

الجمهورية الجزائرية الديمقراطية الشعبية  
REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE



MINISTÈRE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR  
ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE



UNIVERSITE DJILLALI LIABES DE SIDI BEL ABBES

FACULTE DE GENIE ELECTRIQUE

DÉPARTEMENT D'ELECTRONIQUE

# THESE

Présenté Par

**Mr. BENCHEHIMA Miloud**

**POUR L'OBTENTION DU DIPLOME DE  
DOCTORAT EN SCIENCES**

**Présentée à la Faculté de Génie Electrique  
Département de l'électronique**

**Intitulé**

**Etude et optimisation des paramètres physiques  
de la structure AlGaInAs/InP  
Application aux lasers**

Soutenu publiquement le 30/06/2016 devant le jury :

<b>SOUDINI Belabbès</b>	Professeur UDL-SBA	Président
<b>SAHNOUN Mohammed</b>	Professeur U-MASCARA	Examineur
<b>ARBOUCHE Omar</b>	MC-A U-SAIDA	Examineur
<b>LACHEBI Abdelhadi</b>	Professeur UDL-SBA	Invité
<b>ABID Hamza</b>	Professeur UDL-SBA	Encadreur

Année universitaire 2015/2016



*Je dédie ce modeste travail:*

*À la mémoire de ma mère et mon ami intime Docteur Dey  
Louaoui.*

*À mon père, mes très chers frères et sœurs*

*À ma femme qui m'a soutenu jusqu'à la fin de ce travail*

*À bvoucif, mehadji, Rayane, Islame, Abed El Rahmane,  
Yassine El Abdel, abvd El Snour Mustapha et Merieum  
Wissal.*

*miloud benchehima*  
***miloud benchehima***



# REMERCIEMENTS

Ce travail de thèse a été effectué au Laboratoire des Matériaux Appliqués (AML) de la faculté de génie électrique université Djilali Liabès de Sidi Bel Abbés.

Je tiens à remercier monsieur le professeur ABID HAMZA, directeur du laboratoire AML, de m'avoir encadrée pendant toute cette période comme directeur de thèse. Je tiens tout particulièrement à exprimer ma grande gratitude pour m'avoir beaucoup aidé à réaliser ce travail et qui m'a enrichi par ses connaissances rigoureuses ainsi que pour la confiance qu'il m'a témoignée depuis mon inscription à l'école doctorale.

Je remercie monsieur le professeur SOUDINI Belabbès à l'université Djillali Liabès de Sidi Bel-Abbés (UDL-SBA) d'avoir honoré d'examiner ce travail et accepter de présider mon jury de thèse.

Je suis très honorée de l'intérêt que messieurs les professeurs SAHNOUN Mohammed de l'université de Mascara et ARBOUCHE Omar, ont montré pour ce travail en acceptant de faire partie du jury.

Je remercie vivement monsieur le professeur LACHEBI Abdelhad à l'université Djillali Liabès de Sidi Bel-Abbés d'avoir accepté notre invitation.

J'aimerais aussi remercier tous les membres du Laboratoire des Matériaux Appliqués ainsi que toutes les personnes de la faculté de génie électrique pour leur sympathie et pour leur bonne ambiance.

Je tiens à adresser un grand merci à tous mes amis pour leur soutien et pour leur bonne humeur. Tout particulièrement N. Sayeh, C. Chaouche, E. kanous, K.bencheikh, A. Resfa et A.Driz qu'ils trouvent ici ma grande reconnaissance pour leur amitiés et leurs encouragements.

Finalement, je tiens à vivement remercier mes parents, mes frères et sœurs et ma femme pour m'avoir supportée durant cette période ainsi que à Abdeli Yassine, Mustapha Abd El Nour et Meriem Wissal.que je leurs dédie ce travail.

*A tous, un grand merci.*



## Sommaire

Remerciement.....	i
Sommaire .....	ii
Liste des tableaux .....	v
Liste des figures.....	vi
Liste d'abréviation.....	x
Introduction générale.....	1

### Chapitre I Théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT)

I.1. Introduction.....	4
I. 1. 2. La théorie de fonctionnelle de la densité (DFT) .....	5
I. 1. 3. L'Approximation de la densité locale (LDA) .....	7
I. 1. 4. L'approximation du gradient généralisé GGA : .....	9
I. 1. 4. 1. Approximation GGA-WC.....	10
I. 1. 4. 2. Approximation GGA-EV .....	10
I. 1. 4. 3. Approximation (TB-mBJ).....	11
I. 1. 5. La solution des equations de Kohn-Sham d'une seule particule.....	11
I. 1. 6. La procédure de calculs de la DFT .....	12
I. 1.7. Les systèmes à spin polarisés.....	13
I. 2. La méthode des ondes planes augmentées linéarisées (FP-LAPW) .....	14
I. 2. 1. La méthode des ondes planes augmentées (APW).....	14
I. 2. 2. La méthode linéaire des ondes planes augmentées (LAPW) .....	17
I. 2. 2.1. Les propriétés de base .....	18
I. 2. 3. La méthode (FP-LAPW).....	20
I. 3. Le code Wien2k .....	20
I. 3. 1. la structure du programme Wien2k.....	22
Références du chapitre I.....	23

### Chapitre II Laser à puits quantiques

II.I. Introduction .....	24
II.1. Le laser .....	24
II.1.1. Le pompage optique .....	25
II.1.2. Le pompage par injection électrique .....	26
II.1.3. Le pompage électronique .....	26
II.2. Lasers à semi-conducteurs.....	26
II.3. Transitions radiatives, émission et absorption de lumière par un semi-conducteur .....	27
II.3.1. Absorption .....	27
II.3.2. Emission.....	27
II.4. Seuil d'oscillation laser .....	34
II.4.1. Condition sur le gain .....	36
II.5. Effet de la température .....	38
II. 6. Principe de fonctionnement d'un laser à Semi-conducteur .....	39
II. 7. Structure d'une diode laser .....	40
II. 8. Les différents types de laser à semi conducteur .....	41
II. 8. 1 Laser à homojonction .....	41

II. 8. 2. Laser à double hétérostructure.....	42
II. 8. 3. Lasers à cascade quantique.....	43
II.8.4. Diode laser à puits quantiques.....	43
II.8.5. Lasers à multi puits quantiques.....	47
II.8.6. Quelques structures laser particulières.....	53
II.8. Quelques exemples de diodes lasers à base du semi conducteur III-V.....	54
II.9.1. LDs InGaN/GaN/AlGaN à MQW sur substrat de saphir.....	55
II.9.2. LDs InGaN/GaN/AlGaN MQW verticales.....	57
III. 9. 3. LDs InGaN/GaN/AlGaN MQW sur substrat de 6H-SiC.....	58
II.11. Conclusion.....	59
Références du chapitre II.....	60

### **Chapitre III Propriétés structurales et optoélectroniques des ternaires $Al_{1-x}In_xAs$ , $Al_{1-x}Ga_xAs$ et $In_{1-x}Ga_xAs$**

III.1. Introduction.....	62
III.2. Détail de calcul.....	63
III.3. Propriétés structurales.....	65
III. 4. Propriétés optoélectroniques.....	71
III. 4.1. Propriétés électroniques.....	71
III. 4. 2. Densité d'état électronique.....	75
III. 4. 3. Propriétés optiques.....	80
III. 4.3.1. Fonction diélectrique.....	80
III. 4. 3. 2. Coefficient d'absorption.....	85
III. 4. 3. 3. Indice de refraction et le coefficient d'extinction.....	87
IV. 4. Conclusion.....	94
Références du chapitre III.....	95

### **Chapitre IV : Etude des propriétés structurales et optoélectroniques du quaternaire $Al_xGa_yIn_{1-x-y}As/InP$**

IV. Introduction.....	97
IV. 1. Détail de calcul.....	98
IV. 2. Propriétés structurales.....	99
IV. 3. Propriétés optoélectroniques du quaternaire $Al_xGa_yIn_{1-x-y}As/InP$ .....	105
IV. 3. 1. Propriétés électroniques:.....	105
IV. 3. 3. Densité d'états.....	113
IV. 3. 4. Propriétés optiques.....	117
IV. 3. 4. 1. La fonction diélectrique.....	118
IV. 3. 4. 2. Coefficient d'absorption et la conductivité optique.....	122
IV. 3. 4. 3. Indice de réfraction et le coefficient d'extinction.....	123
IV.4. Conclusion.....	128
Références du chapitre IV.....	129

### **Chapitre V. Optimisation des paramètres physiques de la structure AlGaInAs/InP à puits quantique**

V.1. Introduction.....	131
V. 2. Optimisation des paramètres physiques de la structure à puits quantique.....	133
V.3. Longueur d'onde.....	133
V.3. 1. Longueur d'onde en fonction de la largeur de puits.....	133
V. 3. 2. Longueur d'onde en fonction de la température.....	133

V. 3. 3. Longueur d'onde en fonction de la pression .....	136
V. 4. Structure à unique puits quantique .....	137
V. 4.1. Facteur de confinement $\Gamma$ .....	137
V. 4.2. Gain maximal .....	138
V. 4.3. Gain en fonction de la densité de porteurs .....	138
V.4.4. Gain en fonction de la température .....	139
V.4.5. Gain en fonction de la largeur de puits .....	140
V. 4. 5. Gain en fonction de la densité du courant d'injection .....	141
V. 4. 6. Conception d'une structure $Al_{0,03125}Ga_{0,4375}In_{0,53125}As/InP$ à (SQW) .....	142
V.5.2. Laser à multi puits quantique .....	144
V.5.2.1. Facteur de confinement d'un laser à multi puits quantique .....	148
V.5.6. Gain maximal d'un laser à multi puits quantique (MQW) .....	148
V. 5. 6. 1. Gain maximal en fonction de la densité de porteurs .....	148
V. 5. 6. 2. Gain maximal en fonction de la largeur de barrière, largeur de puits et le nombre de puits .....	153
V. 5.6.3. Gain en fonction de la densité de courant d'injection (pompage) .....	151
V. 5. 6. 4. Proposition d'une structure $Al_{0,03125}Ga_{0,4375}In_{0,53125}As/InP$ à (MQW) .....	152
V.6. Conclusion .....	153
Références du chapitre V .....	155
Conclusion générale .....	156

## Liste des tableaux

III. 1 Résultats obtenus du paramètre de maille et le module de compressibilité des binaires et des ternaires comparés avec d'autres résultats expérimentaux et théoriques. ....	68
III. 2 Valeurs du gap des trois ternaires et leurs binaires sont illustrées. Calculées avec les trois approximations (GGA-WC),(PBESol-GGA) et (TB-mBJ). ....	73
III.3 Les principaux pics dans la partie imaginaire de la fonction $\varepsilon_2(\omega)$ , les constantes diélectriques statiques $\varepsilon_1(0)$ pour les ternaires et composés parents. ....	81
III. 4 Résultats obtenues de l'indice de réfraction $n(x)$ pour les concentrations $x$ ( $0 \leq x \leq 1$ ). ....	91
IV. 1 Les résultats calculés par l'approximation (GGA-WC) du paramètre de maille $a$ et le module de compressibilités $B$ de $\text{Al}_x\text{Ga}_y\text{In}_{1-x-y}\text{As}$ et InP. ....	103
IV.2 Position des atomes Al ( $x, y, z$ ) dans le quaternaire $\text{Al}_x\text{Ga}_y\text{In}_{1-x-y}\text{As}$ avec et sans relaxation pour les concentrations ( $x = 0.03125, 0.15625$ et $0.28125$ ). ....	106
IV. 3 Valeurs des gaps énergétiques $E_g$ (eV) du binaire InP et du $\text{Al}_x\text{Ga}_y\text{In}_{1-x-y}\text{As}$ avec et sans relaxation calculées par les approximations GGA-BPESol, GGA-EV et mBJ (en eV) et comparés à d'autres travaux. ....	108
IV. 4 Principaux pics dans la partie imaginaire $\varepsilon_2(\omega)$ , constante diélectrique statique $\varepsilon_1(0)$ et leurs valeurs théoriques et expérimentales correspondantes. ....	120
IV. 5 Indice de réfraction du binaire InP et du quaternaire $\text{Al}_x\text{Ga}_y\text{In}_{1-x-y}\text{As}$ pour différentes compositions $x$ . ....	126
V. 1 les valeurs optimisées graphiquement de la diode laser à un seul puits quantiques à base de la structure $\text{Al}_{0.03125}\text{Ga}_{0.4375}\text{In}_{0.53125}\text{As}/\text{InP}$ comparées aux autres travaux. ....	142
V. 2 Les valeurs optimisées de la diode laser à multi puits quantiques à base de la structure $\text{Al}_{0.03125}\text{Ga}_{0.4375}\text{In}_{0.53125}\text{As}/\text{InP}$ . ....	152

## Liste des figures

I.1 : Le cycle self-consistent dans le calcul de la fonctionnelle de densité.....	13
I.2 : Répartition de la cellule unitaire, une région interstitielle $\alpha$ et des régions sphériques $\beta$ , respectivement. ....	16
I.3 : Schéma de la répartition de la cellule élémentaire en sphères atomiques (I) et en région interstitielle (II) .....	19
I.4 : L'organigramme du code Wien2k cette figure est prise de la Ref Wien2k [39].....	23
II .1 : Schéma de base d'un laser. (1) le milieu actif, (2), le système de pompage; .....	27
(3) la cavité de résonante et (4) le faisceau laser transmise.....	27
II-1 : phénomène d'absorption [9].....	30
II-2 :Emission [9] .....	30
III-3 : Emission spontanée [9].....	31
II-4 : Transitions optiques relatives à des recombinaisons de paires électron-trou.....	31
II-5 : phénomène d'émission stimulée .....	34
II.6. Variation du gain d'une jonction semi-conductrice en fonction du courant de pompage dans un modèle d'approximation linéaire.....	35
II-8 Mécanismes d'établissement de l'oscillation laser dans une cavité .....	38
II-9 : Condition en énergie permettant une recombinaison électron-trou et un.....	39
Confinement optique dans une hétérostructure .....	39
II.10 : Population des bandes d'énergie .....	43
II-11 diagramme d'un laser a semi conducteur .....	43
II-12 : Diode laser [1].....	44
II-13 Laser à homojonction .....	44
II-14 : Structure d'une diode laser à double hétérojonction (DH).PN [15].....	45
II-15 : Profil de bande de conduction d'une portion de la zone active d'un LCQ, montrant la transition inter sous bande du laser et le recyclage des électrons .....	46
II-16 : Laser à puits quantique .....	47
II.17 : Représentation schématique d'une structure à 3 puits quantiques à barrière de GaAs.....	50
II.18.Comparaison des courbes gain-courant dans un laser à hétérojonction et un laser à puits quantiques [2]......	51
II.19. gain normalisé d'une structure à (MQW) à N puits quantiques en fonction de courants de pompe normalisé [2]......	52

II.20. Caractéristique I(V) d'une diode laser à base d'Antimoine (le matériau composant les puits quantiques est le quaternaire GaInAsSb), émettant dans le moyen infrarouge. Le courant de seuil est de 24 mA (collaboration Université de Montpellier/Thomson CSF LCR) ..	54
II. 21. Diode laser (barrettes de puissance) vendus par Thomson-CSF Laser Diodes. Image prise de la référence [24].....	55
II. 22 : Coupe schématique éclatée d'une VCSEL.....	57
II.23. Représentation schématique d'une configuration de VCSEL en cavité externe pompé optiquement avec un élément saturable dans la cavité résonante pour faire un blocage passif des modes de cavité pour la génération d'impulsions optiques courtes. . .	57
II-24 : Structure des LDs InGaN MQW (a) sur substrat de saphir selon S. Nakamura .....	59
(b) avec des couches de revêtement MD-SL sur substrat ELOG selon S. Nakamura .....	59
II-24 : (a) Structure des LDs InGaN/ GaN/AlGaN MQW verticales (b) Structure des.....	61
LDs InGaN/GaN/AlGaN MQW VCSEL selon B. Monemar et al. ....	61
II-5.2 : Structure des LDs InGaN/GaN/AlGaN MQW sur substrat de SiC .....	62
III. 1. La structure cristalline : (a) du binaire AlAs (primitive) (b) du ternaires $Al_{0,500}In_{0,500}As$ ( $1 \times 1 \times 2$ ). .....	68
III. 2. Variation de l'énergie totale en fonction du volume pour les binaires AlAs, GaAs et InAs.....	71
III. 3. variation de l'énergie totale en fonction du volume pour $Al_{0,500}Ga_{0,500}As$ , $Al_{0,500}In_{0,500}As$ et $In_{0,500}Ga_{0,500}As$ .....	71
III. 4. Variations des paramètres de réseau $a(x)$ des ternaires $Al_{1-x}Ga_xAs$ , $Al_{1-x}In_xAs$ et $In_{1-x}Ga_xAs$ en fonction de la concentration $x$ .....	74
III. 5. Variations des modules de compressibilités $B(x)$ des ternaires $Al_{1-x}In_xAs$ , $In_{1-x}Ga_xAs$ et $Al_{1-x}Ga_xAs$ en fonction de la concentration $x$ .....	75
III. 6. Structures de bande des binaires AlAs, GaAs et InAs calculé par approximation (TB-mBJ). ...	77
III. 7. Structures de bande des trois ternaire calculée par l'approximation (TB-mBJ).....	77
III. 8. Variation du gap ( $E_g$ ) des trois ternaires. Les lignes en tiret indiquent les gaps calculés par loi de Vigard.....	78
III. 9. Densité d'état total et partielle du ternaire $In_{0,500}Ga_{0,500}As$ .....	82
III. 10. Densité d'état total et partielle du ternaire $In_{0,500}Ga_{0,500}As$ .....	83
III. 11. Densité d'état total et partielle du ternaire $In_{0,500}Ga_{0,500}As$ .....	83
III. 12. Les parties réelles $\epsilon_1(\omega)$ et imaginaires de la fonction diélectriques $\epsilon_2(\omega)$ pour le ternaire $Al_{1-x}In_xAs$ .....	87
III. 13. Les parties réelles $\epsilon_1(\omega)$ et imaginaires de la fonction diélectriques $\epsilon_2(\omega)$ pour le ternaire $In_{1-x}Ga_xAs$ .....	88
III. 14. Les parties réelles $\epsilon_1(\omega)$ et imaginaires de la fonction diélectriques $\epsilon_2(\omega)$ pour le ternaire $Al_{1-x}Ga_xAs$ .....	89
III. 15. Coefficients absorption $\alpha(\omega)$ pour $Al_{1-x}In_xAs$ calculé par l'approximation (TB-mBJ) .....	89

III. 16. Coefficients d'absorption $\alpha(\omega)$ pour $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}$ calculé par l'approximation (TB-mBJ) .....	90
III. 17. Coefficients d'absorption $\alpha(\omega)$ pour $\text{Al}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}$ calculée par l'approximation (TB-mBJ).....	91
III. 19. Variation de l'indice de refraction $n(\omega)$ et coefficient d'extinction $k(\omega)$ por $\text{Al}_{1-x}\text{In}_x\text{As}$ . .....	93
III. 20. Variation de l'indice de refraction $n(\omega)$ et coefficient d'extinction $k(\omega)$ por $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}$ . .....	94
III. 21. Variation de l'indice de refraction $n(\omega)$ et coefficient d'extinction $k(\omega)$ por $\text{Al}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}$ .....	95
III. 22. indice de réfraction $n(x)$ pour les $\text{Al}_{1-x}\text{In}_x\text{As}$ , $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}$ et $\text{Al}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}$ en fonction de la concentration $x$ . .....	96
III. 23. Indice de réfraction en fonction du band gap ( $E_g$ ) pour $\text{Al}_{1-x}\text{In}_x\text{As}$ . .....	95
III. 25. Indice de réfraction en fonction du band gap ( $E_g$ ) pour $\text{Al}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}$ . .....	96
IV. 1. Structure cristalline du quaternaire $\text{Al}_{0.03125}\text{Ga}_{0.4375}\text{In}_{0.53125}\text{As}$ .....	98
IV. 2. illustration des trois contraintes : (a) compression (b) accord de maille et (c) tension .....	99
IV. 3. Variation de l'énergie totale en fonction du volume pour $\text{Al}_{0.03125}\text{Ga}_{0.4375}\text{In}_{0.53125}\text{As}$ . .....	101
IV 4. Variation de l'énergie totale en fonction du volume pour $\text{Al}_{0.15625}\text{Ga}_{0.3125}\text{In}_{0.53125}\text{As}$ . .....	101
IV. 5. Variation de l'énergie totale en fonction du volume pour $\text{Al}_{0.28125}\text{Ga}_{0.1875}\text{In}_{0.53125}\text{As}$ .....	102
IV. 6. Variation du paramètre (a) en fonction de Al (x) pour $\text{Al}_x\text{Ga}_y\text{In}_{1-x-y}\text{As} / \text{InP}$ . .....	104
IV. 7. Contour du paramètre de maille en fonction des concentrations d'aluminium (x) et du galium (y) du $\text{Al}_x\text{Ga}_y\text{In}_{1-x-y}\text{As}/\text{InP}$ . Calculé par l'approximation (GGA- WC). .....	105
IV. 8. Variation du gap énergétique en fonction de Al (x) pour $\text{Al}_x\text{Ga}_y\text{In}_{1-x-y}\text{As} / \text{InP}$ calculé par les trois approximations (GGA-BPESol, GGA-EV et TB-mBJ). .....	109
IV. 9. Contour du gap énergétique en fonction des concentrations d'aluminium (x) et du galium (y) du $\text{Al}_x\text{Ga}_y\text{In}_{1-x-y}\text{As} / \text{InP}$ . Calculé par l'approximation (TB- mBJ). .....	110
IV.10. Structure des bandes des quaternaires calculées par l'approximation (TB-mBJ). .....	111
IV. 11. Variation des valeurs du gap calculées par l'approximation (TB-mBJ) du quaternaire $\text{Al}_x\text{Ga}_y\text{In}_{1-x-y}\text{As}$ avec et sans relation et l'iconicité en fonction de la concentration en aluminium (x). .....	112
IV.12. The ELF isosurface pour $\text{Al}_{0.03125}\text{Ga}_{0.4375}\text{In}_{0.53125}\text{As}$ (a), $\text{Al}_{0.15625}\text{Ga}_{0.3125}\text{In}_{0.53125}\text{As}$ (b) et $\text{Al}_{0.28125}\text{Ga}_{0.1875}\text{In}_{0.53125}\text{As}$ (c). .....	112
IV. 13. Densité d'états totale (TDOS) et partielle (PDOS) du $\text{Al}_{0.03125}\text{Ga}_{0.4375}\text{In}_{0.53125}\text{As}$ calculées par l'approximation (TB- mBJ). .....	114
IV. 14. Densité d'états totale (TDOS) et partielle (PDOS) du $\text{Al}_{0.15625}\text{Ga}_{0.3125}\text{In}_{0.53125}\text{As}$ calculées par l'approximation (TB- mBJ). .....	115
IV. 15. Densité d'états totale (TDOS) et partielle (PDOS) du $\text{Al}_{0.28125}\text{Ga}_{0.1875}\text{In}_{0.53125}\text{As}$ calculées par l'approximation (TB- mBJ). .....	116
IV. 16. La partie réelle de la fonction diélectrique $\epsilon_1(\omega)$ du quaternaire $\text{Al}_x\text{Ga}_y\text{In}_{1-x-y}\text{As}$ calculée par approximation (TB-mBJ). .....	119
IV.17. La partie imaginaire de la fonction diélectrique $\epsilon_2(\omega)$ du quaternaire $\text{Al}_x\text{Ga}_y\text{In}_{1-x-y}\text{As}$ calculée par approximation (TB-mBJ). .....	120

IV. 18. Variation de la constante diélectrique statique $\epsilon_1(\omega)$ en fonction (x) $Al_xGa_yIn_{1-x-y}As$ calculée par l'approximation (TB-mBJ).....	121
IV. 19. La variation du coefficient d'absorption $\alpha(\omega)$ du $Al_xGa_yIn_{1-x-y}As$ calculée par l'approximation (TB-mBJ). ....	122
IV.20. La variation de la conductivité optique $\sigma(\omega)$ de l' $Al_xGa_yIn_{1-x-y}As$ calculée par l'approximation (TB-mBJ).....	123
IV. 21. Evolution du spectre de l'indice de réfraction $n(\omega)$ pour for $Al_xGa_yIn_{1-x-y}As /InP$ .....	124
IV. 22. Evolution du spectre du coefficient d'extinction $k(\omega)$ pour $Al_xGa_yIn_{1-x-y}As/InP$ . ....	124
IV. 23. Variation de l'indice de réfraction $n(x)$ du quaternaire $Al_xGa_yIn_{1-x-y}As$ pour différentes concentrations x.....	126
IV. 24. Variation de l'indice de réfraction $n(E_g)$ du $Al_xGa_yIn_{1-x-y}As$ en fonction de la valeur du gap.127	
V. 1. Variation de la longueur d'onde en fonction de largeur du puits dans la structure.....	135
$Al_xGa_yIn_{1-x-y}As /InP$ pour différentes concentration x.....	139
V. 2. Variation de la longueur d'onde en fonction de largeur du puits (lz) dans la structure.....	140
$Al_xGa_yIn_{1-x-y}As /InP$ pour x=0.03125. ....	135
V. 3. Variation de longueur d'onde en fonction de la température de la structure $Al_xGa_yIn_{1-x-y}As /InP$ .....	136
V-4 : variation de longueur d'onde en fonction de la pression de la structure $Al_xGa_yIn_{1-x-y}As /InP$ ...	137
V.5 : Structure diode laser à unique puits quantique $Al_{0.03125}Ga_{0.4375}In_{0.53125}As/InP$ .....	137
V.6. Variation du facteur de confinement en fonction de la largeur de puits (lz) pour la structure $Al_{0.03125}Ga_{0.4375}In_{0.53125}As/InP$ . ....	138
V.7 : variation du gain normalisé $G_{max}/ \Gamma g_0$ en fonction de la densité de porteurs (n) avec $n_c=7.8.10^{11} cm^{-2}$ , $n_v=5.8.10^{12} cm^{-2}$ et $R=8.47$ .....	139
V.8 : Variation du gain normalisé en fonction de la température pour différents largeurs de puits pour la structure.....	140
V.9 : la variation en fonction de la largeur de puits pour une concentration de porteurs $10^{19} cm^{-1}$ . ...	140
V.10: variation du gain maximal en fonction de la densité du courant d'injection pour la structure $Al_{0.03125}Ga_{0.4375}In_{0.53125}As/InP$ .....	141
V.11 : schéma d'une structure (SQW) à base de structure $Al_{0.03125}Ga_{0.4375}In_{0.53125}As/InP$ susceptible d'émettre une longueur d'onde 1.30 nm.....	142
V-12: structure à multipuits quantiques (MQW).....	143
V.13. Variation du facteur du confinement en fonction de nombre de puits pour différentes valeurs de la barrière.....	144
V.14. La variation du facteur de confinement en fonction de largeur de barrière et le nombre de puits avec lz=3nm. ....	145
V.15. La variation du facteur de confinement en fonction de largeur de barrière et le nombre de puits avec lz=6 nm. ....	145
V.16. La variation du facteur de confinement en fonction de largeur de barrière et le nombre de puits avec lz =9 nm. ....	146

V.17 : variation du facteur de confinement en fonction la largeur et le nombre du puits pour trois de lb (60,100 et 150) nm. ....	147
V.18 : variation du gain maximal en fonction de densité du porteur et le nombre des puits ( 2, 4, 6, 8 et 10).....	149
V.19 : variation du gain maximal en fonction de la largeur de puits et de la barrière pour différents nombre de puits quantique n= 4, 6, 8et 10.....	151

## Listes d'abréviation

A	Paramètre de réseau
Ab-initio	Méthode de calcul théorique
Al	Aluminium
B	Module de compressibilité
b	Paramètre de courbure
BC	Bande de Conduction
BV	Bande de Valence
DOS	Densité d'état (states/eV cell).
DFT	Théorie de la fonctionnelle de la densité
EF	Niveau de Fermi
EOS	Équation d'état
eV	Électron Volt
Exp	Expérimentale
FP-LAPW	Méthode des ondes planes augmentées et linéarisées
Ga	Gallium
G max	Gain maximal
GGA	Approximation du gradient généralisé
BPE	Perdew, Burk et Ernzerhof
WC	Wu-Cohen
EV	Engel-Vodka
Gpa	Giga Pascal
$J_s$	Densité de Courant de seuil
$J_{th}$	Densité de courant de transparence
k	Coefficient d'extinction
LDA	Local Density Approximation
$L_b$	Largeur de la barrière puits
LEDs	Diodes électroluminescentes
$L_z$	Largeur de puits quantique
MBC	Minimum de la Bande de Conduction
MBE	Épitaxie par jet moléculaire (Molecular Beam Epitaxy)
MBV	Maximum de la Bande de Valence
MOVPE	Metal-Organic Vapor-Phase Epitaxy
MQW	Multiple Quantum Well
n	Indice de réfraction
$N_{tr}$	Densité de porteurs d'injection
P	Pression
PDOS	Densité d'états partielle
Q	Paramètre de Dingle
$R_{MT}$	Le plus petit rayon muffin-tin dans la cellule unitaire
Ryd	Rydberg
SQW	Single Quantum Well
T	Température
TB-mBJ	Tran-Blaha modified Becker-Johnson
TDOS	Densités d'état total
VCSEL	Vertical-Cavity Surface Emitting Laser
Win2k	
x	Fraction molaire

$y$	Fraction molaire
ZB	Zone de Brillouin
$\alpha$	Coefficient d'absorption
$\lambda$	Longueur d'onde
$\sigma$	Conductivité optique
$\Gamma$	Facteur de confinement
$\varepsilon$	Fonction diélectrique complexe
$\varepsilon_1$	Partie réelle de la fonction diélectrique
$\varepsilon_2$	Partie imaginaire de la fonction diélectrique
$\nu$	Fréquence de l'onde électromagnétique

# **Introduction générale**

### Introduction générale

Grâce à la perspective qui offre les calculs d'étude de premier-principes, une large gamme des semi-conducteurs avec les propriétés passionnantes ont été présentés théoriquement dans un effort de satisfaire la demande continue de nouveaux matériaux fonctionnels. En particulier, les développements et les applications des alliages à basés des composés des groupes II-VI et III-V.

Le développement des dispositifs microélectroniques et optoélectroniques dépend de la disponibilité des matériaux appropriés. Les matériaux semi-conducteurs III-V, binaires, ternaires et quaternaires, offrent une grande variété de propriétés électroniques et optiques pour choisir les applications technologiques particulières[1]. Pour cette raison, les propriétés électroniques et optiques de beaucoup de semi-conducteurs III-V ont été intensivement étudiées théoriquement et expérimentalement. Ces études montrent que les semi-conducteurs III-V présentent des propriétés optiques adaptés à la réalisation des dispositifs modernes tel que les cellules solaires, les diodes lasers, les détecteurs infrarouges, les détecteurs photoélectriques et modulateurs électro-optiques .etc.[2, 3]. Les alliages ternaires  $Al_{1-x}In_xAs$ ,  $Al_{1-x}Ga_xAs$  et  $In_{1-x}Ga_xAs$  font partie des matériaux semi-conducteurs III-V. Ces ternaires offrent donc de multiples possibilités, aussi bien pour microélectronique et pour l'optoélectronique, qu'ils offrent sur la conception et le développement de dispositifs totalement nouveaux par l'ajustement des structures de bandes [4]. Les ternaires  $Al_{1-x}In_xAs$ ,  $Al_{1-x}Ga_xAs$  et  $In_{1-x}Ga_xAs$  peuvent élaborer par la technique (MBE) [5, 6]. Aussi, le ternaire  $AlInAs$  a été développé par la technique(LPE) [7]. Cependant, pour élargir le domaine des applications technologiques, ces ternaires ont fait l'objet de nombreuses études expérimentales et théoriques. Emeny et al.[8] ont étudié le taux de désorption d'indium avec la technique de photoluminescence du ternaire  $GaInAs$ . Grenet et al. [9, 10] ont traité la ségrégation extérieure pour  $In_xGa_{1-x}As$  et  $In_xAl_{1-x}As$ .

Cependant, les ternaires sont les constituants du quaternaires  $Al_xGa_yIn_{1-x-y}As$  qui prestent un avantage par rapport à eux, de permettre le contrôle indépendant du paramètre de réseau et de la largeur de la bande interdite. D'autre part,  $Al_xGa_yIn_{1-x-y}As$  offre de nombreux intérêts pour les nouvelles générations de composants optoélectroniques bas coûts. La grande valeur de la discontinuité ( $Q=0.7$ ) des bandes de valence et conduction, cette discontinuité est exprimée par le paramètre de Dingle  $Q$ , favorise l'utilisation dans le domaine de l'optoélectronique ce quaternaire par rapport  $Al_xGa_yIn_{1-x-y}P$  ( $Q=0.5$ ). En plus,  $Al_xGa_yIn_{1-x-y}As$

est capable d'émettre autour de 1300 et 1550 nm. les quaternaires  $\text{Al}_x\text{Ga}_y\text{In}_{1-x-y}\text{As}$  peuvent élaborer par la technique (Metal-Organic Chemical Vapor Deposition) MOCVD et aussi peuvent être facilement développer sur l'InP par jet moléculaire MBE [11, 12]. Encore le quaternaire est susceptible d'émettre dans la gamme (800-1550) nm, cela s'effectue juste par le contrôle adéquat des concentrations (x, y). Il intéressant de noter que cette gamme spectrale est très utilisé dans le domaine de télécommunication. En émetteur de télécommunications optiques sur fibre, les plus couramment utilisées sont les diodes émettant autour de 800 nm pour les réseaux multimodes, et celles émettant autour de 1300 et 1550 nm pour les liaisons monomodes.

Notre travail concerne l'étude et l'optimisation des paramètres physiques de la structure AlGaInAs/InP pour une application aux lasers. En particulier, nous nous concentrons sur l'étude des propriétés optoélectroniques du quaternaire AlGaInAs et ses constituants (ternaires et binaires) et le binaire InP. Dans le but de récolter le maximum d'information pour concevoir une diode laser à puits quantiques.

À cette optique notre travail s'articulera autour de cinq chapitres :

Dans premier le chapitre, nous rappellerons les fondements de la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) et code wien2k.

Le deuxième le chapitre, il s'agira de donner les généralités sur les diodes laser et en particulier les diodes laser à puits quantiques. Nous présenterons aussi les relations donnant le facteur de confinement, le gain optique et le courant de seuil de la diode laser à puits quantique, et nous donnerons quelques différentes diodes laser réalisées.

Dans le troisième chapitre, nous calculeront les différentes propriétés telles que les propriétés structurales, électroniques et optiques des trois ternaires  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ ,  $\text{Al}_x\text{In}_{1-x}\text{As}$  et  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ , et leurs composés parents afin d'exploiter ces résultats. En se basant dans cette étude, sur la méthode ab-initio (FP-LAPW implanté dans le code Wien2k.

Dans le quatrième chapitre, nous traitons les différentes propriétés telles que les propriétés structurales, électroniques et optiques de la structure AlGaInAs /InP pour but d'employer les résultats obtenus pour l'optimisation physique d'une diode a puits quantiques.

Dans le dernier, nous procédons à l'optimisation de la structure en discussion à savoir les paramètres intrinsèques (épaisseur de puits quantique.) et les paramètres extrinsèques (température et pression.). Nous exploiterons ces résultats à fin de concevoir un dispositif optoélectroniques (diode laser à puits quantiques) basés sur AlGaInAs/InP. Nous terminerons par une conclusion générale.

### Références

- [1] A. Bouhemadou, S. Bin-Omran, D. Allali, S. Al-Otaibi, R. Khenata, Y. Al-Douri, M. Chegaar, A. Reshak, *Materials Research Bulletin*, 64 (2015) 337-346.
- [2] M. Xu, Y. Li, B. Yao, Z. Ding, G. Yang, *Physics Letters A*, 378 (2014) 3382-3388.
- [3] N. Noor, N. Ikram, S. Ali, S. Nazir, S. Alay-e-Abbas, A. Shaukat, *Journal of Alloys and Compounds*, 507 (2010) 356-363.
- [4] H. Mathieu, H. Fanet, *Physique des semiconducteurs et des composants électroniques-6ème édition: Cours et exercices corrigés*, Dunod, 2009.
- [5] G. Davies, T. Kerr, C. Tuppen, B. Wakefield, D. Andrews, *Journal of Vacuum Science & Technology B*, 2 (1984) 219-223.
- [6] J. Nagle, J. Landesman, M. Larive, C. Mottet, P. Bois, *Journal of crystal growth*, 127 (1993) 550-554.
- [7] T. Tanahashi, K. Nakajima, A. Yamaguchi, I. Umebu, *Applied Physics Letters*, 43 (1983) 1030-1032.
- [8] M. Emeny, L. Howard, K. Homewood, J. Lambkin, C. Whitehouse, *Journal of crystal growth*, 111 (1991) 413-418.
- [9] G. Grenet, E. Bergignat, M. Gendry, M. Lapeyrade, G. Hollinger, *Surface science*, 352 (1996) 734-739.
- [10] J.-M. Gérard, *Journal of crystal growth*, 127 (1993) 981-985.
- [11] S. Adachi, *Properties of semiconductor alloys: group-IV, III-V and II-VI semiconductors*, John Wiley & Sons, 2009.
- [12] R. Wyckoff, in, Malabar, 1986.

# CHAPITRE 1

## La théorie de la fonctionnelle de la densité

## Chapitre I : Théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT)

### I.1. INTRODUCTION

L'étude du fonctionnement des différents types de composants électroniques passe par une maîtrise préalable des phénomènes physiques régissant les propriétés des électrons dans le semi-conducteur. En outre, les composants modernes faisant appel à des structures complexes, par ailleurs, la réalisation pratique devient de plus en plus difficile à cause de non garantie d'aboutir à des bons résultats et aussi le coût élevé.

Par ailleurs, la nécessité de recourir à des méthodes théoriques afin de prédire de nouveaux composants est devenue indispensable, il s'agit de la simulation.

Avec l'apparition d'ordinateurs puissants, de nouvelles méthodes de simulation numérique classiques (la dynamique moléculaire, la Monté Carlo) ou quantiques (ab-initio, semi-empirique ou empirique) ont été développées.

Les méthodes classiques peuvent être déterministes ou stochastiques telles que la dynamique moléculaire ou la méthode de Monté Carlo. Elles sont utilisées dans le calcul des propriétés thermodynamiques, structurales et mécaniques des matériaux. Elles reposent sur des modèles empiriques classiques qui permettent la description macroscopique du solide.

Contrairement aux méthodes classique, les méthodes quantiques malgré qu'elles sont limitées aux nombres d'atomes, permettent d'accéder aux propriétés microscopiques des matériaux. Ces méthodes sont divisées en trois familles, les méthodes empiriques, les méthodes semi empiriques et les méthodes ab-initio. Le problème majeur dans toutes ces méthodes est de trouver le potentiel d'interaction. Les méthodes empiriques nécessitent des données expérimentales afin d'ajuster les pseudo-potentiels à l'expérience, dans cette méthode, il est bien clair qu'on ne peut pas précéder l'expérience, c'est l'inconvénient majeur de cette méthode.

Un autre inconvénient, lorsqu'on veut étudier des alliages, ici, malgré que les résultats sont bons pour les binaires, il est difficile de savoir si les paramètres du potentiel des binaires sont transférables pour leurs alliages ternaires, quaternaire ou plus. Les méthodes semi empiriques, nécessitent les paramètres atomiques et des données expérimentales pour la détermination des structures de bandes.

Enfin les méthodes ab-initio sont basées sur la résolution de l'équation de Schrodinger. Dans ces méthodes, les données expérimentales ne sont pas nécessaires, il suffit d'introduire le numéro atomique  $Z$ . Il intéressant de noter que le premier principe signifie que la seule information d'entrée exigée est les nombres atomiques ( $Z$ ) des constituants du système.

On distingue essentiellement trois catégories de méthodes pour la résolution de l'équation de Schrödinger.

Les méthodes basées sur une combinaison linéaire d'orbitales atomiques (LCAO) utilisables, par exemple, pour les bandes «d» des métaux de transition.

Les méthodes dérivées des ondes planes orthogonalisées (OPW) mieux adaptées aux bandes de conduction de caractère « s-p » des métaux simples.

Les méthodes cellulaires du type ondes planes augmentées (APW) et la méthode de la fonction de Green de Korringa, Kohn et Rostoker (KKR) applicables à une plus grande variété de matériaux. Et enfin les méthodes linéarisées mises au point par Andersen (FP-LAPW) ondes planes augmentées linéarisées (FP-LAPW) et orbitales «muffin-tin » linéarisées (LMTO), permettent de gagner plusieurs ordres de grandeur dans les temps de calcul.

### **I. 1. 2. La théorie de fonctionnelle de la densité (DFT)**

La physique de l'état solide a pour but de décrire et d'expliquer les propriétés électroniques des systèmes d'électrons en interaction et cela en se basant sur la mécanique quantique. Cependant à cause du nombre important des interactions la résolution de l'équation de Schrödinger devient une tâche très difficile. Pour cela, les approximations de calculs ne cessent de se développer depuis la première approximation faite par Dirac (1929) dont le but est de simplifier la résolution de l'équation caractéristique du système à plusieurs particules. Pour cette raison, le développement de la théorie de la densité fonctionnelle [1, 2] (DFT) couplé avec l'approximation de la densité locale (LDA) a été mis en place pour résoudre ce type de problèmes et pour résoudre ainsi les systèmes les effets électroniques à N corps.

Actuellement, le développement de la théorie de la fonctionnelle de la densité implanté dans plusieurs codes permet d'étudier des structures de bandes électronique.

Cependant, la connaissance des structures de bandes permet d'obtenir des informations sur plusieurs propriétés telles que les propriétés structurales, électroniques optiques, mécanique et thermodynamiques des corps solides et en particulier les semi-conducteur III-V. Dans la recherche scientifique, la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) a pris une place très importante par rapport aux méthodes utilisées pour la description de la structure électronique des systèmes complexes. L'avantage de cette méthodes c'est l'introduction de façon simple et efficace les effets électroniques à N corps, ce qui permet d'atteindre une description quantitative précise. Autre avantage, la DFT permet étudier les systèmes complexes au niveau quantique [3].

La théorie de la densité fonctionnelle (DFT) est basée sur le théorème de Hohenberg et Kohn [4] qui repose sur la considération suivante : l'énergie d'un système est une fonctionnelle de la densité électronique. Donc avec la DFT, le problème à N corps est simplifié, car on n'a pas besoin de connaître toutes les fonctions d'ondes mais seulement la densité électronique. Par conséquent, l'énergie totale  $E$  d'un système d'électrons en interaction dans un potentiel extérieure est représenté comme une fonctionnelle de la densité électronique de l'état fondamental,  $\rho$ , soit :

$$E = E(\rho) \quad (\text{I-2})$$

Hohenberg et Kohn ont montré que la densité de l'état fondamental n'est autre que la densité qui minimise  $E(\rho)$ , et toutes les propriétés sont fonctionnelles de cette densité fondamentale. Pour les systèmes à spin polarisé, l'énergie totale et les autres propriétés de l'état fondamental deviennent une fonctionnelle des deux densités de spin haut (up) et bas (down) ( $\rho\uparrow, \rho\downarrow$ ) :

$$E = E[\rho\uparrow, \rho\downarrow] \quad (\text{I-3})$$

Cependant, le théorème de Hohenberg-Kohn [4] ne donne pas une expression bien définie de cette fonctionnelle  $E(\rho)$ . Dans ce contexte, la DFT intervient pour résoudre ce problème par l'exposition de plusieurs approximations dans le but de déterminer cette fonctionnelle inconnue.  $E(\rho)$  sera donnée comme étant la somme de l'énergie total de Hartree, l'énergie d'échange et de corrélation  $E_{xc}(\rho)$  et de plusieurs autres termes :

$$E(\rho) = T_s(\rho) + E_H(\rho) + E_{ii}(\rho) + E_{ei}(\rho) + E_{xc}(\rho) \quad (\text{I-4})$$

Où  $T_s(\rho)$  : l'énergie cinétique d'une particule unique,  $E_{ei}(\rho)$  : l'énergie d'interaction entre électrons – ion (coulombienne),  $E_{ii}(\rho)$  : l'énergie d'interaction ion – ion,  $E_H(\rho)$  : l'énergie de Hartree produite par l'interaction électron – électron et  $E_{xc}(\rho)$  : l'énergie d'échange et de corrélation.

L'énergie de Hartree définit les interactions entre les électrons :

$$E_H(\rho) = \frac{e^2}{2} \int \frac{\rho(r)\rho(r')}{|r-r'|} d^3r d^3r'. \quad (\text{I-5})$$

### I. 1. 3. L'Approximation de la densité locale (LDA)

L'approximation de la densité local ou LDA (Local Density Approximation) [5] considère le potentiel d'échange et corrélation comme une quantité locale, définie en un point  $r$ , dépendant faiblement des variations de la densité autour de ce point  $r$  [6, 7]. Ainsi, en un point  $r$  auquel correspond une densité  $\rho(r)$ , il sera associé un potentiel d'échange et corrélation comparable à celui d'un gaz homogène d'électrons de même densité  $\rho(r)$ . L'énergie d'échange et corrélation  $E_{xc}^{LDA}(\rho)$  s'exprime alors de la manière suivant :

$$E_{xc}^{LDA}(\rho) = \int \rho(r)\varepsilon_{xc}\rho(\vec{r}) d\vec{r} \quad E_{xc}^{LDA}(\rho) = \int \rho(r)\varepsilon_{xc}\rho(\vec{r}) d\vec{r} \quad (\text{I-6})$$

$$E_{xc} = \varepsilon_x(\rho) + \varepsilon_c(\rho) \quad (\text{I-7})$$

Le terme d'échange  $\varepsilon_x(\rho)$ , appelé échange de Dirac [8], est connu exactement par la relation suivante :

$$E_{xc} = -\frac{3}{4} \left( \frac{3}{\pi} \rho(\vec{r}) \right)^{\frac{3}{4}} \quad (\text{I-8})$$

La partie corrélation  $\varepsilon_c(\rho)$  ne peut être exprimée de manière exacte. L'approximation de ce terme est basée sur l'interpolation de résultats de calculs Monte-Carlo quantique de Ceperley et al. [9]. Aujourd'hui, il existe dans la littérature des para- métrisations,

numériques ou analytiques de  $\varepsilon_c(\rho)$  comme celle de Hedin et Lundqvist(1971) [10] ou Perdew et al.[11].

En utilisant la LDA (équation I.7) pour une molécule ou un solide on suppose implicitement que l'on peut obtenir l'énergie d'échange-corrélation pour un système inhomogène en considérant le gaz d'électrons comme homogène dans des portions infinitésimales de celui-ci. On peut alors appliquer localement à ces régions les résultats du gaz homogène et la sommation de ces contributions individuelles  $\rho(\mathbf{r})\varepsilon_{xc}\rho(\vec{r}) d\vec{r}$  donne une valeur approchée de l'échange-corrélation du système inhomogène.

Il va de soi que la validité de LDA suppose des systèmes où la densité électronique ne varie pas trop rapidement. L'efficacité de cette approximation est apparue à partir des années 1977 avec les travaux de Zunger et Freeman [12], ainsi que ceux de Moruzzi et al. (1978) [13].

Enfin, notons qu'un précurseur de la LDA a été introduit par Slater en 1951 [14] où il proposa la méthode  $X_\alpha$  comme une simplification de la méthode Hartree-Fock. Cette simplification aboutit à l'équation suivante :

$$\left(-\frac{\hbar^2}{m_i}\nabla_j^2 + V_{en} + V_{Hartree}(\vec{r}) + V_{x\alpha}^{LDA}(\vec{r})\right)\varphi_j(\vec{r}) = \varepsilon_j\varphi_j(\vec{r}) \quad (I.9)$$

Avec le potentiel local  $V_{X\alpha}$ :

$$V_{xc}(\rho) = -\frac{3}{4}\alpha\left(\frac{3}{\pi}\rho(\vec{r})\right)^{\frac{1}{3}} \quad (I.10)$$

Dans l'équation (I.10),  $\alpha$  désigne un paramètre qui a été initialement pris comme étant égal à 1. Par la suite il a été évalué pour tous les atomes neutres par Schwarz [15]. Il faut aussi noter que Kohn et Shamont réalisé que l'équation  $X_\alpha$  était équivalente à la LDA, si la corrélation était ignorée et si en plus  $\alpha=2/3$ . La méthode  $X_\alpha$  peut donc être considérée comme un formalisme de fonctionnelle de densité, qui néglige la corrélation et dont l'énergie est donnée par ;

$$E_x^{LDA}[\rho] = -\frac{9}{8}\alpha\left[\frac{3}{4}\right]^{\frac{1}{3}}\int\rho(r)^{\frac{1}{3}}d\vec{r} \quad (I-11)$$

### I. 1. 4. L'approximation du gradient généralisé GGA :

La source d'erreurs de la LDA provient de l'énergie d'échange qui est souvent sous-estimée tandis que l'énergie de corrélation est souvent surestimée même si, en valeur absolue, sa contribution à l'énergie totale est plus petite. Afin d'améliorer la précision des calculs DFT, des corrections ont été introduites à la (LDA) reposent sur l'idée qui consiste à tenir en compte les variations locales de la densité. Pour corriger l'incertitude liée à la LDA, certains auteurs ont eu l'idée de définir une fonctionnelle de la densité qu'ils ont associée à ses dérivées propres dans le but de prendre en compte l'inhomogénéité du système. Dans un premier temps, la LDA fut traitée comme le premier terme d'un développement en série de Taylor

$$E_{xc}^{GAE}[\rho] = \int \varepsilon_{xc}^{GEA}(\rho(r))\rho(r) dr + \int C_{xc}(\rho(r)) \frac{|\nabla\rho(r)|}{\rho^4(r)} dr + \dots \quad (\text{I- 12})$$

Cette forme de fonctionnelle est l'approximation du gradient (GEA ou *Gradient Expansion Approximation* en anglais). Il a été constaté que l'introduction de GEA dans les calculs, donne de plus mauvais résultats que la LDA. En effet, le trou d'échange-corrélation ne satisfait plus les conditions qui assuraient à la LDA un certain sens physique. Afin de corriger ces problèmes, le gradient de la densité d'électronique a été introduit donnant la naissance de l'approximation du gradient généralisé GGA, dont l'énergie d'échange et de corrélation est une fonction de la densité d'électron et de son gradient

$$E_{xc}^{GGA}[\rho; \nabla\rho] = \int \varepsilon_x^{GGA}(\rho, \nabla\rho) + \varepsilon_c^{GGA}(\rho, \nabla\rho) \quad (\text{I-13})$$

Le problème majeur de la LDA provenant de l'échange, une attention toute particulière fut portée sur le développement de cette partie :

$$E_{xc}^{GGA}(\rho; \nabla\rho) = \varepsilon_x^{LDA} - \int F(s(r)) \rho^{3/4}(r) dr \quad (\text{I-14})$$

Où  $F$  est une fonction du gradient de densité réduite (sans dimension) :

$$s(\mathbf{r}) = \frac{|\nabla\rho(\mathbf{r})|}{\rho^{3/4}(\mathbf{r})} \quad (\text{I-15})$$

Il est intéressant à noter que plusieurs formalismes ont été proposés pour inclure la GGA (Generalized Gradient Approximations). Parmi ces formalismes (approximations), on cite (GGA-PBE) proposé par Perdew, Burke, et Ernzerhof [16], (GGA-WC) développée par Wu-Cohen [17], (BPESol-GGA) [18] de Perdew et al. (GGA-EV) proposé Engel-Vodka [19] et la plus récente approximation appelée (TB-mBJ) Tran-Blaha modified Becker-Johnson [20]. Plusieurs chercheurs jugent que l'introduction de la GGA dans les calculs des propriétés du semi-conducteur, a conduit au bon résultat [21].

#### **I. 1. 4. 1. Approximation GGA-WC**

En 2006, Z. Wu et R.E. Cohen (WC) [17] ont proposé une nouvelle approximation (GGA) de la fonctionnelle d'énergie-échange, utilisée en combinaison avec l'approximation (PBE-GGA) de la fonctionnelle d'énergie-corrélation [22]. Elle a apporté une amélioration significative par rapport (LDA) [23] et PBE [22] pour les paramètres de réseau et module de compressibilité de solides. L'approximation (GGA-WC) a des caractéristiques intéressantes, principalement parce que c'est une approximation facile à mettre en œuvre, son calcul est efficace et ne contient pas de paramètre ajustable.

#### **I. 1. 4. 2. Approximation GGA-EV**

Cette approximation est développée dans le but, de corriger la lacune majeure dans les deux approximations (GGA et LDA), est l'estimation de la valeur du gap énergétique, qui est essentiellement due au terme de corrélation qui est jugé trop simple. Engel et Voskoon montré Engel [19], que La GGA ne s'améliore pas sur l'expansion du second ordre du gradient généralisé due à la plupart du temps à l'annulation des erreurs locales, d'où la correction apportée au terme de corrélation, on mixe le second ordre du gradient généralisé avec le terme exacte de corrélation de Hartree-Fock. Cette nouvelle forme dite (EV-GGA) [19] s'avère meilleur pour le calcul du gap, mais malheureusement elle demeure pauvre si on s'intéresse aux calculs de l'énergie fondamentale en fonction des paramètres structurales.

### I. 1. 4. 3. Approximation (TB-mBJ)

Beaucoup de chercheurs ont montré que l'introduction du potentiel d'échange et de corrélation de semi-local de Beecke-Johnson (mBJ) et sa nouvelle forme modifiée par Tran et Blaha (TB-mBJ) [20] donne des bons résultats pour les valeurs du gap énergétiques des semi-conducteurs et les isolants. Cette nouvelle approximation a amélioré les résultats obtenus par la (EV-GGA) et a donné des résultats comparables parfaitement avec l'expérience [24, 25, 26].

### I. 1. 5. La solution des équations de Kohn-Sham d'une seule particule

Dans la méthode LAPW, les orbitales de KS sont données par :

$$\varphi_i(r) = \sum C_{i\alpha} \phi_\alpha(r) \quad (\text{I-16})$$

Tel que  $\phi_\alpha(r)$  sont les fonctions de base et les  $C_{i\alpha}$  représentent les coefficients de développement.

Après le choix de la base, ils restent ces coefficients comme seules variables dans le problème (on note que la densité dépend seulement des orbitales de Kohn et Sham) et l'énergie totale dans la DFT est variationnelle. La solution des équations de KS consiste à déterminer les  $C_{i\alpha}$  pour les orbitales occupées qui minimisent l'énergie totale. Pour éliminer la fonctionnelle inconnue  $T_s[\rho]$ , on utilise les valeurs propres de la particule unique :

$$E[\rho] = E_{ii}[\rho] + \sum_{occ} \varepsilon_i + E_{xc}[\rho] - \int \rho(r) \left( V_{xc}(r) + \frac{1}{2} V_H(r) \right) d^3r \quad (\text{I-17})$$

Où la somme est calculée sur toutes les orbitales occupées, et  $\rho$ ,  $V_H$ , et  $V_{xc}$  sont données par les équations (I-7), (I-8) et (I-9) respectivement.

Pour la majorité des approximations, le calcul de la fonctionnelle de densité (voir Fig. I-1) l'optimisation des  $C_{i\alpha}$  et la détermination de la densité de charge self-consistance se font indépendamment. Dans Fig. I-1, il est nécessaire de déterminer d'une façon répétitive les  $C_{i\alpha}$  qui résident les équations d'une seule particule (Eq.I-16) pour une densité de charge fixe. En utilisant quelques techniques numériques standard de matrices, on peut construire l'équation séculaire donnée par :

$$(H - \varepsilon_i S) C_i = 0 \quad (\text{I-18})$$

### I. 1. 6. La procédure de calculs de la DFT

Pour simplifier les calculs, en résolvant les équations de KS pour les points de symétrie dans la première zone de Brouillon. Ces solutions s'obtiendront d'une manière itérative en utilisant un cycle d'itérations auto-cohérent illustré par l'organigramme de la Fig.1. On commence par une densité d'essai  $\rho_{\text{int}}$  pour la première itération. Typiquement on utilise une superposition des densités atomiques puis on calcule la matrice de Kohn-Sham, et en résolvant les équations pour les coefficients d'expansion pour obtenir les orbitales de Kohn-Sham, à cette étape, en calculant la nouvelle densité  $\rho_{\text{out}}$ . Si la densité ou l'énergie a beaucoup changé (Critère de convergence), on retourne à la première étape, et en mélangeant les deux densités de charge  $\rho_{\text{int}}$  et  $\rho_{\text{out}}$  de la manière suivante :

$$\rho_{\text{in}}^{i+1} = (1 - \alpha)\rho_{\text{in}}^i + \alpha\rho_{\text{out}}^i \quad (\text{I-19})$$

Où l'indice  $i$  représente le nombre de l'itération et  $\alpha$  le paramètre de mixage. Si  $\alpha$  est suffisamment petit les itérations convergent. Cependant, le rayon de convergence devient rapidement petit quand la dimension de la cellule unitaire augmente, particulièrement pour les systèmes métalliques. Plusieurs méthodes de calcul ont été mises en évidence, parmi ces méthodes on cite la méthode de Broyden (1965) qui est montrée dans la Fig. (I-1). Ce processus commence par une superposition de densités atomiques pour construire la densité cristalline initiale  $\rho^{\text{int}}(r)$ , cette densité est utilisée par la suite pour calculer le potentiel  $V(r)$  qui est utilisé dans la résolution des équations de Kohn et Sham d'une seule particule et la détermination de l'énergie de Fermi. Après cette étape, une nouvelle densité de sortie est créée et testée suivant certaines conditions de convergence. Si cette densité obéit à ces conditions, on s'arrête, sinon on mixe les densités de sortie et d'entrée suivant l'équation (I.14) et le processus se répète jusqu'à ce que la convergence soit réalisée. La Fig. (I-1) montre le cycle self-consistent dans le calcul de la fonctionnelle de densité.

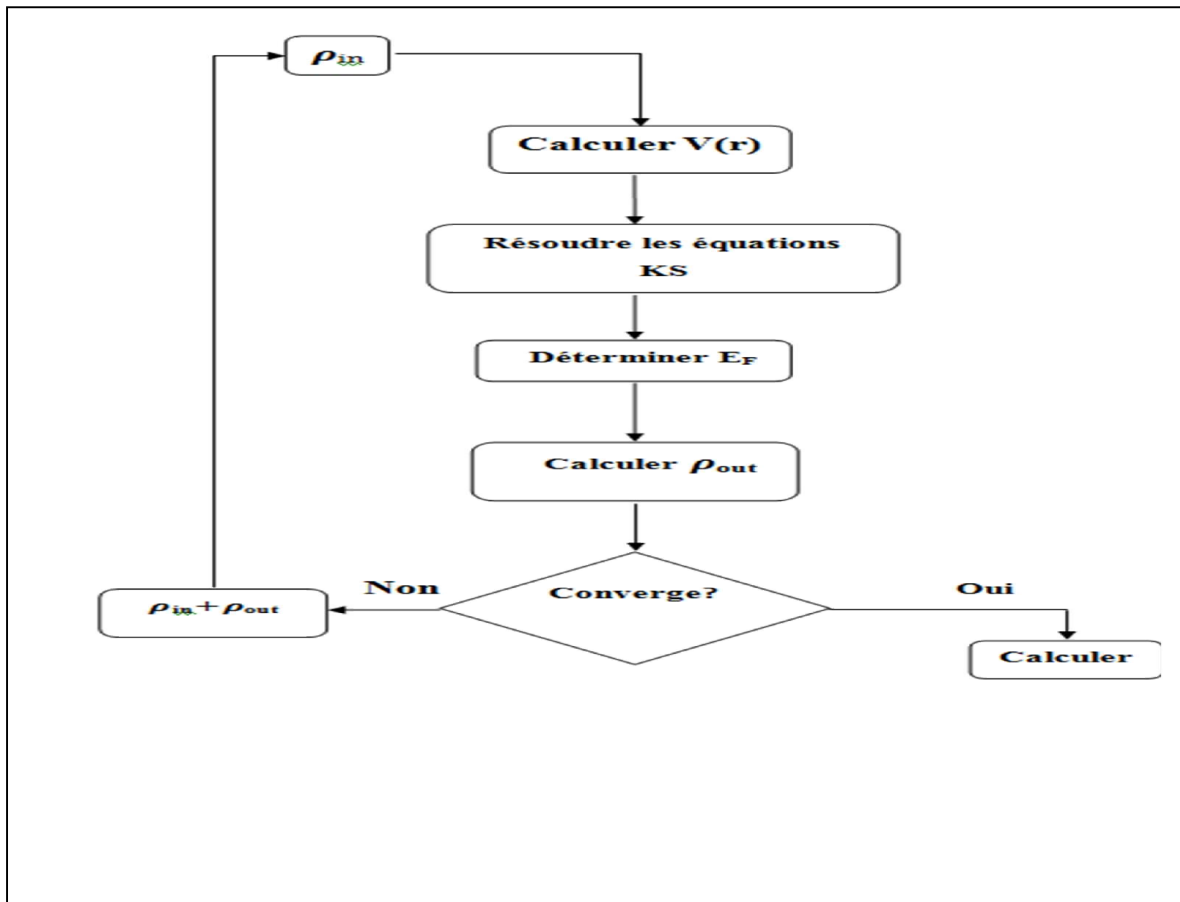


Fig.I.1. Le cycle self-consistent dans le calcul de la fonctionnelle de densité [3].

### I. 1.7. Les systèmes à spin polarisés

Dans le cas des systèmes à spin polarisé, la densité de charge  $\rho(r)$  est décomposée en deux densités de spin haut (up) et bas (down), elle s'écrit comme suit :

$$\rho(r) = \rho\uparrow(r) + \rho\downarrow(r) \quad (\text{I-20})$$

L'énergie totale devient une fonctionnelle variationnelle des deux densités de spin :

$$E = E[\rho\uparrow, \rho\downarrow] \quad (\text{I-21})$$

Dans l'expression de l'énergie totale (I-6). Le terme coulombien reste une fonctionnelle de la densité totale, mais l'énergie cinétique  $T_S$  et  $E_{XC}$  deviennent fonctionnelle des deux densités de spin. Le principe variationnel est utilisé pour la détermination des équations de Kohn et Sham.

$$\{T + V_{ei}(r) + V_H(r) + V_{xc,\sigma}(r)\} \varphi_{i\sigma}(r) = \varepsilon_{i\sigma} \varphi_{i\sigma}(r) \quad (\text{I-22})$$

Où  $\sigma$  est l'indice du spin et :

$$\rho\sigma(r) = \sum_{occ} \varphi_{i\sigma}^*(r) \varphi_{i\sigma}(r) \quad (I-23)$$

Le potentiel d'échange et de corrélation est donnée par :

$$V_{xc,\sigma} = \frac{\delta E_{xc}[\rho\uparrow, \rho\downarrow]}{\delta \rho_{\sigma}(r)} \quad (I-24)$$

L'expression de l'énergie totale devient alors :

$$E[\rho] = E_{ii}[\rho] + \sum_{occ} \varepsilon + E_{xc}[\rho\uparrow, \rho\downarrow] - \frac{1}{2} \int \rho(r) V_H(r) d^3r - \int (\rho_{\uparrow}(r) V_{xc,\uparrow}(r) + \rho_{\downarrow}(r) V_{xc,\downarrow}(r)) d^3r \quad (I-25)$$

## I. 2. La méthode des ondes planes augmentées linéarisées (FP-LAPW)

### I. 2. 1. La méthode des ondes planes augmentées (APW)

LA méthode APW (Augmented plane wave) a été proposée par Slater 1937 [27] et qui était conçue pour pallier au problème des conditions aux limites inhérentes aux autres méthodes. Dans cette méthode Slater a recommandé que la solution de l'équation de Schrödinger pour un potentiel constant soit une onde plane, tandis que pour un potentiel sphérique c'est une fonction radiale. Cependant, le potentiel cristallin est supposé sphérique basée sur l'approximation de Muffin-Tin. Selon cette approximation le système se divise en deux régions, illustré sur la Fig. (I.2).

La première région est prise près du noyau atomique, possédant une forme sphérique de rayon  $R_s$ , où le potentiel cristallin à symétrie sphérique a la même forme que les fonctions d'onde sont des fonctions radiales, elles sont similaires à ceux d'un atome isolé.

La deuxième région est la région interstitielle, où le potentiel est considéré constant et les fonctions d'ondes utilisées sont des ondes planes. Les deux régions sphériques et interstitielles sont comme suit :

$$\varphi(r) = \begin{cases} \frac{1}{\Omega^{1/2}} \sum_G C_G e^{i(G+K)r} & r \in I \\ \sum_{lm} A_{lm} U_l(r) Y_{lm}(r) & r \in S \end{cases} \quad (I-26)$$

$\varphi(r)$  est la fonction d'onde,  $\Omega$  est le volume de la maille unité,  $Y_{lm}(r)$  sont des harmoniques sphériques  $C_G$  et  $A_{lm}$  sont des coefficients d'expansion,  $k$  est le vecteur d'onde dans la zone de Brillouin irréductible (IBZ),  $G$  est le vecteur de l'espace réciproque

$U_l(r)$  est la solution régulière de l'équation de Schrödinger donnée par :

$$\left( -\frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{r^2} + V(r) - E_l \right) r U_l(r) = 0 \quad (\text{I-27})$$

$E_l$  est un paramètre et  $V(r)$  est le composant sphérique du potentiel dans la sphère. Les fonctions radiales définies par l'équation (I.22) sont automatiquement orthogonales à chaque état propre du même Hamiltonien qui disparaît sur la limite de la sphère (Anderson 1975) [28]. Ceci peut être observé à partir de l'équation de Schrödinger suivante :

$$(E_2 - E_1) r U_1 U_2 = U_2 \frac{d^2 r U_1}{dr^2} - U_1 \frac{d^2 r U_2}{dr^2} \quad (\text{I-28})$$

Où  $U_1$  et  $U_2$  sont les solutions radiales à différentes énergies  $E_1$  et  $E_2$ , respectivement. Le chevauchement est construit en utilisant la relation (I-23) et en intégrant par parties. Slater a fait un choix particulier pour les fonctions d'ondes [29], il montre que les ondes planes sont les solutions de l'équation de Schrödinger dans le cas d'un potentiel constant, tandis que les fonctions radiales sont les solutions dans le cas d'un potentiel sphérique, donc il prouve que  $E_l$  est égale à la valeur propre. Par conséquent, l'approximation du potentiel la plus raisonnable est en effet, l'approximation Muffin-Tin (MT). En effet, cette approximation est souvent utilisée dans les codes APW [30]. Cette approximation (MT) donne des résultats très satisfaisants surtout pour les structures compacts (fcc et hcp). Pour les structures bcc, cette approximation donne des résultats pas totalement mauvais mais plus ou moins raisonnables [31] alors que, dans le cas où les sites de symétries et les coordinations sont faibles, cette méthode est déconseillée [3].

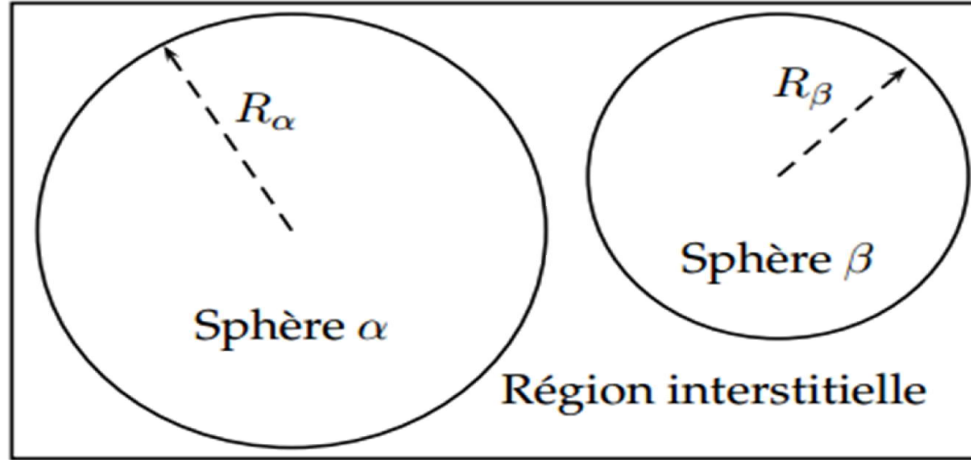


Fig. I. Répartition de la cellule unitaire, une région interstitielle  $\alpha$  et des régions sphériques  $\beta$ , respectivement. Fig. est tirée de la Réf.[32].

Le problème de cette méthode se trouve dans l'expression (I-21), qui n'assure pas la continuité de l'énergie cinétique à la limite de la sphère, par conséquent, il est essentiel d'éliminer cette contrainte dans la méthode, en définissant les coefficients  $A_{lm}$  en termes de  $C_G$  à travers le développement des harmoniques sphériques des ondes planes.

$$A_{lm} = \frac{4\pi i^l}{\Omega^{1/2} U_l(R)} \sum_G C_G j_l(|k+g|R) Y_{lm}^*(k+G) \quad (\text{I-29})$$

Où l'origine est prise au centre de la sphère.

R : présente le rayon de la sphère.

A partir de l'équation (I-24), les  $A_{lm}$  sont déterminés par les coefficients  $C_G$  des ondes planes et les paramètres de l'énergie  $E_l$ . Ces deux termes sont des coefficients variationnels dans la méthode APW. Les fonctions d'ondes qui sont représentées par l'indice  $G$  et qui possèdent les deux formes, une onde plane dans la région interstitielle et une fonction radiale dans la région sphérique, sont appelées les ondes planes augmentées (APW's).

La méthode APW ainsi construite représente quelques difficultés :

Premièrement, dans le cas où  $E_l$  est pris comme un paramètre fixe plutôt qu'un paramètre variationnel, les APWs sont utilisées seulement comme des bases, ce qui nous mène à résoudre l'équation séculaire. Mais les APW's ne sont pas orthogonales, par conséquent, ceci entraîne un chevauchement non-trivial (S), en plus ce manque de liberté variationnelle

dû à la fixation de l'énergie  $E_l$  conduit à un sérieux problème, où les bandes d'énergies ne peuvent pas être obtenues par une seule diagonalisation.

Deuxièmes, un autre problème rencontré dans la méthode APW est celui de l'asymptote, dans l'expression (I. 24),  $U_l(r)$  apparaît dans le dénominateur, donc il est possible de trouver des valeurs pour les paramètres d'énergie  $E_l$ , pour lesquelles  $U_l(r)$  s'annulent sur les limites de la sphère. En plus, les ondes planes et les fonctions radiales deviennent découplées au niveau de ces énergies. D'autre part, quand les bandes apparaissent près des asymptotes, ceci entraînera des calculs numériques très compliqués.

### **I. 2. 2. La méthode linéaire des ondes planes augmentées (LAPW)**

Afin de surmonter les problèmes liés à la méthode APW, plusieurs modifications ont été apportées sur cette méthode. Andersen (1975), [33] a étendu le travail de Koelling et al. [34], il proposa une méthode dans laquelle les fonctions de base et leurs dérivés sont continus en les égalisant pour  $E_l$  fixe. Ce choix résout les problèmes rencontrés dans la précédente méthode (APW) et donnant naissance à une méthode de structure de bandes flexible, cette méthode est appelée la méthode linéaire des ondes planes augmentées (LAPW).

La puissance et l'exactitude de cette méthode ont été largement démontrées à travers des séries de calculs de surface absorbées, et de structures électroniques, par plusieurs auteurs tels que Japsen et al. [35], Krakaver et al. [36], et Hamann et al. [37]. Ils ont prouvé que c'est la méthode la plus adaptée pour les calculs de la structure de bandes électroniques. Dans cette méthode (LAPW), pour trouver la densité de l'état fondamental, l'énergie totale et les valeurs propres d'un système à plusieurs électrons, le système est divisé en deux régions :

La première région présente les sphères atomiques non chevauchées centrées (I) autour des sites atomiques.

La deuxième présente une région interstitielle (II), comme dans la méthode APW. Pour la construction des fonctions de base, l'approximation muffin-tin est aussi utilisée ; son potentiel est supposé avoir une symétrie sphérique à l'intérieur des sphères I mais constant à l'intérieur II.

### I. 2. 2.1. Les propriétés de base

Dans la méthode LAPW les bases à l'intérieur de la sphère sont des combinaisons linéaires de fonctions radiales  $u_l(r) Y_{lm}(r)$  et leurs dérivées par rapport à l'énergie. Les  $U_l$  sont définis exactement comme dans l'APW avec  $E_l$  fixe (I-27). La dérivée de  $U_l$  par rapport à l'énergie s'écrit comme suit :

$$\left\{ -\frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{r^2} + V(r) - E_l \right\} r \dot{u}_l(r) = r u_l(r) \quad (\text{I-30})$$

En termes de base, la fonction d'onde s'écrit :

$$\varphi(r) = \begin{cases} \frac{1}{\Omega^{1/2}} \sum_G C_G e^{i(G+K)r} & r \in I \\ \sum_{lm} A_{lm} U_l(r) Y_{lm}(r) + B_{lm} \dot{U} Y_{lm}(r) & r \in S \end{cases} \quad (\text{I-31})$$

$B_{lm}$  sont les coefficients de la dérivée de la fonction par rapport à l'énergie. Dans la méthode LAPW [38], dans la région interstitielle on utilise des ondes planes (comme la méthode APW), par contre à l'intérieur de la sphère, on utilise des ondes planes linéairement augmentées (LAPW's) qui possèdent plus de liberté variationnelle que les ondes planes augmentées (APW's) dans la méthode APW. Le développement des fonctions radiales au voisinage de  $E_l$  qu'est donné par la relation suivante:

$$U_l(r) = U_l(\varepsilon_l, r) + (\varepsilon - E_l) \dot{U}(r) + O((\varepsilon - E_l)^2) \quad (\text{I-32})$$

Où,  $O((\varepsilon - E_l)^2)$  représente l'erreur quadratique commise.

Dans cette méthode, l'erreur introduite dans le calcul de la fonction et l'énergie, est de l'ordre de  $(\varepsilon - E_l)^2$  et  $(\varepsilon - E_l)^4$ , respectivement. Les ondes planes augmentées linéairement (LAPW) forment une bonne base sous un intervalle d'énergie relativement large. Ainsi que, toutes les bandes de valence peuvent être traitées typiquement avec une seule valeur de  $E_l$ . Dans le cas où ceci est impossible, l'intervalle d'énergie peut être divisé en plusieurs fenêtres, où la solution sera obtenue séparément (pour chaque fenêtre).

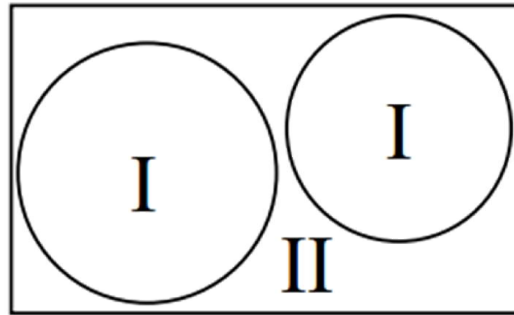


Fig. I.3. Schéma de la répartition de la cellule élémentaire en sphères atomiques (I) et en région interstitielle (II) [38].

Parmi les avantages de la méthode LAPW par rapport à la méthode APW, on cite :

Le premier avantage, dans la méthode LAPW, les énergies de bandes aux points  $k$  sont obtenues avec une seule diagonalisation. Alors que dans la méthode APW, il est nécessaire de calculer l'énergie pour chaque bande.

Le deuxième avantage, le problème d'asymptote dans cette approximation est résolu par l'introduction de la dérivée de la fonction radiale qui assure le non découplage des ondes planes et les secteurs locaux, en comparaison avec la méthode APW.

En troisième, la base de la méthode LAPW possède une grande flexibilité par rapport à la base de la méthode APW à l'intérieur de la sphère.

La synthèse des fonctions de base LAPW consiste à :

- La détermination des fonctions radiales et leurs dérivées,
- La détermination des coefficients  $A_{lm}$  et  $B_{lm}$  qui satisfont les conditions aux limites.

Cette dernière permet la détermination des moments angulaires de coupure ( $cut_{off}$ )  $l_{max}$  et le ( $cut_{off}$ ) des ondes planes utilisées  $G_{max}$ . La méthode LAPW fournit une base suffisamment flexible pour décrire correctement les fonctions propres avec énergies propres près de l'énergie de linéarisation, qui peut être gardée fixe. Ce schéma nous permettra d'obtenir toutes les énergies propres à travers une seule diagonalisation contrairement à APW.

### I. 2. 3. La méthode des ondes planes augmentées linéarisées avec le potentiel complet (FP-LAPW)

La méthode (FP-LAPW) des ondes planes augmentées linéarisées "Full Potential Linearized Augmented Plane Waves [38], assure ainsi la continuité de la fonction d'onde à la surface de la sphère  $MT$  ( $MT =$  muffin tin). Cette méthode est basée sur la résolution auto-cohérente des équations de Kohn-Sham dans deux régions arbitrairement définies de la maille élémentaire, la région (I) étant formée de sphères atomiques de rayon arbitraire  $R_{MT}$ , et la région (II) de l'espace interstitiel entre les sphères. Le potentiel  $V(r)$  et la densité de charge  $\rho(r)$  est décrit par des séries de fonctions radiales et angulaires pour les régions (I) et d'ondes planes pour la région (II).

La méthode FP-LAPW entraîne une erreur sur les fonctions d'onde de l'ordre de  $(E - E_l)^2$  et une autre sur les énergies de bandes de l'ordre de  $(E - E_l)^4$ . Par conséquent, le problème de la continuité à la surface de la sphère  $MT$  ne se posera pas dans la méthode FP-LAPW [32]. C'est la méthode la plus précise mais elle est lourde en temps de calcul, principalement parce que les ondes planes ne sont pas bien adaptées à la description d'une fonction d'onde. Le code utilisé dans nos calculs est le WIEN2k développé par Blaha et al [38], basé sur le formalisme de la méthode FP-LAPW.

### I. 3. Le code Wien2k

Le code Wien2k a été conçu par Blaha et al. [38] dans le but de résoudre les équations de Kohn et Sham dans un cristal périodique. Dans ce présent travail nous avons utilisé la méthode FP-LAPW, et ce code qui est une implémentation de cette méthode.

Dans ce code, les fonctions d'onde de Kohn et Sham sont traitées dans une approche de type LAPW (Linearized Augmented Plane Waves) qui est utilisée dans la construction des équations séculaires généralisées à partir d'un potentiel de départ qui est la superposition des potentiels atomiques tronqué au rayon Muffin-Tin. La diagonalisation produit les premières valeurs propres à chaque point  $k$  de la zone de Brillouin. Les densités du spin sont construites par la suite. A partir desquelles de nouveaux potentiels sont obtenus par la combinaison des multi-pôles, Fourier, et des techniques numériques pour résoudre l'équation de Poisson. Donc, une nouvelle matrice séculaire est générée. Ce type est répété

plusieurs fois jusqu'à atteindre une certaine condition de convergence. La correction relativiste peut être incluse pour les états du cœur et approximativement pour les états de valence (correction scalaire relativiste).

### I. 3. 1. la structure du programme Wien2k

Ce code est constitué de plusieurs programmes, que nous pouvons résumer comme suit :

- Calculer la densité atomique superposée.
- LAPWO : Générer le potentiel à partir des densités calculées en 1
- LAPW1 : Calculer les valeurs et les vecteurs propres.
- LAPW2 : Calculer les densités de valence à partir des vecteurs propres.
- LCORE : Calculer les états et la densité du cœur.
- MIXER : Mélanger les densités résultantes et la densité d'entrée, et vérifier le critère de convergence.

Le même cycle est répété chaque fois, jusqu'à ce que les critères de convergence soient vérifiés.

L'organigramme des différents programmes est montré dans la Fig. (I-4) [38].

- **NN** : permet de calculer les distances entre plus proches voisins, qui aide à déterminer le rayon atomique de la sphère.
- **SGROUP** : détermine le groupe spatial de la structure donnée.
- **SYMMETRY** : Il génère les opérations de symétrie du groupe spatial, détermine le groupe ponctuel des sites atomiques individuels, génère l'expansion  $lm$  pour les harmoniques du réseau et détermine les matrices de rotation locale
- **LSTART** : il produit les densités atomiques et détermine la façon de traiter les différentes orbitales dans le calcul de la structure de bande.
- **KGEN** : Il génère une maille  $k$  dans la zone de Brillouin.
- **DSTART** : Il génère une densité de départ pour le cycle SCF par la superposition des densités atomiques générées dans LSTART. Alors un cycle self consistant est initialisé et répété jusqu'à ce que le critère de convergence soit vérifié. Ce cycle s'inscrit dans les étapes suivantes :
- **LAPWO** : Ce programme utilise la densité d'électron pour calculer le potentiel
- **LAPW1** : Pour calculer les bandes de valences (les valeurs propres et les vecteurs propres).



## Références du chapitre I

- [1] W. Kohn, L. Sham, *Phys. Rev. A*, 140 (1965) 1133.
- [2] P. Stephens, F. Devlin, C. Chabalowski, M.J. Frisch, *The Journal of Physical Chemistry*, 98 (1994) 11623-11627.
- [3] S. MERRAH, *These de Doctorat*, University of Djillali Liabes, 2006.
- [4] P. Hohenberg, W. Kohn, *Phys. Rev. B*, 136 (1964) 864.
- [5] R.M. Dreizler, J. da Providencia, *Density functional methods in physics*, Springer Science & Business Media, 2013.
- [6] J.P. Perdew, J. Chevary, S. Vosko, *Phys. Rev. B*, 46 (1992) 6671.
- [7] A.D. Becke, *Physical review A*, 38 (1988) 3098.
- [8] N.L. Balazs, B.K. Jennings, *Physics Reports*, 104 (1984) 347-391.
- [9] D. Ceperley, B. Alder, *Rev. Lett*, 45 (1980) 566.
- [10] L. Hedin, B.I. Lundqvist, *Journal of Physics C: Solid State Physics*, 4 (1971) 2064.
- [11] J. Perdew, K. Burke, *Phys. Rev. B*, 45 (1992) 13244.
- [12] A. Zunger, A. Freeman, *Physical Review B*, 16 (1977) 2901.
- [13] V. Moruzzi, J. Janak, A. Williams, in, Pergamon, New York, 1978.
- [14] J. Slater, *Rev*, 81 (1951) 385.
- [15] C. Fiolhais, F. Nogueira, M.A. Marques, *A primer in density functional theory*, Springer Science & Business Media, 2003.
- [16] J.P. Perdew, P. Ziesche, H. Eschrig, *Electronic structure of solids' 91*, Akademie Verlag, Berlin, 1991.
- [17] Z. Wu, R.E. Cohen, *Physical Review B*, 73 (2006) 235116.
- [18] J.P. Perdew, A. Ruzsinszky, G.I. Csonka, O.A. Vydrov, G.E. Scuseria, L.A. Constantin, X. Zhou, K. Burke, *Physical Review Letters*, 100 (2008) 136406.
- [19] E. Engel, S.H. Vosko, *Physical Review B*, 47 (1993) 13164.
- [20] F. Tran, P. Blaha, *Physical Review Letters*, 102 (2009) 226401.
- [21] P. Bagno, O. Jepsen, O. Gunnarsson, *Physical Review B*, 40 (1989) 1997.
- [22] J. Perdew, *Phys Rev Lett*, 77 (1996) 3865-3868.
- [23] R.O. Jones, O. Gunnarsson, *Reviews of Modern Physics*, 61 (1989) 689.
- [24] M. Benchehima, H. Abid, *Optik-International Journal for Light and Electron Optics*, (2016).
- [25] B.U. Haq, R. Ahmed, F.E.H. Hassan, R. Khenata, M.K. Kasmin, S. Goumri-Said, *Solar Energy*, 100 (2014) 1-8.
- [26] N.N. Anua, R. Ahmed, A. Shaari, M.A. Saeed, B.U. Haq, S. Goumri-Said, *Semiconductor Science and Technology*, 28 (2013) 105015.
- [27] J. Slater, *Physical Review*, 51 (1937) 846.
- [28] H. Ohrui, S. Emoto, *Tetrahedron Letters*, 16 (1975) 3657-3660.
- [29] J.C. Slater, *The Journal of Chemical Physics*, 41 (1964) 3199-3204.
- [30] P.M. Marcus, *International Journal of Quantum Chemistry*, 1 (1967) 567-588.
- [31] N. Elyashar, D. Koelling, *Physical Review B*, 13 (1976) 5362.
- [32] T. Ouahrani, A.H. Reshak, R. Khenata, B. Amrani, M. Mebrouki, A. Otero-de-la-Roza, V. Luana, *Journal of Solid State Chemistry*, 183 (2010) 46-51.
- [33] J.C. Slater, *The self-consistent field for molecules and solids*, McGraw-Hill New York, 1974.
- [34] K. Liu, A. MacDonald, J. Daams, S. Vosko, D. Koelling, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 12 (1979) 43-57.
- [35] O. Jepsen, J. Madsen, O.K. Andersen, *Physical Review B*, 18 (1978) 605.
- [36] H. Krakauer, M. Posternak, A. Freeman, *Physical Review B*, 19 (1979) 1706.
- [37] D. Hamann, M. Schlüter, C. Chiang, *Physical Review Letters*, 43 (1979) 1494.
- [38] P. Blaha, K. Schwarz, G. Madsen, D. Kvasnicka, J. Luitz, *An augmented plane wave+ local orbitals program for calculating crystal properties*, (2001).

## CHAPITRE 2

### Diode laser à puits quantique

## Chapitre I : Laser à puits quantiques

### II. Introduction

En 1917, l'aventure du laser commence quand Albert Einstein découvre l'existence du processus d'émission stimulée, c'est-à-dire l'émission d'un photon commandée par un autre photon. En 1951 Weber et Twones aux Etats-Unis, et en 1954 Basov et Prokhorov en Union Soviétique, proposent d'utiliser l'émission stimulée pour amplifier les hyperfréquences. En 1954 Twones réalise le premier MASER (Microwave Amplification by Stimulated Emission of Radiation) en utilisant les propriétés d'inversion de la molécule d'ammoniac. En 1958 Shalow et Twones démontrent la possibilité d'étendre le MASER aux longueurs d'onde visibles, et en juillet 1960 Maiman, à la Hugues Aircraft Company, réalise le premier LASER (Light Amplification by Stimulated Emission of Radiation) en utilisant les niveaux de l'ion  $\text{Cr}_3^+$  dans  $\text{Al}_2\text{O}_3$ , c'est le laser à rubis [1]. Dès lors de nombreuses recherches se développent et différents types de laser, solides, à gaz, à colorants, sont réalisés. En ce qui concerne les lasers à semi-conducteur, dès 1958 Aigrain émet l'hypothèse de l'utilisation des semi-conducteurs pour obtenir l'effet laser, le premier laser est réalisé à GaAs, en 1962 [1, 2] fonctionnant à très basse température (77K). Il a fallu attendre 5 ans pour voir fonctionner la première diode laser à température ambiante (300 K). Celle-ci était basée sur le concept essentiel de double hétérojonction [3].

Récemment, la maîtrise du dépôt à l'échelle d'une monocouche atomique de composés semi-conducteurs a donné l'accès à la réalisation des structures complexes à Multi- Puits Quantiques (MPQ) qui présentent des propriétés optoélectroniques nouvelles liées à la structure de bande bidimensionnelle du matériau. L'intérêt de l'utilisation de ces structures à multi-puits quantiques réside dans la possibilité de contrôler la longueur d'onde de travail, par une ingénierie des matériaux.

#### II.1.Le laser

Un laser est une source d'émission de photons qui par émission stimulée crée une lumière monochromatique et cohérente d'où son nom LASER « Light Amplification by Stimulated

Emission of Radiation » [1]. Il existe plusieurs types de lasers dont les lasers à gaz, les lasers liquides à colorants, les lasers solides, les lasers à électrons libres, les lasers à fibre, les lasers à semi-conducteurs....

Tout laser est constitué de trois éléments essentiels : un milieu amplificateur, une cavité résonante et une source de pompage [4]. La Fig. II-1 montre un schéma de base d'un laser.

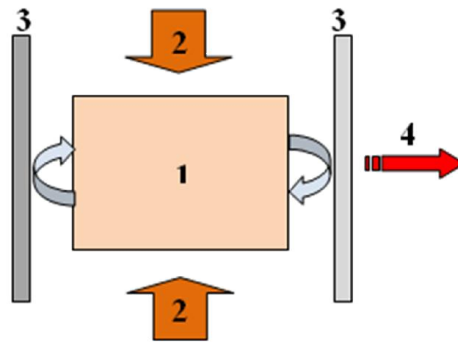


Fig. II .1 : Schéma de base d'un laser. (1) le milieu actif, (2), le système de pompage; (3) la cavité de résonante et (4) le faisceau laser transmise.

Le milieu amplificateur est un milieu optiquement actif qui transforme en photons l'énergie injectée par le pompage et dans lequel il y a du gain (émission stimulée). La cavité résonante permet la rétroaction d'une partie de ces photons sur le milieu qui les a émis. L'effet laser se produit lorsque, d'une part, l'émission stimulée devient prépondérante par rapport à l'émission spontanée (inversion de population) et, d'autre part, le gain dans le milieu amplificateur devient supérieur aux pertes optiques dans la cavité (pertes par propagation et pertes par réflexions sur les miroirs). On appelle seuil d'émission laser la densité de puissance de pompage nécessaire pour réaliser ces deux conditions. Dans le cas d'un laser solide ou d'un laser à semi-conducteurs, il existe trois types de pompage couramment utilisés :

### II.1.1.Le pompage optique

Le matériau laser est pompé par une excitation optique : soit un flash lumineux très intense soit un autre laser de longueur d'onde plus courte appelé laser de pompe. C'est la technique utilisée dans le premier laser fabriqué en 1960 (laser à rubis) [5].

### II.1.2. Le pompage par injection électrique

Le pompage par injection électrique est la technique standard utilisée dans les diodes lasers. L'excitation se fait par un courant électrique circulant entre des régions dopées n et p de la diode laser. En plus de la maîtrise du dopage du matériau, ce type de pompage nécessite la réalisation de contacts ohmiques de qualité. Le premier laser semi-conducteur fonctionnant par injection de courant a été réalisé en 1962. Il s'agissait d'une jonction p-n en GaAs [6].

### II.1.3. Le pompage électronique

Ce type de pompage est basé sur le même principe que la cathodo luminescence : un faisceau d'électrons accélérés sous une tension de l'ordre d'une dizaine de kilovolts est utilisé pour exciter le milieu actif. Le premier laser fonctionnant sur ce principe a été initié en 1964 par le groupe de recherche soviétique Bogdankevich et al. [7]

## II.2. Lasers à semi-conducteurs

Comme tout laser, ils sont constitués d'une association de trois éléments : une zone active qui peut amplifier des ondes lumineuses par émission stimulée, une cavité résonnante effectuant une sélection de longueurs d'onde émises et permettant une plus grande amplification, un dispositif de pompage produisant une inversion de population des porteurs dans la zone active, condition nécessaire à l'amplification [1].

Les lasers à semi-conducteurs, en particulier les diodes lasers à multi puits quantiques, présentent de nombreux avantages. En effet, ils ont une forte compacité, leurs dimensions étant de quelques centaines de microns de long pour moins d'une dizaine de large, ils couvrent une large gamme spectrale qui opèrent du visible au proche infrarouge selon la filière technologique, l'énergie de pompe peut être électrique, ils ont un fort potentiel d'intégration avec les autres composants semi-conducteurs. Par conséquent, leurs fortes capacités de modulation, des puissances émises pouvant atteindre plusieurs Watts en continu, et ils ont un faible coût de fabrication [8].

### II.3.Transitions radiatives, émission et absorption de lumière par un semi-conducteur

Le comportement d'un atome peut être connu grâce aux électrons contenus dans les deux dernières bandes d'énergie qui sont la bande de valence (d'énergie  $E_v$ ) et La bande de conduction (d'énergie  $E_c$ ). La différence d'énergie entre ces deux bandes représente la bande interdite (gap) laquelle caractérise les différents constituants de la matière. L'absorption et l'émission d'énergie sont obtenues à partir de la transition des électrons d'un niveau d'énergie vers un autre niveau. La longueur d'onde de la radiation émise et ou absorbée est liée à la différence d'énergie entre ces deux niveaux [1].

$$E_g = E_c - E_v = \frac{hc}{\lambda} \quad (\text{II-1})$$

$E_g$  : Bande interdite (Gap) en (eV) ou en (J).

$E_C$  : Niveau d'énergie de la bande de conduction.

$E_V$ : Niveau d'énergie de la bande de valence.

$h$  : constante de Planck en (J.s).

$c$  : Vitesse de la lumière dans le vide en (m/s).

$\lambda$  : La longueur d'onde de la radiation émise ou absorbée.

#### II.3.1.Absorption

Un photon d'énergie suffisante  $h\nu_{12} \geq E_g$  peut induire la transition d'un électron occupant la bande de valence vers la bande de conduction. Cette interaction est le phénomène d'absorption présente Fig. II.1

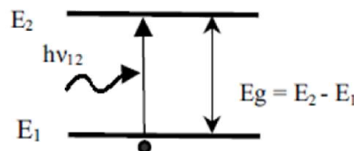


Fig. II-1 : phénomène d'absorption [9].

### II.3.2.Emission

Un électron excité situé dans la bande de conduction peut passer à un niveau d'énergie plus bas (bande de valence) en émettant un photon dont la fréquence  $\nu$  est donnée par :

$$\nu = \frac{E_c - E_v}{h} \quad (\text{II-2})$$

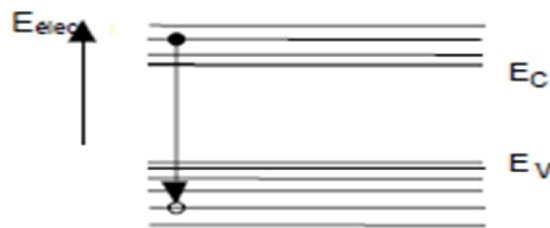


Fig. II-2 :Emission [9]

On distingue deux types d'émissions : l'émission spontanée et l'émission stimulée

#### II.3.2.1.Emission spontanée

L'émission spontanée se fait de façon aléatoire et donne naissance à des radiations incohérentes. Les photons ainsi créés ne sont liés par aucune relation de phase. Fig. (II-3).

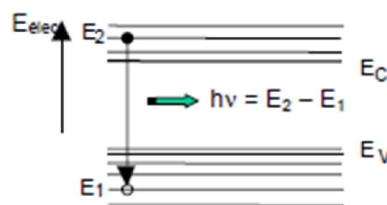


Fig. III-3 : Emission spontanée [9]

Cette émission correspond à la transition inverse ; l'électron revient très rapidement à son niveau fondamental avec émission d'un photon de même énergie que le photon absorbe.

Les porteurs excédentaires s'accumulent et se répartissent dans les bandes de conduction et de valence, occupant des états d'énergie croissante dans ces bandes (Fig. II-4).

Dans un modèle à une seule bande de valence, la répartition des porteurs dans leurs bandes respectives est décrite par un quasi-niveau de Fermi,  $E_{FC}$  pour les électrons et  $E_{FV}$  pour les trous de la bande de valence. Cet écart à l'équilibre, décrit par des quasi-niveaux différents pour les électrons et les trous, conduit à une augmentation de l'émission spontanée dont le taux spectral  $R_{spont}(h\nu)$  Par unité de temps, de volume et d'énergie des photons émis  $h\nu$  est donné par :

$$R_{spont}(h\nu) = \frac{1}{\tau_R} \rho_j(h\nu) f_c(h\nu) (1 - f_v(tv)) \quad (\text{II-3})$$

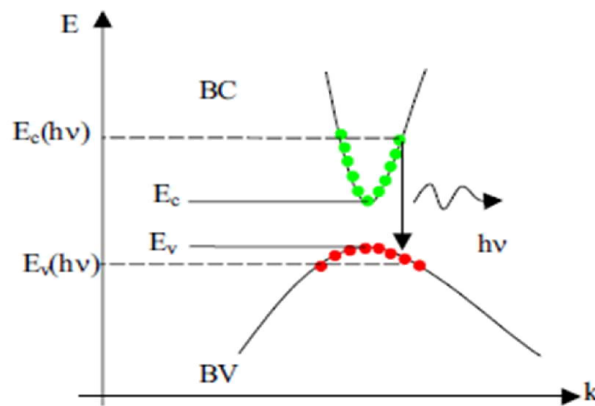


Fig. II-4 : Transitions optiques relatives à des recombinaisons de paires électron-trou

Avec les quantités suivantes :

$\tau_R$  est la durée de vie spontanée du matériau émetteur : on peut la supposer relativement indépendante de l'énergie des photons émis. C'est une quantité qui est propre au semi-conducteur. On la définit de la manière suivante. [1, 2, 10]:

$$\frac{1}{\tau_R} = \frac{q^2 \cdot \chi_{VC}^2 \cdot n_{op} \cdot \omega_{VC}^2}{\pi \cdot c^3 \cdot \hbar \cdot \epsilon_0} = \frac{q^2 \cdot n_{op} \cdot E_g \cdot E_p}{2\pi \cdot c^3 \hbar^2 \cdot \epsilon_0 \cdot m_e} \quad (\text{II-4})$$

Avec

$\chi_{vc}$  : Elément de la matrice dipolaire

$n_{op}$  : Indice optique du matériau

$\omega_{vc}$  : Pulsation des photons émis

$E_g$  : Energie du gap

$E_p$  : Champ électrique

$c$  : Célérité de la lumière

$\hbar$  : Constante de Planck réduite

$\varepsilon_0$  : Permittivité dans le vide

$m_e$  : Masse de l'électron

$\rho_j(h\nu)$ : Représente la densité d'états joints donnée par :

$$\rho_j(h\nu) = \frac{1}{2\pi^2} \left( \frac{2m_r}{\hbar^2} \right)^{3/2} (h\nu - E_g)^{1/2} \quad (\text{II-5})$$

Cette quantité ( $\rho_j(h\nu)$ ) représente le nombre d'états qui satisfait à la conservation de l'énergie  $h\nu = E_c(k) - E_v(k)$  et du moment ( $\mathbf{k}$  définit comme étant le vecteur d'onde est constant lors de transitions radiatives) lors de la transition d'un état d'énergie de la bande de valence à un état d'énergie de la bande de conduction (Fig. II-4).  $f_c(h\nu)$  et  $f_v(h\nu)$  décrivent les fonctions de Fermi-Dirac, décrivant l'occupation des états connectés par la transition optique, c'est à dire satisfaisant à :

$$f_c(h\nu) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E_c(h\nu) - E_{FC}}{KT}\right)} \quad (\text{II-7})$$

$$E_c(h\nu) = E_{g+} + \frac{m_r}{m_c} (h\nu - E_g) , \quad (\text{II-8})$$

et

$$f_v(h\nu) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E_v(h\nu) - E_{FV}}{KT}\right)} \quad (\text{II-9})$$

$$E_v(h\nu) = -\frac{m_r}{m_v} (h\nu - E_g) \quad (\text{II-10})$$

Avec  $m_c$  : Masse effective de densité d'état de la bande de conduction

$m_v$  : Masse effective de densité d'état de la bande de valence

$m_r$ : Masse effective relative

En règle générale, dans le cas d'une diode électroluminescente, la densité de porteurs excédentaires est suffisamment faible pour pouvoir s'autoriser à simplifier les fonctions de Fermi-Dirac par la fonction de Boltzmann. Les quasi-niveaux de Fermi sont considérés comme éloignés des extremums de bandes. La Fig. II-4 schématise les transitions optiques

dans un semi-conducteur. Ces dernières sont verticales, c'est à dire à vecteur d'onde  $k$  constant. Les états  $h_c(h\nu)$  et  $h_v(h\nu)$  sont les états joints par les transitions optiques mettant en jeu des photons d'énergie  $h\nu$  le taux spectral d'émission spontanée peut alors s'écrire [1, 2, 10]:

$$R_{spon}(h\nu) = k_{spon}(h\nu - E_g)^{1/2} \exp\left(-\frac{h\nu - E_g}{KT}\right) \quad (\text{II-11})$$

Où  $k_{spon}$  est une constante de l'énergie des photons donnée par :

$$k_{spon} = \frac{(2m_r)^{3/2}}{\pi \hbar^2 \tau_R} \exp\left(\frac{\Delta E_F - E_g}{KT}\right) \quad (\text{II-12})$$

Le terme  $\Delta E_F$  représente la différence des quasi-niveaux de Fermi. Les facteurs  $\exp(E_{FC}/kT)$  et  $\exp(E_{FV}/kT)$  augmentent proportionnellement à la densité de porteur  $n$  et le taux spectral  $R_{spon}(h\nu)$  est proportionnel à  $n^2$ .

### III.3.2.2. Emission stimulée

On considère que l'atome est excité et possède déjà un électron au niveau d'énergie  $E_2$  (Fig. II-5) sous l'action du rayonnement électromagnétique d'énergie  $h\nu = E_2 - E_1$ , la transition de l'électron vers le niveau 1 est alors déclenchée (stimulée) avec émission d'un photon.

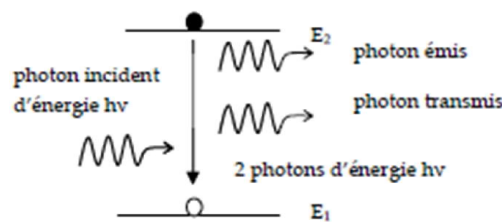


Fig. II-5 : phénomène d'émission stimulée [11]

La particularité de ce type d'émission est que le photon émis (photon stimulé) prend strictement les mêmes caractéristiques que le photon incident ; à savoir :

Ils ont la même fréquence, ils ont la même trajectoire. L'émission n'est plus isotrope, elle est dite unidirectionnelle et ils évoluent en phase. L'émission stimulée apparaît donc comme une duplication de la lumière ou un renforcement de l'onde incidente. Les semi-conducteurs

peuvent être pompés suffisamment loin de leur équilibre thermodynamique pour réaliser l'inversion de population entre les électrons de la bande de conduction et les trous de la bande de valence. Il existe une condition de transparence, c'est à dire la concentration de porteurs pompés  $n_{transp}$  dans les bandes au-delà de laquelle le matériau devient transparent et se met à amplifier. Au-delà de ce seuil de transparence, les photons d'énergie vérifiant la condition :  $E_g < h\nu < E_{FC} - E_{FV}$  (condition de Durrafourg) subissent alors une amplification optique. Le gain du milieu amplificateur est donné par [2] :

$$\gamma(h\nu) = \alpha_0(\omega)[f_C(h\nu) - f_V(h\nu)] \quad (\text{II-13})$$

Où  $\alpha_0$  représente l'absorption pour une population de la bande de conduction nulle, c'est à dire à courant nul, donnée par :

$$\alpha_0(\omega) = \frac{q^2 \cdot \chi_{VC}}{\lambda_0 \cdot \epsilon_0 \cdot \hbar \cdot n_{SC}} \left( \frac{2m_r}{\hbar^2} \right)^{3/2} \sqrt{\left( \omega - \frac{E_g}{\hbar} \right)} \quad (\text{II-14})$$

Une approximation de la dépendance de  $\gamma_{max}$  vis-à-vis de  $n$  par une fonction linéaire est généralement adoptée :

$$\gamma_{max} = \alpha_0 \left( \frac{n}{n_{transp}} - 1 \right) \quad (\text{II-15})$$

Cette approximation fait correctement tendre le gain vers  $-\alpha_0$  lorsque la population  $n$  devient nulle. La Fig. II-6 représente la variation du gain maximal en fonction de  $J$ . Pour une densité  $n$  comprise entre 0 et  $n_{transp}$ , le milieu est absorbant, devient transparent au-delà de  $n_{transp}$  et reproduit dans la plupart des cas la dépendance de  $\gamma_{max}$  vis-à-vis de  $n$  au-delà  $n_{transp}$

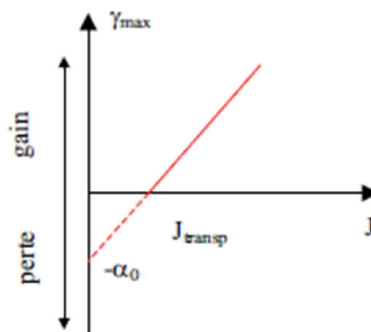


Fig. II.6. Variation du gain d'une jonction semi-conductrice en fonction du courant de pompage dans un modèle d'approximation linéaire [2].

Le gain maximal  $\gamma_{max}$  est alors donné par :

$$\gamma_{max} = \alpha_0 \left( \frac{J}{J_{transp}} - 1 \right) \quad (\text{II-16})$$

Où le courant de transparence est donné par :

$$J_{transp} = \frac{qd}{\eta_i \tau_{rad}} n_{transp} \quad (\text{II-17})$$

Où  $\tau_{rad}$  représente le taux de recombinaison radiative,  $q$  la charge de l'électron, et  $\eta_i$  représente le rendement quantique interne ( $\eta_i = \frac{\tau_{tot}}{\tau_{rad}}$ ).

### II.3.3.3. inversion de population

La condition d'inversion de population s'obtient en utilisant le model d'Einstein .Ces relations expriment les taux d'absorption, d'émission spontanée et d'émission stimulée qui, dans le cas des semi-conducteurs, gouvernent les transitions entre les bandes de conduction et de valence du semi-conducteur. Les porteurs sont considérés par hypothèse comme étant en quasi équilibre thermodynamique à l'intérieur des bandes. Cela revient à dire qu'on peut définir une température pour les électrons  $T_e$  et les trous  $T_h$ .de plus, pour simplifier le problème, on considère généralement que  $T_e = T_h = T_r$ ,  $T_r$  étant la température du réseau cristallin. Il peut alors possible de décrire la distribution d'un nombre  $n_e$  ( $n_h$ ) de porteurs dans les bandes au moyen de la statistique de Fermi Dirac, en définissant des quasi niveaux de fermi des trous  $E_{Fh}$  dans la bande de valence et des électrons  $E_{Fe}$  dans la bande de conduction [2]:

$$n_e = \int \rho_c(E) \cdot f_c(E) \cdot dE \quad (\text{II-28})$$

Où  $f_c(E) = \frac{1}{1 + e^{\left[ \frac{E - E_{F0}}{KT} \right]}}$  est la loi de distribution de Fermi Dirac des électrons dans la bande

de conduction, et  $\rho_c$  représente la densité d'états des électrons dans la bande de conduction.

Dans la pratique les électrons se thermalisent entre eux plus vite qu'avec le réseau cristallin [1]. Par ailleurs dans le cas des boîtes quantiques, à basse température, il est parfois erroné de considérer l'équilibre thermodynamique [12]

Plus on augmente l'injection de porteurs et plus les quasi niveaux de fermi des électrons et des trous se séparent. Bernrd et Durraffourg [13] ont montré que l'inversion de population était atteinte dès que la séparation des quasi niveaux de fermi dépassait l'énergie de la transition optique  $E_e - E_h$  :

$$E_{F_e} - E_{F_h} > E_e - E_h \quad (\text{II-29})$$

#### II.4. Seuil d'oscillation laser

Un milieu semi-conducteur pompé électriquement au-delà du seuil de transparence, dans la zone active d'une jonction PN, amplifie les modes photoniques satisfaisant à la condition de Bernard et Durraffourg. On peut alors être en présence d'oscillations lasers s'il est soumis à une contre réaction optique, plusieurs méthodes existent pour effectuer cette oscillation. La méthode la plus simple est d'utiliser le miroir diélectrique naturel formé par l'interface entre semi-conducteur et l'air. Ces miroirs sont obtenus naturellement par deux clivages qui permettent d'obtenir deux surfaces parfaitement parallèles (Fig. II-7). L'interface semi-conducteur/air fournit un miroir diélectrique dont la réflectance

$$R_m = \frac{(n_{SC} - 1)^2}{(n_{SC} + 1)^2} \quad (\text{II-30})$$

Avec  $n_{SC}$  indice optique du semi-conducteur.

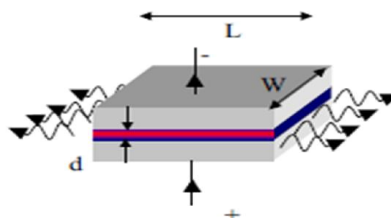


Fig. II-7 : Configuration d'un laser à injection à semi-conducteur avec deux miroirs clivés.

Les grandeurs  $d$ ,  $L$  et  $W$  définissent le volume de la cavité laser, l'oscillation laser apparaît lorsque le gain du milieu amplificateur dépasse les différents mécanismes de perte du résonateur optique. On considère deux miroirs parfaitement parallèles espacés d'une distance  $L$ , représentative de la longueur de la cavité, à ses extrémités, deux réflecteurs parallèles caractérisés par leurs coefficients de réflexion : en amplitude  $r_{m1}$  et  $r_{m2}$  ou en intensité  $R_{m1}$  et  $R_{m2}$ . On suppose de plus que la zone active possède un gain  $\gamma$  et des pertes internes  $\alpha$  liées essentiellement à l'absorption, diffusion, diffraction, comme l'indique la Fig. II-8.

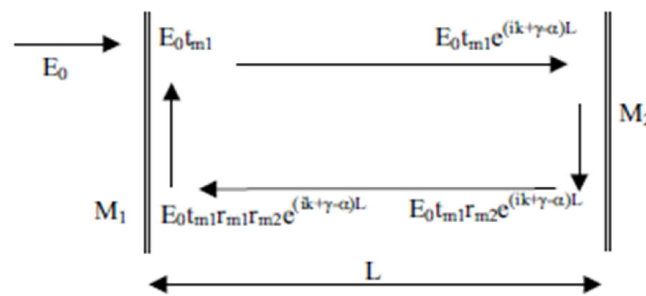


Fig. II-8 Mécanismes d'établissement de l'oscillation laser dans une cavité

Incidente avec les constantes suivantes :

$t_{mi}$  : Coefficient de transmission du miroir considéré

$r_{mi}$  : Coefficient de réflexion du miroir considéré

$\gamma$  : Gain du milieu entre les deux miroirs

$\alpha$  : Pertes du milieu entre les deux miroirs

$E_0$  : Champ électrique de l'onde

Et on note que  $r_{mi} = \sqrt{R_{mi}}$  ( $i=1,2$ )

La sommation des champs électriques donne :

$$E = E_0 \frac{e^{j\omega t}}{1 - r_{m1} r_{m2} e^{(\gamma - \alpha)L} e^{i2\kappa L}} \quad (\text{II-31})$$

Petermann [14] donne la condition d'émission de la diode laser sans couplage externe :

$$1 - r_{m1} r_{m2} e^{(\gamma - \alpha)L} e^{i2\kappa L} = 0 \quad (\text{II-32})$$

La résolution de cette équation (II-32) permet d'accéder aux expressions du gain seuil et des fréquences optiques autorisées de la diode laser.

### II.4.1. Condition sur le gain

Le gain du milieu doit compenser les différentes pertes de la cavité indiquées par le terme  $\alpha$  qui sont de deux types :

**a).** La perte intrinsèque  $\alpha_m$  à la structure de la diode laser qui est la fuite des photons par les miroirs correspondant à la sortie laser du dispositif et décrit par :

$$\alpha_m = \frac{1}{2L} \ln \frac{1}{R_{m1}R_{m2}} \quad (\text{II-33})$$

Où  $R_{m1}$  et  $R_{m2}$  sont les coefficients de réflexion globaux des miroirs M1 et M2.

Généralement l'un des deux miroirs est totalement réflecteur afin de diminuer le courant de seuil nécessaire à l'émission laser.

**b).** Une perte parasite  $\alpha_p$  qui provient des porteurs libres des contacts électriques, de la diffusion sur des rugosités. La condition de seuil d'oscillation laser est alors :

$$\gamma_{th}(h\nu) = \alpha_p + \frac{1}{2L} \ln \frac{1}{R_{m1}R_{m2}} \quad (\text{II-34})$$

On note que la valeur du gain qui vérifie l'égalité (II-32) est appelée gain au seuil  $g_{\text{seuil}}$ . Au-dessus de cette valeur le mécanisme d'émission stimulée est prépondérant. On obtient l'émission laser.

Cette dernière expression ne tient pas compte du caractère ondulatoire des photons qui doivent être aussi solution de l'équation de Maxwell. Dans le cas d'un double hétérostructure, les barrières de potentiel qui ont un gap supérieur à celui des puits de potentiels ont corrélativement un indice optique inférieur. Les ondes électromagnétiques sont donc piégées dans la partie d'indice supérieur c'est-à-dire la région amplificatrice (Fig. II-9). On parle alors de confinement optique et électrique [1].

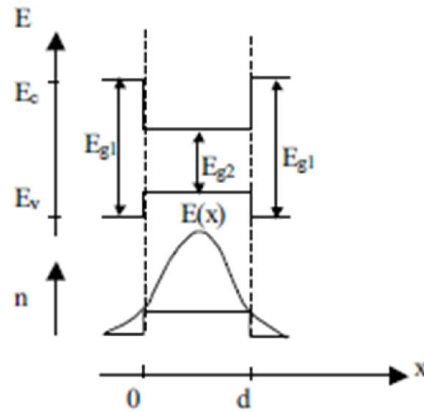


Fig. II-9 : Condition en énergie permettant une recombinaison électron-trou et un Confinement optique dans une hétérostructure [2].

La proportion de l'énergie effectivement présente dans la partie amplificatrice est définie par le facteur de confinement  $\Gamma$  :

$$\Gamma = \frac{\int_{-d}^0 |E(x)|^2 dx}{\int_{-\infty}^{+\infty} |E(x)|^2 dx} \quad (\text{II-35})$$

Ainsi, seule la portion  $\Gamma$  de l'énergie électromagnétique est soumise à l'amplification alors que l'on supposera que toutes les parties (dans la barrière et dans les puits) subissent les mêmes pertes. La condition sur le seuil d'oscillation laser s'en trouve donc affectée sous la forme :

$$\gamma_{th}(h\nu) = \frac{1}{\Gamma} \left[ \alpha_p + \frac{1}{2L} \ln \frac{1}{R_{m1}R_{m2}} \right] = \frac{1}{\Gamma} (\alpha_p - \alpha_m) \quad (\text{II-36})$$

Nous pouvons donner cette équation sous la forme plus explicite pour le courant de seuil d'oscillation laser :

$$\alpha_0 \left[ \frac{\eta_i \tau_{rad}}{q d n_{transp}} J_{th} - 1 \right] = \left[ \alpha_p + \frac{1}{2L} \ln \frac{1}{R_{m1}R_{m2}} \right] \quad (\text{II-37})$$

Le facteur de confinement  $\Gamma$  diminue avec l'épaisseur  $d$  de la zone active. Il existe un optimum pour l'épaisseur  $d$  de cette dernière qui permet de minimiser le courant de seuil. Pour cela, on réalise une hétérostructure dont les principaux apports sont de diminuer le

courant de seuil laser et d'augmenter le facteur confinement des photons par changement d'indice.

### II.4.2. Condition sur la phase

La condition sur la phase pour l'annulation du dénominateur de l'équation (II-31) est donnée par :

$$kd + \varphi = p\pi \quad ; p = 1, 2 \dots \quad (\text{II-38})$$

Où  $\varphi$  est la moyenne des déphasages induits par les miroirs. Les modes amplifiés seront donnés par :

$$v_p = p \frac{c}{2n_{op}L} \quad ; \quad p = 1, 2 \dots \quad (\text{II-39})$$

La prise en compte de ces deux conditions permet d'envisager l'étude du spectre optique d'une diode laser et de sélectionner un jeu de paramètre à suivre permettant de caractériser son comportement général en fonction de la contrainte appliquée.

### II.5. Effet de la température

L'augmentation du courant de seuil avec la température est habituellement caractérisée par,  $t_0$  défini par la relation empirique suivante [1]:

$$I_2 = I_1 e^{\frac{(T_2 - T_1)}{T_0}} \quad (\text{II-40})$$

Où  $I_1$  et  $I_2$  sont le courant de seuils correspondants aux températures  $T_1$  et  $T_2$  respectivement.  $T_0$  est la température caractéristique qui est égale 150-180 K pour le laser à double hétérojonction et 50-70 K pour les lasers à puits quantiques [15].

## II. 6. Principe de fonctionnement d'un laser à Semi-conducteur

Les lasers à semi-conducteur ne diffèrent pas fondamentalement des autres lasers (lasers à gaz et lasers solides). Ils sont constitués d'un milieu amplificateur (le matériau semi-conducteur) renfermé dans une cavité résonnante.

La lumière émise est due à une inversion de populations entre les niveaux mis en jeu. Cependant, dans le cas d'un semi-conducteur les niveaux d'énergie sont regroupés dans des bandes ou leur répartition est quasi-continue. Par conséquent, le concept d'inversion de population est différent. L'effet laser se produit entre les états du bas de la bande de conduction où se thermalisent les électrons injectés dans cette bande et les états du haut de la bande de valence où se thermalisent les trous créés dans cette bande. Dans ce cas, la condition d'émission stimulée se traduit par :  $E_C - E_V > E_g$

L'inversion de population dans une jonction p-n est réalisée par jonction électrique (pompage électrique). Pour une jonction polarisée en direct, les électrons sont injectés dans la région p où ils deviennent des porteurs minoritaires en excès ; à leurs tours les trous sont injectés dans la région n. Cette procédure a été utilisée pour produire de l'émission spontanée dans le cas des LED.

Cependant, si la concentration des porteurs minoritaires en excès est très élevée, les conditions d'inversion de population seront satisfaites.

Ceci pour être réalisé en dopant fortement aussi bien la région n que la région p et en appliquant une polarisation en direct suffisante pour que la jonction soit parcourue par un courant élevé. Ainsi, des larges concentrations d'électrons et de trous vont diffuser dans la région opposée créant une inversion de populations dans une couche assez mince appelé " zone active " dont l'épaisseur est de l'ordre de grandeur de diffusion ( $L_n$ ) des électrons injectés dans la région p.

En général, le dopage de la région p est plus faible que celui de la région n pour que le courant de la jonction soit assuré essentiellement par les électrons.

Lorsque la jonction est polarisée en direct, il se produit un abaissement de la barrière qui se traduit par un courant de diffusion. Cependant, si la polarisation est suffisamment élevée, le pseudo-niveau de Fermi  $E_{FN}$  dans la région n devient au-dessus du bas de la bande de conduction de la couche p ( $E_{FN} > E_{FP}$ ) et le pseudo-niveau de fermi  $E_{FP}$  dans la région p devient au-dessous de la bande de valence de la couche n ( $E_{FP} < E_{VN}$ )

Par conséquent, la zone se remplit assez rapidement avec les électrons de conduction et les trous de valence à partir des régions n et p respectivement. La condition d'inversion de population est aussi remplie. Les porteurs vont se recombiner donnant lieu à une émission spontanée et les photons ainsi créés vont pouvoir stimuler d'autres émissions

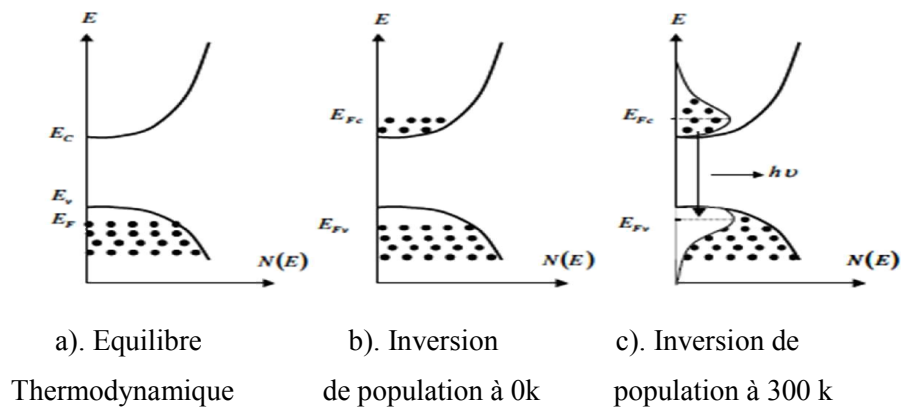


Fig. II.10 : Population des bandes d'énergie [1]

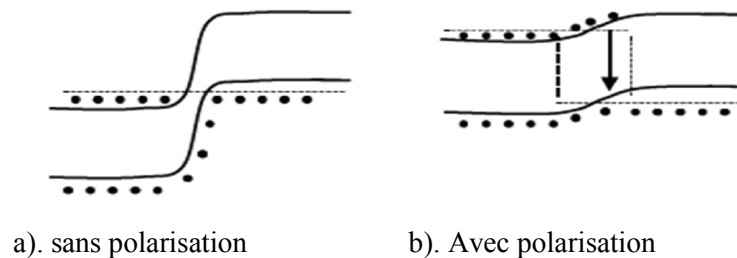


Fig. II-11 diagramme d'un laser a semi-conducteur [1]

Il faut noter que, les régions n et p étant très dopées, les extrema des bandes de valence et de conduction sont perturbés par l'étalement des états donneurs et accepteurs et par l'effet d'écran associé à la grande densité de porteurs libres.

## II. 7. Structure d'une diode laser

La diode se présente sous la forme d'un parallélépipède rectangle dont deux faces clivées perpendiculaires au plan de la jonction constituent les faces semi-réfléchissantes du résonateur (Fig. II-12). La cavité se présente donc sous la forme d'un Pérot-Fabry. La longueur  $L$  de la

diode est typiquement de l'ordre de  $300 \mu\text{m}$ . L'épaisseur de la zone active est conditionnée par la longueur de diffusion des électrons dans la région de type p. En régime d'émission stimulée, la durée de vie radiative des électrons étant réduite par les recombinaisons stimulées, leur longueur de diffusion est faible, l'épaisseur de la zone active est de l'ordre de  $0,2 \mu\text{m}$  [1].

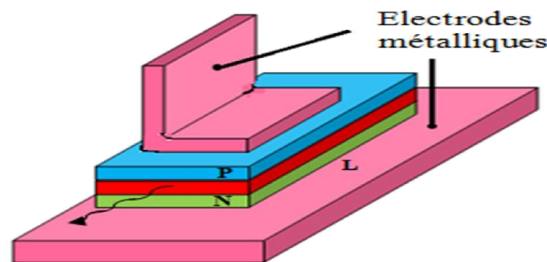


Fig. II-12 : Diode laser [1]

Soit  $L$  la longueur de la cavité,  $R_{1,2}$  les coefficients de réflexion sur les faces de sortie et  $A(E)$  le coefficient net d'amplification de la zone active (Fig. II-12).

## II. 8. Les différents types de laser à semi-conducteur

### II. 8. 1 Laser à homojonction

C'est une jonction PN est physiquement la juxtaposition de deux types dopés différemment dans un même cristal semi-conducteur Fig. II-13

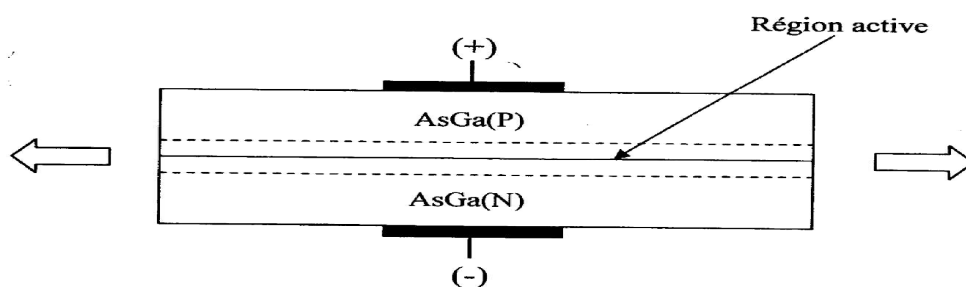


Fig. (II-13) Laser à homojonction

Ce type de laser présente des courants de seuil important ( $I > 10\text{A}$ ), à cause de l'épaisseur de la région de recombinaison ( $d = 1 \text{ à } 3\mu\text{m}$ ), ce qui provoque un échauffement important de la jonction et entraîne sa détérioration. Dans ces conditions, ce laser ne peut pas fonctionner en

contenu, il est surtout utilisé en région impulsional. Afin d'abaisser la température de la jonction et d'augmenter sa fiabilité donc un refroidissement est nécessaire.

## II. 8. 2. Laser à double hétérostructure

Dans les lasers à double hétérostructure (DH) Fig. (II-14), le facteur de confinement  $\Gamma$  est voisin de 1 car les mêmes barrières, barrières de potentiel pour les uns et d'indice pour les autres, confinent à la fois les porteurs et les photons. En fait, dans ces structures la distance entre les barrières est typiquement de l'ordre de  $0,2 \mu\text{m}$ , c'est-à-dire voisine des longueurs d'ondes optiques mais très supérieure aux longueurs d'ondes électroniques. Il en résulte un bon confinement des photons mais pas un confinement optimisé des porteurs.

Pour obtenir des densités de porteurs élevées et donc un gain élevé, avec des courants de faible valeur, on a été amené à réaliser des structures de type double hétérojonction ou structure DH, dont le schéma de principe est donné ci-dessous [15] :

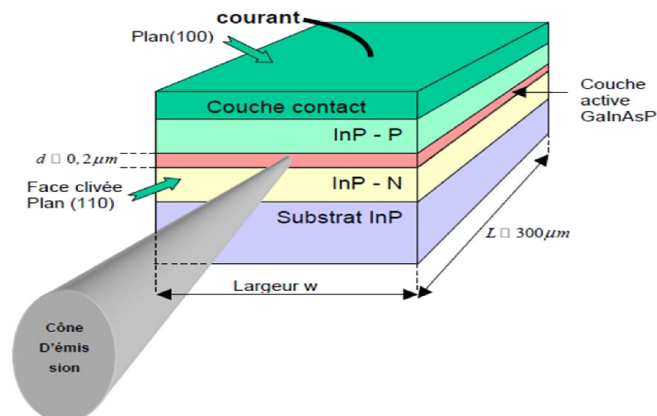


Fig. II-14 : Structure d'une diode laser à double hétérojonction (DH).PN [15]

La couche active à petit gap (ici le composé GaInAsP, pour une longueur d'onde émission à  $1,55 \mu\text{m}$ ) est placée entre deux couches à grand gap en InP, dites couches de confinement. En polarisation directe (pôle positif sur la couche P), les électrons et les trous sont injectés dans la couche active d'épaisseur  $d \approx 0,2 \mu\text{m}$  où ils se recombinent radiativement. Les faces de la cavité optique sont obtenues par clivage du semi-conducteur selon le plan cristallin (110). L'indice de réfraction du GaInAsP est voisin de  $n_1 = 3,5$  et l'indice de l'air est  $n_0 = 1$  [15].

Le pouvoir réflecteur à l'incidence normale a pour valeur :

$$R = \left( \frac{n_1 - n_0}{n_1 + n_0} \right)^2 \simeq 0,32 \quad (\text{II -41})$$

Ce qui est généralement suffisant pour créer la contre-réaction optique.

### II. 8. 3. lasers à cascade quantique

Les lasers à cascade quantique sont des lasers à semi-conducteurs, unipolaires, qui tirent leur gain optique de transitions entre sous-bandes dans la bande de conduction de puits quantiques couplés. Un recyclage des électrons est exploité par une cascade de régions actives mise en série (Fig. II-15). Leur caractéristique la plus remarquable est que la longueur d'onde d'émission ne dépend plus du gap des matériaux employés, mais de l'épaisseur des puits quantiques de la zone active.

Depuis leur invention en 1994 [16], ils se sont imposés comme une classe importante de sources laser pour le moyen et lointain infrarouge.

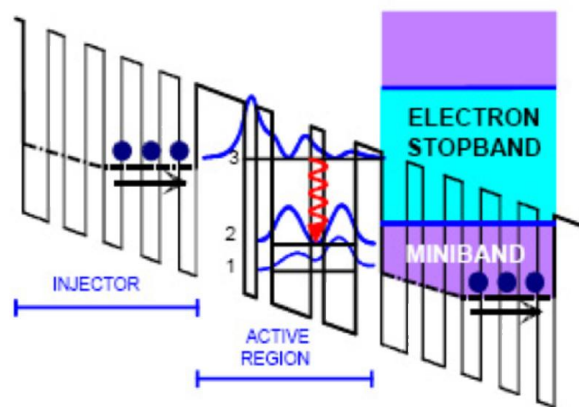


Fig. II-15 : Profil de bande de conduction d'une portion de la zone active d'un LCQ, montrant la transition inter sous bande du laser et le recyclage des électrons [17].

### II.8.4. Diode laser à puits quantiques

Dès les années 1970, les calculs ont prouvé qu'un laser dont la couche active très mince (puits quantique) serait plus performant qu'un laser à couche active massive.

On a intérêt à réduire l'épaisseur de la zone active en faisant appel aux techniques d'épitaxie MBE ou MOCVD, le laser obtenu est à unique puits quantique (de dimension de couche

active  $< 20\text{nm}$ ) ou à multi puits quantiques (séparés par des barrières: matériaux SCs de gap plus élevé que celui du puits), d'où l'important changement observé dans certains paramètres du laser (tel que le gain, la densité d'états, etc.) et la réduction du seuil d'un facteur de 10 ou plus [18].

La réduction de volume de la zone d'inversion est obtenue par la réalisation de lasers à puits quantiques. Le puits quantique présente le double intérêt d'une part de réduire l'extension spatiale des électrons et des trous, et d'autre part de confiner leurs distributions énergétiques par la nature bidimensionnelle de la densité d'états.

Le paramètre qui joue un rôle essentiel dans ces structures à puits quantiques est le facteur de confinement  $\Gamma$  qui mesure le taux de recouvrement des distributions spatiales des porteurs et des photons, c'est-à-dire le taux de recouvrement de la zone active et du rayonnement [1].

Dans la structure à puits quantique, le confinement quantique des porteurs nécessitant des largeurs de puits de quelques dizaines de nanomètres, la largeur de la zone active est alors comparable aux longueurs d'ondes électroniques mais très inférieure aux longueurs d'ondes optiques. Il en résulte un confinement optimisé des porteurs, mais pas des photons. Le facteur de confinement est alors faible.

On combine le double confinement des porteurs et des photons par la réalisation de structures à confinements séparés SCH (Separate Confinement Heterostructure). Les porteurs sont confinés dans un puits de potentiel et les photons sont confinés par des barrières de variation d'indice. Le confinement optique est ici optimisé par la réalisation de guides d'ondes à indice graduel GRIN (GRaded INdex), de part et d'autre du puits de potentiel. Ces structures portent le nom de structures GRIN-SCH (Fig. II-16).

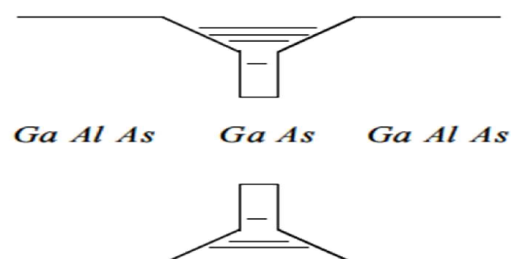


Fig. II-16 : Laser à puits quantique [1]

### II.8.4.1. Intérêt du puits quantique dans le laser à SC

Le double intérêt du puits quantique, de quelques nm, est de réduire l'extension spatiale des trous et des électrons et de confiner leurs distributions énergétiques par la nature bidimensionnelle de la densité d'états [16], mais quand les porteurs y sont confinés et vu que l'épaisseur de la zone active est très inférieure à la longueur d'onde optique, les photons occupent alors un volume s'étendant au-delà de la zone active, d'où le risque de perdre en recouvrement porteurs-photons l'acquit en confinement de porteurs. L'efficacité de ce recouvrement est caractérisée par le facteur de confinement optique des photons  $\Gamma$  mesurant la proportion de la densité de rayonnement effectivement en interaction avec le milieu actif [16]. On note que le faible recouvrement entre l'onde guidée et le puits quantique réduit le gain optique.

### II.8.4.2. Facteur de confinement dans un laser à puits quantique

L'énergie électromagnétique guidée dans la couche active n'y est pas complètement confinée, par conséquent le milieu actif n'affecte le signal optique que partiellement. L'évaluation de la densité de porteurs de seuil  $n_{seuil}$  implique le calcul du facteur de confinement, où le gain  $\gamma$  est une fonction de la densité de porteurs [19-21], Il a été trouvé que le facteur de confinement est considéré comme étant le produit de deux composantes latérale  $\Gamma_T$  et transversale  $\Gamma_L$ , illustrant respectivement les confinements latéral et transversal, et donnant l'énergie électromagnétique dans la région active en fractions de l'énergie totale, comme il a été déterminé par la variation de l'indice de réfraction dans les deux directions. Le calcul de  $\Gamma_T$  et  $\Gamma_L$  nécessite donc l'approche numérique, d'où les expressions analytiques (de *D. Botez*) simplifiées et très approximées :

$$\Gamma_L = \frac{W^2}{(2+W^2)} \quad \text{où} \quad W = \frac{2\pi}{\lambda} (n_{int}^2 - n_{ext}^2)^{\frac{1}{2}} \cdot w \quad (\text{II-42})$$

$$\Gamma_T = \frac{D^2}{(2+D^2)} \quad \text{où} \quad D = \frac{2\pi}{\lambda} (n_a^2 - n_c^2)^{\frac{1}{2}} \cdot d \quad (\text{II-43})$$

avec  $\lambda$  la longueur d'onde du rayonnement émis,  $d$  l'épaisseur de la zone active,  $n_{int}$ ,  $n_{ext}$  et  $n_{a,c}$  respectivement les indices de réfraction à l'intérieur et à l'extérieur de la cavité et ceux de la couche active et des couches de confinement, et  $w$  la largeur de la zone active. Notons que

la valeur de  $\Gamma_L$  est cependant proche de l'unité, alors que  $\Gamma_T$  peut être considéré comme étant le facteur de confinement,  $D$  est dit épaisseur normalisée de la zone active [22].

Pour des lasers à puits quantiques (QWLs) émettant à  $1\mu\text{m}$ ,  $d \approx 150\text{\AA}$ ,  $n_a = 3.5$ ,

$$\Delta n_a = (n_a^2 - n_c^2)/n_c^2 = 0.1,$$

On aura:

$D \approx 0.1$ , et  $\Gamma$  peut être approximé à

$$\Gamma_T \approx 4 \pi^2 \cdot n_c \cdot \Delta n_c \cdot \sqrt{\frac{d}{\lambda}} \quad (\text{II-44})$$

La valeur typique de  $d$  est de  $1.5\text{nm}$ , d'où un facteur de confinement de  $0.3$  à  $0.4\%$ , pour une longueur d'onde de  $1$  à  $1.5\mu\text{m}$  [22]. Dans une structure à unique puits quantique, la largeur  $d$  de la zone active est très inférieure à la longueur d'onde  $\lambda$  du rayonnement, et l'expression du facteur de confinement peut être approximée par [20]:

$$\Gamma_{sw} = \frac{2\pi^2}{\lambda^2} (n_{int}^2 - n_{ext}^2) d^2 \quad (\text{II.45})$$

Afin d'augmenter  $\Gamma$ , on réalise des structures à confinements séparés (Separate Confinement Heterojunction) *SCH*, où les porteurs sont confinés dans un puits quantique d'épaisseur  $L_z$ , et les photons sont confinés dans un guide d'onde de largeur  $d_{ph}$ . On améliore encore  $\Gamma$  en remplaçant l'unique puits quantique par une structure à multi puits quantiques (MQWs) [22], dont le  $\Gamma$  est approximé à:

$$\Gamma_{MQW} = \frac{2\pi^2}{\lambda^2} \frac{d_w}{d} N \cdot d^2 (\eta_a^2 - n_c^2) \quad (\text{II-46})$$

$$\text{Avec } \eta_a = n_a d_w + \frac{(d-d_w) \cdot n_c}{d} \quad (\text{II-47})$$

$d$  l'épaisseur totale de la structure à puits quantiques,  $d_w$  l'épaisseur de chaque puits, et  $N$  le nombre de puits. Si  $(N_p, d_p, n_p)$  et  $(N_b, d_b, n_b)$  sont respectivement le nombre, l'épaisseur, et l'indice de réfraction des matériaux puits/barrière, l'indice moyen de la zone d'épaisseur  $N_p d_p + N_b d_b$  contenant la structure de multi puits donné par Streife [23] est:

$$n = \frac{N_p d_p n_p + N_b d_b n_b}{N_p d_p + N_b d_b} \quad (\text{II-48})$$

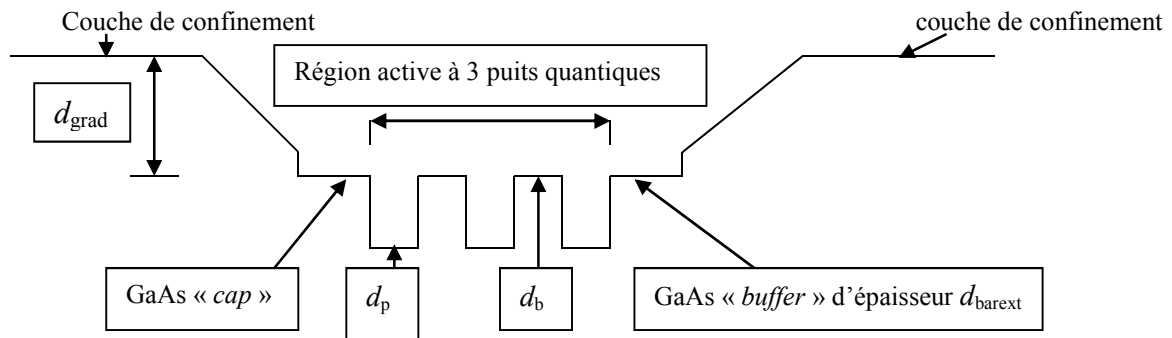


Fig. II.17 : Représentation schématique d'une structure à 3 puits quantiques à barrière de GaAs [19].

Le facteur de confinement  $\Gamma$  de la structure à multi puits, par rapport à celui de celle d'un puits unique augmente certes, mais au détriment du gain qui diminue. Il est souhaitable de conserver donc l'unique puits et améliorer  $\Gamma$ , on y parvient en remplaçant le guide d'onde à saut d'indice par un guide à gradient d'indice, où la composition (donc l'indice) de l'alliage constituant le guide varie graduellement, ces structures sont dites *GRIN-SCH* (GRaded Index Index-SCH) [23].

L'augmentation progressive de la hauteur des barrières de potentiel dans le guide a bénéfiquement deux effets sur le confinement de porteurs [23], l'un associé aux fonctions d'ondes réduisant l'étalement de porteurs à l'extérieur de la zone active, l'autre lié à la densité d'états. Dans le guide à gradient de composition, l'augmentation progressive de la largeur du puits entraîne un confinement électronique réduisant sévèrement la densité d'états électroniques au fond du guide où les porteurs restent dans le puits, ce qui réduit la sensibilité à la température.

### II.8.5.Lasers à multi puits quantiques

Que ce soit pour un laser à SC massif ou à puits quantique, on sait que la densité de porteurs au seuil de transparence (seuil d'oscillation laser) est identique [21]. Inversement, le courant de seuil décroît proportionnellement à l'épaisseur (ou taille) de la région amplificatrice  $d$ . Quant au gain, il croît, en fonction du courant, plus rapidement dans un puits quantique que dans un système à hétérojonctions (HJs). Enfin, le gain optique dans le puits quantique sature

rapidement avec le courant de pompe, or qu'il augmente continument en HJs massives [2] voir Fig. II.18.

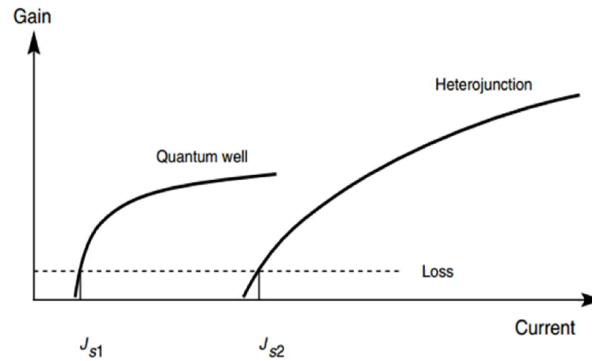


Fig. II.18. Comparaison des courbes gain-courant dans un laser à hétérojonction et un laser à puits quantiques [2].

### II.8.5.1 Influence du nombre de puits sur le courant de seuil

Plus le nombre de puits quantiques est grand, plus est haut le gain optique (donc les pertes sont compensées), mais d'autre part, le courant de seuil augmente proportionnellement à ce nombre de puits. Il y'a donc un optimum qu'on obtient en définissant [2]:

Le gain maximal  $G_1$  d'une structure à un seul puits quantique ( $N = 1$ ) soit:

$$G_1 = \Gamma_{g0} \ln\left(\frac{J_1}{J_{tr,1}}\right) \quad (\text{II-49})$$

Avec  $J_1$  et  $J_{tr,1}$  sont respectivement le courant de pompe et le courant de transparence de la structure à puits unique.

Le gain  $G_N$  de la même structure précédente, mais avec  $N$  puits quantiques. En supposant le couplage avec l'onde électromagnétique identique dans tous les puits. Dans ce cas le gain le  $G_N$  est défini comme suit :

$$G_N = N G_1 = N \Gamma_{g0} \ln\left(\frac{J_1}{J_{tr,1}}\right) \quad (\text{II-50})$$

$J_N$  est le courant de pompe de la structure à multi puits quantiques (MWQ).

$$J_N = NJ_1 = Nq \frac{n_s}{t_{tot}} \quad (\text{II-51})$$

Si on remplace dans (II.50)  $J_N$  par son expression de (II.51), on obtient à la variation du gain optique en fonction du nombre de puits :

$$G_N = N \Gamma_{g0} \ln\left(\frac{J_1}{N J_{tr,1}}\right) \quad (\text{II-52})$$

La Fig. II.19 Montre la variation du gain normalisé en fonction du courant de pompage normalisé pour un nombre de puits  $N=1, 2, 3$  et  $4$ . on remarque ainsi que le seuil de transparence augmente proportionnellement avec le nombre de puits  $N$

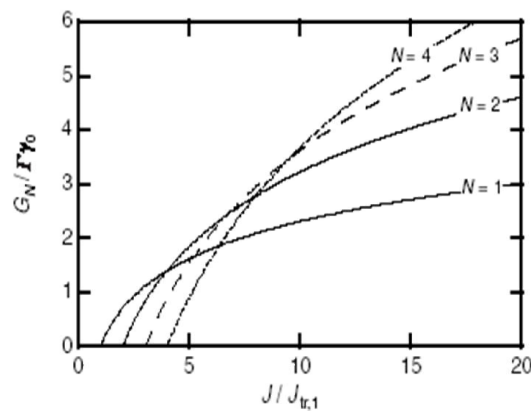


Fig. II.19. gain normalisé d'une structure à (MQW) à  $N$  puits quantiques en fonction de courants de pompe normalisé [2].

Cependant, le seuil d'oscillation est obtenu en écrivant l'égalité entre le gain donné par l'expression (II.50) et les pertes données par l'expression (II.37). La densité de courant de seuil d'un laser à multi puits quantiques soit :

$$J_{seuil,N} = \frac{N e J_{tr,1}}{\eta} \exp \left[ \frac{1}{N \Gamma_{g0}} \left( \alpha_p + \frac{1}{2L} \ln \frac{1}{R_{m1} R_{m2}} \right) - 1 \right] \quad (\text{II-53})$$

Dans l'expression (II.53) le rendement quantique  $\eta$  a été introduit, cette expression permet toutes les optimisations de cavité. Ainsi, le nombre de puits quantiques qui minimise le courant et donc obtenu par  $\frac{dJ_N}{dN} = 0$  soit :

$$N_{opt} = 1 + I \left[ \frac{1}{\Gamma g_0} \left( \alpha_p + \frac{1}{2L} \ln \frac{1}{R_{m1} R_{m2}} \right) - 1 \right] = \frac{\text{perte de la cavité}}{\text{gain du puits}} \quad (\text{II-54})$$

Cette dernière formule, peut être immédiatement interprétée. De même le courant de seuil  $J_{seuil,N}$  qui est le produit de l'équation (II.53) par  $Lw$ , ou  $w$  est la largeur de la structure, présente en fonction de la longueur  $L$  de la cavité un minimum. Cette longueur optimale est obtenue en dérivant  $J_{seuil,N}$  par rapport à  $L$  ce qui donne :

$$L_{opt} = \frac{1}{2N\Gamma g_0} \ln \frac{1}{R_{m1} R_{m2}} \quad (\text{II-55})$$

En résumé, le seuil d'une diode laser et les différents moyens de diminuer ce seuil, a constitué la principale préoccupation de la communauté travaillant sur les lasers à semi-conducteurs pendant une bonne vingtaine d'années. Désormais les seuils des lasers à semi-conducteurs sont assez bas (typiquement  $200 \text{ A.cm}^{-2}$ ) mais d'autres performances font l'objet d'une recherche sans répit. Parmi celles-ci, la puissance maximale que peut sortir une diode laser. Lorsqu'on cherche à sortir le maximum de puissance d'une diode laser, on augmente le courant et la puissance de sortie augmente presque linéairement avec ce courant au-dessus du seuil. Au-dessus du seuil, augmenter le courant revient encore à augmenter le nombre de porteurs qui traversent la zone active (par définition même du courant). Tout courant au-dessus du seuil est converti en lumière, mis à part certaines pertes toujours présentes (absorption des photons émis, recombinaisons non radiatives) qui permettent de définir un rendement différentiel en watt/ampère. Il s'agit de la pente de la caractéristique  $I(V)$  de la diode laser, dont un exemple est présenté sur la Fig. II.20.

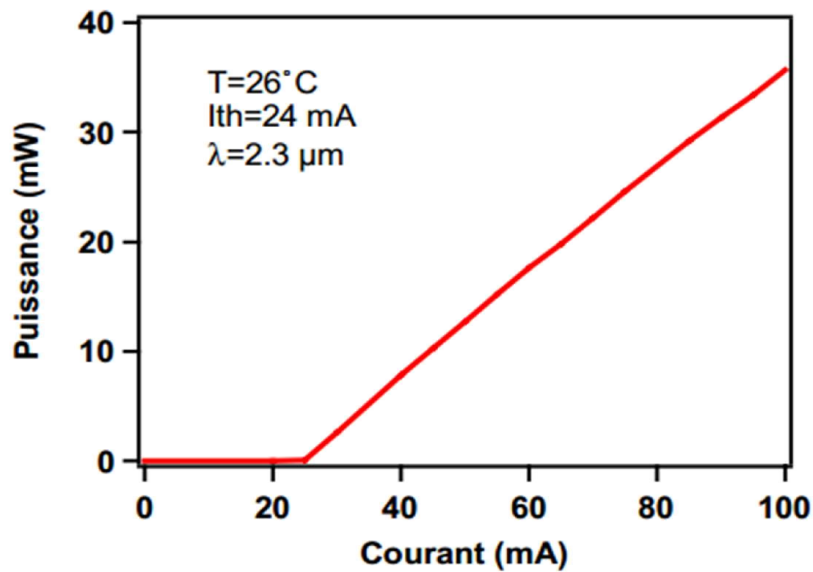


Fig. II.20. Caractéristique I(V) d'une diode laser à base d'Antimoine (le matériau composant les puits quantiques est le quaternaire GaInAsSb), émettant dans le moyen infrarouge. Le courant de seuil est de 24 mA (collaboration Université de Montpellier/Thomson CSF LCR) [24].

Pour les courants d'injection très élevés, les caractéristiques de la diode finissent néanmoins par se dégrader, parfois définitivement. La dégradation des performances peut provenir d'abord de l'augmentation des canaux non-radiatifs avec le courant (courants de fuite, mécanismes de recombinaison non radiative plus efficaces pour une densité de porteurs élevée...). Il peut exister également des problèmes thermiques, les mêmes problèmes qui ont rendu les progrès des lasers à semi-conducteurs assez lents au début de leur histoire. Les pertes non radiatives (en particulier sur les surfaces du cristal, au niveau des facettes miroirs), l'absorption résiduelle contribuent à chauffer le composant. Plusieurs phénomènes s'associent pour une augmentation de la température. Il est intéressant à noter quand la température augmente, le gain optique diminue, ainsi que le gap du matériau. La montée en température de la structure peut aussi contribuer aux migrations de dislocations qui vont augmenter les pertes non radiatives et donc l'échauffement. Aussi la montée en puissance, provoque la dégradation de la structure laser. A cet effet, la haute puissance détruit finalement le composant.

Pour traiter ces problèmes, le traitement des surfaces (passivation, dépôts de miroirs diélectriques qui ont également une fonction de limitation de la fragilité des facettes vis-à-vis du flux optique) ainsi que l'évacuation de la chaleur par l'embase sur laquelle est soudé le semi-conducteur sont des points très délicats (nécessitant un important savoir-faire).

Pour résoudre le problème lié à et pour avoir plus de puissance, il est naturel d'assembler différents lasers côte à côte sur une barrette laser (au détriment naturellement de la qualité de faisceau globale) [24].

La gestion de la dissipation thermique de ces barrettes est un point crucial, d'autant plus difficile à résoudre que la densité de composants est grande. On peut avoir éventuellement recours à un système de refroidissement des composants laser qui peut être obtenu par la circulation de fluide dans les embases en cuivre. La Fig. II. 21 montre un exemple de barrette vendu par Thomson. Si l'on veut toujours plus de puissance, on peut empiler des barrettes ensemble. Une barrette de 1 cm de large peut sortir aujourd'hui 50 watts continu, un empilement de barrettes peut fournir des puissances supérieures à 300 watts continu et des puissances crêtes focalisées dépassant les  $10 \text{ kW.cm}^{-2}$ .

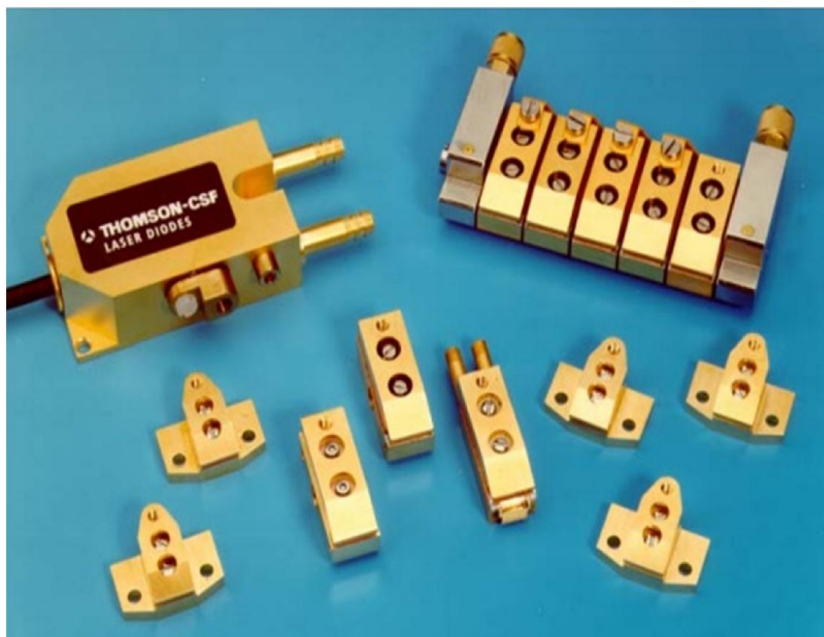


Fig. II. 21. Diode laser (barrettes de puissance) vendus par Thomson-CSF Laser Diodes. Image est prise de la référence [24].

## II.8.6. Quelques structures laser particulières

### II.8.6.1. Les lasers à cavité verticale émettant par la surface ( VCSELs )

Le but est de réaliser un laser émettant non plus dans le plan des couches, mais perpendiculairement à la surface des couches semi-conductrices cette structure est appelée VCSEL. Un laser VCSEL (Vertical Cavity Surface Emitting Laser ) possède une cavité Fabry- Perrot verticale obtenue par épitaxie de faible épaisseur à l'intérieur de laquelle sont logés des puits quantiques servant de milieu actif et fournissant le gain optique, et des miroirs extrêmement parallèles de SCs (non métalliques) épitaxies. Le faible volume de la couche active impose que les miroirs de la cavité aient de fortes réflectivités, obtenues avec des réflecteurs de Bragg distribués DBR, pour avoir un gain suffisant conditionnant l'émission stimulée. La réflectivité des miroirs est forte si le nombre de bicouches empilées pour former les DBRs est élevé, et l'écart d'indice entre deux couches adjacentes est grand [2, 25] .Ces structures émettant par la surface ont été décrites par Jewell et al. [26]; Des réalisations plus récentes sont décrites dans Vertical Cavity Surface Emitting Lasers III, édité par Kent Choquette et Chun Lei Choquette [27], la Fig. II.22 montre une coupe schématique écartée d'une VCSEL.

Pour qu'un VCSEL puisse fonctionner, il faut faire un compromis entre la longueur d'onde d'émission du milieu actif et la longueur d'onde de résonance de la cavité Fabry-Perrot, et le domaine de longueurs d'onde pour lequel les miroirs de Bragg sont réfléchissants, ce qui nécessite de contrôler finement l'épaisseur et la composition des couches, conditions pouvant être satisfaites par les techniques de croissance MBE et MOVPE [25].

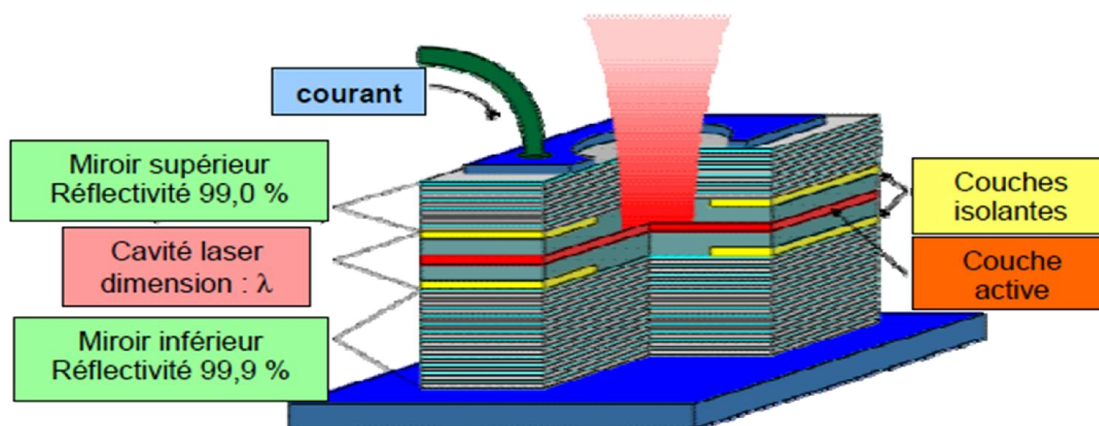


Fig. II. 22 : Coupe schématique écartée d'une VCSEL .Image tirée de la Réf. [19].

### II.8.6.2. Les lasers à cavité verticale externe émettant par la surface

Lasers de surface-émission d'externe-cavité verticale, ou VECSELS, soit semblable à VCSELS. Dans VECSELS les miroirs sont distingués par une construction dans laquelle un des deux miroirs est externe à la structure de diode. En conséquence, la cavité inclut une région du libre-espace. Une distance typique de la diode au miroir externe serait de 1 (un) centimètre.

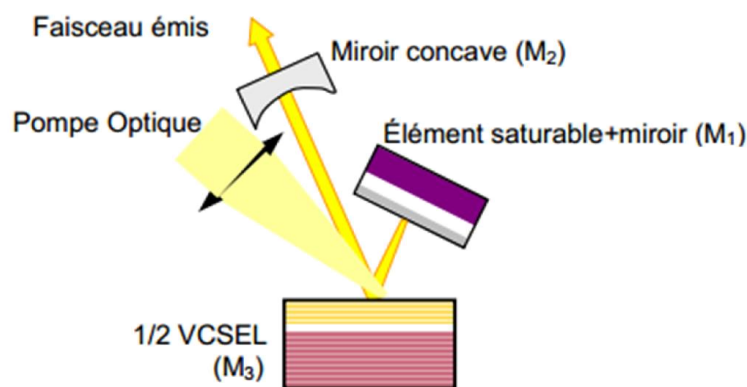


Fig. II.23. Représentation schématique d'une configuration de VCSEL en cavité externe pompé optiquement avec un élément saturable dans la cavité résonante pour faire un blocage passif des modes de cavité pour la génération d'impulsions optiques courtes. Image tirée de la référence [28].

Il existe d'autres composants lasers particuliers que nous n'avons pas évoqués dans cette section. A titre d'exemple, nous citons les lasers à boîtes quantiques qui sont décrite en détail par Bimberg et al, et E. Rosencher et al. [2, 29], les lasers à modes bloqués [30], ou encore les lasers pompés optiquement [31].

## II.8. Quelques exemples de diodes lasers à base du semi-conducteur III-V

Le marché des diodes laser [Laser Diodes (LDs)] est pour moitié dévolu aux communications et pour moitié à l'impression et au stockage de l'information. En ce qui concerne les communications, les fibres optiques utilisées étant transparentes entre 1,3 et 1,55  $\mu\text{m}$ , les LDs utilisées sont fabriquées à partir de GaAs et InP. Cependant, une émission à 1,55  $\mu\text{m}$  a été mise en évidence pour InGaAsN sur GaAs [32].

En ce qui concerne l'impression et le stockage l'information, le marché est pour l'instant dominé par les LDs rouges à 780 nm pour les CD et à 635 ou 650 nm pour les DVD. Des LDs à courte longueur d'onde (400-600) nm de faible encombrement et de moyenne (5 mW) ou haute (35-50 mW) puissance sont attendues afin d'améliorer les performances. En effet, une diminution de la longueur d'onde permet une meilleure focalisation du spot d'un faisceau, la surface du spot étant proportionnelle au carré de la longueur d'onde. La qualité de l'impression et la densité de stockage sur disques optiques seront donc considérablement améliorée par l'utilisation de LDs bleues ou violettes. Ainsi, la capacité de stockage d'un DVD passerait de 2,9 Gbyte à 30 Gbyte en diminuant la longueur d'onde de 635-650 nm à 410 nm. De plus, la lecture ne demande qu'une puissance de 5 mW alors que l'écriture (gravure) nécessite une puissance de 35-50 mW [32].

Les LDs bleues actuellement produites sont des LDs DBR infrarouge haute puissance associées à des matériaux non linéaires comme  $\text{LiNbO}_3$  capables de générer un faisceau à 425nm (bleu violet). Celles-ci sont assez puissantes (15mW), avec peu de bruit de fond et ont un faisceau de très cohérent. Elles sont cependant très chères, peu compactes et nécessitent un alignement mécanique précis. Les LDs à base d'InGaN sont donc promises à un grand avenir pour des dispositifs moins coûteux et plus simples [32].

Les LDs à multiples puits quantiques (MQW) réalisées sur substrat de saphir, développées par Nichia seront tout d'abord analysées. Les LDs verticales, une autre configuration de diodes laser. Les LDs MQW réalisées sur substrat de SiC, développées par Cree, seront finalement décrites.

### II.9.1. LDs InGaN/GaN/AlGaN à MQW sur substrat de saphir

Les premières LDs réalisées par Nakamura [33] pour Nichia sont présentées à la Fig II-24 (a). Elles comprennent une structure  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  à multiples puits quantiques MQW, avec une variation verticale de la composition de  $x$  égal 0,15 en bas à  $x$  égal 0,20 en haut. Cette structure est constituée de 4 couches actives et de 5 couches de barrière quantique. Les couches actives sont des films de 35 Å de  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  non dopés,  $x$  variant verticalement de 0,15 en bas à 0,20 en haut. Les couches de barrières quantiques sont des films de 70 Å de  $\text{In}_{0,02}\text{Ga}_{0,098}\text{N}$  non dopés. Les couches de GaN dopés p et n servent de guides de lumière et

celles de  $\text{Al}_{0,08}\text{Ga}_{0,92}\text{N}$  dopés p et n de couches de confinement des porteurs de charge et de la lumière émise par la structure InGaN SQW.

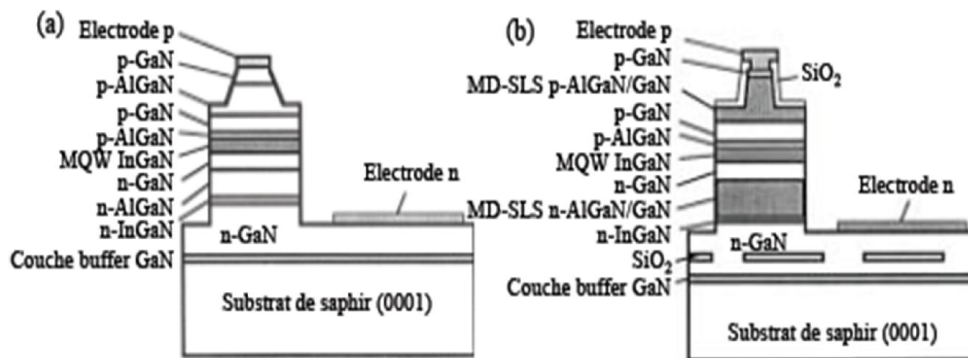


Fig. II-24 : Structure des LDs InGaN MQW (a) sur substrat de saphir selon S. Nakamura [34] (b) avec des couches de revêtement MD-SL sur substrat ELOG selon S. Nakamura [33]

En fonctionnement en régime continu et à température ambiante, ces LDs émettent à 405nm (violet bleuté) lors de l'application d'un courant continu. La densité de charge seuil et la tension seuil sont trop élevées,  $3,6 \text{ kAcm}^{-2}$  et 5,5V, et la puissance est encore faible, de 1,5 mW par facette. De plus, elles ne présentent qu'une durée de vie très limitée, de 35h [34].

Les mauvaises performances de ces LDs proviennent de la mauvaise qualité cristalline de la couche du revêtement AlGaN, elle-même due à la différence de réseau avec la couche de GaN dopé p immédiatement déposée sur le substrat. Les super-réseaux de couches contraintes à modulation de dopage (Modulated Doped-Strained-Layer Superlattices MD-SLS) ont été développés pour limiter les contraintes dans les couches AlGaN. Ils consistent en une succession de couches de AlGaN dopées n et de couches de GaN non dopées [33].

La Fig. (II-24 (b)) présente la structure des LDs InGaN MQW avec des couches de revêtement MD-SLS réalisées à nouveau par Nakamura et al. Pour Nichia. On remarque, par la présence de masques en  $\text{SiO}_2$ , que le dispositif a été réalisé sur le substrat de GaN par la technique ELOG (Epitaxially Lateral Over Grown). Celle-ci permet de réduire fortement la densité de dislocations dans la couche épitaxie, et ainsi d'améliorer la qualité cristalline des couches déposées [34].

Les meilleures performances relatives pour ces LDs en fonctionnement en régime continu à température ambiante sont d'une part une densité de courant seuil de  $1,2 \text{ kAcm}^{-2}$  et d'autre

part une intensité seuil 4,3V, pour une longueur d'onde de 420nm (bleu-violet) à une puissance de 5mW. Le rendement quantique est de 39% et la durée de vie estimée à 10000h. Ces performances sont proches de celles demandées pour la lecture de disques optiques et l'impression avec une définition de 1200dpi (dot per inches), le standard courant étant de 600dpi [32].

### II.9.2. LDs InGaN/GaN/AlGaN MQW verticales

Les LD précédemment décrites ont une géométrie verticale, c'est à dire que l'émission se fait sur les côtés du dispositif. L'obtention de LDs verticales présente une utilité, entre autre pour simplifier les dispositifs intervenant dans le stockage de l'information sur disque optique. Un premier essai a été réalisé en utilisant les LDs précédentes et en ôtant le substrat de saphir afin de le remplacer par une électrode Fig. (III-25 (a)). Les performances de ce type de dispositif n'ont pas encore été optimisées, même si son fonctionnement semble plus simple [35]. D'autres dispositifs peuvent permettre d'obtenir des LDs verticales, les lasers émettant grâce à une surface émettrice à cavité verticale [Vertical Cavity Surface Emitting Laser (VCSEL)] Ils nécessitent deux miroirs à très haute réflectivité, un en bas de la LD et l'autre en haut, afin de réduire la densité de courant seuil. Ce sont des miroirs DBR (Distributed Bragg Reflector) composés d'un grand nombre de couples de couches AlGaN/GaN. D'autre part, la cavité laser doit être extrêmement lisse, ce qui nécessite l'utilisation de la technique du dry et ching afin de diminuer la rugosité des faces des miroirs. Les densités de courant seuil attendues sont de  $1\text{kA.cm}^{-2}$ , voire moins [36].

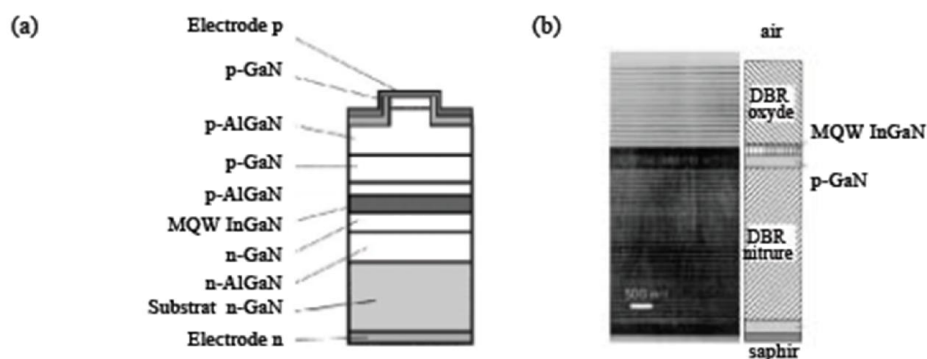


Fig. II-24 : (a) Structure des LDs InGaN/ GaN/AlGaN MQW verticales (b) Structure des LDs InGaN/GaN/AlGaN MQW VCSEL selon B. Monemar et al. [35].

La possibilité de réaliser des LDs InGaN MQW VCSEL par pompage optique a été montrée par Someya et al. [36]. (Fig. II-24 (b)). Le miroir du bas est un miroir DBR à 43 couples AlGa<sub>x</sub>N/GaN, de réflectivité 98%. Celui du haut est un miroir DBR à 15 couples ZrO<sub>2</sub>/SiO<sub>2</sub>, de réflectivité 99,5%. La structure MQW est composée de 26 couches actives In<sub>0,1</sub>Ga<sub>0,9</sub>N de 30Å et de 26 couches de barrière quantique In<sub>0,01</sub>Ga<sub>0,99</sub>N de 50Å.

Pour l'instant seul le pompage optique permet le fonctionnement des LDs InGa<sub>x</sub>N/GaN/AlGa<sub>x</sub>N MQW VCSEL. Le développement du pompage électrique de ces LDs, comme pour les précédentes, est attendu mais présente beaucoup de problèmes, étant donné la difficulté pour injecter des porteurs, en particulier les trous [32].

### III. 9. 3. LDs InGa<sub>x</sub>N/GaN/AlGa<sub>x</sub>N MQW sur substrat de 6H-SiC

Tout comme pour les LEDs, des LDs ont été réalisées sur substrats de SiC, afin d'en retirer les avantages suivants : meilleure qualité cristalline des couches épitaxiales, simplicité des montages. De plus, la fabrication des LDs nécessite de réaliser des facettes clivées de grande qualité. Dans le cas de couches épitaxiales sur substrat de saphir, elles doivent être réalisées par et ching, car il n'y a pas concordance entre les plans de clivages du saphir et de GaN ou de ses alliages. Le carbure de silicium 6H-SiC présente l'avantage de présenter des plans de clivages qui s'alignent parfaitement avec ceux de GaN. La réalisation des facettes clivées est donc plus simple et beaucoup plus précise. Deux firmes utilisent ce type de montage [37].

Les LDs ont tout d'abord été réalisées sur une couche sur une couche tampon conductrice AlGa<sub>x</sub>N afin de simplifier le montage, tout comme pour les LEDs réalisées sur substrat de SiC. La Fig. II-25 présente la structure des LDs réalisées par Bulman et al. [37] pour Toyoda Gosei. Elle comprend une structure MQW In<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>N, à 8 couches. La structure MQW est entourée de deux couches de Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>N non-dopées, servant de guides de lumière, x variant de 0 à 0,06 suivant les dispositifs. Viennent ensuite les deux couches de confinement Al<sub>0,12</sub>Ga<sub>0,88</sub>N dopées p et n. Les LDs sont revêtues sur les faces par du SiO<sub>2</sub> [37].

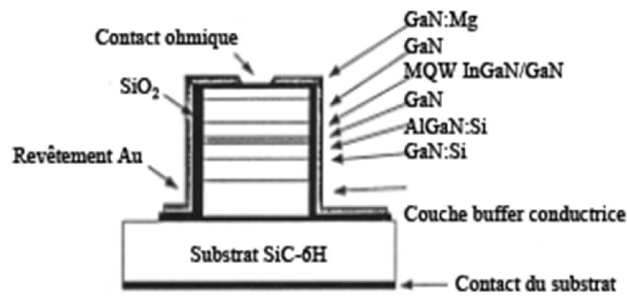


Fig. II-5.2 : Structure des LDs InGaN/GaN/AlGaN MQW sur substrat de SiC [37].

La longueur d'onde émise est de 405,6 nm, avec une largeur à mi-hauteur de 0,18 nm, ce qui est tout à fait correct. La puissance et la densité de courant seuil sont bien trop élevées, respectivement de 1,7mW et de  $7,1\text{kA}\cdot\text{cm}^{-2}$  [37]. Les inconvénients de l'utilisation de SiC pour ces LDs sont le prix du substrat lui-même et la difficulté de préparation de la surface de SiC. En raison de sa dureté, il est difficile d'obtenir une rugosité aussi fine que celle obtenue avec le saphir. On attend cependant une meilleure évacuation de la chaleur par exemple et un volume plus petit, tout comme pour les LEDs réalisées sur substrat de SiC [32]

## II.11. Conclusion

Dans ce chapitre nous avons abordé l'étude de la diode laser à semi-conducteurs, nous avons rappelé leurs atouts principaux, et nous avons donné les structures élémentaires des lasers à semi-conducteurs (diode à un seul puits quantique et multi puits quantiques) et leurs caractéristiques fondamentales. Nous avons présenté aussi les relations donnant le facteur de confinement, le gain optique et le courant de seuil de la diode laser à puits quantique, et nous avons donné quelques différentes diodes laser réalisées. A la fin de ce chapitre nous avons cité les domaines d'application de ce genre de dispositifs.

## Références du chapitre II

- [1] H. Mathieu, H. Fanet, Physique des semiconducteurs et des composants électroniques-6ème édition: Cours et exercices corrigés, Dunod, 2009.
- [2] E. Rosencher, B. Vinter, B.F. Levine, Intersubband transitions in quantum wells, Springer Science & Business Media, 2012.
- [3] K. Herbert, in, Google Patents, 1967.
- [4] M. Pospiech, S. Liu, An introduction (University of Hannover, 2014), (2004).
- [5] T. Maiman, Physical Review Letters, 4 (1960) 564.
- [6] R.N. Hall, G. Fenner, J. Kingsley, T. Soltys, R. Carlson, Physical Review Letters, 9 (1962) 366.
- [7] O.V. Bogdankevich, Quantum Electronics, 24 (1994) 1031-1053.
- [8] O. Bouchard, in, Université Paul Sabatier-Toulouse III, 2008.
- [9] C. Hepburn, in.
- [10] Y. Deshayes, in, Bordeaux 1, 2002.
- [11] M.J. Connelly, Semiconductor optical amplifiers, Springer Science & Business Media, 2007.
- [12] S. Bidnyk, J. Lam, B. Little, Y. Kwon, J. Song, G.E. Bulman, H. Kong, T. Schmidt, Applied Physics Letters, 75 (1999) 3905-3907.
- [13] H.D. Summers, J.D. Thomson, P.M. Snowton, P. Blood, M. Hopkinson, Semiconductor Science and Technology, 16 (2001) 140.
- [14] K. Petermann, Laser diode modulation and noise, Springer Science & Business Media, 2012.
- [15] J. Jacquet, in, Université Montpellier II-Sciences et Techniques du Languedoc, 2004.
- [16] J. Faist, F. Capasso, D.L. Sivco, C. Sirtori, A.L. Hutchinson, A.Y. Cho, Science, 264 (1994) 553-556.
- [17] M. Beck, D. Hofstetter, T. Aellen, J. Faist, U. Oesterle, M. Ilegems, E. Gini, H. Melchior, Science, 295 (2002) 301-305.
- [18] R. Maciejko, Optoélectronique, Presses inter Polytechnique, 2002.
- [19] Benchehima. Miloud, these de magister, Université El Djillali Liabès de Sidi Bel Abbès,(2011).
- [20] M. Yamada, Y. Haraguchi, IEICE TRANSACTIONS (1976-1990), 73 (1990) 131-132.
- [21] J. KAYAIAAN, B. ORSAL, de la famille exponentielle-Cécile Low-Kam 11 4 Pour l'arbre la cellule ose la cellulose!-Cédric Monteiro 13 5 Problèmes non-locaux en mécanique du solide-Azdine Nait-Ali 15 6 Microscopie acoustique haute fréquence-application à l'ima, 34.
- [22] B.R. Nag, Physics of quantum well devices, Springer Science & Business Media, 2001.
- [23] H. Mathieu, H. Fanet, Physique des semiconducteurs et des composants électroniques, Dunod Paris, 2001.
- [24] V. Berger, in: Collection de la Société Française d'Optique, EDP Sciences, 2002, pp. 01.
- [25] L. Grenouillet, in, Villeurbanne, INSA, 2001.
- [26] J.L. Jewell, J. Harbison, A. Scherer, Y. Lee, L. Florez, IEEE Journal of Quantum Electronics, 27 (1991) 1332-1346.
- [27] K.D. Choquette, K.M. Geib, R.D. Briggs, A.A. Allerman, J.J. Hindi, in: Symposium on Integrated Optoelectronics, International Society for Optics and Photonics, 2000, pp. 230-233.
- [28] A. Bousseksou, in, Université Paris Sud-Paris XI, 2007.
- [29] D. Bimberg, M. Grundmann, N.N. Ledentsov, Quantum dot heterostructures, John Wiley & Sons, 1999.
- [30] Y.-K. Chen, M.C. Wu, Quantum Electronics, IEEE Journal of, 28 (1992) 2176-2185.
- [31] H. Le, W. Goodhue, P. Maki, S. Di Cecca, Applied Physics Letters, 63 (1993) 1465-1467.
- [32] J.-Y. Duboz, Comptes Rendus de l'Académie des Sciences-Series IV-Physics, 1 (2000) 71-80.
- [33] S. Nakamura, S, Series on Semiconductor Science Technology, Oxford University Press Inc., &num, 6 (1998) 391-416.
- [34] S. Nakamura, M. Senoh, S.-i. Nagahama, N. Iwasa, T. Yamada, T. Matsushita, H. Kiyoku, Y. Sugimoto, T. Kozaki, H. Umemoto, Applied Physics Letters, 72 (1998) 211.
- [35] B. Monemar, G. Pozina, Progress in Quantum Electronics, 24 (2000) 239-290.

- [36] K. Iga, T. Honda, EMIS DATAREVIEWS SERIES, 23 (1999) 623-631.  
[37] A. Denis, in, Université Sciences et Technologies-Bordeaux I, 2003.

# Résultats et discussions

# CHAPITRE 3

Etude des propriétés

structurales et

optoélectroniques des ternaires

AlInAs, InGaAs et AlGaAs et

leurs binaires

## Chapitre III : Propriétés structurales et optoélectroniques des ternaires

### $Al_{1-x}In_xAs$ , $Al_{1-x}Ga_xAs$ et $In_{1-x}Ga_xAs$

#### III.1.Introduction

Le développement des dispositifs microélectroniques et optoélectroniques dépend de la disponibilité des matériaux appropriés. Les matériaux semi-conducteurs III-V, binaires, ternaires et quaternaires, offrent une grande variété de propriétés électroniques et optiques pour choisir les applications technologiques particulières [1]. Pour cette raison, les propriétés électroniques et optiques de beaucoup de semi-conducteurs III-V ont été intensivement étudiées théoriquement et expérimentalement. Ces études montrent que les semi-conducteurs III-V présentent des propriétés optiques adaptés à la réalisation des dispositifs modernes tel que les cellules solaires, les diodes lasers, les détecteurs infrarouges, les détecteurs photoélectriques et modulateurs électro-optiques [2, 3]. Les alliages ternaires  $Al_{1-x}In_xAs$ ,  $Al_{1-x}Ga_xAs$  et  $In_{1-x}Ga_xAs$  font partie des matériaux semi-conducteurs III-V, ils sont les constituants du quaternaires  $Al_xGa_yIn_{1-x-y}As$ . Ces ternaires offrent donc de multiples possibilités, aussi bien pour microélectronique et pour l'optoélectronique, qu'ils offrent sur la conception et le développement de dispositifs totalement nouveaux par l'ajustement des structures de bandes [4]. Ces ternaires peuvent élaborer par la technique (MBE) [5, 6]. Aussi, le ternaire AlInAs a été développé par la technique (LPE) [7]. Cependant, pour élargir le domaine des applications technologiques, ces ternaires ont fait l'objet de nombreuses études expérimentales et théoriques. Emeny et al.[8] ont étudié le taux de désorption d'indium avec la technique de photoluminescence du ternaire GaInAs. Grenet et al. [9,10] ont traité la ségrégation extérieure pour  $In_xGa_{1-x}As$  et  $In_xAl_{1-x}As$ .

Récemment, B.U. Haq et al. [11] ont étudié les propriétés structurales, électroniques et thermodynamiques des ternaires  $Ga_{1-x}Al_xAs$ ,  $Ga_{1-x}In_xAs$  and  $In_{1-x}Al_xAs$  par la méthode (FP-LAPW) où ils ont utilisé une super cellule de huit atomes. Cependant, la description exacte des propriétés optoélectroniques des matériaux est une étape cruciale pour développer et prévoir leurs applications technologiques.

Dans ce présent chapitre ; nous traitons les différentes propriétés telles que les propriétés structurales, électroniques et optiques des trois ternaires  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ ,  $\text{Al}_x\text{In}_{1-x}\text{As}$  et  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  dans la phase zinc-blend. Afin d'exploiter ces résultats obtenus pour déterminer les caractéristiques électroniques et optiques des composants optoélectroniques (diode laser, cellule solaire ...). En se basant dans cette étude, sur la méthode *ab-initio* (FP-LAPW) dans le cadre de la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) avec l'approximation basée sur le gradient généralisé (GGA) avec ces variantes (GGA-WC) et (GGA-PBESol), (GGA-EV) et (TB-mBJ) en utilisant le code Wien2k.

Nous avons calculés les différentes propriétés des ternaires ( $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ ,  $\text{Al}_x\text{In}_{1-x}\text{As}$  et  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ ) avec six concentrations différentes :  $x = 0.125, 0.25, 0.375, 0.5, 0.625, 0.75$  et  $0.825$  et ses composés binaires parents. Pour cela, une super-cellule cubique de 16 atomes a été utilisée.

La comparaison de nos résultats avec d'autres résultats théoriques et expérimentaux montre l'existence d'un très bon accord.

### III.2.Détail de calcul

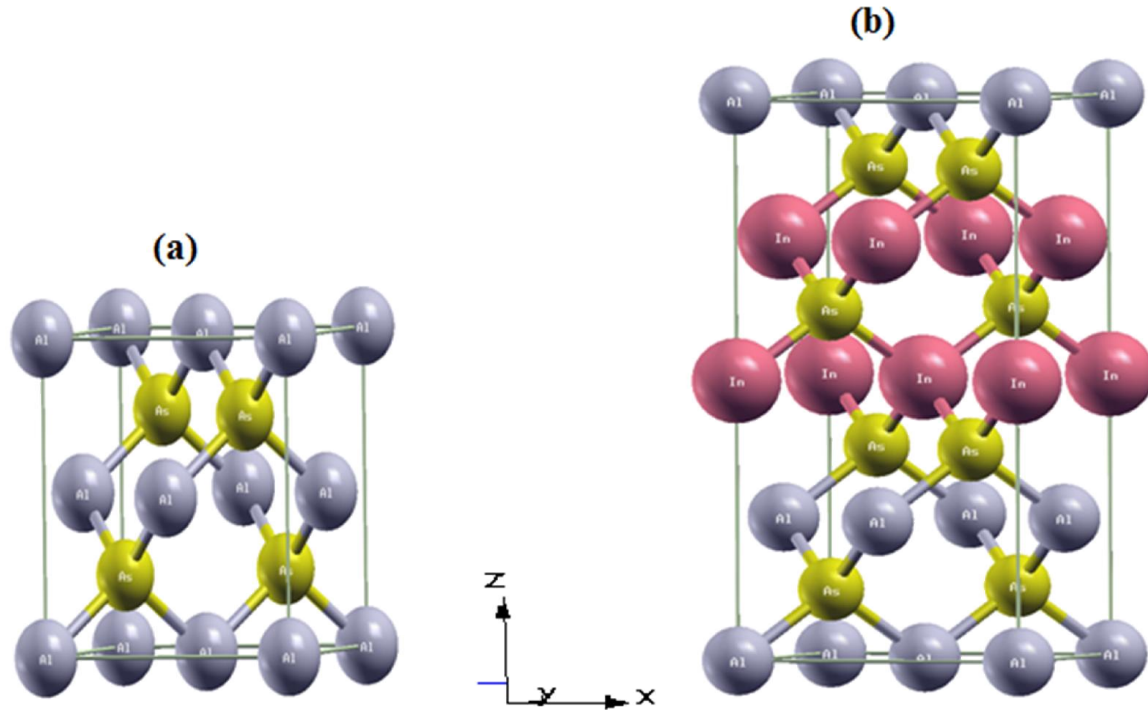
Dans ce courant chapitre, nous présentons une étude théorique de type *ab-initio* des composés sous étude à l'aide de la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) [12]. Nous avons utilisé la méthode des ondes planes augmentées et linéarisées (FP-LAPW) [4], Cette méthode est très utilisée pour simuler les propriétés structurales, électroniques et optiques, le code WIEN2K [13] dont lequel la méthode FP-LAPW est implémentée. Pour la détermination des paramètres structuraux, nous avons utilisé la récente approximation du gradient généralisé (GGA-WC) développée par Wu-Cohen [14]. L'introduction de cette dernière dans le calcul a donné une excellente description des propriétés structurales par rapport aux fonctionnelles les plus souvent utilisés (LDA) [15] et (GGA-PEB) [16]. les approximations (BPESol-GGA) [17], (GGA-EV) of Engel–Vodka [18] et (TB-mBJ) Tran-Blaha modified Becker-Johnson [19] ont été utilisées pour calculer les propriétés électroniques des  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ ,  $\text{Al}_x\text{In}_{1-x}\text{As}$  et  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ . À noter que ces dernières approximations ont été développée uniquement pour prédire la structure des bandes électroniques [20], et la nouvelle approximation et la plus fiable appelée Becker-Johnson modifiée Tran-Blaha (TB-mBJ). Car elle décrit exactement la structure électronique des solides et des isolateurs [11, 21, 22].

Tran et al. ont prouvé que cette approximation à corriger le problème de la sous-estimation de la valeur du gap due à l'utilisation des autres approximations (GGA et LDA) [20].

Dans la méthode FP-LAPW, la fonction d'onde, la densité de charge et le potentiel sont développés par des fonctions harmoniques sphériques à l'intérieur des sphères entourant les sites atomiques (sphères muffin-tin) et par une base d'ondes planes dans la région interstitielle de la cellule unitaire.

Dans cette étude, nous avons choisi la valeur du rayon  $R_{MT}$  2.0, 2.2 et 2.4 a.u. pour Al, Ga et In, respectivement ( $R_{MT}$  est le plus petit rayon muffin-tin dans la cellule unitaire). Le facteur de coupure d'onde plane  $K_{max}=8.0/R_{MT}$  a été choisi, après une série de test. La valeur maximale de  $l$  pour le développement de la fonction d'onde à l'intérieur des sphères a été limitée à  $l_{max}=10$ . Tandis que la densité de charge est développée en série de Fourier jusqu'à  $G_{max}=12(\text{Ryd})^{1/2}$ . L'énergie de coupure est prise égale -6 Ryd pour séparer le noyau des états de valence l'évolution des calculs itératifs se répète jusqu'à ce que la convergence de l'énergie totale soit stable à moins de  $0.10^{-4}$  Ryd.

Les binaires AlAs, GaAs et InAs se cristallisent dans phase B3 avec un groupe d'espace F-43m [23]. Afin de simuler les ternaires en discussion, une super cellule cubique de  $a(1 \times 1 \times 2)$  avec 16 atomes a été employé. Le nombre de k-points spéciaux dans la zone réduite de Brillouin a été pris égal 500 k pour le calcul des propriétés électroniques et 1000k pour les propriétés optiques. La super cellule cubique utilisé pour simuler ces ternaires est construite par 8 atomes de la valence III (Al, Ga ou In) et 8 de la valence V (As). Comme prototype, la structure cristalline du binaire AlAs et le ternaires  $\text{Al}_{0.500}\text{In}_{0.500}\text{As}$  sont montrée dans Fig. III. 1. La configuration des atomes Al, Ga, In, et As sont Al:[Ne]  $3s^2 3p^1$ , Ga:[Ar]  $3d^{10} 4s^2 4p^1$ , In:[Kr]  $4d^{10} 5s^2 5p^1$  et As:[Ar]  $3d^{10} 4s^2 4p^3$  où ils ont été traité comme les étant des états de valence.



**Fig.III.1.** La structure cristalline : (a) du binaire AlAs (primitive) (b) du ternaires  $\text{Al}_{0.500}\text{In}_{0.500}\text{As}$  ( $1 \times 1 \times 2$ ).

### III. 3. Propriétés structurales

Le module de compression d'une matière est la résistance de cette dernière contre une compression uniforme. Le module de compression  $B$  est défini par :

$$B = -V \frac{\partial P}{\partial V} \quad (\text{III-1})$$

Avec  $P$  et la pression,  $V$  et le volume,  $\frac{\partial P}{\partial V}$  est la dérivée partielle de la pression par rapport au volume. L'inverse du module de compression donne la compressibilité de la matière.  $B_0$  est le module de compression lorsque la pression  $P$  tend vers 0. L'équation d'état de Murnaghan [24] est donnée par:

$$E(V) = E_0 + \frac{B}{B'(B'-1)} \left[ V \left( \frac{V_0}{V} \right)^{B'} - V_0 \right] + \frac{B}{B'} (V - V_0) \quad (\text{III-11a})$$

$E_0$  et  $V_0$  sont l'énergie et le volume d'équilibre,  $B$  et  $B'$  sont le module de compressibilité et sa dérivée par rapport à la pression.

$$B = V \frac{\partial^2 E}{\partial V^2} \quad (\text{III-11b})$$

Le paramètre du réseau d'équilibre  $a_0$  est donné par le minimum de la courbe de l'énergie totale  $E_{tot}$  en fonction du volume.

Les propriétés structurales des binaires AlAs, GaAs et InAs, et leurs ternaires  $\text{Al}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}$ ,  $\text{Al}_{1-x}\text{In}_x\text{As}$  et  $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}$  ont été calculé par l'utilisation de l'approximation (GGA-WC) proposée par Wu and Cohen.

L'ajustement des différentes courbes à l'équation d'état de Murnaghan [24] nous a permis de déterminer le paramètre du réseau et le module de compressibilité la pression de ces matériaux. Nos résultats obtenus sont présentés dans le Tableau III.1 et ils sont comparés avec d'autres résultats expérimentaux et théoriques.

Les variations de l'énergie totale en fonction du volume pour les binaires (AlAs, GaAs et InAs) et les ternaires ( $\text{Al}_{0.500}\text{Ga}_{0.500}\text{As}$ ,  $\text{Al}_{0.500}\text{In}_{0.500}\text{As}$  et  $\text{In}_{0.500}\text{Ga}_{0.500}\text{As}$ ) sont montrés dans les Figs. III. 2 et III.3, respectivement.

Nos résultats sont en très bon accord avec les résultats théoriques obtenus par d'autres travaux utilisant des différentes méthodes DFT avec une légère différence qui peut être due au type d'approximation utilisée ou bien au choix des paramètres de calcul utilisés.

Ces constatations permettent de valider le choix des paramètres de calcul et de juger et d'évaluer la qualité des résultats obtenus.

Pour les binaires, Nos calculs faits avec l'approximation (GGA-WC) montre un bon accord avec la disposition des résultats expérimentaux et des calculs théoriques (voir tableau III. 2). Nous notons une surestimation des paramètres de maille calculés par cette l'approximation par rapport à l'expérience. En effet ces surestimations sont de l'ordre de 0.26%, 0.91% et 0.85% pour les composés binaires AlAs, GaAs et InAs, respectivement. Ceci est en accord avec le comportement général de cette approximation. Qui est connue pour sa surestimation du paramètre cristallin et sa sous-estimation du module de compressibilité. Ce dernier est sous-estimé par rapport à l'expérience de l'ordre de 11.95%, 18.44% et 6,61% pour les composés AlAs, GaAs et InAs, respectivement. Ce comportement est également constaté.

Il est intéressant à dire qu'une grande majorité des auteurs jugent que cette forme GGA donne des résultats remarquables par rapport aux approximations (PBE-GGA) [16] et (LDA), concernant les propriétés structurales des semi-conducteurs.

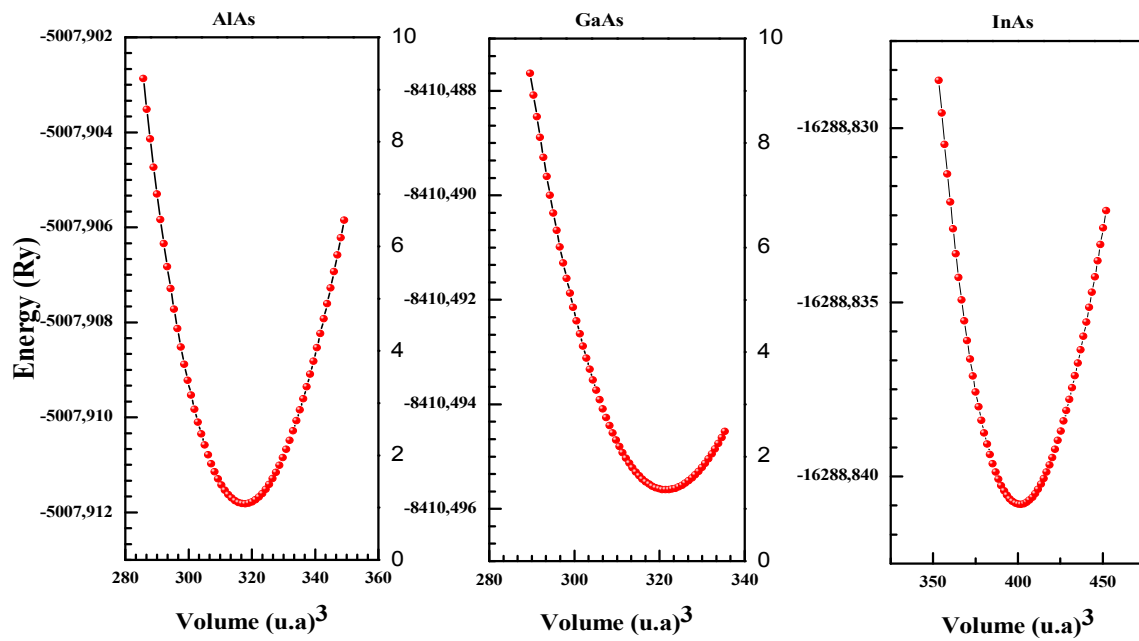


Fig. III. 2.Variation de l'énergie totale en fonction du volume pour les binaires AlAs, GaAs et InAs.

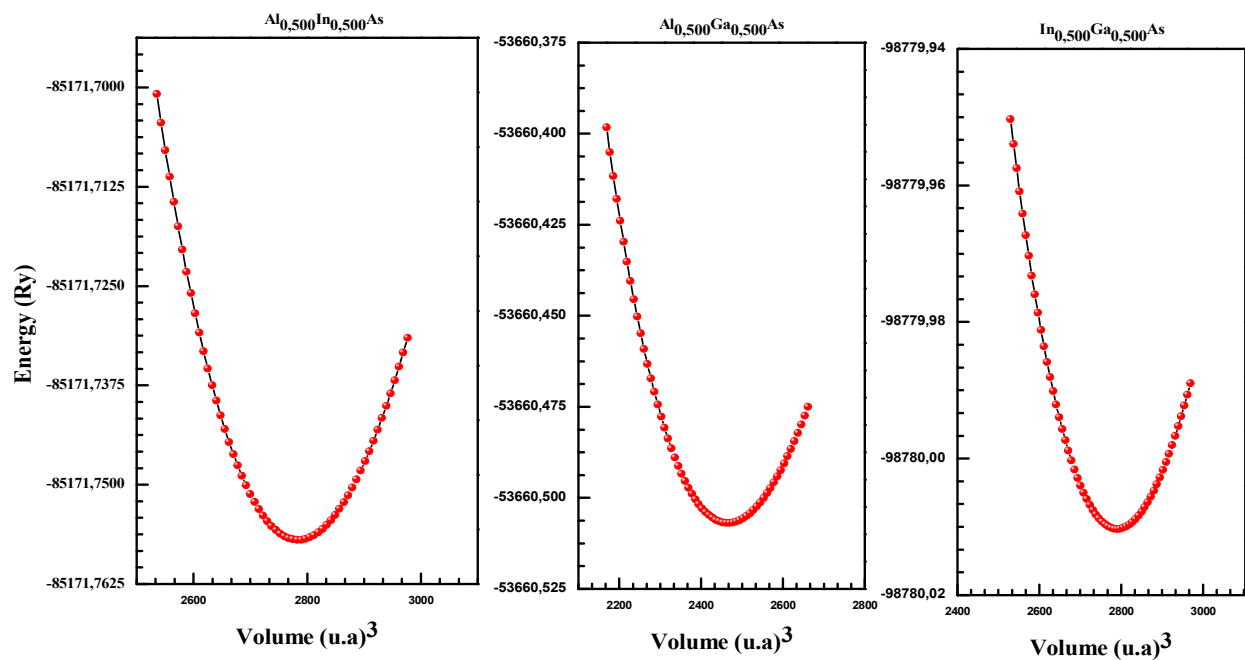


Fig. III.3. Variation de l'énergie totale en fonction du volume pour  $\text{Al}_{0,500}\text{Ga}_{0,500}\text{As}$ ,  $\text{Al}_{0,500}\text{In}_{0,500}\text{As}$  et  $\text{In}_{0,500}\text{Ga}_{0,500}\text{As}$ .

Table III. 1. Résultats obtenus du paramètre de maille et du module de compressibilité des binaires et des ternaires comparés avec d'autres résultats expérimentaux et théoriques.

Composé	Paramètre de maille a(A°)			Module de compressibilité B (GPa)		
	Présent	Autres travaux		Présent	Autres travaux	
	travail			travail		
	WC-GGA	Theo.	Exp.	WC-GGA	Theo.	Exp.
<b>AlAs</b>	5.677	5.68[25],5.678 [26]	5.661 [27]	72.182	72.25 [25], 72.3 [26]	<b>77.30 [28]</b> <b>78.1 [29]</b>
<b>GaAs</b>	5.668	5.666 [30]	5.6533[26]	68.5095	69.60 [31], 69.6 [26]	<b>75.00 [32]</b> <b>75.5 [28]</b>
<b>InAs</b>	6.0996	6.0995 [33]	6.058 [34]	56.3366	60.90 [35]	<b>58.0 [36]</b>
<b>Al<sub>0.875</sub>In<sub>0.125</sub>As</b>	5.7403	-	-	68.3362	-	-
<b>Al<sub>0.750</sub>In<sub>0.250</sub>As</b>	5.7988	5.732[11],5.878[37]	-	67.0527	51.645 [11]61.42 [37]	-
<b>Al<sub>0.625</sub>In<sub>0.375</sub>As</b>	5.8547	-	-	64.8499	-	-
<b>Al<sub>0.500</sub>In<sub>0.500</sub>As</b>	5.9087	5.964[11], 6.009[37]	-	63.0085	60.106 [11],52.69[37]	-
<b>Al<sub>0.375</sub>In<sub>0.625</sub>As</b>	5.9596	-	-	61.0697	-	-
<b>Al<sub>0.250</sub>In<sub>0.750</sub>As</b>	6.0081	6.094 [11], 6.131[37]	-	59.0666	74.364 [11],50.17[37]	-
<b>Al<sub>0.250</sub>In<sub>0.750</sub>As</b>	6.0556	-	-	57.2312	-	-
<b>In<sub>0.875</sub>Ga<sub>0.125</sub>As</b>	6.0574	-	-	57.0236	-	-
<b>In<sub>0.750</sub>Ga<sub>0.250</sub>As</b>	6.0126	6.095 [11],6.10[38]	-	57.6304	46.516 [11],49.1[38]	-
<b>In<sub>0.625</sub>Ga<sub>0.375</sub>As</b>	5.96445	-	-	58.9422	-	-
<b>In<sub>0.500</sub>Ga<sub>0.500</sub>As</b>	5.9134	5.978 [11],6.00[38]	-	60.8855	55.435 [11], 52.2 [38]	-
<b>In<sub>0.375</sub>Ga<sub>0.625</sub>As</b>	5.8583	-	-	61.9702	-	-
<b>In<sub>0.250</sub>Ga<sub>0.750</sub>As</b>	5.8000	5.865 [11],5.871[38]	-	64.3048	66.923 [11],54.0[38]	-
<b>In<sub>0.125</sub>Ga<sub>0.875</sub>As</b>	5.7363	-	-	66.3626	-	-
<b>Al<sub>0.875</sub>Ga<sub>0.125</sub>As</b>	5.6774	-	-	70.8677	-	-
<b>Al<sub>0.750</sub>Ga<sub>0.250</sub>As</b>	5.6764	5.731[11]	-	70.4931	60.808 [11]	-
<b>Al<sub>0.625</sub>Ga<sub>0.375</sub>As</b>	5.67545	-	-	69.8845	-	-
<b>Al<sub>0.500</sub>Ga<sub>0.500</sub>As</b>	5.6742	5.737[11]	-	69.5999	54.434 [11]	-
<b>Al<sub>0.375</sub>Ga<sub>0.625</sub>As</b>	5.6728	-	-	69.0610	-	-
<b>Al<sub>0.250</sub>Ga<sub>0.750</sub>As</b>	5.6713	5.742[11]	-	68.8878	52.402 [11]	-
<b>Al<sub>0.125</sub>Ga<sub>0.875</sub>As</b>	5.6700	-	-	68.4432	-	-

Nous avons tracé les variations des paramètres de réseau a (x) et les modules de compressibilités B(x) des trois ternaires dans la Fig. 4 et Fig. 5, respectivement. Les lignes pointillées représentent les valeurs déterminées par la loi de Vegard [39].

Suite à la figure III.4 nous avons constaté que la substitution de Al par In est accompagnée d'une augmentation du paramètre de réseau et diminution du module de compressibilité du ternaire Al<sub>1-x</sub>In<sub>x</sub>As, ceci est dû à la taille de l'atome d'aluminium (Al) qui inférieure de la tome d'indium (In). Pour le ternaire In<sub>1-x</sub>Ga<sub>x</sub>As, la substitution d'In par Ga est accompagnée d'une diminution du paramètre de réseau et d'une augmentation du module de compressibilité.

Ce phénomène il peut être dû à la taille de l'atome de galium (Ga) qui inférieure de la taille de l'indium (In). La décroissance /la croissance du module de compressibilité du ternaire  $Al_{1-x}In_xAs / In_{1-x}Ga_xAs$  en fonction de la concentration  $x$  (In/ Ga) signifie que le composé AlAs/ InAs est plus compressible que le composé InAs/GaAs. Pour le ternaire  $Al_{1-x}Ga_xAs$ , la substitution de Ga par Al est accompagnée par une faible augmentation du paramètre de réseau et d'une diminution du module de compressibilité.

Dans la Fig.III.4, Nous remarquons que les deux courbes représentant les deux ternaires ( $Al_{1-x}In_xAs$  et  $In_{1-x}Ga_xAs$ ) se croisent au point correspondant à la concentration  $x \approx 0.50$  qui donne un bon accord de maille entre ces deux ternaires d'où la possibilité d'utilisation des hétérostructures à cette concentration. Cette constatation est cependant vérifiée par Grenet et al. [9]. Donc la structure ( $Al_{0.50}In_{0.50}As / In_{0.50}Ga_{0.50}As$ ) peut être utilisée comme diode comme diode laser à puits quantique. Graphiquement la deuxième remarque importante qu'on peut la constater c'est l'existence d'une symétrie remarquable par rapport à l'axe vertical passant par ce point ( $x \approx 0.50$ ). Cette symétrie nous permet de valider le choix de la concentration  $x$  pour assurer l'accord de maille des structures que soit  $Al_{1-x}In_xAs / In_{1-x}Ga_xAs$  ou  $In_{1-x}Ga_xAs / Al_{1-x}In_xAs$ . Cela dépend du domaine d'utilisation (transistor, diode.....).

L'ajustement des trois courbes représentées dans la Fig. III. 4 à l'équation polynomiale du deuxième ordre nous a donné les équations suivantes :

$$a_{Al_{1-x}Ga_xAs}^{WC-GGA}(x) = 5.774 - 0.002 \cdot x - 0.006 \cdot x^2 \quad (III-2)$$

$$a_{Al_{1-x}In_xAs}^{WC-GGA}(x) = 5.67853 + 0.49914 \cdot x - 0.07834 \cdot x^2 \quad (III-3)$$

$$a_{In_{1-x}Ga_xAs}^{WC-GGA}(x) = 6.09861 - 0.31125 \cdot x - 0.1182 \cdot x^2 \quad (III-4)$$

Une variation non linéaire est clairement visible. Les valeurs obtenues du paramètre de courbure (bowing)  $b$  sont -0.006, -0.0783 et -0.118 pour  $Al_{1-x}Ga_xAs$ ,  $Al_{1-x}In_xAs$  et  $In_{1-x}Ga_xAs$ , respectivement. L'origine physique de faible écart est probablement due à l'écart entre les paramètres de réseaux des composés binaires parents correspondants à chaque ternaire. Les expressions (2), (3) et (4) peuvent être utilisées comme modèle pour déterminer les valeurs du paramètre de réseau pour n'importe quelles concentrations pour  $Al_{1-x}Ga_xAs$ ,  $Al_{1-x}In_xAs$  et  $In_{1-x}Ga_xAs$ , respectivement.

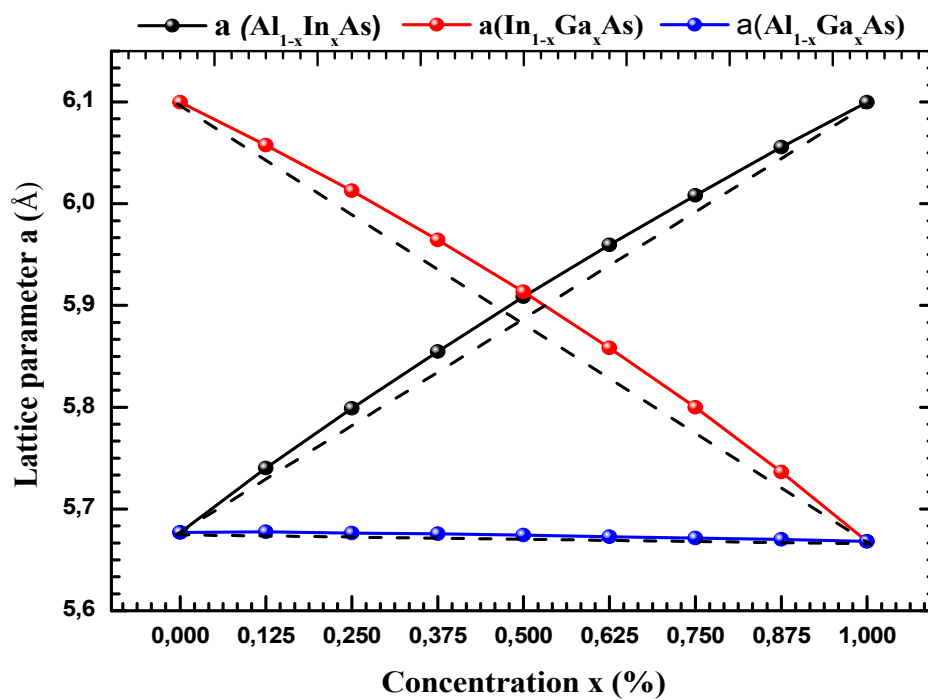


Fig.III.4.Variations des paramètres de réseau a(x) des ternaires Al<sub>1-x</sub>Ga<sub>x</sub>As, Al<sub>1-x</sub>In<sub>x</sub>As et In<sub>1-x</sub>Ga<sub>x</sub>As en fonction de la concentration x.

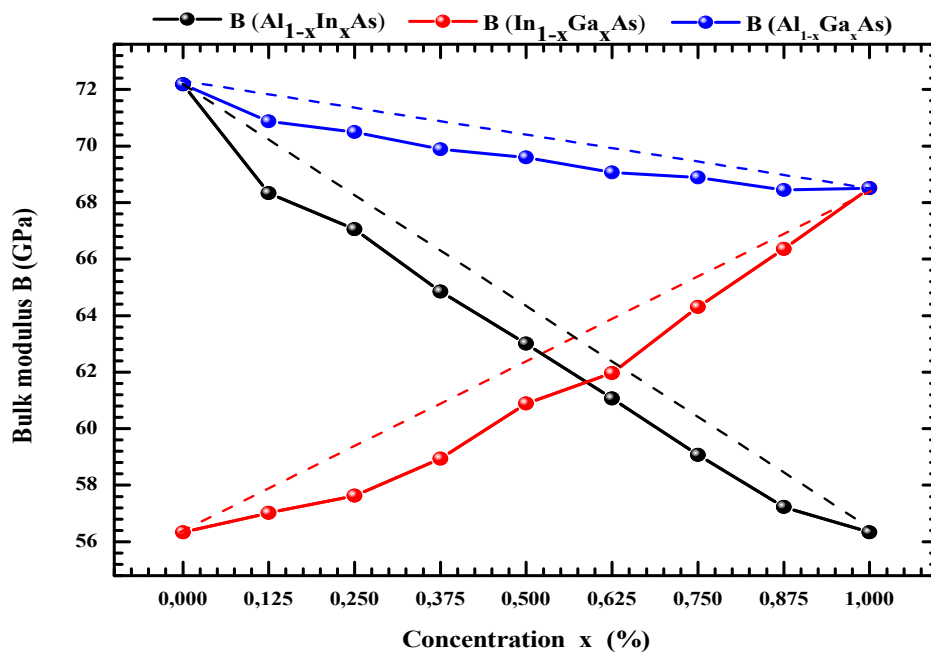


Fig.III.5.Variations des modules de compressibilités B(x) des ternaires Al<sub>1-x</sub>In<sub>x</sub>As In<sub>1-x</sub>Ga<sub>x</sub>As et Al<sub>1-x</sub>Ga<sub>x</sub>As en fonction de la concentration x

### III. 4. Propriétés optoélectroniques

#### III. 4.1. Propriétés électroniques

Les propriétés électroniques telles que les structure de band et les densités d'états totales (TPDOS) et partielles (PDOS) des ternaires  $Al_{1-x}In_xAs$ ,  $In_{1-x}Ga_xAs$  et  $Al_{1-x}Ga_xAs$  ont été calculées par l'utilisation de leurs paramètres de maille optimisées ( $a^{(WC-GGA)}$ ) et l'approximation (TB-mBJ). Comme prototype, nous avons tracé les structures de bande de ces ternaires pour  $x=0.5$  dans la Fig. III. 7 et celle des composés parent dans la Fig. III.6, calculées le long des différentes directions de haute symétrie dans la zone de Brillouin. Le niveau de Fermi est pris à l'origine des énergies. Suite à nos résultats, nous constatons que le binaire AlAs a un gap indirect suivant la direction ( $\Gamma-X$ ) tandis que les autres binaires GaAs et InAs et le ternaire  $In_{1-x}Ga_xAs$  à différentes concentration  $x$  présentent un gap direct, ce qui en bon accord avec l'étude théorique et expérimentales rapportées dans les Refs.[27, 25, 35]. Pour le cas du ternaire  $Al_{1-x}In_xAs$  une transition de gap a été repérée à la concentration en indium  $x= 0.006$  (i.e une concentration d'Al =93.4), montrant le ternaire  $Al_{1-x}In_xAs$  a un gap indirect ( $\Gamma-X$ ) pour  $0 \leq x < 0.066$  et direct ( $\Gamma-\Gamma$ ) pour le reste des concentrations  $x$  en aluminium. Pour le ternaire  $Al_{1-x}Ga_xAs$  une transition de gap a été repérée à la concentration en gallium  $x= 0.006$  (i.e une concentration d'Al =93.4), indique que le ternaire  $Al_{1-x}Ga_xAs$  possédant un direct ( $\Gamma-\Gamma$ ) dans l'intervalle  $x$   $0 \leq x < 0.944$  et indirect ( $\Gamma-X$ ) pour le reste des concentrations en gallium  $0 \leq x < 0.066$ . Concernant les valeurs expérimentales des ternaires  $Al_{1-x}In_xAs$ ,  $In_{1-x}Ga_xAs$  et  $Al_{1-x}Ga_xAs$  ont été déterminées à partir des relations citées dans les Refs. [40,41], respectivement.

$$Eg_{Al_{1-x}In_xAs}(x) = 1.511 + 2.22(x - 0.48) \quad (III-5)$$

$$Eg_{In_{1-x}Ga_xAs}(x) = 0.415 + 0.6337.x + 0.475 x^2 \quad (III-6)$$

$$Eg_{Al_{1-x}Ga_xAs}(x) = 2.701 - 1.119.x + 0.05 x^2 \quad (III-7)$$

Les résultats du gap en fonctions de la concentration ( $x$ ) des trois ternaires et leurs binaires sont illustrées dans le tableau III. 2 et montrées dans la Fig. III.8.

Les valeurs calculées du gap par l'approximation (TB-mBJ) des binaire AlAs, GaAs et InAs sont 2.162eV, 1.557eV et 0.583 eV, respectivement. leur correspondantes valeurs mesurées

sont 2.170 [29], 1.52 eV [42] et 0.416 [34], respectivement. D'autre part, ces résultats sont en bonne accord avec celles déterminées par des autres méthodes [25, 17, 43]. Pour les ternaires, nous avons remarqué qu'il y a une très bonne concordance entre les valeurs des gaps  $E_g^{(TB-mBJ)}$  obtenus par l'approximation (TB-mBJ) et les valeurs mesurés et les valeurs par calculées Haq et al. [11] par l'utilisation de l'approximation (TB-mBJ).

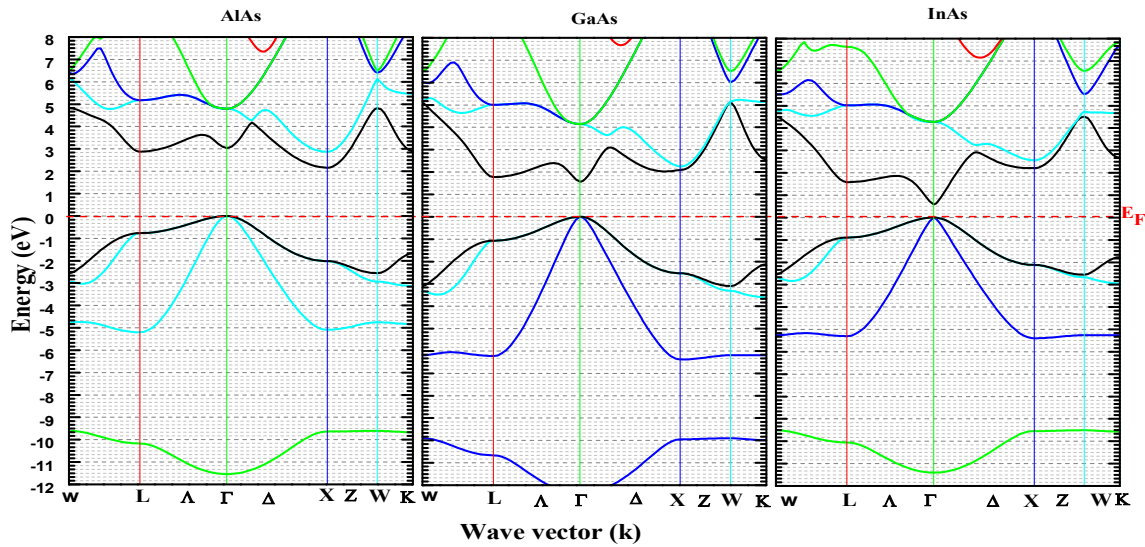


Fig.III.6. Structures de bande des binaires AlAs, GaAs et InAs calculé par approximation (TB-mBJ).

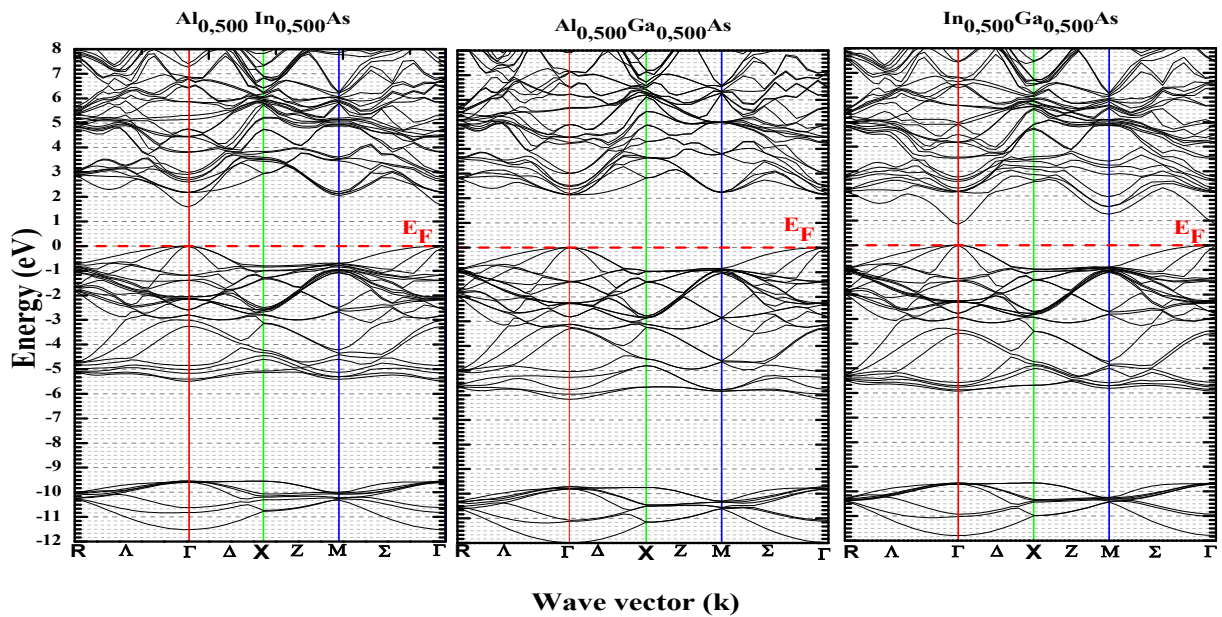
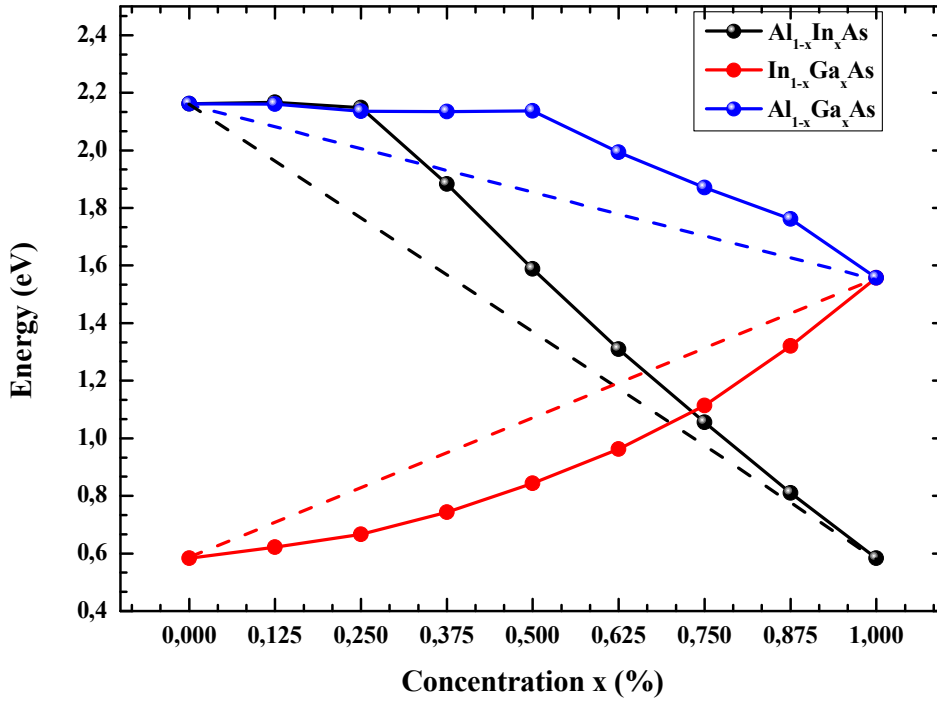


Fig.III.7. Structures de bande des trois ternaires calculées par l'approximation (TB-mBJ).

Tableau III.2.Valeurs du gap des trois ternaires et leurs binaires calculées avec les trois approximations (GGA-WC), (PBESol-GGA) et (TB-mBJ).

Composés	Gap d'énergie $E_g$ (eV)				
	Présent travail			Autre travaux	
	PBESol	EV-GGA	TB-mBJ	Théo.	Exp.
<b>AlAs</b>	1.341	2.315	2.162	1.310[35],1.40[35],2.250[35]	<b>2.170 [29]</b>
<b>GaAs</b>	0.380	0.957	1.557	0.336[44], 0.966[44], 1.03[35]	<b>1.52 [42]</b>
<b>InAs</b>	0.0001	0.209	0.583	0.00[35], 0.400[35]	<b>0.416 [34]</b>
<b>Al<sub>0.875</sub>In<sub>0.125</sub>As</b>	1.368	2.271	2.167		<b>2.388<sup>a</sup></b>
<b>Al<sub>0.750</sub>In<sub>0.250</sub>As</b>	1.134	1.869	2.148	1.760 [11],	<b>2.111<sup>a</sup></b>
<b>Al<sub>0.625</sub>In<sub>0.375</sub>As</b>	0.819	1.526	1.883	-	<b>1.833<sup>a</sup></b>
<b>Al<sub>0.500</sub>In<sub>0.500</sub>As</b>	0.534	1.222	1.588	1.443 [11]	<b>1.555<sup>a</sup></b>
<b>Al<sub>0.375</sub>In<sub>0.625</sub>As</b>	0.269	0.939	1.310	-	<b>1.277<sup>a</sup></b>
<b>Al<sub>0.250</sub>In<sub>0.750</sub>As</b>	0000	0.681	1.056	1.038 [11]	<b>1.000<sup>a</sup></b>
<b>Al<sub>0.125</sub>In<sub>0.875</sub>As</b>	0000	0.435	0.810	-	<b>0.723<sup>a</sup></b>
<b>In<sub>0.875</sub>Ga<sub>0.125</sub>As</b>	0.047	0.217	0.622	-	<b>0.501<sup>b</sup></b>
<b>In<sub>0.750</sub>Ga<sub>0.250</sub>As</b>	0.095	0.235	0.666	0.587 [11]	<b>0.603<sup>b</sup></b>
<b>In<sub>0.625</sub>Ga<sub>0.375</sub>As</b>	0.140	0.285	0.743	-	<b>0.719<sup>b</sup></b>
<b>In<sub>0.500</sub>Ga<sub>0.500</sub>As</b>	0.190	0.357	0.843	0.685 [11]	<b>0.850<sup>b</sup></b>
<b>In<sub>0.375</sub>Ga<sub>0.625</sub>As</b>	0.237	0.443	0.962	-	<b>0.996<sup>b</sup></b>
<b>In<sub>0.250</sub>Ga<sub>0.750</sub>As</b>	0.285	0.474	1.114	0.771 [11]	<b>1.157<sup>b</sup></b>
<b>In<sub>0.125</sub>Ga<sub>0.875</sub>As</b>	0.332	0.751	1.321	-	<b>1.333<sup>b</sup></b>
<b>Al<sub>0.875</sub>Ga<sub>0.125</sub>As</b>	1.352	2.247	2.160		<b>2,561<sup>d</sup></b>
<b>Al<sub>0.750</sub>Ga<sub>0.250</sub>As</b>	1.336	2.068	2.136	1.296[11]	<b>2,405<sup>d</sup></b>
<b>Al<sub>0.625</sub>Ga<sub>0.375</sub>As</b>	1.219	1.897	2.134		<b>2,263<sup>d</sup></b>
<b>Al<sub>0.500</sub>Ga<sub>0.500</sub>As</b>	1.101	1.760	2.137	2.21,2.09[45],0.989[11]	<b>2,110<sup>d</sup></b>
<b>Al<sub>0.375</sub>Ga<sub>0.625</sub>As</b>	0.924	1.556	1.993		<b>1,960<sup>d</sup></b>
<b>Al<sub>0.250</sub>Ga<sub>0.750</sub>As</b>	0.747	1.371	1.871	0.953[11]	<b>1,815<sup>d</sup></b>
<b>Al<sub>0.125</sub>Ga<sub>0.825</sub>As</b>	0.558	1.097	1.661		<b>1,660<sup>d</sup></b>

<sup>a</sup> Ref. [40].<sup>b</sup>Ref. [41].<sup>d</sup> Ref. [5]



**Fig. III. 8.** Variation du gap ( $E_g$ ) des trois ternaires en fonction de la concentration ( $x$ ). Les lignes en tiret indiquent les gaps calculés par loi de Vegard

La Fig. III. 8 représente la variation du gap ( $E_g$ ) des trois ternaires en discussion en fonction de la concentration  $x$ . Il est clairement visible de noter que les valeurs du gap  $E_g^{(TB-mBJ)}$  des deux ternaires  $Al_{1-x}In_xAs$  et  $Al_{1-x}Ga_xAs$  diminuent avec l'augmentation des concentrations In et Ga, respectivement. Contrairement pour le ternaire  $In_{1-x}Ga_xAs$ , la valeur du gap augmente avec l'augmentation de la concentration Ga. Ce comportement particulier est probablement un effet de la différence dans les électronégativités. L'interpolation polynomiale de ces courbes nous a donné les expressions suivantes :

$$E_{g, Al_{1-x}In_xAs}(x) = 2.259 - 0.771x - 0.960x^2 \quad (III-7)$$

$$E_{g, In_{1-x}Ga_xAs}(x) = 0.599 - 0.0599x + 0.957x^2 \quad (III-8)$$

$$E_{g, Al_{1-x}Ga_xAs}(x) = 2.701 - 1.119x + 0.05x^2 \quad (III-9)$$

Les valeurs du paramètre de courbure ( $b$ ) du gap obtenues sont -0.96, 0.95 et 0.05 pour  $Al_{1-x}In_xAs$ ,  $In_{1-x}Ga_xAs$  et  $Al_{1-x}Ga_xAs$ , respectivement.

### III. 4.2. Densité d'état électronique

Nous avons calculé les densités d'état électroniques des trois ternaires par l'utilisation de l'approximation (TB-mBJ) pour les trois ternaires  $Al_{1-x}In_xAs$ ,  $In_{1-x}Ga_xAs$  et  $Al_{1-x}Ga_xAs$  à différentes concentrations  $x$  ( $0 \leq x \leq 1$ ). Les densités d'états totales (DOS) et partielles (PDOS)  $Al_{0.500}In_{0.500}As$  et  $In_{0.500}Ga_{0.500}As$  sont montrées dans les Figs. III.9, III.10 et III.11, respectivement. Le maximum de la bande de valence ( $VB_{max}$ ) a été placé au niveau de Fermi ( $E_F$ ), ce qui correspond à l'origine des énergies. Ces figures montrent clairement que le profil de la densité de ces ternaires est divisée en trois régions: Bandes de valence inférieure (BVI), bande supérieure de valence (BVS) et la bande de conduction (BC).

Pour le ternaire  $Al_{1-x}In_xAs$ , la première région (BVI), dans la gamme d'énergie de -12 à -9.51 eV, la contribution est due principalement aux As (p) et In (d) orbitales, avec une légère participation des orbitaux Al (s, p) and In (s, p). Ces états représentent la structure électronique de base. La deuxième région (BVS), entre -5.60 eV et le niveau de Fermi ( $E_F$ ), est divisée en deux parties. La première, de -5.60 à -3.32 eV, la contribution est essentiellement due au l'orbital (s) des deux atomes In et Al, avec une faible participation des orbitales hybridées Al (s, p), et In (s, p). La deuxième partie, entre -3.32 eV et  $E_F$  (Fermi Niveau), est formée par les états s, p des atomes As et les états p des atomes Al et In avec une légère contribution des orbitales Al (s, p), In (s, d) and As (s, d). La troisième région (BC), au-dessus du niveau de Fermi, est formée par une mixture d'états de caractère (s, p) de l'atome Al et des états (s, p et d) des atomes In et As.

Pour le ternaire  $In_{1-x}Ga_xAs$ , la première région (BVI), dans la gamme d'énergie de -12 à -9.45 eV, est due principalement aux As(p) et In(d) orbitales, avec une légère participation des orbitaux In (s, p) and Ga (s, p et d). La deuxième région (BVS), entre -5.74 eV et le niveau de Fermi ( $E_F$ ), est divisée en deux parties. La première, de -5.74 à -3.53 eV, la contribution est essentiellement due au l'orbital (s) des deux atomes In et Ga, avec une faible participation des orbitales hybridées In (s, p), et Ga (p, d). La deuxième partie, entre -3.53 eV et  $E_F$  (Fermi Niveau), est formée par les états p des atomes In, Ga et As avec une légère contribution des orbitales In (s, d), Ga (s, d) and As (s, d). La troisième région (BC), au-dessus du niveau de Fermi, est formée par une mixture d'états de caractère (s, p, d) de l'atome In et des états (s, p et d) des atomes In et As.

Pour le ternaire  $\text{Al}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}$ , la première région (BVI) qui se trouve dans la gamme d'énergie entre -12 et 10 eV la contribution est due principalement aux orbital s de l'atome As, avec une légère participation des orbitales s et p des atomes (Al, Ga), et les orbitales (p et d) de l'atome Ga. La deuxième région (BVS), entre -6.25 eV et le niveau de Fermi ( $E_F$ ), est aussi divisée en deux parties. La première, de -6.25 à -3.73 eV est due principalement aux orbitales s des atomes Al et Ga avec une participation des orbitales (p et d) de l'atome Ga. Dans la gamme énergétiques entre -3.73 eV et le niveau de Fermi la contribution est due principalement aux orbitale p des trois atomes Al, Ga et As. La troisième région (BC), au-dessus du niveau de Fermi, est formée par une mixture d'états de caractère (s et p) des atomes Al, Ga et les états (d) des atomes Ga et As.

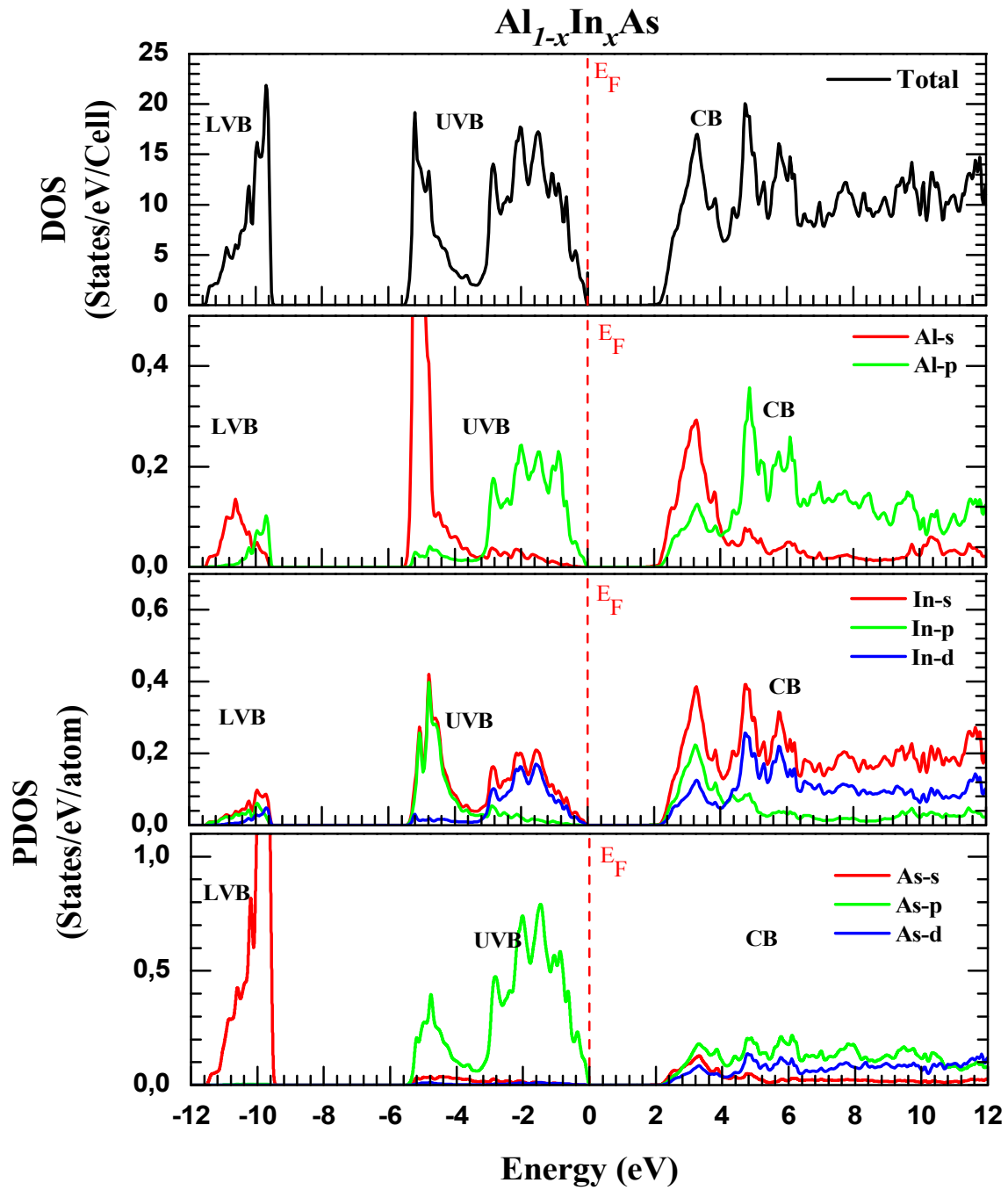


Fig.III.9. Densité d'état total et partielle du ternaire  $\text{In}_{0.500}\text{Ga}_{0.500}\text{As}$ .

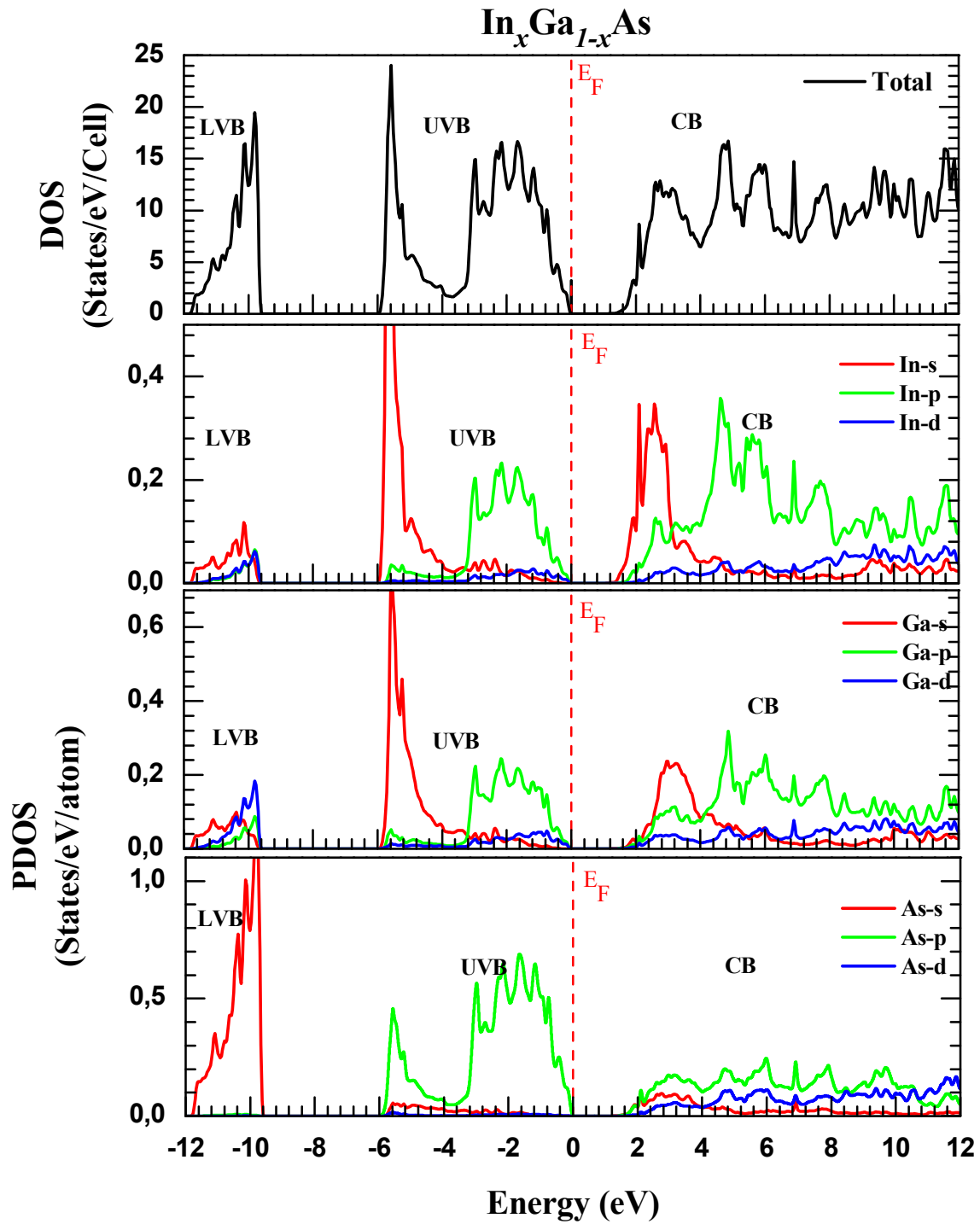
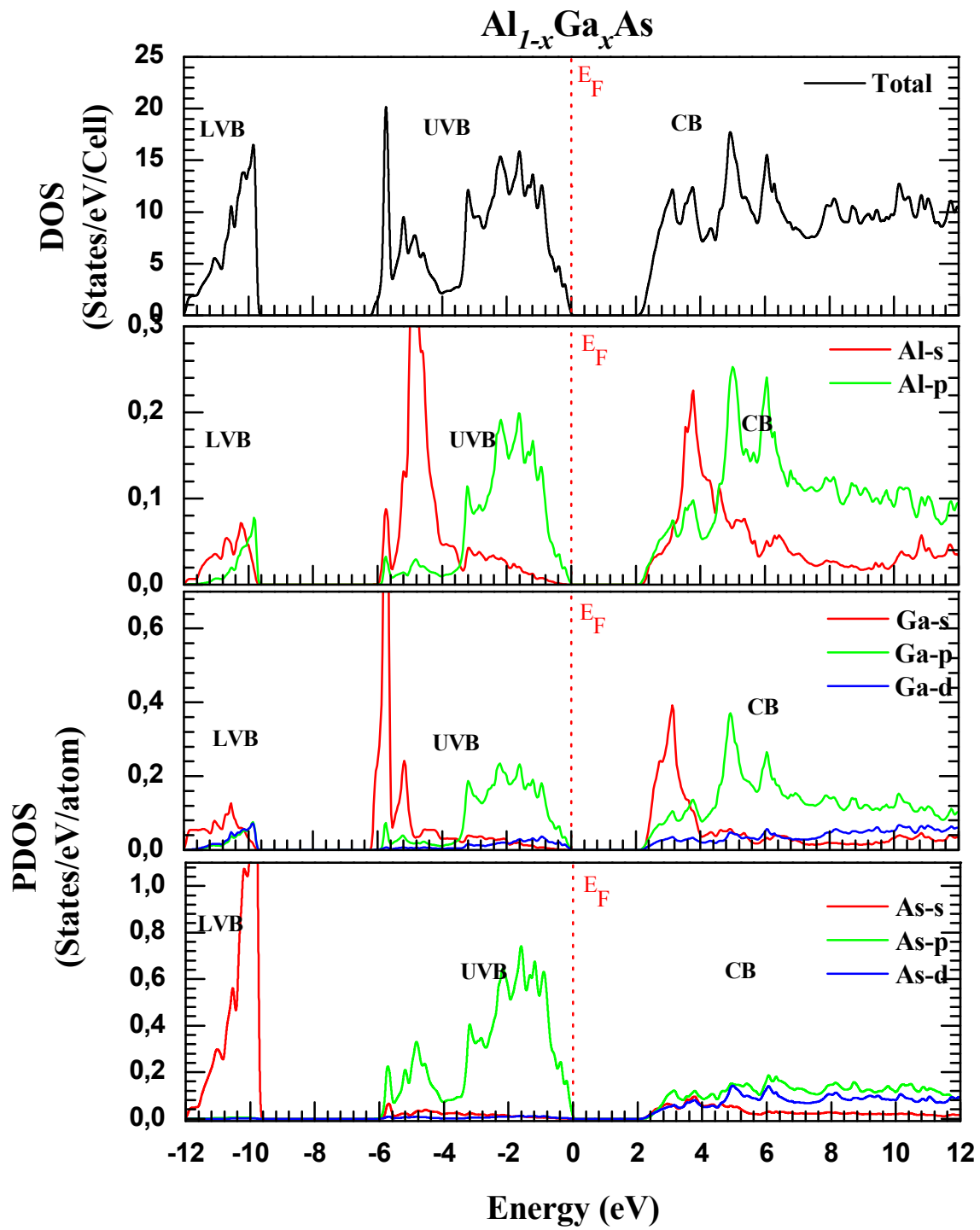


Fig.III.10. Densité d'état total et partielle du ternaire In<sub>0.500</sub>Ga<sub>0.500</sub>As.

Fig. III. 11. Densité d'état total et partielle du ternaire  $\text{In}_{0.500}\text{Ga}_{0.500}\text{As}$

### III. 4. 3. Propriétés optiques

#### III. 4.3.1. Fonction diélectrique

Les parties réelles et imaginaires de la fonction diélectrique, dans la gamme d'énergie allant de 0 à 8 eV et pour  $0.125 \leq x \leq 0.825$ , pour les trois ternaires  $\text{Al}_{1-x}\text{In}_x\text{As}$ ,  $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}$  et  $\text{Al}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}$  sont montrées dans les Figs.III.12, III.13 et III.14, respectivement. Les résultats obtenus des parties réelles  $\varepsilon_1(\omega)$  des  $\text{Al}_{1-x}\text{In}_x\text{As}$ ,  $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}$  et  $\text{Al}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}$  par l'approximation (TB-mBJ) sont montrées les Figs III.11a, III.12a et III.14a, respectivement, sachant qu'ils ont presque la même allure avec une légère déférence quantitative. Tableau III. 3 représente les principaux pics dans la partie imaginaire de la fonction  $\varepsilon_2(\omega)$ , les constantes diélectriques statiques  $\varepsilon_1(0)$  et leurs valeurs expérimentales correspondantes.

Pour le cas du ternaire  $\text{Al}_{1-x}\text{In}_x\text{As}$ , 3.52, 3.14, 2.95, 2.89, 2.77, 2.56 et 2.54 eV, respectivement, et la constante  $\varepsilon_1(0)$  augment en fonction de la concentration de l'atome In  
 Pour le cas du ternaire  $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}$ , 2.43, 2.44, 2.50, 2.47, 2.51, 2.59 et 2.74 eV, et la constante  $\varepsilon_1(0)$  démunie en fonction de l'augmentation de la concentration de l'atome Ga

Pour le cas du ternaire  $\text{Al}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}$ , et la constante  $\varepsilon_1(0)$  démunie en fonction de l'augmentation de la concentration du l'atome Al.

Les résultats de la partie imaginaire  $\varepsilon_2(\omega)$  des trois ternaires sont montrées dans les Figs.III.12b, III.13b et III.14b, leurs principaux pics sont illustrés dans le tableau III. 3. Il intéresse de noter que ces valeurs maximum correspondent au passage électronique de la bande de valence à la bande de la conduction (transitions optiques), que nous les indiquons par ( $E_0$ ,  $E_1$  et  $E_2$ ).

Le premier point critique (indiqué par  $E_0$ ), est connu sous le nom de seuil d'absorption fondamentale, donne le seuil de la transition directe optique entre le plus haut de la bande de valence (HVB) et le plus bas de la bande de conduction (LCB) au point  $\Gamma$ .  $E_1$  et  $E_2$  présent les deux pics principaux dans les spectres des ternaires.

Pour le ternaire  $\text{Al}_{1-x}\text{In}_x\text{As}$ , nous nous constatons que le seuil d'absorption fondamentale ( $E_0$ ) démunie en fonction de l'augmentation de la concentration d'In (x). Ensuite, le premier pic ( $E_1$ ) se déplace vers les bases énergies et son magnitude augmente avec la composition (x).

Le second pic ( $E_2$ ) dans  $\varepsilon_2(\omega)$  se déplace vers les bases énergies et démunie en fonction de l'augmentation de la concentration en indium.

Pour le deuxième ternaire  $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}$ , nous constatons que le seuil d'absorption fondamentale ( $E_0$ ) augmente en fonction de l'augmentation de la concentration d'In (x).

Ensuite, le premier pic ( $E_1$ ) se déplace vers les grandes énergies et son magnitude diminue avec la composition (x).

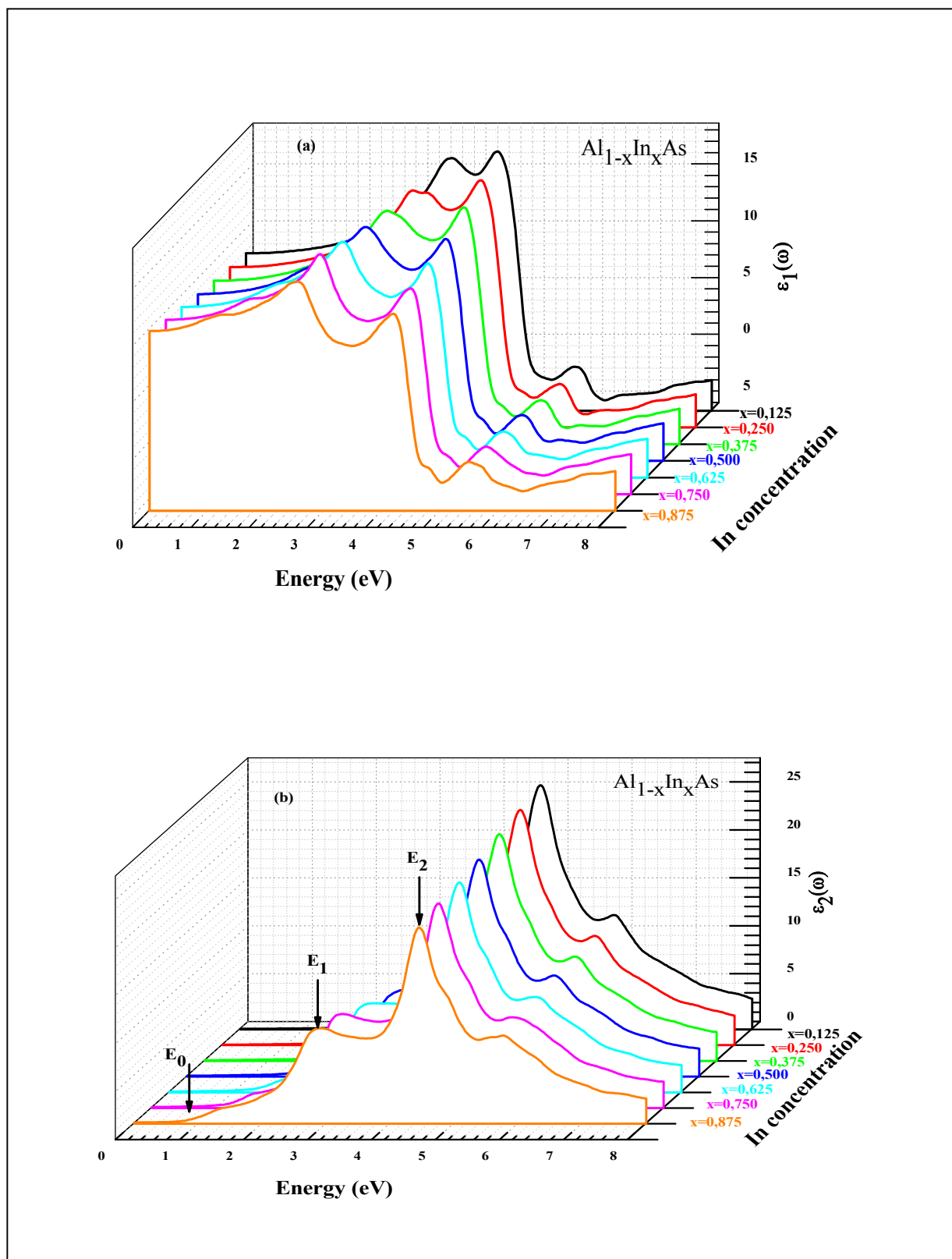
Le second pic ( $E_2$ ) dans  $\varepsilon_2(\omega)$  se déplace vers les grandes énergies et diminue en fonction de l'augmentation de la concentration en indium.

Pour le ternaire  $\text{Al}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}$ , nous constatons que le seuil d'absorption fondamentale ( $E_0$ ) diminue en fonction de l'augmentation de la concentration Ga (x). Ensuite, le premier pic ( $E_1$ ) se déplace vers les basses énergies et son magnitude augmente avec la composition Ga.

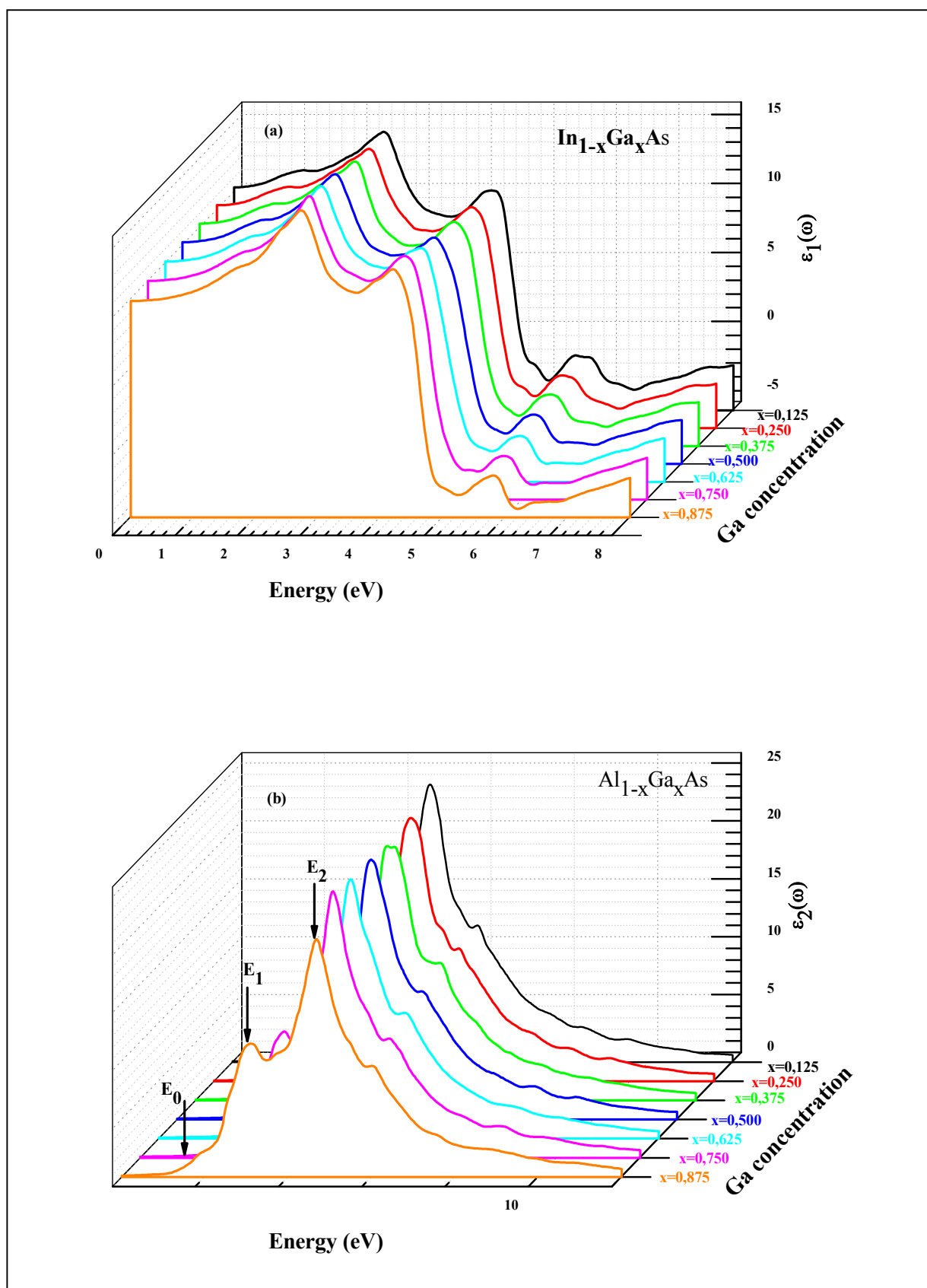
Le second pic ( $E_2$ ) dans  $\varepsilon_2(\omega)$  se déplace vers les basses énergies et diminue en fonction de l'augmentation de la concentration en indium.

Table III.3. Les principaux pics dans la partie imaginaire de la fonction  $\varepsilon_2(\omega)$ , les constantes diélectriques statiques  $\varepsilon_1(0)$  pour les ternaires et les composés parents.

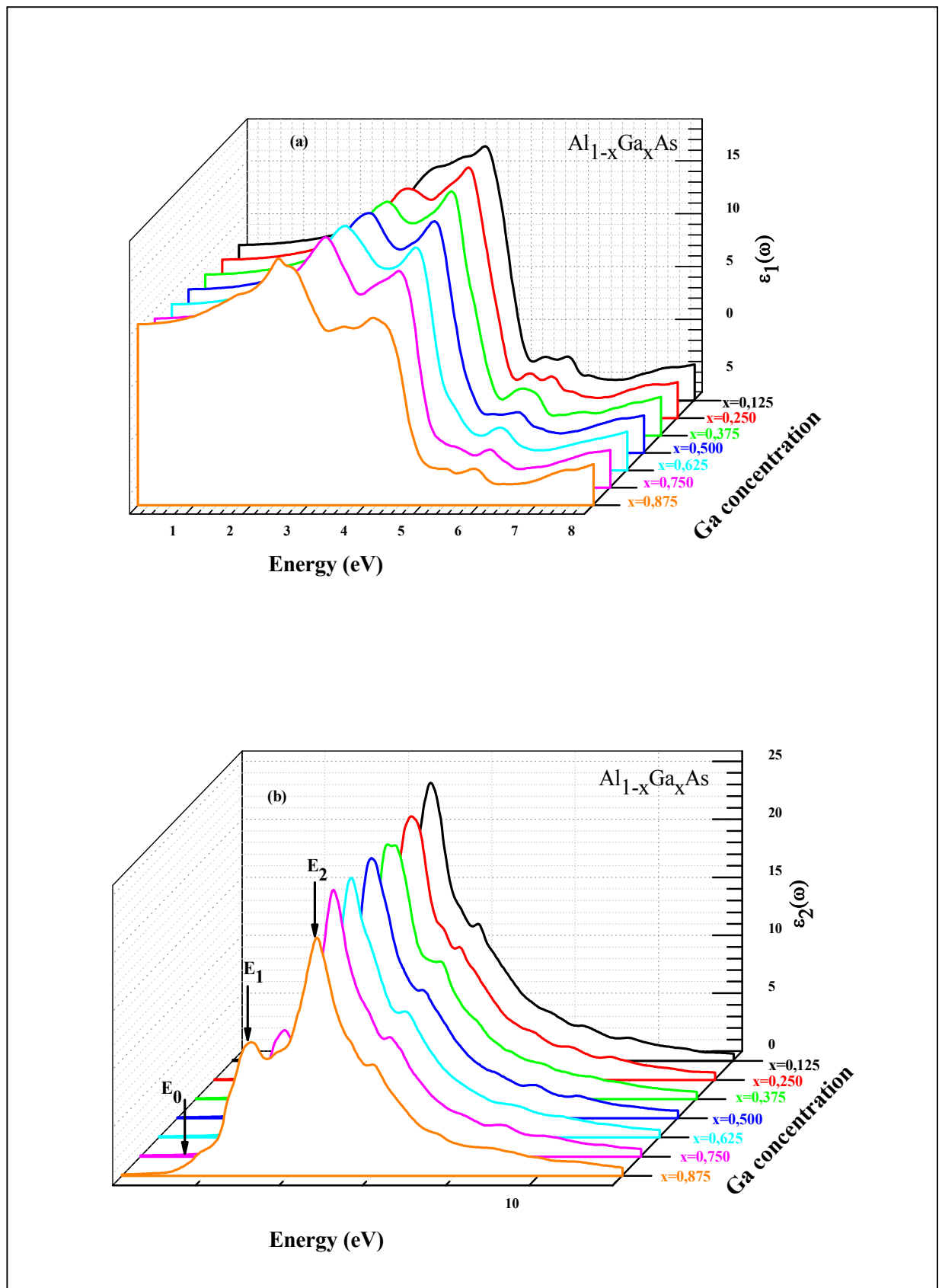
x	$\text{Al}_{1-x}\text{In}_x\text{As}$				$\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}$				$\text{Al}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}$			
	$E_0$	$E_1$	$E_2$	$\varepsilon_1(0)$	$E_0$	$E_1$	$E_2$	$\varepsilon_1(0)$	$E_0$	$E_1$	$E_2$	$\varepsilon_1(0)$
<b>0</b>	2.162	3.945	4.775	7.661	0.583	2.610	4.449	10.314	2.162	3.945	4.721	7.661
<b>0.125</b>	2.147	3.712	4.340	7.877	0.570	2.743	4.476	10.621	2.160	3.621	4.750	7.909
<b>0.250</b>	2.181	3.573	4.666	8.108	0.660	2.743	4.503	10.262	2.136	3.591	4.732	8.171
<b>0.375</b>	1.878	3.319	4.612	8.378	0.690	2.758	4.530	10.324	2.134	3.457	4.607	8.418
<b>0.500</b>	1.590	3.118	4.585	8.673	0.823	2.816	4.557	10.268	2.137	3.506	4.661	8.671
<b>0.625</b>	1.296	2.980	4.557	9.000	0.914	2.852	4.531	10.156	1.993	3.505	4.623	8.864
<b>0.750</b>	1.055	2.823	4.504	9.330	1.104	2.940	4.557	10.046	1.87	3.447	4.638	8.868
<b>0.875</b>	0.799	2.729	4.530	9.800	1.269	3.040	4.639	9.879	1.661	3.090	4.670	9.194
<b>1</b>	0.583	2.610	4.449	10.31	1.557	3.020	4.721	9.727	1.557	3.020	4.721	9.727



**Fig.III.12.** Les parties réelles  $\epsilon_1(\omega)$  et imaginaires de la fonction diélectriques  $\epsilon_2(\omega)$  pour le ternaire  $\text{Al}_{1-x}\text{In}_x\text{As}$ .



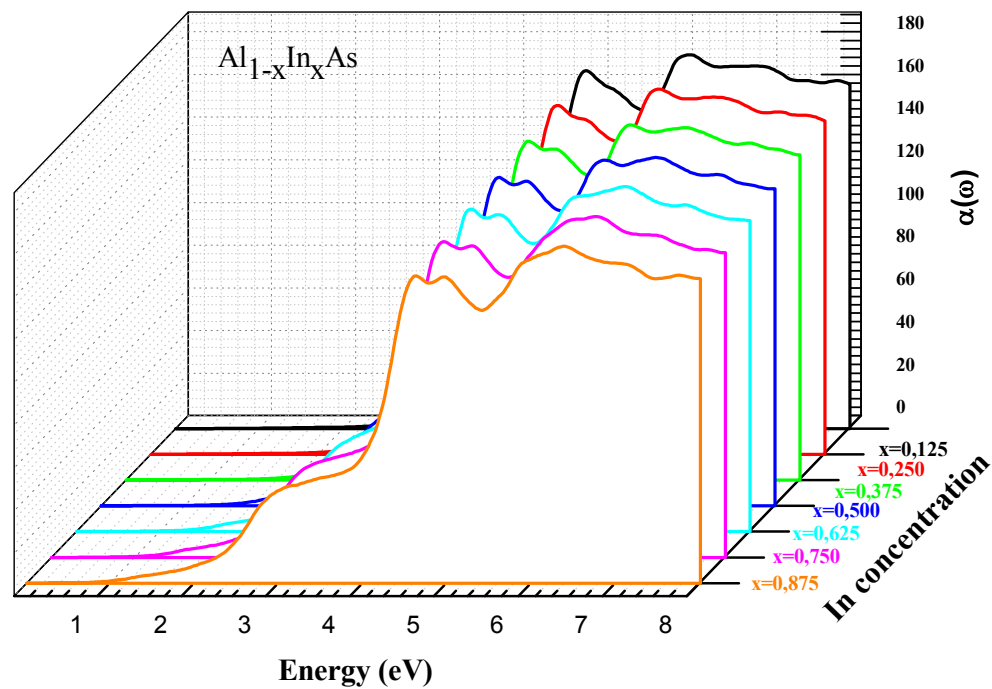
**Fig.III.13.** Les parties réelles  $\epsilon_1(\omega)$  et imaginaires de la fonction diélectriques  $\epsilon_2(\omega)$  pour le ternaire  $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}$ .



**Fig.III.14.** Les parties réelles  $\epsilon_1(\omega)$  et imaginaires de la fonction diélectriques  $\epsilon_2(\omega)$  pour le ternaire  $\text{Al}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}$ .

### III. 4. 3. 2. Coefficient d'absorption

Lorsqu'un photon d'énergie  $h\nu$  supérieure à la largeur de bande interdite  $E_g$  est envoyé sur le semi-conducteur, il est absorbé en induisant la transition d'un électron de la bande de valence vers la bande de conduction, c'est-à-dire créant une paire (électron-trou) [4].



**Fig.III.15.** Coefficients absorption  $\alpha(\omega)$  pour  $\text{Al}_{1-x}\text{In}_x\text{As}$  calculé par l'approximation (TB-mBJ)

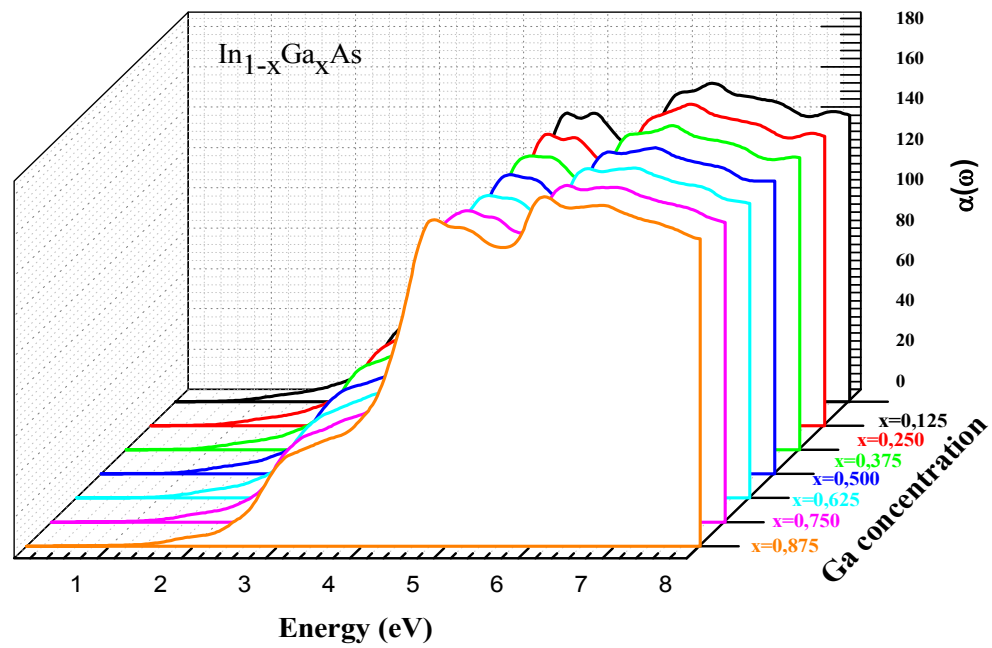


Fig.III.16. Coefficients d'absorption  $\alpha(\omega)$  pour  $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}$  calculé par l'approximation (TB-mBJ).

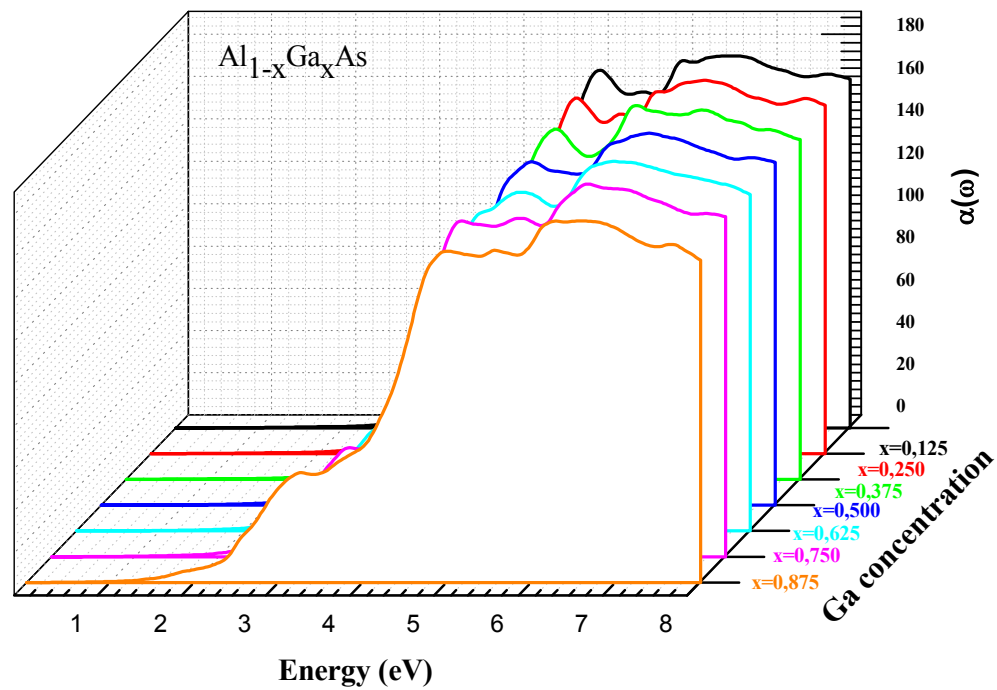


Fig.III.17. Coefficients d'absorption  $\alpha(\omega)$  pour  $\text{Al}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}$  calculé par l'approximation (TB-mBJ).

### III. 4. 3. 3. Indice de refraction et le coefficient d'extinction

La détermination de l'indice de réfraction est une étape essentielle lorsqu'on veut étudier les structures laser car le confinement optique, et donc la propagation des photons dans le guide d'onde, en dépendent. L'indice de réfraction et le coefficient d'extinction des trois ternaires en discussion ont été calculés par l'utilisation de l'approximation (TB-mBJ) à différentes concentrations  $x$ . Le tableau III. 4 présente les résultats de l'indice de réfraction pour les trois ternaires et leurs composés parents et ils sont montrés sur la Fig.III.18. L'interpolation polynomiale de ces courbes  $n(x)$  nous a conduit aux expressions suivantes :

$$n_{Al_{1-x}In_xAs}(x) = 2.7778 + 0.228.x + 0.2102.x^2 \quad (III-10)$$

$$n_{In_{1-x}Ga_xAs}(x) = 3.2308 + 0.6619.x - 0.17905.x^2 \quad (III-11)$$

$$n_{Al_{1-x}Ga_xAs}(x) = 2.768 + 0.332.x - 0.025.x^2 \quad (III-13)$$

Les variations de l'indice de réfraction en fonction de l'énergie de gap ( $E_g$ ) pour les ternaires  $Al_{1-x}In_xAs$ ,  $In_{1-x}Ga_xAs$  et  $Al_{1-x}Ga_xAs$  sont présentées dans les Figs.III.19, III.20 et III.21 respectivement. L'interpolation polynomiale de ces courbes nous a données les expressions suivantes :

$$n_{Al_{1-x}In_xAs}(E_g) = 3.338 - 0.330E_g - 0.0296 E_g^2 \quad (III-14)$$

$$n_{In_{1-x}Ga_xAs}(E_g) = 3.270 - 0.068E_g + 0.0192E_g^2 \quad (III-15)$$

$$n_{Al_{1-x}Ga_xAs}(E_g) = 1.158 + 2.356E_g - 0.755E_g^2 \quad (III-16)$$

il est intéressant de noter que ces expressions,  $n(x)$  et  $n(E_g)$ , peuvent être utilisées comme modèles pour la détermination de l'indice de réfraction dans la gamme de concentration  $x$  ( $0 \leq x \leq 1$ ). Suite aux Figs.III.22, III.23 et III.24, nous remarquons que la relation entre l'indice de réfraction et le gap est inversement proportionnelle, ce qui exprime le fait que lorsque l'indice de réfraction d'un matériau augmente son gap d'énergie doit diminuer dans une même proportion, et vice-versa.

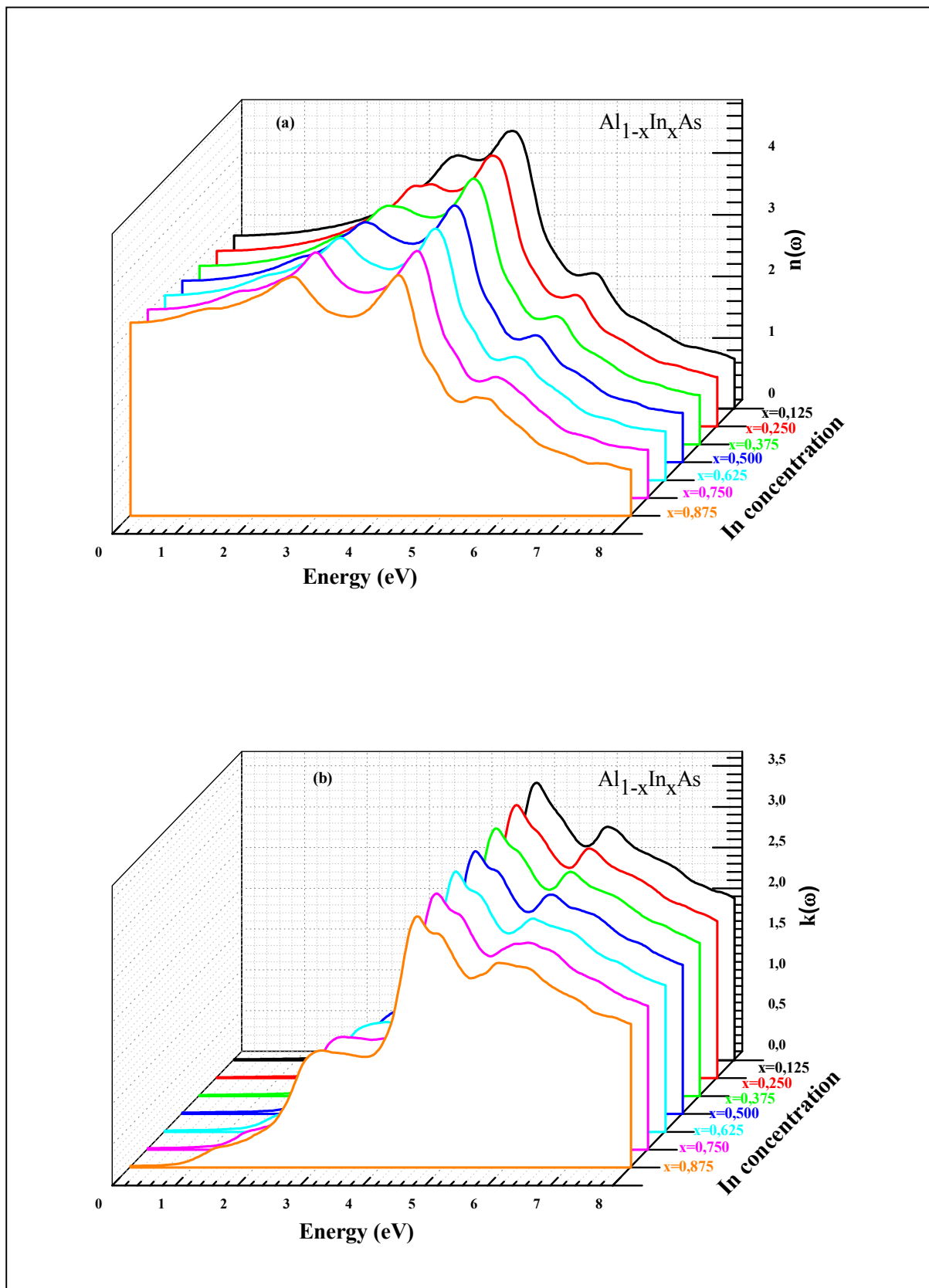


Fig.III.19.Variation de l'indice de refraction  $n(\omega)$  et coefficient d'extinction  $k(\omega)$  pour  $Al_{1-x}In_xAs$ .

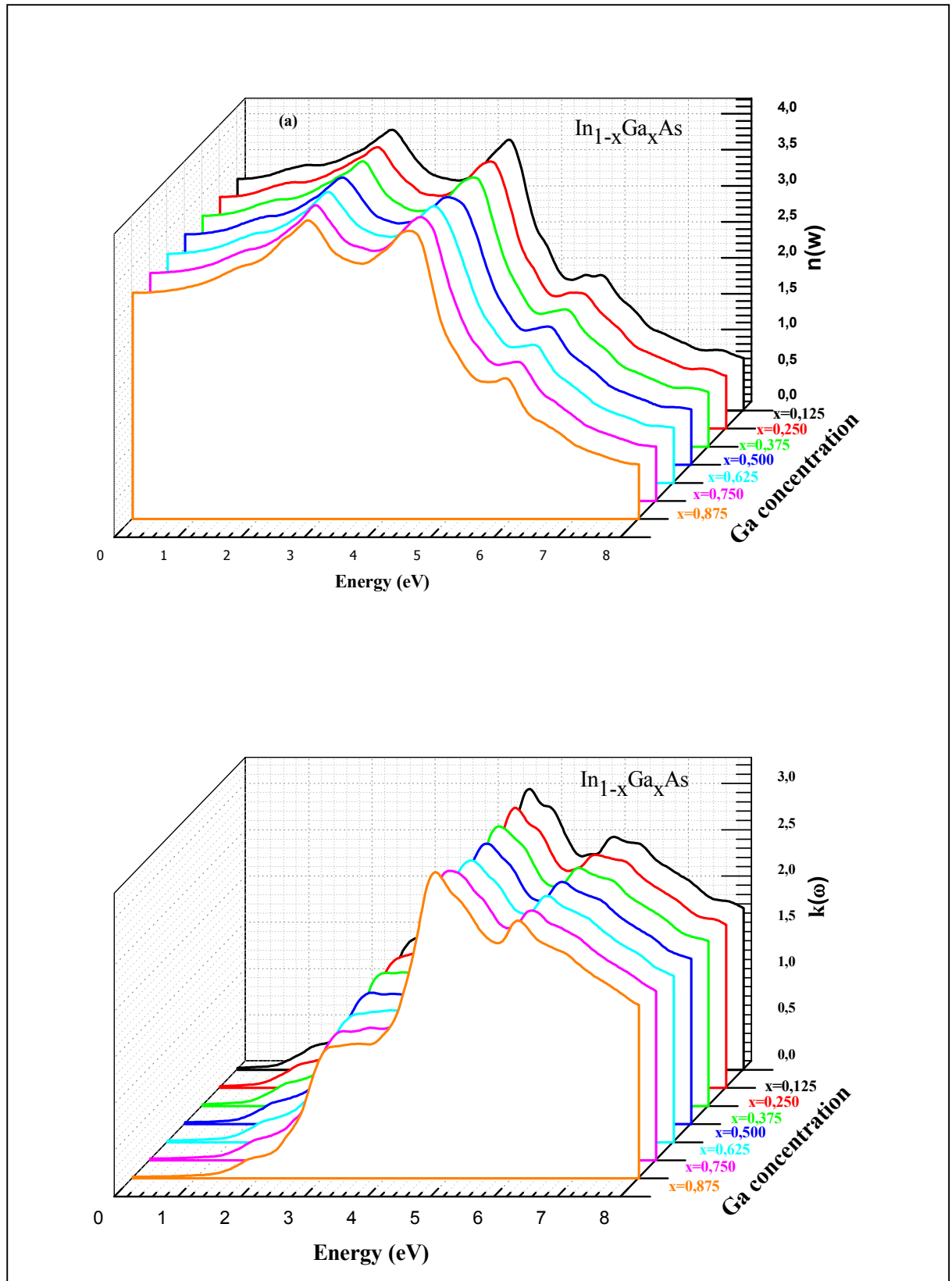
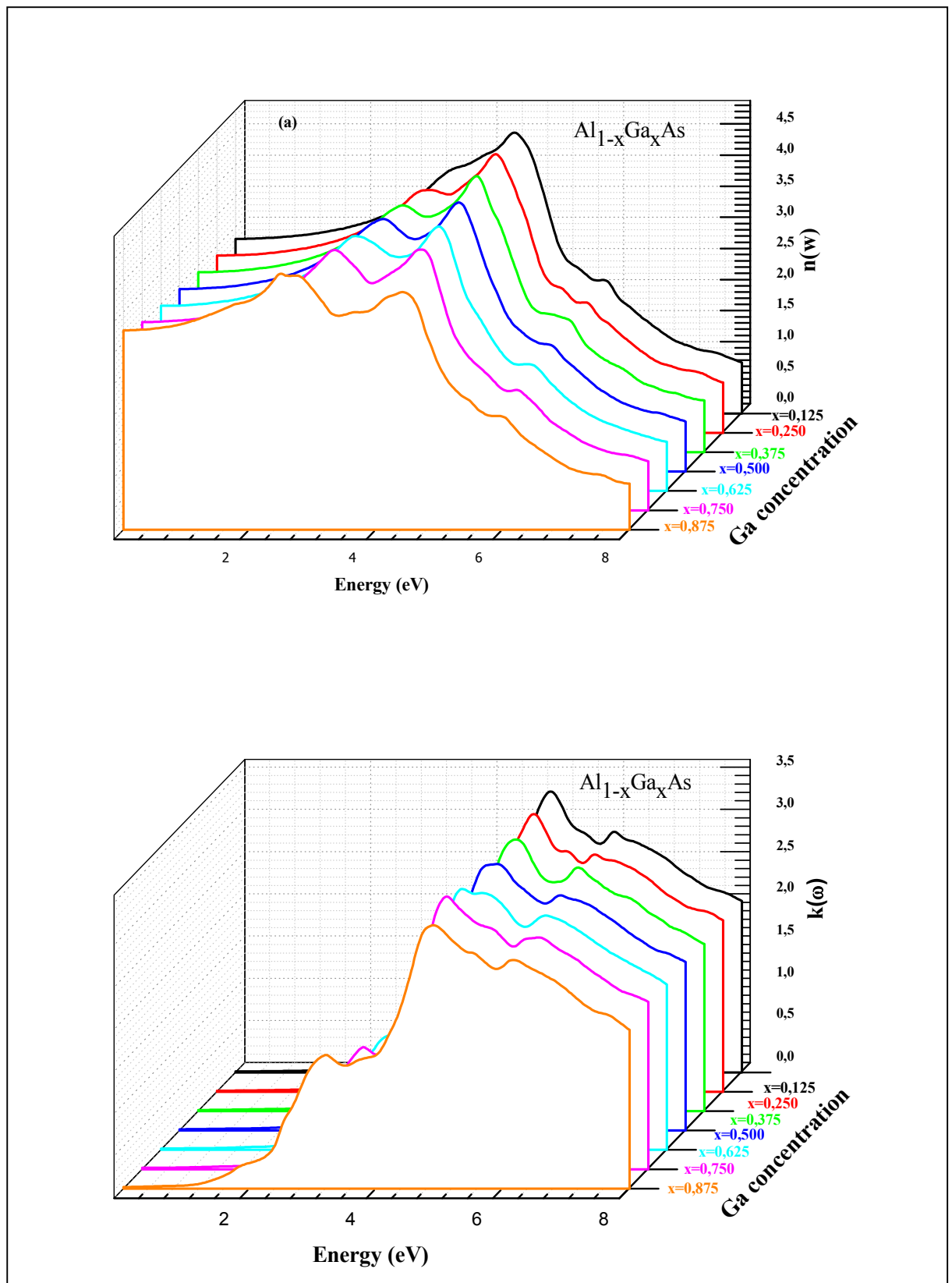


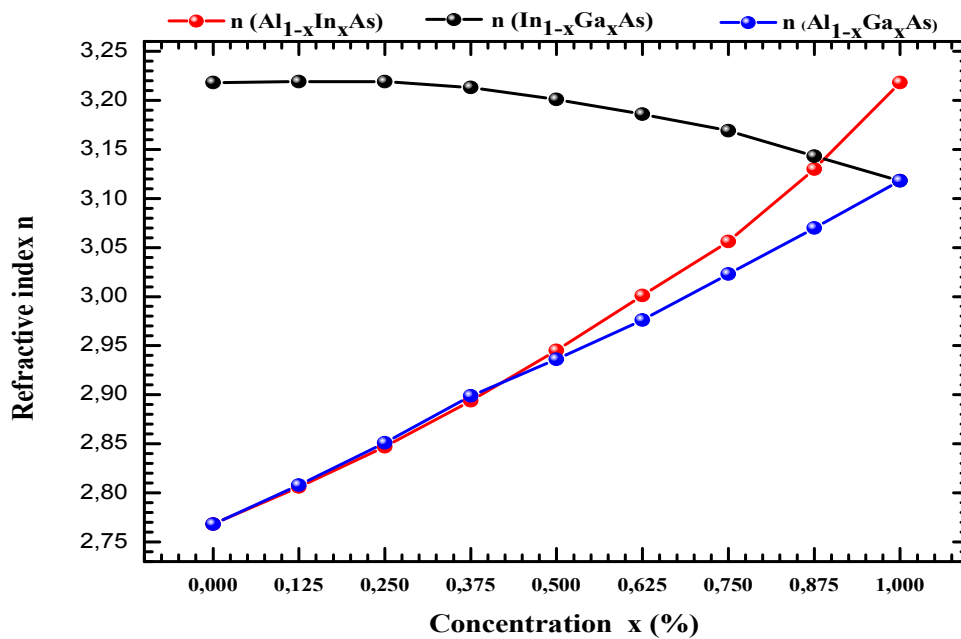
Fig.III.20. Variation de l'indice de refraction  $n(\omega)$  et coefficient d'extinction  $k(\omega)$  pour  $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}$ .



**Fig.III.21.** Variation de l'indice de refarction  $n(\omega)$  et coefficient d'extinction  $k(\omega)$  pour  $\text{Al}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}$  .

Table III. 4. Résultats obtenus de l'indice de réfraction  $n(x)$  pour les concentrations  $x$  ( $0 \leq x \leq 1$ ).

Indice de réfraction (n)						
x	Al <sub>1-x</sub> In <sub>x</sub> As		In <sub>1-x</sub> Ga <sub>x</sub> As		Al <sub>1-x</sub> Ga <sub>x</sub> As	
	Présent travail	Autres travaux	Présent travail	Autres travaux	Présent travail	Autres travaux
0	2.768	3.0[46], 2.76, 2.66 [45]	3.218	3.81,3.82[47]	2.768	3.0[46], 2.76 [45]
0.125	2.806	–	3.219	–	2.808	
0.250	2.847	–	3.219	–	2.851	
0.375	2.894	–	3.213	–	2.899	
0.500	2.945	–	3.201	–	2.936	
0.625	3.001	–	3.186	–	2.976	
0.750	3.056	–	3.169	–	3.023	
0.875	3.130	–	3.143	–	3,070	
1	3.218	3.81, 3.82 [47]	3.118	3.3[46],3.20[45]	3.118	3.95[45],3.36 [48]

Fig.III.22.indice de réfraction  $n(x)$  pour les trois  $\text{Al}_{1-x}\text{In}_x\text{As}$ ,  $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}$  et  $\text{Al}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}$  en fonction de la concentration  $x$ .

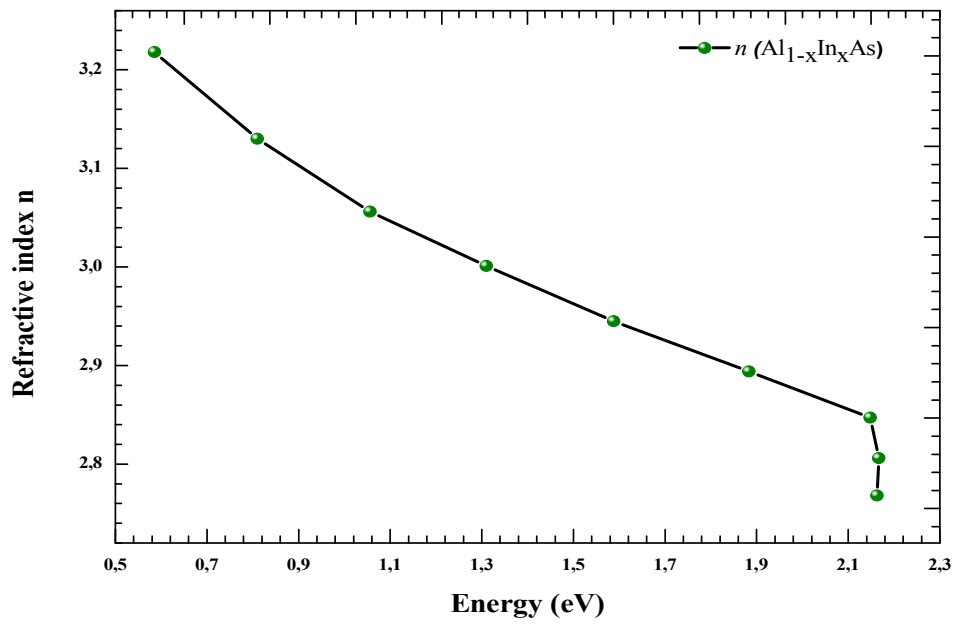


Fig.III.23. Indice de réfraction en fonction du band gap ( $E_g$ ) pour  $\text{Al}_{1-x}\text{In}_x\text{As}$ .

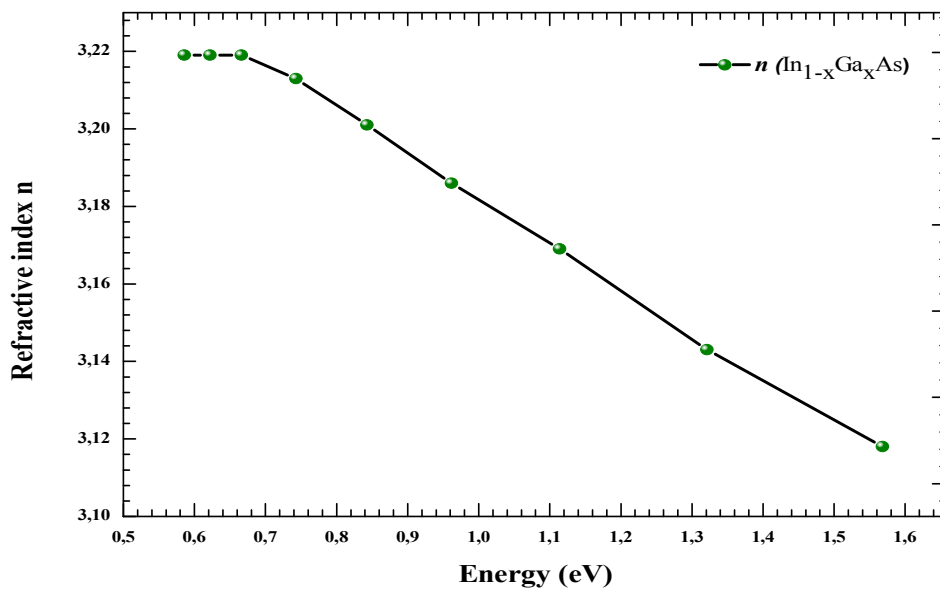


Fig.III.24. Indice de réfraction en fonction du band gap ( $E_g$ ) pour  $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}$ .

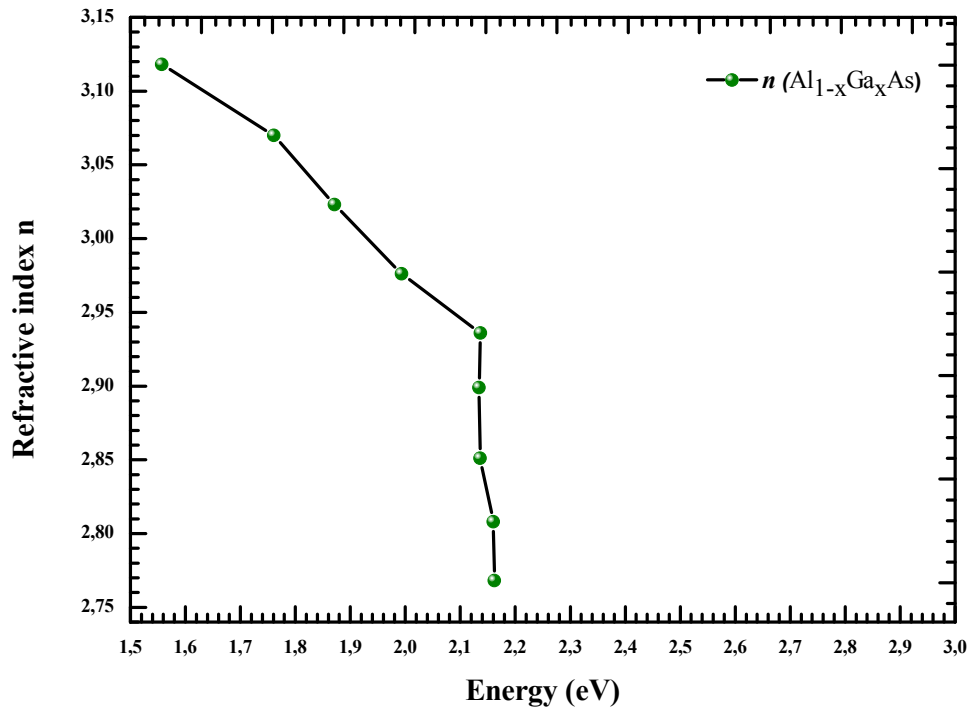


Fig.III.25. Indice de réfraction en fonction du band gap ( $E_g$ ) pour  $\text{Al}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}$ .

#### IV. 4.4. Conclusion

En conclusion, nous avons présenté une étude théorique des propriétés structurales, et optoélectroniques des ternaires  $Al_{1-x}In_xAs$ ,  $In_{1-x}Ga_xAs$  et  $Al_{1-x}Ga_xAs$  et leurs composés parents. Cette étude a été basée sur la méthode (FP-LAPW). À l'aide de l'approximation (GGA-CW), nous avons déterminé le paramètre de réseau et le module de compressibilité des trois ternaire à différentes concentration  $x$  ( $0 \leq x \leq 1$ ). Les résultats obtenus ont été comparés avec les travaux théoriques et expérimentaux existants. Aussi, les propriétés électroniques de ces ternaires ont été calculés par l'utilisation des trois approximations (GGA-BPSol), (GGA-EV) et (TB-mBJ).

L'étude des propriétés électroniques de ces matériaux montre que les deux binaires GaAs et InAs, et le ternaire  $In_{1-x}Ga_xAs$  à différentes concentration  $x$  ( $0 < x < 1$ ) ont un gap direct. Par contre le binaire AlAs a un gap direct. D'autre part, un changement de nature de gap a été observé, indirect vers direct, pour les concentrations en aluminium (Al =93.4%) et pour la concentration en indium (In=0.006) pour les ternaires  $Al_{1-x}Ga_xAs$  et  $Al_{1-x}In_xAs$ ,

respectivement. Nous avons calculé les paramètres de courbure (bowing) pour ces trois matériaux dont ses valeurs sont -0.96, 0.957 et 0.006 pour  $Al_{1-x}In_xAs$ ,  $In_{1-x}Ga_xAs$  et  $Al_{1-x}Ga_xAs$ , respectivement. Les densités d'état totales et partielles ont été calculées et analysées en détail.

Ensuite, nous avons calculé et discuté en détail les propriétés optiques linéaires de ces ternaires, tel que la fonction diélectrique, le coefficient d'absorption, l'indice de réfraction et le coefficient d'extinction. Nous avons déterminé la dépendance de l'indice de réfraction en fonction de la concentration  $x$ , pour chaque ternaire en discussion. Les interpolations polynômiales de leurs courbes donnent les paramètres de courbure suivants 0.210,-0.170 et -0.025 pour  $Al_{1-x}In_xAs$ ,  $In_{1-x}Ga_xAs$  et  $Al_{1-x}Ga_xAs$ , respectivement. Nous avons également déterminé la variation de l'indice de réfraction de ces trois ternaires en fonction de l'énergie de la bande interdite ( $E_g$ ). Nous avons remarqué que l'indice de refarction varie inversement proportionnelle avec  $E_g$ , ce qui exprime le fait que lorsque l'indice de réfraction d'un matériau augmente son gap d'énergie diminue dans une même proportion, et vice-versa.

### Références du chapitre III

- [1] A. Bouhemadou, S. Bin-Omran, D. Allali, S. Al-Otaibi, R. Khenata, Y. Al-Douri, M. Chegaar, A. Reshak, *Materials Research Bulletin*, 64 (2015) 337-346.
- [2] M. Xu, Y. Li, B. Yao, Z. Ding, G. Yang, *Physics Letters A*, 378 (2014) 3382-3388.
- [3] N. Noor, N. Ikram, S. Ali, S. Nazir, S. Alay-e-Abbas, A. Shaikat, *Journal of Alloys and Compounds*, 507 (2010) 356-363.
- [4] H. Mathieu, H. Fanet, *Physique des semiconducteurs et des composants électroniques-6ème édition: Cours et exercices corrigés*, Dunod, 2009.
- [5] G. Davies, T. Kerr, C. Tuppen, B. Wakefield, D. Andrews, *Journal of Vacuum Science & Technology B*, 2 (1984) 219-223.
- [6] J. Nagle, J. Landesman, M. Larive, C. Mottet, P. Bois, *Journal of crystal growth*, 127 (1993) 550-554.
- [7] T. Tanahashi, K. Nakajima, A. Yamaguchi, I. Umebu, *Applied Physics Letters*, 43 (1983) 1030-1032.
- [8] M. Emeny, L. Howard, K. Homewood, J. Lambkin, C. Whitehouse, *Journal of crystal growth*, 111 (1991) 413-418.
- [9] G. Grenet, E. Bergignat, M. Gendry, M. Lapeyrade, G. Hollinger, *Surface science*, 352 (1996) 734-739.
- [10] J.-M. Gérard, *Journal of crystal growth*, 127 (1993) 981-985.
- [11] B.U. Haq, R. Ahmed, F.E.H. Hassan, R. Khenata, M.K. Kasmin, S. Goumri-Said, *Solar Energy*, 100 (2014) 1-8.
- [12] W. Kohn, L.J. Sham, *Physical review*, 140 (1965) A1133.
- [13] P. Blaha, K. Schwarz, G. Madsen, D. Kvasnicka, J. Luitz, *An augmented plane wave+ local orbitals program for calculating crystal properties*, (2001).
- [14] Z. Wu, R.E. Cohen, *Physical Review B*, 73 (2006) 235116.
- [15] P. Hohenberg, W. Kohn, *Physical Review*, 136 (1964) B864.
- [16] J. Perdew, *Phys Rev Lett*, 77 (1996) 3865-3868.
- [17] J.P. Perdew, A. Ruzsinszky, G.I. Csonka, O.A. Vydrov, G.E. Scuseria, L.A. Constantin, X. Zhou, K. Burke, *Physical Review Letters*, 100 (2008) 136406.
- [18] E. Engel, S.H. Vosko, *Physical Review B*, 47 (1993) 13164.
- [19] T. Kim, S. Hwang, J. Byun, D.E. Aspnes, E. Lee, J. Song, C.-T. Liang, Y.-C. Chang, H. Park, J. Choi, *Current Applied Physics*, 14 (2014) 1273-1276.
- [20] B.G. Yalcin, *Physica B: Condensed Matter*, 462 (2015) 64-69.
- [21] N.N. Anua, R. Ahmed, A. Shaari, M.A. Saeed, B.U. Haq, S. Goumri-Said, *Semiconductor Science and Technology*, 28 (2013) 105015.
- [22] O. Yassin, *Optik-International Journal for Light and Electron Optics*, 127 (2016) 1817-1821.
- [23] S. Adachi, in, *John Wiley & Sons Ltd*, 2009.
- [24] F. Murnaghan, *Proceedings of the national academy of sciences of the United States of America*, 30 (1944) 244.
- [25] K. Boubendira, H. Meradji, S. Ghemid, F.E.H. Hassan, *Materials Science in Semiconductor Processing*, 16 (2013) 2063-2069.
- [26] R. Wyckoff, in, *Malabar*, 1986.
- [27] A. Sadao, *England: John Wiley & Sons Ltd*, (2005) 373.
- [28] S. Adachi, *Journal of applied physics*, 61 (1987) 4869-4876.
- [29] S. Adachi, *Journal of applied physics*, 58 (1985) R1-R29.
- [30] B.H. Reshak, Y. Al-Douri, *Appl. Phys. A*, 106 (2012) 687-696.
- [31] F.E.H. Hassan, A. Breidi, S. Ghemid, B. Amrani, H. Meradji, O. Pagès, *Journal of Alloys and Compounds*, 499 (2010) 80-89.
- [32] I. Vurgaftman, J. Meyer, L. Ram-Mohan, *Journal of applied physics*, 89 (2001) 5815-5875.
- [33] S. Namjoo, A.S. Rozatian, I. Jabbari, *Journal of Alloys and Compounds*, 628 (2015) 458-463.

- 
- [34] J. Kim, M.V. Fischetti, *Journal of applied physics*, 108 (2010) 013710.
- [35] R. Ahmed, S.J. Hashemifar, H. Akbarzadeh, M. Ahmed, *Computational materials science*, 39 (2007) 580-586.
- [36] K. Hellwege, O. Madelung, *Group III*, 17 (1982).
- [37] M. Ameri, F. Boufadi, A. Touia, M. Faudil, D. Hachemane, K. Boudia, A. Slamani, A. Aze-Eddine, *Materials Sciences and Applications*, 3 (2012) 674.
- [38] S. Kumar, T.K. Maurya, S. Auluck, *Japanese Journal of Applied Physics*, 47 (2008) 5417.
- [39] L. Vegard, *Z. Phys*, 5 (1921) 17-26.
- [40] K.H. Goetz, D. Bimberg, H. Jürgensen, J. Selders, A. Solomonov, G. Glinskii, M. Razeghi, *Journal of applied physics*, 54 (1983) 4543-4552.
- [41] D. Oertel, D. Bimberg, R. Bauer, K. Carey, *Applied Physics Letters*, 55 (1989) 140-141.
- [42] F. Tran, P. Blaha, *Physical Review Letters*, 102 (2009) 226401.
- [43] A. Gazhulina, M. Marychev, *Journal of Alloys and Compounds*, 623 (2015) 413-437.
- [44] F.E.H. Hassan, A. Postnikov, O. Pagès, *Journal of Alloys and Compounds*, 504 (2010) 559-565.
- [45] N. Bouarissa, *Materials chemistry and physics*, 72 (2001) 387-394.
- [46] V. Gupta, N. Ravindra, *Physica status solidi (b)*, 100 (1980) 715-719.
- [47] T. Moss, S. Smith, T. Hawkins, *Proceedings of the Physical Society. Section B*, 70 (1957) 776.
- [48] D. Aspnes, A. Studna, *Physical Review B*, 27 (1983) 985..

# CHAPITRE 4

Etude des propriétés  
structurales et  
optoélectroniques du  
quaternaire AlGaInAs/Inp

## Chapitre IV : Etude des propriétés structurales et optoélectroniques du quaternaire $\text{Al}_x\text{Ga}_y\text{In}_{1-x-y}\text{As} / \text{InP}$

### IV. Introduction

Grâce à la perspective qui offre les calculs d'étude de premier-principes, une large gamme des semi-conducteurs avec les propriétés passionnantes ont été présentés théoriquement dans un effort de satisfaire la demande continue de nouveaux matériaux fonctionnels. En particulier, les développements et les applications des alliages mal adaptés basés II-VI et III-V. Le quaternaire  $\text{Al}_x\text{Ga}_y\text{In}_{1-x-y}\text{As}$  présente l'avantage, par rapport aux ternaires  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ ,  $\text{Al}_x\text{In}_{1-x}\text{As}$  et  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ , de permettre le contrôle indépendant du paramètre de réseau et de la largeur de la bande interdite. D'autre part,  $\text{Al}_x\text{Ga}_y\text{In}_{1-x-y}\text{As}$  offre de nombreux intérêts pour les nouvelles générations de composants optoélectroniques bas coûts [1]. La grande valeur de la discontinuité ( $Q=0.7$ ) des bandes de valence et conduction, cette discontinuité est exprimée par le paramètre de Dingle  $Q$ , favorise l'utilisation dans le domaine de l'optoélectronique ce quaternaire par rapport  $\text{Al}_x\text{Ga}_y\text{In}_{1-x-y}\text{P}$  ( $Q=0.5$ ) [1]. La structure  $\text{Al}_x\text{Ga}_y\text{In}_{1-x-y}\text{As}/\text{InP}$  est intensivement étudiées dans la littérature [2-5]. Cette structure est plus avantageuse pour l'opération laser à haute température et cela est due à son grand décalage de la bande de conduction permet de meilleurs confinement des électrons dans les puits quantiques [6,7]. H.H.Chang et al.[4] ont démontré que laser sur le silicium fonctionnant en injection électrique continue pour une température allant jusqu'à 105 C°. Ce quaternaire s'avère prometteur pour la fabrication des lasers puces CMOS à des températures dépassant 70 C° [6].

## IV. 1. Détail de calcul

Les quaternaires  $\text{Al}_x\text{Ga}_y\text{In}_{1-x-y}\text{As}$  peuvent élaborer par la technique (Metal-Organic Chemical Vapor Deposition) MOCVD et aussi peuvent être facilement développer sur l'InP par la technique jet moléculaire MBE [8, 9]. Dans cette étude, la phase zinc blende est prise comme model pour les binaires et les quaternaires.

Dans cette étude, nous avons utilisé les mêmes paramètres employés dans le chapitre précédent. À fin de simuler les quaternaires  $\text{Al}_x\text{Ga}_y\text{In}_{1-x-y}\text{As}$ , une super cellule cubique de  $a$  ( $2 \times 2 \times 2$ ) avec 64 atomes a été employé. Le nombre de k-points spéciaux dans la zone réduite de Brillouin a été pris égal 50 k pour le calcul des propriétés électroniques et 500k pour les propriétés optiques. La super cellule cubique utilisé pour simuler ce quaternaire est construite par 32 atomes (des atomes de la valence III (Al, Ga et In) et 32 de la valence V (As). la configuration des atomes Al, Ga, In, et As sont Al:[Ne]  $3s^23p^1$ , Ga:[Ar]  $3d^{10}4s^24p^1$ , In:[Kr]  $4d^{10}5s^25p^1$ , As:[Ar]  $3d^{10}4s^24p^3$  and P:[Ne]  $3s^23p^3$  où ils ont été traité comme les étant des états de valence. La structure cristalline du quaternaire  $\text{Al}_{0.03125}\text{Ga}_{0.4375}\text{In}_{0.53125}\text{As}$  est montrée dans Fig. IV. 1.

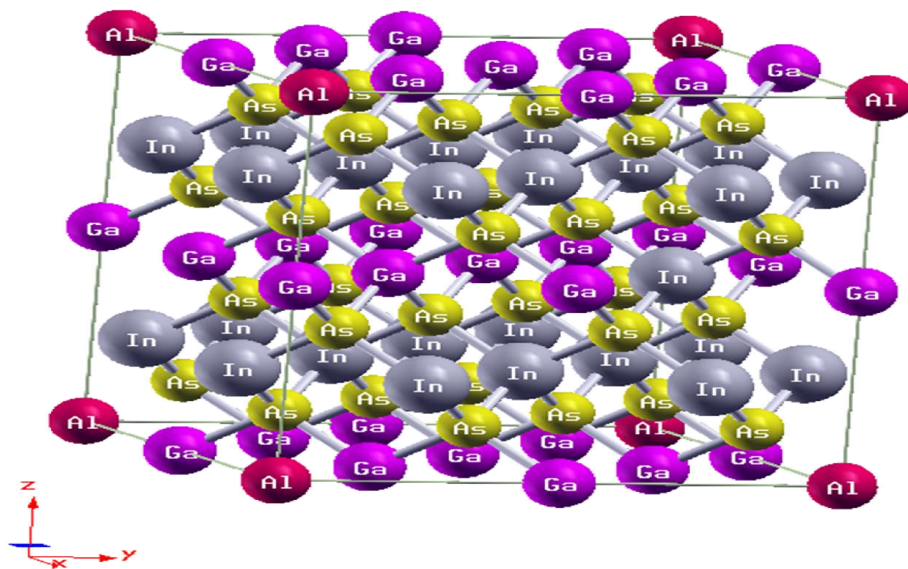


Fig. IV. 1. Structure cristalline du quaternaire  $\text{Al}_{0.03125}\text{Ga}_{0.4375}\text{In}_{0.53125}\text{As}$ .

## IV. 2. Propriétés structurales

Le paramètre de maille des alliages quaternaires est obtenu par interpolation linéaire des paramètres de maille des binaires correspondants (loi de Végard) [8].

$$a_{A_xB_yC_{1-x-y}D}(x, y) = xa_{AD} + ya_{BD} + (1 - x - y)a_{BD}, \quad (IV-1)$$

Où  $a_{A_xB_yC_{1-x-y}D}(x, y)$  est le paramètre du réseau du quaternaire  $a_{A_xB_yC_{1-x-y}D}(x, y)$  et  $a_{AD}$ ,  $a_{BD}$  et  $a_{AC}$  sont les paramètres de maille des binaires AD, BD et AC, respectivement.

A l'aide de cette relation, le paramètre de maille du quaternaire  $Al_xGa_yIn_{1-x-y}As$  peut être écrit comme suit :

$$a_{Al_xGa_yIn_{1-x-y}As}(x, y) = x \cdot a_{AlAs} + y \cdot a_{GaAs} + (1 - x - y)a_{InAs} \quad (IV-2)$$

Où  $a_{Al_xGa_yIn_{1-x-y}As}(x, y)$  est le paramètre du réseau du quaternaire  $Al_xGa_yIn_{1-x-y}As$  et  $a_{AlAs}$ ,  $a_{GaAs}$  et  $a_{InAs}$  sont les paramètres de maille des binaires AlAs, GaAs et InAs, respectivement.

Une couche mince élaborée par épitaxie peut être de même nature que le substrat, on parle d'homo-épitaxie. Lorsque la nature de la couche épitaxie et du substrat sont différentes, on parle d'hétéro-épitaxie ces deux types de croissances peuvent être réalisées en accord de maille ou en désaccord de maille avec le substrat. Dans ce dernier cas, on distingue deux situations. La couche est en tension si son paramètre de maille est inférieur à celui du substrat, en compression dans la situation inverse (voir Fig. IV.2). Il est intéressant de noter si les deux paramètres de mailles sont légèrement différents, le matériel constituant la couche plus épaisse imposera sa maille [8, 10].

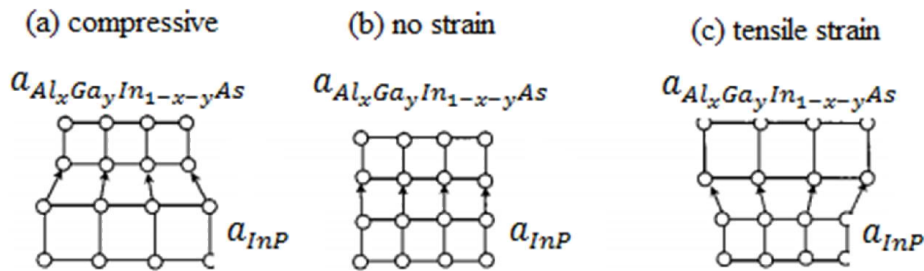


Fig. IV. 2. Illustration des trois contraintes : (a) compression (b) accord de maille et (c) tension [11].

La condition d'accord de maille du quaternaire  $Al_xGa_yIn_{1-x-y}As$  sur  $InP$  est obtenue si :

$$a_{Al_xGa_yIn_{1-x-y}As}(x, y) = a_{InP} \quad , \quad (IV-3)$$

À partir de nos paramètres de mailles calculés par l'approximation (GGA-WC), les concentrations correspondantes pour le lequel le quaternaire peut être adapté (mis-match) avec InP sont :

$$y = 0.47099 - 0.9767 x \quad (IV-4)$$

$$0 \leq x \leq 0.4821 \quad (IV-5)$$

Suivant les deux relations (IV-4) et (IV-5), le quaternaire  $Al_xGa_yIn_{1-x-y}As$  est adapté (mis match) avec le InP pour un grand nombre de concentration (x, y), ce nombre est limité par les dimensions de la super cellule utilisée.

Afin d'accomplir notre travail et par respect à la condition de l'accord de maille du système  $Al_xGa_yIn_{1-x-y}As/InP$ , Nous étudions les divers propriétés de ce système pour les concentrations aluminium x ( $\frac{1}{32} \leq x \leq \frac{13}{32}$  avec un pas de  $\frac{2}{32}$  et  $1-x-y = \frac{17}{32}$ ).

Suite à notre recherche bibliographique, nous tenons à mentionner qu'il n'y a aucune simulation théorique basée sur les méthodes [FP-LAPW] et aucune valeur expérimentale des propriétés structurales pour ces concentrations.

Tableau IV. 1 représente les résultats calculés par l'approximation (GGA-WC) du paramètre de maille  $a$  et le module de compressibilités  $B$  de  $Al_xGa_yIn_{1-x-y}As$  et InP.

Comme prototype, nous avons montré dans les Fig. IV.3, Fig. IV. 4 et Fig. IV. 5 la variation de l'énergie totale en fonction du volume pour les concentrations en aluminium (x) (0.03125, 0.1625 et 0.28128).

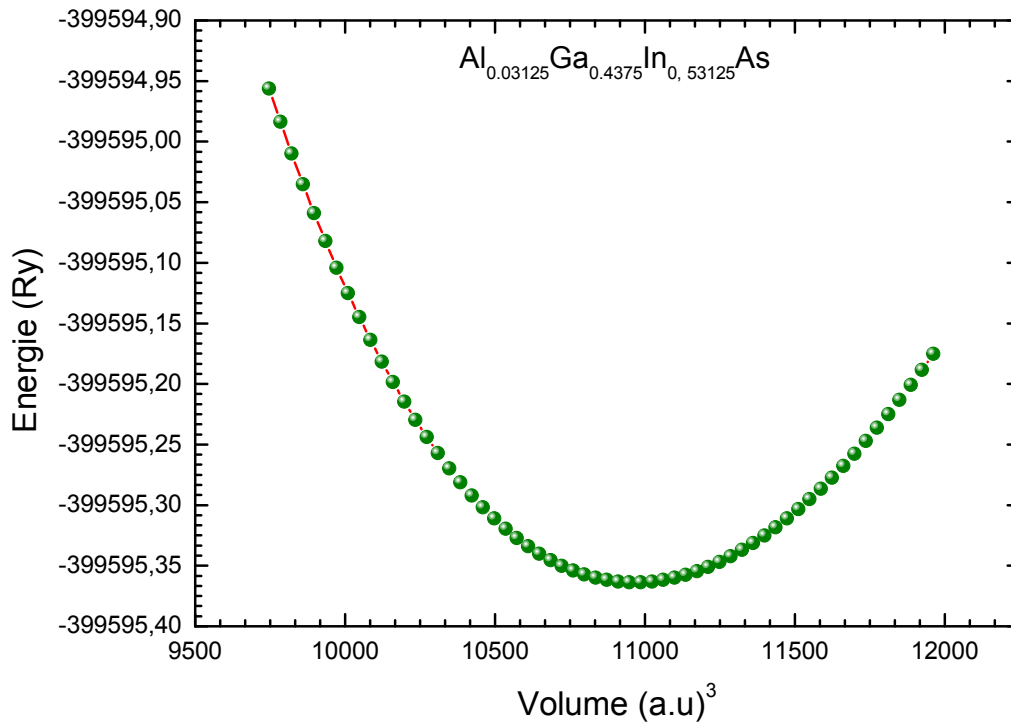


Fig. IV. 3. Variation de l'énergie totale en fonction du volume pour Al<sub>0,03125</sub>Ga<sub>0,4375</sub>In<sub>0,53125</sub>As.

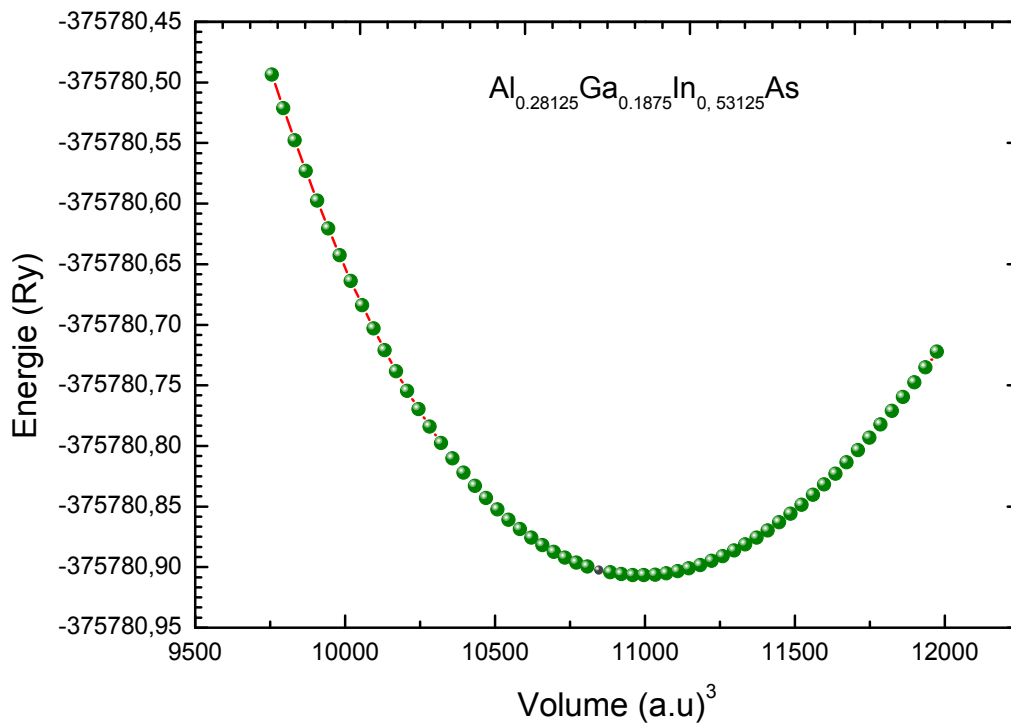
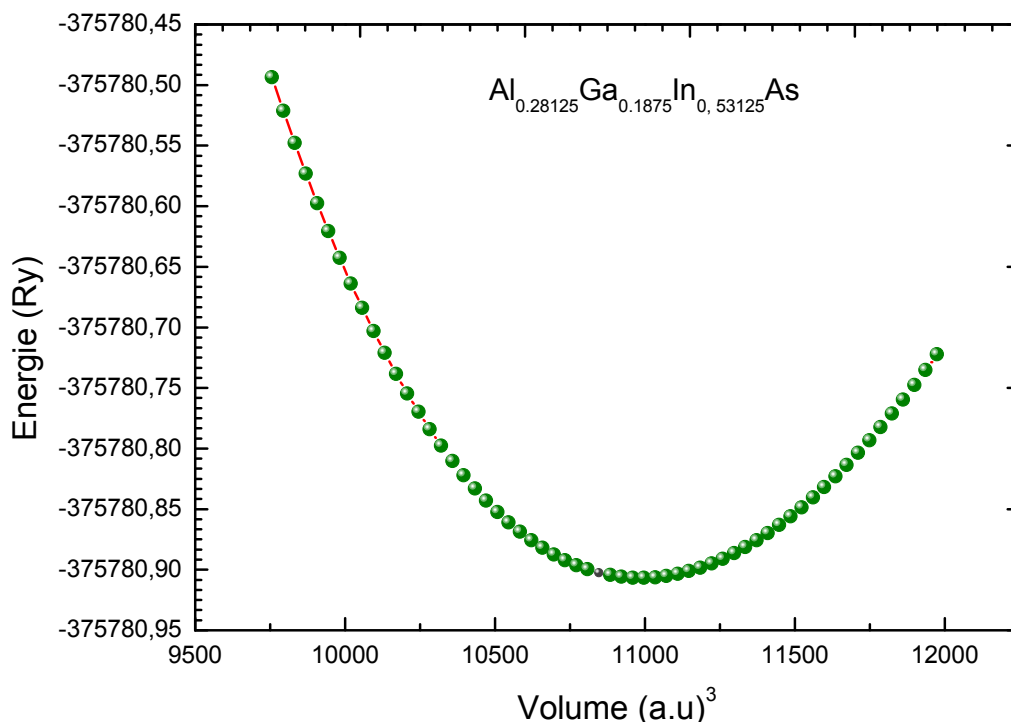


Fig. IV 4. Variation de l'énergie totale en fonction du volume pour Al<sub>0,15625</sub>Ga<sub>0,3125</sub>In<sub>0,53125</sub>As.



**Fig. IV. 5.** Variation de l'énergie totale en fonction du volume pour  $\text{Al}_{0,28125}\text{Ga}_{0,1875}\text{In}_{0,53125}\text{As}$ .

Les valeurs expérimentales représentées dans le tableau IV. 1 sont déduites à partir de la relation (IV-2) [8] où nous avons utilisé les valeurs expérimentales des composés binaires parents.

La Fig. IV. 6, représente la variation du paramètre de réseau en fonction de la concentration d'aluminium (x) du quaternaire  $\text{Al}_x\text{Ga}_y\text{In}_{1-x-y}\text{As}$ .

A l'observation de ce tableau et cette figure, nous constatons que le paramètre de maille  $a^{(\text{GGA-WC})}$  du quaternaire  $\text{Al}_x\text{Ga}_y\text{In}_{1-x-y}\text{As}$  sont en bon accord avec la valeur expérimentale du binaire InP et sont en bon accord avec celle déduites par utilisation de la relation (2). D'autre part, la variation du paramètre  $a^{(\text{GGA-WC})}$  en fonction de la concentration d'aluminium(x) est presque constante (autour de 5.88 Å).

Nous remarquons que la variation du module de compressibilité  $B^{(\text{GGA-WC})}$  en fonction de la concentration x est presque constant (71 GPa), ce qui est en accord avec le rapport entre B et la constante de maille a :  $BaV_0^{-1}$  [12], où  $V_0$  est le volume de cellules d'unité. D'autre part, la valeur du paramètre de maille du binaire InP calculée est en excellent accord avec la valeur expérimentale de la Réf.[13], aussi concorde bien avec celle citées dans la Ref.[14].

Tableau IV. 1. Les résultats calculés par l'approximation (GGA-WC) du paramètre de maille  $a$  et le module de compressibilité  $B$  de  $\text{Al}_x\text{Ga}_y\text{In}_{1-x-y}\text{As}$  et InP.

Composés	Ce travail		Autres travaux théoriques				
	GGA-WC		Théorique		Expérimental		
	$a$	$B$	$a$	$B$	$a$	$B$	
$\text{Al}_x\text{Ga}_y\text{In}_{1-x-y}\text{As}$	$x$						
	0.03125	5.878	71.356	-	-	5.856 <sup>a</sup>	-
	0.09375	5.879	71.208	-	-	5.857 <sup>a</sup>	-
	0.15625	5.880	71.091	-	-	5.857 <sup>a</sup>	-
	0.21875	5.881	71.038	-	-	5.858 <sup>a</sup>	-
	0.28125	5.882	71.017	-	-	5.859 <sup>a</sup>	-
	0.34375	5.883	71.070	-	-	5.859 <sup>a</sup>	-
	0.40625	5.884	71.121	-	-	5.860 <sup>a</sup>	-
InP		5.896	69.437	5.968 [14] 5.838 [14]	62.0 [14] 71.0 [14]	5.869 [13]	72 [13]

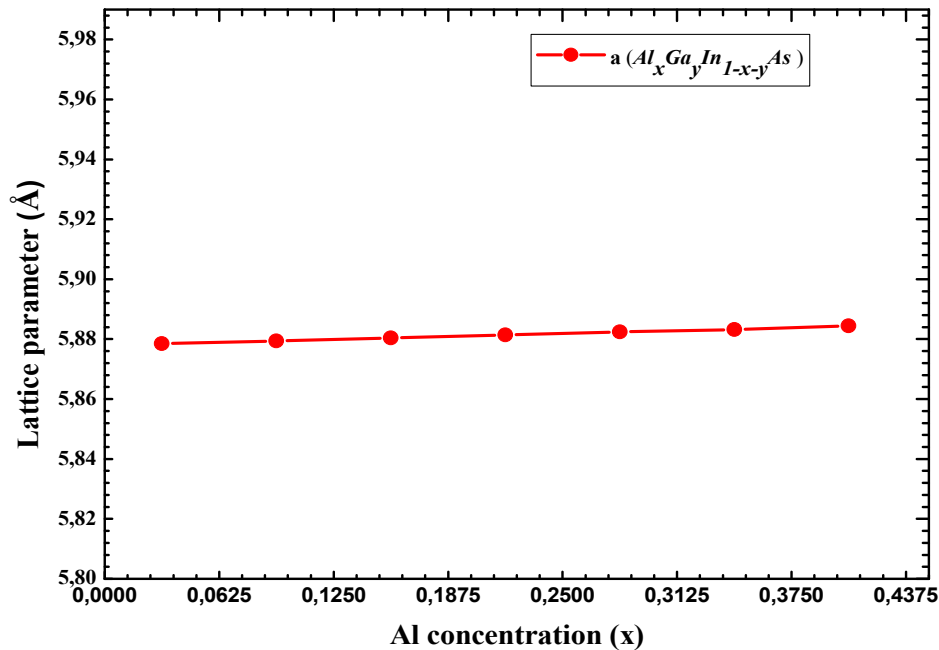
<sup>a</sup> deduite de la relation (IV-2) Réf. [8] avec les paramètres de maille expérimentales  $a$  (Å) des binaires AlAs, GaAs et InAs.

Dans la Fig. IV. 6, nous représentons la variation du paramètre de maille du quaternaire  $\text{Al}_x\text{Ga}_y\text{In}_{1-x-y}\text{As}/\text{InP}$  en fonction de la concentration d'aluminium  $x$  ( $(0.03125 \leq x \leq 0.40625)$  et  $1-x-y = 0.53125$ ). Afin de déterminer le paramètre de courbure (bowing), la variation du paramètre de maille en fonction de la concentration  $x$  a été interpolée par une fonction polynomiale du deuxième degré ( $a + bx + cx^2$ ). Nous présentons le résultat comme suit :

$$a_{\text{Al}_x\text{Ga}_y\text{In}_{1-x-y}\text{As}}^{\text{WC-GGA}}(x) = 5.87797 + 0.01503 \cdot x + 0.00183 x^2 \quad (\text{IV-6})$$

Où,  $c$  présente le paramètre de courbure (bowing) ou écarts à la linéarité.

Nos résultats montrent que les coefficients  $b$  et  $c$  calculés sont négligeables et sont égaux à ( $b=0.01503$  Å) et ( $c = 0.00183 \pm 0.0085$  Å). Comme la concentration de l'indium est la même dans les quaternaires, donc l'origine physique de cette valeur négligeable de bowing de paramètre de maille peut être due à la faible différence entre les valeurs du paramètre de maille des deux binaires (AlAs= 5.678 Å et GaAs= 5.668 Å).



**Fig.IV.6.** Variation du paramètre de réseau (a) en fonction de concentration Al (x) pour  $\text{Al}_x\text{Ga}_y\text{In}_{1-x-y}\text{As} / \text{InP}$ .

Dans la Fig. IV. 7. Montre le contour du paramètre de maille en fonction des concentrations d'aluminium (x) et du gallium (y) de l' $\text{Al}_x\text{Ga}_y\text{In}_{1-x-y}\text{As}/\text{InP}$  calculé par l'approximation (GGA-WC). Dans cette figure, la ligne discontinuée indiquée en rouge représente la condition de l'accord de maille, la concentration en indium ( $1-x-y=0.53125$ ) implique toute une gamme de composition du quaternaire en accord avec InP, et les chiffres indiqués par le symbole \*en rouge présentent les valeurs expérimentales des binaires AlAs, GaAs et InAs. Il intéressant de noter que la surface interne du triangle présente la variation du paramètre de maille du quaternaire en fonction des concentrations (x, y), ces cotés pressent les ternaires (AlGaAs, InGaAs et AlInAs) et les sommets présentent les binaires. Nous avons observé que les lignes situés à l'intérieur du triangle sont presque parallèle et chacune ligne correspond à une concentration d'indium fixe. Sur un plan pratique, ce résultat est remarquable car il montre que le contrôle du paramètre de maille du quaternaire  $\text{Al}_x\text{Ga}_y\text{In}_{1-x-y}\text{As}$  peut être obtenu par l'ajustement de la concentration d'indium. Autrement dit la concentration en indium ( $1-x-y$ ) impose le paramètre de réseau dans le système  $\text{Al}_x\text{Ga}_y\text{In}_{1-x-y}\text{As}/\text{InP}$ . L'origine physique de ce phénomène peut être due à la grande tailles de l'atome d'indium par rapport aux celles d'aluminium et du gallium.

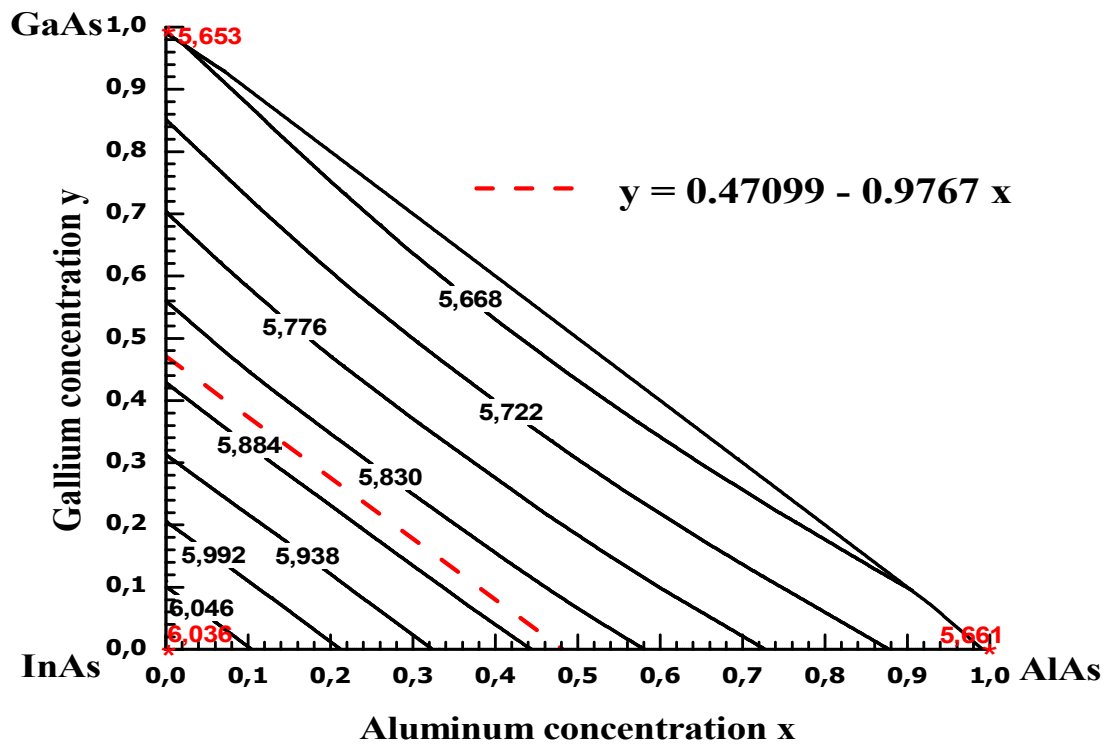


Fig.IV.7. Contour du paramètre de maille en fonction des concentrations d'aluminium ( $x$ ) et du gallium ( $y$ ) du  $\text{Al}_x\text{Ga}_y\text{In}_{1-x-y}\text{As}/\text{InP}$ . Calculé par l'approximation (GGA- WC).

### IV. 3. Propriétés optoélectroniques du quaternaire $\text{Al}_x\text{Ga}_y\text{In}_{1-x-y}\text{As}/\text{InP}$

#### IV. 3. 1. Propriétés électroniques:

Dans cette section, nous calculons les structures de bandes électroniques du quaternaire  $\text{Al}_x\text{Ga}_y\text{In}_{1-x-y}\text{As}$  avec et sans relation et le binaire InP. Ces propriétés ont été calculées par l'utilisation des trois approximations PBESol-GGA [15], GGA-EV proposé par Engel-Vosko [16] et (TB-mBJ) de Tran-Blaha modified Becke-Johnson [17]. Les structures de bandes électroniques du binaire InP et du quaternaire  $\text{Al}_x\text{Ga}_y\text{In}_{1-x-y}\text{As}$  sont calculées le long des lignes de symétrie de la zone de Brillouin. Le maximum de la bande de conduction est pris comme origine des énergies (niveau de fermi  $E_F$ ).

La super cellule utilisée dans notre simulation a été relaxée, afin d'éviter l'ambiguïté liée à l'effet de l'incorporé de l'atome d'aluminium.

Comme prototype, nous présentons le tableau IV. 2 les arrangements atomiques du quaternaire  $Al_xGa_yIn_{1-x-y}As$  avec et sans relation pour les concentrations  $x$  suivantes ( $x=0.03125, 0.15625$  et  $0.28125$ ).

Table IV.2. Position des atomes Al (X, Y, Z) dans le quaternaire  $Al_xGa_yIn_{1-x-y}As$  avec et sans relaxation pour les concentrations ( $x =0.03125, 0.15625$  et  $0.28125$ ).

Composé		Non relaxé	relaxé
		Position des atomes Al(X, Y, Z)	Position des atomes Al (X, Y, Z)
$Al_xGa_yIn_{1-x-y}As$	$x$		
	0.03125	Al <sub>1</sub> (0, 0, 0)	Al <sub>1</sub> (0.00003851, 0.00003851, 0.99994825)
	0.15625	Al <sub>1</sub> (0, 0, 0) Al <sub>2</sub> (0.5, 0, 0) Al <sub>3</sub> (0, 0.5, 0) Al <sub>4</sub> (0.5, 0.5, 0) Al <sub>5</sub> (0, 0, 0.5)	Al <sub>1</sub> (0.00013922, 0.00013922, 0.00028144) Al <sub>2</sub> (0.49976163, 0.00024811, 0.99735356) Al <sub>3</sub> (0.00248111, 0.49976163, 0.99735356) Al <sub>4</sub> (0.49981298, 0.49981298, 0.00024252) Al <sub>5</sub> (0.00231931, 0.00231931, 0.50024947)
	0.28125	Al <sub>1</sub> (0, 0, 0) Al <sub>2</sub> (0.5, 0, 0) Al <sub>3</sub> (0, 0.5, 0) Al <sub>4</sub> (0.5, 0.5, 0) Al <sub>5</sub> (0, 0, 0.5) Al <sub>6</sub> (0.5, 0, 0.5) Al <sub>7</sub> (0, 0.5, 0.5) Al <sub>8</sub> (0.5, 0.5, 0.5) Al <sub>9</sub> (0.25, 0.25, 0)	Al <sub>1</sub> (0.00014815, 0.00014815, 0.00052771) Al <sub>2</sub> (0.49985185, 0.00014815, 0.99947229) Al <sub>3</sub> (0.00014815, 0.49985185, 0.99947229) Al <sub>4</sub> (0.49985185, 0.49985185, 0.00052771) Al <sub>5</sub> (0.00236656, 0.00236656, 0.50025852) Al <sub>6</sub> (0.49763344, 0.00236656, 0.49974148) Al <sub>7</sub> (0.00236656, 0.49763344, 0.49974148) Al <sub>8</sub> (0.49763344, 0.49763344, 0.50025852) Al <sub>9</sub> (0.25000000, 0.25000000, 0.00000000)

Le Tableau IV. 3 illustre les valeurs des gaps énergétiques à différentes concentrations  $x$  ( $0.03125 \leq x \leq 0.40625$  avec un pas de 0.0625 et la composition In ( $1-x-y$ ) fixée à 0.53125) calculées par l'utilisation des trois approximations.

Nous tenons à mentionner qu'il n'existe pas dans la littérature de données expérimentales ou théoriques du gap énergétiques du quaternaire  $Al_xGa_yIn_{1-x-y}As$  pour ces concentrations Al ( $x$ ) en discussions. Donc pour cela nous avons utilisé des deux relations (7) [18] et (8) [19] pour déduire les valeurs expérimentales du quaternaire .

$$Eg(x) = 0.81 + 1.45 x \quad (IV-7)$$

$$Eg(x) = 0.75 + 1.548 x \quad (IV-8)$$

Nous remarquons que les valeurs des gaps énergétiques obtenues par les deux approximations (GGA-BPEsol et GGA-EV) sont sous-estimées par rapport à l'expérimental. Ce comportement est bien connu dans les méthodes basées sur le formalisme de la DFT [20]. Par contre, des bonnes valeurs gaps sont obtenues lorsque nous avons utilisé l'approximation (TB-mBJ) proposée par Tran et Blaha. Nous observons que les résultats obtenus par l'utilisation de cette nouvelle approximation proposée récemment concordent parfaitement avec l'expérience en comparaison avec les deux autres approximations (GGA-BPEsol et GGA-EV). Cependant, dans le cas du quaternaire non relaxé l'écart entre la valeur du gap calculée par l'approximation (TB-mBJ) et calculée par la relation (IV-7) [18] est de l'ordre de 0.15% et 0.23% (IV-8) [19]. La faible valeur de cet écart peut être attribuée au fait que le présent calcul a été effectué à la température  $T=0$  K, les mesures expérimentales ont été effectuées à 77 K relation (IV-7)[18] et à la température ambiante (IV.8)[19]. A partir des résultats du tableau IV. 3, Nous observons que la valeur de gap du quaternaire  $\text{Al}_x\text{Ga}_y\text{In}_{1-x-y}\text{As}$  s'approche de celle binaire InP pour la concentration en aluminium ( $x = 0.40625$ ). En fait, au-delà de cette concentration ( $x = 0.40625$ ) la valeur du gap du binaire InP dépasse celle du quaternaire  $\text{Al}_x\text{Ga}_y\text{In}_{1-x-y}\text{As}$ . Donc cette faible différence de gaps ne favorise pas l'utilisation de structure  $\text{Al}_x\text{Ga}_y\text{In}_{1-x-y}\text{As}/\text{InP}$  comme une diode laser à puits quantiques. Pour cette raison nous avons focalisé notre étude sur les concentrations  $x$  inférieures à cette valeur critique de la concentration d'aluminium.

Après l'analyse des résultats calculés, nous observons un faible écart entre les valeurs des gaps énergétiques, obtenus par l'utilisation de ces trois approximations, du quaternaire relaxé et non relaxé. A titre d'exemple, dans le cas de l'approximation (TB-mBJ), l'écart trouvé est de l'ordre de 0.028 eV, 0.19 eV et 0.002 eV pour les concentrations en aluminium 0.03125, 0.15625 et 0.28125, respectivement. Ceci peut être expliqué par l'effet de relaxation, et le changement de l'environnement ionique de la cellule résultante.

La Fig. IV. 8, présente la variation du gap énergétique en fonction de la concentration Al ( $x$ ) pour  $\text{Al}_x\text{Ga}_y\text{In}_{1-x-y}\text{As}/\text{InP}$  calculé par les trois approximations (GGA-BPEsol, GGA-EV et TB-mBJ). Il est bien clair d'après cette figure, que la variation des gaps augmente en fonction de la concentration  $x$ . Cependant, nous observons que cette variation est presque linéaire. L'interpolation polynomiale des courbes représentées dans la Fig.IV.8 nous donne :

$$\begin{cases} E_g^{(GGA-BPEsol)un-reLaxed}(x) = -0.115 + 1.389x + 0.073x^2 \\ E_g^{(EV-GGA)un-reLaxed}(x) = 0.4775 + 1.5428x + 0.128x^2 \\ E_g^{(TB-mBJ)un-reLaxed}(x) = 0.9489 + 1.2598.x + 0.2407x^2 \end{cases} \quad (IV-9)$$

$$\begin{cases} E_g^{(GGA-BPEsol)reLaxed}(x) = -0.179 + 1.825x - 0.676x^2 \\ E_g^{(GGA-EV)reLaxed}(x) = 0.447 + 1.74x - 0.323x^2 \\ E_g^{(TB-mBJ)reLaxed}(x) = 0.917 + 1.259.x + 0.390x^2 \end{cases} \quad (IV-10)$$

Ces expressions peuvent être utiles pour calculer la valeur du band gap du système  $Al_xGa_yIn_{1-x-y}As/InP$  pour n'importe quelle concentration  $x$ .

Le paramètre de courbure  $c$  (bowing) déterminé, dans le cas du quaternaire non relaxé nous avons  $c=0.0373$ ,  $0.128$  et  $0.240$  eV correspondant aux approximations (GGA-BPEsol), (GGA-EV) et (TB-mBJ), respectivement. Cependant, dans le cas du quaternaire non relaxé le paramètre de courbure est trouvé égale  $c= -0.676$  eV,  $-0.323$  eV et  $0.390$  eV correspondant aux approximations (GGA-BPEsol), (GGA-EV) et (TB-mBJ), respectivement.

Tableau IV.3: Valeurs des gaps énergétiques  $E_g$  (eV) du binaire InP et du  $Al_xGa_yIn_{1-x-y}As$  avec et sans relaxation calculées par les approximations GGA-BPEsol, GGA-EV et mBJ (en eV) et comparés à d'autres travaux.

Composé	Present travail						Autres travaux		
	Non relaxé			Relaxé			Theo.	Exp.	
	GGA-BPEsol	GGA-EV	TB-mBJ	GGA-BPEsol	GGA-EV	TB-mBJ			
$Al_xGa_yIn_{1-x-y}As$	$x$								
	0.03125	-0.071	0.524	0.985	-0.112	0.495	0.957	-	0.855 <sup>d</sup> , 0.798 <sup>e</sup>
	0.09375	-0.024	0.626	1.074	-0.013	0.624	1.076	-	0.945 <sup>d</sup> , 0.895 <sup>e</sup>
	0.15625	0.104	0.723	1.155	0.087	0.703	1.136	-	1.046 <sup>d</sup> , 0.991 <sup>e</sup>
	0.21875	0.188	0.815	1.227	0.187	0.810	1.227	-	1.127 <sup>d</sup> , 1.088 <sup>e</sup>
	0.28125	0.289	0.933	1.336	0.294	0.929	1.334	-	1.217 <sup>d</sup> , 1.185 <sup>d</sup>
	0.34375	0.364	1.011	1.395	0.350	0.993	1.380	-	1.308 <sup>e</sup> , 1.282 <sup>d</sup>
	0.40625	0.463	1.130	1.507	0.457	1.111	1.481	-	1.399 <sup>e</sup> , 1.378 <sup>d</sup>
InP			1.193	1.570					1.344 [21] 1.423 [13], 1.50 [14] 1.35 [22],[23]

<sup>d</sup>estimé à partir de la relation  $E_g(x) = 0.81 + 1.45x$  (at 77K), citée dans la Ref. [18].

<sup>e</sup>estimé à partir de la relation  $E_g(x) = 0.75 + 1.548x$  (at 300K), citée dans la Ref. [19]

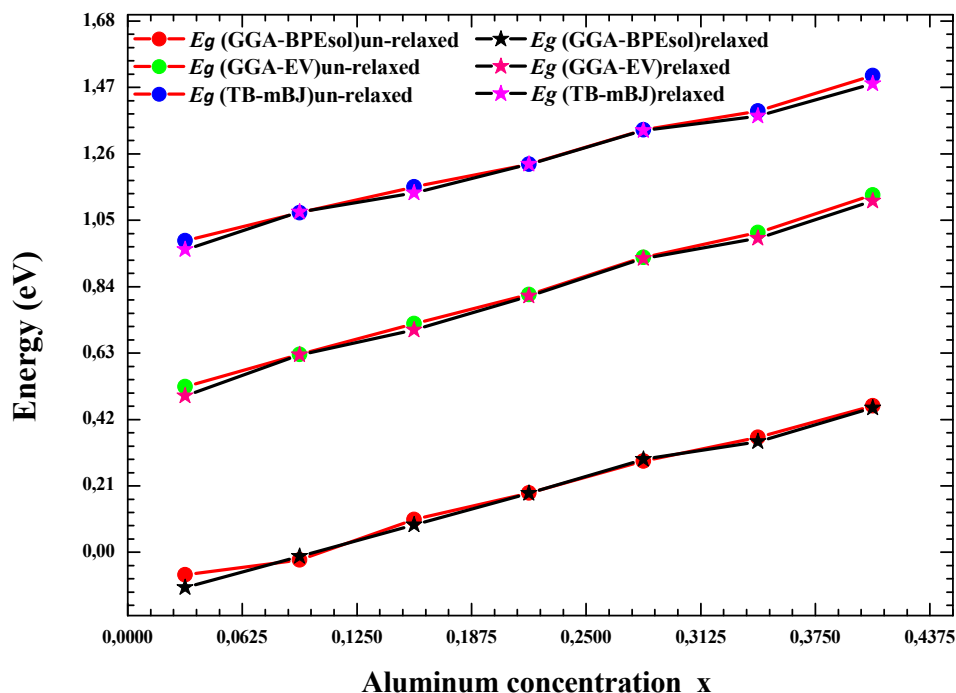
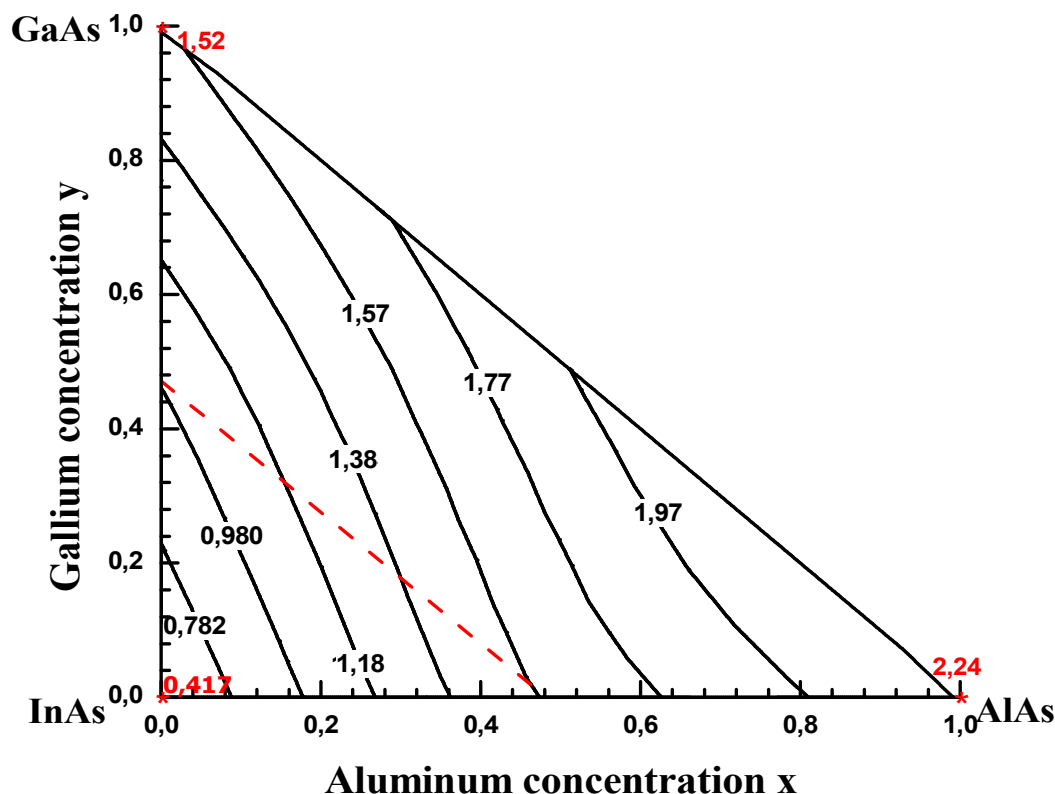


Fig. IV. 8. Variation du gap énergétique en fonction de Al (x) pour  $Al_xGa_yIn_{1-x-y}As / InP$  calculé par les trois approximations (GGA-BPESol, GGA-EV et TB-mBJ).

Dans la Fig. IV.9 nous présentons le contour du gap énergétique en fonction des concentrations d'aluminium (x) et du gallium (y) du  $Al_xGa_yIn_{1-x-y}As / InP$ . La ligne discontinuée indiquée en couleur rouge représente la condition de l'accord de maille. Ici, le symbole en rouge (étoile \*) indique les valeurs des gaps expérimentales des binaires AlAs, GaAs et InAs, qui sont en bon accord avec celle calculée par l'approximation (TB-mBJ). Cependant, nous observons que le gap augmente en fonction de la concentration de l'Al (x). Aussi, le contour du gap énergétique montre que le quaternaire  $Al_xGa_yIn_{1-x-y}As / InP$  possède un gap varie entre 0.980 et 1.507 eV, ce qui correspond aux longueurs d'ondes entre 1.30  $\mu m$  et 0.822  $\mu m$ . Cette large variation du gap énergétique favorise l'utilisation ce quaternaire dans le domaine de l'optoélectronique. Nous notons que la représentation du contour offre la possibilité de lire les valeurs des gaps graphiquement. En outre, nous avons remarquons que la valeur du gap du  $Al_xGa_yIn_{1-x-y}As / InP$  peut être ajusté en commandant la concentration Al (x). Donc Il est facile de varier les valeurs du gap  $Al_xGa_yIn_{1-x-y}As$  tout en gardant la condition de l'accord de maille du système  $Al_xGa_yIn_{1-x-y}As / InP$ . Ceci est accompli juste par substitution de l'atome du gallium (y) par celle d'Aluminium (x).

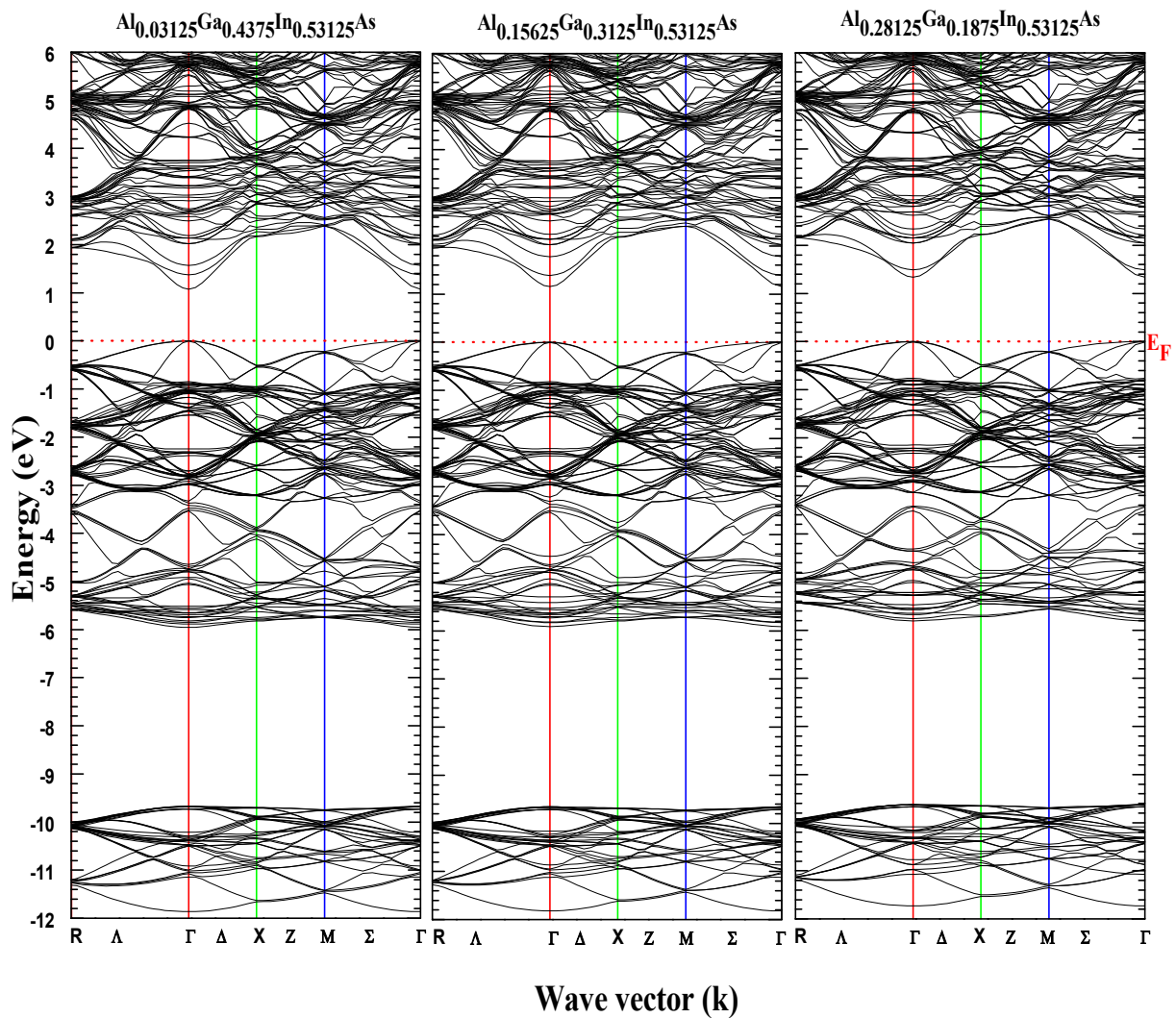


**Fig.IV.9.** Contour du gap énergétique en fonction des concentrations d'aluminium ( $x$ ) et du gallium ( $y$ ) du  $\text{Al}_x\text{Ga}_y\text{In}_{1-x-y}\text{As} / \text{InP}$ . Calculé par l'approximation (TB- mBJ).

Le calcul des structures de bandes du quaternaire  $\text{Al}_x\text{Ga}_y\text{In}_{1-x-y}\text{As}$  a été effectué par la méthode FP-LAPW et par l'utilisation des trois approximations (GGA-BPEsol), (GGA-EV) et (TB-mBJ). Nous observant que l'allure des structures de bandes obtenues par ces trois approximations est la même. D'autre part, elles n'affectent pas la nature des bandes de ces quaternaires mais elles ont une influence quantitative (sur les valeurs des gaps énergétiques). Pour cela, Nous avons tracé les résultats obtenue par l'utilisation de la récente approximation (TB-mBJ) pour tous les quaternaires en discussion.

Les structure de bandes des quaternaires  $\text{Al}_{0.03125}\text{Ga}_{0.4375}\text{In}_{0.53125}\text{As}$ ,  $\text{Al}_{0.15625}\text{Ga}_{0.3125}\text{In}_{0.53125}\text{As}$  et  $\text{Al}_{0.28125}\text{Ga}_{0.1875}\text{In}_{0.53125}\text{As}$  calculées le long des différentes directions de haute symétrie dans la zone de Brillouin par l'approximation (TB-mBJ) sont représentées dans Fig. IV.10. Dans cette figure, le niveau de Fermi est pris comme origine des énergies et il est indiqué par une ligne rouge en pointées. Suite à nos résultats obtenus, nous constatons que le maximum de la bande de valence ( $\text{VB}_{\text{max}}$ ) et minimum de la bande de conduction ( $\text{BV}_{\text{min}}$ ) sont

localisés au point ( $\Gamma$ ), ce qui montre que le quaternaire  $\text{Al}_x\text{Ga}_y\text{In}_{1-x-y}\text{As}$  à différentes concentrations ( $x$ ) possède un gap direct. Cette nature de gap favorise l'utilisation de ce quaternaire dans le domaine de l'optoélectronique. Dans la Fig. IV.11, nous présentons la variation des valeurs du gap calculées par l'approximation (TB-mBJ) du quaternaire avec et sans relation et l'iconicité en fonction de la concentration en aluminium ( $x$ ).



**Fig.IV.10.** Structure des bandes des quaternaires  $\text{Al}_{0.03125}\text{Ga}_{0.4375}\text{In}_{0.53125}\text{As}$ ,  $\text{Al}_{0.15625}\text{Ga}_{0.3125}\text{In}_{0.53125}\text{As}$  et  $\text{Al}_{0.28125}\text{Ga}_{0.1875}\text{In}_{0.53125}\text{As}$  calculées par l'approximation (TB-mBJ).

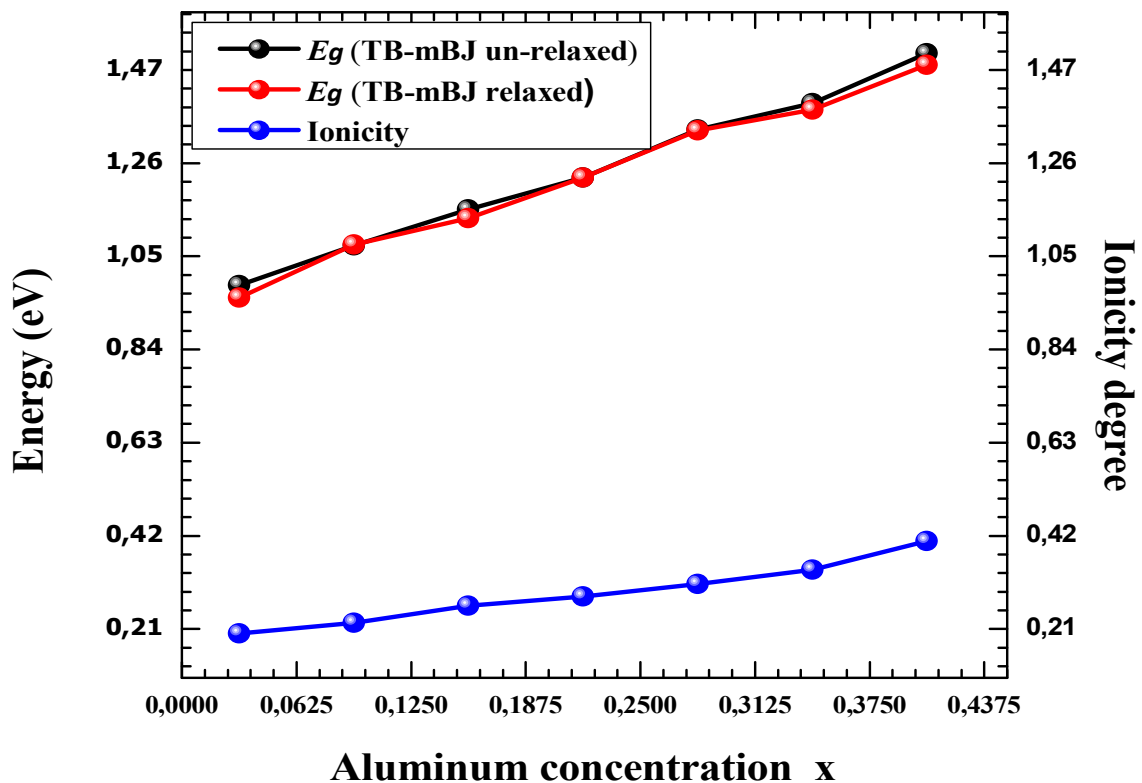


Fig. IV.11. Variation des valeurs du gap calculées par l'approximation (TB-mBJ) du quaternaire  $\text{Al}_x\text{Ga}_y\text{In}_{1-x-y}\text{As}$  avec et sans relation et l'ionicité en fonction de la concentration d'aluminium ( $x$ ).

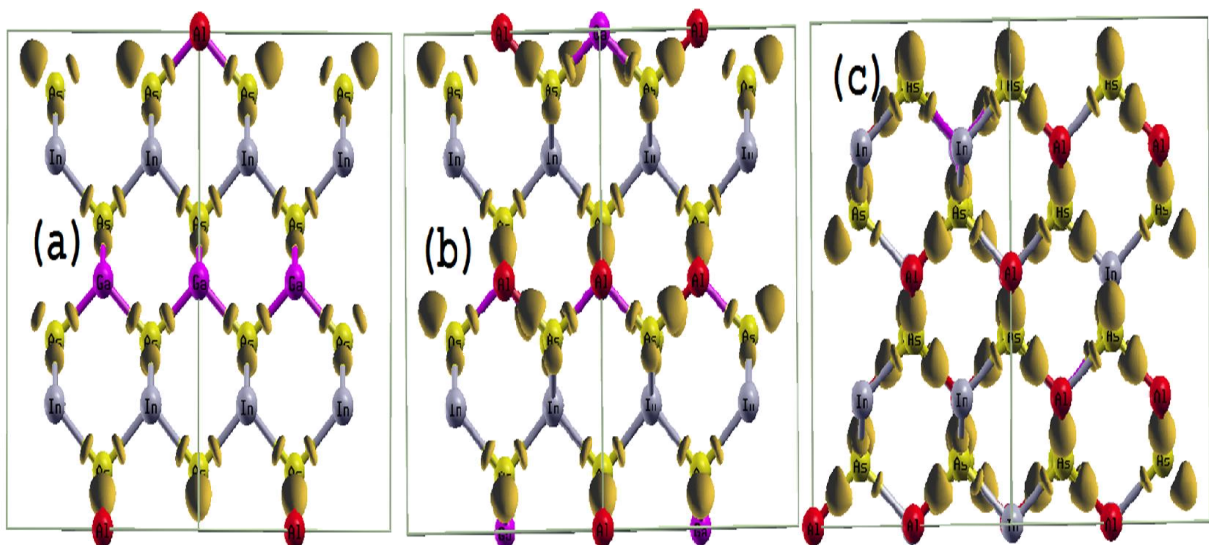


Fig.III.2. The ELF isosurface pour  $\text{Al}_{0.03125}\text{Ga}_{0.4375}\text{In}_{0.53125}\text{As}$  (a),  $\text{Al}_{0.15625}\text{Ga}_{0.3125}\text{In}_{0.53125}\text{As}$  (b) et  $\text{Al}_{0.28125}\text{Ga}_{0.1875}\text{In}_{0.53125}\text{As}$  (c).

### IV. 3. 3. Densité d'états

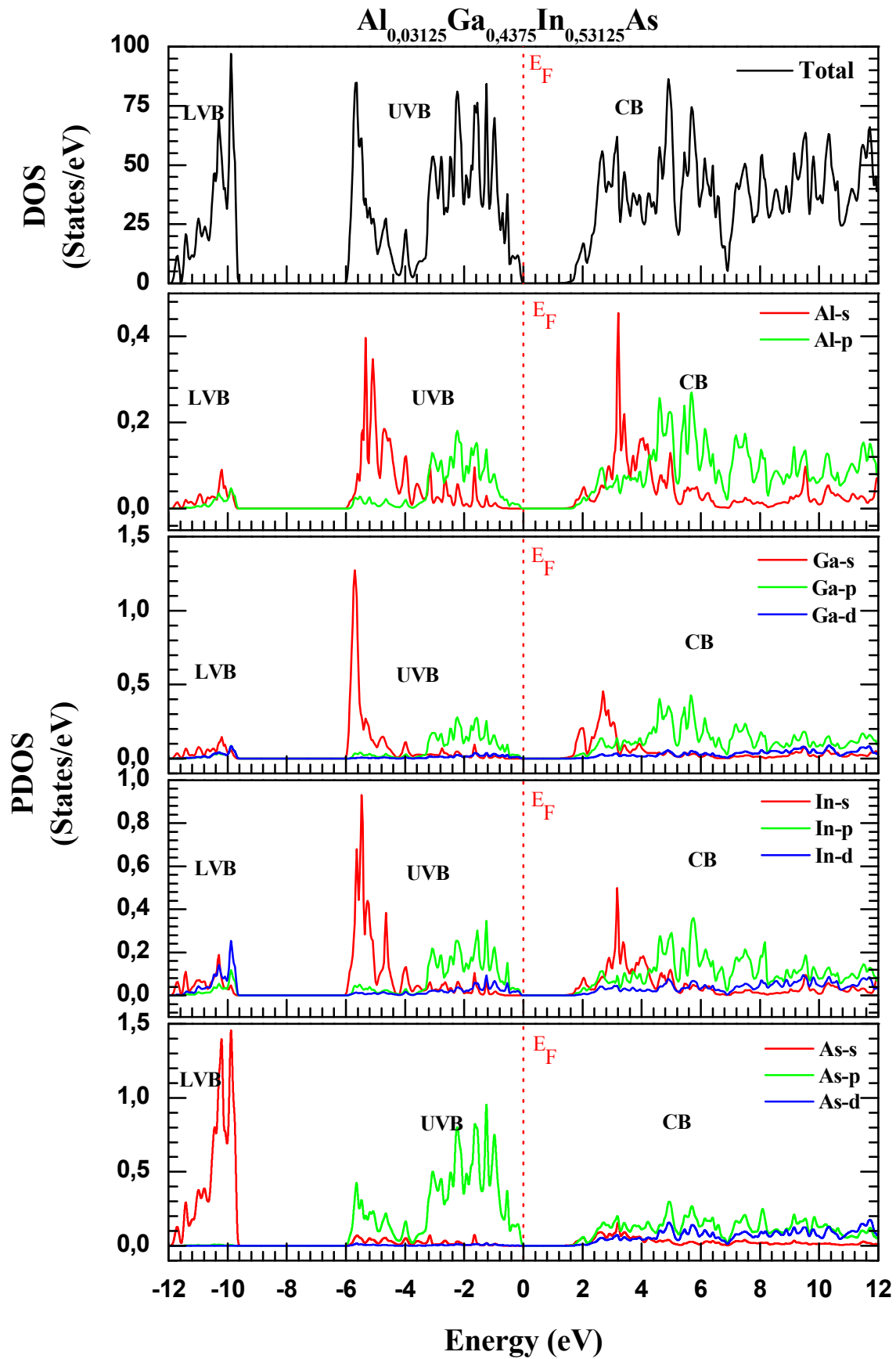
Les densités d'états totales (TDOS) et partielles (PDOS) du quaternaire  $Al_xGa_yIn_{1-x-y}As$  ont été calculées par l'utilisation du paramètre de maille optimisé  $a^{(GGA-WC)}$ . Ces propriétés ont été déterminées à l'aide des trois approximations via (GGA-BPEsol), (GGA-EV) et (TB-mBJ). Nous remarquons le profil de la densité d'états du quaternaire à différentes concentrations en aluminium ( $x$ ) sont similaires avec une légère différence qualitatives. Donc, comme exemple, nous avons ploté les résultats calculés par l'utilisation l'approximation (TB-mbj) pour les trois concentrations suivantes  $x$  ( $x=0.03125$ ,  $0.15625$  et  $0.1875$ ) dans les Fig. IV. 13, Fig. IV.14 et Fig. IV 15, respectivement.

Ces figures montre que le profil de la densité d'état des trois quartenaires  $Al_{0.03125}Ga_{0.4375}In_{0.53125}As$ ,  $Al_{0.15625}Ga_{0.3125}In_{0.53125}As$  et  $Al_{0.2875}Ga_{0.1875}In_{0.53125}As$  est divisée en trois régions: Bandes de valence inferieur (BVI), bande supérieure de valence (BVS) et la bande de conduction (BC).

La première région (BVI), dans la gamme d'énergie de  $-12eV$  à  $-9.57 eV$ , est due principalement aux As(s) et In(d) orbitales, avec une légère participation des orbitaux Al(s, p), In(s, p) and Ga(s, p). Ces états représentent la structure électronique de base.

La deuxième région (BVS), entre  $-5.82 eV$  et le niveau de Fermi ( $E_F$ ), est divisée en deux parties. La première, de  $-5.82$  à  $-3.66 eV$ , la contribution est essentiellement due au l'orbital (s) des deux atomes Ga et In, avec une faible participation des orbitales hybridées Al (s, p), In(s, p) et Ga (p, d). La deuxième partie, entre  $-3.66 eV$  et  $E_F$  (Fermi Niveau), est formée par les états p des atomes As, In, Ga et Al avec une légère contribution des orbitales Al(s, p), In (s, d), Ga(s, d) et As(s, d).

La troisième région (BC), au-dessus du niveau de Fermi, est formée de mixture d'états de caractère s, p de l'atome Al et des états (s, p et d) des atomes Ga, In et As. Selon ces résultats, nous pouvons noter que l'influence de l'incorporation (Al) dans ( $Al_xGa_yIn_{1-x-y}As$ ) sur les propriétés électroniques est légère.



**Fig. IV.13.** Densité d'états totale (TDOS) et partielle (PDOS) du  $\text{Al}_{0,03125}\text{Ga}_{0,4375}\text{In}_{0,53125}\text{As}$  calculées par l'approximation (TB- mBJ).

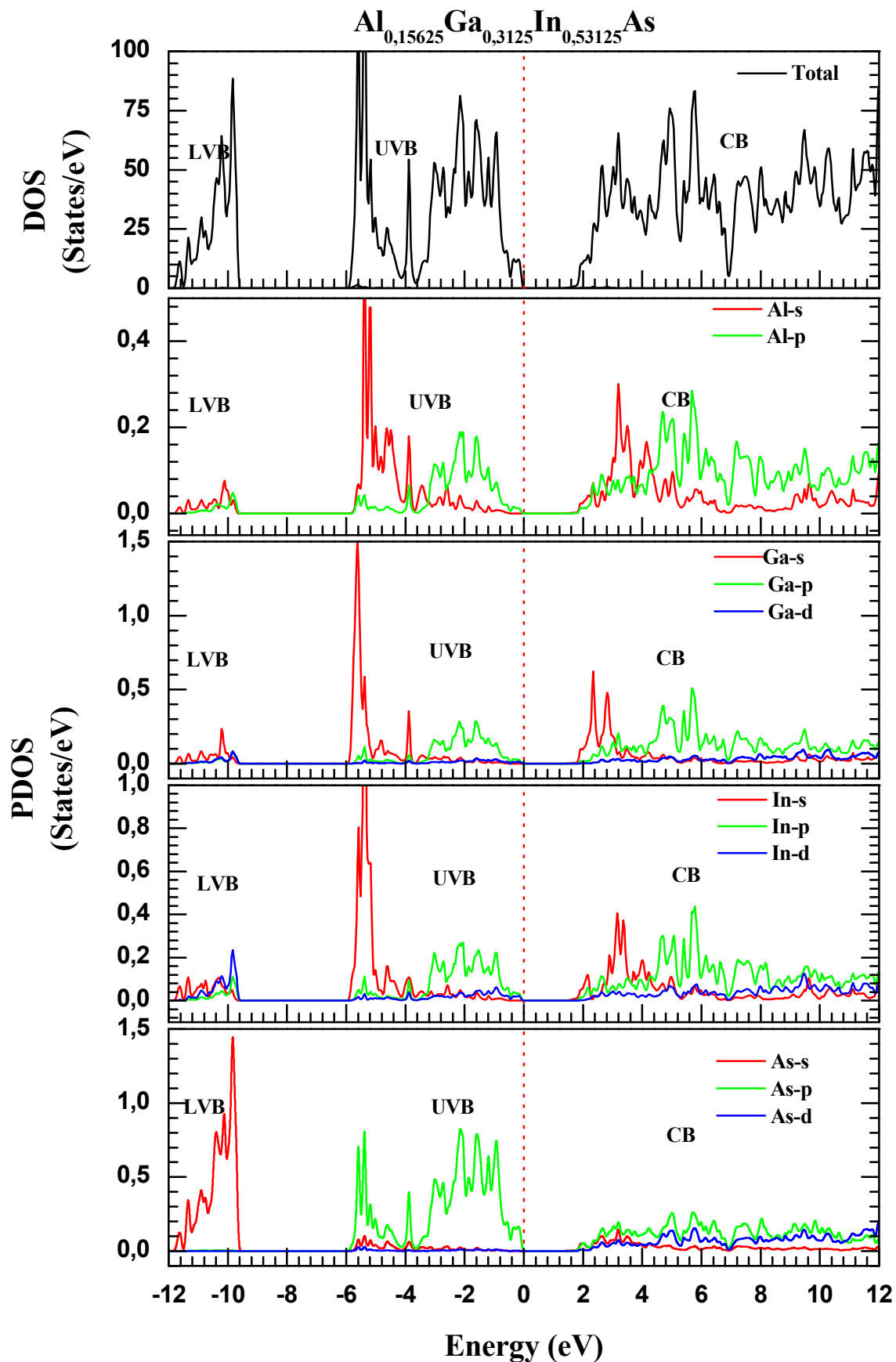
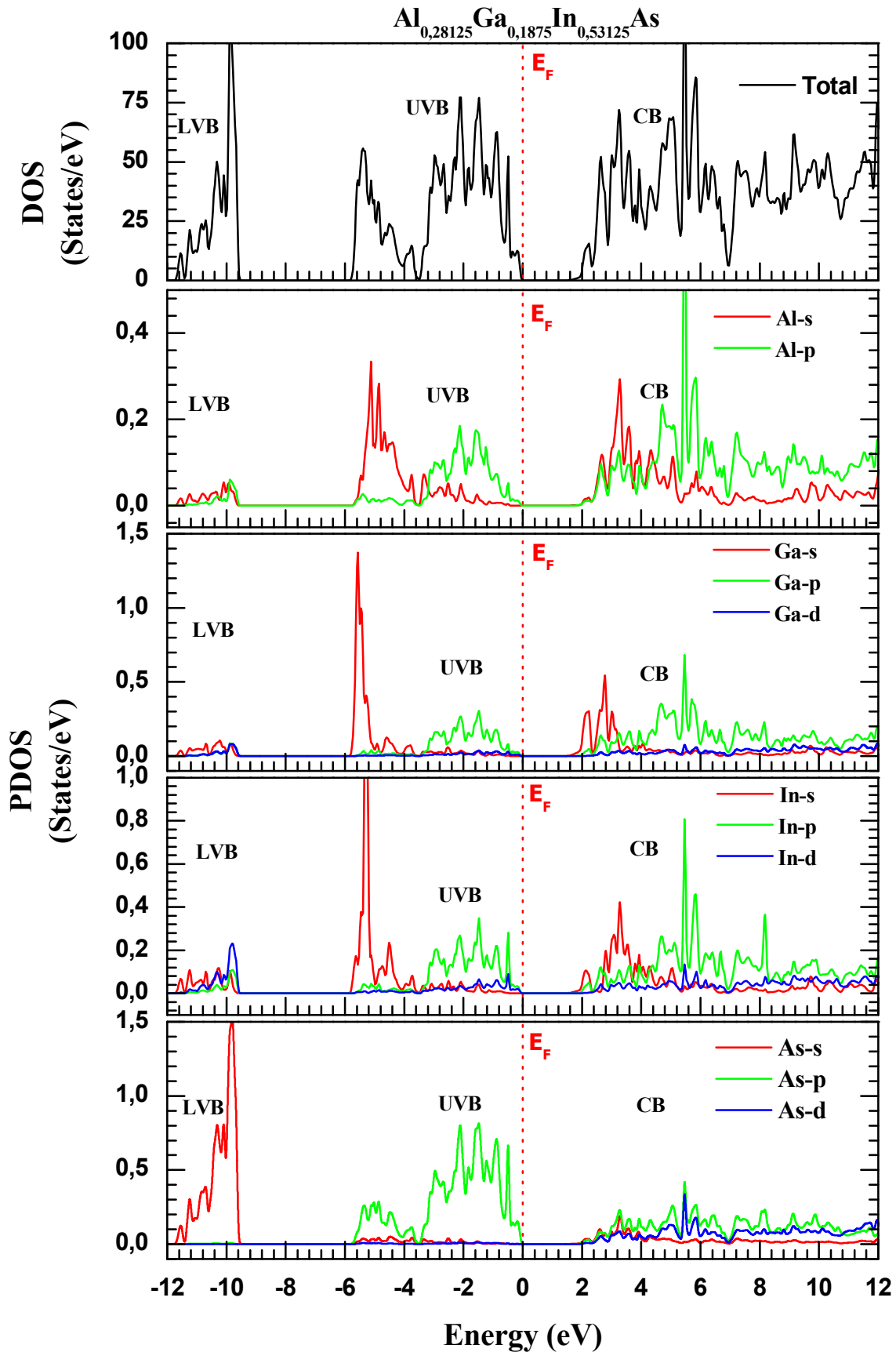


Fig. IV.14. Densité d'états totale (TDOS) et partielle (PDOS) du  $\text{Al}_{0,15625}\text{Ga}_{0,3125}\text{In}_{0,53125}\text{As}$  calculées par l'approximation (TB- mBJ).



**Fig. IV.15.** Densité d'états totale (TDOS) et partielle (PDOS) du  $\text{Al}_{0,28125}\text{Ga}_{0,1875}\text{In}_{0,53125}\text{As}$  calculées par l'approximation (TB- mBJ).

### IV. 3. 4. Propriétés optiques

Dans cette section, nous avons calculé les propriétés optiques de l' $\text{Al}_x\text{Ga}_y\text{In}_{1-x-y}\text{As}$  avec  $x$  ( $0.03125 \leq x \leq 0.40625$  avec un pas de 0.0625 et la concentration In fixée à (0.53125) via l'approximation (TB-mBJ) et par l'introduction du paramètre de maille optimisée  $a$  (GGA-WC). En effet, la connaissance de ces propriétés sont important pour les matériaux optiques et les applications correspondantes [24]. Abt et al. [25], et Ambrosch-Draxl et Sofo [26] ont décrit en détail les procédures de détermination de la fonction diélectrique (tensor)  $\varepsilon(\omega) = \varepsilon_1(\omega) + i\varepsilon_2(\omega)$  par la méthode de (FP-LAPW). Afin d'obtenir un meilleur spectre optique de la fonction diélectrique  $\varepsilon(\omega)$ , un maillage dense de nombre de points  $k = 172$  uniformément réparti dans toute la zone de Brillouin a été utilisé. Et pour éviter l'apparition des pics indésirables (parasitaires) dans les spectres de la fonction diélectrique nous avons pris l'élargissement Lorentzien (broadening) égal à 0.1 eV. Nous notons que notre quaternaire possède une symétrie cubique donc sa réponse optique est isotrope. A cet effet, la détermination d'une seule composante de la fonction diélectrique permet la caractérisation des propriétés optiques linéaires de ce quaternaire.

La partie imaginaire  $\varepsilon_2(\omega)$  a été calculée à partir des éléments de la matrice dynamique entre les états occupés et non occupés des fonctions d'ondes.

La partie réelle  $\varepsilon_1(\omega)$  de la fonction diélectrique complexe peut être extrait à partir de  $\varepsilon_2(\omega)$  par l'utilisation de la relation de Kramers-Kronig [27, 28].

Il est important cependant de noter que la connaissance des deux parties imaginaire et réelle de la fonction diélectrique s'est avérée être un puissant outil dans la compréhension des propriétés électroniques des matériaux. D'autres propriétés importantes de l'optique peuvent être dérivées de la fonction diélectrique complexe  $\varepsilon(\omega)$  [29, 30]. Les expressions utilisées pour le calcul de l'indice de réfraction  $n(\omega)$ , le coefficient d'extinction  $k(\omega)$ , la réflectivité optique  $R(\omega)$ , le coefficient d'absorption  $\alpha(\omega)$ , et la fonction de perte d'énergie  $L(\omega)$  sont [8]:

$$n(\omega) = \left[ \frac{\sqrt{\varepsilon_1^2(\omega) + \varepsilon_2^2(\omega)} + \varepsilon_1(\omega)}{2} \right]^{1/2} \quad (\text{IV-11})$$

$$k(\omega) = \left[ \frac{\sqrt{\varepsilon_1^2(\omega) + \varepsilon_2^2(\omega)} - \varepsilon_1(\omega)}{2} \right]^{1/2} \quad (\text{IV-12})$$

A titre de comparaison, suite à l'absence dans la littérature des données théoriques et expérimentales du quaternaire pour les concentrations en aluminium ( $0.03125 \leq x \leq 0.40625$ ) avec un pas de 0.0625, nous avons utilisé le model de Hervé et Vandamme [31] et le model de Moss [32] pour calculer  $n(E_g)$ .

1. model de Herve et Vandamme [31]:

$$n = \sqrt{1 + \left(\frac{A}{E_g + B}\right)^2} \quad (\text{IV-13})$$

Où,  $A = 13.6$  eV,  $B = 3.4$  eV,  $E_g$  est le gap in eV.

2. relation de Moss [32]:

$$E_g n^4 = k \quad (\text{IV-14})$$

où,  $k = 108$  eV [32]

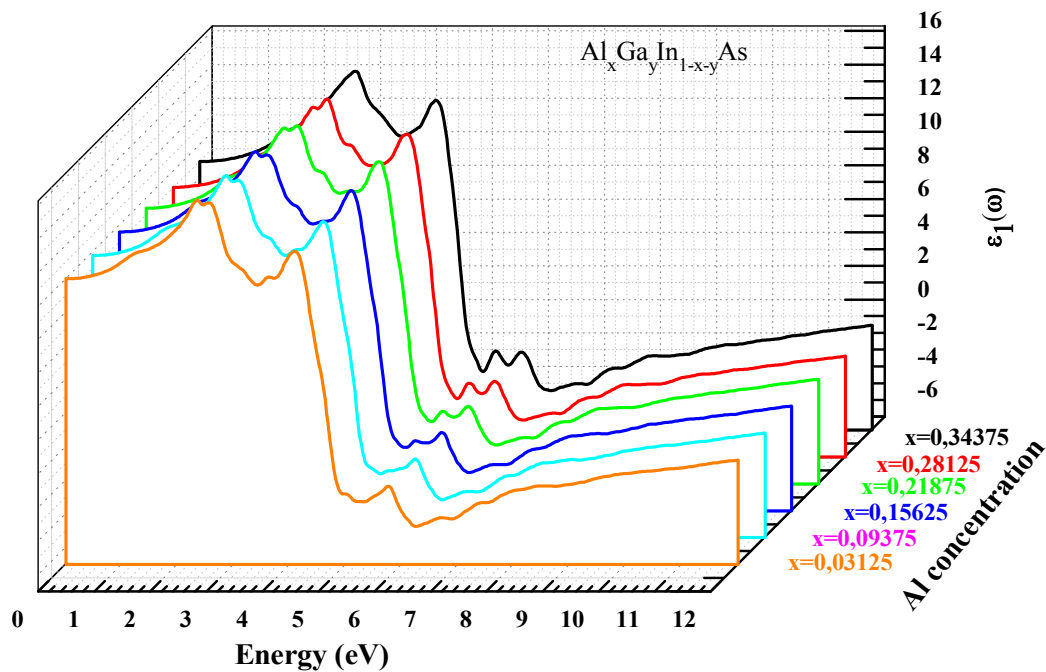
#### IV. 3. 4. 1. La fonction diélectrique

La partie réelle et imaginaire de la fonction diélectrique, dans la gamme d'énergie (rayonnement) allant jusqu'à 12eV et à différentes concentrations ( $x$ ), du quaternaire  $\text{Al}_x\text{Ga}_y\text{In}_{1-x-y}\text{As}$  en fonction de l'énergie incidente du photon  $E = \hbar\omega$  ont été calculées et représentées les Fig. IV. 16 et Fig. IV17, respectivement.

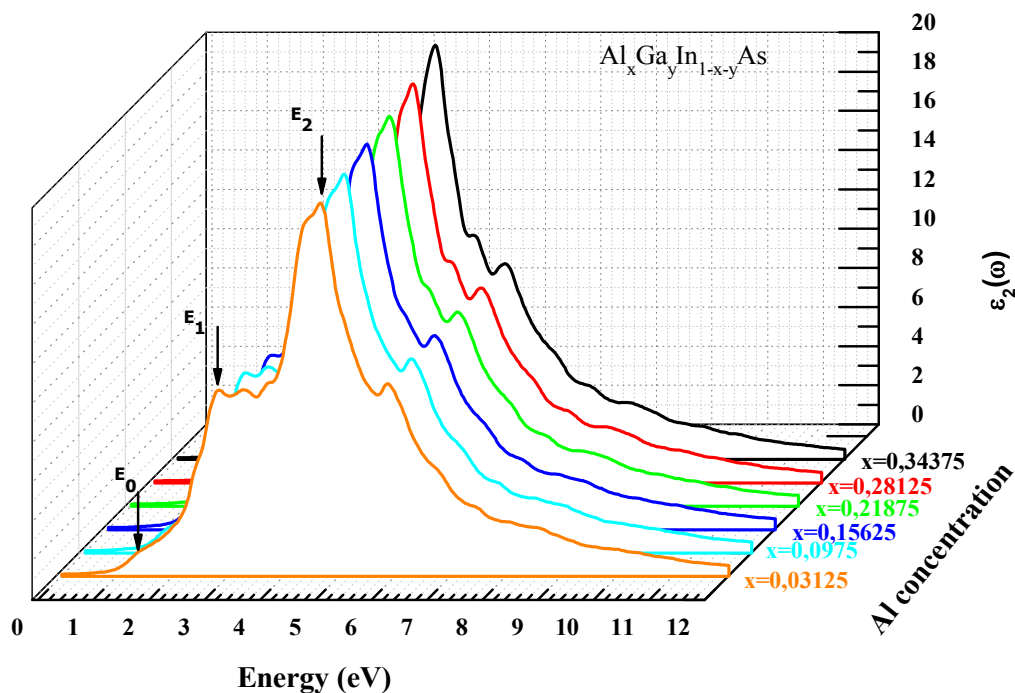
Tableau IV.4 représente les principaux pics dans la partie imaginaire de la fonction  $\varepsilon_2(\omega)$ , les constantes diélectriques statiques  $\varepsilon_1(0)$  et leurs valeurs expérimentales correspondantes. Suite aux spectres optiques représentés dans la Fig. IV.16, nous constatons que les pics dans la partie réelle se déplacent vers les faibles énergies avec l'augmentation de la concentration en aluminium ( $x$ ). Les constantes diélectriques statiques  $\varepsilon_1(0)$  calculées par l'approximation (TB-mBJ) en fonction de la concentration  $x$  sont représentées dans le tableau IV.4 et montrées dans la Fig. IV. 17. Nous remarquons que la constante  $\varepsilon_1(0)$  diminue en fonction l'augmentation de la concentration ( $x$ ), ce qui correspond à l'augmentation de la valeur du gap, démontrant  $\varepsilon_1(0)$  est inversement proportionnel à la valeur du gap. Cette courbe est ajustée à l'aide d'une fonction polynomiale de deuxième ordre. Cet ajustement nous a permet obtenir la relation suivantes la constante  $\varepsilon_1(0)$ :

$$\varepsilon_1(0) = 9.998649 - 3.0349x + 0.42895x^2 \quad (\text{IV-15})$$

La relation (15) peut être utile pour déterminer la constante  $\varepsilon_1(0)$  de la structure  $\text{Al}_x\text{Ga}_y\text{In}_{1-x-y}\text{As}/\text{InP}$  pour différentes concentrations ( $0.03125 \leq x \leq 0.40625$ ). Ajoutant que la variation la constante est presque linéaire. Le paramètre de courbure est trouvé égal à 0.42895. Dans cas du binaire InP, notre calcul via l'approximation (TB-mBJ) prévoit pour cette constante  $\varepsilon_1(0)$  une valeur de 8.318 où elle est en bon accord avec le résultat expérimental (9.6) citée la Réf. [33] et les valeurs théoriques, 7.92 obtenu par la méthode OLCAO citée dans la Réf. [34], et 10.03 calculée par l'emploi de la méthode (FP-LAPW+lo) [35].



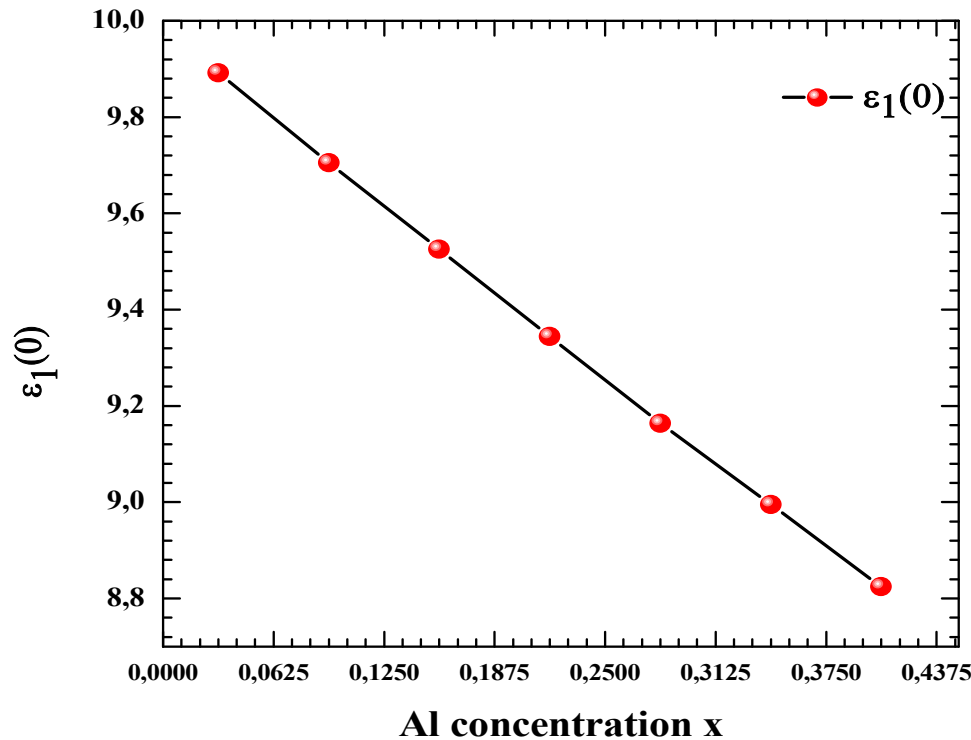
**Fig. IV. 16.** La partie réelle de la fonction diélectrique  $\varepsilon_1(\omega)$  du quaternaire  $\text{Al}_x\text{Ga}_y\text{In}_{1-x-y}\text{As}$  calculée par approximation (TB-mBJ).



**Fig. IV.17.** La partie imaginaire de la fonction diélectrique  $\epsilon_2(\omega)$  du quaternaire  $\text{Al}_x\text{Ga}_y\text{In}_{1-x-y}\text{As}$  calculée par approximation (TB-mBJ).

Tableau IV 4. Principaux pics dans la partie imaginaire  $\epsilon_2(\omega)$ , constante diélectrique statique  $\epsilon_1(0)$  et leurs valeurs théoriques et expérimentales correspondantes.

Composé	Présent travail				Autres travaux				
	TB-mBJ				Theo.		Exp.		
	$E_0$	$E_1$	$E_2$	$\epsilon_1(0)$	$E_1$	$E_2$	$E_1$	$E_2$	
$\text{Al}_x\text{Ga}_y\text{In}_{1-x-y}\text{As}$ $x$									
	0.03125	0.985	2.510	4.645	9.8917	-	-	-	-
	0.09375	1.074	2.671	4.648	9.70496	-	-	-	-
	0.15625	1.155	2.680	4.658	9.52525	-	-	-	-
	0.21875	1.227	2.681	4.661	9.34371	-	-	-	-
	0.28125	1.336	2.705	4.666	9.16342	-	-	-	-
	0.34375	1.395	2.713	4.667	8.99515	-	-	-	-
	0.40625	1.507	3.443	4.668	8.82462	-	-	-	-
InP									
		1.570	3.284	4.760	8.318	3.06 [35]	4.69 [35]	3.20 [33]	4.70 [33]
						2.40 [36]	4.10 [36]		



**Fig. IV. 18.** Variation de la constante diélectrique statique  $\epsilon_1(0)$  en fonction  $(x)\text{Al}_x\text{Ga}_y\text{In}_{1-x-y}\text{As}$  calculée par l'approximation (TB-mBJ).

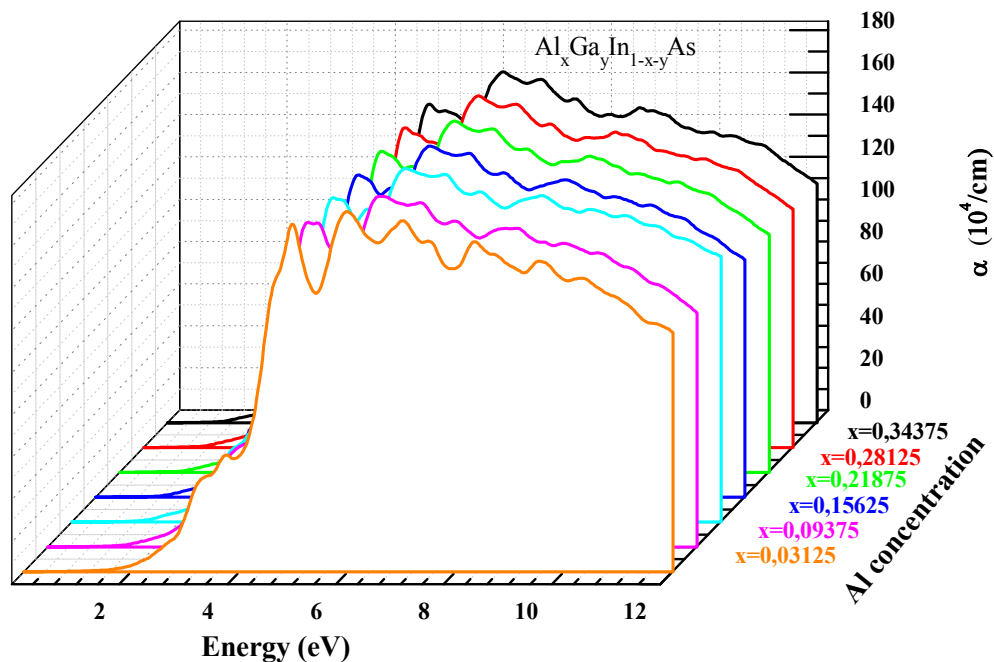
La Fig. IV.17 représente la variation de la partie imaginaire de la fonction diélectrique  $\epsilon_2(\omega)$  du quaternaire  $\text{Al}_x\text{Ga}_y\text{In}_{1-x-y}\text{As}$  calculée par approximation (TB-mBJ) en fonction de l'énergie du photon à différentes concentrations (x). Aussi, Les valeurs (pics) maximum des parties imaginaires de la fonction diélectrique basées sur l'énergie de photon sont montrées dans Fig. IV. 17 et sont présentées dans le tableau IV.4. Nous notons que ces valeurs maximum correspondent au passage électronique de la bande de valence à la bande de la conduction (transitions optiques), que nous les appellerons  $E_0$ ,  $E_1$  et  $E_2$ .

Le point critique (indiqué par  $E_0$ ), est connu sous le nom de seuil d'absorption fondamentale, donne le seuil de la transition directe optique entre le plus haut de la bande de valence (HVB) et le plus bas de la bande de conduction (LCB) au point  $\Gamma$ . Habituellement, cette valeur d'énergie correspond à la valeur du gap. Notre analyse des spectres du  $\epsilon_2(\omega)$  montre l'évolution du seuil d'absorption fondamentale augmente avec l'augmentation de la concentration en aluminium (x), ce qui est en accord avec l'augmentation du gap. Concernant les premiers principaux pics (indiqué par  $E_1$ ), Nous constatons que ces pics diminuent en

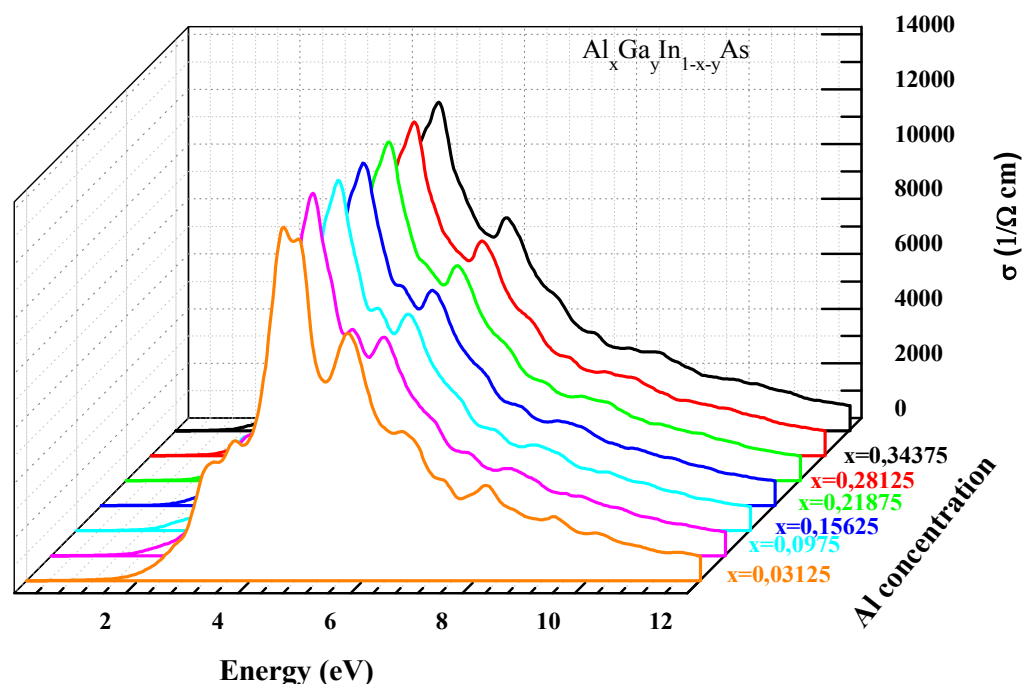
fonction de l'augmentation la concentration en aluminium. Il est aussi intéressant de noter que le maximum de ces derniers se déplace vers les faibles énergies lorsque la concentration Al(x) augmente. Par contre, dans le cas des deuxièmes pics, nous constatons que ces pics diminuent et se déplacent vers les faibles énergies avec l'augmentation la concentration d'aluminium. Nous notons également que la même allure des spectres de la partie imaginaire de la fonction du quaternaire  $\text{Al}_x\text{Ga}_y\text{In}_{1-x-y}\text{As}$  en fonction de la concentration en aluminium a été observée avec une légère différence dans le détail. Pour le binaire InP, nos calculs des positions des pics ( $E_1$  and  $E_2$ ) sont en excellent accord avec les données expérimentales (3.20 et 4.70 eV) citées dans Ref. [33] et les données (3.06 et 4.69 eV) calculées par la méthode (FP-LAPW+lo) [35], et les valeurs (2.40 et 4.10 eV) obtenues par la méthode FPLMTO[36].

#### IV. 3. 4. 2. Coefficient d'absorption et la conductivité optique

Les Figs.IV.19 et IV.20, montrent la variation du coefficient d'absorption et de la conductivité optique du quaternaire  $\text{Al}_x\text{Ga}_y\text{In}_{1-x-y}\text{As}$  pour différentes concentrations x en fonction de l'énergie des photons, respectivement.



**Fig. IV.19.** La variation du coefficient d'absorption  $\alpha(\omega)$  du  $\text{Al}_x\text{Ga}_y\text{In}_{1-x-y}\text{As}$  calculée par l'approximation (TB-mBJ).



**Fig.IV.20.** La variation de la conductivité optique  $\sigma(\omega)$  de l' $\text{Al}_x\text{Ga}_y\text{In}_{1-x-y}\text{As}$  calculée par l'approximation (TB-mBJ).

### IV. 3. 4. 3. Indice de réfraction et le coefficient d'extinction

L'indice de réfraction  $n(\omega)$  et le coefficient d'extinction  $k(\omega)$  ont été calculées par l'utilisation du paramètre de maille optimisée  $a^{(\text{GGA-WC})}$  et par l'approximation (TB-mBJ). Dans les Figs.IV.21 et 22, nous présentons l'évolution  $n(\omega)$  et  $k(\omega)$ , dans la gamme d'énergie [0-12] eV, pour du quaternaire  $\text{Al}_x\text{Ga}_y\text{In}_{1-x-y}\text{As}$  en fonction de la concentration en aluminium  $x$  ( $0.03125 \leq x \leq 0.40625$  pas de 0.0625 et la concentration indium fixée à 0.53125). L'analyse des spectres de la Fig. IV.21 montre que la variation des points critiques dans  $n(\omega)$  est accompagnée par une variation de gap. On peut toutefois noter que la forme générale des courbes pour  $\text{Al}_x\text{Ga}_y\text{In}_{1-x-y}\text{As}$  est assez similaire. Ceci, est dû à la même allure de leurs structures de bande. Pour le cas du coefficient de d'extinction nous remarquons que les maximums locaux des spectres de  $k(\omega)$  correspondent au constante diélectrique statique  $\epsilon_1(0)$ .

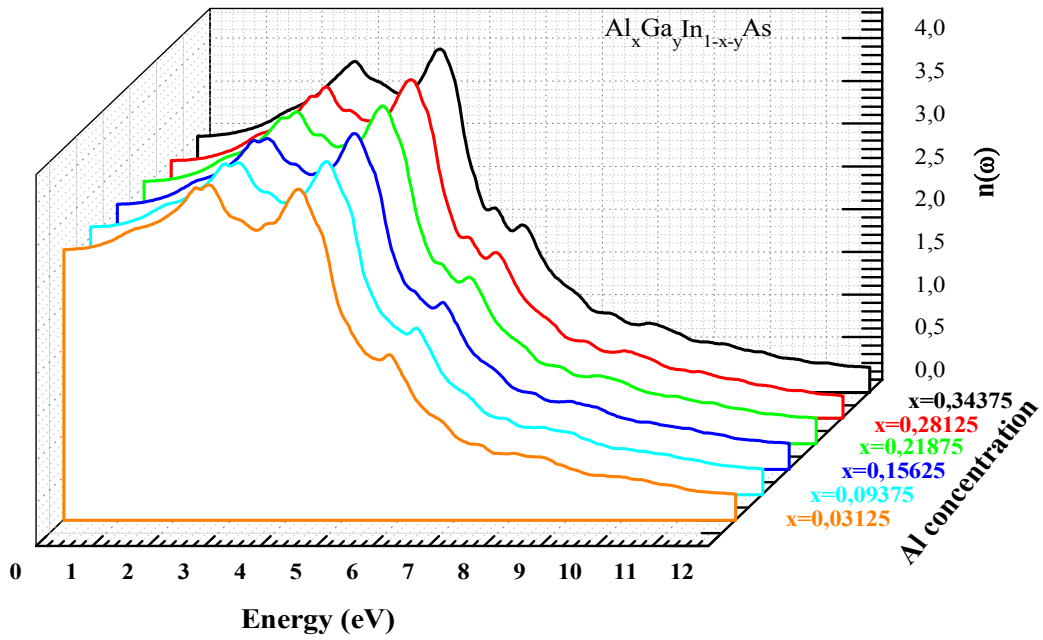


Fig. IV. 21. Evolution du spectre de l'indice de réfraction  $n(\omega)$  pour for  $Al_xGa_yIn_{1-x-y}As/InP$

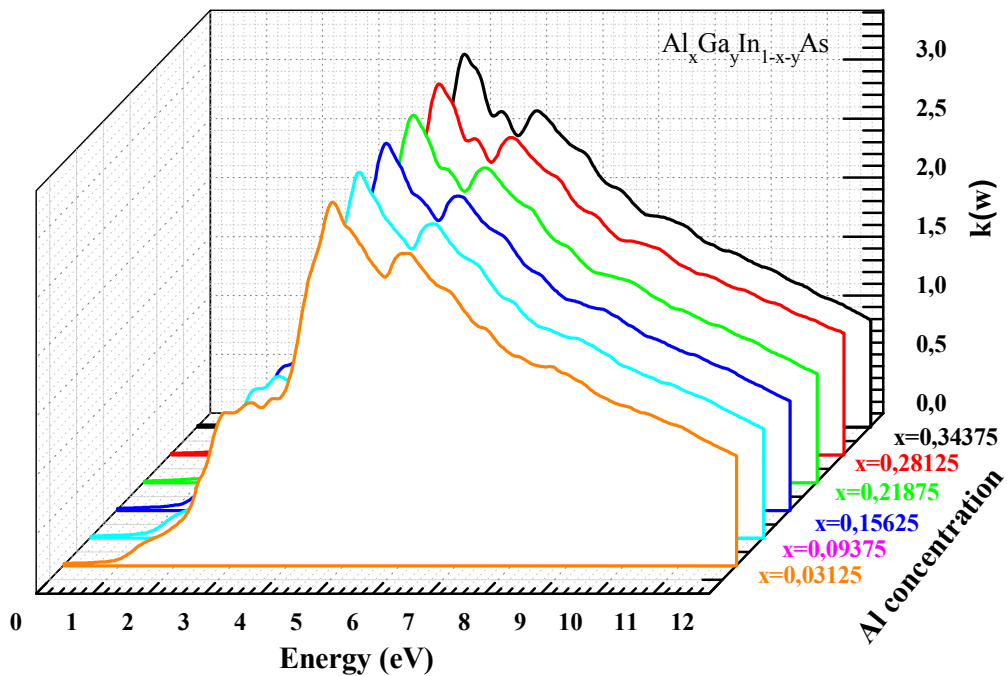


Fig. IV.22. Evolution du spectre du coefficient d'extinction  $k(\omega)$  pour  $Al_xGa_yIn_{1-x-y}As/InP$ .

Dans le tableau IV. 5, nous représentons les résultats l'indice de réfraction calculé par l'approximation (TB-mBJ) et les deux modèles (modèle de Hervé et Vandamme et le modèle Moss). Ces résultats sont ajustés à l'aide d'une fonction polynomiale deuxième ordre. Cet ajustement nous a permis d'obtenir les expressions suivantes de l'indice de réfraction :

$$n_{Al_xGa_yIn_zAs}^{TB-mBJ}(x) = 3.160 - 0.482x + 0.036 x^2 \quad (IV-16)$$

$$n_{Al_xGa_yIn_zAs}^{Hervé\ et\ Vandamme\ relation}(x) = 3.283 - 0.870x + 0.121 x^2 \quad (IV-17)$$

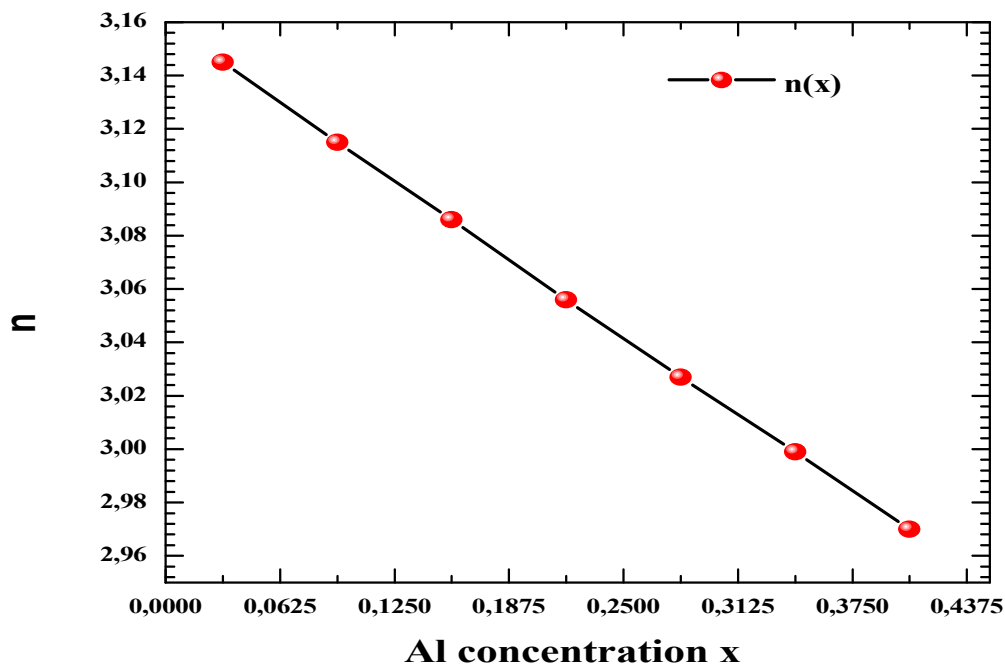
$$n_{Al_xGa_yIn_{1-x-y}As}^{Moss\ relation}(x) = 3.264 - 1.052. x + 0.460 x^2 \quad (IV-18)$$

Les résultats calculés par l'approximation (TB-mBJ) de l'indice de réfraction sont présentés dans la Fig. IV.23. Nous remarquons que l'indice de réfraction du quaternaire  $Al_xGa_yIn_{1-x-y}As/InP$  varie linéairement avec la concentration en aluminium, avec un paramètre de courbures égales 0.036, 0.121 et 0.460 suivant l'approximation (TB-mBJ) , la relation(13) [31] et la relation (14) [32] , respectivement.

Pour le binaire InP, les valeurs de l'indice de réfraction calculées sont en très bon accord avec les résultats théoriques cités dans les Refs. [33, 36, 35] et les données expérimentales citées en Ref.[37]. Nous voyons clairement que les résultats de l'indice de réfraction des quaternaire obtenue par approximations (TB-mBJ) sont en bon accord avec celle déterminés par l'introduction des deux relations (Herve et Vandamme, et Moss).

Table IV.5. Indice de réfraction du binaire InP et du quaternaire  $\text{Al}_x\text{Ga}_y\text{In}_{1-x-y}\text{As}$  pour différentes compositions  $x$ .

Composé	Indice de réfraction					
	Present travail			Autres travaux		
	TB-mBJ	Hervé and Vandamme	Moss relation	Théorétiques	Expérimentaux	
$\text{Al}_x\text{Ga}_y\text{In}_{1-x-y}\text{As}$	$x$					
	0.03125	3.145 <sup>a</sup>	3.171 <sup>b</sup>	3.258	3.235	-
	0.09375	3.115 <sup>a</sup>	3.129 <sup>b</sup>	3.200	3.166	-
	0.15625	3.086 <sup>a</sup>	3.112 <sup>b</sup>	3.148	3.109	-
	0.21875	3.056 <sup>a</sup>	3.083 <sup>b</sup>	3.104	3.062	-
	0.28125	3.027 <sup>a</sup>	3.058 <sup>b</sup>	3.040	2.998	-
	0.34375	2.999 <sup>a</sup>	3.028 <sup>b</sup>	3.007	2.966	-
	0.40625	2.970 <sup>a</sup>	2.946	2.946	2.909	-
InP	InP	2.884	2.914	2.881	3.09 [33], 2.81 [36], 3.20 [35]	3.3 [37]

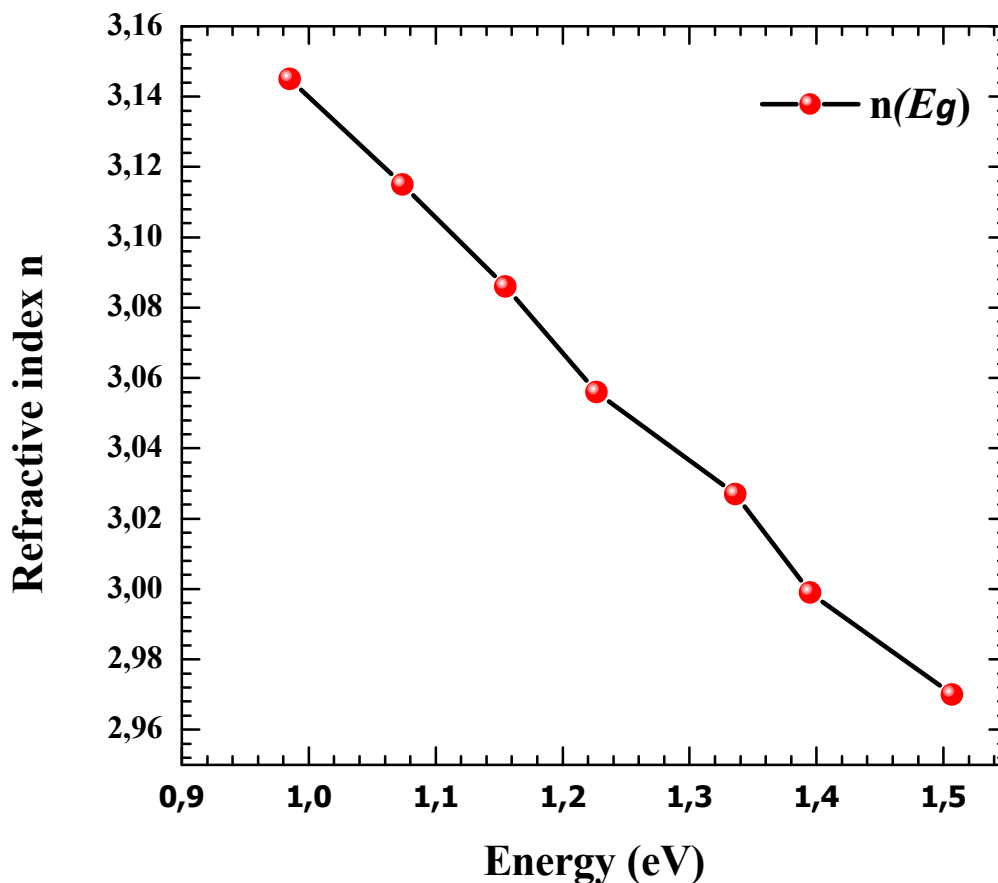
<sup>a</sup> quaternaire non relaxé<sup>b</sup> quaternaire relaxé.Fig. IV. 23. Variation de l'indice de réfraction  $n(x)$  du quaternaire  $\text{Al}_x\text{Ga}_y\text{In}_{1-x-y}\text{As}$  pour différentes concentrations  $x$ .

La Fig. IV. 24 représente la variation de l'indice de réfraction  $n(E_g)$  du quaternaire  $\text{Al}_x\text{Ga}_y\text{In}_{1-x-y}\text{As}$  en fonction de la valeur du gap  $E_g$ . Nous constatons que l'indice de réfraction diminue

avec l'augmentation de la valeur du gap ( $E_g$ ). On peut raisonnablement conclure que le système quaternaire ( $\text{Al}_x\text{Ga}_y\text{In}_{1-x-y}\text{As}$ ), prouve que le matériel de faible valeur du gap a une grande valeur de l'indice de réfraction. il est intéressant de noter ce comportement est généralement fréquent pour la majorité des matériaux [22, 38] l'interpolation polynomiale de la courbe présenté dans la Fig. IV.18 nous permet d'obtenir l'équation suivante :

$$n_{\text{Al}_x\text{Ga}_y\text{In}_z\text{As}}^{\text{TB-mBJ}}(E_g) = 3.584 - 0.513.E_g + 0.069 E_g^2 \quad (\text{IV-19})$$

Suite à l'Eq. (19), nous avons obtenu un faible paramètre de courbure égal à  $0.069 \pm 0.0547$  ( $\text{eV}$ )<sup>-2</sup>. Cette équation peut être utile pour l'obtention de la valeur  $n(E_g)$  du quaternaire  $\text{Al}_x\text{Ga}_y\text{In}_{1-x-y}\text{As}$  avec respect à la condition d'adaptation.



**Fig. IV.24.** Variation de l'indice de réfraction  $n(E_g)$  du  $\text{Al}_x\text{Ga}_y\text{In}_{1-x-y}\text{As}$  en fonction de la valeur du gap.

## IV.4.Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons présenté une étude théorique des propriétés structurales, électroniques et optiques du quaternaire  $Al_xGa_yIn_{1-x-y}As$  en fonction de concentration d'aluminium. Cette étude est effectuée à l'appui de méthode des ondes planes augmentées et linéarisées (FP-LAPW) implémentée par le code Wien2k dans le cadre de la théorie de la fonctionnelle de la densité.

Afin d'accomplir notre étude, nous étions obligés de passer par l'étape d'optimisation des paramètres structuraux du quaternaire  $Al_xGa_yIn_{1-x-y}As$  et les composés parents. Les résultats d'optimisation obtenus pour les composés binaires sont en très bon accord avec les données théoriques et les résultats expérimentaux. Nous avons également déterminé la condition d'adaptation du quaternaire  $Al_xGa_yIn_{1-x-y}As$  sur substrats InP. Nous avons constaté que les résultats du paramètre structuraux (a, B) sont presque identiques et sont en excellent accord la valeur mesuré du binaire InP ce qu'implique que la condition d'adaptation est vérifiée et le choix des paramètres et les concentrations x est validé. D'autre part, ces résultats montrent que le paramètre de maille du système  $Al_xGa_yIn_{1-x-y}As/InP$  peut être contrôlé par l'ajustement de la concentration d'indium (1-x-y).

Ensuite, nous avons étudié les structures de bande électronique du quaternaire  $Al_xGa_yIn_{1-x-y}As$  avec et sans relation par l'utilisation des trois approximations suivantes (GGA- PBESol), (GGA-EV) et (TB-mBJ). Les résultats déterminés par l'utilisation de la nouvelle approximation proposée récemment par Tran et Blaha (TB-mBJ) sont en très bons avec les données expérimentales comparés aux celle déterminées par les deux approximations. Cette étude montre aussi que ce quaternaire possède un gap direct pour tous les concentrations sélectionnées. De plus, la variation du gap entre 0.989 et 1.507eV (1.25et 0.822um) favorise ce quaternaire à la réalisation des dispositifs optoélectroniques. Aussi, ces résultats montrent que la valeur du gap valeur peut être contrôlée par l'ajustement de la concentration en aluminium (x) tout en gardant la condition d'adaptation. Nous avons calculé et discuté les densités d'états totales et partielles du système  $Al_xGa_yIn_{1-x-y}As/InP$ .

Les propriétés optiques telles que les deux parties réelle et imaginaire de fonction diélectrique, coefficient d'absorption, la conductivité optique, indice de réfraction et coefficient d'extinction ont été présentés et discutés en détails.

## Références du chapitre IV

- [1] N. Dupuis, in, Université de Metz, 2008.
- [2] A.W. Fang, H. Park, O. Cohen, R. Jones, M.J. Paniccia, J.E. Bowers, *Optics express*, 14 (2006) 9203-9210.
- [3] A.W. Fang, R. Jones, H. Park, O. Cohen, O. Raday, M.J. Paniccia, J.E. Bowers, *Optics express*, 15 (2007) 2315-2322.
- [4] H.-H. Chang, A.W. Fang, M.N. Sysak, H. Park, R. Jones, O. Cohen, O. Raday, M.J. Paniccia, J.E. Bowers, *Optics express*, 15 (2007) 11466-11471.
- [5] C. Monat, C. Seassal, X. Letartre, P. Viktorovitch, P. Regreny, M. Gendry, P. Rojo-Romeo, G. Hollinger, E. Jalaguier, S. Pocas, *Electronics Letters*, 37 (2001) 1.
- [6] T. Dupont, in, Ecole Centrale de Lyon, 2011.
- [7] A.W. Fang, B.R. Koch, K.-G. Gan, H. Park, R. Jones, O. Cohen, M.J. Paniccia, D.J. Blumenthal, J.E. Bowers, *Optics express*, 16 (2008) 1393-1398.
- [8] S. Adachi, *Properties of semiconductor alloys: group-IV, III-V and II-VI semiconductors*, John Wiley & Sons, 2009.
- [9] R. Wyckoff, in, Malabar, 1986.
- [10] H. Mathieu, H. Fanet, *Physique des semiconducteurs et des composants électroniques-6ème édition: Cours et exercices corrigés*, Dunod, 2009.
- [11] S.R. Selmic, T.-M. Chou, J. Sih, J.B. Kirk, A. Mantle, J.K. Butler, D. Bour, G.A. Evans, *Selected Topics in Quantum Electronics*, *IEEE Journal of*, 7 (2001) 340-349.
- [12] M.L. Cohen, *Physical Review B*, 32 (1985) 7988.
- [13] M. Ameri, D. Rached, M. Rabah, R. Khenata, N. Benkhetto, B. Bouhafis, M. Maachou, *Materials science in semiconductor processing*, 10 (2007) 6-13.
- [14] K. Teo, Y. Feng, M. Li, T. Chong, J. Xia, *Semiconductor science and technology*, 9 (1994) 349.
- [15] J.P. Perdew, A. Ruzsinszky, G.I. Csonka, O.A. Vydrov, G.E. Scuseria, L.A. Constantin, X. Zhou, K. Burke, *Physical Review Letters*, 100 (2008) 136406.
- [16] E. Engel, S.H. Vosko, *Physical Review B*, 47 (1993) 13164.
- [17] T. Kim, S. Hwang, J. Byun, D.E. Aspnes, E. Lee, J. Song, C.-T. Liang, Y.-C. Chang, H. Park, J. Choi, *Current Applied Physics*, 14 (2014) 1273-1276.
- [18] M. Sacilotti, F. Motisuke, Y. Monteil, P. Abraham, F. Iikawa, C. Montes, M. Furtado, L. Horiuchi, R. Landers, J. Morais, *Journal of crystal growth*, 124 (1992) 589-595.
- [19] M. Antonell, C. Abernathy, in: *MRS Proceedings*, Cambridge Univ Press, 1995, pp. 511.
- [20] W. Kohn, L.J. Sham, *Physical review*, 140 (1965) A1133.
- [21] M. Linnik, A. Christou, *Physica B: Condensed Matter*, 318 (2002) 140-161.
- [22] S. Adachi, *Journal of applied physics*, 61 (1987) 4869-4876.
- [23] S. Wang, H. Ye, *Physical Review B*, 66 (2002) 235111.
- [24] Y. Yan, Q. Wang, W. Shu, Z. Jia, X. Ren, X. Zhang, Y. Huang, *Physica B: Condensed Matter*, 407 (2012) 4570-4573.
- [25] R. Abt, C. Ambrosch-Draxl, P. Knoll, *Physica B: Condensed Matter*, 194 (1994) 1451-1452.
- [26] C. Ambrosch-Draxl, J.O. Sofo, *Computer Physics Communications*, 175 (2006) 1-14.
- [27] T. Ouahrani, A.H. Reshak, R. Khenata, B. Amrani, M. Mebrouki, A. Otero-de-la-Roza, V. Luana, *Journal of Solid State Chemistry*, 183 (2010) 46-51.
- [28] R. Reddy, S. Anjaneyulu, C. Sarma, *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, 54 (1993) 635-637.
- [29] Z.-Y. Jiao, S.-H. Ma, Y.-L. Guo, *Computational and theoretical chemistry*, 970 (2011) 79-84.
- [30] N. Korozlu, K. Colakoglu, E. Deligoz, *Journal of Physics: Condensed Matter*, 21 (2009) 175406.
- [31] P. Herve, L. Vandamme, *Infrared physics & technology*, 35 (1994) 609-615.
- [32] V. Gupta, N. Ravindra, *Physica status solidi (b)*, 100 (1980) 715-719.
- [33] D. Aspnes, A. Studna, *Physical Review B*, 27 (1983) 985.
- [34] M.-Z. Huang, W. Ching, *Physical Review B*, 47 (1993) 9449.

- [35] Z. Feng, H. Hu, S. Cui, W. Wang, *Physica B: Condensed Matter*, 404 (2009) 2103-2106.
- [36] R. Ahuja, S. Auluck, O. Eriksson, J. Wills, B. Johansson, *Solid state communications*, 104 (1997) 249-252.
- [37] B.G. Yalcin, S. Bagci, M. Ustundag, M. Aslan, *Computational Materials Science*, 98 (2015) 136-141.
- [38] N. Bouarissa, *Materials chemistry and physics*, 72 (2001) 387-394.

# CHAPITRE 5

## Optimisation des paramètres physiques de la structure AlGaInAs/InP

## Chapitre V. Optimisation des paramètres physiques de la structure AlGaInAs/InP à puits quantique

### V.1. Introduction

Les lasers, à base de semi-conducteur, ont aujourd'hui une importance monstrueuse dans notre civilisation, et en particulier dans les télécommunications par fibre optique (internet, téléphone, télévision...), stockage de l'information dans les disques optiques (CD, DVD ou BRD pour la musique comme pour l'informatique), photocopie ou impression laser, applications médicales et industrielles [1]. Ces diodes sont les plus utilisés ; en nombre, ils représentent un nombre important de l'ensemble des lasers commercialisés.

Par rapport aux diodes électroluminescentes (LEDs), les diodes laser possèdent des miroirs de fin de cavité, obtenus par clivage du matériau, qui imposent au rayonnement une émission modale géométrique et spectrale. La structure transverse de la diode (homo ou hétérojonction, guidage par le gain ou l'indice), imposent le mode géométrique (monomode ou multi mode), et donc la qualité spatiale du champ émis (limité par la diffraction ou non). La structure des miroirs de cavité définit la qualité spectrale du laser. Les cavités simplement clivées (Fabry-Pérot) émettent un peigne de longueurs d'onde limité par la courbe de gain du matériau. La largeur de chacun des pics est faible (typiquement 0,1 nm à 800 nm) mais l'enveloppe atteint 2 nm. Les cavités DFB possèdent un réseau réparti sur la longueur de la zone active qui détermine la longueur d'onde émise de façon précise. Les diodes DBR possèdent un réseau en dehors de la zone active, moins sensible aux variations de courant et de température et pouvant être commandé électriquement pour un accord en longueur d'onde. Les lasers DFB et DBR possèdent une largeur spectrale de l'ordre du MHz au mieux.

La gamme spectrale des diodes lasers (DL) est large (0,45  $\mu\text{m}$  à 0,5  $\mu\text{m}$  et plus encore avec les nouvelles DL). En émetteur de télécommunications optiques sur fibre, les plus couramment utilisées sont les diodes émettant autour de 800 nm pour les réseaux multi modes, et celles émettant autour de 1300 et 1550 nm pour les liaisons monomodes. Les fibres monomodes imposent des lasers monomodes spatiaux, le rapprochement des canaux WDM (Wavelength Division Multiplexing) sur une même fibre impose des émetteurs spectralement fins. La forte demande récente en réseaux monomodes haut débit a donc permis le fort

développement de lasers de grande qualité autour de 1550 nm. A titre d'exemple, dans une fenêtre de longueur d'onde de 30 nm entre 1.53  $\mu\text{m}$  et 1.56  $\mu\text{m}$  correspondant au minimum d'absorption des fibres optiques monomodes actuelles dans l'infrarouge (0.2 dB/km à 1.55  $\mu\text{m}$ ). Cette bande passante colossale représente la possibilité de véhiculer environ 5 millions de connections Internet rapide [2].

Récemment, l'amélioration des fibres en matériaux organiques a suscité le développement des diodes rouges ou vertes pour profiter du minimum d'absorption dans cette gamme spectrale [3]. Sans prétendre être exhaustif.

Pour atteindre notre objectif, ce chapitre est consacré à l'optimisation des paramètres physiques intrinsèques et extrinsèques d'une structure à seul puits quantiques et à multi puits quantiques à base de la structure AlGaInAs/InP.

Pour optimiser les paramètres fonctionnels de la structure; nous avons exploité les résultats obtenus dans les deux précédents chapitres. À cet effet, nous avons utilisé la méthode graphique basée sur le logiciel Mathcad.

Cependant, l'optimisation consiste donc à choisir les valeurs optimales en tenant compte de la faisabilité du dispositif en question(en tenant en compte les contraintes comme le dopage et l'indice de réfraction qui affectent le gain). Afin, de concevoir une structure (AlGaInAs/InP) opérant dans l'intervalle de longueur d'onde (1300-1550) nm et de puissance max monomode 100 mW et ceci à travers l'optimisation de leurs paramètres physiques.

## V.2. Optimisation des paramètres physiques de la structure à puits quantique

Les puits quantiques sont des empilements de couches cristallines alternées, par des couches de matériaux différents, pouvant être aussi minces que quelques monocouches atomiques, de semi-conducteurs de compositions chimiques différentes. Ces structures à (MQW) sont artificiellement obtenues par croissance alternée de fines couches de matériaux. Cependant, la fabrication de ces structures se fait à l'aide de technique d'épitanie par jet moléculaire (Molecular Beam Epitaxy MBE) [4, 5]. Dans les semi-conducteurs, un puits quantique peut s'obtenir par l'empilement successif de couches planes de différents matériaux, par exemple un matériau de petit gap entouré de chaque côté par un matériau qui plus est grand gap. Dans ce cas, les électrons voient un puits de potentiel carré avec une barrière de hauteur finie [4].

Cette section est dédiée à l'optimisation des paramètres physiques intrinsèques et extrinsèques d'une structure à seul puits quantiques suivi d'une structure à multi puits quantiques à base de la structure  $(Al_xGa_yIn_{1-x-y}As / InP)$ . Cette structure est composée par un réseau caractérisé par la largeur, noté (lz), de la couche du quaternaire  $(Al_xGa_yIn_{1-x-y}As)$  de faible énergie. La largeur du binaire InP sera noté (lb). Le quaternaire  $(Al_xGa_yIn_{1-x-y}As)$  et binaire InP compose respectivement le puits et la barrière. L'exploitation des propriétés optiques des puits quantiques a été initiée par D.S.Chemla et al. [6].

## V.3. Longueur d'onde

### V.3. 1. Longueur d'onde en fonction de la largeur de puits

Il est intéressant de rappeler, la condition d'adaptation de la structure  $Al_xGa_yIn_{1-x-y}As / InP$  a été étudié en détail dans le chapitre précédent.

On calculera la longueur d'onde émise par la diode où on utilisera le quaternaire  $Al_xGa_yIn_{1-x-y}As$  comme une couche active (puits), pour différentes concentrations x ( $(0.03125 \leq x \leq 0.40625)$ ) et  $1-x-y=0.53125$ , et le binaire InP comme une barrière.

On obtient un laser à puits quantique lorsque la région active a une dimension inférieure à 20 nm (la largeur de puits) [7], la raie d'émission du laser est donnée par la relation suivante :

$$\hbar\omega = E_g + E_{e1} + E_{hh1} \text{ (V-1)}$$

Suite à l'équation V.1, il est donc possible de maîtriser dans une certaine gamme de la longueur d'onde d'émission du laser en modulant la largeur du puits.

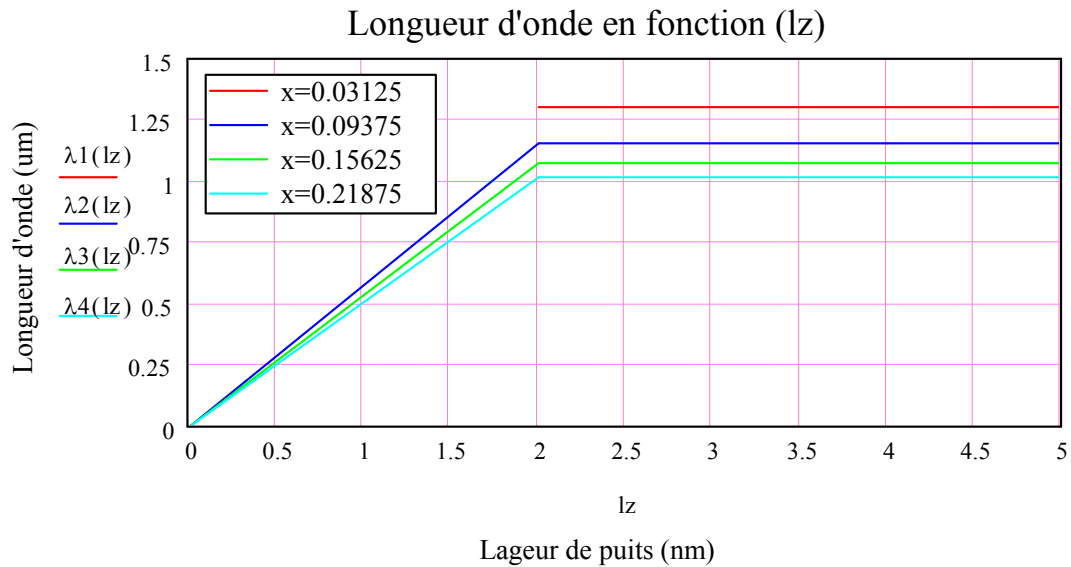
Nous avons l'équation suivante qui donne la longueur d'onde en fonction de la largeur de puits quantique ( $L_z$ ) [8] :

$$\lambda_n = \frac{1,24}{E_g + E_{cn} + E_{vn}} \text{ (V-1)}$$

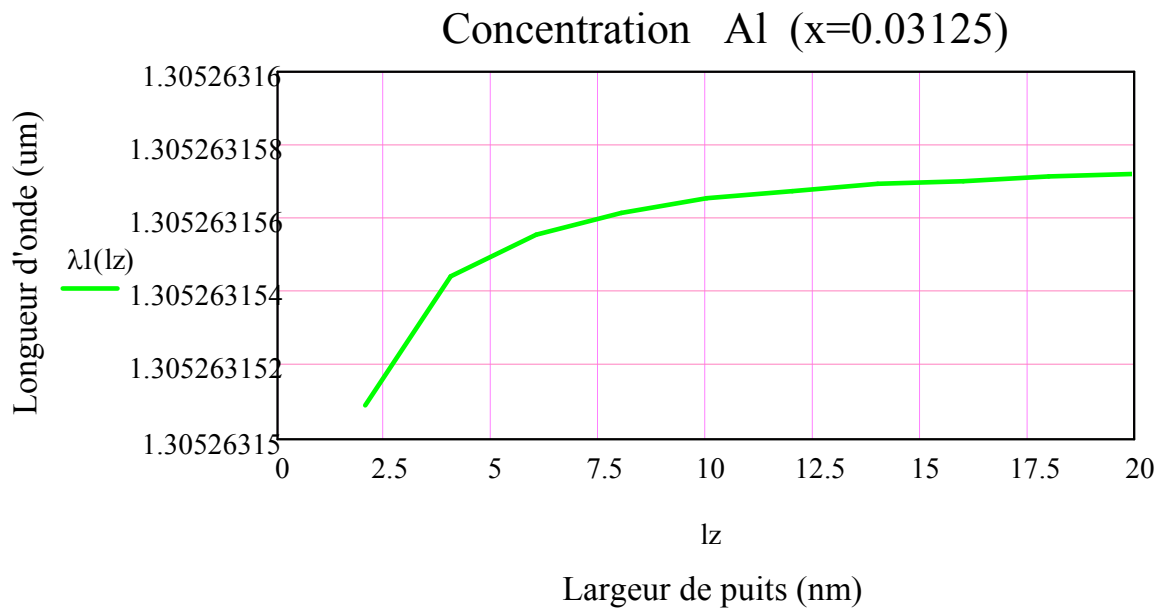
Avec  $E_{cn} = (n + 1) \frac{\pi\hbar}{\sqrt{2m_e^*L_z}}$  et  $E_{vn} = (n + 1) \frac{\pi\hbar}{\sqrt{2m_h^*L_z}}$ , ( $n = 1$ ) est la plus favorable pour

l'émission laser.

La Fig.V.1 montre la variation des longueurs d'onde en fonction de largeur du puits dans la structure  $\text{Al}_x\text{Ga}_y\text{In}_{1-x-y}\text{As} / \text{InP}$  pour différentes concentration ( $x$ ). Suite aux courbes présentées dans cette figure, nous constatons que les longueurs d'onde croient avec la largeur du puits pour les différentes concentrations  $x$ . Cette croissance est linéaire dans l'intervalle ( $0 < l_z \leq 2$ ) nm et par la suite elle devient constante. Il est intéressant de noter que pour les concentrations sélectionnées,  $x$  (0.03125-0.21875)%, la structure  $\text{Al}_x\text{Ga}_y\text{In}_{1-x-y}\text{As} / \text{InP}$  opère dans l'intervalle (1300-0.831). Donc on peut utiliser de manière satisfaisante la concentration en aluminium  $x = 0.03125$  pour une longueur d'onde égale à 1300 nm. D'autre part, pour cette concentration nous constatons que le gap de la couche active ( $E_g^{\text{AlGaInAs}} = 0.957$  eV) est très inférieur à celle de la barrière ( $E_g^{\text{InP}} = 1.750$  eV). Ce qui implique qu'on peut utiliser cette structure comme diode laser à puits. Pour plus de détail nous montrons l'évolution de cette structure en fonction de largeur de puits dans la Fig.V.2. Suite à cette évolution, nous pouvons utiliser une largeur de puits de 2 nm ou plus pour une longueur d'onde égale à 1300 nm. Ce type de longueur d'onde est favorable pour les liaisons monomodes dans le domaine de télécommunication.



**Fig.V. 1.** Variation de la longueur d’onde en fonction de largeur du puits dans la structure  $Al_xGa_yIn_{1-x-y}As/InP$  pour différentes concentration x.



**Fig.V. 2.** Variation de la longueur d’onde en fonction de largeur du puits (lz) dans la structure  $Al_xGa_yIn_{1-x-y}As/InP$  pour x=0.03125.

### V.3.2. Longueur d’onde en fonction de la température

Il est intéressant de noter que la température influe sur la largeur de bande interdite( $E_g$ ), elle a donc une influence sur la longueur d’onde. A fin, d’étudier l’influence de la température sur

la longueur d'onde de la structure  $\text{Al}_{0.03125}\text{Ga}_{0.4375}\text{In}_{0.53125}\text{As}/\text{InP}$ , nous utilisons le modèle de Y. P. Varshni [9]. La Fig. V.3 montre la variation de la longueur d'onde en fonction de la température. Cependant, nous observons que la longueur d'onde ( $\lambda$ ) augmente avec l'augmentation de la température. Ce qui est attendu puisque la longueur d'onde est inversement proportionnelle à la largeur de bande interdite ( $E_g$ ), Notons que la largeur de bande interdite diminue lorsqu'on augmente la température.

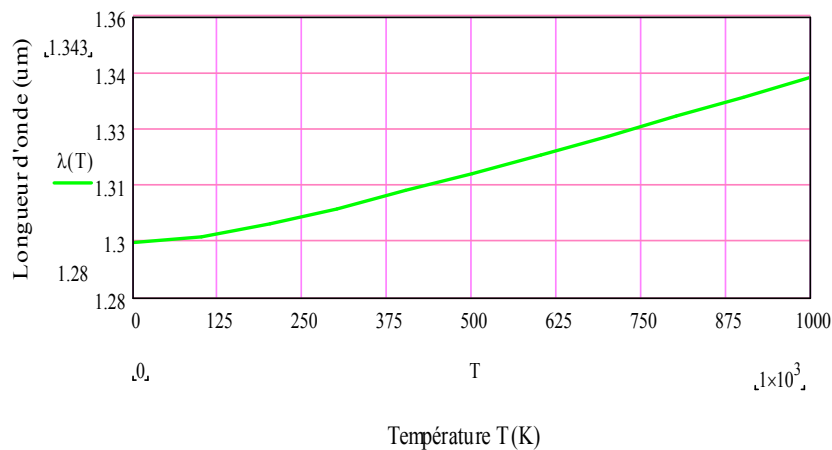


Fig. V.3. Variation de longueur d'onde en fonction de la température de la structure  $\text{Al}_x\text{Ga}_y\text{In}_{1-x-y}\text{As}/\text{InP}$

### V. 3. 3. Longueur d'onde en fonction de la pression

Dans ce cas, nous avons utilisé le modèle de MURNAGAN [10] pour étudier l'effet de la pression sur la longueur d'onde ( $\lambda$ ) de la structure  $\text{Al}_x\text{Ga}_y\text{In}_{1-x-y}\text{As}/\text{InP}$ . La Fig. V.4 montre la variation de la longueur d'onde en fonction de la pression. Suite à cette courbe, nous remarquons que la longueur d'onde diminue lorsque la pression augmente.

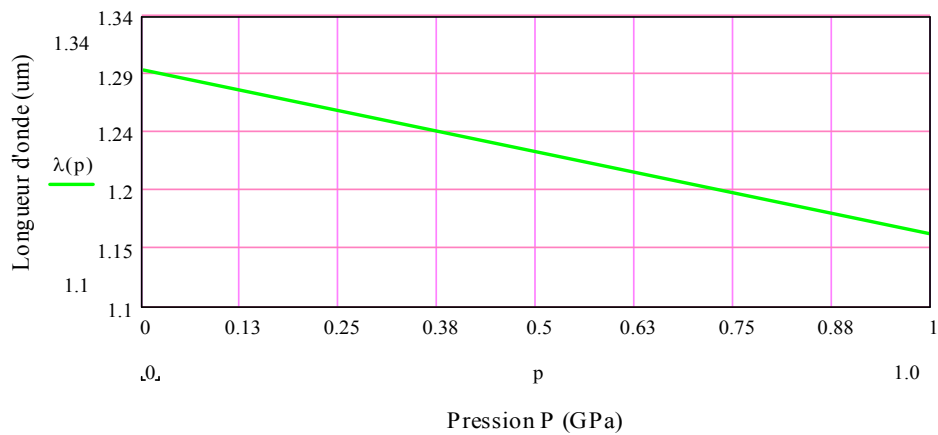


Fig. V-4 : variation de longueur d’onde en fonction de la pression de la structure Al<sub>x</sub>Ga<sub>y</sub>In<sub>1-x-y</sub>As /InP

## V. 4. Structure à unique puits quantique

### V. 4.1. Facteur de confinement Γ

L’optimisation du facteur de confinement serait donc la recherche d’une valeur élevée. L’intérêt évoqué est l’augmentation du gain modal, qui tout simplement le produit du gain optique par le facteur de confinement. Pour déterminer ce facteur nous avons utilisé l’équation suivante [11]:

$$\Gamma_{sw} = \frac{2\pi^2}{\lambda^2} (n_{int}^2 - n_{ext}^2) d^2 \quad (V-2)$$

La Fig.V.5 montre la structure d’une diode laser à unique puits quantique à base de Al<sub>x</sub>Ga<sub>y</sub>In<sub>1-x-y</sub>As /InP pour la concentration en Aluminium (x= 0.3125). Nous utilisons le quaternaire Al<sub>x</sub>Ga<sub>y</sub>In<sub>1-x-y</sub>As comme une couche active et le binaire InP comme une barrière.

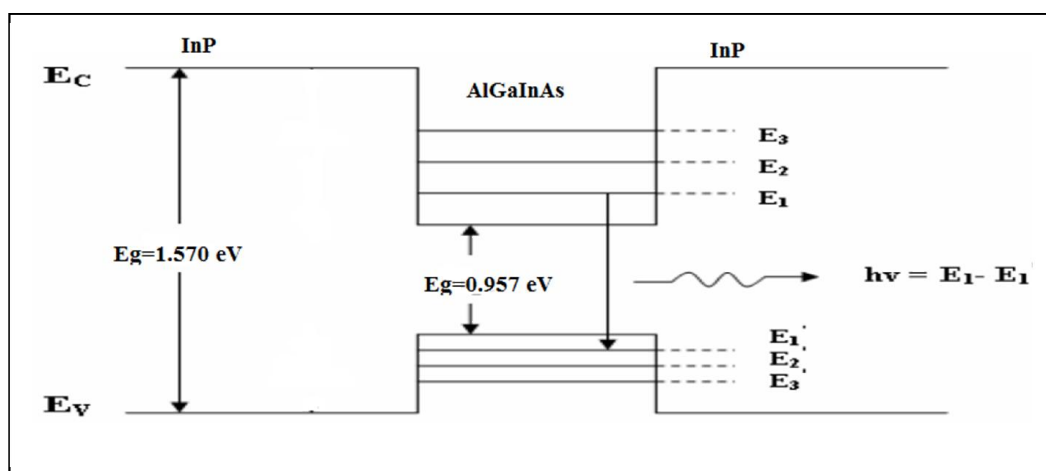
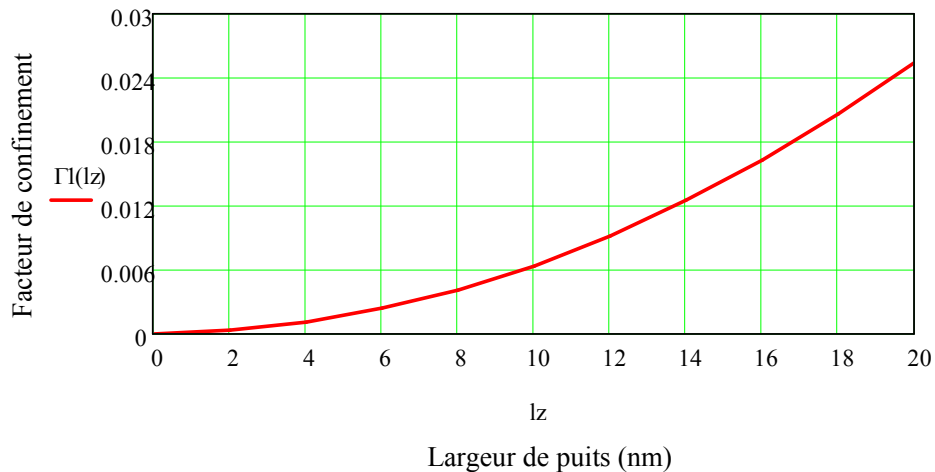


Fig. V.5 : Structure diode laser à unique puits quantique Al<sub>0.03125</sub>Ga<sub>0.4375</sub>In<sub>0.53125</sub>As/InP

La figure V-6 montre la variation du facteur de confinement en fonction de la largeur de puits de la structure  $\text{Al}_{0.03125}\text{Ga}_{0.4375}\text{In}_{0.53125}\text{As}/\text{InP}$ . Nous constatons que ce facteur augmente avec la largeur du puits.



**Fig. V.6.** Variation du facteur de confinement en fonction de la largeur de puits (lz) pour la structure  $\text{Al}_{0.03125}\text{Ga}_{0.4375}\text{In}_{0.53125}\text{As}/\text{InP}$ .

#### V. 4.2. Gain maximal

Dans cette étape, Nous déterminons le gain maximal en fonction de plusieurs paramètres tels que la largeur de puits, la densité de porteur, la température et la densité de courant pour la structure  $\text{Al}_{0.03125}\text{Ga}_{0.4375}\text{In}_{0.53125}\text{As}/\text{InP}$ .

L'analyse du gain maximal nous permettra de déterminer la densité de porteurs d'injection  $N_{tr}$  ainsi que la densité de courant  $J_{th}$ .

#### V. 4.3. Gain en fonction de la densité de porteurs

La Fig.V.7 montre la variation du gain en fonction de la densité de porteurs. Suite à la courbe de la fig. V.7, nous remarquons que le gain maximal croit lorsqu'on fait augmenter l'injection des porteurs, et il devient positif à partir d'une valeur de densité égale à  $1,365 \cdot 10^{12} \text{cm}^{-2}$  qui correspond à la densité de transparence ce résultat est en accord avec les prédictions théoriques [12, 13]. Il est intéressant de rappeler que la densité de transparence

correspond à un gain nul. Cependant, cette valeur ( $1,365 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ ) nous permet de choisir la densité de porteur que nous devons utiliser dans la diode laser (QW)  $\text{Al}_x\text{Ga}_y\text{In}_{1-x-y}\text{As}/\text{InP}$ . Pour déterminer ce gain nous avons utilisé l'équation suivante [4].

$$G_{max} = \Gamma g_0 \left( 1 - e^{-\frac{n}{n_c}} - e^{-\frac{n}{R \cdot n_c}} \right) \quad (\text{V-3})$$

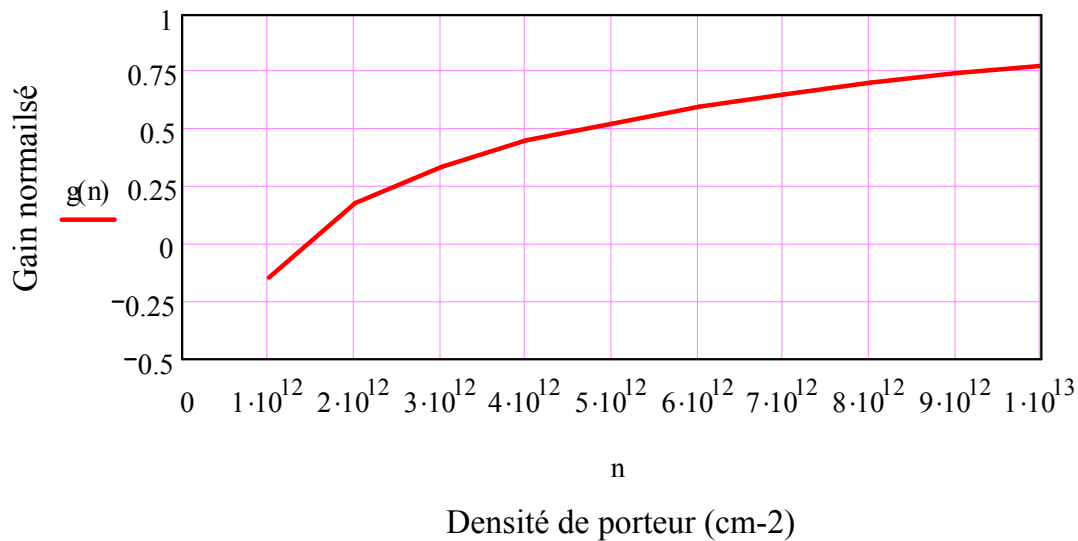


Fig.V.7 : variation du gain normalisé en fonction de la densité de porteurs (n) avec  $n_c=7.8 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ ,  $n_v=5.8 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-2}$  et  $R=8.47$ .

#### V.4.4. Gain en fonction de la température

Nous présentons la variation du gain maximal normalisé sur la Fig. V-8. Suite à cette courbe, nous ne constatons que le gain diminue quand la température augmente. Cependant, quand la température passe de 240 à 420, le gain maximal ne décroît que de 0.25%, donc l'influence de la température est négligeable et on note que le gain est obtenu pour une largeur de puits de 10 nm. Nous ajoutons que le gain croît avec l'élargissement de puits

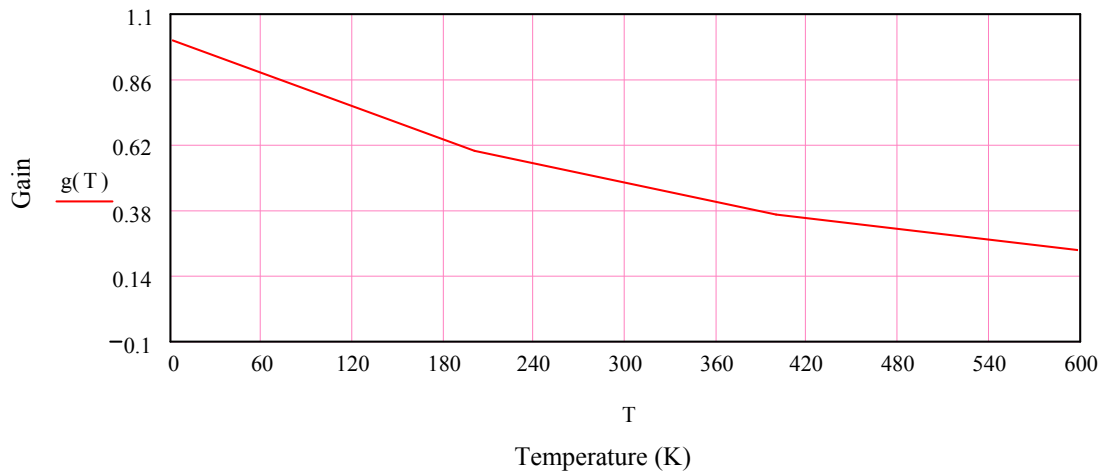


Fig. V.8 : Variation du gain normalisé en fonction de la température pour différents largeurs de puits pour la structure

### V.4.5. Gain en fonction de la largeur de puits

La Fig. V.9 représente la variation du gain maximal en fonction de la largeur de puits pour une concentration de porteurs ( $n = 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ ). Nous remarquons que le gain augmente avec l'augmentation de la largeur de puits. D'autres parts ce gain est négatif pour les valeurs de largeur de puits inférieures à 1.189 nm. Nous remarquons aussi une légère augmentation du gain à partir de la valeur de 9 nm. Ces deux constatations nous permet utiliser de manière satisfaisante une largeur de puits compris dans l'intervalle ( $1.189 < lz \leq 9$ ) nm pour une structure susceptible d'émettre une longueur d'onde 1300 nm.

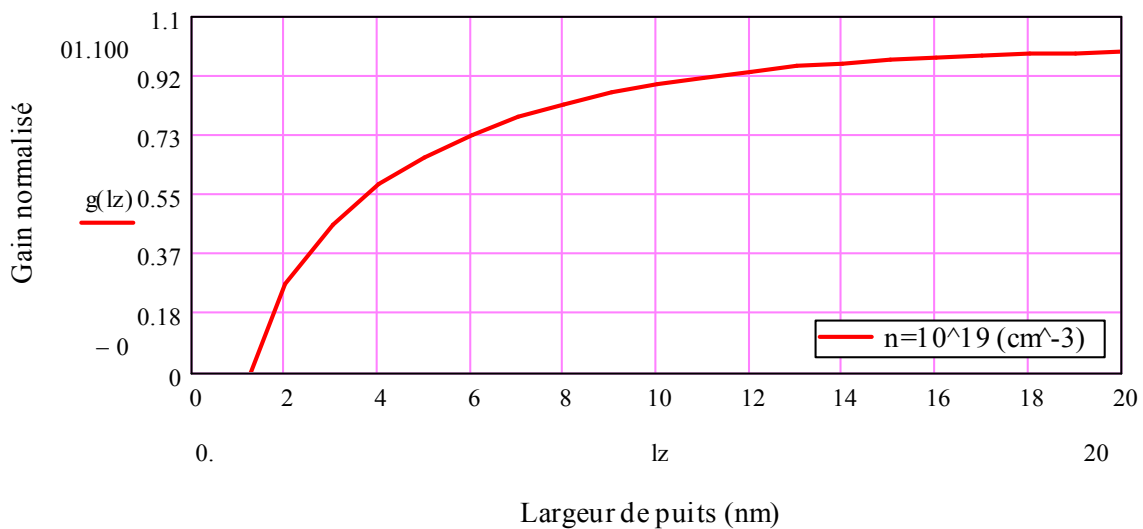
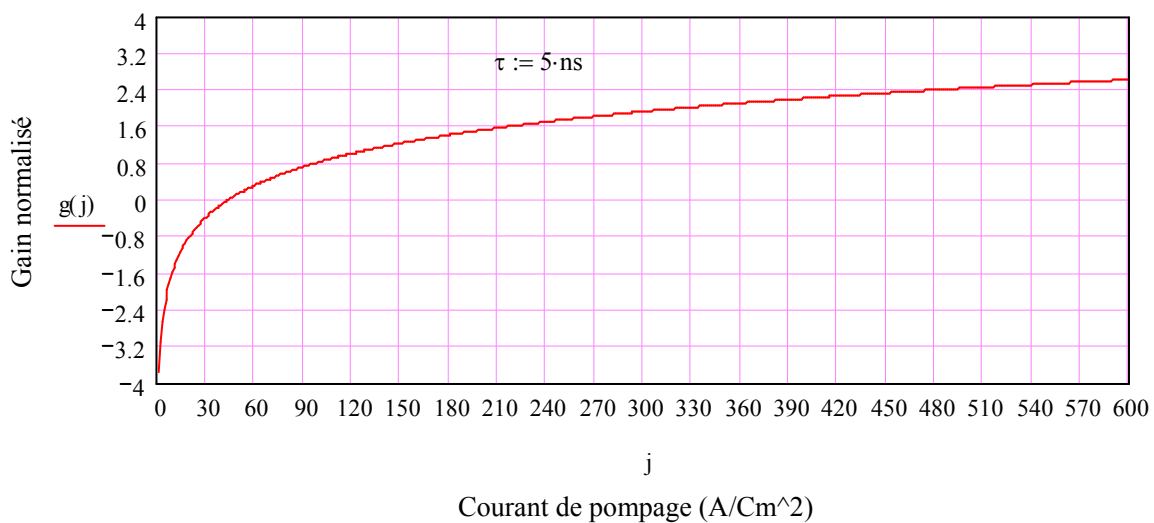


Fig.V.9 : la variation du gain en fonction de la largeur de puits pour une concentration de porteurs  $10^{19} \text{ cm}^{-3}$ .

### V.4.5. Gain en fonction de la densité du courant d'injection

La Fig. V.10 montre la variation du gain maximal en fonction de la densité du courant d'injection pour la structure  $Al_{0.03125}Ga_{0.4375}In_{0.53125}As/InP$ . Cette courbe montre que le gain maximal augmente avec l'augmentation du courant de pompage, et s'annule au point correspondant à la valeur égale  $43.68 A/cm^2$  [13]. À partir de ce point le gain devient positif et à tendance à croître avec l'augmentation du courant d'injection augmente. Cette valeur correspond à un gain nul. En prenant en considération le temps de relaxation intra bande ( $\tau$ ) égale à  $1.059 ns$  [14, 15]. Pour un puits de largeur de  $10 nm$  et longueur de cavité de  $500 um$  possède un miroir de  $R=100 \%$  et autre de  $R=32\%$  et de perte parasite est de  $10 cm^{-1}$ . Le gain au seuil est donc  $21.4 cm^{-1}$ . Pour déterminer le gain normalisé nous avons utilisé l'équation suivante [4].

$$G_{max} = \Gamma g_0 \ln\left(\frac{J_1}{J_{tr,1}}\right) \quad (V-4)$$



**Fig. V.10:** variation du gain maximal en fonction de la densité du courant d'injection pour la structure  $Al_{0.03125}Ga_{0.4375}In_{0.53125}As/InP$ .

### V.4.6. Conception d'une structure $Al_{0.03125}Ga_{0.4375}In_{0.53125}As/InP$ à seul puits quantiques

Les valeurs optimisées graphiquement de la diode laser à seul puits quantiques à base de la structure  $Al_{0.03125}Ga_{0.4375}In_{0.53125}As/InP$  sont montrées dans le tableau V. 1. A partir des calculs réalisés précédemment nous proposons une structure  $Al_{0.03125}Ga_{0.4375}In_{0.53125}As/InP$  (figure V.11) pour une longueur d'onde de 1.3  $\mu m$ , un puits de largeur 10 nm entourée d'une barrière de 100 nm et un dopage de  $10^{19} cm^{-3}$  à cause de difficultés prévisibles rencontrées pour un alliage à forte concentration en aluminium d'une et d'autre parts pour ces propriétés (semi-conducteur). Un courant de seuil de 57.6  $A/cm^2$  à une température ambiante (300 K) pour une durée de vie 5 ns et une surface de 5  $\mu m$  par 500  $\mu m$  on trouve un courant de seuil égal 1.44 mA. Pour le choix de concentration x, notre modèle proposé est en accord avec d'autres modèles proposés ou réalisés et nous avons tenu en compte les difficultés technologiques. Les valeurs optimales déterminées de la diode laser à multi puits quantiques sont montrées dans le tableau V.1. Nos valeurs des paramètres optimisés sont améliorées par rapports aux travaux théoriques effectués par Kasarinov et al.[16]. nous notons que différences de valeurs est due probablement aux choix des paramètres physiques de la structure proposés par ce groupe [16], tel que la température (27 et 87  $C^\circ$ ), largeur de puits (4 nm) et de la barrière (1000 nm) , et la surface d'injection (3  $\mu m$  x 500  $\mu m$ ).

Tableau V.1 : les valeurs optimisées graphiquement de la diode laser à un seul puits quantiques à base de la structure  $Al_{0.03125}Ga_{0.4375}In_{0.53125}As/InP$  comparées aux autres travaux.

Paramètres de la structure	Présent travail	Autres travaux
Largeur de puits $L_z$ (nm)	10	4 [16]
Largeur de la barrière puits $L_b$ (nm)	100	1000 [16]
Densités des porteurs ( $cm^{-3}$ )	$10^{19}$	-
Facteur de confinement	0.005	-
Gain normalisé	0.889	-
Gain maximal ( $cm^{-1}$ )	8890	-
Densité de courant $J_{th}$ ( $A/cm^2$ )	43.68	-
Courant de transparence $I_{th}$ ( $A/cm^2$ )	12.88	-
Courant de seuil $J_s$ ( $A/cm^2$ )	576	264, 481.8 [16]
Courant de seuil $I_s$ (mA)	14.4	12.4[17]26.4, 48.18 [16]

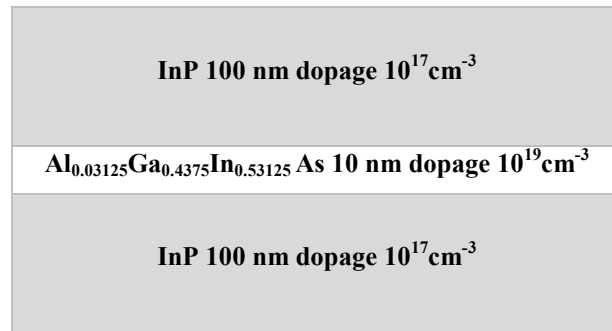


Fig. V.11 : schéma d'une structure(SQW) à base de structure  $Al_{0.03125}Ga_{0.4375}In_{0.53125}As/InP$  susceptible d'émettre une longueur d'onde 1.30 nm.

## V.5.2. Laser à multi puits quantiques

Dans cette section, nous procédons à l'étude de l'influence de nombre de puits sur le facteur de confinement, le gain modal maximal et le courant de pompage pour une structure a multi à puits quantiques (MQW).

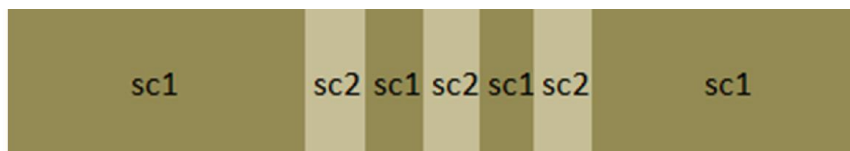


Figure V-12: structure à multipuits quantiques(MQW)

### V.5.2.1.Facteur de confinement d'un laser à multi puits quantique

Le facteur de confinement est étudié pour la structure à multi puits quantiques(MQW) en fonctions de plusieurs paramètres, le quaternaire  $Al_{0.03125}Ga_{0.4375}In_{0.53125}As$  présente couche active et le binaire InP présente la barrière.

### V.5.2.2.Facteur de confinement en fonction de nombres de puits

La Fig.V.13 montre la variation du facteur en fonction de nombre de puits pour la structure  $Al_{0.03125}Ga_{0.4375}In_{0.53125}As/InP$  pour largeur de barrière (60,100 et 150) nm. Nous constatons

que le facteur de confinement croît avec l'augmentation des nombre du puits et décroît avec élargissement de la barrière. Nous notons que la croissance du gain en fonction de nombre du puits est rapide pour un nombre de puits égale à  $N = 3$ , ensuite cette croissance devient faible pour un nombre de puits supérieur.

Nous remarquons aussi que le facteur de confinement est amélioré lorsque nous remplaçons le puits unique par une structure à multi puits quantiques (MQW).

Il est intéressant de noter que ce facteur augmente avec la diminution de la largeur de barrière.

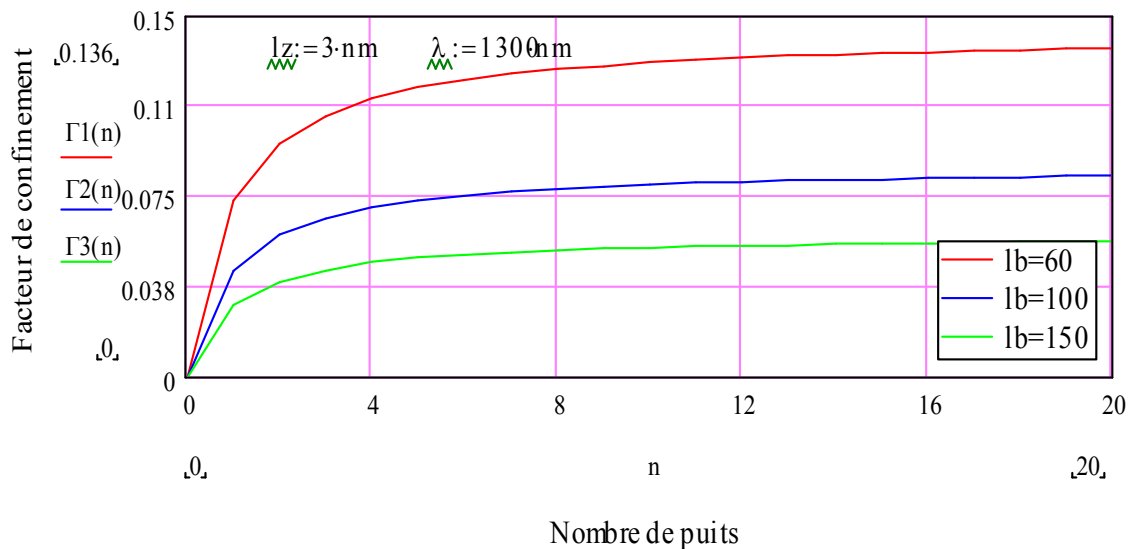


Fig. V.13. Variation du facteur du confinement en fonction de nombre de puits pour différentes valeurs de la barrière.

### V.5.2.3. Facteur de confinement en fonction de la largeur de barrière

Les figures V-14, V-15 et V-16 montrent la variation du facteur de confinement en fonction de largeur de barrière et le nombre de puits pour la structure en discussion pour trois valeurs de la largeur de puits 3nm, 6 nm et 9nm, respectivement. Suite à ces courbes, nous constatons que les pics du facteur( $\Gamma$ ) augmentent et se déplacent vers les faibles valeurs de la barrière avec l'élargissement de la barrière. Pour le cas de la largeur de puits ( $l_z$ ), les maximums pics sont repérés aux voisinages de largeur de la barrière 19 nm, 22 nm ,35 nm et 60 nm pour le nombre de puits égale à 2, 4,6et 8, respectivement.

A partir de ce maximum le facteur de confinement est d'autant plus faible que la barrière est large et il est plus marqué si le nombre (n) de puits augmente.

Il est aussi intéressant de noter que le maximum des courbes se déplace vers les faibles largeurs de barrière lorsque le nombre de puits (n) augmente.

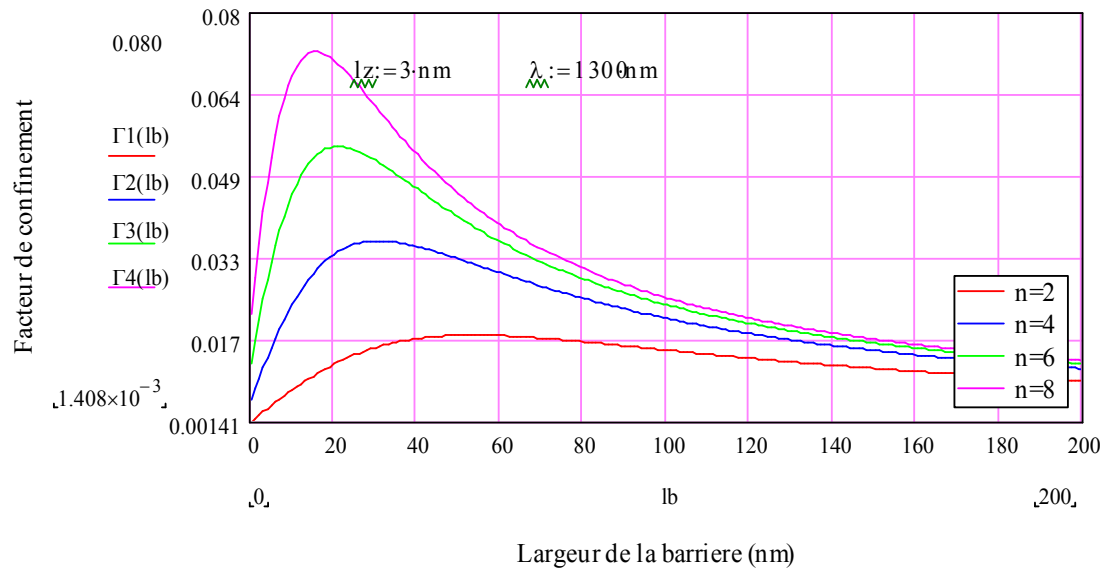


Fig. V.14. La variation du facteur de confinement en fonction de largeur de barrière et le nombre de puits avec  $l_z=3\text{nm}$ .

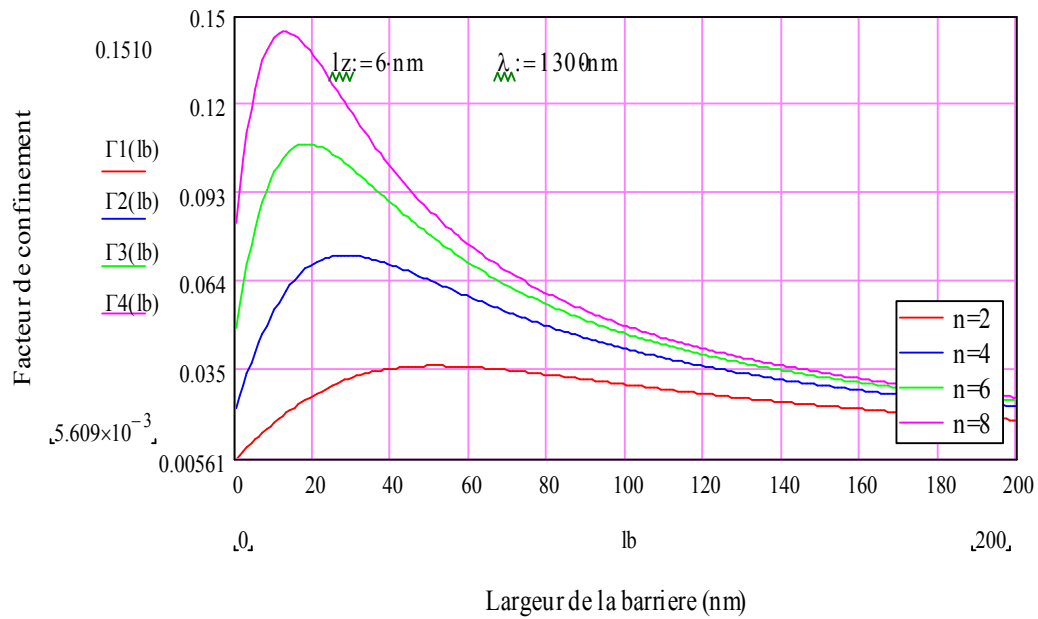


Fig. V.15. La variation du facteur de confinement en fonction de largeur de barrière et le nombre de puits avec  $l_z=6 \text{ nm}$ .

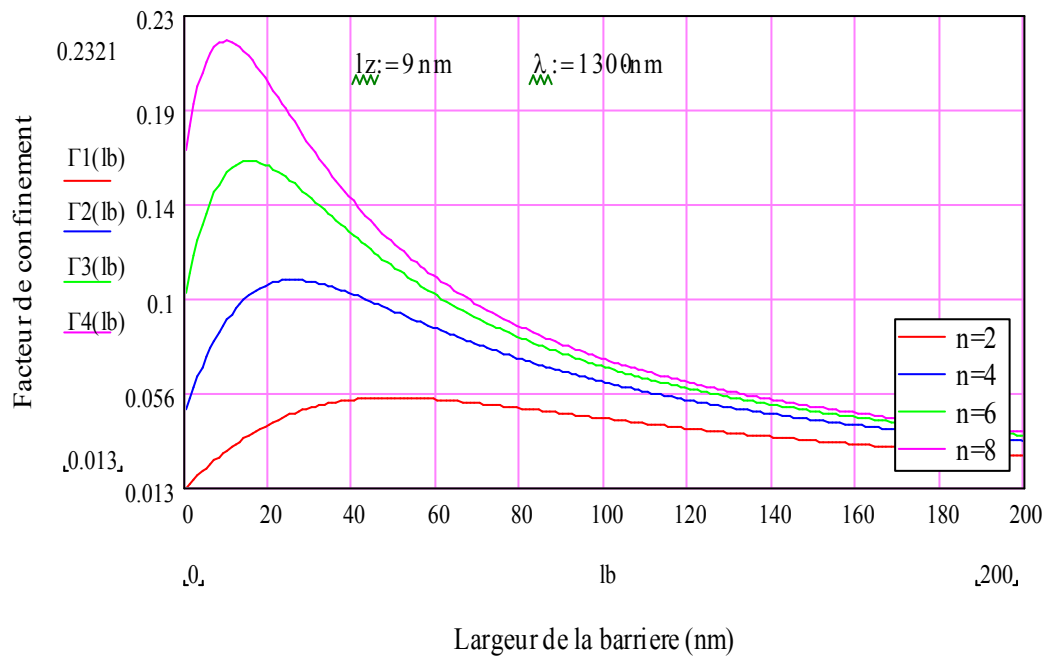


Fig. V.16. La variation du facteur de confinement en fonction de largeur de barrière et le nombre de puits avec  $l_z = 9 \text{ nm}$ .

#### V.5. 5.4. Facteur de confinement en fonction de la largeur de puits

La Fig.V.17 montre la variation du facteur de confinement en fonction de largeur et le du nombre de puits pour des différentes valeurs de la barrière (60,100et 150) nm. Nous constatons clairement que largeur de puits influe positivement sur le facteur de confinement. Cependant, les résultats obtenus dans le cas de structure à multi puits (MQW) sont nettement plus importantes que celles obtenues par l'utilisation d'une structure à unique puits (SQW). Il est aussi intéressant de noter que ce facteur augmente avec le nombre de puits.

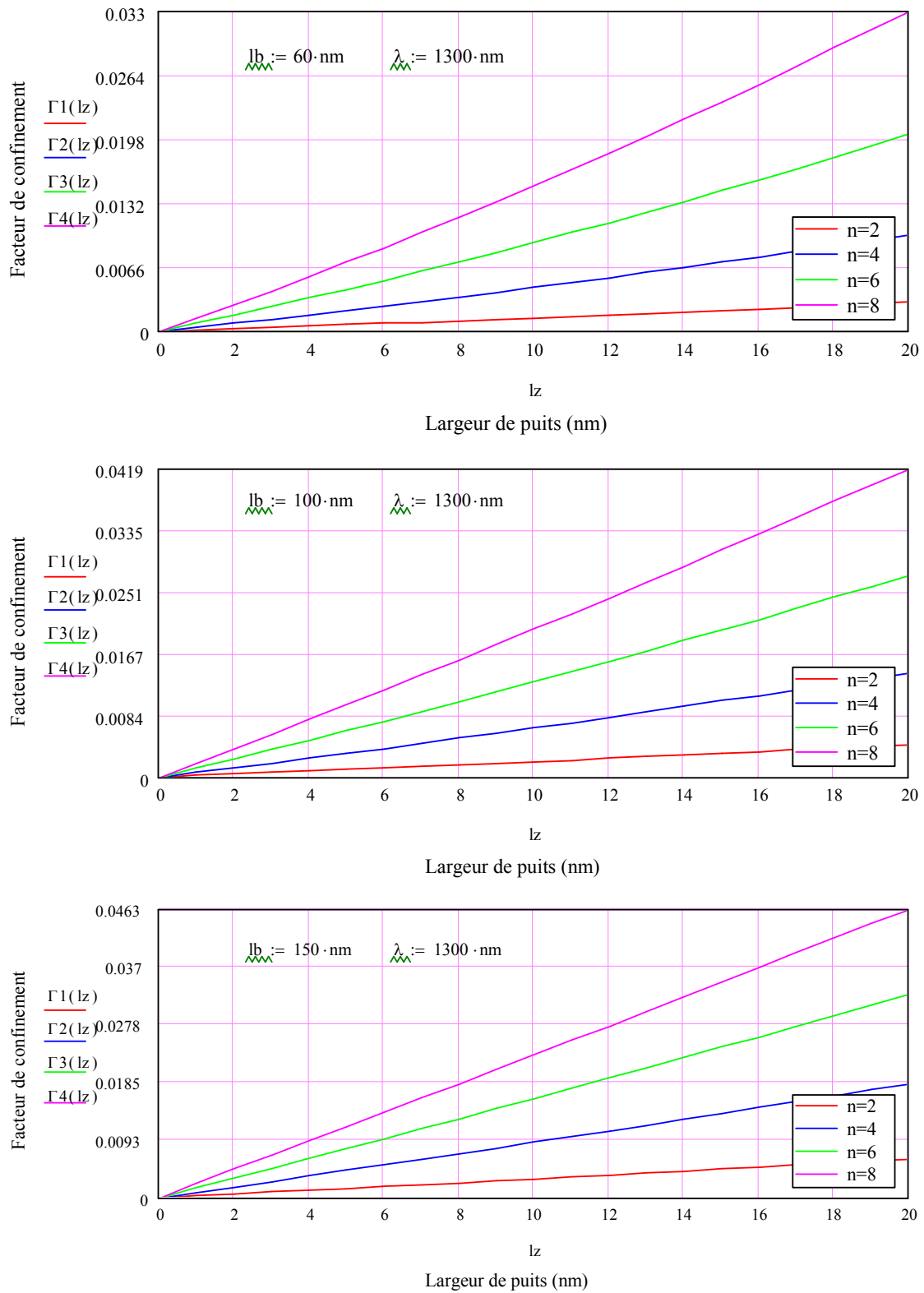


Fig. V.17 : variation du facteur de confinement en fonction la largeur et le nombre du puits pour trois de  $l_b$  (60,100 et 150)nm.

### V.3.6. Gain maximal d'un laser à multi puits quantique (MQW)

Dans le présent cas, nous étudions le gain maximal en fonction de plusieurs paramètres tels que, la densité de porteur, la largeur de puits, la largeur de la barrière et le nombre de puits.

#### V.5.5.6. Gain maximal en fonction de la densité de porteurs

La Fig. V.18 montre la variation du gain maximum en fonction de la densité des porteurs et le nombre de puits. Graphiquement, ces courbes nous donnent la possibilité de comparer plusieurs structures à nombre de puits différent. Nous remarquons que le gain maximal augmente avec l'augmentation de la densité. Cette augmentation est rapide dans l'intervalle ( $<10^{18}$  presque linéaire), Puis il s'affaiblie pour des densités importantes. Il est intéressant de noter qu'il y a une saturation du gain, au-delà d'une concentration de porteur de  $3.7 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ . Afin d'éviter d'avoir un semi-conducteur dégénéré, il serait donc opérant d'injecter des porteurs dont la concentration est inférieure ou égale à cette limite ce résultat est en bon accord avec les prédictions théoriques [19]. D'autre part, l'augmentation du gain maximal est accompagnée par une augmentation du nombre de puits et, nous remarquons que la densité des porteurs au seuil ( $n_{tr}$ ) est de deux à trois fois plus faible que celle obtenue dans le cas d'un (SQW). La contribution de ce mécanisme non radiatif qui dépend linéairement de la densité de porteurs a un faible effet sur les diodes laser à multiples puits quantiques que sur ceux de type (SQW) [18, 19]. A cet effet, il faut donc trouver le nombre de puits qui réalise un compromis entre le gain et le facteur de confinement.

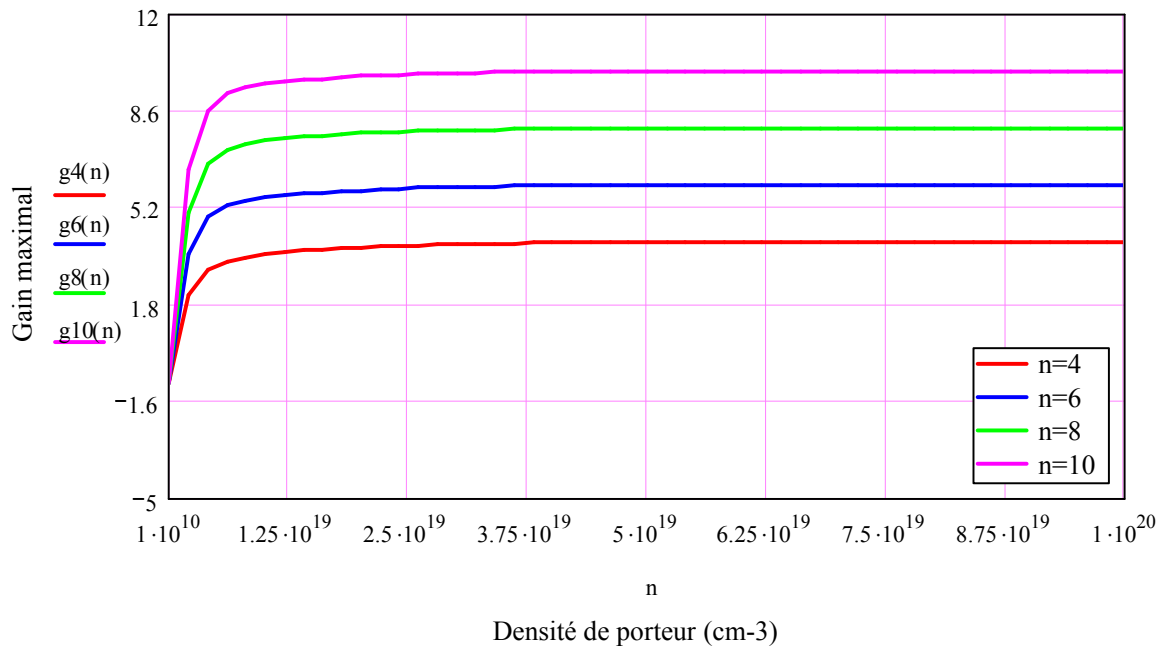


Fig. V.18 : variation du gain maximal en fonction de densité du porteur et le nombre des puits (2, 4, 6, 8 et 10).

### V.5.5.7. Gain maximal en fonction de la largeur de barrière, largeur de puits et le nombre de puits

La figure V.19 montre la variation du gain maximal en fonction de la largeur de barrière et le nombre de puits pour différents largeurs du puits (3,6 et 9) nm. Dans l'intervalle de [0..200] nm. La valeur maximale du gain est obtenue au voisinage de 30nm, pour un nombre de puits inférieur à 6, et à partir de cette valeur le gain décroît avec l'augmentation de la barrière. Pour un nombre de puits supérieur à 6. La valeur maximale du gain est obtenue au voisinage de 20 nm. Nous notons que les valeurs élevées des gains se trouvent dans l'intervalle de [20..100] nm. Aussi, il est intéressant de noter que le maximum des courbes se déplace vers les valeurs élevées de largeurs de barrière lorsque la largeur du puits augmente.

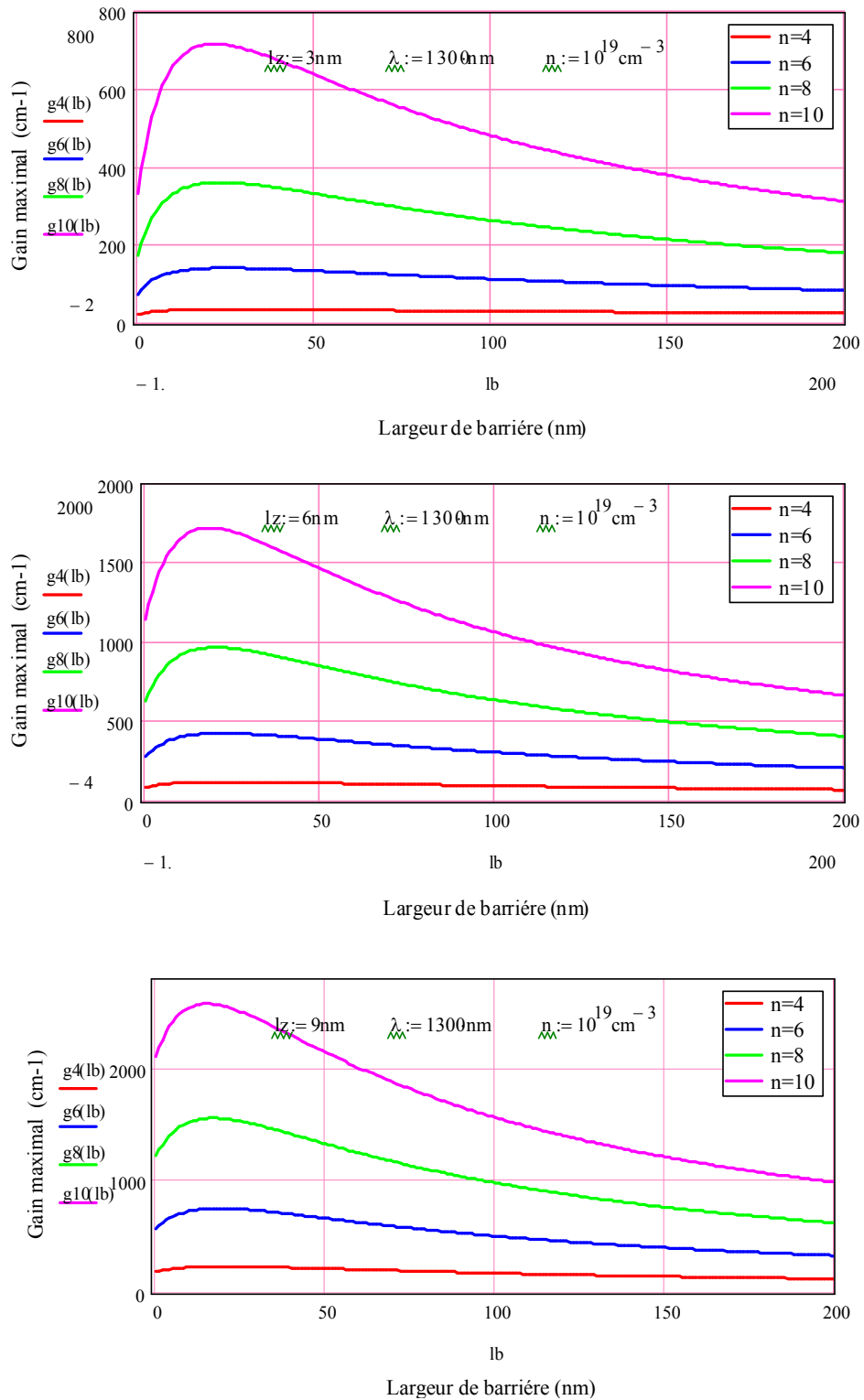


Fig.V.19 : variation du gain maximal en fonction de la largeur de puits et de la barrière pour différents nombre de puits quantique n= 4, 6, 8,10.

### V.5.5.8. Gain en fonction de la densité de courant d'injection (pompage)

La Fig. V.20, montre la variation du gain maximal en fonction de densité du courant de pompage pour différents nombre de puits quantique  $n=2, 4, 6, 8$  et  $10$ . Nous constatons ainsi que le gain augmente avec le courant de pompage. Le temps de relaxation intra bande ( $\tau$ ) est pris égal à  $1.059$  ns. D'autre part, nous remarquons aussi que le seuil de transparence augmente proportionnellement avec le nombre de puits. Il intéressant de noter que le gain se sature avec l'augmentation de la densité de courant, dès faite qu'on a pris les valeurs optimales, la densité de courant injecté doit être limitée à  $2500$  A/cm<sup>2</sup> pour une injection électrique, à cause de l'échauffement thermique dans la structure et cette condition reste absente pour une injection pulsé [4]

Maintenant, nous sommes en mesure de nous poser la question suivante : pour quel nombre optimal de puits quantiques doit-on utiliser pour un courant de seuil plus faible possible ? Il est clair que plus ce nombre est grand plus grand le gain optique et plus on composera les pertes dans le milieu laser. D'autre coté, si ce nombre est grand, le courant de seuil sera très important. Il excite donc un optimum qu'on doit le déterminer.

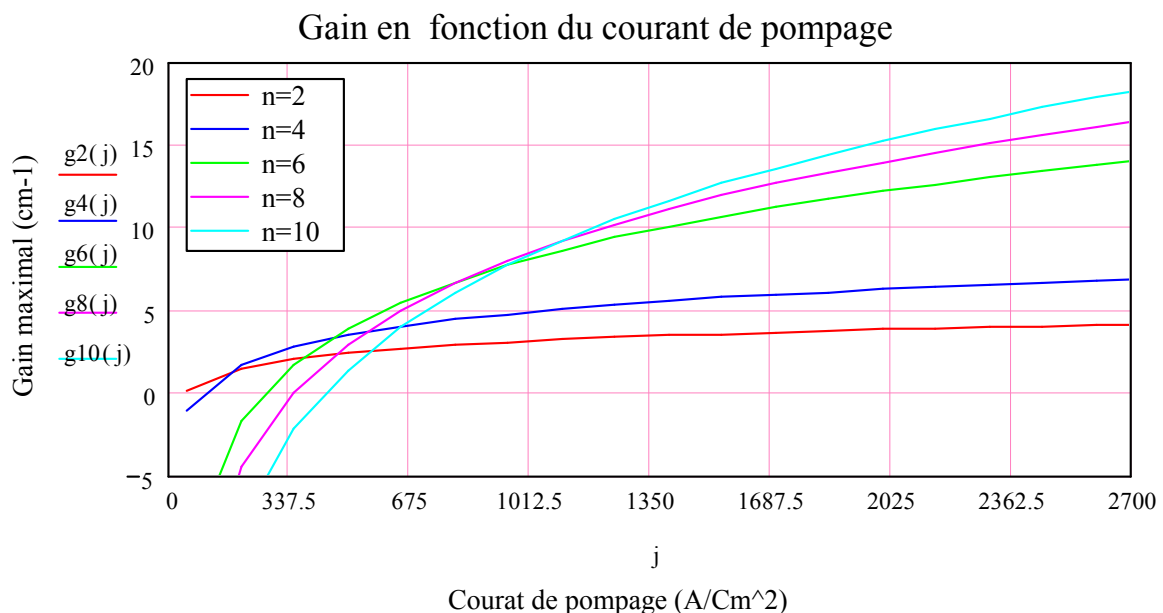


Figure V.20 : variation du gain maximal en fonction de densité du courant de pompage pour différents nombre de puits quantique  $n= 2, 4, 6, 8$  et  $10$ .

**V.5.5.9. Proposition d'une structure  $Al_{0.03125}Ga_{0.4375}In_{0.53125}As/InP$  à multi puits quantiques**

Les valeurs optimisées graphiquement de la diode laser (MQW) à base de la structure  $Al_{0.03125}Ga_{0.4375}In_{0.53125}As/InP$  sont montées dans le tableau V.2. Ces valeurs ont été obtenues avec une surface d'injection de 5 um par 500 um. La structure que nous proposons est basée sur les calculs que nous avons effectué à partir des paramètres de la structure  $Al_xGa_yIn_{1-x-y}As/InP$  ainsi que les valeurs optimisés pour la diode laser à puits quantiques. Nos valeurs optimisées sont en excellent accord avec les données cite dans la Réf.[17]. Les résultats obtenus, nous permis de confirmer la possibilité de réaliser une diode laser à puits quantiques susceptible d'émettre une longueur d'onde de 1300nm.

Tableau V.2 : Les valeurs optimisées de la diode laser à multi puits quantiques à base de la structure  $Al_{0.03125}Ga_{0.4375}In_{0.53125}As/InP$ .

Paramètres physiques de la structure (MQW)	Présent travail			Autre travaux
Nombre de puits (N)	10	10	10	5 [17]
Largeur de puits Lz (nm)	3	6	9	5
Largeur de la barrière puits Lb (nm)	30	30	30	10
Densités des porteurs (cm <sup>-3</sup> )	10 <sup>19</sup>	10 <sup>19</sup>	10 <sup>19</sup>	-
Facteur de confinement	0.062	0.119	0.171	-
Gain maximal (cm <sup>-1</sup> )	717.71	1658	2437	-
Densité de transparence J <sub>th</sub> (A/cm <sup>2</sup> )	432.432	432.43	432.43	-
Courant de transparence I <sub>th</sub> (mA)	10.81	10.81	10.81	-
Courant de seuil J <sub>s</sub> (A/cm <sup>2</sup> )	59.91	59.92	59.92	-
Courant de seuil I <sub>s</sub> (mA)	14.97	14.97	14.97	12.5 [17]

## V.6.Conclusion

En conclusion, nous avons déterminé les paramètres physiques intrinsèques et extrinsèques de la diode laser à puits quantique à base la structure  $Al_xGa_yIn_{1-x-y}As/InP$ . Nous avons choisi la concentration d'aluminium à fin d'avoir une diode laser capable d'émettre une longueur d'onde égal à 1300 nm. Nous avons étudié la variation de la longueur d'onde en fonction de la température et la longueur de puits. Ensuite nous avons calculé l'évolution du facteur de confinement en fonction de largeur de puits pour la structure  $Al_{0.03125}Ga_{0.4375}In_{0.53125}As/InP$ . Ce facteur croit avec l'élargissement du puits. Nous avons noté que facteur s'améliore si on remplace la structure à unique puits par une structure à multi puits quantiques. Puis nous avons calculé l'évolution du gain maximal en fonction de la densité de porteurs et le courant d'injection, ce dernier croit avec la variation de la densité de porteurs il devient positif à une valeur de  $1.365 \cdot 10^{12} \text{cm}^{-2}$  qui correspond à la densité de transparence. Un autre paramètre important à calculer est le courant de transparence qui vaut  $43.68 \text{ A/cm}^2$  pour un temps de relaxation intrabande calculé ( $\tau$ ) de 1.059 ns et un courant de seuil ( $I_s=14.4 \text{ mA}$ ).

L'étude de la variation du gain en fonction de la largeur de puits nous a permis de constater que ce dernier croit avec l'élargissement du puits et il devient positif à partir d'une largeur égale à 1.059 nm. Et à partir des calculs réalisés nous proposons une structure à un seul puits quantique.

En dernier, nous avons remplacé le puits unique (SWQ) par la structure à multi puits quantiques (MWQ) d'où nous avons observé l'amélioration du facteur de confinement et le gain optique (ce qui implique que les pertes sont compensées), mais d'autre part, le courant de seuil augmente proportionnellement avec le nombre de puits ce qui nous oblige donc de trouver un optimum pour les deux derniers paramètres.

Nous avons utilisé l'évolution du facteur de confinement en fonction de la largeur de barrière pour différents nombre de puits (N) pour La  $Al_{0.03125}Ga_{0.4375}In_{0.53125}As/InP$  afin d'optimiser la largeur de barrière, puisque cette quantité n'interfère en rien avec les propriétés d'émission du puits quantique. L'évolution du gain en fonction de largeur de puits, la densité de porteurs et le courant d'injection, lorsque  $L_b$  est optimisée. Et à la fin pour optimiser le courant de seuil nous avons utilisé l'évolution du gain en fonction du courant d'injection pour différents nombre de puits. Nous avons comparé nos valeurs optimisées avec d'autres travaux ou ils sont accords.

En conclusion, nous avons sélectionné la structure la plus prometteuse qui nous offre un gain très élevé et courant minimal.

## Références du chapitre V

- [1] V. Berger, in: Collection de la Société Française d'Optique, EDP Sciences, 2002, pp. 01.
- [2] S. Gouraud, in, Université Blaise Pascal-Clermont-Ferrand II, 2005.
- [3] L. Badie, in, École normale supérieure de Cachan-ENS Cachan, 2008.
- [4] E. Rosencher, B. Vinter, B.F. Levine, Intersubband transitions in quantum wells, Springer Science & Business Media, 2012.
- [5] J. POCHOLLE.Ecole de l'optoélectronique.Journal Article
- [6] C. Weisbuch, R. Willardson, A. Beer, in, Academic Press, New York, 1987.
- [7] J. Menniger, U. Jahn, O. Brandt, H. Yang, K. Ploog, Physical Review B, 53 (1996) 1881.
- [8] T. Makino, Quantum Electronics, IEEE Journal of, 32 (1996) 493-501.
- [9] Y.P. Varshni, Physica, 34 (1967) 149-154.
- [10] A. Sadao, England: John Wiley & Sons Ltd, (2005) 373.
- [11] H. Mathieu, H. Fanet, Physique des semiconducteurs et des composants électroniques-6ème édition: Cours et exercices corrigés, Dunod, 2009.
- [12] D.P. Sapkota, M.S. Kayastha, K. Wakita, 電気学会論文誌. C, 131 (2011) 290-295.
- [13] D.P. Sapkota, M.S. Kayastha, K. Wakita, 電気学会論文誌 C (電子・情報・システム部門誌), 133 (2013) 1139-1144.
- [14] B. Miloud, These de magister , Université El Djillali Liabès de Sidi Bel Abbès.(2011).
- [15] S. Gautier, C. Sartel, S.O.S. Hamady, N. Maloufi, J. Martin, F. Jomard, A. Ougazzaden, Superlattices and Microstructures, 40 (2006) 233-238.
- [16] R. Kazarinov, G. Belenky, Quantum Electronics, IEEE Journal of, 31 (1995) 423-426.
- [17] S.R. Selmic, T.-M. Chou, J. Sih, J.B. Kirk, A. Mantle, J.K. Butler, D. Bour, G. Evans, Selected Topics in Quantum Electronics, IEEE Journal of, 7 (2001) 340-349.
- [18] K. Petermann, Laser diode modulation and noise, Springer Science & Business Media, 2012.
- [19] C. Green, N. Dutta, W. Watson, Applied Physics Letters, 50 (1987) 1409-1410.

# **Conclusion générale**

## Conclusion générale

L'optoélectronique dans la région spectrale qui s'étend du 1300 et 1550 nm est particulièrement importante pour les applications en télécommunications optiques. Cependant, grâce aux concepts de l'ingénierie de bande interdite développés dans le cadre des matériaux du groupe III-V, il est donc possible de concevoir et réaliser des diodes lasers capables de couvrir entièrement cette gamme spectrale. De par les avantages dont elles ont déjà fait preuve, les diodes laser à puits quantique à base du semi-conducteur III-V apparaissent être un des composants-clé de l'avenir des télécommunications optiques ou plus largement, de l'optoélectronique intégrée et système à traitement de l'information.

Le travail mené au cours de cette thèse porte sur l'étude et l'optimisation des paramètres physiques de la structure AlGaInAs/InP. Notre travail s'articule sur deux appuis que sont la confrontation d'un calcul du premier principe basé sur la méthode des ondes planes linéarisées (FP-LAPW) pour déterminer les différentes propriétés du quaternaire AlGaInAs et ses constituants ternaires et binaires, et le logiciel Mathcad pour optimisation les paramètres de la structure AlGaInAs/InP graphiquement.

La première partie de notre travail a porté sur l'étude des propriétés structurales et optoélectroniques des binaires AlAs, GaAs et InAs, et leurs ternaires  $Al_{1-x}In_xAs$ ,  $Al_{1-x}Ga_xAs$  et  $In_{1-x}Ga_xAs$ . En premier, nous avons calculé les propriétés structurales des binaires AlAs, GaAs et InAs à l'aide de l'approximation (GGA-WC). Les résultats obtenus ont été parfaitement vérifiés par une comparaison avec les travaux expérimentaux et théoriques. Ce qui prouve la puissance de l'approximation employée et le bon choix de nos paramètres utilisés. Nous avons utilisés les résultats du paramètre de maille de ces binaires pour accéder au calcul des propriétés structurales des ternaires  $Al_{1-x}In_xAs$ ,  $Al_{1-x}Ga_xAs$  et  $In_{1-x}Ga_xAs$ . Aussi, par l'utilisation de l'approximation (GGA-WC) les valeurs calculées ont été en excellents accords avec l'expérience et la théorie. Nous avons déterminé le paramètre de courbure lie à chaque ternaires. Les valeurs de ces paramètres de courbe sont faibles, ces résultats ont été expliqués par les faibles écarts entre les paramètres cristallins des composés binaires parents. La dépendance en composition des paramètres de maille des ternaires varient presque linéairement avec la composition  $x$  ce qui en concordance avec la loi linéaire de Vegard. Après l'analyse de ces résultats, nous avons remarqué que les deux courbes représentant les deux ternaires ( $Al_{1-x}In_xAs$  et  $In_{1-x}Ga_xAs$ ) se croisent au point correspondant à la concentration

$x \approx 0.50$  qui donne un bon accord de maille entre eux d'où la possibilité d'utilisation des hétérostructures à cette concentration. Cette constatation est cependant vérifiée par Grenet et al. [9]. donc la structure ( $\text{Al}_{0.50}\text{In}_{0.50}\text{As}/\text{In}_{0.50}\text{Ga}_{0.50}\text{As}$ ) peut être utilisée comme diode laser à puits quantique. Graphiquement la deuxième remarque importante qu'on a pu constater, c'est l'existence d'une symétrie remarquable par rapport à l'axe vertical passant par ce point ( $x \approx 0.50$ ). Cette symétrie nous permet de valider le choix de la concentration  $x$  pour assurer l'accord de maille des structures que soit  $\text{Al}_{1-x}\text{In}_x\text{As}/\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}$  ou  $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}/\text{Al}_{1-x}\text{In}_x\text{As}$ . Cela dépend du domaine d'utilisation. Après l'étape de l'optimisation, Nous avons calculé les propriétés optoélectroniques, électroniques et optiques, des binaires et les ternaires.

Nous avons employé trois approximations (GGA-WC), (PBEsol-GGA) et (TB-mBJ) pour calculer les gaps énergétiques. L'analyse de ces résultats a montré que les valeurs du gap obtenues par la nouvelle approximation (TB-mBJ) sont comparables avec les données expérimentales liées à chaque binaire et ternaire. Par contre celles obtenues par les deux autres approximations sont sous-estimées par rapport à l'expérience mais sont en bon accord avec les résultats théoriques estimés par ces approximations. Nous avons tracé la variation du gap en fonction de la composition  $x$  et nous avons calculé le paramètre de courbure de chaque ternaire. Le tracé des structures des bandes de ces matériaux nous a permis de constater que les matériaux GaAs, InAs et InGaAs possédant des gaps directs, par contre le binaire AlAs a un gap indirect. D'autre et suite aux analyses des résultats, pour le cas du ternaire  $\text{Al}_{1-x}\text{In}_x\text{As}$  un passage d'un gap indirect à un gap direct pour une concentration en aluminium  $x=0.06$  %. Dans le cas du  $\text{Al}_{1-x}\text{In}_x\text{As}$ , une transition du gap direct vers un gap indirect a été remarquée pour une concentration en indium  $=0.96$  %. Les densités d'états partielles et totales ont été déterminées et discutées en détail.

Dans la dernière section de cette partie, nous avons calculé et discuté en détail les propriétés optiques linéaires de ces matériaux, tel que la fonction diélectrique, le coefficient d'absorption, l'indice de réfraction et le coefficient d'extinction. Nous avons déterminé la dépendance de l'indice de réfraction en fonction de la concentration  $x$ , pour chaque ternaire en discussion. Les interpolations polynômiales de leurs courbes donnent les paramètres de courbure suivants 0.210, -0.170 et -0.025 pour  $\text{Al}_{1-x}\text{In}_x\text{As}$ ,  $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}$  et  $\text{Al}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}$ , respectivement. Nous avons également déterminé la variation de l'indice de réfraction de ces trois ternaires en fonction de l'énergie de la bande interdite ( $E_g$ ). Nous avons remarqué que l'indice de réfraction varie inversement proportionnellement avec  $E_g$ , ce qui exprime le fait que

lorsque l'indice de réfraction d'un matériau augmente son gap d'énergie diminue dans une même proportion, et vice-versa.

Dans l'avant dernière partie de cette thèse, nous avons également présenté une étude théorique des propriétés structurales et optoélectroniques du système  $\text{Al}_x\text{Ga}_y\text{In}_{1-x-y}\text{As}/\text{InP}$  en fonction de concentration d'aluminium pour  $x$  ( $0.03125 \leq x \leq 0.40625$ ). Le choix de ces concentrations a été imposé par la condition de l'accord de maille, adaptation, entre le quaternaire  $\text{Al}_x\text{Ga}_y\text{In}_{1-x-y}\text{As}$  et le substrat InP. Aussi, cette étude a été effectuée à l'appui de méthode des ondes planes augmentées et linéarisées (FP-LAPW) et avec les mêmes approximations utilisées dans le chapitre III. Afin d'accomplir notre étude, nous étions obligés de passer par l'étape d'optimisation des paramètres structuraux du quaternaire  $\text{Al}_x\text{Ga}_y\text{In}_{1-x-y}\text{As}$  et le binaire InP. Les résultats d'optimisation obtenus pour le composé binaire ont été en très bon accord avec les données théoriques et les résultats expérimentaux. Il est intéressant encore de noter que l'approximation (GGA-WC) a prouvé sa puissance en calcul, du point de vue de précision. Nous avons également déterminé la condition d'adaptation du quaternaire  $\text{Al}_x\text{Ga}_y\text{In}_{1-x-y}\text{As}$  sur substrats InP. Nous avons constaté que les résultats du paramètre structuraux ( $a$ ,  $B$ ) sont presque identiques et sont en excellent accord la valeur mesurée du binaire InP, ce qui implique que la condition d'adaptation est vérifiée et le choix des paramètres et les concentrations  $x$  est validé. D'autre part, ces résultats montrent que le paramètre de maille du système  $\text{Al}_x\text{Ga}_y\text{In}_{1-x-y}\text{As}/\text{InP}$  peut être contrôlé par l'ajustement de la concentration d'indium ( $1-x-y$ ). Ensuite, nous avons étudié les structures de bande électronique du quaternaire  $\text{Al}_x\text{Ga}_y\text{In}_{1-x-y}\text{As}$  avec et sans relation par l'utilisation des trois approximations suivantes (GGA- PBESol), (GGA-EV) et (TB-mBJ). Les résultats déterminés par l'utilisation de la nouvelle approximation proposée récemment par Tran et Blaha (TB-mBJ) sont en très bons avec les données expérimentales comparés aux celle déterminées par les deux approximations. Cette étude a montré aussi que ce quaternaire possède un gap direct pour tous les concentrations sélectionnées. De plus, la variation du gap entre 0.989 et 1.507eV (1.25 et 0.822  $\mu\text{m}$ ) favorise ce quaternaire à la réalisation des dispositifs optoélectroniques. Aussi, ces résultats montrent que la valeur du gap peut être contrôlée par l'ajustement de la concentration en aluminium ( $x$ ) tout en gardant la condition d'adaptation.

Pour le calcul des propriétés optiques de ce système nous nous utilisons l'approximation (TB-mBJ) car elle a été bien jugée comme étant une approximation assez précise pour prédire la valeur du gap des matériaux III-V. Suite à la non disponibilité des données théoriques et expérimentales de ce système  $\text{Al}_x\text{Ga}_y\text{In}_{1-x-y}\text{As}/\text{InP}$  pour les concentrations en aluminium choisies, Nous avons

utilisé deux modèles (de Hervé et Vandamme, et de Moss). Qui sont les plus adéquats pour ces types de matériaux. Nous avons remarqué que l'indice de réfraction du quaternaire diminue lorsque la concentration d'aluminium augmente, ceci est en accord avec l'observation empirique qui montre que l'indice de réfraction diminue lorsque le gap direct augmente. Les propriétés optiques telles que les deux parties réelle et imaginaire de fonction diélectrique, coefficient d'absorption, la conductivité optique, le coefficient d'absorption, l'indice de réfraction et le coefficient d'extinction ont été présentés et discutés en détails.

Suite aux résultats acquis dans le chapitre IV ; il apparaît donc qu'il est possible de jouer sur la concentration en aluminium pour contrôler à volonté le gap et l'indice de réfraction de structure  $\text{Al}_x\text{Ga}_y\text{In}_{1-x-y}\text{As}/\text{InP}$ , tout en respectant l'accord de maille, où le contrôle de ces deux derniers joue un rôle primordial pour être en mesure de prévoir les caractéristiques électriques et optiques des composants optoélectroniques.

Dans le dernier chapitre, nous avons procédé à l'optimisation des paramètres physiques d'une diode laser à puits quantiques à base du système  $\text{Al}_x\text{Ga}_y\text{In}_{1-x-y}\text{As}/\text{InP}$ . L'optimisation par la méthode graphique a été utilisée pour atteindre les valeurs optimales des deux facteurs importants et nécessaires pour la conception d'un laser à puits quantique. Le premier concerne le gain maximal dont nous avons recherché par sa caractérisation les valeurs les plus élevées et le deuxième concerne le courant de seuil qui doit avoir une valeur minimale, à la fin nous avons essayé de trouver un compromis entre eux. Nous avons utilisé le quaternaire  $\text{Al}_x\text{Ga}_y\text{In}_{1-x-y}\text{As}$  comme couche active et le binaire InP comme barrière pour les deux structures (laser à unique puits et multi puits quantiques), autoriser une émission à  $1,3 \mu\text{m}$  avec des bonnes performances. Nous avons calculé l'effet des paramètres intrinsèques et extrinsèques sur la longueur d'onde, le facteur de confinement et le gain. Nos calculs ont montré que le facteur de confinement est plus important dans la structure à multi puits (MQW) que celle à unique puits quantiques (SQW). Ce qui implique que ce facteur augmente avec l'augmentation du nombre de puits tel pour une largeur de  $10 \text{ nm}$ ,  $\Gamma=0.005$  pour la structure à puits unique tandis que pour la structure à multi puits quantiques possédant dix puits quantiques,  $\Gamma=0,062$  qui veut dire que ce facteur a été multiplié par dix. Pour maximiser le gain, nous avons déterminé les valeurs optimales influant sur ce gain maximal tel que la largeur de puits, la largeur de barrière et le nombre de puits pour la structure multiple. Nous avons aussi étudié la variation du gain maximal en fonction de la densité de courant. Nous avons de plus noté que ce gain a été amélioré dans le cas de la structure à (MQW). D'autre côté, nous avons remarqué que le courant de seuil augmente proportionnellement avec le nombre de puits.

Cette situation nous a obligé de rechercher un compromis entre le gain max et le courant de seuil (gain maximal et un courant de seuil minimal).

En conclusion et suite aux résultats trouvés ; nous avons confirmé la possibilité de contrôler le gain maximum et le courant de seuil en fonction de plusieurs paramètres, en tenant compte les difficultés technologiques. Nous avons aussi sélectionné la structure la plus prometteuse qui nous offre un gain très élevé et courant minimal.

## Résumé

Les composés semi-conducteurs à base de multiples puits quantiques (QW) présentent des propriétés optiques remarquables adaptées à la réalisation des dispositifs optoélectroniques pouvant être utilisés dans des systèmes de télécommunications optiques. L'association de ces matériaux artificiels avec d'autres fonctions (diodes laser à microlentilles intégrées, miroirs de Bragg actifs, émission surfacique,...) réalisés à partir de semi-conducteurs III-V contribue au développement de nouveaux systèmes propre à l'utilisation de l'optique dans le domaine des télécommunications optiques, et en particulier les systèmes de télécommunication par fibres optiques. A cet effet, l'excellente connaissance des semi-conducteurs III-V donne l'axe rapide au développement de l'optoélectronique.

Le présent travail consiste à étudier et optimiser les paramètres physiques de la structure AlGaInAs/InP : applications aux diodes lasers. Nous avons commencé par l'étude des propriétés structurales et optoélectroniques des matériaux AlAs, GaAs, et InAs, et leurs ternaires AlGaAs, AlInAs InGaAs et le quaternaire AlGaInAs/InP et ceci dans le but d'étudier et optimiser une diode laser à puits quantiques à base de AlGaInAs/InP.

À cet effet, nous avons employé la méthode des ondes planes augmentée linéarisées (FP-LAPW) basée sur la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) est implémentée dans le code Wien2k pour déterminer les différents propriétés de ces matériaux. Nous avons utilisé le logiciel « Mathcad », pour déterminer graphiquement les valeurs optimales des grandeurs intrinsèques et extrinsèques de la structure AlGaInAs/InP et ceci dans le but d'avoir un gain maximal très élevé et un courant de seuil minimal. Et à la fin nous avons exploité les résultats trouvés pour proposer une structure à un seul puits quantique(SQW) et une structure à multi puits quantiques (MQW).

**Mots-clés :** semi-conducteurs; la théorie fonctionnelle de la densité (DFT); propriétés optoélectroniques; méthode FP-LAPW, puits quantiques ; diode laser, gain ; courant de seuil

## Abstract

The semiconductor compounds containing multiple quantum wells (MQW) present remarkable optical properties adapted to the realization of the optoelectronic devices being able to be used in optical systems of telecommunications. The association of these artificial materials with other functions (integrated lenslets, active Bragg reflectors, surface emitting laser diodes...) realized starting from the semiconductors III-V contributes to the development of new systems suitable for the use of optics in the field of optical telecommunications, and in particular systems of telecommunication by optical fibers. To this end, the excellent knowledge of the III-V semiconductors gives the centered fast one to the development of optoelectronics.

This work consists to study and optimize the physical parameters of the structure (AlGaInAs/InP):applications to the lasers diode. We started with the study of structural and optoelectronic properties of compounds AlAs, GaAs, and InAs, and their ternary AlGaAs, AlInAs InGaAs and the quaternary (AlGaInAs/InP), and this with an aim of studying and of optimizing a laser diode with quantum wells containing AlGaInAs/InP. For this purpose, we employed the full-potential linearized augmented plane wave (FP-LAPW) method within the framework of the density functional theory (DFT) as implemented in the Wien2k code to determine the various properties of these materials. We used the software "Mathcad", to graphically determine the optimal values of the intrinsic and extrinsic values of the structure AlGaInAs/InP, and this with an aim of having a very high maximum gain and a minimal threshold current. And at the end, we exploited the found results to propose a structure with single quantum well (SQW) and a structure with multi quantum wells (MQW).

**Keywords:** Semiconductors; Density functional theory (DFT); Optoelectronic properties; FP-LAPW method, quantum well; laser diode; gain; threshold current.