue que le niveau  $E_3$  reste toujours dépeuplé, ainsi qu'un faible couplage  $\mu_{13} = \langle \chi_1 | z | \chi_3 \rangle$  due au fait que les fonctions d'onde des niveaux  $E_1$  et  $E_3$  ont presque la même parité

## Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons étudié théoriquement le confinement quantique dans l'hétérostructure non contrainte GaN/AlInN. Nous avons travaillé dans le cadre du modèle de la fonction enveloppe en adoptant l'approximation des bandes paraboliques. Nous avons utilisé une méthode numérique dite des différences finies pour déterminer les énergies et les fonctions enveloppes propres de l'hétérostructure. L'objectif est la détermination des géométries dont les énergies de transitions intersousbandes permettraient la conception de dispositifs optoélectroniques unipolaires pour des applications dans le domaine térahertzique d'une part et d'autre part dans le domaine des télécommunications par fibre optique.

Nos résultats montrent qu'il faut considérer des géométries engendrant 4 niveaux confinés pour atteindre des longueurs d'onde pour des applications en télécommunications. En effet, la transition  $E_{14}$  nous permet d'avoir des longueurs d'ondes  $\lambda=1.44\text{--}1.54\ \mu\text{m}$  pour des largeurs du puits  $L_w=20\text{--}45\ \text{\AA}$  et de la barrière  $L_b=60\ \text{\AA}$ . Et la transition  $E_{34}$  nous permet d'avoir une transitions de fréquence  $\nu=9.86\ \text{THz}$  correspondant aux rayonnements térahertziques pour la géométrie critique  $6/2.5/6\ \text{nm}$ . Cette géométrie satisferait ainsi aux deux domaines souhaités. Ainsi, par rapport au cas parabolique, les positions des niveaux excités ont diminué lorsque la non parabolicité des bandes a été inclus dans les calculs. Par ailleurs, dans le dernier cas, le ralentissement du niveau  $E_3$ , autour de  $V_b$ , s'est révélé plus prononcé. Cela explique le croisement clair entre  $E_{12}$  et  $E_{23}$  pour une configuration spécifique ( $E_{12} = E_{23} \approx 390\ \text{meV}$  pour  $L_w = 2,5\ \text{nm}$ ). Cela suggère une possible amélioration de l'absorption d'un rayonnement dont la fréquence remplit  $h\nu = E_{12} = E_{23}$ . Nous avons étudié l'évolution de la position du niveau de Fermi en fonction de la température pour déterminer les densités de porteurs dans chaque niveaux d'autre part, afin de calculer le coefficient d'absorption intersousbande. Les calculs du coefficient d'absorption ont été effectués pour deux géométries. L'une, correspondant à  $L_w = 3.5\ \text{nm}$  et où les deux transitions distinctes sont séparées en énergie, pourrait être utilisée dans un processus de multidétection impliquant un système unique. L'autre, où les deux transitions distinctes  $E_{12}$  et  $E_{23}$  coïncident, correspond à  $L_w = 2,5\ \text{nm}$ . Nous pensons que des dispositifs basés sur la dernière structure spécifique pourraient être conçus pour une meilleure détection des signaux ayant de faibles intensités.

### Références

- [1] Y. Chrafi, L. Moudou, K. Rahmani, I. Zorkani, M. Khenfouch, and S. Janati Edrissi : Eur. Phys. J. Appl. Phys. 86, 20101 (2019)
- [2] L. Moudou, Y. Chrafi, K. Rahmani, I. Zorkani, J. Phys. Conf. Ser. 984, 012002 (2018)
- [3] Y. Arslan, T. Çolakoglu, G. Torunoglu, O. Aktas, C. Besikci, Infrared Phys. Technol. 59 (2013) 108–111.
- [4] A. Almagoussi, A. Abounadi, H. Akabli, K. Zekentes, M. Androulaki, Eur. Phys. J. Appl. Phys. 45 (2009) 20301.
- [5] M. Beck, D. Hofstetter, T. Aellen, J. Faist, U. Oesterle, M. Illegems, E. Gini, H. Melchior, Science 295 (2002) 301–305.
- [6] R. Colombelli, J.M. Manceau, Phys. Rev. X 5 (2015) 011031.
- [7] H. Schneider, H.C. Liu, S. Winner, O. Drachenko, M. Helm, J. Faist, Appl. Phys. Lett. 93 (101114) (2008) 49–51.
- [8] C. Franke, M. Walter, M. Helm, H. Schneider, Infrared Phys. Technol. (2014), <http://dx.doi.org/10.1016/j.infrared.2014.08.012>.
- [9] H. Schneider, T. Maier, H.C. Liu, M. Walther, P. Koidl, Opt. Lett. 30 (2005) 287.
- [10] R. Kudrawiec, M. Motyka, G. Cywinski, M. Siekacz, C. Skierbiszewski, L. Nevou, L. Doyennette, M. Tchernycheva, F. H. Julien, J. Misiewicz, Phys. Stat. Sol. (c) 5, 503 (2008).
- [11] G. Bastard, « Wave Mechanics Applied to Semiconductor Heterostructures » les éditions de Physique, Paris, (1988).
- [12] B. F. Levine, K. K. Choi, C. G. Bethea, J. Walker, R. J. Malik, Appl. Phys. Lett. 50 (16), 1092(1987).
- [13] H. Alause, « Modulateurs à base de semi-conducteurs pour la détection optique de gaz » Thèse Université Montpellier II (1997).
- [14] E. Rosencher, B. Vinter, Optoélectronique, Dunod, Paris, 2002.
- [15] H. Mathieu and Hervet Fanet « Physique des semiconducteurs et des composants électroniques » 6ème édition, DUNOD (2009).
- [16] A. Rajira et al. / Superlattices and Microstructures 84 (2015) 192–197
- [17] H. Akabli, A. Rajira, A. Almagoussi, A. Abounadi, Eur. Phys. J. Appl. Phys. 52 (2010) 20302.
- [18] Moudou, L., Mohamed, A. H., Bajjou, O., Boulghallat, M., Khenfouch, M., & Rahmani, K. (2022). Improvement of intersubband absorption in asymmetric quantum wells based on

GaN/AlInN. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, 115168.

- [19] A. Helman, «Puits et boites quantiques de GaN/AlN pour les applications en optoélectronique à  $\lambda \approx 1.55 \mu\text{m}$  », Thèse de l'Université Paris VI Orsay (2004).
- [20] N. Grandjean, B. Damilano, S. Dalmaso, M. Leroux, M. Lügt, J. Massies, *J. Appl. Phys.* 86, 3714(1999).
- [21] [http://www.nextnano.de/nextnano3/tutorial/1Dtutorial\\_IntrabandTransitions.htm](http://www.nextnano.de/nextnano3/tutorial/1Dtutorial_IntrabandTransitions.htm)
- [22] J.P. Loehr, M.O. Manasreh, “Semiconductor Quantum Wells and Superlattices for Long-Wavelength Infrared detectors”, edited by M.O. Manasreh (Artech House, Boston, London, 1993), pp. 37–41.

**Chapitre 4 :**  
**Absorption**  
**intersousbande dans**  
**les puits quantiques**  
**asymétriques**  
**ZnO/MgZnO pour les**  
**applications en**  
**télécommunications**  
**et l'émission**  
**Térahertzique**

## **Chapitre 4 : Absorption intersousbande dans les puits quantiques asymétriques ZnO/MgZnO pour les applications en télécommunications et l'émission Téraherzique**

### **Introduction**

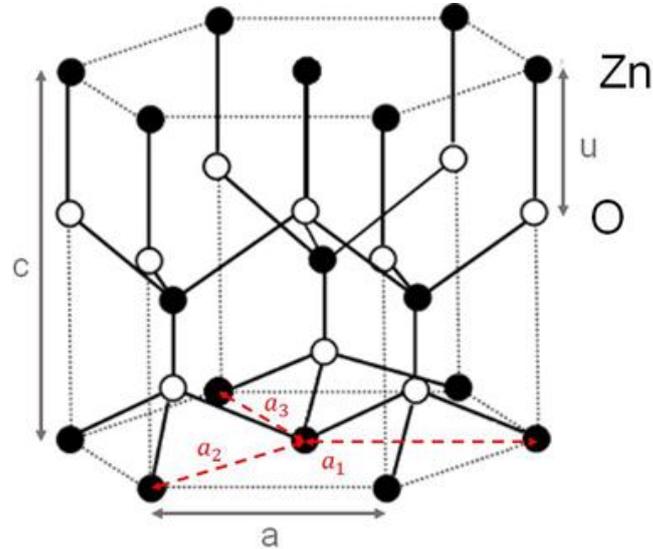
Afin d'évaluer les résultats calculés dans les chapitres précédents et qui concernent la structure à base de GaN/AlInN, nous nous effectuée une étude comparative avec une structure à base de ZnO/ZnMgO. A cet effet nous avons présenté dans ce chapitre, des généralités concernant les propriétés des semiconducteurs massifs II-VI. Toutes ces propriétés sont nécessaires afin d'effectuer des simulations mais aussi afin de comprendre les résultats expérimentaux et pour la conception de structure de dispositifs à base de ces matériaux. Les valeurs des paramètres utilisés dans ce manuscrit sont présentées et s'appuient sur un travail bibliographique. Puis nous avons rapporté les résultats des transitions inter-sous-bandes dans les puits quantiques ZnO/ZnMgO ainsi de le coefficient d'absorption. Nous avons fini par une comparaison de ces transitions avec les semi-conducteurs à base de GaN/AlInN qu'on a traité dans les chapitres précédents.

### **4.1. Généralités sur l'oxyde de zinc ZnO.**

#### **4.1.1. Structures cristallines et polarisation spontanée**

Les semiconducteurs II-VI cristallisent naturellement selon des structures de type wurtzite et cubique. Tandis que le cristal ZnO se structure selon l'arrangement wurtzite. Le cristal MgO cristallise naturellement selon la structure cubique ce qui présente une difficulté majeure pour la croissance sans dislocation d'alliages ternaires ZnMgO à haute concentration de Mg.

La wurtzite est caractérisée par deux paramètres nommés  $a$  selon la direction (100) correspondant à la base de l'hexagone et  $c$  selon la direction (001) qui est la hauteur de l'hexagone présentées dans la figure 4.1.

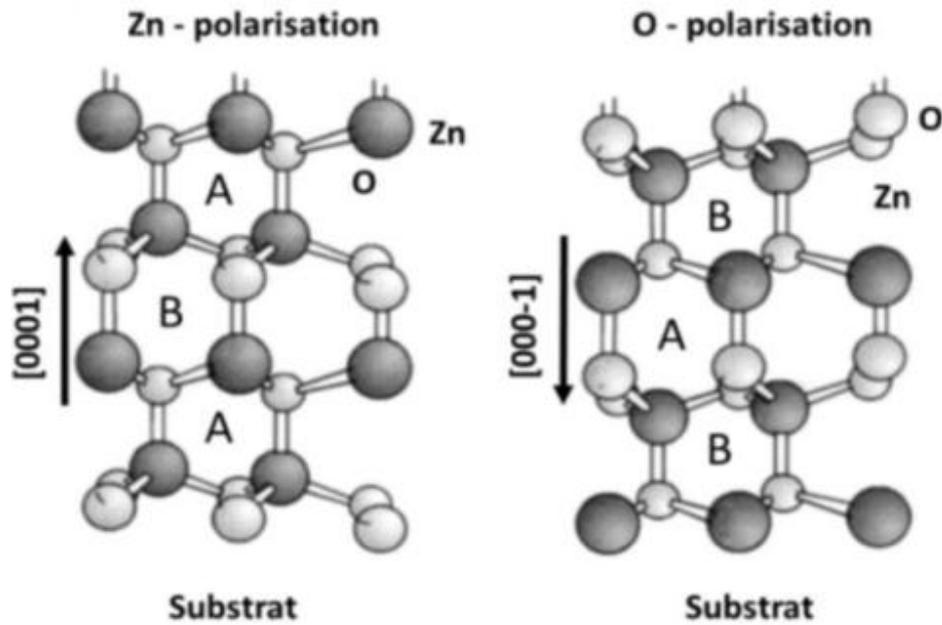


**Figure 4.1 :** Arrangement cristallographique de la wurtzite pour le cristal ZnO.

La maille élémentaire de la wurtzite contient deux types d'atomes. Pris indépendamment, chaque type d'ion forme un sous-réseau hexagonal compact composé soit de cation  $Zn^{2+}$  ou d'anion  $O^{2-}$ . Ces deux réseaux sont traduits par la distance  $u$ . Le paramètre  $u$  est défini comme la longueur de la liaison anion-cation selon l'axe  $c$  de la wurtzite. Sa valeur dans un réseau réel donne sa divergence par rapport à un réseau idéal [1] qui est  $u_0 = \frac{3}{8}c_0$ . Le cation  $Zn^{2+}$  est positionné aux coordonnées  $(0,0,0)$  et  $(1/3, 2/3, 1/2)$ . Les coordonnées de l'anion  $O^{2-}$  sont  $(0,0,u)$  et  $(1/3, 2/3, 1/2+u)$  dans la maille élémentaire.

Ces deux sous-réseaux sont empilés selon la séquence ABAB suivant l'axe  $c$  et représentés dans la Figure 4.2. Les paramètres cristallins à température ambiante de cette structure ZnO sont [3]:

$$a_0(\text{ZnO}) = 3.246 \text{ \AA} \quad \text{et} \quad c_0(\text{ZnO}) = 5.213 \text{ \AA}$$



**Figure 4.2 :** Arrangement cristallographique Zn et O et l'orientation de la polarisation spontanée [2].

Concernant l'alliage ternaire  $Zn_{1-x}Mg_xO$ , le paramètre cristallographique  $a$ , varie selon une interpolation linéaire en fonction de la concentration en Mg entre les valeurs des deux binaires. Cette interpolation est appelée la loi de Vegard [4] :

$$a(Zn_{1-x}Mg_xO) = x \cdot a(MgO) + (1 - x) \cdot a(ZnO) \quad (4.1)$$

Dans l'arrangement wurtzite, les plans cristallographiques sont définis en utilisant les indices de Bravais  $\{h\ k\ i\ l\}$ . Ces plans  $\{h\ k\ i\ l\}$  sont orthogonaux aux directions  $\langle h\ k\ i\ l \rangle$ . Ces conventions sont avant tout utilisées pour indiquer la direction de croissance des cristaux. Ce travail se focalise uniquement sur l'arrangement cristallographique de la wurtzite puisque cette phase est plus stable thermodynamiquement que la phase cubique pour la plupart des matériaux considérés.

De surcroît, la structure wurtzite possède la caractéristique de ne pas être centrosymétrique ce qui a pour conséquence la non-équivalence des directions  $[0001]$  et  $[000-1]$ . La direction  $[0001]$  pointant du cation à l'anion est appelée l'orientation métal (Zn). A l'inverse, la direction  $[000-1]$  pointant de l'anion au cation est appelée l'orientation O. Les structures fabriquées selon  $[0001]$  sont d'une polarité Zn et selon  $[000-1]$  sont d'une polarité O.

Le choix de la polarité du matériau affecte fortement la structure de bande, la stabilité thermique ainsi que la morphologie chimique de la surface. Néanmoins il est à noter que la polarité ne donne aucune indication sur la nature des atomes à la surface du matériau gouvernée par la minimisation de l'énergie de surface. L'importance de ce choix impose la maîtrise des conditions de croissance ainsi que le choix judicieux des substrats [5].

Dans ce travail, nous concentrons notre attention sur la polarité métal pour les hétérostructures ZnO/MgZnO. En effet, pour ces structures la polarité métal est généralement caractérisée par des croissances plus facilement contrôlables et plus stables chimiquement.

#### **4.1.2. Structure de bande**

La structure de bande des semiconducteurs est déterminée par la théorie des bandes. Cette théorie est basée sur la structure électronique des atomes constituant le cristal du semiconducteur considéré ainsi que sur leurs positions dans le réseau cristallin. Les noyaux atomiques périodiquement espacés dans ce réseau cristallin créent un potentiel Coulombien périodique tridimensionnel dans lequel les électrons peuvent se déplacer. C'est cette présence électronique qui nous intéresse ici.

Sur un atome, la probabilité de présence des électrons obéit à des solutions que l'on nomme les fonctions d'onde qui pour un atome isolé sont des harmoniques sphériques. Ces solutions donnent aux électrons leur probabilité de présence dans une certaine région de l'espace ainsi que leur énergie.

Certaines fonctions d'onde dites de valence peuvent interagir avec une autre fonction d'onde de valence d'un autre atome créant de ce fait un lien entre atomes. La nature de ce lien va dépendre des électrons dits de valence présents dans ces fonctions d'onde. Ce phénomène est à la base de la formation des cristaux.

Cependant les propriétés électroniques du cristal ne peuvent pas être considérées comme uniquement l'addition des propriétés électroniques des atomes. Effectivement la forte quantité d'atomes liés a pour effet de créer des états d'énergie discrets qui se rassemblent engendrant l'apparition des bandes d'énergie permises pour les électrons et les trous.

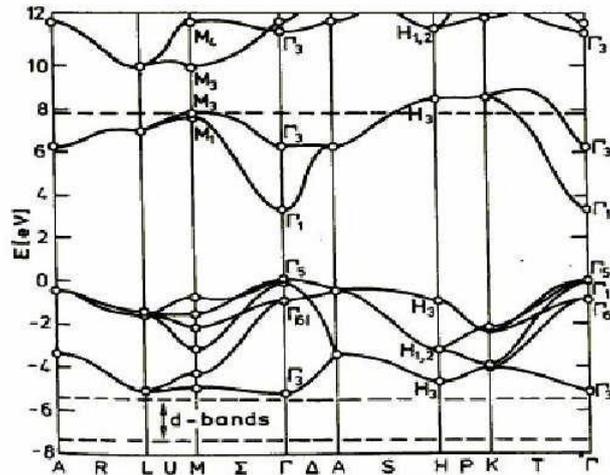


Figure 4.3 : Structure de bande de la wurtzite de ZnO [6].

#### 4.1.3. Energie de bande interdite

Les matériaux considérés dans cette thèse sont des matériaux à large bande interdite dont l'énergie couvre le domaine UV. Leur énergie à 0 K est rapportée dans le Tableau 2.6. La dépendance en température de leur bande interdite varie selon la loi de Varshni [7] ([8] – [9]), [10]:

$$E_g(T) = E_g(0) - \frac{\alpha}{\beta + T} T^2 \quad (4.2)$$

$\alpha$  et  $\beta$  correspondent aux coefficients de Varshni qui sont des constantes déterminées par ellipsométrie, photoluminescence ou absorption. La valeur des coefficients de Varshni est rassemblée, pour ZnO, dans le Tableau 4.1.

$E_g(0)$ eV	$\alpha$ (meV/K)	$\beta$ (K)
3.4407 (3.441 - 3.44)	0.67 (0.65 – 0.82)	672 (660 – 700)

Tableau 4.1 : Valeur des énergies de bande interdite et des coefficients de Varshni pour la structure wurtzite de ZnO. Les valeurs utilisées sont libres mais les différentes valeurs trouvées dans la littérature sont mises entre parenthèses.

Afin d'obtenir la valeur de bande interdite pour un alliage  $Zn_{1-x}Mg_xO$ , on utilise la loi quadratique d'interpolation entre les deux binaires utilisant le bowing parameter (b). Ce paramètre prend en compte la déviation par rapport à l'interpolation linéaire entre les deux binaires GaN/ZnO et AlN/MgO. L'interpolation quadratique a la formule suivante :

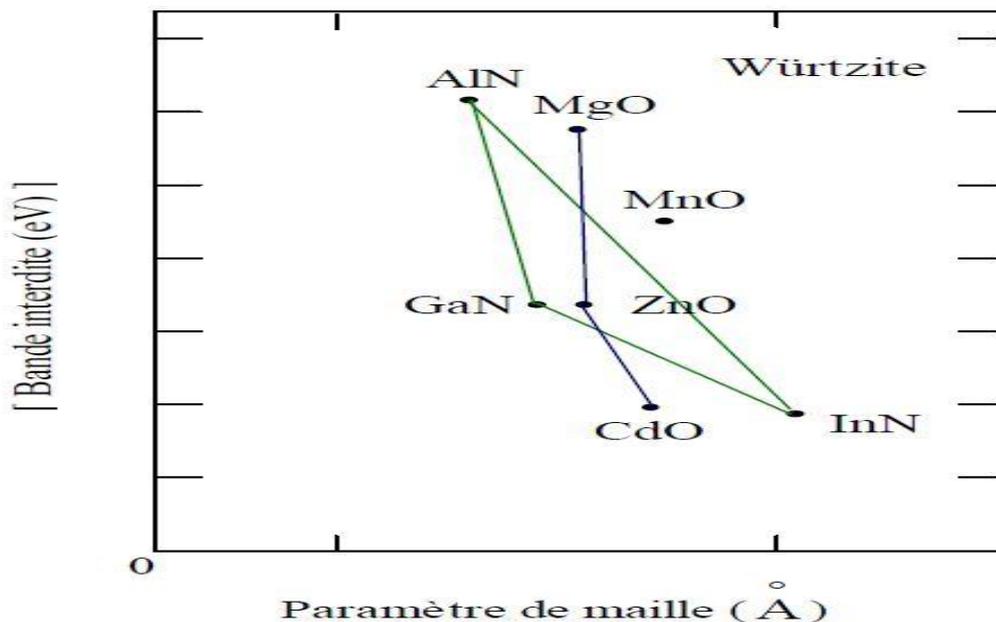
$$E_g(Zn_{1-x}Mg_xO) = x.E_g(MgO) + (1-x).E_g(ZnO) - (1-x).b \quad (4.3)$$

Ce concept d'interpolation quadratique utilisant un bowing parameter b est généralisé à d'autres paramètres que l'énergie de bande interdite afin d'obtenir la valeur des propriétés des alliages ternaires variant avec leur concentration de Mg.

## 4.2. Puits quantique asymétrique ZnO/MgZnO

### 4.2.1. Description du système ZnO/MgZnO

Le système ZnO/MgZnO est une hétérojonction dans laquelle le matériau ZnO joue le rôle de puits et le matériau MgZnO représente la barrière. Grâce aux performances des techniques de croissances, le système ZnO/MgZnO est bien réalisé et donne des interfaces de bonne qualité (quasi-abruptes). La qualité de ce système est gagée par l'accord/désaccord paramétrique de maille de deux matériaux puits et barrière, et selon la fraction molaire du magnésium on peut avoir des structures moins contraintes. La Figure 4.4 indique l'énergie de la bande interdite des différents semiconducteurs en phase wurtzite en fonction de leurs paramètres de maille.



**Figure 4.4:** variation de la bande interdite en fonction du paramètre de maille pour différents semiconducteurs en phase wurtzite [11].

#### 4.2.2. Répartition du champ

La présence du champ électrique interne, ou plus scientifiquement l'effet Stark confiné quantique [12], dans les puits quantiques à base des nitrures, a un rôle très important sur les propriétés. Les structures wurtzite sont naturellement l'objet d'une polarisation. C'est la même chose dans le puits ZnO/MgZnO pour des petites fractions en Mg. La juxtaposition de deux matériaux nitrure en phase wurtzite différents, l'un constitue le puits (w) et l'autre la barrière (b), résulte une discontinuité de la polarisation macroscopique totale ( $\mathbf{P}$ ) (somme des deux contributions de polarisation, spontanée et piézoélectrique) entre ces deux matériaux, ce qui crée un plan de charges résiduelles fixes à l'interface entre les matériaux puits/barrière :

$$\sigma = (P_b - P_w)n \quad (4.4)$$

Avec  $n$  : est le vecteur suivant la direction de croissance. Cette accumulation de charges aux interfaces des structures quantiques correspond à la présence d'un champ électrique interne macroscopique  $F$ , différent dans chaque matériau.

Dans le cas d'une hétérostructure, la composante normale du vecteur déplacement électrique est continue à travers l'interface [13]:

$$D = \varepsilon F + P \Leftrightarrow \varepsilon_w \varepsilon_0 F_w + P_w = \varepsilon_b \varepsilon_0 F_b + P_b \quad (4.5)$$

$\varepsilon_w$  ( $\varepsilon_b$ ) est la constante diélectrique relative du puits (barrière).

La deuxième condition, communément utilisée pour les structures périodiques, traduit une chute de potentiel nulle aux bornes de chaque période [14]. Elle s'exprime par la relation suivante :

$$-e(L_w F_w + L_b F_b) = 0 \quad (4.6)$$

Ces deux relations permettent d'exprimer analytiquement les champs électriques internes dans le puits et la barrière, résultants de la discontinuité des polarisations totales à leur interface :

$$F_w = \frac{(P_b - P_w)L_b}{\varepsilon_0(\varepsilon_w L_w + \varepsilon_b L_b)} \quad (4.7)$$

$$F_b = \frac{-(P_b - P_w)L_w}{\varepsilon_0(\varepsilon_w L_w + \varepsilon_b L_b)} = -F_w \frac{L_w}{L_b}$$

Dans l'hypothèse où  $\varepsilon_A \cong \varepsilon_B$  on obtient :

$$F_w = \frac{(P_b - P_w)}{\varepsilon_0 \varepsilon_w} \frac{L_b}{(L_w + L_b)} \quad (4.8)$$

Dans le puits, le champ électrique est une fonction décroissante (croissante) de la largeur de puits (barrière) [15], et inversement dans la barrière. On peut donc faire varier le champ électrique dans le puits (barrière) en jouant sur les compositions et les largeurs des matériaux puits et barrières.

Les deux contributions des polarisations participent de façon significative aux valeurs des champs électriques internes. La valeur maximale du champ électrique interne  $F_{MAX} = \frac{\Delta P}{\varepsilon_B}$  dépend donc directement de la proportion en magnésium dans la barrière. Une augmentation approximativement linéaire a été mesurée par des mesures de photoluminescence résolue en temps [16] :

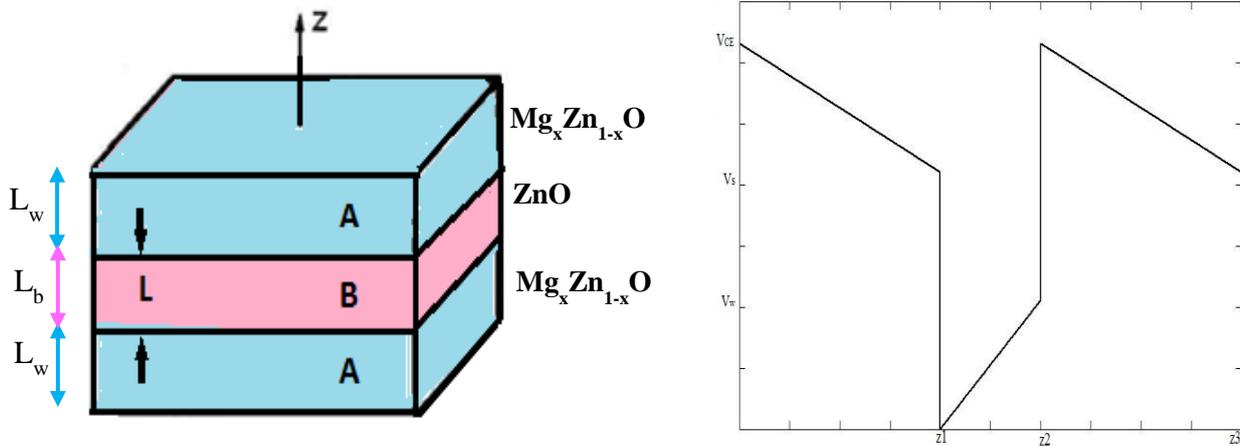
$$F_{MAX}(x_{Mg}) = 3.95 x_{Mg} \text{ MV/cm}, \text{ soit pour } x_{Mg} = 0,2 \text{ on aura : } F_{MAX} = 0.79 \text{ MV/cm}$$

### 4.2.3. Profil du potentiel de conduction

Le potentiel  $U_H(z)$  d'une hétérostructure résulte fréquemment de la discontinuité de bande ( $\Delta E_c$ : offset) à l'interface des deux matériaux à cause de la différence des positions des bandes de conduction. Mais, cette fois ci, la présence de champs électriques internes ( $F_w$  et  $F_b$ ) dans chacun des deux matériaux va l'influencer. La variation du potentiel de la bande de conduction le long de la structure est donnée par :

$$U_H(z) = \begin{cases} eF_b(z - z_1) + \Delta E_c & z < z_1 \\ eF_w(z - z_1) & z_1 \leq z \leq z_2 \\ eF_b(z - z_3) + \Delta E_c & z > z_2 \end{cases} \quad (4.9)$$

$z_1$  et  $z_2$  déterminent les positions de la barrière et du puits :  $z_1 = L_b$ ,  $z_2 = L_b + L_w$  et  $z_3 = z_2 + L_b$ . La position  $z_1$  est prise comme origine des potentiels.



**Figure 4.5:** Profil de potentiel de la bande de conduction [17]

Le profil de la bande de conduction est en forme de dents de scie : c'est une fonction linéaire par morceaux ayant des sauts aux interfaces de l'hétérostructure (on admet que les interfaces sont abruptes et que leurs effets sur le potentiel se traduisent par une discontinuité de potentiel dont la valeur est un paramètre caractéristique de l'hétérostructure). Les champs électriques internes dans ZnO/MgZnO peuvent avoir des valeurs importantes (de quelques MV/cm). Les champs dans le puits et dans les barrières sont de signes opposés.

Pour la suite, on distinguera trois régions énergétiques sur ce profil: de 0 à  $eF_w L_w = V_w$  (R1) ; de  $V_w$  à  $V_s = \Delta E_c$  (R2), et de  $\Delta E_c$  à  $V_{CE} = -eF_b L_b + V_s$  (R3).

#### 4.2.4. Etats électroniques dans les puits quantiques ZnO/MgZnO

Cette étude théorique est consacrée à la détermination des géométries convenables pour avoir l'émission des ondes téraherziques 0.4—41.33 meV. On va s'intéresser aux transitions intersousbandes dans la BC de l'hétérostructure ZnO/MgZnO, avec un pourcentage de Mg dans la barrière 20% sans tenir compte de la contrainte due au désaccord paramétrique (les paramètres de la maille dans le puits et la barrière sont très proches). Les calculs ont été développés dans l'approximation parabolique et dans le cas non parabolique où la masse effective dépend de l'énergie selon le modèle de Nilson [18] :

$$m_w(\varepsilon) = m_w \left(1 + \frac{\varepsilon}{E_w}\right) ; m_b(\varepsilon) = m_b \left(1 - \frac{V_s - \varepsilon}{E_w}\right) \quad (4.10)$$

$E_{w(b)}$  : l'énergie du gap du puits (barrière)

$m_{w(b)}$  : la masse effective des électrons de BC dans l'approximation parabolique dans le puits (barrière)

Dans le cadre du modèle de la fonction enveloppe, l'équation de Schrödinger se ramène à la résolution de l'équation différentielle suivante :

$$\left( \frac{-\hbar^2}{2} \frac{d}{dz} \left( \frac{1}{m^*(z)} \frac{d}{dz} \right) + U_H(z) \right) \chi_i(z) = E_i \chi_i(z) \quad (4.11)$$

La détermination des énergies et fonctions enveloppes propres solution de l'équation de Schrödinger est réalisée à travers une méthode de résolution numérique différente de celle, graphique, utilisée pour les puits quantiques carrés. Cette méthode est basée sur la méthode des différences finies, dont le principe est cité dans le chapitre 2.

Le potentiel de la bande de conduction du puits asymétrique de ZnO/Mg<sub>0.2</sub>Zn<sub>0.8</sub>O est de cette forme :

$$U_H(z) = \begin{cases} eF_b(z - z_1) + \Delta E_c & z < z_1 \\ eF_w(z - z_1) & z_1 \leq z \leq z_2 \\ eF_b(z - z_3) + \Delta E_c & z > z_2 \end{cases} \quad (4.12)$$

Avec  $z_1=L_b$  et  $z_2=L_b+L_w$  et  $z_3=L_b+z_2$ .

La masse effective, la permittivité relative sont calculées à partir de la loi de Vegard (interpolation linéaire entre les valeurs de ZnO et MgO) et le gap varie avec la composition selon la loi quadratique :

$$E_{Al_{1-y}In_yN}^g(y) = y.E_{mN}^g + (1-y).E_{AlN}^g - y.(1-y).b \quad (4.13)$$

Où le paramètre de bowing  $b=0$  eV pour l'alliage MgZnO où la fraction de Mg est inférieur à 36% [11,19].

A 300K	ZnO	Mg <sub>0.2</sub> Zn <sub>0.8</sub> O
m*/m <sub>0</sub>	0.29	0.302
E <sub>g</sub> (eV)	3.4	3.7

**Tableau 4.2:** Masse effective et énergie interdite de ZnO et Mg<sub>0.2</sub>Zn<sub>0.8</sub>O

Puis, qu'on prend comme deuxième approximation pour simplifier, les permittivités relatives égales, et égale à celle de la barrière :

$$\varepsilon_r^{\text{puits}} = \varepsilon_r^{\text{barrière}} \text{ et } \Delta E_c = 0,72 \cdot \Delta E_g = 210 \text{ meV} \quad (4.14)$$

Les niveaux confinés sont relativement sensibles à la variation de la hauteur de la barrière en particulier pour les faibles L<sub>b</sub>. Les positions du niveau fondamental et du 1<sup>er</sup> niveau excité, situés dans le domaine énergétique R2, augmentent lorsqu'on élargi la barrière. Au contraire, ceux situés dans R3 descendent en énergie. De plus le potentiel V<sub>CE</sub> augmente avec L<sub>b</sub>, ce qui entraîne l'apparition d'autres niveaux excités.

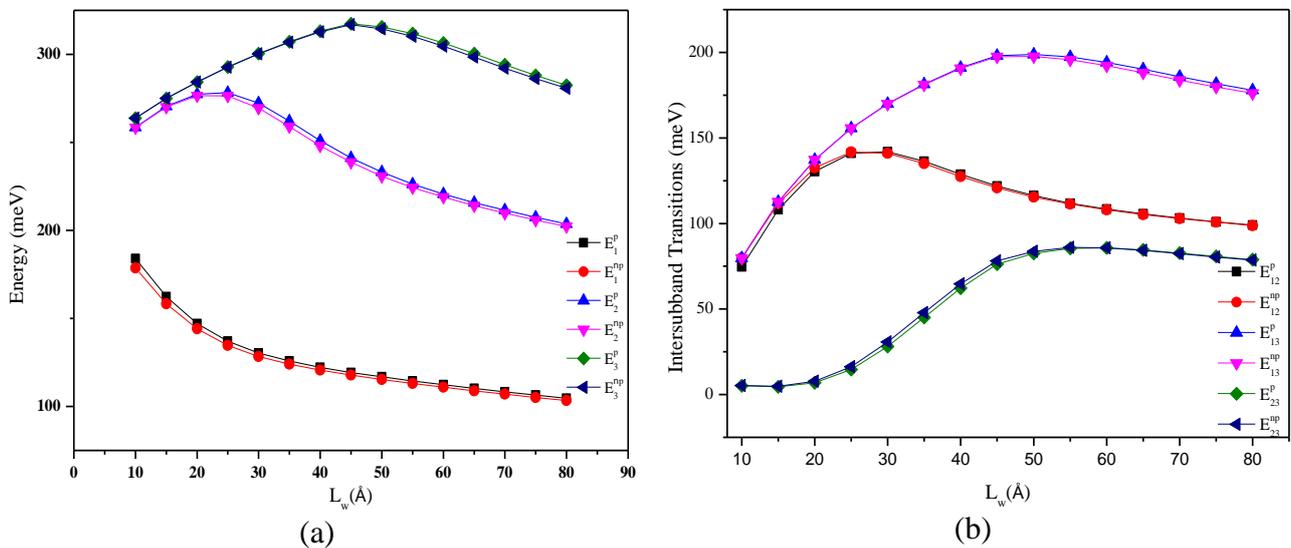
Il est à signaler que ces variations d'énergie sont globalement faibles au-delà d'une certaine largeur de la barrière. On considérera, ainsi, la valeur de L<sub>b</sub>=8 nm, pour étudier l'effet de la largeur du puits. On obtient les résultats cités dans le tableau suivant :

L <sub>w</sub> (Å)	Les niveaux confinés en (meV)					
	E <sup>P</sup> <sub>1</sub>	E <sup>np</sup> <sub>1</sub>	E <sup>P</sup> <sub>2</sub>	E <sup>np</sup> <sub>2</sub>	E <sup>P</sup> <sub>3</sub>	E <sup>np</sup> <sub>3</sub>
10	184,1	183,9	258,6	258,4	263,8	263,4
15	162,4	162,1	270,5	269,9	275	274,5
20	147,1	146,8	277,4	276,2	284,3	283,7
25	137,1	136,8	278,2	275,8	292,8	292,2
30	130,4	130,1	272,3	268,6	300,4	299,7
35	125,8	125,4	262,1	257,6	307,2	306,4
40	122,2	121,9	251	246,6	313,2	312,2
45	119,3	119	241,2	237	317,4	314,3
50	116,8	116,5	233,1	229,1	315,6	311,3
55	114,5	114,2	226,3	222,7	311,8	306,6
60	112,3	112	220,7	217,3	306,5	300,7

65	110,2	110	215,8	212,6	300,4	294,2
70	108,3	108	211,5	208,4	294,1	288
75	106,4	106,2	207,4	204,5	288,1	282
80	104,6	104,4	203,7	200,9	282,5	276,7

**Tableau 4.3:** Evolution des niveaux confinés en fonction de la largeur du puits pour une largeur de la barrière fixe à 8nm

La figure 4.6 est la représentation graphique de l'évolution des différents niveaux confinés en fonction de  $L_w$  ainsi que les transitions intersousbandes associées [17]:



**Figure 4.6:** Evolution en fonction de la largeur du puits pour  $L_b=8$ nm, (a) des niveaux confinés, (b) Les transitions énergétiques. [17]

D'après la figure 4.6 (a), on constate que lorsque la largeur du puits diminue chaque niveau confinés augmentent en énergie jusqu'à une certaine largeur du puits dont laquelle ils ont une valeur maximale et au-dessous de laquelle les énergies diminuent,  $L_w=45$  Å pour  $E_3$  et  $L_w=25$  Å pour  $E_2$ . Lorsqu'un niveau rentre dans la région R3 sa position subit un ralentissement dû à l'effet combiné du continuum et du champ confinant de la barrière. Et pour des puits larges, la variation de l'énergie des niveaux confinés sont globalement faibles.

Pour la nonparabolicité, son effet est négligeable pour le niveau fondamental. Le  $E_{1p}$  et  $E_{1np}$  sont presque confondus. Mais à chaque fois le niveau est excité l'effet de la nonparabolicité devient important. Il baisse l'énergie de niveau confinés pour des puits

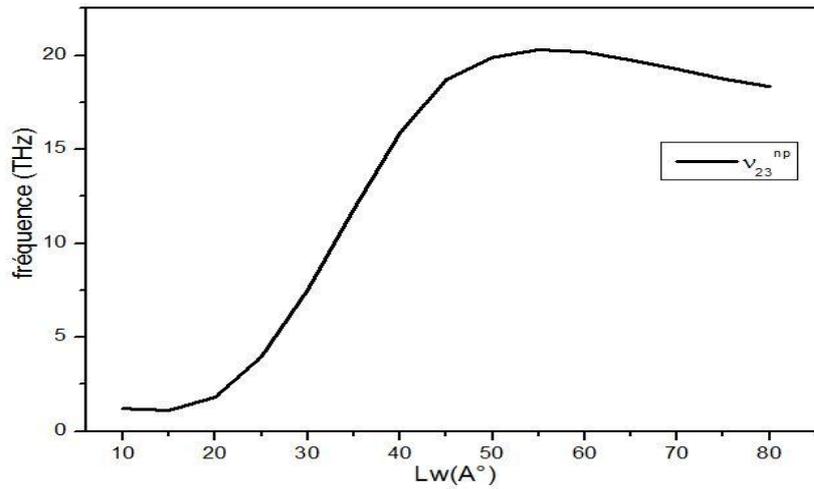
immense d'environ  $\approx 2.8\text{eV}$  pour  $E_2$  et  $\approx 8\text{eV}$  pour  $E_3$ . Ainsi pour des puits fins l'effet de la nonparabolicité est généralement faible. Les énergies se baissent d'environ  $\approx 0.3\text{eV}$  pour  $E_2$  et  $\approx 0.7\text{eV}$  pour  $E_3$ .

Pour la figure 4.6 (b), on remarque que chaque transition possède deux régions de variation, une où la transition croît avec  $L_w$ , et l'autre où elle décroît. Dans la 1<sup>ère</sup> région, le niveau haut situé au-dessus de  $V_s$  se déplace lentement, contrairement au niveau en dessous de  $V_s$  qui décroît fortement, entraînant une augmentation de l'énergie de transition. Dans la 2<sup>ème</sup> région, les deux niveaux ont des positions inférieures à l'offset, l'évolution de l'énergie de transition a un comportement habituel correspondant à une diminution. Les calculs de  $E_{12}$  couvrent la plage des longueurs d'onde de l'infrarouge moyen à l'infrarouge lointain ( $\lambda_{12}=9\text{—}16\ \mu\text{m}$ ).

La transition  $E_{23}$  présente en fonction de la largeur de puits trois régions. Dans la 1<sup>ère</sup>, entre  $L_w=10\text{--}20\ \text{Å}$ , l'énergie de transition reste pratiquement constante. En effet, les deux niveaux sont situés au-dessus de  $V_s$ , où le déplacement des niveaux est faible, avec une variation quasi similaire. Puis, quand le 2<sup>ème</sup> niveau se situe au-dessous de  $V_s$ , il descend fortement, contrairement, au niveau 3 qui reste au-dessus, cela entraîne une forte augmentation de  $E_{23}$ , c'est la 2<sup>ème</sup> région. Après, dans la 3<sup>ème</sup> région, au-delà de  $L_w=50\ \text{Å}$ , le troisième niveau tombe à son tour dans le puits et descend fortement avec l'augmentation de  $L_w$  (avec une plus forte décroissance que le deuxième) ce qui explique la diminution de  $E_{23}$ .

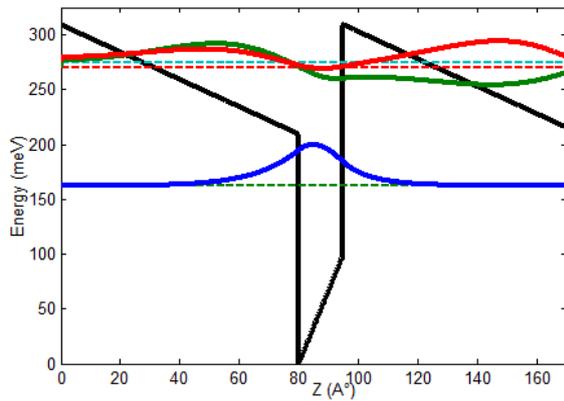
Ainsi ces transitions présentent un maximum. La transition  $E_{13}$  présente le plus élevé,  $E_{13}=194.5\ \text{meV}$  pour  $L_w=50\ \text{Å}$  correspond à  $\lambda_{13}=6.37\ \mu\text{m}$ . Concernant le domaine térahertzique, la transition  $E_{23}$  nous permet cette émission/détection pour les toutes géométries considérées soit,  $\nu_{23}$  détend de 1.1 THz à 20.2 THz. La figure 4.7 présente les fréquences correspond à ces transitions en fonction de la largeur du puits.

La nonparabolicité réduit les énergies de transition due à son effet sur les positions des niveaux confinés, Ainsi, pour des puits larges, elle baisse l'énergie de transition  $E_{13}$  d'environ  $\approx 6\ \text{meV}$  et la transition  $E_{12}$  d'environ  $\approx 3\ \text{meV}$ . Or, pour des puits fins l'effet de la nonparabolicité est généralement faible, l'énergie de transition  $E_{13}$  se baisse d'environ  $\approx 0.5\ \text{meV}$ .

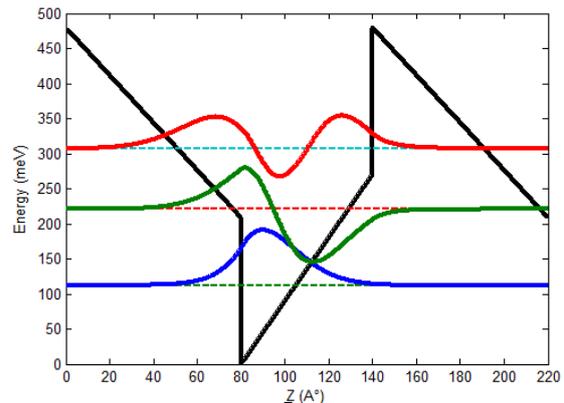


**Figure 4.7:** Fréquences de la transition  $E_{23}$  [17]

Sur les figures 4.8 et 4.9 sont représentés le profil de la bande de conduction, les positions énergétiques et les fonctions enveloppes propres (unité arbitraire), relatifs à les géométries 8/1.5/8 nm et 8/6/8 nm.



**Figure 4.8:** Profil de la BC, les positions des niveaux confinés et les fonctions enveloppes associées pour  $L_w=15 \text{ \AA}$  et  $L_b=80 \text{ \AA}$



**Figure 4.9 :** Profil de la BC, les positions des niveaux confinés et les fonctions enveloppes associées pour  $L_w=60 \text{ \AA}$  et  $L_b=80 \text{ \AA}$

Pour les fonctions enveloppes, elles ne sont pas symétriques, comme il est bien présenté dans les figures 4.8 et 4.9. Car le puits n'est plus symétrique, c'est celles des niveaux confinés dans les domaines énergétiques R2 et R3 (ayant des énergies supérieures à l'offset  $V_s$ ).

### 4.3. Transmission dans le puits quantique ZnO/Mg<sub>x</sub>Zn<sub>1-x</sub>O

Nous considérons une hétérostructure ZnO/MgZnO et nous étudions l'effet tunnel à travers cette structure comme le montre la figure 4.10.

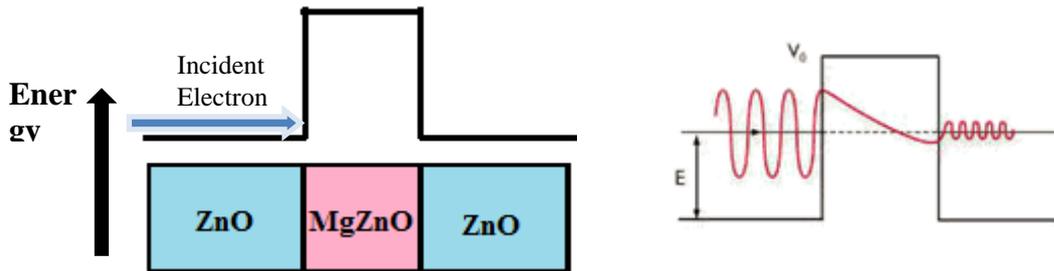


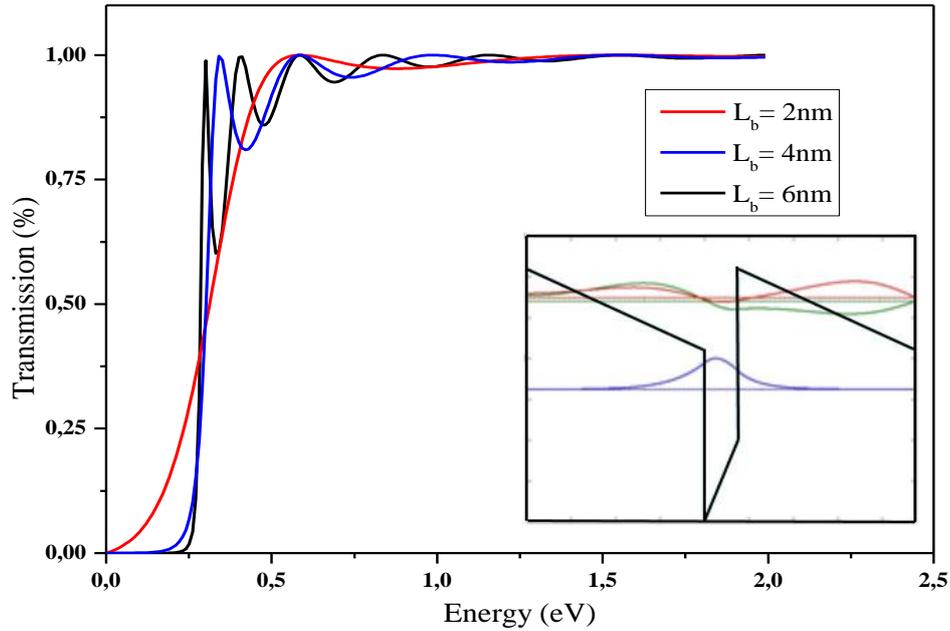
Figure 4.10: Structure de barrière de potentiel

Le coefficient de transmission d'un électron à travers la barrière de potentiel s'écrit [20] :

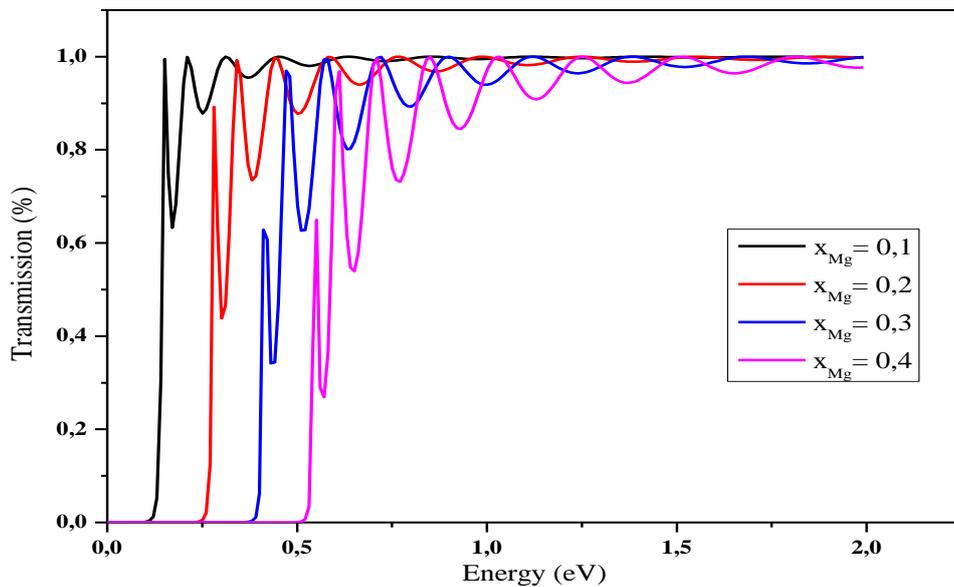
$$T(E) = \frac{1}{1 + \frac{V_0^2}{4E(V_0 - E)} \operatorname{sh}^2\left(\frac{L_b}{\hbar} \sqrt{2m(V_0 - E)}\right)} \quad (4.15)$$

Avec E l'énergie des électrons,  $V_0$  la hauteur de la barrière,  $L_b$  sa largeur et m la masse des électrons.

Différentes variables interviennent dans le calcul du coefficient de transmission : l'épaisseur de la barrière, l'énergie des électrons ou la hauteur de la barrière. Nous avons montré dans les figures 4.11 et 4.12, l'influence de deux paramètres sur le coefficient de transmission : l'épaisseur et la hauteur de la barrière de potentiel.



**Figure 4.11 :** Coefficient de transmission d'une couche simple de MgZnO à 20% de Mg selon l'épaisseur de la couche avec  $V_b = 0.26\text{ eV}$ .

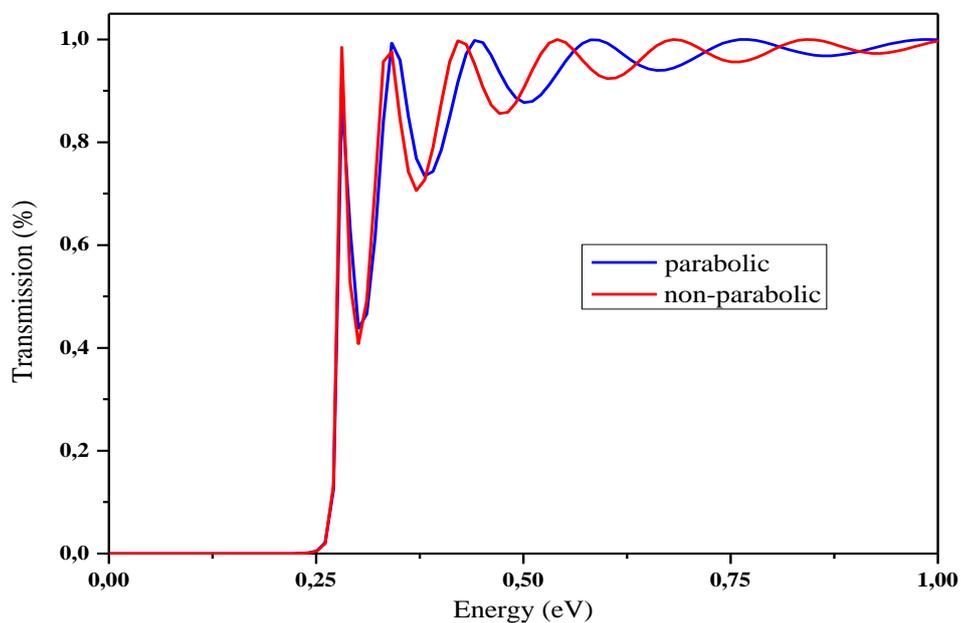


**Figure 4.12 :** Coefficient de transmission d'une simple couche de MgZnO, épaisseur  $L_b = 8\text{ nm}$  selon la fraction  $x$  de Mg.

Généralement, on constate sur la figure 4.11 que, plus la barrière est grande, plus la transmission d'un électron avec une énergie donnée sera plus faible. Lorsque la hauteur de la barrière est de 5 nm, très peu d'électrons peuvent la traverser (coefficient proche de 0 lorsque

l'énergie est inférieure à 0,26 eV). Et quand la hauteur est inférieure à 5 nm, on constate que le coefficient de transmission n'est plus nul pour des énergies inférieures à la hauteur de barrière. La probabilité de franchir la barrière augmente. Au-delà de l'énergie (0,2 eV), correspond à celle de la barrière, on observe sur la barrière la plus épaisse, des oscillations liées à un phénomène de réflexion quantique.

La figure 4.12, indique qu'il y a une diminution du coefficient de transmission lorsque la hauteur de la barrière augmente (la fraction de Mg augmente). Dans ce cas, il faudra fournir plus d'énergie à l'électron pour qu'il puisse traverser la barrière.



**Figure 4.13 :** Coefficient de transmission dans les cas parabolique et non parabolique,  $L_b = 8\text{nm}$  et  $V_b = 0,526\text{ eV}$ .

D'après la figure 4.13, on constate que les deux échantillons présentent une bonne transmission optique autour de 90 %, dans la plupart des cas ; les multicouches minces ont montré des propriétés physiques différentes. La variation de la forme des couches individuelles de MgZnO a une influence significative sur les propriétés optiques et la structure cristalline des alliages de MgZnO. On voit que la transmission dans le cas des bandes paraboliques se fait de manière plus rapide que dans les bandes non paraboliques. Un bon accord est obtenu avec les valeurs existantes de la littérature.

#### 4.4. Absorption optique dans le puits quantique asymétrique ZnO/MgZnO

L'expression de l'absorption optique pour les transitions intersousbandes, comme déjà traité dans le troisième chapitre est donnée par [21,22]:

$$\alpha(\omega) = \frac{4\pi e^2 \epsilon_z^2}{nc\omega c_0 L} \left[ \sum_{i,j=1,\dots,3} (n_i - n_j) \mu_{ij}^2 \omega_{ij}^2 \frac{\hbar \Gamma_{ij}}{(\epsilon_j - \epsilon_i - \hbar\omega)^2 + (\hbar \Gamma_{ij})^2} \right] \quad (4.16)$$

Où  $\mu_{if} = \langle \chi_i | \mathbf{z} | \chi_f \rangle$  est l'élément de matrice dipolaire électrique intersousbandes et  $\epsilon_z$  est la composante, sur l'axe de croissance, du vecteur polarisation du rayonnement électromagnétique. Dans cette expression on a remplacé la distribution de Dirac, par une Lorentzienne (de largeur à mi-hauteur  $2\Gamma_{ij}$ ) pour tenir compte du pic d'élargissement de la transition.  $n_i$  est la densité d'électrons libres par unité de surface, de la  $i^{\text{ème}}$  sous-bande. Ces quantités, sur lesquelles l'absorption dépend fortement, sont calculés après la détermination de la position du niveau de Fermi ( $E_F$ ), à température donnée et pour une densité électronique totale donnée,  $n_s$ .

##### 4.4.1. Effet de la température sur la position du niveau de Fermi

Nous commençons donc par étudier le niveau de Fermi en fonction de la température. Pour cela nous avons fixé la densité totale des électrons libres à une valeur typique de l'ordre de  $n_s = 5.10^{11} \text{ cm}^{-2}$  [23]. Dans le cas de notre structure assimilée à un système quasi-2D, la densité des électrons est donnée par:

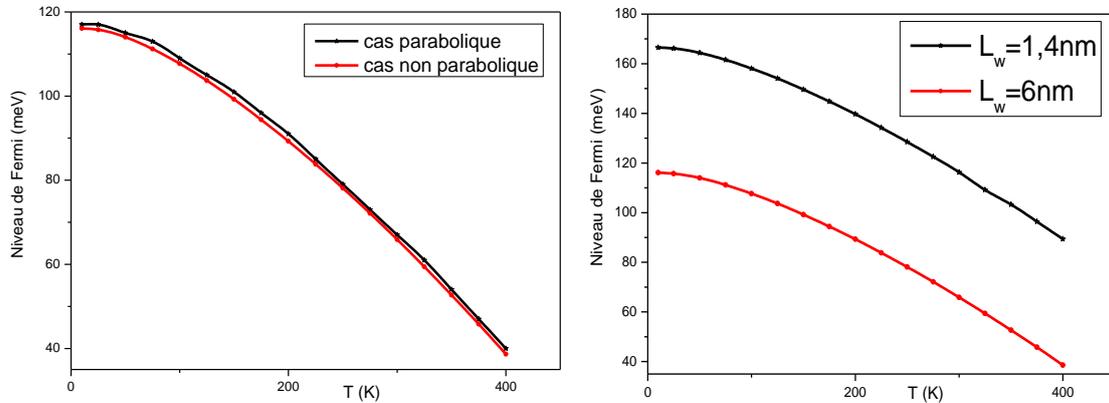
$$n_s = \int_0^{+\infty} N_{2D}(E) f(E) dE \quad (4.17)$$

Où  $N_{2D}(E)$  est la densité d'états à 2 dimensions et  $f(E)$  est la distribution de Fermi-Dirac. Ainsi, la densité des électrons peut se mettre sous la forme [24,20] :

$$n_s = \frac{m^*}{\pi \hbar^2} \left[ \int_{\epsilon_1}^{+\infty} \frac{dE}{1 + \exp\left(\frac{E - E_f}{k_B T}\right)} + \int_{\epsilon_2}^{+\infty} \frac{dE}{1 + \exp\left(\frac{E - E_f}{k_B T}\right)} + \int_{\epsilon_3}^{+\infty} \frac{dE}{1 + \exp\left(\frac{E - E_f}{k_B T}\right)} \right] \quad (4.18)$$

Pour une valeur fixe de  $n_s$  et une température donnée, nous déterminons la valeur  $E_F$  du niveau de Fermi qui permet la résolution numérique de cette équation.

Dans la figure 4.14, on présente l'évolution de la position du niveau de Fermi de la structure ZnO/MgZnO, en fonction de la température, par rapport au minimum de la bande de conduction. Ces calculs sont effectués dans les deux cas, parabolique et non parabolique.

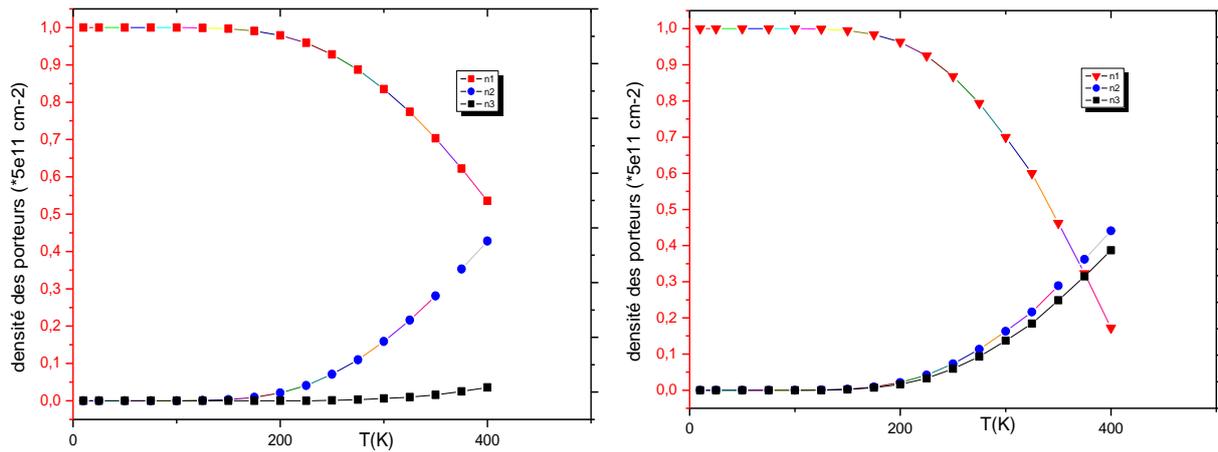


**Figure 4.14 :** Evolution du niveau de Fermi en fonction de la température. A gauche : Effet de la non parabolicité de bande. A droite : Effet de la largeur de puits. Pour une barrière  $L_b = 6\text{nm}$

La figure 4.14 montre, en accord avec la réf [24], que la position du niveau de Fermi soit dans le cas parabolique ou dans le cas non parabolique, décroît lorsque la température augmente. Cette diminution est presque de même variation pour les deux largeurs de puits. Le niveau de Fermi est situé aux basses températures entre le niveau fondamental et le premier niveau excité et se déplace vers les basses énergies dans la bande de conduction quand la température augmente. Nous notons aussi qu'il n'y a pas de différence notable à relever en comparant les deux cas, avec et sans effet de la non parabolicité.

#### 4.4.2. Densités d'électrons

Après avoir déterminé la position du niveau de Fermi en fonction de la température, nous avons calculé la densité des électrons libres ( $n_i$ ) pour chaque sousbande pour la plage de températures considérées. Les résultats sont présentés sur la figure 4.15.



**Figure 4.15 :** Evolution des densités surfaciques des électrons  $n_i$  en fonction de la température pour les deux géométries de puits. (A gauche) : 6/6/6nm. (A droite) : 6/1.5/6nm

Nous pouvons constater qu'aux basses températures tous les niveaux excités sont vides, seul le niveau fondamental est peuplé. Lorsque la température augmente ( $T > 200K$ ), et pour la largeur de puits  $L_w = 6nm$ , le premier niveau excité commence à être peuplé par les électrons provenant du niveau fondamental qui voit sa densité électronique diminuer. Nous notons que les autres niveaux excités restent dépeuplés et ne commencent à être remplis que pour des températures assez élevées. Mais pour  $L_w = 1.5nm$  les deux niveaux excités commencent à être peuplés par les électrons vue ces positions voisins.

#### 4.4.3. Force d'oscillateur

Concernant les forces d'oscillation, les calculs dans les deux cas parabolique et non parabolique, et pour les deux géométries, montrent :

Force $f_{ij}$ d'oscillateur	cas parabolique	cas non parabolique
$f_{12}$	0.9322	0.9055
$f_{13}$ (presque interdite)	0.0442	0.0429
$f_{23}$	1.7356	1.6871

**Tableau 4.4:** Forces d'oscillations des différentes transitions pour  $L_w = 6nm$

Force $f_{ij}$ d'oscillateur	cas parabolique	cas non parabolique
$f_{12}$	0.2872	0.2864

$f_{13}$ (presque interdite)	0.0180	0.0180
$f_{23}$	0.6834	0.6686

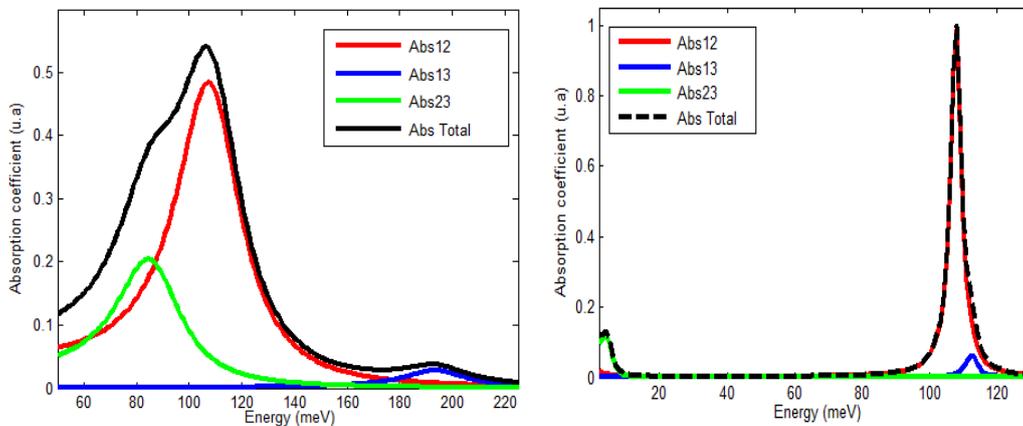
**Tableau 4.5:** Forces d'oscillations des différentes transitions pour  $L_w = 1.5\text{nm}$

Nous notons que la valeur de la force d'oscillateur  $f_{12}$  est proche de 1, c'est donc la transition la plus probable. La force d'oscillateur  $f_{13}$  est presque nulle, ceci est expliqué par le fait que les transitions entre les états électroniques de même parité sont interdites par les règles de sélections dans les puits carrés. Et comme les puits étudiés ici sont déformé par rapport au puits carré ; le couplage  $\langle \chi_i | z | \chi_f \rangle$  est très faible et proche de zéro pour ces transitions. La transition  $E_{23}$  (entre les premier et deuxième niveaux excités) a une force d'oscillateur supérieure à 1. La valeur de  $f_{ij}$  peut être supérieure à 1 si  $i$  est strictement supérieure à 1 [25]. Seules les transitions optiques correspondant aux états  $|i\rangle \rightarrow |j\rangle$  ( $j = 2, 3$  ou 4) auront des forces d'oscillateur inférieures à 1.

Les différentes valeurs de ces forces traduisent le résultat de recouvrement des fonctions d'onde correspondantes. Nous constatons également que le non parabolicité a pour effet de diminuer les valeurs des forces d'oscillateurs pour toutes les transitions

#### 4.4.4. Coefficient d'absorption

Après avoir calculé les états électroniques, les éléments des moments dipolaires et les densités surfaciques d'électrons  $n_i(T)$ , nous avons calculé le coefficient d'absorption intersousbandes en fonction de l'énergie. Les résultats sont reportés sur la figure 4.16 :



**Figure 4.16 :** Variation du coefficient d'absorption intersousbande en fonction de l'énergie (u.a) pour les deux géométries de puits. A gauche : 6/6/6nm. A droite : 6/1.5/6nm

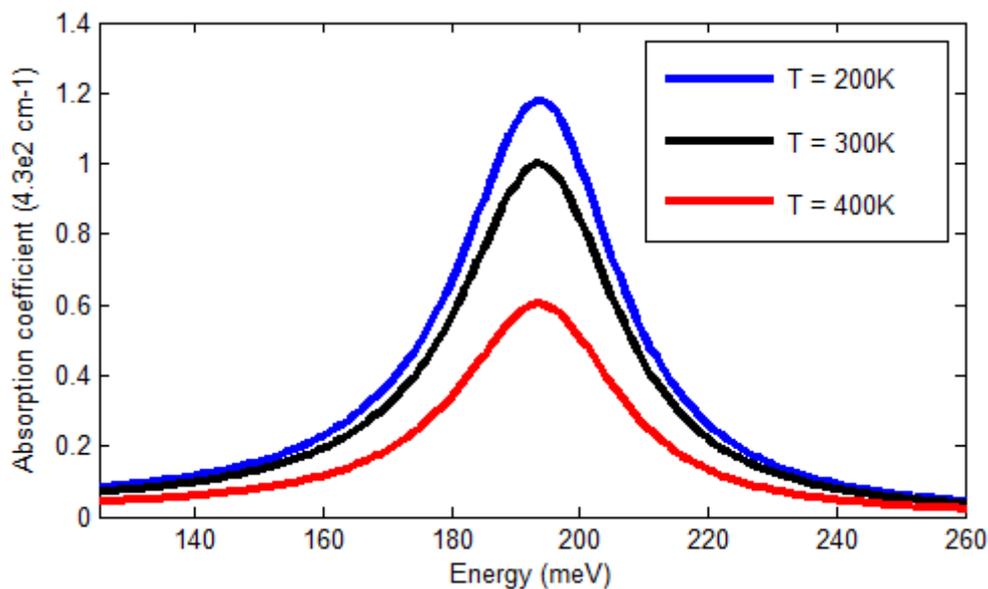
Nous remarquons le faible coefficient d'absorption de la de la transition  $E_{13}$  due d'une part, à la faible valeur de sa force d'oscillateur, et d'autre part, le niveau  $E_3$  reste vide pour une gamme de températures allant jusqu'à 400K. Elle est pratiquement non observable.

Dans l'expression du coefficient d'absorption intersousbande calculé, le paramètre d'élargissement  $\Gamma_{12}$  a été estimé sur la base des valeurs expérimentales données dans la littérature [21].

A travers les spectres de la figure 4.16, nous constatons que pour  $L_w = 1.5\text{nm}$ , la seule transition de coefficient d'absorption important est la transition  $E_{12}$ . C'est celle qui est pratiquement observable. Contrairement au cas où  $L_w = 6\text{ nm}$ , la transition  $E_{23}$  est aussi importante et encore proche énergétiquement de  $E_{12}$ , qui renforce l'absorption total de ces fréquences correspondante (12 ---- 23 THz).

#### 4.4.5. Effet de la température sur le coefficient d'absorption

Sur la figure 4.17 nous avons reporté le spectre d'absorption théorique de la transition  $E_{13}$  pour les trois températures 200 K, 300 K et 400 K.



**Figure 4.17 :** Coefficient d'absorption intersousbande de la transition  $E_{13}$  en fonction de l'énergie. Pour  $L_w = 6\text{ nm}$ , pour une densité  $n_s = 5.10^{11} \text{ cm}^{-2}$

D'après la figure 1.17, pour la largeur de puits  $L_w = 6\text{nm}$ , le niveau  $E_3$  reste vide pour la gamme étudié de températures allant jusqu'à 400K. Alors la population du niveau fondamental  $E_1$  est la seule qui va influencer sur le comportement de cette transition vis-à-vis de la température. Ainsi, lorsqu'on augmente la température, le niveau  $E_1$  commence à être dépeuplé par les électrons en faveur de  $E_2$  qui voit sa densité électronique augmente, et donc le coefficient d'absorption  $\alpha_{13}$  va diminuer. Les autres coefficients  $\alpha_{12}$  et  $\alpha_{23}$  suivent des comportements différents selon la variation de la population des niveaux mise en jeu.

#### **4.5. Comparaison entre les deux puits non contraints ZnO/MgZnO et GaN/AlInN**

##### **4.5.1. Propriétés physiques des deux puits**

- **Structure cristalline**

L'oxyde de zinc (ZnO) et le nitrure de gallium (GaN) sont deux semiconducteur à grand gap étudiés pour la réalisation de dispositifs optoélectroniques.

La plupart des semiconducteur III-V ou II-VI comme GaN ou ZnO peuvent cristalliser sous deux phases : l'une de structure wurtzite et l'autre de structure blende de zinc. Dans les deux cas l'atome du groupe III (ou II pour ZnO) est entouré par quatre atomes d'azote (ou d'oxygène). Une telle coordinence est caractéristique d'une hybridation  $sp^3$  et donc d'une liaison à fort caractère covalent. Cependant, le caractère ionique de la liaison ne peut être négligé, et notamment dans le cas de ZnO, du fait de la forte électronégativité de l'azote et de l'oxygène. Ces deux matériaux sont ainsi à la frontière entre les semiconducteurs ioniques et covalents.

Dans les conditions normales de température et de pression, la phase la plus stable est la structure wurtzite. Elle est constituée de deux sous réseaux hexagonaux compacts interpénétrés et décalés. Cette structure appartient au groupe d'espace  $C_{6v}^4$  en notation de Schönflies et confère au matériau des propriétés d'anisotropie. Les paramètres de maille mesurés expérimentalement pour la structure wurtzite sont  $a = 3.1892 \text{ \AA}$  et  $c = 5.185 \text{ \AA}$  pour GaN [26], et pour ZnO,  $a = 3.2496 \text{ \AA}$  et  $c = 5.2042 \text{ \AA}$  [27].

Tous les puits étudiés dans la suite de ces travaux sont de symétrie hexagonale. Ces derniers pourront alors être de polarité Ga (ou Zn) ou de polarité N (ou O) car la maille wurtzite ne présente pas de symétrie d'inversion.

- **Techniques de croissance de GaN et ZnO**

Afin d'élaborer des échantillons d'oxyde de zinc et de nitrure de gallium différentes techniques d'épitaxie sont employées. L'épitaxie consiste en un dépôt d'un cristal sur un substrat. Il existe un grand nombre de techniques épitaxiales, qui peuvent être classées en deux catégories :

— Les techniques pour lesquelles le dépôt se fait par voie physique. Les plus couramment utilisées sont l'épitaxie sous jets moléculaires (Molecular Beam Epitaxy) et le dépôt en phase vapeur (Physical Vapor Deposition) ; toutes les deux sont basées sur la condensation d'un ou plusieurs jets moléculaires sur un substrat.

— Les techniques pour lesquelles le dépôt se fait par voie chimique. Parmi les plus employées pour la croissance de ZnO et de GaN, on peut citer les techniques par la méthode aux hydrures (Hydride Vapor Phase Epitaxy), par la méthode aux organométalliques (Metal Organic Vapor Phase Epitaxy) ou bien encore la technique de synthèse hydrothermale (pour ZnO) où la croissance est réalisée à partir d'un germe de ZnO plongé dans des solvants minéraux en solution aqueuse (NaOH ou KOH, etc) dans lesquels on introduit de la poudre de ZnO dans des conditions de température et de pression importantes (300 à 400 °C et 40 à 150 MPa) [28].

Pour la réalisation d'échantillons massifs de bonne qualité on préférera des techniques de croissances rapides telles la technique HVPE ou bien encore des techniques de synthèse hydrothermale. Bien qu'il soit possible de réaliser des couches homoépitaxiées de ZnO ou de GaN, généralement des substrats comme le saphir ( $\text{Al}_2\text{O}_3$ ), ou le silicium sont préférés notamment pour des raisons de coût. Les différentes techniques de croissance détaillées ici permettent également de doper les matériaux au cours de la croissance et également de contrôler la polarité des échantillons.

- **Polarisation spontanée et piézoélectrique dans GaN et ZnO**

Il existe, dans les structures de type wurtzite, une polarisation macroscopique non nulle. Elle est appelée polarisation spontanée : résultat de la non superposition des barycentres de charges positives et négatives. En effet, l'électronégativité de l'azote (l'oxygène) est plus importante que celle du gallium (Zinc), la répartition du nuage électronique le long d'une liaison Ga-N (Zn-O) est donc dirigée vers l'atome la plus électronégative. On peut considérer que l'atome d'azote (d'oxygène) présente une charge  $-Q$  alors que l'atome gallium (Zinc) une charge  $+Q$ . Chaque liaison Ga-N (Zn-O) présente donc un moment dipolaire.

Lors de la croissance une contrainte résiduelle peut être induite dans la couche épitaxiale, notamment à cause d'un désaccord de maille avec le substrat, ou bien dû désaccord entre les coefficients de dilatation thermique. Cette contrainte peut alors avoir pour conséquence une modification de la structure de bandes du matériau et donc de la valeur de la bande interdite. Ainsi une polarisation dite piézoélectrique qui dépend linéairement de la déformation du paramètre de maille  $a$  se développe et s'additionne vectoriellement au vecteur polarisation spontané. La polarisation résultante crée un champ interne au sein du puits et par analogie dans la barrière ce qui modifie le profil de potentiel de la bande de conduction.

- **Structure de bandes de GaN et ZnO**

Le nitrure de gallium comme l'oxyde de zinc sont deux semi-conducteurs à gap direct : le minimum de la bande de conduction et le maximum de celle de valence sont situés au centre de la zone de Brillouin. La différence d'énergie entre ces deux bandes correspond à l'énergie de bande interdite. A température ambiante, la valeur de la bande interdite de GaN non contraint [29] est de 3,39 eV et de 3,37 eV pour ZnO [30].

#### **4.5.2. Emission dans l'IR**

Grace à la grande discontinuité de potentiel en bande de conduction, présentées dans les deux hétérostructures étudiées, ils sont les meilleurs candidats pour la réalisation des dispositifs optoélectroniques à base des transitions intersousbandes (dispositifs unipolaires) fonctionnant aux longueurs d'onde de télécommunications par fibre optique, pour lesquelles les longueurs d'onde comprises dans l'intervalle suivant :  $1,3 \mu\text{m} < \lambda < 1,55 \mu\text{m}$  [31].

Le domaine IR lointain avec des longueurs d'onde dépassant  $30 \mu\text{m}$  où peu de sources compactes existent [32], ce domaine dont les énergies sont intermédiaires entre la gamme radar et infrarouge, constitue un gap TéraHertz avec peu de réalisation malgré un potentiel

d'utilisation assez vaste. En effet, les applications dans le domaine THz dont la longueur d'onde comprise entre 30 et 300  $\mu\text{m}$  sont nombreuses et s'étendent du domaine de l'électronique à celui militaire, en passant par les industries pharmaceutiques et agroalimentaires [33]. Des substances chimiques telles que les médicaments, les explosifs ou encore les drogues ont une signature spécifique dans le domaine THz. D'un autre côté, les matériaux comme le plastique, le béton et les cartons d'emballage sont transparents aux rayonnements THz, ce qui laisse envisager des applications pour des scanners performants.

Nos résultats montrent que pour les puits quantiques à base de GaN, il faut considérer des géométries engendrant 4 niveaux confinés pour atteindre des longueurs d'onde pour des applications en télécommunications. En effet, la transition  $E_{14}$  nous permet d'avoir des longueurs d'ondes  $\lambda=1.44\text{--}1.54 \mu\text{m}$  pour des largeurs du puits  $L_w = 20\text{--}45 \text{ \AA}$  et de la barrière  $L_b = 60 \text{ \AA}$ . Et la transition  $E_{34}$  nous permet d'avoir une transitions de fréquence  $\nu=9.86 \text{ THz}$  correspondant aux rayonnements térahertziques pour la géométrie critique 6/2.5/6 nm. Cette géométrie satisfèrait ainsi aux deux domaines souhaités.

Pour les puits quantiques à base de ZnO, La transition  $E_{12}$  couvrent la plage des longueurs d'onde de l'infrarouge moyen à l'infrarouge lointaine ( $\lambda_{12} = 9\text{--}16 \mu\text{m}$ ). La transition  $E_{23}$  donne des fréquences térahertziques  $\nu_{23} = 1.1\text{--}20 \text{ THz}$ .

## Conclusion

Dans ce chapitre nous avons calculé d'une part, le profil de bande de conduction et effectué des calculs des énergies de transition dans un puits quantique ZnO /MgZnO avec 20% du magnésium et pour des géométries 8/1--8/8 nm. Trois niveaux d'énergie tout au plus pourraient être confinés sous une certaine largeur de puits conduisant à trois transitions permises car les règles de sélections s'en trouvent changées (puits asymétrique). Nous avons considéré comment les paramètres matériels tels que la nonparabolicité affectent ces énergies et ces longueurs d'onde correspondante. Et étudiant d'autre part, l'évolution de la position du niveau de Fermi en fonction de la température pour déterminer les densités de porteurs dans chaque niveau d'autre part afin de calculer le coefficient d'absorption intersousbande. Les calculs du coefficient d'absorption ont été effectués pour deux géométries. L'une, correspondant à  $L_w = 1.5 \text{ nm}$  et où le seul coefficient pratiquement observable est celui de  $E_{12}$ . L'autre, où les deux transitions distinctes  $E_{12}$  et  $E_{23}$  importent.

La transition  $E_{12}$  couvrent la plage des longueurs d'onde de l'infrarouge moyen à l'infrarouge lointaine ( $\lambda_{12}=9\text{---}16\ \mu\text{m}$ ). Nos résultats montrent que les énergies de transition  $E_{23}$  des structures de puits quantiques ZnO /MgZnO, qui ont des paramètres de maille très proche, d'avantage d'avoir une structure non contrainte, ont donné des fréquences térahertziques  $\nu_{23} = 1.1\text{---}20\ \text{THz}$  utilisés dans la détections des explosifs et pour la sécurité dans les aéroports. Cela sert à encourager la conception et la croissance épitaxiale des structures photoniques intersousbandes. Puis, nous avons effectué une étude comparative entre deux puits non contraints à base de ZnO/MgZnO et GaN/AlInN.

## Références

- [1] I. Vurgaftman, J. R. Meyer, Band parameters for nitrogen-containing semiconductors, *J. Appl. Phys.* 94, 3675 (2003)
- [2] O. Ambacher, Growth and applications of Group III-nitrides, *J. Appl. Phys.* 31, 20 (1998)
- [3] B. Laumer, M. Eickhoff, F. Schuster, M. Stutzmann, A. Bergmaier, S. Eschbaumer, Accurate determination of optical bandgap and lattice parameters of Zn<sub>1-x</sub>Mg<sub>x</sub>O epitaxial films (0 ≤ x ≤ 0.3) grown by plasma-assisted molecular beam epitaxy on a-plane sapphire, *J. Appl. Phys.* 113, 233512 (2013)
- [4] L. Vegard, Die Konstitution der Mischkristalle und die Raumbfüllung der Atome, *Z. Für Phys.* 5, 1921 (1921)
- [5] E. S. Hellman, The polarity of GaN : a critical review, *MRS internet J. Nitride Semiconductors Res.* 3, e11 (1998)
- [6] A. Kobayashi, O. F. Sankey, S. M. Volz, J. D. Dow, Semiempirical tight-binding band structures of wurtzite semiconductors : AlN, CdS, CdSe, ZnS and ZnO, *Phys. Rev. B* 28, 935 (1983)
- [7] C. Boemare, T. Monteiro, M.J. Soares, J.G. Guilherme, E. Alves, Photoluminescence studies in ZnO samples, *Physica B* 308-310, 985 (2001)
- [8] S. Ozaki, S. Kalusniak, O. Benson, S. Sadofev, Photoreflectance spectroscopy of ZnO for ordinary and extraordinary rays, *Jpn. J. Appl. Phys.* 42, 5465 (2003)
- [9] L. Wang, N. C. Giles, Temperature dependence of the free-exciton transition energy in zinc oxide by photoluminescence excitation spectroscopy, *J. Appl. Phys.* 94, 973 (2003)
- [10] H. Yin, Junli Chen, Yin Wang, Jian Wang, Hong Guo, Composition dependent band offsets of ZnO and its ternary alloys, *Scientific Reports* 7, 41567 (2016)
- [11] J-M Chauveau, C. Morhain, B. Vinter, C. Deparis, X. Tang, B. Lo, M. Teisserire-Doninelli, P. Vennéguès, S. Laüget, G. Neu. Centre de recherche sur l'Hétéro-Epitaxie et ses Application, Centre National de la Recherche Scientifique (CRHEA/CNRS).
- [12] G. Bastard, « Wave Mechanics Applied to Semiconductor Heterostructures » les éditions de Physique, Paris, (1988).
- [13] M. Leroux, N. Grandjean, M. Laügt, J. Massies, B. Gil, P. Lefebvre, P. Bigenwald, *Phys. Rev. B* 58, R13371 (1998).
- [14] V. Fiorentini, F. Bernardini, F. Della-Sala, A. Di-Carlo, P. Lugli, Effects of macroscopic polarization in III-V nitride multiple quantum wells, *Phys. Rev. B* 60, 8849-58 (1999).
- [15] N. Grandjean, B. Damilano, S. Dalmaso, M. Leroux, M. Laügt, J. Massies, *J. Appl. Phys.* 86, 3714 (1999).
- [16] T. Bretagnon, P. Lefebvre, T. Guillet, T. Taliércio, B. Gil, and C. Morhain. Barrier

- composition dependence of the internal electric field in ZnO/ZnMgO quantum wells. *Appl. Phys. Lett.* 90, 201912 (2007).
- [17] L. Moudou, Y. Chrafi, K Rahmani, I. Zorkani, *J. Phys. Conf. Ser.* 984, 012002 (2018)
- [18] D.F. Nelson, R.C. Miller, D.A. Kleinman, *Phys. Rev. B* 35 (1987) 7770.
- [19] Ü. Özgür, Ya. I. Alivov, C. Liu, A. Teke, M. A. Reshchikov et al. *J. Appl. Phys.* 98, 041301 (2005);
- [20] A. Rajira et al. / *Superlattices and Microstructures* 84 (2015) 192–197
- [21] G. Bastard, *Wave Mechanics Applied to Semiconductor Heterostructures*, EDP Sciences, Paris, 1988.
- [22] E. Rosencher, B. Vinter, *Optoélectronique*, Dunod, Paris, 2002.
- [23] A. Almagoussi, A. Abounadi, H. Akabli, K. Zekentes, M. Androulaki, *Eur. Phys. J. Appl. Phys.* 45 (2009) 20301.
- [24] H. Akabli, A. Rajira, A. Almagoussi, A. Abounadi, *Eur. Phys. J. Appl. Phys.* 52 (2010) 20302.
- [25] [http://www.nextnano.de/nextnano3/tutorial/1Dtutorial\\_IntrabandTransitions.htm](http://www.nextnano.de/nextnano3/tutorial/1Dtutorial_IntrabandTransitions.htm)
- [26] Berkowicz, E., Gershoni, D., Bahir, G., Lakin, E., Shilo, D., Zolotoyabko, E., Abare, A. C., Denbaars, S. P. & Coldren, L. A. Measured and calculated radiative lifetime and optical absorption of In<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>N/GaN quantum structures. *Phys. Rev. B* 61, 10994 (2000).
- [27] Karzel, H., Potzel, W., Köfferlein, M., Schiessl, W., Steiner, M., Hiller, U., Kalvius, G. M., Mitchell, D. W., Das, T. P., Blaha, P., Schwarz, K. & Pasternak, M. P. Lattice dynamics and hyperfine interactions in ZnO and ZnSe at high external pressures. *Phys. Rev. B* 53, 11425 (1996).
- [28] Brochen, S. Propriétés électriques du ZnO monocristallin. Ph.D. thesis, CEA L'eti et Institut Néel (2012).
- [29] Suzuki, M., Uenoyama, T. & Yanase, A. First-principles calculations of effective-mass parameters of AlN and GaN. *Phys. Rev. B* 52, 8132 (1995).
- [30] Chen, Y., Bagnall, D. M., Jun Koh, H., Tae Park, K., Hiraga, K., Zhu, Z. & Yao, T. Plasma assisted molecular beam epitaxy of ZnO on c plane sapphire : Growth and characterization. *J. Appl. Phys.* 84, 3912 (1998).
- [31] I. Akasaki, H. Amano, Y. Koide, K. Hiramatsu, N. Sawak, *J. Cryst. Growth*, 98, 209 (1989).
- [32] C. Pflügl, W. Schrenk, S. Anders, G. Strasser, C. Becken, C. Sirtori, Y. Bonetti, A. Muller, *Appl. Phys. Lett.* 83, 4688 (2003).
- [33] B.S. Williams, *Nature Photonics*, 1, 517(2007).

Conclusion

générale

## Conclusion générale

Dans ce travail, nous avons mené des études théoriques sur les transitions intersousbandes dans des hétérostructures GaN/AlInN et ZnO/MgZnO. Le formalisme de la fonction enveloppe est utilisé pour le calcul des états électroniques dans nos systèmes aussi bien dans l'approximation des bandes paraboliques et non paraboliques. Nous avons utilisé la méthode numérique des différences finies.

Nous avons présenté dans le premier chapitre un aperçu général sur les semi-conducteurs nitrures d'éléments III et leurs hétérostructures. Ces notions s'appuient sur une connaissance approfondie de la structure de bande des matériaux, la structure cristalline et les substrats pour l'épitaxie. Puis on a exposé les méthodes de croissance les plus employées actuellement pour ces matériaux ainsi que les applications à base de ces nitrures.

Dans le deuxième chapitre, nous avons exposé d'une part, la théorie fondamentale qui nous permet de calculer les états électroniques dans les puits quantiques et les fonctions d'onde associées, en se basant sur l'approximation de la fonction enveloppe, pour montrer les paramètres qui influencent sur le nombre des niveaux d'énergies confinés. Et d'autre part, la méthode de résolution numérique. Puis, on a présenté les résultats de calculs concernant l'évolution des transitions intersousbandes (au sein de la bande de conduction BC) en fonction des largeurs de la barrière et du puits.

Dans le troisième chapitre, nous avons présenté et calculé le coefficient d'absorption optique des deux puits (6/2.5/6nm et 6/3.5/6nm) à base de GaN/AlInN non contrainte. Et nous avons étudié l'effet de la température sur cette grandeur physique.

Dans le quatrième chapitre, nous nous sommes intéressés aux transitions intersousbandes (au sein de la bande de conduction BC) qui donnent des courtes longueurs d'ondes dans l'I.R à base des transitions intersousbandes utilisant les matériaux ZnO/MgZnO non contrainte. Ainsi que le coefficient d'absorption, l'étude théorique concernant les deux puits (6/1.5/6nm et 6/6/6nm).

Nous avons étudié ces deux structures pour différents facteurs dont le but était d'accorder les transitions intersousbandes d'une part pour les ondes de télécommunication par fibre optique (1.3 – 1.5  $\mu\text{m}$ ), et d'autre part dans la gamme THz. Nous avons montré que nous pouvons réaliser ces transitions intersousbandes dans les deux puits quantiques en jouant sur l'épaisseur respective des puits et des barrières. L'effet de la température sur le coefficient d'absorption était étudié. Le jeu de paramètres optimal pour le puits GaN/AlInN, pour couvrir la gamme spectrale 1.3 – 1.5  $\mu\text{m}$  est obtenu pour des largeurs du puits  $L_w=20\text{--}45 \text{ \AA}$  et de la barrière  $L_b = 60 \text{ \AA}$  ou quatre niveaux sont confinés. C'est la transition  $E_{14}$  nous permet d'avoir ces longueurs d'ondes. Pour le domaine THz c'est la transition  $E_{34}$  qui nous permet d'avoir une transition de fréquence  $\nu=9.86 \text{ THz}$  pour la géométrie 6/2.5/6 nm. Cette géométrie 6/2.5/6 nm satisferait ainsi aux deux domaines souhaités. Concernant le puits quantique ZnO/MgZnO, la transition  $E_{23}$  donne des fréquences térahertziques  $\nu_{23} = 1.1\text{--}20 \text{ THz}$ .

Un autre phénomène singulier que nous avons constaté d'après nos résultats dans le puits quantique GaN/AlInN, est l'existence également d'une géométrie pour laquelle on a coïncidence entre les transitions  $E_{12}$  et  $E_{23}$ , correspond à  $L_w = 2,5 \text{ nm}$ . Nous pensons que des dispositifs basés sur la dernière structure spécifique pourraient être conçus pour une meilleure détection des signaux ayant de faibles intensités, puisque l'absorption de la fréquence associée s'effectue par les deux transitions à la fois. C'est le principe des détecteurs quadratiques.

Les perspectives de ce travail sont nombreuses. Nous pouvons par exemple citer la poursuite de l'étude visant à réaliser des détecteurs moyens infrarouges. C'est aussi le développement de lasers ou détecteurs à cascade quantique THz. En ce qui concerne les lasers THz, plusieurs étapes restent encore à franchir. Il faut d'abord maîtriser le transport tunnel dans les puits quantiques de nitrides. Il est clair que les matériaux polaires sont à privilégier mais qu'ils pourraient à terme être concurrencés par les nitrides semi-polaires ou cubiques en fonction des progrès accomplis dans la croissance de couches de haute qualité structurale.



## Improvement of intersubband absorption in asymmetric quantum wells based on GaN/AlInN

Lhoucine Moudou<sup>a</sup>, Mohamed AL-Hattab<sup>a</sup>, Omar Bajjou<sup>b</sup>, Mustafa Boulghallat<sup>c</sup>, Mohammed Khenfouch<sup>d,e,f</sup>, Khalid Rahmani<sup>a,\*</sup>

<sup>a</sup> LRPSI, Polydisciplinary Faculty- Beni Mellal, Sultan Moulay Slimane University, BP 592, 23000, Morocco

<sup>b</sup> Material Physics Laboratory, Faculty of Sciences and Technology, Sultan Moulay Slimane University, BP 523, 23000, Beni Mellal, Morocco

<sup>c</sup> LDD, Faculty of Sciences and Technology, Sultan Moulay Slimane University, BP 523, 23000, Beni Mellal, Morocco

<sup>d</sup> Faculty of Applied Sciences, Ibn Zohr University, Ait-Melloul, Morocco

<sup>e</sup> EPTHE, Department of Physics, Faculty of Sciences, Ibn Zohr University, Agadir, Morocco

<sup>f</sup> UNESCO UNISA Africa Chair in Nanosciences & Nanotechnology (U2ACN2), College of Graduate Studies, University of South Africa (UNISA), Pretoria, South Africa

### ARTICLE INFO

#### Keywords:

Quantum well  
Confinement  
Non parabolicity  
Oscillation force  
Absorption improvement

### ABSTRACT

In the present work, we have considered an unconstrained asymmetric quantum wells based on GaN/AlInN with 17.7% of Indium in the barrier material. Three energy levels could be confined thus giving authorized transitions. Our calculations were made in parabolic and non-parabolic cases. In the case of a small well width  $L_w$ , the transition  $E_{12}$  is located above  $E_{23}$  and vice versa for large well width. We clearly record an intersection between these two transitions ( $E_{12} = E_{23}$ ) for  $L_w$  close to 2.5 nm. This enhances the absorption of such a photon with appropriate frequency. We have studied the temperature effect on the Fermi level, and the population of load carriers in each level for this interesting structure. As well as the intersubband absorption and the oscillation force of each transitions. Such structures can be used in two photons absorption devices.

### 1. Introduction

Quantum well heterostructures are the building blocks of most optoelectronic devices. The main interest of this structure type is the confinement of carriers in the quantum well following the direction of growth, which gives a discretization of the energies levels that accessible to carriers. The bursting between these levels will determine the energy of the various transitions (interband and intersubband). The energy and the number of confined levels depend on various parameters defining the structure, namely: The thickness of the well, the thickness of the barrier, the gap energy, the doping and the offset: the energy shift between the different bands of the well and the barrier [1,2].

Under certain conditions, the confinement of electrons and holes in the same region of space results in very high quantum and optical efficiencies. The resulting devices (Led's, LD, QWIPs [3,4], QCL [5,6]) are used in various fields of applications (Medicine, Telecoms, security, military, astronomy ...). In this work we are interested in medium infrared and terahertz radiation sources [2,7,8]. However, they are often weak emitters. Innovative concepts are then needed to detect the resulting weak signals. Good sensitivity has been demonstrated in a

two-photon quadratic detector showing optical non-linearity for radiation with power as low as  $0.1 \text{ W/cm}^2$  [9]. These quadratic detectors are mainly based on three-level quantum well structures and require equal energy transitions.

Since the 1970s, element III-nitride materials: GaN, AlN, InN and their alloys have been presented as interesting semiconductors for the development of optoelectronic devices in a very wide range of wavelengths. Research into these materials was initiated by observing in particular some of their characteristics: their wide direct band gap, their high thermal conductivity, the fairly high internal field, their great mechanical stability, their resistance to radiation, etc. Their band gap is at the origin of one of the most interesting properties.

Many researches have shown that AlInN/GaN heterojunctions will reveal the potential of such a system for the fabrication of high electron mobility transistors and also have shown that InAlN/GaN heterojunction can be an interesting alternative to high power and high temperature AlGaIn/GaN devices [10,11].

The InAlN/GaN material is still promoted for photonics and electronics for its interesting physical properties.

In this work, we explore the GaN/AlInN heterostructure having three

\* Corresponding author.

E-mail address: [kh.rahmani@hotmail.fr](mailto:kh.rahmani@hotmail.fr) (K. Rahmani).

<https://doi.org/10.1016/j.physe.2022.115168>

Received 23 April 2021; Received in revised form 16 December 2021; Accepted 30 January 2022

Available online 5 February 2022

1386-9477/© 2022 Elsevier B.V. All rights reserved.

## Effect of conduction band non-parabolicity on the intersubband transitions in ZnO/Mg<sub>x</sub>Zn<sub>1-x</sub>O quantum well heterostructures

L Moudou<sup>1</sup>, Y Chrafi<sup>1</sup>, K Rahmani<sup>2</sup> and I Zorkani<sup>3</sup>

<sup>1</sup>LDD Faculty of Sciences and Technologies, Beni Mellal-Morocco

<sup>2</sup>LIRST Faculty of Polydisciplinary, Beni Mellal-Morocco

<sup>3</sup>LPS, Faculty of Sciences Dhar Mehraz, Fès-Morocco

Email: younescharafih@gmail.com --- kh.rahmani@hotmail.fr

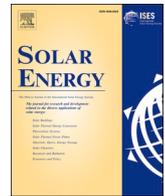
**Abstract.** In this paper, we have calculated the electronic states and the coefficient of transmission in ZnO/Mg<sub>x</sub>Zn<sub>1-x</sub>O quantum well structures (QW), with 20% of Magnesium in both the parabolic and the non-parabolic cases. Our calculations are performed in the context of the approximation of the envelope function formalism, and using the finite difference method. The results show that the intersubband transition energy increases rapidly with well width until  $L_w=5\text{nm}$  and becomes almost constant (specially transitions  $E_{13}$  et  $E_{23}$ ). Wavelength  $\lambda_{23}$  decreases with well width until  $L_w=5\text{nm}$  and becomes constant. The non-parabolicity effect is more pronounced for small QW ( $L_w \leq 5\text{nm}$ ) and less marked in narrow and large QW. Also, we are studied the coefficient of transmission. We notice that when the height of barrier increases the coefficient of transmission decreases. It will be necessary to provide more energy to the electron so that it can cross the barrier. We also notice the variations related to a phenomenon of reflection quantum.

### 1. Introduction:

Semiconductor materials II-VI with a large band gap of the ZnO/MgZnO system are gaining increasing interest; they are the potential competitors of the other large family of materials with a large band gap, the III-V nitrides. Like the nitrides, ZnO crystallizes in the wurtzite phase then the presence of the particular effects related to the polarization with internal electric fields more intense than those in the nitrides III-V, due to their applications in the field of fabrication of the photodetectors and diode lasers [1-5]. However, ZnO has several advantages, the ZnO substrate is naturally solid ZnO of good crystalline quality, it is not very expensive and easy to manufacture [6-7]. Intersubband transitions in quantum wells of ZnO/MgZnO are theoretically and experimentally determined for the purpose of improving optoelectronic properties, and making it an ideal candidate for optoelectronic devices, more precisely in the ultraviolet regions [8-11].

Recently, several groups interested on intersubband transitions in quantum wells composed of semiconductors due to their potential in ultraviolet regions. We found that Bhattacharya et al.[12] experimentally studied the transmission spectra of MgZnO thin films with different Mg to Zn by changing the thicknesses of ZnO layer, and found that the films showed high (>80%) transparency, and the absorption edge shifted as the thickness of the ZnO sublayers decreases. Ohno et al.[13-14] studied the intersubband transitions in ZnO-MgZnO and have reported that there are unique properties for intersubband absorption in ZnO quantum well. In this work, we adopt a numerical method to determine the intersubband transitions of the conduction band in ZnO/MgZnO, by solving the Schrödinger equation, under the effect of the approximation of the envelope function and considering the impact of





# Numerical simulation of a new heterostructure CIGS/GaSe solar cell system using SCAPS-1D software

Mohamed Al-Hattab<sup>a,\*</sup>, L'houcine Moudou<sup>a</sup>, Mohammed Khenfouch<sup>b,c,d</sup>, Omar Bajjou<sup>e</sup>,  
Younes Chrafi<sup>f</sup>, Khalid Rahmani<sup>a</sup>

<sup>a</sup> ERPTM, Faculty of Polydisciplinary Beni Mellal, Sultan Moulay Slimane University, B.P 592, 23000 Beni Mellal, Morocco

<sup>b</sup> Faculty of Applied Sciences, Ibn Zohr University, Ait-Melloul, Morocco

<sup>c</sup> EPTHE, Department of Physics, Faculty of Sciences, Ibn Zohr University, Agadir, Morocco

<sup>d</sup> UNESCO UNISA Africa Chair in Nanosciences & Nanotechnology (U2ACN2), College of Graduate Studies, University of South Africa (UNISA), Pretoria, South Africa

<sup>e</sup> Material Physics Laboratory, Faculty of Sciences and Technics, Sultan Moulay Slimane University, BP 523, 23000 Beni Mellal, Morocco

<sup>f</sup> Lphe-modeling and Simulation, Faculty of Science, Mohammed V University in Rabat, Morocco

## ARTICLE INFO

### Keywords:

CIGS/GaSe solar cell  
CIGS-P<sup>+</sup>  
Device simulation  
Heterojunction solar cell  
SCAPS-1D

## ABSTRACT

The aim of this work is to study the photovoltaic performance of a solar cell based on GaSe materials using SCAPS-1D simulator. The novelty of this work consists in the use of GaSe lamellar as a buffer layer, this material has not been used at this part of solar cells before, which makes this new study interesting; we had also used a thin film (CIGS-P<sup>+</sup>), strongly doped type p as back surface field in order to obtain high performance. The solar cell is made up of two CIGS layers with different acceptors densities, one layer of Gallium selenide GaSe, and ITO anti-reflective layer. The role and impact of the CIGS-P<sup>+</sup> layer as a back surface field on the performance of solar cells were investigated. To improve cell performance, the effects of thickness, carrier concentration, operating temperature, and resistors  $R_s$  and  $R_{sh}$  are explored. The carrier concentration as well as the thickness of the GaSe, CIGS absorber layer, and CIGS-P<sup>+</sup> were shown to affect the cell's performance. The open circuit voltage of the simulated cell was increased to 309 mV after using CIGS-P<sup>+</sup>, the current density  $J_{sc}$  up to 32.61 mA/cm<sup>2</sup>, the Fill Factor FF up to 89.39%. After employing CIGS-P<sup>+</sup> in a GaSe-based solar cell, an efficiency gains of roughly 10.06 % was recorded.

## 1. Introduction

For decades, scientists have been working on renewable energies, because fossil fuels, in addition to being polluting, are exhaustible. The search for an alternative energy source is inevitable. The sources of fossil fuels are becoming increasingly rare. Therefore, scientific research has turned to sustainable energy, and the most important source of these energies remains the sun. The photovoltaic effect converts solar radiation directly into electricity, which is how solar energy is harnessed (Kabir et al., 2018; Laser et al., 2017; Şen, 2004). As a result, renewable energy is the subject of multiple researches to find materials that, on one hand, will give the best energy conversion efficiency and on the other hand, respect the environment. Among the types of cells that are still subjects of research and development, we find those made from III to VI materials such as; InSe, GaSe, GaS (Al Garmi and Darwish, 2017; Bassou et al., 2020). The efficiency/cost ratio is the most essential factor in most

research, and thin film solar cell materials are now being developed to obtain a high value of this ratio. Solar cells composed of chalcopyrite materials have a thick absorbent layer ( $\leq 2 \mu\text{m}$ ) that absorbs the useful portion of the solar spectrum (Heriche et al., 2017). Chalcogenide photovoltaic technologies offer a new technological choice compared to conventional silicon technologies (Heinrich et al., 2020).

CIGS has many advantages, such as an adjustable band gap according to the ratio (Ga/Ga + In) (Asaduzzaman et al., 2016; Bär et al., 2004; Peace et al., 2016), high absorption coefficient of order  $3\text{--}6 \times 10^5 \text{ cm}^{-1}$  (Li et al., 2019) and high exterior stability. Jackson et al. (2011) found that CIGS solar cells have a conversion efficiency of over 20%, while Amin et al. (2012) found a conversion efficiency of 17.26%, using an absorbent layer thickness of 1  $\mu\text{m}$  CIGS. In the lab, a variety of techniques have been utilized to create ultra-thin CIGS solar cells with efficiencies of 12 to 13%. (Naghavi et al., 2017; Van Lare et al., 2015). Vermang et al. (2014) used an ultra-thin Cu(In,Ga)Se<sub>2</sub> absorbent layer thickness of 0.385  $\mu\text{m}$  to increase the efficiency of solar cells by 13.5%.

\* Corresponding author.

E-mail address: [med.alhattab@gmail.com](mailto:med.alhattab@gmail.com) (M. Al-Hattab).

<https://doi.org/10.1016/j.solener.2021.08.084>

Received 29 July 2021; Received in revised form 19 August 2021; Accepted 31 August 2021

0038-092X/© 2021 International Solar Energy Society. Published by Elsevier Ltd. All rights reserved.

# GaAs quantum well in the non-parabolic case: the effect of hydrostatic pressure on the intersubband absorption coefficient and the refractive index<sup>★</sup>

Younes Chrafi<sup>1</sup>, Lhoucine Moudou<sup>1</sup>, Khalid Rahmani<sup>1,\*</sup>, Izeddine Zorkani<sup>2</sup>, Mohammed Khenfouch<sup>3</sup>, and Sanae Janati Edrissi<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Department of Physics, Faculty of Polydisciplinary (ERPTM), B.P 592, 23000 Beni-Mellal, Morocco

<sup>2</sup> Department of Physics, Faculty of Science, Dhar Mehraz (LPS), Fès, Morocco

<sup>3</sup> Africa Graphene Center, Physics department, Eureka building, CSET, UNISA-Florida Campus, Roodepoort, 1709 Gauteng, South Africa

Received: 14 February 2019 / Received in final form: 19 February 2019 / Accepted: 16 May 2019

**Abstract.** We investigated the effect of the hydrostatic pressure on the optoelectronic properties of a quantum well (QW) based on  $\delta$ -doped GaAs sandwiched by  $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ . We study the case of a non-parabolic conduction band where the aluminum content is set at 30%. We perform our calculations in the context of the approximation of the envelope function formalism using the finite difference method. Results show that the transition energies decrease with the increase of the hydrostatic pressure, which causes remarkable modifications on the optical properties of the QW nanostructure. The non-parabolicity effect is more important for small QW ( $L_w \leq 5\text{nm}$ ) and less marked in narrow and large QW. In addition, we study the absorption coefficient for 8 nm/4 nm/8 nm geometry. On the one hand, the pressure increase creates a displacement of the optical absorption coefficient towards low energies and a decrease of the absorption peak value. On the other hand, the refractive index moves towards higher energies. We show that in the presence of a hydrostatic pressure and following its effect on intersubband transitions, these optical properties also depend on the dopant concentration rate and the quantum well width. Our study finds interests for the nano-fabrication of quantum wells and in particular for those used in optical and electronic applications.

## 1 Introduction

This research developed for studying the behavior of optical properties in nanostructured materials [1–7]. Another idea in the progress of semiconductors is  $\delta$ -doping in quantum well materials. It has been found that this technique is gainful to promote the movement of charge carriers in quantum wells [8–12]. Most of the results provided indicated that several parameters such as doping concentration, temperature, and hydrostatic pressure affect the electronic and optical properties of these semiconductor materials. The combined effect of the concentration of doping and the intensity of hydrostatic pressure leads to a considerable change in intersubband transitions, as well as to change in the confinement of charge carriers. These changes are very useful in the manufacture of infrared photodetectors [13,14], infrared lasers [15] and many others.

Recently, the behavior of optical properties of small structures with the combined effects of applied electric and magnetic fields and hydrostatic pressure in GaAs/GaAlAs QW have been largely studied by many researchers [16–20]. On one hand before, we can mention the first experimental report about the observation of a large-amplitude transition in the conductive band of a GaAs quantum well by West and Eglash [21].

This paper is an overview of a theoretical study on the effect of the non-parabolicity conduction band, taking into account the presence of the hydrostatic pressure, on the optoelectronic properties of GaAs QWs, such as the total intersubband optical absorption coefficient and the relative refractive index coefficient. Our numerical calculations reveal that all these fundamental parameters are strongly depend on the  $\delta$ -doping layer in the active zone. These effects have attracted a lot of attention from researchers because of the experimental and theoretical perspectives. In this context, there are several works that are in good agreement with our results. We can quote Dakhlaoui et al. [22] and Baghramyan et al. [23].

Our document is outlined as follows: In Section 2, we briefly present the description of the theoretical model and the method of resolution. Section 3 is devoted to discuss the numerical results and give our interpretations, and finally the conclusion of our study is included in Section 4.

<sup>★</sup> Contribution to the Topical Issue “Materials for energy harvesting, conversion, storage and environmental engineering (Icome 2018)”, edited by Jean-Michel Nunzi, Rachid Bennacer, Mohammed El Ganaoui, Mohamed El Jouad.

\* e-mail: [kh.rahmani@hotmail.fr](mailto:kh.rahmani@hotmail.fr)

# The anisotropic optical properties of different polytypes ( $\varepsilon$ , $\beta$ , $\delta$ , $\gamma$ ) of GaSe lamellar materials

Mohamed Al-Hattab<sup>1</sup>, Lhoucine Moudou<sup>1</sup>, Younes Chraifh<sup>1</sup>, Mohammed Khenfouch<sup>2</sup>, Omar Bajjou<sup>3</sup>, and Khalid Rahmani<sup>1,\*</sup>

<sup>1</sup> ERPTM, Polydisciplinary Faculty, Sultan My Slimane University, B.P 592, 23000 Beni Mellal, Morocco

<sup>2</sup> Africa Graphene Center, Physics department, Eureka building, CSET, UNISA-Florida Campus, Roodepoort, 1709 Gauteng, South Africa

<sup>3</sup> Material Physics Laboratory, Faculty of Sciences and Technics, Sultan Moulay Slimane University, BP 523, 23000 Beni Mellal, Morocco

Received: 14 May 2020 / Received in final form: 14 July 2020 / Accepted: 17 August 2020

**Abstract.** In this paper, we have calculated the optical properties of the different polytypes of GaSe lamellar materials. The calculations are based on the DFT method and is performed using the CASTEP code. All optical properties have been studied in a domain that extends energetically from 10 meV to 35 eV and have been measured for a polarization // and  $\perp$  with the  $c$  axis. A strong anisotropic was observed, which indicates that the optical properties of the GaSe material are essentially determined by the symmetry of a single layer, exactly by the symmetry resulting from the stacking of the layers. Moreover, the absorption starts in the UV-vis spectral range, the peaks appear in the UV range. The refractive index values are  $n_{xx} = 2.54, 2.55, 2.88, 10.85$ ,  $n_{zz} = 3.90, 3.90, 3.26, 11.73$  for  $\varepsilon, \beta, \gamma, \delta$ , respectively at zero photon energy. Furthermore, we notice that the optical properties of different polytypes ( $\varepsilon, \beta, \delta, \gamma$ ) of GaSe lamellar materials are obtained both in the ultraviolet field or in the visible domain are significant and give a strong argument for the use of these materials in various applications, namely photovoltaic cells, nanoelectronic, optoelectronic, optical fiber and photo-catalytic applications.

## 1 Introduction

For a long time, the industry has been looking for more efficient materials to meet market demand. Miniaturization, strength, lightness, flexibility are all parameters that must be taken into account when designing a high quality manufactured product. In recent years, the technological revolution has paved the way for another generation of materials called: lamellar materials. The III-VI lamellar semiconductor binary compounds, such as gallium selenide (GaSe) and indium selenide (InSe) are of great scientific interest for their various technological applications.

Gallium Selenide is a new direct band gap semiconductor. It has a lamellar structure whose basic element is a sheet. The latter consists of two Gallium planes interspersed between two planes of Selenium with a Se-Ga-Ga-Se sequence. It should be noted that within the same sheet, there are strong bonds between the atoms (ion-covalent bonds). On the other hand, all the layers constituting the 2D lamellar crystal are connected by weak Van der Waals bonds [1-3].

The lamellar form of these materials, allows to build various types of structures called polytypes, mainly obtained by a simple rotation or translation.  $\varepsilon, \beta, \delta$  with a hexagonal lattice of space group  $D_{3h}^1, D_{6h}^4, C_{6v}^4$  respectively and  $\gamma$  with a rhombohedral lattice of space group  $C_{3v}^5$  [1,4-7]. GaSe has been the subject of numerous studies because of their potential applications in optoelectronic devices [8,9] and photovoltaic [10,11], X-ray detectors [12], energy storage. The choice of lamellar materials as insertion cathode was made by M. Balkanski [13]. Frequency doubling and fast optical synchronization [14]. Recent studies also rely mainly on a pseudo-potential approach based on the DFT theory to study the fundamental properties of GaSe materials [15-19].

In the present work, we have studied the optical properties of the different polytypes of GaSe lamellar materials using the DFT method.

## 2 Theoretical framework

The optical chalcogen GaSe properties are calculated using the PWPP method, using the CASTEP code [20], included in the Biovia material Studio 2017 software. This code is based on the functional density theory (DFT). The electrons are taken into account for the Ga, Se atoms

\* e-mail: [kh.rahmani@hotmail.fr](mailto:kh.rahmani@hotmail.fr)



# First-principles calculation of the structural, electronic and optical properties of GaSe<sub>(1-x)</sub>S<sub>x</sub> (x = 0, 0.25, 0.5 and 1) compounds

Mohamed Al-Hattab<sup>a</sup>, L'Houcine Moudou<sup>a</sup>, younes Chrafi<sup>a</sup>, Khalid Rahmani<sup>a</sup>, Mohammed Khenfouch<sup>b</sup> and Omar Bajjou<sup>c</sup>

<sup>a</sup>ERPTM, Faculty of Polydisciplinary Beni Mellal, Sultan Moulay Slimane University, Beni Mellal, Morocco; <sup>b</sup>Physics Department, Africa Graphene Center, Gauteng, South Africa; <sup>c</sup>Material Physics Laboratory, Faculty of Sciences and Technics, Sultan Moulay Slimane University, Beni Mellal, Morocco

## ABSTRACT

The industry has long sought ever more efficient materials, allowing it to meet market demand. For this purpose, doping remains a good choice for improving the properties of a material. The structural, electronic, optical properties of the GaSe<sub>1-x</sub>S<sub>x</sub> (x = 0, 0.25, 0.5 and 1) compounds are studied using the pseudopotential method of first principles in the Density Functional Theory using CASTEP code. The calculated results show that the lattice constants of  $\epsilon$ -GaSe decrease as function of the impurity concentration increases. Also, the increase of doping by the sulphur leads to a decrease of  $D_{Ga-x}$  and an increase of  $D_{Ga-Ga}$ . The values of the gap energy are increased with the increase in sulphur content. For optical calculations the results show the appearance of an absorption peak in all GaSe<sub>1-x</sub>S<sub>x</sub> (x = 0, 0.25, 0.5 and 1) structures, with different intensities and a shift of the band to lower wavelengths when the doping content by the sulphur is increased. The insertion of the sulphur atom reduces the refractive index of  $\epsilon$ -GaSe, and increases its birefringence which is important for non-linear optics applications. Raman lines move to higher frequencies with increasing sulphur content indicating a change in the crystal structure of  $\epsilon$ -GaSe.

## ARTICLE HISTORY

Accepted 4 June 2021

## KEYWORDS

GaSe<sub>1-x</sub>S<sub>x</sub>; structural property; electronic property; optical property; DFT

## 1. Introduction

The Gallium Selenide (GaSe) is a binary lamellar semiconductor compound (III–VI), which crystallises in different polytypes due to the arrangement of its complex layers; each formed by four atomic sublayers in a Se-Ga-Ga-Se sequence [1]. The four atomic sheets are bound together by covalent bonds, while the layers are limited by weak *Van der Waals* interactions [2]. The most common polytypes in the literature are  $\epsilon$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$ ,  $\delta$  [2–4].

The polytype  $\epsilon$  is characterised by the existence of two sheets per elementary cell, and a sequence of order AB, with a space group  $D_{3h}^1$  [5]. Despite the very low hardness of these materials due to its structure, which leads to uncontrolled layer stacking defects in the growth process. These materials currently have great scientific interest stemming from