

**REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE**  
**MINISTRE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR**  
**ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE**

**UNIVERSITE MENTOURI CONSTANTINE**  
**FACULTE DES SCIENCES EXACTES**  
**DEPARTEMENT DE PHYSIQUE**

N° d'ordre :  
Série :

**MEMOIRE**

**PRESENTE POUR OBTENIR LE DIPLOME DE MAGISTER**  
**SPECIALITE : SCIENCES DES MATERIAUX**

**OPTION:**

**SEMICONDUCTEURS**

Titre :

**Etude de la nanostructure AlAs/GaAs/AlAs par  
cathodoluminescence et méthode Monte Carlo**

**PAR :**

**AOUATI REDHA**

Soutenu le :     /     / 2007

Devant le jury :

Président :	R. Halimi	Prof.	Université Mentouri Constantine
Rapporteur :	A. Nouiri	Prof.	Université Mentouri Constantine
Examineurs :	K. Mirouh	M.C.	Université Mentouri Constantine
	A. Benslama	Prof.	Université Mentouri Constantine

## إهداء:

- ❖ إلى أمي الغالية أطال الله في عمرها وجازاها عني كل خير.
- ❖ إلى أبي العزيز حفظه الله ورعاه .
- ❖ إلى جميع إخوتي و أخواتي.
- ❖ إلى جميع الأهل والأقارب.
- ❖ إلى كل أصدقاء الدرب بالجامعة.
- ❖ إلى كل من ساعدني على إتمام هذا العمل.

أهدي هذا العمل...

عواطي رضا

## Remerciements

Le présent travail a été réalisé au niveau de département de physique à l'université de Mentouri Constantine, sous la direction de Monsieur Nouri Abdelkader.

Je tiens à adresser toute ma gratitude à Monsieur **AbdelKader Nouri**, Professeur à l'université de Mentouri Constantine, pour son encadrement durant deux années et pour tout les conseils qui m'apportés, malgré sa charge croissante de responsabilités.

Je remercie Monsieur **R. Halimi**, Professeur à l'université de Mentouri constantine, d'avoir accepté de juger mon travail en étant le président.

Je tiens à remercier Monsieur **K. Mirouh**, Maître de conférence et de la recherche scientifique à l'université de Mentouri constantine, d'avoir accepté de participer au jury de soutenance.

Je remercie également Monsieur **A. BENSLAMA**, Professeur à l'université de Mentouri constantine, d'avoir accepté de participer au jury de soutenance.

J'adresse mes remerciements à tous ceux qui ont contribué à faire avancer ce travail. Je remercie mes amis et mes collègues : Boukhmis, Sofiane, Hamza, Hocine..., pour l'aide qu'ils m'ont beaucoup apporté durant la réalisation de ce travail, et pour les moments passés ensemble au niveau de département, et au niveau de Zouaghi Sliman.

Je remercie également Monsieur H. Boumachrah, pour les touches et les points finals de ce travail, merci également à Abd El Ali pour sa contribution amicale dans ce travail.

Je tiens aussi à remercier toute ma famille, et d'une façon particulier mes parents, pour l'encouragement et le soutien moral et matériel, et à tous ceux qui m'ont aidé dans ce travail.

## Sommaire:

<u>Titre</u>	<u>Pages</u>
<b>Introduction générale</b> .....	<b>02</b>
<b><u>Chapitre I</u>: Notions et principes fondamentaux</b>	
I.1. Introduction.....	<b>05</b>
I.2. La cathodoluminescence (CL).....	<b>05</b>
I.2.1. Définition.....	<b>05</b>
I.2.2. Caractéristique et applications.....	<b>06</b>
I.2.3. Cathodoluminescence en champ proche optique.....	<b>08</b>
I.3. L'interaction électron matière.....	<b>08</b>
I.3.1. Introduction.....	<b>08</b>
I.3.2. Mécanismes physiques de l'interaction électron matière.....	<b>09</b>
I.3.2.1. Les diffusions élastiques.....	<b>09</b>
I.3.2.2. Les diffusions inélastiques.....	<b>10</b>
I.3.3. Parcours électronique.....	<b>11</b>
I.3.4. Volume de génération.....	<b>13</b>
I.3.5. Phénomène de génération de porteurs dans les sc.....	<b>14</b>
I.3.5.1. Energie de formation d'une paire électron-trou.....	<b>14</b>
I.3.6. Taux de génération total.....	<b>14</b>
I.3.7. Phénomène de recombinaison.....	<b>15</b>
I.3.7.1. Les processus de recombinaison.....	<b>16</b>
I.3.7.1.1. La recombinaison radiative.....	<b>16</b>
a. La luminescence intrinsèque (bande-bande).....	<b>16</b>
b. La luminescence extrinsèque (bande-niveau).....	<b>17</b>
I.3.7.1.2. La recombinaison non-radiative.....	<b>17</b>
a. La recombinaison par choc.....	<b>17</b>
b. La recombinaison plastique.....	<b>18</b>
I.3.7.1.3. La recombinaison excitonique.....	<b>18</b>
I.4. Les hétérostructures des matériaux sc.....	<b>18</b>
I.4.1. Les matériaux semiconducteurs III-V.....	<b>19</b>
I.4.1.1. Introduction.....	<b>19</b>

I.4.1.2. Structure cristallin.....	21
I.4.1.3. Structure des bandes d'énergie.....	22
I.4.2. Les hétérostructures.....	23
I.4.2.1. Les hétérostructures semiconducteur-semiconducteur.....	23
I.4.2.1.1. Diagramme de bande d'énergie.....	23
I.4.2.1.2. Le concept des puits, fils et boîtes quantiques.....	25
I.4.2.1.2.1. Les puits quantiques.....	26
I.4.2.1.2.2. Multipuits quantiques et superréseaux.....	29
I.4.2.1.3. Les propriétés électroniques d'hétérostructures.....	31
I.4.2.1.3.1. Niveaux d'énergie électronique dans un puits quantique.....	31
I.4.2.1.3.2. Niveaux d'énergie des trous.....	32
I.4.2.1.3.3. Le double puits quantique.....	32
I.4.2.1.4. Les propriétés optiques d'hétérostructures.....	33
I.4.2.1.4.1. Absorption.....	33
I.4.2.1.4.1.1. Transition intrabande.....	34
I.4.2.1.4.1.2. Transitions interbandes.....	35
I.4.2.1.5. Luminescence dans les hétérostructures.....	36
I.4.3. L'effets quantiques dans les hétérostructures.....	37
I.4.3.1. L'effet de confinement.....	38
I.4.4. Fabrication des hétérostructures.....	38
I.4.4.1. L'épitaxie par Jets moléculaires pour l'hétérostructures III-V.....	39
I.4.5. Les applications d'hétérostructures.....	40
I.4.5.1. La jonction p-n polarisée en direct (la diode).....	40
I.4.5.2. Structure MIS : effet tunnel et électroluminescence.....	41
I.4.5.3. Laser à cascade quantique.....	41
I.5. La Méthode Monte Carlo.....	43
I.5.1. Introduction.....	43
I.5.2. Simulation Monte Carlo (MC).....	43
I.5.2.1. Définition.....	43
I.5.2.2. Terminologie.....	44
I.5.3. Génération des nombres aléatoires.....	44
I.5.2.1. Méthode Congruentiel.....	44
I.5.2.2. Algorithme de décalage de Registre.....	45

I.5.2.3. Générateurs Traînés de Fibonacci.....	45
I.5.4. Applications de monte Carlo.....	46
I.5.4.1. Intégration Monte Carlo.....	46
I.5.4.2. La Marche Aléatoire.....	48
I.5.4.3. Interaction électron-matière.....	49
I.5.5. La Méthode Monte Carlo Quantique (QMC).....	51
I.6. Conclusion.....	52

## **Chapitre II : Modélisation**

II.1. Introduction.....	54
II.2. Générateur de nombres aléatoires.....	55
II.2.1. La fonction Ran.....	55
II.2.1.1. La définition de la fonction Ran.....	55
II.2.1.2. La syntaxe de la fonction Ran.....	56
II.3. Détails du modèle.....	56
II.3.1. Les bases physiques.....	57
II.3.2. Les étapes de calcul.....	61
II.3.2.1. Puits quantique perpendiculaire (AlAs/GaAs/AlAs).....	62
II.3.2.1.1. Trajectoire des électrons.....	62
II.3.2.1.2. Profondeur de pénétration.....	63
II.3.2.1.3. Profil de distribution.....	63
II.3.2.1.4. Calcul de signal CL.....	65
II.3.2.1.5. Organigramme.....	66
II.3.2.2. Multi puits quantiques parallèles.....	67
II.3.2.2.1. Trajectoire des électrons.....	67
II.3.2.2.2. Profondeur de pénétration.....	68
II.3.2.2.3. Calcul le nombre de paires ( $\Delta n_i$ ) généré.....	68
II.3.2.2.4. Calcule le signal cathodoluminescence.....	71
II.3.2.2.5. Organigramme.....	72
II.4. Conclusion.....	74

## **Chapitre III : Résultats et discussion**

III.1. Introduction.....	76
III.2. Trajectoire des électrons.....	76

III.3. La Profondeur de pénétration.....	78
III.3.1. Profondeur de pénétration pour AlAs et GaAs.....	78
III.3.2. Profondeur de pénétration pour AlAs/GaAs/AlAs.....	79
III.4. Profile de distribution.....	81
III.4.1. Influence de largeur du puits et de longueur de diffusion.....	81
III.5. Signal cathodoluminescence $I_{CL}$ .....	83
III.5.1. Signal cathodoluminescence dans le AlAs/GaAs/AlAs.....	83
III.5.1.1. Influence de largeur du puits quantique.....	84
III.5.1.2. Influence de longueur de diffusion.....	85
III.5.2. Signal CL dans une hétérostructure parallèle au faisceau.....	85
III.5.2.1. Influence de largeur du puits quantique.....	86
III.5.2.2. Influence de longueur de diffusion.....	87
III.5.2.3. Influence de l'énergie d'accélération.....	89
III.5.2.4. Comparaison avec l'expérimentale.....	91
III.6. Conclusion.....	93
<b>Conclusion générale.....</b>	<b>95</b>
<b>Références.....</b>	<b>97</b>
<b>Annexes</b>	

# **Introduction générale**

## **Introduction générale :**

Durant ces dernières années, la plupart des méthodes modernes d'analyse et de caractérisation des matériaux semiconducteurs prennent la voie de la microscopie électronique à balayage (MEB) sous ces différents modes de sortie. [52]

Cependant dans la caractérisation, la connaissance des propriétés électroniques et optiques est d'une importance majeure pour résoudre les problèmes posés par les matériaux micro-optoélectroniques, et semiconducteurs qui sont requis à l'industrie électronique et la nanotechnologie [52].

En effet, l'interaction électron-matière offre la possibilité de déterminer avec succès des informations quantitatives et qualitatives aux propos, des paramètres électriques et optiques des matériaux [9]. Comme l'étude de la nanostructure AlAs/GaAs/AlAs par la cathodoluminescence (CL) exige une bonne simulation fiable et exacte de signal CL, et comme la génération des paires  $e-h$  provient de la dissipation de l'énergie du faisceau d'électrons dans la matière, et puisque la diffusion des électrons se font d'une façon aléatoire nous avons choisi la méthode Monte Carlo (MC) comme méthode de simulation.

Le travail proposé dans ce sujet appartient au domaine de la physique numérique et simulation, le progrès réalisé dans le domaine de l'ordinateur a permis d'utiliser la méthode de Monte Carlo. Malgré les travaux réalisés dans le domaine de l'interaction électron-matière, il reste toujours quelques problèmes quand on prend le cas des hétérostructures ou les multicouches nanostructures, en particulier, la mauvaise résolution d'image CL à l'échelle nanométrique.

L'objectif général de notre travail est de calculer la profondeur de pénétration ainsi que le parcours électronique (la trajectoire des électrons) dans l'hétérostructure à puits quantique AlAs/GaAs/AlAs et leur variation en fonction de l'énergie d'accélération. On a également étudié l'intensité de signal cathodoluminescence  $I_{CL}$  dans la structure AlAs/GaAs/AlAs et la structure AlAs/GaAs/AlAs/GaAs/AlAs/GaAs/AlAs (les multipuits quantiques).

Ce présent travail est organisé en trois chapitres comme la suite :

**Premier chapitre :** étude des concepts de base de l'interaction électron-matière et les principes de la technique de cathodoluminescence CL, une étude bibliographique sur les hétérostructure à base de GaAs, AlAs, GaAlAs, qui sont utilisés comme des matériaux d'application, ensuite une description générale de la méthode Monte Carlo (MC).

**Deuxième chapitre :** contient le détail de notre modèle proposé, c'est l'intérêt essentiel de ce mémoire, où les bases physiques de calcul sont bien détaillés, avec des organigrammes qui sont les représentations synthétiques des diverses parties du programme Fortran.

**Troisième chapitre :** comporte les résultats du calcul de la trajectoire des électrons, la profondeur de pénétration  $R(E_0)$ , le profil de distribution et l'intensité  $CL(E_0)$  pour la structure AlAs/GaAs/AlAs (le diode laser). Dans la deuxième partie de ce chapitre nous avons calculés l'intensité de signal cathodoluminescence  $I_{CL}(X)$  pour l'hétérostructure à multipuits quantiques AlAs/GaAs/AlAs/GaAs/AlAs/GaAs/AlAs.

En fin, nous comparons notre modèle numérique avec l'expérience par l'ajustement des courbes théorique avec celles de l'expérience.

# **Chapitre I**

## **Notions et principes fondamentaux**

## **I.1. Introduction :**

L'étude de l'interaction des électrons avec la matière solide a débuté vers la fin de l'avant dernier siècle (Lenard 1895). Les premières théories, Bethe (1933) et (1938) s'intéressaient au domaine des hautes énergies [15]. Les divers phénomènes se produisant durant l'irradiation du solide par les électrons constituent la base des informations concernant la distribution spatiale et l'énergie de ce faisceau pénétrant. Une première tentative pour déduire cette distribution a été élaborée empiriquement par Makhov (1960) en se basant sur la théorie de Spencer (1955) qui était jusque là peut être la seule théorie complète de l'intensité du faisceau incident et de ces fluctuations [15].

Ce genre de modèle empirique est assez limité pour conduire à une approche globale. Dans le même domaine des énergies citées, Archad (1961) et la théorie des collisions élastique d'Everhart (1960). C'est qu'à partir de 1964 que Cosslett et Thomas publia des résultats sous une forme généralisée et collectives pour le domaine des énergies moyennes (5 à 50 keV) avec discussion des différentes théories et modèles de ceux qui les ont précédés.

L'approche théorique a fournit une description physique détaillée des phénomènes en question. En 1972, Kanaya et Okayama démontrèrent les limitations du modèle d'Archad en proposant leur modèle semi-empirique qui avait un domaine de validité assez large (10 à 1000keV) et qui pouvait être affiné afin d'apporter une approche globale du problème de l'interaction électron-matière [15].

## **I.2. La Cathodoluminescence (CL):**

### **I.2.1. Définition :**

La cathodoluminescence est le phénomène optique et électrique que l'on observe lorsqu'un faisceau d'électrons produit par un canon à électrons (par exemple un tube à rayons cathodiques) bombarde un échantillon en phosphore, conduisant à l'émission de lumière visible. L'application la plus répandue est l'écran de télévision (lorsque celui-ci est un tube à rayons cathodiques). En géologie, le microscope à cathodoluminescence est utilisé pour examiner des structures internes des échantillons géologiques, dans le but de déterminer, par exemple, l'histoire de la formation de la roche. En sciences des matériaux et dans la technologie des semi-conducteurs, la cathodoluminescence est produite soit dans un microscope à balayage électronique simple, soit dans un microscope à balayage électronique à transmission. Dans ce dernier cas, le faisceau d'électrons focalisés excitent l'échantillon de telle façon que la lumière émise provient d'une zone localisée. Cette lumière doit être collectée par un système optique comme un miroir elliptique. Une fibre optique alors transporte la lumière à

l'extérieur de l'instrument, où un monochromateur filtre la longueur d'onde désirée et l'on opère ensuite une mesure quantitative des photons avec un photomultiplicateur en synchronisme avec le balayage du faisceau d'électrons. On obtient ainsi une carte de l'activité optique de l'échantillon. Un microscope électronique avec un détecteur de cathodoluminescence est plus compliqué, plus cher, mais plus souple d'emploi et présente un grandissement plus élevé qu'un simple Microscope à cathodoluminescence.

Définissons maintenant en détail les processus responsable de la CL. La CL est l'émission de photons, du proche infrarouge à l'approche ultraviolette, consécutive à l'excitation par faisceau électronique ; C'est un phénomène de luminescence [26]. Il y a d'autres types de luminescence tels que la photoluminescence (excitation par des photons), l'électroluminescence (excitation par un champ électrique)...etc. Lorsqu'on excite un solide, celui-ci peut émettre des photons pour se désexciter. Les processus de désexcitation peuvent être classés en deux groupes : les actes thermiques et non thermiques. La luminescence est un processus non thermique (l'émission croît quand la température décroît contrairement aux processus thermiques).

De plus, l'émission peut avoir lieu dans un région où le solide est transparent, ce qui est à l'opposé de la loi de Kirchoff [6]. La luminescence fait aussi partie des rayonnements déséquilibrés, elle se caractérise par une durée finie dépassant les périodes d'oscillations lumineuses (contrairement aux processus Raman et Rayleigh) [6].

Les constants progrès en physique des matériaux requièrent l'utilisation, mais aussi le développement, d'outils et de techniques de plus performants permettant d'analyser leurs structures à une échelle toujours plus petite [6]. La résolution des dispositifs classiques de CL est généralement limitée par le domaine d'interaction électron-matière et la portée du transfert d'énergie au sein du matériau [5]. Aller au-delà de cette limite est en principe possible en détectant les phonons très localement par l'intermédiaire d'une pointe-sonde (champ proche optique) [6].

### **I.2.2. Caractéristique et applications :**

La CL est un puissant outil de caractérisation de la matière [28,4], permettant une observation des matériaux luminescents, associée à la Microscope électronique à balayage (MEB), la CL nous ouvre l'accès à de nombreuses informations chimiques. En effet, la durée de vie et la longueur d'onde de la luminescence sont fortement dépendent de la structure électronique qui est imputable à la composition chimique, à la structure du matériau, à un éventuel dopage ou à la présence d'impuretés. Ces différentes propriétés sont donc accessibles par le biais d'études spectroscopiques ou d'études dynamiques sur la dure de vie et permettent

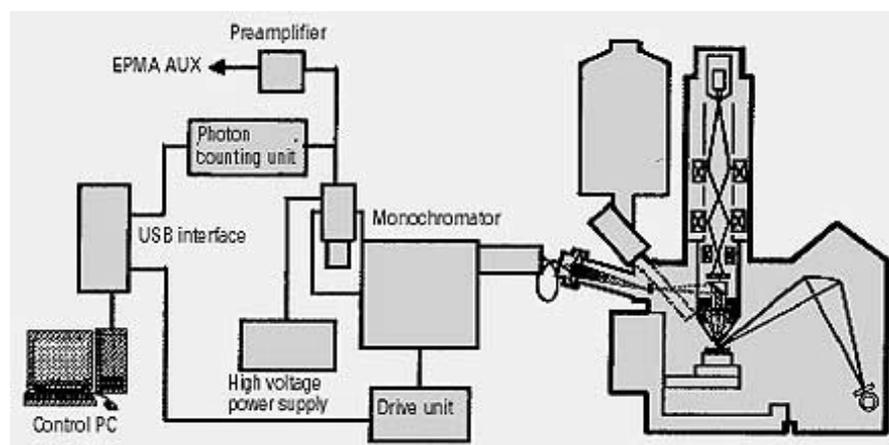
d'éteindre de informations quantitatives reliables au relevant des paramètres électroniques et optiques locaux du matériau comme la longueur de diffusion, le coefficient d'absorption [21] et la recombinaison vis-à-vis les défauts tels que les dislocations, surface libre [7]...etc.

La CL est une technique mise à la disposition autant des physiciens que des géologues [23,51] et des biologistes [8]. Il s'agit d'une technique qui possède un large éventail d'application. Cependant, les images de CL ne possèdent pas une bonne résolution latérale (quelques micromètres), parce que l'énergie déposée par le faisceau électronique se disperse au sein du matériau [5].

Les processus d'absorption et d'émission peuvent être séparés par des intervalles de temps assez longs. Cela signifie qu'entre l'absorption et l'émission il existe d'autres processus qui assurent le maintien durable de la lumière après cessation de l'excitation. La luminescence ne dépend pas de la nature de l'excitation qui lui a donné naissance mais les mécanismes de luminescence seront différemment excités suivant la nature de l'excitation, sélective (privilégier un mécanisme de luminescence) ou collective (tous les mécanismes possibles sont simultanément mis à contribution).

La CL est une technique très importante qui a un large domaine d'application. Elle est appliquée sur une grande variété d'instruments modernes basés sur les tubes cathodique comme par exemple : les oscilloscopes, les télévisions, les écrans fluorescent, l'appareillage utilisé comprend aussi une chambre d'observation, un canon à électron et un luminoscope, PC Le développement de la microscopie électronique donne à la CL comme une utilisation courante de microcaractérisation des matériaux luminescents.

La figure (I.1) illustre une présentation schématique de bloc d'appareillage utilisé dans la technique cathodoluminescence (CL).



**Fig.I.1.** présentation schématique d'appareillage CL.

Les travaux de la CL consacrés sur l'imagerie, c'est l'observation visuelle de la luminescence et la modélisation des image par la luminescence non dispersive de l'échantillon, cette observation permet de localiser des zones de rendement radiative différent [12,22,29]. Mais avant ces travaux Smith [31] a proposé des applications de la CL pour caractérisation des matériaux semiconducteurs.

### **I.2.3. Cathodoluminescence en champ proche optique :**

Les constants progrès en physique des matériaux requièrent l'utilisation, mais aussi le développement, d'outils et de techniques de plus en plus performants permettent d'analyser leurs structures à une échelle toujours plus petite. Dans ce but il y a un nouveau système d'imagerie de cathodoluminescence beaucoup plus performants en terme de résolution spatiale que les systèmes classiques actuels basés sur la détection des photons en champ lointain. La résolution des dispositifs classiques de cathodoluminescence est généralement limitée par le domaine d'interaction électron-matière et portée du transfert d'énergie au sein du matériau. Aller au-delà de cette limite est en principe possible en détectant les photons très localement par l'intermédiaire d'une pointe-sonde (champ proche optique). C'est sur principe un nouveau système de cathodoluminescence a été développé pour cela un microscope à force atomique (Atomic Force Microscope (AFM)) a été transformé en un microscope à champ proche optique (Scanning Near-field Optical Microscope (SNOM)), ça se fait par une association d'un microscope à force atomique (AFM) et un microscope électronique à balayage (MEB) équipé d'un canon à émission de champ. Grâce à ce dispositif, il est possible d'acquérir simultanément une image topographique (AFM), et une image de luminescence avec une résolution latérale d'un ordre de grandeur supérieur à celle des systèmes utilisés jusqu'alors [68].

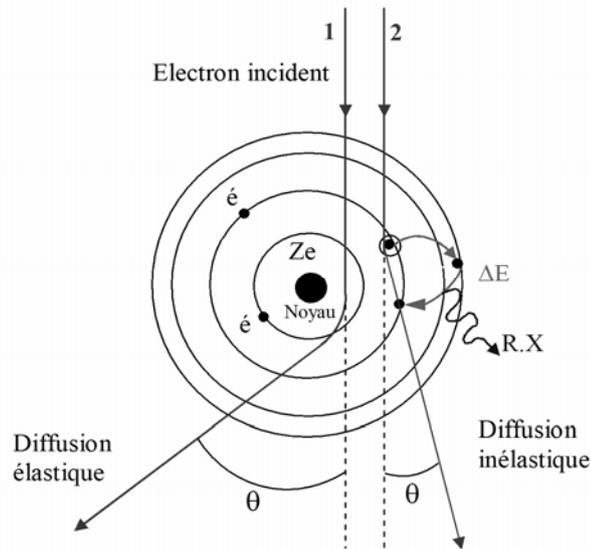
## **I.3. L'interaction électron matière :**

### **I.3.1. Introduction :**

Un microscope électronique à balayage permet une accélération des électrons dans un domaine d'énergie allant de 1 à 50 keV. Leur trajectoire dans la matière dépend de leur énergie et des propriétés physiques des matériaux. Les électrons qui pénètrent dans le matériau subissent des interactions électromagnétiques qui ont deux effets : une déviation de leur direction et une variation de leur énergie cinétique primaire [1].

### I.3.2. Mécanismes physiques de l'interaction électron matière :

Le bombardement d'un corps solide par un faisceau d'électrons donne naissance à divers phénomènes. D'un point de vue global on peut les diviser en deux volets, des dispersions élastiques et d'autres inélastiques (figure (I.2)).



**Fig.I.2.** Schéma illustrant les deux types de diffusion d'un faisceau d'électrons dans un cible solide

#### I.3.2.1. Les diffusions élastiques :

Les diffusions élastiques sont essentiellement des interactions coulombiennes avec les noyaux des atomes. Au cours de ces collisions, l'énergie cinétique des particules et leur quantité de mouvement sont conservées. Leur masse étant très supérieure à celles des électrons incidents, les noyaux qui induisent dans leur environnement immédiat un champ électrique très intense, peuvent faire subir à la direction de l'électron une variation allant jusqu'à un angle de 180 degrés [1].

Dans le cas d'interaction proche de surface, l'électron peut ressortir par la face avant du matériau. On dit qu'il est rétrodiffusé. La proportion et les énergies de tels électrons dépendent de leurs énergies primaires ainsi que des propriétés physiques du matériau considéré. Cependant, la majorité des électrons suivent leurs chemins sans trop s'approcher du noyau en raison de l'écrantage produit par les électrons atomiques [1].

L'énergie perdue par l'électron incident est transférée aux noyaux au cours de ce type de collision, peu donc être considérée comme négligeable, en vertu des rapports de masse des deux partenaires [1].

### I.3.2.2. Les diffusions inélastiques :

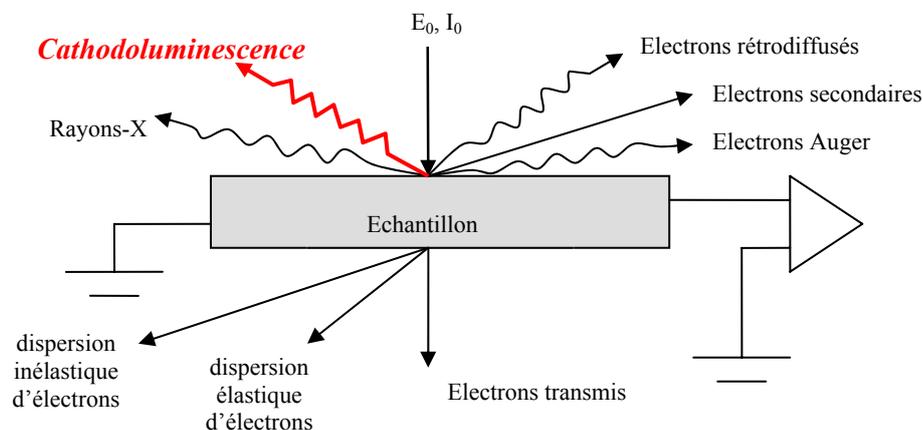
En revanche, les interactions inélastiques se font entre électrons incidents et électrons atomiques. Cependant, il faut distinguer les électrons du cœur et ceux des couches externes.

Les électrons du cœur sont très liés au noyau et leur excitation met en jeu une énergie supérieure à leur énergie de liaison. Sous l'impact de l'électron incident, ils subissent une transition vers un niveau inoccupé d'énergie plus élevée. L'électron incident voit alors son énergie cinétique diminuer. Le processus de désexcitation se produit immédiatement après et l'entité excitée restitue rapidement l'énergie qu'elle a acquise dans ce processus soit radiativement, soit par transfert à un électron externe ou à un électron interne de niveau plus élevée. Celui ci retombe au niveau du cœur inoccupé. L'excès d'énergie est libéré sous forme d'un rayonnement électromagnétique (rayon x) ou d'énergie cinétique à un autre électron atomique du cœur [1].

Dans le cas des semiconducteurs et des isolants, on assiste pour les électrons externes à une transition inter-bande et donc à la création d'une pair (é-h). Alors que dans un métal cette transition s'effectue au sein d'une même bande d'un état vers un autre état plus énergétique [1]. On peut conclure que la dispersion inélastique donne naissance à une grande variété de signaux utiles tel que : RX, l'émission d'électrons secondaires, l'effet Auger, la cathodoluminescence et les effets d'échauffement (Figure (I.3)).

Les deux types de collisions que nous venons de citer ainsi que les phénomènes qui les accompagnent sont responsables de la dissipation d'énergie de l'électron incident dans la matière qu'il traverse ainsi que la forme de sa trajectoire [1].

Afin d'expliquer la forme des fonctions génération et des parcours des électrons dans le matériau qui vont figurer à plusieurs reprises dans notre étude, nous nous contenons de rappeler brièvement, quelques aspects qualitatifs et quantitatifs du problème. Seuls la mécanique quantique permet de le résoudre correctement.



**Fig.I.3.** Mécanismes de dispersion des électrons incidents, (d'après A. Nouri 2000) [16]

### I.3.3. Parcours électronique :

Dans le cas des particules lourdes, dont les trajectoires dans la matière sont pratiquement rectilignes, la formule (I.6) donne directement l'énergie déposée dans le matériau en fonction de la profondeur. Par contre, les électrons incidents subissent des séries successives de dispersions élastiques et inélastiques dans le semiconducteur, et ont alors des trajectoires quelconques [1]. Leur profondeur de pénétration ( $R$ ) est donnée par plusieurs expressions générales de parcours électronique (qui décrit la profondeur de pénétration de l'électron dans l'échantillon) est donnée en fonction de l'énergie du faisceau incident  $E_0$  sous la forme suivante [15] :

$$R_e = \left( \frac{K}{\rho} \right) E_0^\alpha \quad (\text{I.1})$$

Où :

$\rho$  : la masse volumique du matériau.

$K, \alpha$  : sont des constantes dépendent du nombre atomique du matériau et aussi de  $E_0$ .

$E_0$  : est l'énergie du faisceau incident.

D'autres formules ont été également proposées par d'autres auteurs. En utilisant l'approximation du freinage continu et par intégration de la formule de pénétration de Bohr-Beth normalisée à l'énergie  $E$ , entre l'énergie initiale  $E$  et la valeur  $E=0$ , on obtient la pénétration de Bohr et Bethe notée  $R_B$  est donnée par l'expression suivante [3] :

$$R_B = \int_E^0 \frac{dE}{dE / (d \rho z)} \quad (\text{I.2})$$

$\rho$  : est la masse volumique du matériau considéré.

Grâce à cette méthode, Kyser (1972) propose l'expression du parcours électronique suivante [24] :

$$R_K = 2.56(E_0/30)^{1.68} \quad (\text{I.3})$$

$R$  : est exprimée en  $\text{mg}/\text{cm}^2$ .

$E_0$  : est exprimée en  $\text{KeV}$ .

Avant cette expression et en 1957, Les travaux de Grün concernant la dissipation de l'énergie des expression et l'aire l'ont conduit à un parcours donné par extrapolation de la partie linéaire de la fonction  $\Phi(u)$  (fonction de dissipation d'énergie) à zéro .Il trouve comme expression de  $R$  la relation suivante [3] :

$$R_G = 4.57 E_0^{1.75} \quad (\text{I.4})$$

$R_G$  : est exprimée en  $\text{g/cm}^3$ .

$E_0$  : est exprimée en  $\text{KeV}$ . ( $5 < E_0 < 25 \text{ KeV}$ ).

Et après en 1971, Everhart et Hoff proposent de part pour les matériaux qui ont un nombre atomique  $Z$  tel que  $10 < Z < 15$  et pour des énergies d'excitation  $E_0$  tel que  $5 < E_0 < 35 \text{ (KeV)}$  la relation suivante [20] :

$$R_{EH} (\mu\text{m}) = (0.0398 / \rho) E_0^{1.75} \quad (\text{I.5})$$

$\rho$  : est exprimé en  $\text{g/cm}^3$ .

$E_0$  : est exprimé en  $\text{KeV}$ .

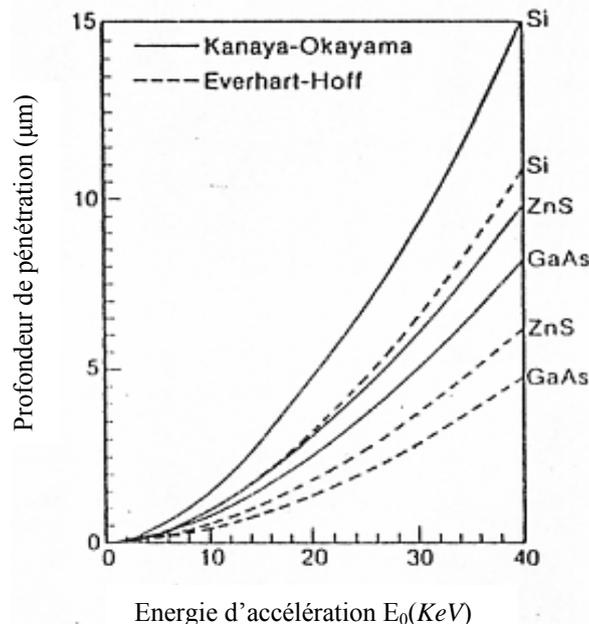
Une autre relation plus générale a été dérivée par Kanaya et Okayama en 1972 sous la forme suivante [18] :

$$R_{K-O} (\mu\text{m}) = \left( \frac{0.0276 A}{\rho Z^{0.889}} \right) E_0^{1.67} \quad (\text{I.6})$$

$E_0$  : est exprimée en  $\text{KeV}$

$A$  : est le poids atomique en  $\text{g/mol}$ ,  $\rho$  est en  $\text{g/cm}^3$ , et  $Z$  est le nombre atomique.

La figure (I.4) [25] montre une comparaison entre le parcours électronique calculé suivant le modèle de Everhart-hoff et modèle de Kanaya pour quelques matériaux.

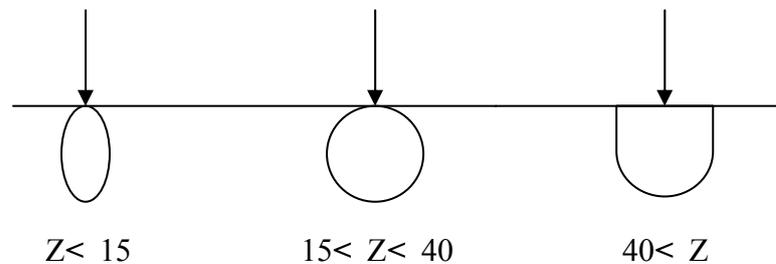


**Fig.I.4.** Profondeur de pénétration des électrons en fonction de  $E_0$  [25].

### I.3.4. Volume de génération :

Le volume de génération est le lieu de création des paires (é-h), il prend une forme qui dépend du nombre atomique du matériau ( $Z$ ) et de  $E_0$ .

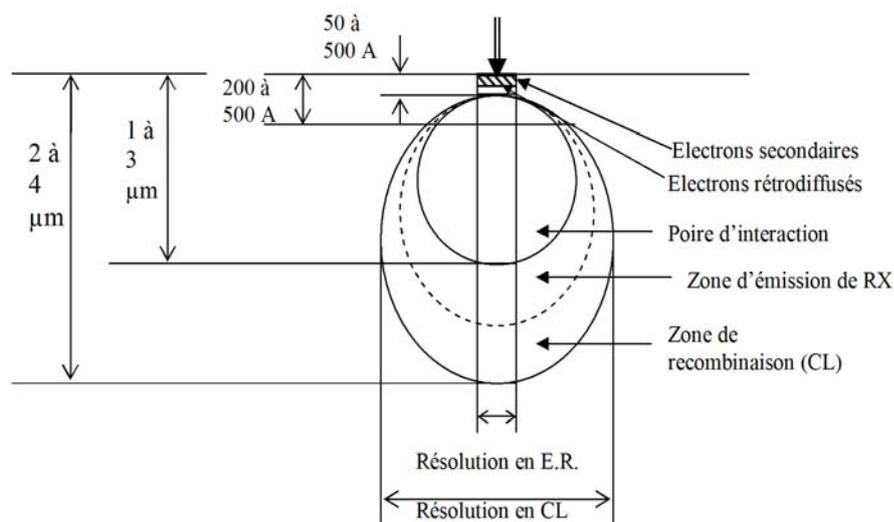
Suivant le model de Kanaya-Okayama [16], le volume de génération prend trois formes différentes, suivant la valeur de  $Z$  :



**Fig.I.5.** les forme de volume de génération d'après [16].

La résolution spatiale des différents phénomènes de l'interaction électron matière dans le volume de génération est montrée dans la figure (I.6) [16].

D'autre part l'interaction électron-matière est caractérisé par d'autres paramètres tels que l'énergie de formation de pair (é-h) et le taux de génération qui sont analysés dans les paragraphes suivantes.



**Fig.I.6.** La résolution spatiale des différents phénomènes dans le volume de génération [16].

### I.3.5. Phénomène de génération des porteurs dans les sc :

Les interactions du faisceau avec le matériau sont donc responsables de l'excitation et l'ionisation des atomes. Dans un semiconducteur, ces excitations conduisent, entre autre, à la formation de paires électron-trou.

On caractérise la réaction des porteurs dans les SC par un paramètre  $G'$  ( $\text{cm}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}$ ) (taux de génération) qui mesure le nombre des porteurs créés par unité de volume et unité de temps. Ce paramètre résulte de la contribution de deux types de génération de porteurs. Il existe d'une part les générations spontanées des porteurs due à l'agitation thermique que l'on caractérise par un paramètre  $G_{\text{th}}$  que nous appellerons taux de génération thermique, et il existe d'autre part les générations induites des porteurs qui résultent de l'excitation du SC par une source extérieure [15]. Ces générations peuvent résulter d'une excitation optique, d'une irradiation par des particules, d'un champ électrique intense ou d'une injection électrique. Ce type de génération est caractérisé par un paramètre  $G$  qui est spécifique du processus mis en jeu. Par contre, le paramètre  $G_{\text{th}}$  est spécifique de matériau [13].

Etudiant la détermination de la fonction de génération induite  $G(x,y,z)$  qui décrit la distribution des paires électron-trou dans le volume et qui correspond au nombre de paires créés par unité de volume et unité de temps ( $\text{cm}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}$ ). On peut traiter le problème en utilisant une fonction à une seule variable  $G(z)$  puisque le faisceau est normal à la surface de l'échantillon. Donc la résolution autour de l'axe du faisceau incident est symétrique dont on peut obtenir  $G(z)$  par projection de  $G(x,y,z)$  sur le plan XY [15] :

$$G(z) = \int_{xy} G(x, y, z) dx \cdot dy \quad (\text{I.7})$$

Mais pour déterminer cette fonction  $G(z)$  il est préférable de définir l'énergie de formation d'une paire électron-trou ( $E_{e-h}$ ) et le taux total de génération  $G$  [15].

#### I.3.5.1. Energie de formation d'une paire électron-trou :

Cette énergie est définie comme une énergie moyenne dissipée par paire (é-h) générée. Dans la plupart des cas elle est considérée comme l'énergie d'ionisation qui est donnée par la relation suivante [41].

$$E_i = 2.8E_g + M \quad (\text{I.8})$$

$0 < M < 1 \text{ eV}$  dépend du matériau et indépendant de l'énergie du faisceau  $E_0$ ,  $E_g$  est le gap.

### I.3.6. Taux de génération total :

Le taux de génération total  $G_0(\text{s}^{-1})$  est défini comme le nombre de paires électron-trou créés par unité de temps dans l'échantillon.

En connaissant l'énergie de création de paires(é-h)  $E_{e-h}$  et l'énergie effective perdue dans l'échantillon  $E_{eff}$  on peut calculer le taux de génération total qui s'exprime par [15] :

$$G = \frac{E_{eff}}{E_{e-h}} \quad (\text{I.9})$$

D'autre part  $E_{eff}$  est la différence entre l'énergie incidente de la totalité des électrons et l'énergie perdue par les électrons rétrodiffusés, elle s'écrit alors [15]

$$E_{eff} = N_0 E_0 (1 - f) \quad (\text{I.10})$$

$f$ : la fraction d'énergie rétrodiffusée.

$N_0$ : le nombre d'électrons incidents par unité de temps, exprimé [3] par

$$N_0 = \frac{I_0}{|e|}$$

$I_0$ : l'intensité du faisceau incident

$e$ : la charge d'électron

Finalement,  $G_0$  peut être exprimée par la relation suivante [3] :

$$G_0 = \frac{I_0 E_0}{|e| E_{e-h}} (1 - f) \quad (\text{I.11})$$

### I.3.7. Phénomène de recombinaison :

La recombinaison au sein d'un semiconducteur d'électrons et des trous libres s'effectue par l'un des deux mécanismes [14] :

- i) par transition d'un électron de la bande de conduction ( $E_c$ ) vers la bande de valence ( $E_v$ ) (recombinaison directe)
- ii) par intermédiaire de centres de recombinaison ; l'acte élémentaire de recombinaison comporte deux étapes successive ; tout d'abord l'électron (le trou) est capté par un centre localisé (dans la bande interdite), puis ce même centre capte le trou (l'électron) qui recombine avec le porteur initialement capté (recombinaison « indirecte »).

La contribution relative à ces deux mécanismes au processus de recombinaison dépend [14] :

- du rapport des probabilités des ces deux mécanismes.
- de la position en énergie des centres de recombinaison à l'intérieure de la bande interdite et de la concentration de ces centres.
- de la concentration de porteurs à l'équilibre.
- de la température.

### I.3.7.1. Les processus de recombinaison :

Selon le mécanisme de recombinaison et selon la forme sous laquelle est libérée l'énergie de porteur capté par le centre de recombinaison on distingue les processus suivant :

#### I.3.7.1.1. La recombinaison radiative :

Elle donne naissance à des photons. Elle a été étudiée en détail depuis 1953[34].

Le porteur à l'état d'équilibre du matériau, par recombinaison de l'électron avec le trou peut se faire d'une façon intrinsèque ou extrinsèque.

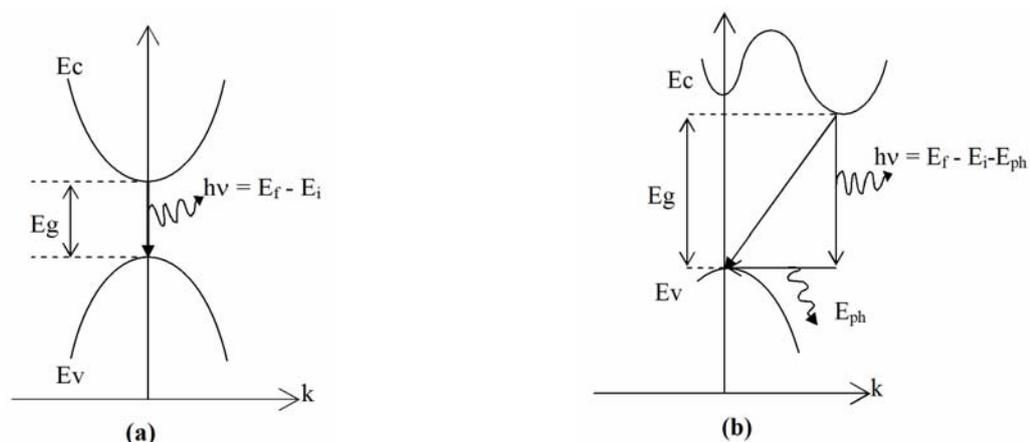
##### a. La luminescence intrinsèque (bande-bande) :

on distingue deux transitions

**i) Transition directe :** Dans ce cas, le minimum de la bande de conduction ( $E_c$ ) et le maximum de la bande de valence se trouvent au même vecteur d'onde  $k$ .

L'énergie de photon émis ( $h\nu$ ), dans ce cas, est égale (presque) à l'énergie du gap ( $E_g$ ) et la luminescence est dite intrinsèque (figure.I.6.a) [16]

**ii) Transition indirecte :** Dans ce cas, la transition n'est plus verticale, et par conséquent, la différence de quantité de mouvement entre les deux niveaux n'est pas négligeable. Pour satisfaire le principe de conservation des quantité de mouvement, il est nécessaire de faire intervenir une pseudo-particule, qui est le « phonon » de vecteur d'onde  $k_1$  (Figure.I.7.b). Il s'agit donc ici d'une interaction à trois particules dont la probabilité est plus faible. C'est ainsi que l'émission de luminescence dans les semiconducteurs à gap indirect est difficile à observer [16].



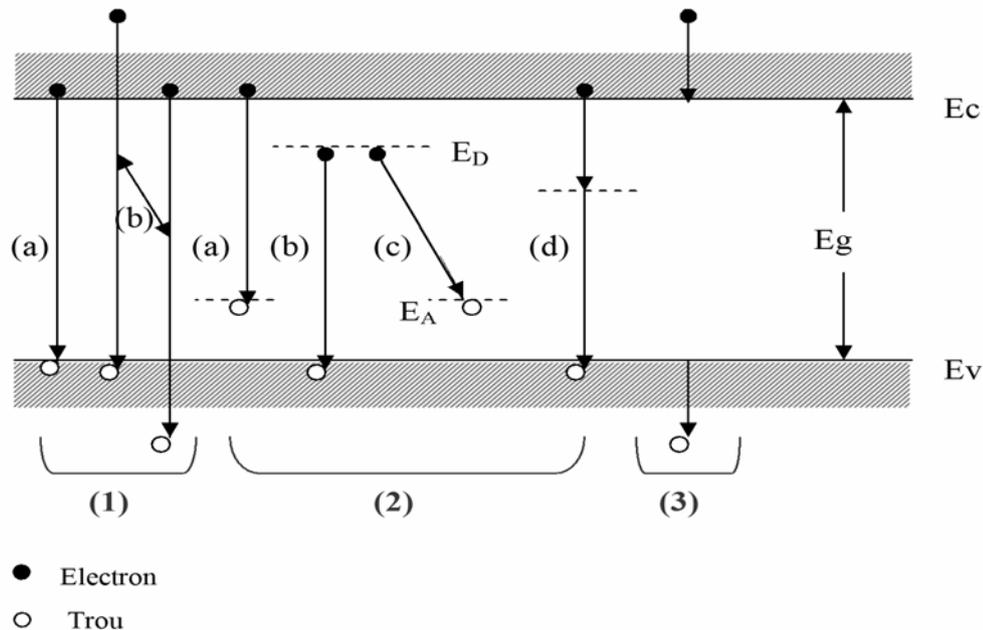
**Fig.I.7.** Les énergies de transition dans les semiconducteurs

(a) à gap directe (b) et gap indirect.

(Pour les transitions indirectes, la participation du phonon ( $E_{ph}$ ) est indispensable).

### b. La luminescence extrinsèque (bande-niveau) :

La luminescence extrinsèque est relative aux impuretés et défauts, la figure (I. 8) montre les différentes transitions possibles dans un SC.



**Fig.I.8.** Les différents transitions dans les sc [35].

(1) transition bande-bande. (a) : émission directe correspondant très étroitement à l'énergie du gap, où les phonons ou les excitons peuvent être impliqués, et (b) transition haut d'énergie impliquant les porteurs chauds.

(2) la transition impliquant les impuretés chimiques ou les défauts physiques, (a) bande de conduction à l'accepteur, (b) donneur au bande de valence, (c) bande de conduction à l'accepteur, (d) niveaux profonds.

(3) la transition entre niveaux profonds impliquant les porteurs chauds, parfois appelé l'émission de décélération.

#### I.3.7.1.2. La recombinaison non-radiative :

Les niveaux profonds dans le gap peuvent occasionner également des transitions non radiatives, et donne lieu indirectement à un contraste. Il existe plusieurs mécanismes de recombinaisons non-radiatives, à titre d'exemple :

**a. la recombinaison par choc :** est tel que l'énergie libérée dans l'acte de recombinaison est transmise à un troisième porteur qui la dissipe ensuite par interaction avec les vibrations du réseau. Selon (Scela et Burstein) [36], ce mécanisme de recombinaison peut jouer un rôle notable dans Ge, avec la particularité que les sections efficaces de capture des porteurs sont

proportionnelles aux concentrations de porteurs de charge. Mais, l'absence d'une dépendance de la section efficace de capture avec la concentration constatée par d'autres auteurs montre que tout au moins jusqu'à  $\approx 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ , la recombinaison par choc n'est pas le processus prédominant dans Ge.

**b. La recombinaison plastique :** est tel que l'énergie libéré est transmise aux oscillations du plasma de porteurs. Ce mécanisme de recombinaison n'est réalisable que dans des cristaux fortement dopés ( $n_0 \geq 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ ), mais à ce niveau de dopage, les sections efficaces de capture d'électrons (et de trou) peuvent atteindre  $10^{-13}$ - $10^{-15} \text{ cm}^2$  [34]

#### **I.3.7.1.3. La recombinaison excitonique :**

C'est le couplage qui se produit à basse température entre électron et trou pour donner une pseudo-particule « exciton libre ». Celui-ci peut être piégé sur une impureté « exciton piégé » en donnant naissance à de niveaux d'énergie bien définis dans le gap [14].

## I.4. Les hétérostructures des matériaux sc :

### I.4.1. Les matériaux semiconducteurs III-V :

#### I.4.1.1. Introduction :

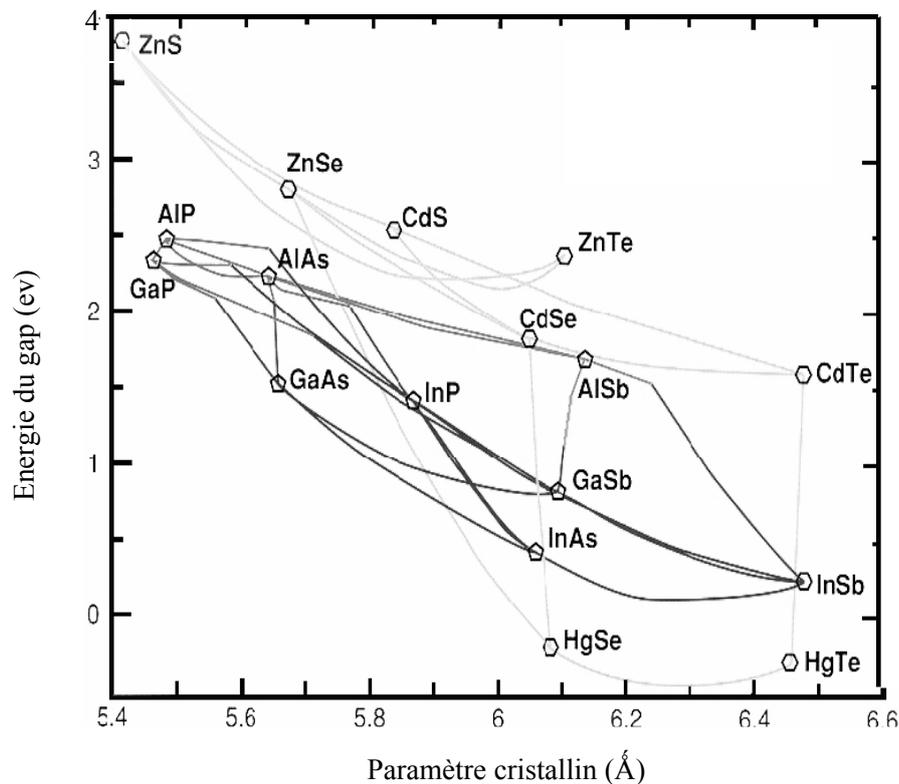
Les matériaux semiconducteurs III-V sont des corps composés formés à partir d'un élément de la 3<sup>ème</sup> colonne et d'un élément de la 5<sup>ème</sup> colonne de la classification périodique. Parmi tous les composés binaires possibles, tous n'ont pas le même intérêt potentiel. L'étude de leurs propriétés, et en particulier de la structure des bandes, montre que les éléments les plus légers donnent des composés à large bande interdite, dont les propriétés se rapprochent de celles des isolants, et à structure de bande interdite. Les composés incluant du bore, de l'aluminium, ou de l'azote, et le phosphore de gallium GaP entrent dans cette catégorie ; ils ont en général peu d'intérêt pour l'électronique rapide [63], qui demande des semiconducteurs à forte mobilité de porteurs, ou pour l'optoélectronique où une structure de bande directe est nécessaire pour que les transitions optiques soient efficaces [37]. A l'autre extrémité, les éléments lourds comme le thallium ou le bismuth donnent des composés à caractère métallique. On considérera donc essentiellement les composés à base de gallium (GaAs, GaSb), ou d'indium (InP, InAs, InSb), dont les propriétés sont les plus intéressantes. Le tableau (I.1) résume quelques paramètres pour différents matériaux de la famille III-V.

Composé III-V	$E_g$ (eV)	$\lambda_g$ ( $\mu\text{m}$ )	$m^*/m_0$	$a_0$ (Å)	Structure de la Bande interdite
AlAs	2,16	0,57		5,661	indirecte
AlSb	1,58	0,75	0,12	6,138	
Ga P	2,26	0,55	0,82	5,449	
GaAs	1,42	0,87	0,063	5,653	directe
GaSb	0,72	1,85		6,095	
In P	1,35	0,92	0,08	5,868	

**Tableau.I.1.** Paramètres caractéristiques pour les principaux composés III-V.

$\epsilon_g$  énergie de bande interdite ;  $\lambda_g$  longueur d'onde du seuil d'absorption ,  
 $m^*$  masse effective des électrons ;  $a_0$  paramètre de maille du cristal.

L'intérêt pratique des semiconducteurs III-V est encore considérablement renforcé par la possibilité de réaliser des alliages par substitution partielle de l'un des éléments par un autre élément de la même colonne. On sait par exemple obtenir des alliages ternaires du type  $Ga_xAl_{1-x}As$ , ou quaternaires comme  $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}$ . La figure (I.9) représente les variations de la largeur de bande interdite de l'alliage en fonction du paramètre cristallin, qui varie lui-même avec la composition. Ce diagramme montre qu'il est possible d'obtenir des matériaux dont la largeur de bande interdite, et donc les propriétés optiques, varient dans une large gamme.



**Fig.I.9.** Largeur de bande interdite en fonction du paramètre cristallin pour les alliages III-V et II-VI.

Par ailleurs, l'interface entre deux composés différents (hétérojonction), présente des propriétés spécifiques, par exemple la présence d'un gaz d'électrons bidimensionnel, que l'on peut mettre à profit dans la réalisation de composants performants. L'empilement de couches alternées très minces de deux composés différents peut également faire apparaître des effets quantiques (puits quantiques multiples), ou même une périodicité supplémentaire du réseau cristallin (super-réseaux).

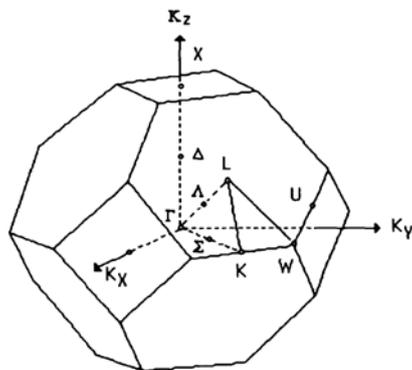
### I.4.1.2. Structure cristallin :

Les semiconducteurs III-V formés à partir de Al, Ga, ou In d'une part, P, As, ou Sb d'autre part ont tous une structure de type zinc-blende [38]. Leur réseau cristallin peut se décomposer en deux sous-réseaux cubiques à faces centrées interpénétrés, l'un étant constitué des atomes de l'élément III, l'autre des atomes de l'élément V (figure.I.10). Ces deux sous-réseaux sont décalés l'un par rapport à l'autre le long de la diagonale du cube, d'une quantité  $(a_0/4, a_0/4, a_0/4)$ ,  $a_0$  étant le paramètre cristallin, c'est-à-dire la longueur de l'arête du cube élémentaire. Chaque atome se trouve donc au centre d'un tétraèdre régulier dont les sommets sont occupés par un atome de l'autre espèce. La maille élémentaire, à partir de laquelle on peut reconstituer le cristal entier par un ensemble de translations, est formée par un atome de chaque type [39].



**Fig.I.10.** Réseau cristallin dans la structure zinc-blende.

Le réseau réciproque associé à la structure de type zinc-blende est cubique centré. Sa maille élémentaire, qui correspond à la première zone de Brillouin est représentée sur la figure (I.11) [40]. Elle présente un centre de symétrie  $\Gamma$  à l'origine ( $k=0$ ), et un certain nombre d'axes de symétrie : il existe trois axes équivalents  $\langle 100 \rangle$  coupant le bord de la zone de Brillouin aux points X, et quatre axes équivalents  $\langle 111 \rangle$ , avec les points correspondants L.



**Fig.I.11.** Première zone de Brillouin d'un réseau cubique à faces centrées.

### I.4.1.3. Structure des bandes d'énergie :

Le composé *GaAs* possède une bande interdite directe. La transition d'énergie minimale entre ses deux bandes peut avoir lieu sans changement de vecteur d'onde, ce qui permet l'absorption et l'émission de lumière de façon beaucoup plus efficace que dans les matériaux à gap indirect comme l'*AlAs*, figure (I.12).

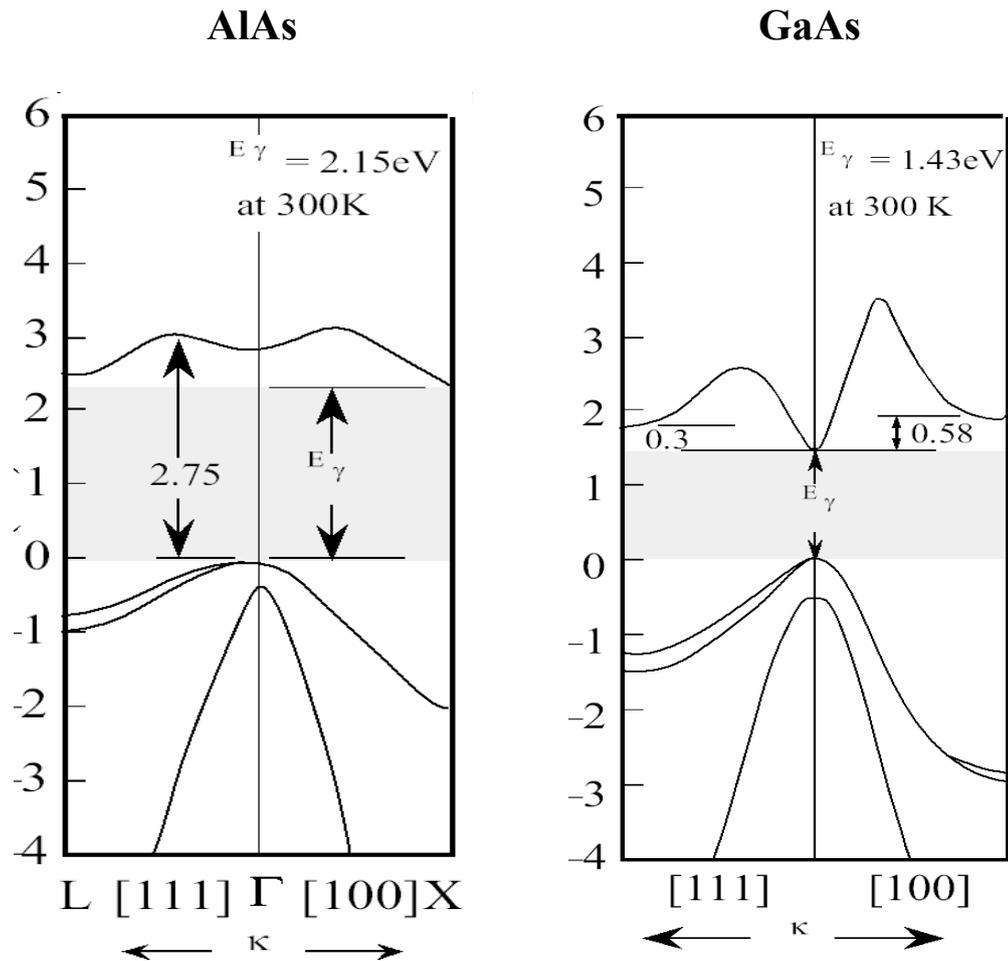


Fig.I.12. Structure de bande d'énergie du GaAs et d'AlAs [42].

## I.4.2. Les hétérostructures :

### I.4.2.1. Les hétérostructures semiconducteur-semiconducteur :

Une hétérostructure est une jonction formée par la juxtaposition de deux matériaux de natures différentes.

Les hétérostructures semiconducteur-semiconducteur sont généralement des hétéroépitaxies car les deux semiconducteurs mis en présence ont la même structure cristallographique (cubique faces centrées la plupart du temps) et un relatif accord de maille. Quand les deux semiconducteurs ont une conductivité du même type, l'hétérostructure est dite *isotype*. Dans le cas contraire elle est *anisotype*.

De nombreux composants à hétérostructure ont aujourd'hui produit industriellement, la plupart étant des composants GaAs/GaAlAs : diode laser à double hétérostructure, transistors bipolaires hétérojonction, diode laser à puits quantiques...[43].

#### I.4.2.1.1. Diagramme de bande d'énergie :

Lorsque deux semiconducteurs différents sont en contact, il apparaît une barrière de potentiel à l'interface, donnée par [43]:

$$E_b = e(\chi_1 - \chi_2) \quad (\text{I-12})$$

Où  $e\chi_1$  et  $e\chi_2$  représentent les affinités électroniques des semiconducteurs. La forme de cette barrière et le diagramme énergétique correspondant, est en outre fonction des gaps des semiconducteurs de leurs dopages respectifs.

Considérons deux semiconducteurs, par exemple *AlAs* et *GaAlAs*, caractérisés par les affinités électroniques  $e\chi_1$  et  $e\chi_2$  et l'énergie des gaps  $E_{F1}$  et  $E_{F2}$  et le niveau de Fermi à la bande de conduction. En l'absence de tout contact les diagrammes énergétiques dans chacun de semiconducteurs sont représentés sur la figure (I.13.a). Lorsque les deux semiconducteurs sont mis en contact, ils échangent des électrons de manière à aligner leurs niveaux de Fermi. Cette échange se fait au voisinage de la jonction et fait apparaître, comme dans la jonction p-n, une charge d'espace à laquelle est associée une barrière de potentielle (la tension de diffusion  $V_d$ ) qui arrête la diffusion des porteurs et définit l'état d'équilibre, le Schéma de bandes d'énergie d'hétérojonction *GaAlAs/AlAs* est représenté sur la figure (I.13.b).

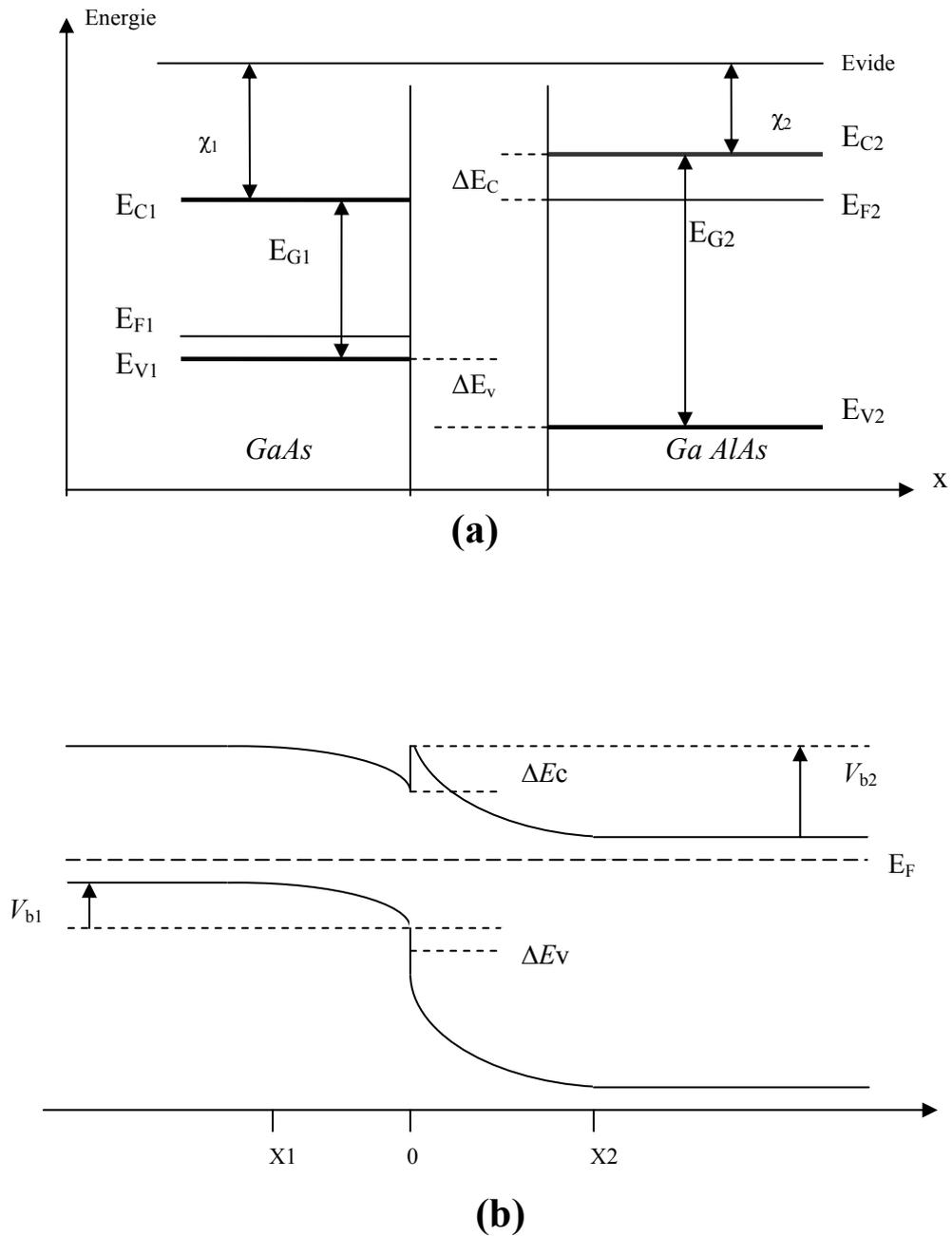
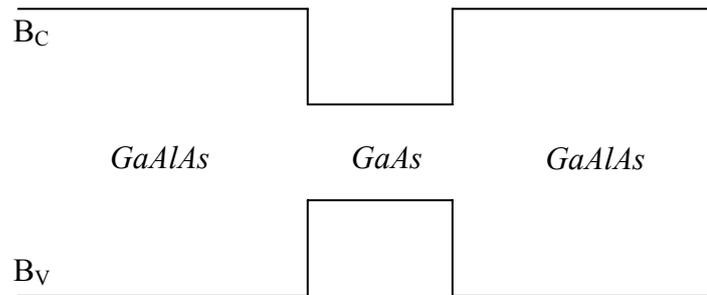


Fig.I.13 [43].

(a) Structure de bandes d'énergie pour *GaAs* et *GaAlAs*.

(b) Schéma de bandes d'énergie d'hétérojonction *GaAlAs/AlAs*.

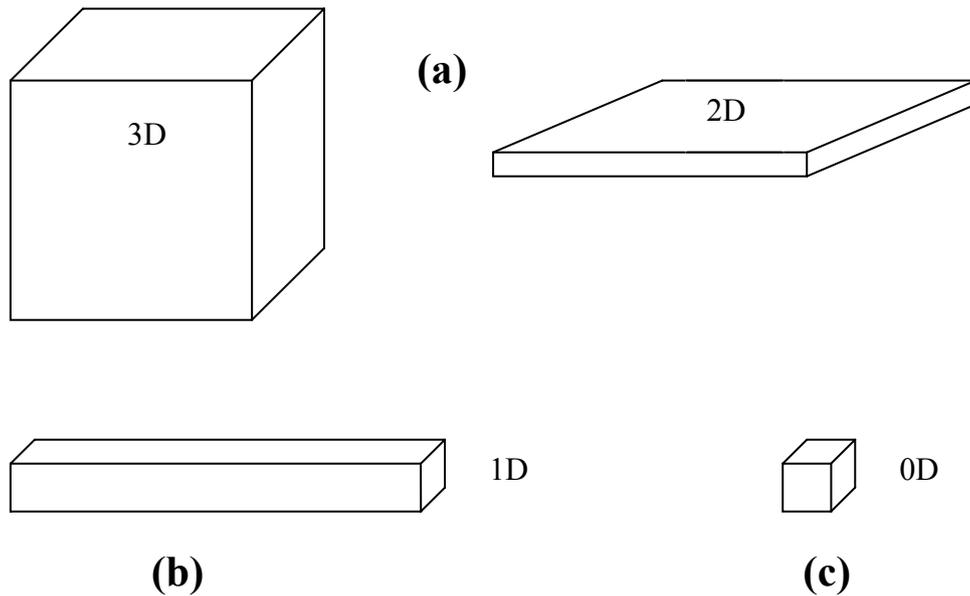
Pour simplifier les études théoriques, il est courant d'adopter en première approximation un schéma de bandes plates (figure I.14). Nous verrons que c'est le schéma de bandes classique retenu dans l'étude des lasers à puits quantique. Il existe plusieurs types de contacts semiconducteur-semiconducteur. Les valeurs de gap, de dopage et d'affinités électroniques déterminent la nature de contact entre les deux semiconducteurs.



**Fig.I.14.** Schéma de bandes d'un laser à puits quantique [43].

#### **I.4.2.1.2. Le concept des puits, fils et boîtes quantiques :**

Les méthodes de croissance de cristaux semiconducteurs par épitaxie, comme l'épitaxie par jet moléculaire (MBE, molecular beam epitaxy) ou le dépôt en phase vapeur à partir d'organométalliques (MOCVD, metal-organic chemical vapor deposition) permettent des dispositifs sur mesure dans lesquels les électrons sont confinés, dans une direction particulière, sur une très faible longueur. Pour cette direction particulière, les niveaux d'énergie sont discrets et bien séparés comme c'est le cas pour une particule confinée entre deux murs proches l'un de l'autre. Lorsque le confinement ne se fait que dans une dimension, alors que les deux autres dimensions ne sont pas contraintes sur de ces courtes longueurs, on a pratiquement un gaz bidimensionnel d'électrons ; on dit que l'on a un *puits quantique*. Si le confinement sur de très faibles longueurs se fait sur deux directions perpendiculaires, alors que la troisième direction n'a pas cette contrainte, on réalise un *fil quantique*. Enfin, une minuscule boîte à 3 dimension permet de créer une *boîte* ou *point quantique*. La figure (I.15) donne une représentation imagée des systèmes 3D, 2D, 1D et 0D, la notation nD signifiant qu'il y a n dimensions non confinées [44].



**Fig.I.15.**Représentation géométriques [44] :

- (a) 3D, 2D (puits quantique).
- (b) 1D (fil quantique).
- (c) 0D (point quantique).

#### I.4.2.1.2.1. Les puits quantiques :

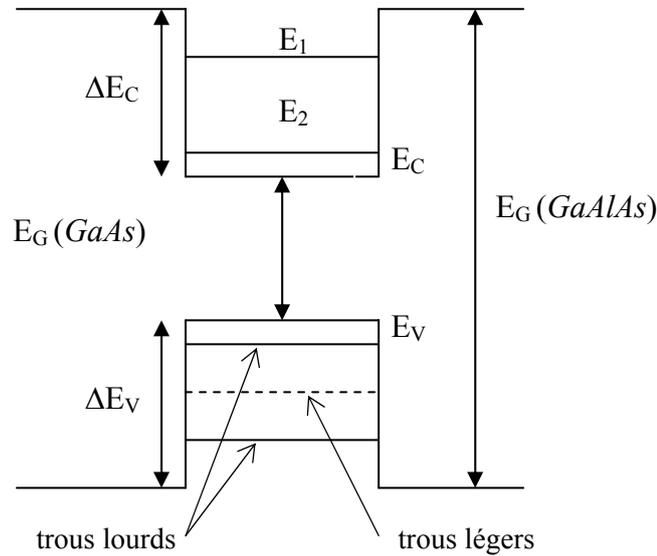
Considérons un puits quantique très simple constitué à partir de deux semiconducteurs : de  $GaAs$  et de  $Ga_{1-x}Al_xAs$  ( $x \approx 0,3-0,35$ ) non dopés. Cette valeur de  $x$  permet d'avoir une barrière importante pour l'hétérojonction tout en conservant un gap direct. Ce couple de semiconducteurs permet de créer des interfaces abritées et donc de réaliser des structures d'empilement assez complexes. Un puits quantique consiste en une structure de  $GaAs$ , de longueur  $a$ , prise en sandwich entre deux couches de  $Ga_{1-x}Al_xAs$  ; c'est donc un dispositif constitué de deux hétérojonctions. Ceci est illustré dans la figure (I.16).

Pour cet exemple, la transition est abrupte aux interfaces car les semiconducteurs ne sont pas dopés. S'ils l'étaient, les bandes seraient courbées aux interfaces.

Avec la supposition (dans ces exemple) :

- que la largeur  $a$  de puits est suffisamment grande ( $a \geq 20 \text{ \AA}$ ) pour que la couche de  $GaAs$  conserve les caractéristiques du cristal macroscopique de  $GaAs$ .

- qu'elle est suffisamment faible ( $a \leq 400 \text{ \AA}$ ) pour que  $a$  reste plus petit que le libre parcours moyen des électrons.
- que la masse effective des électrons et des trous sont les même dans le  $GaAs$  et dans le  $Ga_{1-x}Al_xAs$ .



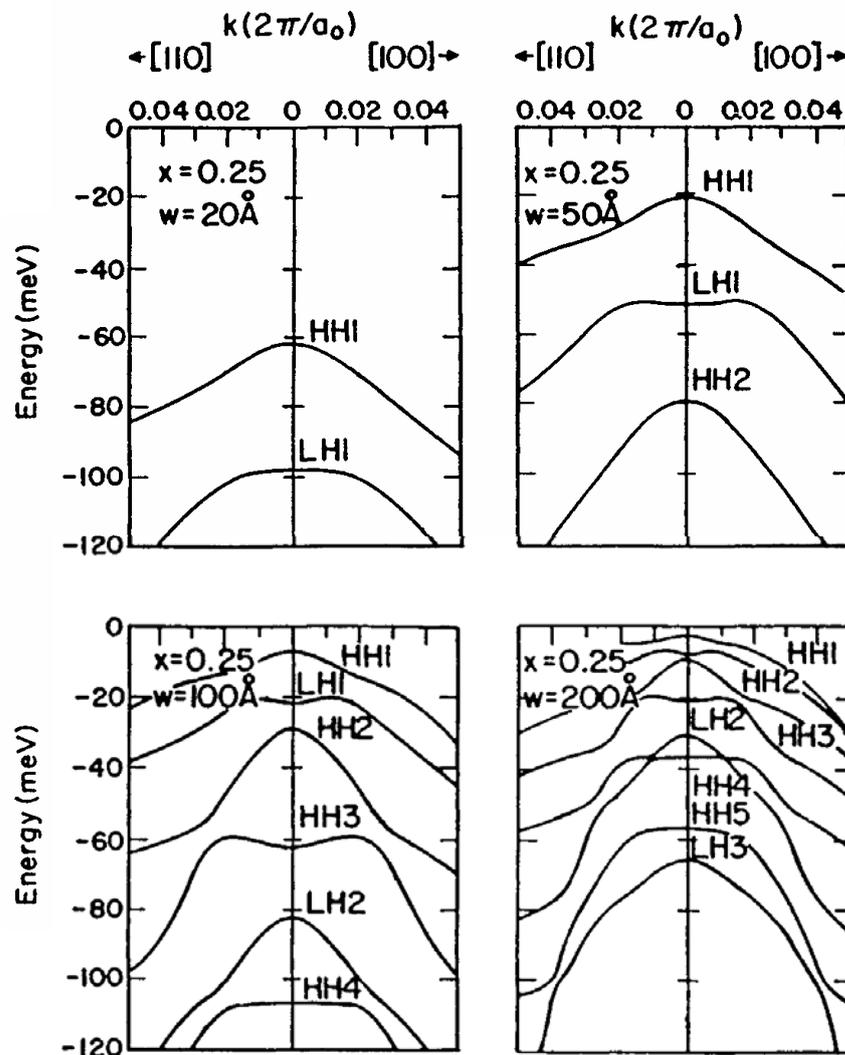
**Fig.I.16.** Schéma des bandes d'énergie d'un puits quantique [44].

Le puits quantique sera orienté de façon à ce que le confinement soit dans la direction  $z$  et que les interfaces soient parallèles au plan de coordonnées  $xy$ . L'énergie d'un électron dans la bande de conduction peut s'écrire sous la forme  $E_n + (\hbar k_{//})^2 / 2m^*$ , où  $k_{//} = k_x + k_y$  est le vecteur d'onde des électrons dans la direction  $xy$ . L'origine des énergies est prise au bas de la bande de conduction ( $E_C$ ). L'énergie  $E_n$  est dans l'approximation la plus simple, celle la particule de masse  $m^*$  confinée entre deux murs séparé par la distance  $a$ , ou, de manière plus exacte, celle d'une particule confinée dans un puits de potentiel, elle dépend du nombre quantique  $n$  qui est un entier ( $n=1,2,3,\dots$ ). Par conséquent, toutes les énergies de la bande de valence ne sont pas permises. La bande se décompose en sous bandes qui correspondent au différentes valeurs du nombre quantique  $n$ . Notons qu'il y a toujours au moins un niveau d'énergie dans le puits quel que soit sa largeur (dans les limites fixées plus haut) et la hauteur de la barrière. Par ailleurs, comme la hauteur des barrières de confinement est finie, la fonction d'onde de l'électron confinée dans le puits décroît à l'extérieur de celui-ci comme  $\exp[-(2m^*E/\hbar^2)l]$ , où  $E$  est mesuré à partir de  $E_C$  et  $l$  est la distance à l'extérieur du puits [44].

Ainsi, plus la masse effective est petite, plus la fonction d'onde électronique s'étend loin en dehors du puits.

Nous avons une situation analogue pour la bande de valence à ceci près que, pour le *GaAs*, nous avons deux bande de valence : celle des trous lourds et celle des trous légers. Pour chacune d'entre-elles, nous avons confinement des électrons dans la direction  $z$ , ce qui conduit à des niveaux d'énergie différents pour les trous lourds et pour les légers.

Dans la figure (I.17) nous avons représenté la structure de bande de valence d'hétérostructure *GaAs/Ga<sub>0.75</sub>Al<sub>0.25</sub>As* à puits quantique obtenue par la méthode (k.p) pour plusieurs largeurs de puits quantique.



**Fig.I.17.** la structure de la bande de valence de *GaAs/Ga<sub>0.75</sub>Al<sub>0.25</sub>As* à puits quantique pour différents largeurs de puits :  $w = 20, 50, 100, 200 \text{ \AA}$  [53].

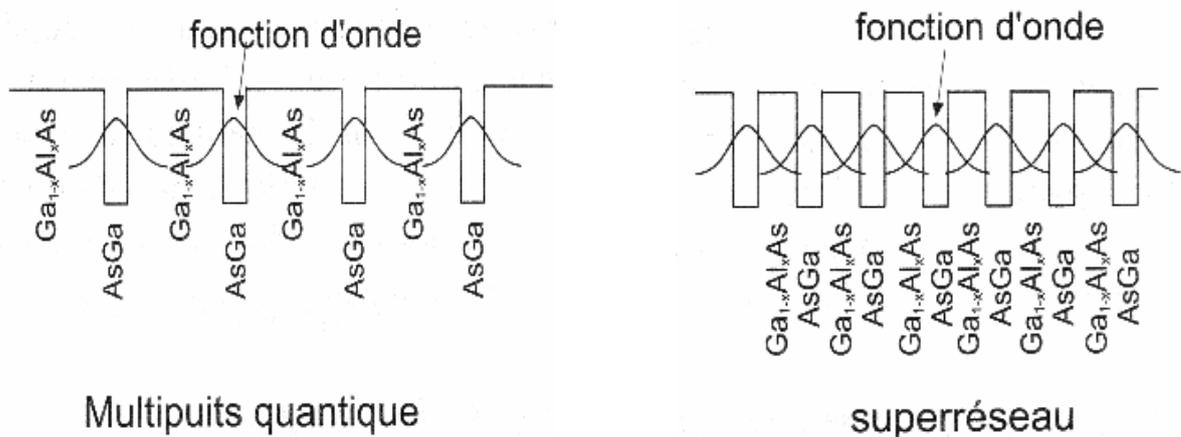
Le tableau (I.2) illustre les valeurs expérimentales de l'énergie de bande de valence et de conduction ( $\Delta E_c$  et  $\Delta E_v$ ) pour plusieurs hétérostructures.

hétérostructure	$\Delta E_c$ (eV)	$\Delta E_v$ (eV)
GaAs/AlAs	0.98	0.63
GaAs/Ga <sub>1-x</sub> Al <sub>x</sub> As (x<0.3)	0.75x	0.50x
InAs/GaAs	1.03	0.07
GaSb/AlSb/AlSb	1.26	0.3
HgTe/CdTe	1.56	0.35

**Tab.I.2.** Valeurs expérimentales de l'énergie de bande de valence et de conduction pour plusieurs hétérostructures [53].

#### I.4.2.1.2.2. Multipuits quantiques et superréseaux :

Un multipuits quantique est constitué d'une succession alternée de couches de deux semi-conducteurs, *GaAs* et *Ga<sub>1-x</sub>Al<sub>x</sub>As*, par exemple (figure I.18). Lorsque les couches intermédiaires de *Ga<sub>1-x</sub>Al<sub>x</sub>As* sont suffisamment épaisses (> 10nm) les fonction d'onde des électrons dans le puits de la bande de conduction de *GaAs* ne pénètrent pas suffisamment les barrières qui les confinement pour qu'il y ait un recouvrement appréciable avec la fonction d'onde en dehors du puits implique une localisation de l'électron dans le puits dans lequel il se trouve. On peut alors traiter une telle structure comme la superposition de puits quantiques et il n'apparaît aucun nouveau niveau d'énergie.



**FigI.18.** Schéma de bandes d'un multipuits quantique et d'un superréseau [44].

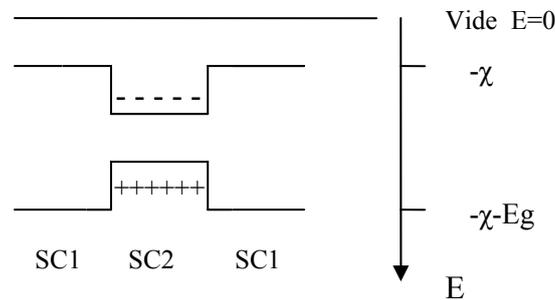
Si l'épaisseur de l'alliage  $Ga_{1-x}Al_xAs$  diminue dans la structure du multipuits quantique décrite ci-dessus, les fonctions d'ondes électroniques de chacun des puits de  $GaAs$  (figure I.18) se recouvrent et un électron peut être délocalisé sur l'ensemble de la structure. Cet état de chose ne doit pas nous surprendre. Nous avons un phénomène analogue à celui que nous avons vu pour un cristal dans lequel la présence d'une périodicité des d'atomes fait apparaître des bandes d'énergie et délocalise la fonction d'onde des électrons les moins liés sur tout le cristal. Pour cette raison, on appelle cette structure un *superréseau*.

Les multipuits quantiques et les superréseaux sont une succession de couches de semi-conducteurs  $A$  et  $B$ . Nous supposons que leurs gaps sont tels que  $E_g^{(A)} < E_g^{(B)}$ . Nous pourrions avoir, par exemple, de  $GaAs$  pour  $A$  et l'alliage ternaire  $Ga_{1-x}Al_xAs$  pour  $B$  [44].

### I.4.2.1.3. Les propriétés électroniques d'hétérostructures :

#### I.4.2.1.3.1. Niveaux d'énergie électronique dans un puits quantique :

Les hétérostructures de type I (Figure I.19) les plus étudiées concernent le couple GaAs/GaAlAs.



**Fig.I.19.** configuration des bandes de conduction et de valence dans une hétérostructure [43].

Nous allons maintenant uniquement nous intéresser aux hétérostructures de type I. Le niveau d'énergie de la bande de conduction peut être calculées à partir du modèle de la fonction enveloppe. En partant d'un modèle de Kane, la fonction d'onde d'un électron peut s'écrire [43]:

$$\Psi(r) = \sum_{n=1}^N \frac{1}{\sqrt{S}} e^{ik_{\parallel} r_{\parallel} u_c(r)} \chi_n(z)$$

où  $S$  représente l'aire de l'échantillon,  $k_{//} = (k_x, k_y)$  est vecteur bidimensionnel correspondant au mouvement de l'électron dans le plan de l'hétérostructure,  $u_c(r)$  une fonction de Bloch de la bande de conduction et  $N$  le nombre de niveaux considérés.

Ainsi,  $\Psi(r)$  est la somme d'un produit de fonctions variant rapidement,  $u_c(r)$ , car elles ont la périodicité du réseau cristallin, et de fonctions à variation lente, les fonctions enveloppes  $\chi_n(z)$ .

Les niveaux d'énergie dans le puits sont déterminés en résolvant l'équation aux valeurs propres :

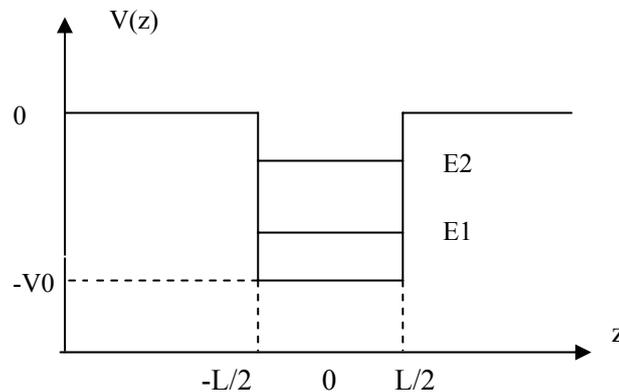
$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m^*(z)} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + V(z) \right] \chi_n(z) = E_n \chi_n(z)$$

où  $m^*(z)$  est la masse effective de l'électron, et  $V(z)$  l'énergie potentielle dans la structure à l'abscisse  $z$  (figure I.18).

$$\begin{aligned} V(z) &= 0 & \text{pour} & \quad z > L/2 \text{ ou } z < -L/2 \\ V(z) &= -V_0 & \text{pour} & \quad -L/2 < z < L/2 \end{aligned}$$

Les conditions aux limites qui permettent de résoudre complètement l'équation différentielle sont les suivantes :

$$\lim_{z \rightarrow \pm \infty} |\chi(z)| = 0, \quad \chi(z) \quad \text{et} \quad \frac{1}{m^*(z)} \frac{\partial \chi_n(z)}{\partial z} \quad \text{sont continus aux interfaces}$$



**Fig.I.20.** modèle de la boîte quantique pour un électron piégé dans un puits de potentiel idéal à 1 dimension [43].

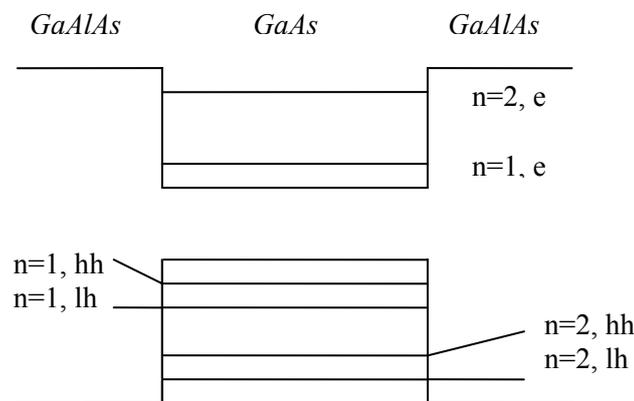
Le mouvement des électrons étant quasi libre dans le plan de l'hétérostructure, l'énergie totale d'un électron s'écrit [43] :

$$E = E_c + E_n + \frac{\hbar^2 k_{//}^2}{2m^*} \quad \text{(I-13)}$$

#### I.4.2.1.3.2. Niveaux d'énergie des trous :

Les transitions électroniques peuvent être des transitions :

- intrabandes, si elles sont internes à même bande d'énergie (bande de conduction ou de valence)
- interbandes, si l'état initial est dans la bande de conduction et l'état final dans la bande de valence. Ainsi, pour les hétérostructures de type I, dans le cas de transitions intrabandes interne à la bande de valence, ou dans celui des transitions interbandes, il est nécessaire de calculer les niveaux d'énergie de la bande de valence de puits quantique. Les niveaux d'énergies sont représentés dans la figure (I.21).



**Fig.I.21.** Niveaux d'énergie des électrons et des trous dans un puits quantique. lh est la dénomination pour trous légers et hh celle pour trous lourds [43].

Le problème de la détermination des niveaux d'énergie doit être résolu numériquement. Dans le cas d'un puits infiniment profond, une méthode analytique développée à partir des paramètres de Luttinger ( $\gamma_1, \gamma_2 = \gamma_3$ ) permet de déterminer les niveaux d'énergie des trous[43] :

$$E_{hh} = n^2 \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m_0 L^2} (\gamma_1 + \gamma_2) \quad \text{et} \quad E_{lh} = n^2 \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m_0 L^2} (\gamma_1 - \gamma_2) \quad (\text{I-14})$$

Où n est un entier supérieur ou égal à 1.

#### I.4.2.1.3.3. Le double puits quantique:

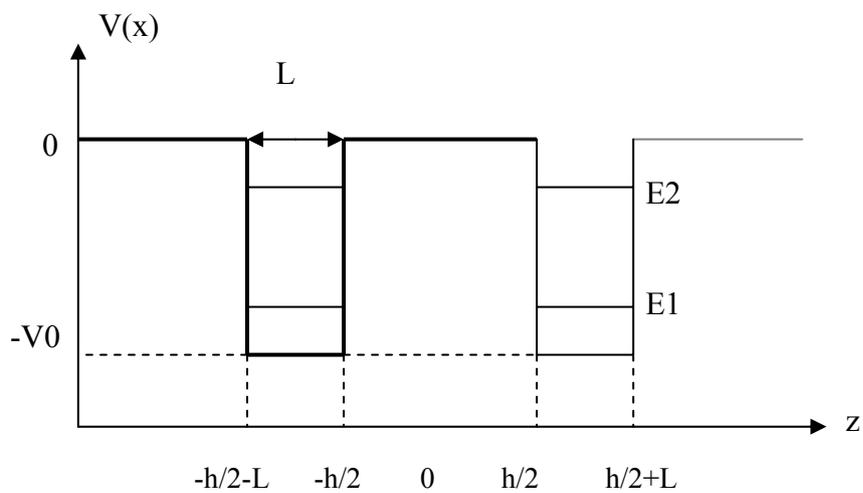
Considérons maintenant deux puits quantiques monodimensionnels équivalents. De hauteur  $V_0$  et de largeur  $L$ , séparés d'une distance  $h$ . pris isolément, chacun de ces puits possède  $n$  états propres. En fonction de la largeur du puits et de leur séparation, un électron présent dans l'un des puits peut traverser la barrière par effet tunnel et se retrouve dans l'autre puits (figure I-22). Ces deux puits sont couplés.

**Niveau d'énergie :**

L'hamiltonien du système s'écrit, si  $z_1 = -h/2 - L$  et  $z_2 = h/2 + L$  :

$$H = \frac{-\hbar^2}{2m^*} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + V_0(z - z_1) + V_0(z - z_2)$$

$$\text{Avec } V_0(z - z_i) = \begin{cases} 0 & \text{si } |z - z_i| \geq \frac{L}{2} \\ -V_0 & \text{si } |z - z_i| \leq \frac{L}{2} \end{cases} \quad i=1,2$$



**FigI.22.** Schéma énergétique de deux puits couplés [43].

**I.4.2.1.4. Les propriétés optiques d'hétérostructures :**

Les propriétés optiques des puits quantiques sont particulièrement attractives. En effet, les forces d'oscillateur, et par conséquent les intensités de luminescence, sont très élevées dans ces structures [43].

**I.4.2.1.4.1. Absorption :**

L'allure générale d'un spectre d'absorption, et l'intensité du coefficient d'absorption optique  $\alpha$ , diffèrent notablement si la structure considérée est :

- un puits quantique
- le volume du semiconducteur.

La détermination du spectre d'absorption optique découle d'un traitement physique de la probabilité de transition :

$$\Pi_{if} = \frac{1}{\hbar^2} \left| \langle f | H(t) | i \rangle \right|^2 F(l, \omega_{if} - \omega)$$

Où  $F(t, \omega_{if} - \omega) = \frac{\sin^2 \left[ (\omega_{if} - \omega) t / 2 \right]}{(\omega_{if} - \omega)^2}$ ,  $\hbar \omega_{if} = E_f - E_i$  et  $H(t)$  désigne

l'hamiltonien d'interaction électron-phonon décrit par son onde électromagnétique associée.

La transition électronique s'effectue entre les états initial,  $|i\rangle$  et final,  $|f\rangle$ . A partir de la probabilité de transition, on obtient le coefficient d'absorption optique  $\alpha$ , qui est lui proportionnel, c'est-à-dire :

$$\alpha(\omega) = \frac{4\pi^2 e^2}{ncm_0^2 \omega \Omega} \sum_{i,f} |e \cdot P_{if}|^2 \delta(E_f - E_i - \hbar \omega) \quad (\text{I-15})$$

Où  $e$  est le vecteur polarisation du champ électromagnétique.  $P_{if} = \langle i | p | f \rangle$  est l'élément de matrice dipolaire et le volume de l'échantillon.

La modification par rapport au traitement 3D classique intervient dans le choix des fonctions d'onde qui décrivent l'état initial et l'état final. Dans une hétérostructure celles-ci prennent la forme :

$$\Psi_i = \frac{1}{\sqrt{S}} u_{i,c,v}(r) e^{ik_{\parallel} \cdot r_{\parallel}} \chi_i(z)$$

C'est-à-dire le produit d'une fonction de Bloch par une fonction harmonique et par la fonction enveloppe qui décrit le mouvement de l'électron dans la direction  $z$ . Nous allons étudier séparément le cas d'une transition intrabande (ou inter sous-bande), et celui d'une transition interbande[43].

#### I.4.2.1.4.1.1. Transition intrabande :

Considérons le niveau fondamental  $E_1$ , occupé par  $n$  électrons par unité de surface, ces électrons peuvent être excités sur un état lié, c'est-à-dire à l'intérieur du puits, ou sur un état libre, c'est-à-dire au dessus du puits. Dans ce dernier cas les états forment un quasi continuum. Les électrons sont quasi libres et la fonction enveloppe s'écrit :

$$\chi_f(z) = \frac{1}{\sqrt{l}} \exp(ikz)$$

$l$  a la dimension d'une longueur dans la direction de l'axe  $z$  ( $l \gg L$ ). L'absorption a lieu dans le puits quantique, de largeur  $L$ , mais l'énergie électromagnétique est délocalisée sur une distance plus grande,  $l$  correspond, à ce phénomène d'extension spatiale.

Par conséquent, le coefficient d'absorption optique, dans le cas d'une transition intrabande de type niveau discret vers continuum, prend la forme :

$$\alpha(\omega) = \frac{8\pi e^2 n_e}{ncm^* l \omega} (k_0 L) \cos^2\left(\frac{k_0 L}{2}\right) \left[ \frac{1}{k_0 L + \pi} - \frac{1}{k_0 L - \pi} \right]^2$$

où  $k_0^2 = \frac{2m^*}{\hbar} (\hbar \omega - V_0 + E_i)$ . Remarquons que  $m^*$  a été substitué à  $m_0$  pour tenir compte des couplages entre sous bandes d'énergie.  $n_e$  est la densité surfacique d'électrons dans la sous bandes d'énergie  $E_1$ .

Considérons à présent une transition intrabande entre niveaux discrets, par exemple le niveau fondamental  $E_1$  et le premier niveau exciter  $E_2$ . Toujours dans l'approximation du puits infiniment profond, les fonctions d'onde des électrons s'écrivent :

$$\chi_f(z) = \chi_2(z) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{2\pi z}{L}\right)$$

Le coefficient d'absorption optique associé à la transition du niveau 1(fondamental) vers le niveau 2 (1<sup>o</sup> état excité), a la forme d'un Dirac :

$$\alpha(\omega) = \frac{256\pi^2 e^2 \hbar^2}{9nc(m^*)^2 L^2 \omega l} (n_1 - n_2) \delta[E_2 - E_1 - \hbar \omega] \quad (\text{I-16})$$

$n_1$  et  $n_2$  représentent les densités des porteurs sur les niveaux correspondants. Par exemple, dans le cas de *GaAs*, si  $n_1 - n_2 = 10^{11} \text{ cm}^{-1}$  et  $l = 1 \mu\text{m}$ ,  $\alpha \sim 1000 \text{ cm}^{-1}$  [43].

#### I.4.2.1.4.1.2. Transitions interbandes :

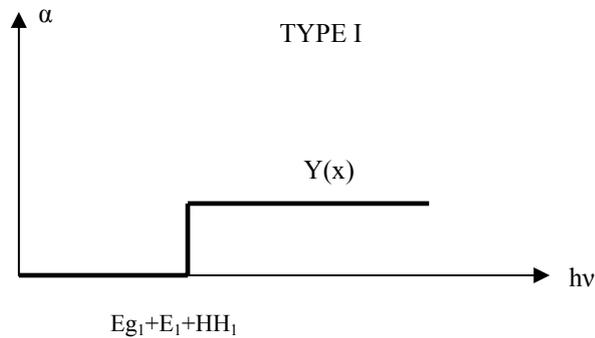
Le calcul de coefficient d'absorption optique dans le cas d'une transition interbande est très complexe. En effet, les courbes de dispersion des sous bandes de valence dans le plan de la structure sont très compliquées. D'autre part, il est nécessaire de faire la distinction entre les hétérostructures de type I et de type II. Dans le premier cas les électrons et les trous sont spatialement localisés à la même abscisse et dans l'autre cas les porteurs sont spatialement isolés.

Nous ne démontrons pas les expressions du coefficient d'absorption optique données ci-dessous. Elles ont obtenues dans le cadre de modèles très simplifiés.

Ainsi dans le cas d'une hétérostructure de type I, si  $E_g$  est le gap du semiconducteur dans lequel s'effectue les transitions :

$$\alpha \propto Y[\hbar \omega - E_{g1} - E_n - HH_m]$$

Dans cette expression  $Y$  est la fonction escalier. Le coefficient d'absorption optique a la même forme d'écriture dans le cas d'une sous bande de trous légers (LH) [43].



**Fig.I.23.** Spectre d'absorption optique schématisé pour une transition  $HH_1-E_1$ , dans un puits quantique de type I.

#### I.4.2.1.5. Luminescence dans les hétérostructures :

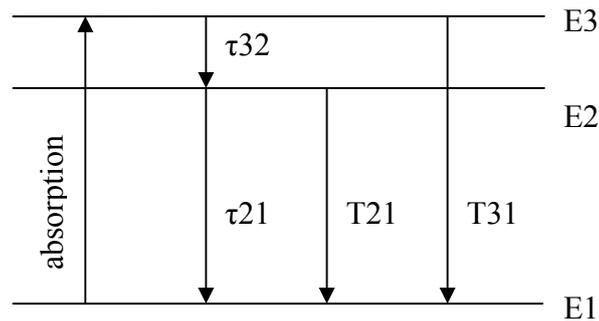
L'émission spontanée résulte d'un processus de recombinaison électron-trou. Dans les systèmes bidimensionnels les effets excitoniques sont très importants, même à température ambiante. Ainsi, les recombinaisons de type excitonique seront très fréquentes dans les hétérostructures. La principale différence entre un spectre de luminescence issu d'une recombinaison entre niveaux d'énergie et d'une recombinaison excitonique est un léger décalage de Stokes. Toutefois, ce décalage de Stokes vers les basses énergies est très faible, inférieur à  $10 \text{ meV}$ . S'il est supérieur à cette valeur, la désexcitation radiative fait intervenir des défauts (donneurs ou accepteurs). En fait, cette luminescence d'origine extrinsèque, qui fait intervenir des défauts, est courante dans les systèmes bidimensionnels, même dans *GaAs-GaAlAs* qui reste le couple de matériaux le mieux maîtrisé actuellement.

Si on ne tiend pas compte de ces particularités (excitons, défauts), la recombinaison dans les puits quantiques, ou les superréseaux peut être appréhendée, en première approximation, comme la recombinaison électronique dans les ions des métaux de transition ou de terres rares, comme le montre la figure (I.23). Les recombinaisons peuvent être radiatives ou non radiatives (émission phononique, capture par des centres profonds, effet Auger...). Ces différents mécanismes sont gouvernés par des durées de vie. Ces durées de vie sont généralement de l'ordre de  $10^{-10} \text{ s}$ . Le spectre de photoluminescence est obtenu en résolvant les équations aux populations. Par exemple, pour le système décrit figure (I-24) :

$$\frac{dn_3}{dt} = g_3(t) - \frac{n_3}{\tau_{32}} - \frac{n_3}{T_{31}} \quad (\text{I-17})$$

$$\frac{dn_2}{dt} = \frac{n_3}{\tau_{32}} - \frac{n_2}{\tau_{21}} - \frac{n_2}{T_{21}}$$

où  $g_3(t)$  représente la vitesse de création de porteurs sur le niveau 3,  $\tau$  les durées de vie des processus non radiatifs et  $T$  les durées de vie des processus radiatifs[43].

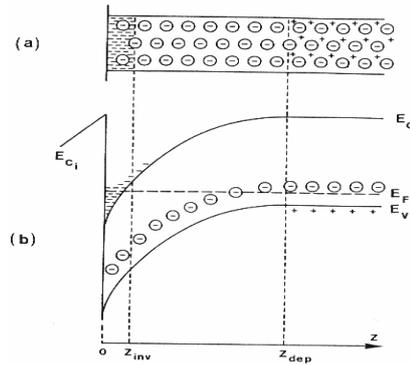


**Fig.I.24.** Recombinaisons radiatives dans une hétérostructure à 3 niveaux.

#### I.4.3. L'effets quantiques dans les hétérostructures :

L'étude des hétérostructures a montré que la région voisine de l'interface entre deux matériaux, pouvait être le siège d'une grande densité de porteurs libres, fonction de la nature des matériaux et de la polarisation de la structure, ces porteurs libre sont localisés au voisinage de l'interface, dans un puits de potentiel très étroit, représenté dans le diagramme énergétique par la courbure des bandes de valence et de conduction. La courbe représentée sur la figure (I.24). Examinons maintenant le mouvement des électrons dans ce puits de potentiel de quelques dizaines d'Angströms d'épaisseur.

Considérons tout d'abord la représentation corpusculaire des électrons dans le semiconducteur. Ces électrons sont des particules de masse effective  $m_e$  animées d'un mouvement brownien caractérisé par un libre parcours moyen  $Ln = v_{th} \tau_c$  où  $v_{th}$  est vitesse thermique des porteurs et  $\tau_c$  leur temps de collision. A la température ambiante  $v_{th} \approx 10^7$  cm/s et  $\tau_c \approx 10^{-13}$  à  $10^{-12}$  s, ce qui donne  $Ln = 10$  à  $100$  nm. Comparons  $z_{inv}$  et  $Ln$ . la largeur du puits de potentiel est inférieure au libre parcours moyen des électrons. Ces électrons se comportent alors comme des particules libres dans un puits de potentiel, leur mouvement et conditionné par les réflexions sur les faces du puits, leurs états d'énergie sont quantifiés [45].



**Fig.I.25.** Distributions spatiale (a) et énergétique (b) de la charge d'espace dans le semiconducteur hétérostructure [45].

Les effets de réduction de dimensions peuvent se manifester sur le mouvement des électrons soit parce que la zone active du composant a des dimensions réduites, longitudinalement et/ou transversalement, soit parce que cette zone active est subdivisée en régions dans lesquelles le mouvement des électrons est confiné dans une ou plusieurs directions [45].

#### I.4.3.1. L'effet de Confinement :

L'effet de confinement est apparaît lorsque le matériau est structuré dans une, deux ou les trois directions à une échelle de l'ordre de  $1/k$ , où  $k$  est le vecteur d'onde des électrons étudiés. Ces échelles sont plus faciles à atteindre dans les semiconducteurs ( $1/k_F \geq 10$  nm) que dans les métaux ( $1/k_F \approx$  fraction de nm). Ces effets de confinement sont mis en évidence directement dans des mesures de spectroscopie, ils sont même utilisés dans des composants comme les lasers à semiconducteurs [52].

#### I.4.4. Fabrication des hétérostructures :

Les techniques modernes de croissance de cristaux semiconducteurs, qui sont l'épitaxie par jet moléculaire MEB (Molecular Beam Epitaxy) et le dépôt de phase vapeur à partir d'organométalliques MOCVD (Metal-Organic Chemical Vapour Deposition), permettent de réaliser des couches monocristallines avec une maîtrise exceptionnelle de la composition chimique, des quantités, cristallographiques et de l'épaisseur. Ces techniques permettent, à partir des éléments constitutifs d'un matériau, de déposer ce matériau sur un substrat convenablement choisi, pratiquement couche atomique par couche atomique. Les très faibles vitesses de croissance que l'on peut mettre en œuvre permettent de réaliser des hétérostructures constituées par la juxtaposition de couches de matériaux différents et/ou différemment dopés, avec des profils de composition et/ou de dopage extrêmement abrupts. La discontinuité d'une couche à l'autre s'étant typiquement sur une épaisseur de l'ordre de la monocouche atomique [45].

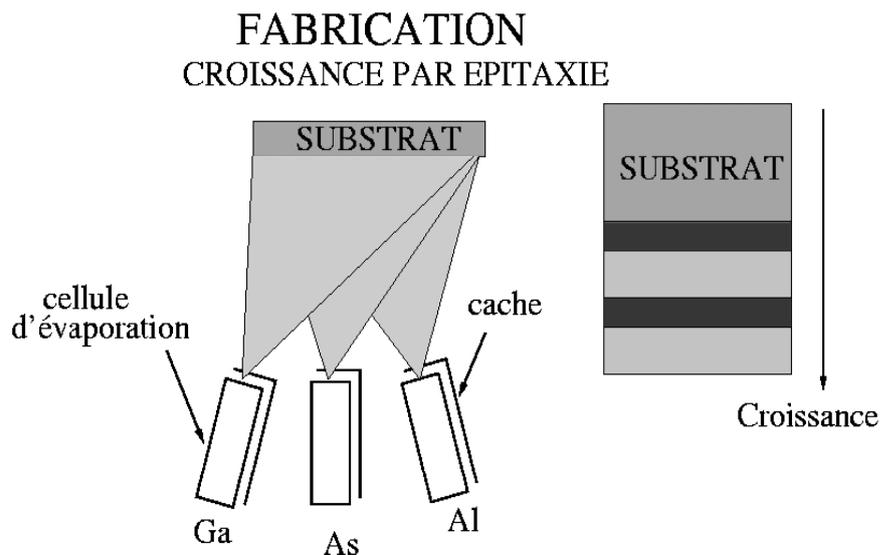
La condition nécessaire à la réalisation d'une bonne hétéro-épitaxie d'un semiconducteur SC1 sur un semiconducteur SC2 est évidemment que les deux matériaux aient d'une part la même structure cristalline et d'autre part des paramètres de maille voisins. Si les structures cristallines sont différentes, le dépôt est généralement amorphe ou dans le meilleur des cas polycristallin. Si les paramètres de maille sont différents, le matériau constituant la couche de plus grande épaisseur impose sa maille à l'autre, au moins de voisinage de l'interface.

Ceci entraîne l'existence, dans le matériau de faible épaisseur, d'une contrainte biaxiale dans le plan de la couche. Si les couches sont d'épaisseurs comparables, la contrainte est répartie dans les deux matériaux. Dans l'un comme l'autre des cas précédents, on dit que la hétérostructure est contrainte. Si les paramètres de maille sont trop différents, les contraintes sont telles que la densité de dislocations dans la structure devient rédhibitoire.

Différents types de semiconducteurs, tels que les composés III-V et leurs alliages respectifs, peuvent être épitaxiés les uns sur les autres pour former différents types de hétérostructures. Les hétérostructures les plus simples sont d'une part les hétérojonctions entre deux semiconducteurs différents, et d'autre part les structures Schottky ou MIS [45].

#### I.4.4.1. L'épitaxie par Jets moléculaires pour les hétérostructures III-V :

L'épitaxie par jets moléculaires (EJM) a été développée dans les années 1970 aux États-Unis aux laboratoires Bell. La croissance s'effectue sous ultravide (pression résiduelle de  $5 \cdot 10^{-10}$  torr), sur un substrat monocristallin porté en température, où interagissent les flux atomiques ou moléculaires des éléments constituant les matériaux à épitaxier (I.26).



**Fig.I.27.** Schéma de principe d'une croissance en EJM [52].

Les flux atomiques ou moléculaires proviennent de la sublimation (évaporation) d'éléments appropriés. Le flux d'arsenic est constitué de molécules tétramères d'As<sub>4</sub> et les flux d'éléments III sont atomiques. Les températures des éléments et du substrat sont choisies selon la méthode des trois températures régie par les conditions:  $T_V < T_{\text{substrat}} < T_{\text{III}}$ .

En résumé, les caractéristiques de la croissance en EJM sont les suivantes:

- La vitesse de croissance d'environ une monocouche par seconde permet de contrôler l'épaisseur des différentes couches d'une hétérostructure au plan atomique près.
- Le flux de chacun des éléments peut être interrompu par l'interposition en une fraction de seconde d'un cache devant la cellule d'effusion. Ceci permet la réalisation d'interfaces extrêmement abruptes.
- La température de croissance est assez basse pour éviter les phénomènes d'interdiffusion en volume au cours de la croissance, entre les différents alliages constituant l'hétérostructure. En particulier, une diffusion des éléments dopants est ainsi évitée.
- L'ultra-vide nécessaire pour la croissance par EJM est compatible avec la méthode d'analyse in situ par diffraction RHEED. La technologie ultravide permet aussi la connexion du réacteur EJM à des chambres d'analyse de surface telle que l'effet Auger, l'XPS, le STM ou les chambres de dépôt d'oxydes ou de traitements plasma [52].

#### **I.4.5. Les applications d'hétérostructures :**

Les hétérostructures possèdent un large domaine d'application surtout avec l'évolution technologique d'actuel, nous allons citer succinctement quelques applications.

##### **I.4.5.1. La jonction p-n polarisée en direct (la diode):**

La diode électroluminescente, ou LED (Light Emitting Diode), est une jonction p-n polarisée en direct, et réalisée à partir de semiconducteurs dans lesquels les recombinaisons des porteurs excédentaires sont essentiellement radiatives. Plusieurs possibilités de recombinaison s'offrent aux trous et aux électrons qui traversent la zone de charge d'espace :

- 1- recombinaison dans les zones neutres n ou p.
- 2- recombinaison dans le volume de la zone de charge d'espace. Elle peut être le fait d'une recombinaison bande à bande ou d'une recombinaison d'un porteur sur des défauts, c'est-à-dire sur des niveaux profonds situés dans la bande interdite.
- 3- recombinaison sur des défauts situés en surface de la zone de charge d'espace. En fait, les deux derniers processus ont une importance mineure car la zone de charge d'espace est très étroite, dans la mesure où les dopages sont très importants et la jonction généralement fortement polarisée dans le sens direct. Ainsi, la plupart des recombinaisons radiatives

s'effectuent dans ces zones neutres  $n$  ou  $p$ . Elles dépendent de la densité de porteurs injectés dans ces zones et de leur longueur de diffusion. Les taux d'injections sont définis par  $\gamma_n$  et  $\gamma_p$ , respectivement pour les électrons et les trous [43].

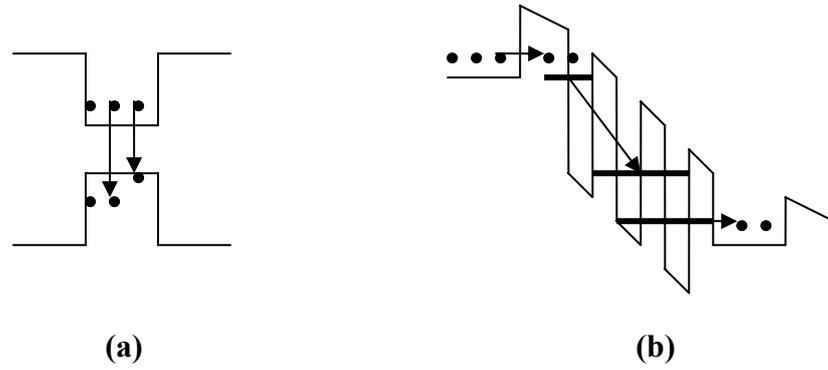
#### **I.4.5.2. Structure MIS : effet tunnel et électroluminescence :**

Une structure MIS à effet tunnel est constituée d'une fine couche isolante, de quelques dizaines d'Å d'épaisseur, séparant le substrat semiconducteur d'une électrode métallique. Si le métal est porté à une tension positive suffisante des électrons de ma bande de valence peuvent franchir par effet tunnel la barrière isolante, ce qui correspond à une injection de trous dans la bande de valence du semiconducteur. Ce trou peut se recombiner avec un électron de la bande de conduction [43].

#### **I.4.5.3. Laser à cascade quantique :**

Le laser à puits quantique est un laser semiconducteur utilisant un seul type de porteur, basé sur deux phénomènes fondamentaux de la mécanique quantique ; l'effet tunnel et le confinement quantique [10]. Bien que le, le laser à cascade quantique, ou laser QC, est basé sur une proche complètement différente ,par rapport au diode laser classique, dans un laser QC les électrons font des transitions entre des états liés, créés par confinement quantique dans des couches alternées ultraminces de matériaux semiconducteurs (figure.I.27). Comme ces couches ultraminces, appelées puits quantiques, ont des tailles comparables à la longueur d'onde de Broglie de l'électron, elles restreignent son mouvement dans la direction perpendiculaire au plan des couches. A cause de cet effet, appelé confinement quantique, l'électron ne peut passer d'un état d'énergie à l'autre que par pas discrets, en émettant des photons de lumière. L'espacement entre les états dépend de la largeur du puit, et augmente quand la taille du puit diminue.

De façon imagée, ce laser est libéré de ' l'esclavage de la bande interdite' i.e. la longueur d'onde d'émission dépend maintenant des épaisseurs des couches, pas de la bande interdite des matériaux qui les constituent. Cela a permis la réalisation de lasers avec des longueurs d'onde d'émission de 3.5 à 24  $\mu\text{m}$  en utilisant les mêmes semiconducteur de base (InGaAs crus sur InP), ainsi que la réalisation de laser émettent dans l'infrarouge lointain dans le système de matériaux GaAs/AlGaAs [9].



**Fig.I.28.** Représentation schématique d'un :(a)laser interbande (laser classique), (b) et d'un laser à cascade quantique (laser intersousbande).

Concernant la physique, ce nouveau dispositif soulève de très intéressants problèmes :

- Importance relative des différents mécanismes non-radiatifs (photons optiques, effet Auger, intersousbande).
- Modèle de l'élargissement des états (qui donnera la limite ultime des performances).
- Rôle des effets collectifs.
- Distribution d'énergie des électrons.
- Lasers à cascade quantique basés sur des îlots quantiques.
- Possibilité d'utiliser les matériaux Si/SiGe (laser semiconducteur à base de silicium).

## **I.5. La Méthode Monte Carlo :**

### **I.5.1. Introduction :**

Bien souvent, les problèmes scientifiques conduisent à l'évaluation d'intégrales ou de somme ainsi qu'à la résolution d'équations différentielles ou intégrales.

En générale les calculs analytiques exactes des intégrales ne sont pas réalisables directement. De même les sommes doivent parfois être effectuées sur un nombre de temps trop important pour espérer les comptabiliser. On fait alors appel à des méthodes d'approximation. Parmi les plus couramment utilisées, on retrouve les méthodes classiques d'analyse numérique. Efficaces en une dimension, ces techniques s'avèrent rapidement sans intérêt dès que la dimension augmente. Or le nombre de variables pour certains problèmes est très grand et peut même s'avérer si important que les progrès envisageables du calcul informatique ne seront probablement jamais suffisants pour rendre ces techniques intéressantes.

Dans cette optique, une méthode de simulation statique, méthode dite de « Monte Carlo », est très prometteuse puisque sa vitesse de convergence est indépendante de la dimension du problème posé. En revanche elle fournisse non pas la solution numérique du problème, mais un intervalle de confiance la contenant avec une probabilité donnée.

### **I.5.2. Simulation Monte Carlo (MC):**

Un nombre très grand des problèmes différents entrent dans cette catégorie.

L'amélioration de l'exactitude des résultats de Monte Carlo (MC) est non simplement possible en principe mais également dans la pratique !

#### **I.5.2.1. Définition :**

Dans le sens plus large, la simulation de MC signifie n'importe quelle simulation (ce n'est pas nécessairement une simulation sur ordinateur) qui utilise les nombres aléatoires dans l'algorithme de simulation [47].

Les méthodes de MC, bien qu'utilisées depuis fort longtemps, ont pris une importance croissante depuis leur mise en œuvre par Von Neumann, Ulam et Metropolis à la fin de la seconde guerre mondiale dans le but d'étudier les processus de diffusion (la simulation des réactions nucléaires). Ces méthodes se prêtent bien à la modélisation de tel processus dans la mesure où elle possède un caractère purement stochastique.

L'idée d'employer l'aspect aléatoire pour obtenir une réponse à un problème scientifique est réellement beaucoup plus ancienne que des ordinateurs.

Ces méthodes donnent un cadre de résolution numérique très général, sans contraintes théoriques et un cadre pour évaluer l'incertitude liée aux résultats. C'est pourquoi elles sont appliquées à une grande variées de problèmes.

Les deux principaux types de problèmes efficacement traités par la méthode de MC sont les calculs d'intégrales, et les problèmes de diffusion et collision : Ceci est rendu possible par la propriété essentielle de pouvoir simuler des distributions de grandeurs aléatoires.

### **I.5.2.2. Terminologie :**

Le terme «MC» est réellement extrêmement large, et il y a beaucoup de chevauchement.

Le terme « Monte Carlo » vient en effet des casinos célèbres à Monte Carlo. Quand l'étude des méthodes de MC est devenue très sérieuse dans les années 40 et les années 50, quelqu'un a pensé à la similarité d'employer des nombres aléatoires à l'aspect aléatoire dans les jeux à casino, et appelé la méthode ensuite [48].

Un autre terme étroitement lié est la simulation stochastique, qui signifie la même chose que simulation MC. Quoique stochastique semble être une limite plus descriptive, depuis les chances des échecs sont beaucoup plus petits, la raison pour laquelle MC est répandue plus largement.

Pour donner un exemple concret, les simulations de la dynamique moléculaires (DM) (en revient sur cette méthode dans un proche paragraphe) qui décrivent l'atomistique soyer en principe complètement déterministe en nature. Mais dans la pratique, on emploie souvent des nombres aléatoires dans (MD) aussi bien, les vitesses initiales d'atome sont habituellement indiquées aléatoirement, ainsi ceci apporte un caractère à MC[48].

### **I.5.3. Génération des nombres aléatoires :**

Nous avons vu que la méthode Monte Carlo est basée sur l'utilisation des nombres aléatoires, C'est-à-dire tirés au sort. L'outil de base de la génération de nombre aléatoires en général consiste en une séquence de nombres aléatoires indépendants et identiquement distribués selon la loi uniforme sur l'intervalle [0,1] :  $g_i \rightarrow U(0,1)$ .

Plusieurs méthodes numérique on été utilisées pour générer des nombres aléatoires, qu'on va détailler quelques uns.

#### **I.5.3.1. Méthode Congruentiel :**

Une méthode simple est populaire pour produire des suites de nombres aléatoires est la méthode multiplicative ou congruentiel. Ici, un multiplicateur fixe C est choisi avec un germe donné  $X_0$  et des nombres suivants sont produits par multiplication simple [30,54] :

$$X_n = (C.X_{n-1} + a_0) \text{MOD}(N_{ax}) \quad (\text{I.21})$$

Où  $X_n$  est un nombre entier entre 0 et  $N_{\max}$ . Il est important que la valeur du multiplicateur soit choisie pour avoir 'de bonnes' propriété, des divers choix ont été employés dans le passé. En

outre, la meilleure exécution obtenue quand le nombre aléatoire initial  $X_0$  est impaire. L'expérience a prouvé que le générateur congruentiel d'un 'bon' algorithme congruentiel linéaire est de 32 bits (le GONG) [30,55,56].

$$X_n = (16807 \cdot X_{n-1}) \pmod{2^{31} - 1} \quad (\text{I.22})$$

### I.5.3.2. Algorithme de décalage de Registre :

Une méthode rapide qui a été présentée pour éliminer certains problèmes avec les corrélations qui avaient été découvertes avec une méthode congruentiel est le décalage de registre ou l'algorithme de Tausworthe (Kirkpatrick et Stoll, 1981) [30]. Une table des nombres aléatoires est d'abord produite un nouveau nombre aléatoire est produit en combinant deux nombres existants à partir de la table :

$$X_n = X_{n-p} \text{ XOR } X_{n-q} \quad (\text{I.23})$$

Là où  $p$  et  $q$  doivent être correctement choisis si la séquence doit avoir de bonnes propriétés. Le XOR est l'opérateur au niveau du bit exclusif - OR.

Les meilleurs choix des paires  $(p, q)$  sont déterminés par les trinômes primitifs donnés par :

$$X^p + X^q + 1 = \text{primitif} \quad (\text{I.24})$$

### I.5.3.3. Générateurs Traînés de Fibonacci :

L'algorithme de registre est un cas spécial d'une classe plus générale des générateurs connus ou le nom de générateurs traînés de Fibonacci. Des générateurs additionnels peuvent être produits par le remplacement exclusif - OR (-XOR-) dans l'équation (I.23) par un autre opérateur. Un générateur qui s'est avéré pour avoir de bonnes propriétés emploie l'opérateur de multiplication :

$$X_n = X_{n-p} * X_{n-q} \quad (\text{I.25})$$

Avec des valeurs plutôt petites de 'compensation', par exemple  $p=17, q=5$ . Des générateurs plus complexes ont été également utilisés, par exemple une soustraction avec porte génératrice composée de 32 bits' ( Marsaglia et autre, 1990)[30], qui pour l'arithmétique est :

$$X_n = X_{n-22} - X_{n-43} - c \quad (\text{I.26})$$

Si  $X_n \geq 0, c = 0$

Si  $X_n < 0, X_n = X_n + (2^{32} - 5), c = 1$

Et le générateur, combiné soustrait avec le générateur de carry-Weyl (Marsaglia et autre, 1990) [30].

$$Z_n = Z_{n-22} - Z_{n-43} - c \quad (\text{I.27})$$

Si  $Z_n \geq 0, c = 0$

$$\text{Si } Z_n < 0, Z_n = Z_n + (2^{32} - 5), c = 1$$

$$Y_n = (Y_{n-1} - 362436069) \text{ MOD } 2^{32}.$$

Quand on travaille sur Microsoft Windows, il suffit d'introduire un germe  $n$  dans la fonction RAN( $n$ ) ou RAND( $n$ ) pour générer un nombre aléatoire dans le programme Fortran

#### I.5.4. Applications de monte Carlo :

De très nombreux secteurs scientifiques et technologiques ont désormais adopté ce type d'approche connue sous le nom « méthode de Monte Carlo ». C'est en fait la puissance accrue des ordinateurs qui a permis à ces méthodes de devenir opérationnelles et de se répandre dans des secteurs aussi variés que la physique, tel que la biologie moléculaire et génétique, les télécommunications, les réseaux, la recherche opérationnelle, la finance, et bien d'autres encore [50]. En voici quelques exemples.

##### I.5.4.1. Intégration Monte Carlo :

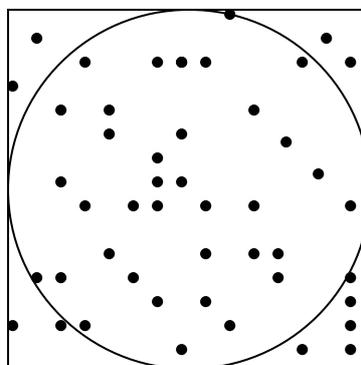
On considère un cercle inscrit dans un carré affiché dans un panneau relativement grand. Il est relativement simple de trouver l'aire de carré, mais c'est difficile de trouver l'aire de cercle, sans utiliser la géométrie,  $\pi$  et les formules difficiles que nous avons vu la dernière fois à l'école primaire.

Supposons que nous lançons un grand nombre de fléchettes sur le panneau et comptent le nombre de fléchettes à l'intérieur du carré ( $n$ ) rapporté au nombre de fléchettes à l'intérieur du cercle ( $n^*$ ). Si l'aire du carré est donnée par  $V$ , alors la surface du cercle ( $I$ ) peut être approximé par :

$$I \approx \frac{n^*}{n} V \quad (\text{I.28})$$

C'est-à-dire, l'aire du cercle est approximativement égale du carré multiplié par une fraction des fléchettes qui débarquent à l'intérieur de ce cercle.

Ceci est illustré sur la figure (I.29).



**Fig.I.29.** Illustration de la « méthode de Monte Carlo » pour trouver l'aire d'un cercle.

L'équation (I.28), est appliquée de plus à des fonctions compliquées et leurs simples résolutions, constitue l'hypothèse sur laquelle repose l'intégration MC. Les problèmes d'intégration concernant les fonctions compliquées sont réduits à l'intégration des formes simples et prennent un nombre suffisant d'échantillons. Comme les autres mesures statistiques l'intégrale MC défini seulement une approximation d'aire.

Plus généralement l'intégration MC est seulement pratique si la fonction en question est continue et s'il est possible de trouver une bonne forme simple. On va essayer de reformuler une intégrale définie arbitrairement dans une forme qui peut être facilement résolue en utilisant MC.

Appliquons la méthode de MC au calcul de l'intégral  $I$  d'une fonction  $f$  sur  $[a ; b]$  :

$$I = \int_a^b f(x)dx \quad (\text{I.29})$$

Ou  $f(x)$  prend des valeurs continues et réelles dans  $[a,b]$ , nous pouvons trouver l'aire  $V$  de l'encadrement limité tel que  $I$  est entièrement située à l'intérieur de  $V$ . Il y a, cependant, une méthode plus simple si nous pouvons prendre l'avantage de certaines propriétés de l'intégral [57].

Nous pouvons définir une seconde fonction  $g(x)$  telle que :

$$g(x) = \begin{cases} \frac{1}{b-a}, & a \leq x \leq b \\ 0, & \text{autrement} \end{cases} \quad (\text{I.30})$$

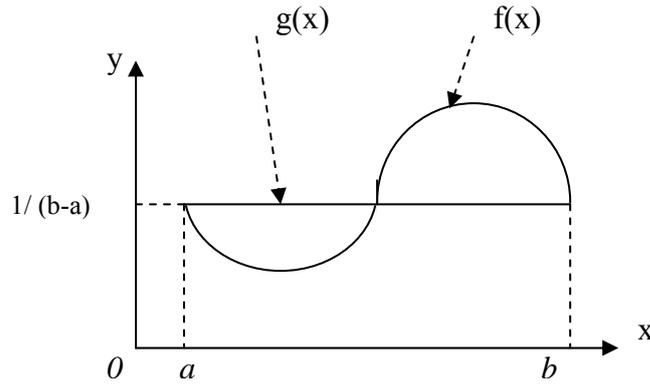
De cette dernière on a 
$$\int_{-\infty}^{+\infty} g(x)dx = 1 \quad (\text{I.31})$$

Comme ça nous pouvant considérer  $g(x)$  à être la fonction de la densité de probabilité (PDF). Si on insère cette dernière dans l'équation (I.30) on obtiendra :

$$I = (b-a) \int_a^b f(x)g(x)dx \quad (\text{I.32})$$

Notons que  $g(x)$  et une PDF, on peut voir que l'intégration (I.32) est l'intégral défini de variable stochastique multipliée par son PDF, d'où nous avons :

$$I = (b-a) \int_a^b f(x)g(x)dx = (b-a)E(f(x)) \quad (\text{I.33})$$



**Fig.I.30.** : La ligne droite est  $g(x)$  et l'intégrale fini de  $a$  à  $b$  est  $(b-a)E(f(x))$ .

Comme ça l'intégral est simplement la largeur de l'intervalle multipliée par la valeur moyenne de la fonction  $f(x)$ .

Dans l'équation (I.33), le problème n'est pas dans la forme qui peut être résolu efficacement en utilisant la méthode MC. L'autre avantage de cette interprétation statistique est que nous avons maintenant une série d'outils algébriques pour déterminer la précision de l'intégration, parce que nous pouvons calculer la variance de l'approximation MC.

C'est difficile de croire qu'il y a beaucoup de valeur en utilisant la technique MC pour évaluer un intégrale à une dimension, mais pour des intégrales multidimensionnelles (dimensions plus grand, plus de quatre (4)), alors la technique MC est préférée.

**I.5.4.2. La Marche Aléatoire :**

Plusieurs processus physiques tel que le mouvement Brownien, le transport des électrons à travers un solide, et les erreurs achever dans un ordinateur sont modélés comme une marche aléatoire.

Dans ce model, plusieurs marches sont prises avec l'indépendance de la direction de chaque marche avec celle qui précède. On part de l'origine et on prend des marches de longueur (non coordonnées) dans les directions x et y comme suit :

$$(\Delta x_1, \Delta y_1), (\Delta x_2, \Delta y_2), \dots, (\Delta x_N, \Delta y_N)$$

Où il y a un total de N marches. La distance du point de départ R est relié à ces marches par :

$$R^2 = (\Delta x_1 + \Delta x_2 + \dots + \Delta x_N)^2 + (\Delta y_1 + \Delta y_2 + \dots + \Delta y_N)^2$$

Maintenant tandis que cette dernière relation est tout à fait générale pour n'importe quelle marche prise, si elle est marche aléatoire lors c'est équivalent à un déplacement en avant ou en arrière, ou bien à droite ou à gauche.

Ainsi pour la moyenne, pour un grand nombre de marches, la majorités des termes mixtes dans l'équation vont s'annulés et on a :

$$R^2 \approx \Delta x_1^2 + \Delta x_2^2 + \dots + \Delta x_N^2 + \Delta y_1^2 + \Delta y_2^2 + \dots + \Delta y_N^2$$

$$R^2 \approx N \langle v^2 \rangle$$

$$R^2 \approx N^{1/2} r_{\text{rnc}}$$

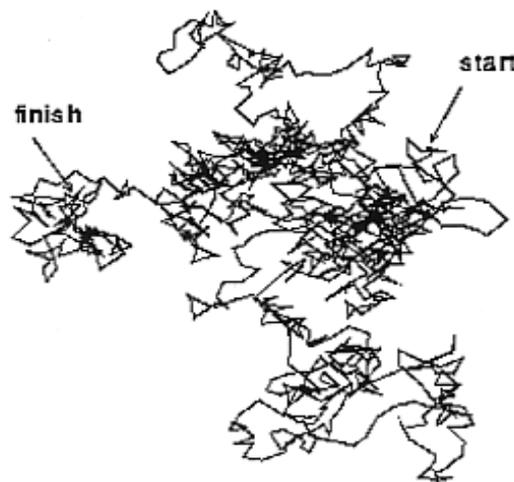
Où  $r_{\text{rnc}}$  est la racine carrée de la moyenne carrée de la grandeur de marche ou, la racine moyenne carrée de la grandeur de marche.

Noté, qu'on obtient les mêmes résultats pour des marches à trois dimensions.

D'après la relation bien que la distance totale marchée soit  $N r_{\text{rnc}}$  dans la moyenne, la distance de départ est seulement  $N^{1/2} r_{\text{rnc}}$ .

Exemple : simulation de la marche aléatoire

Le tracé montre clairement que la méthode de choix des nombres aléatoires dans la direction de la marche aléatoire ne donne pas un grand nombre de marche. Si de l'autre côté on fait le choix aléatoire pour  $x$  et  $y$  dans l'intervalle  $[-\sqrt{2}, \sqrt{2}]$ , alors on obtient un résultat qui est proche du résultat théorique.

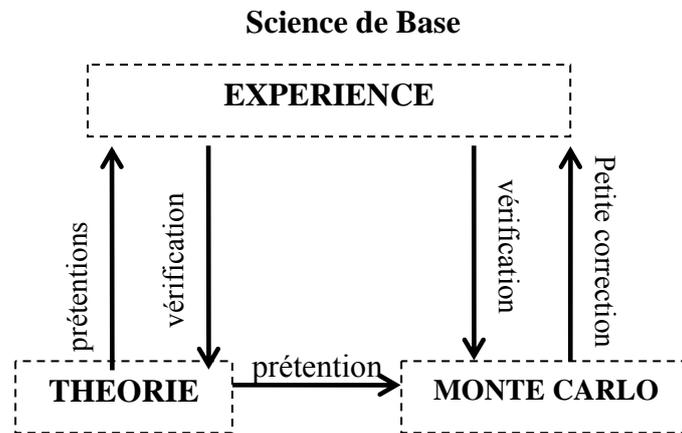


**FigI.31.** Marche aléatoire de 1000 étapes.

#### **I.5.4.3. Interaction Electron-Matière :**

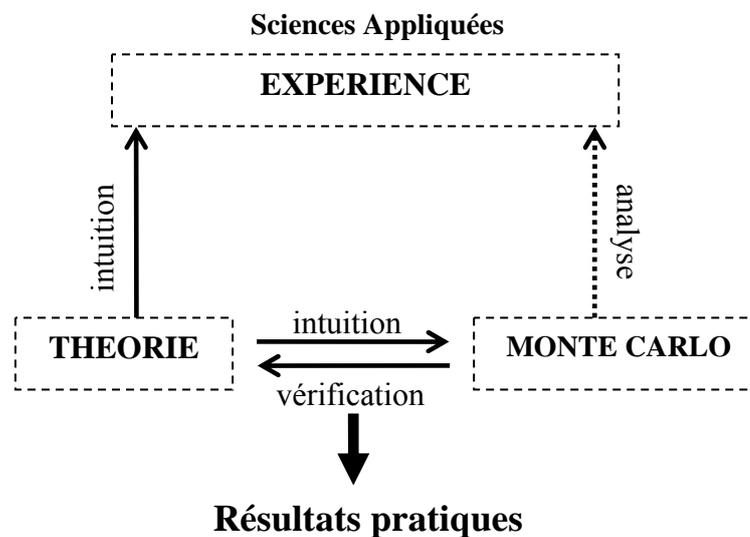
Le procédé de simulation MC est développé pour l'interaction du faisceau d'électrons d'énergie d'ordre kilovolt et la perte d'énergie dans les cibles qui composent des couches minces sur les substrats épais. Un tel calcul a une application directe à l'analyse chimique quantitative des films ultra-minces dans la microsonde d'électron [58]. L'angle de diffusion élastique est calculé dans la simulation de la trajectoire d'électron avec l'expression de Rutherford pour la section efficace de diffusion, et la perte d'énergie entre les chocs élastique est calculée avec l'approximation de Bethe [58]. Cette application est tout notre intérêt dans cette thèse et elle sera plus détaillée dans le chapitre suivant. Le rôle important que les méthodes Monte Carlo doivent jouer dans cette sorte d'étude est illustré sur la figure (I.30). La

science de base essaye de comprendre les mécanismes fonctionnant de base d'un phénomène. La "théorie" est un ensemble de prétentions avec peut être une formulation mathématique de ces prétentions) que pouvez pas mesuré dans "expérience". Dans les meilleur des cas, le raccordement dans la théorie et l'expérience est direct de sorte que l'interprétation de l'expérience est non complexe.



**Fig.I.32.** Le rôle des méthodes de Monte Carlo dans la science de base [46].

Cependant, le résultat calculé dépend de manière compliquée et couplée sur toute la physique de transport d'électron et de photon. Cette utilisation de la méthode de Monte Carlo est décrite sur la figure (I.31). Dans ce cas-ci, la théorie ne peut pas fournir une description mathématique précise et entière de la physique microscopique et macroscopique. La théorie peut, cependant, fournir l'intuition pour la conception des mesures. Les méthodes de Monte Carlo sont une adjonction à ce processus aussi bien, servant dans les analyses de l'expérience et de vérification ou d'infirmer de la conception.



**Fig.I.33.** Le rôle des méthodes de Monte Carlo dans les sciences appliquées [46].

### I.5.5. La Méthode Monte Carlo Quantique (QMC) :

Il est d'usage de faire remonter à Fermi, en 1945, la possibilité théorique d'utiliser des méthodes stochastiques pour résoudre l'équation de Schrödinger. Cependant, d'un point de vue pratique ce n'est qu'en 1975 que fut publié par Anderson [11] le premier calcul pour une molécule ( $H_3^+$ ) effectué à l'aide de marches aléatoires. Au cours des dernières années, les méthodes Monte Carlo quantique se sont beaucoup développées. De nombreuses applications ont été présentées ; elles incluent entre autres la détermination de chemins réactionnels en chimie organique [32,33], l'étude de clusters à grand nombre d'atomes [59,60], la détermination de conformations de surfaces [61,62,63] etc.... La précision obtenue sur les énergies totales est impressionnante ; elle est d'une qualité au moins comparable et souvent meilleure que celle obtenue avec les méthodes traditionnelles de grande précision. La taille des systèmes traitables est également supérieure à celle des méthodes classiques.

Le terme *Monte Carlo quantique* englobe plusieurs méthodes. La plus simple des ces méthodes est la méthode *Monte Carlo Variationnel* (VMC). Elle consiste à utiliser une méthode stochastique d'intégration pour évaluer les valeurs moyennes des observables d'une fonction d'essai. L'inconvénient de cette méthode, comme toute les méthodes variationnelles reposant sur le choix d'une fonction d'essai particulière, est que la précision du résultat dépend de la qualité de la fonction d'essai. Et, les méthodes *Diffusion Monte Carlo* (DMC), où cet inconvénient est presque totalement éliminé (structure nodale approchée) par une technique de projection qui extrait la composante de l'état fondamental de la fonction d'essai.

Toutes les méthodes ont l'avantage qu'aucune intégrale ne doit être calculée. Ceci permet d'utiliser des formes de fonction d'onde dont l'intégrale n'a pas à être connue. On peut donc se servir de bases d'orbitales de Slater et prendre en compte la corrélation avec un facteur de la forme  $e^{-\alpha r_{ij}}$ , ce qui est extrêmement difficile avec les méthodes analytiques.

## I.6. Conclusion :

On peut conclure de ce premier chapitre le suivant :

- Les hétérostructures sont des composants importants à cause de leur intérêt pratique dans le domaine technologique et de la télécommunication. Dans la physique des semiconducteurs ils sont apportés beaucoup de la matière scientifique, des informations et des applications de la physique du solide et la mécanique quantique.
- La technique CL est une technique très importante et possède un large domaine d'application dans la pratique, parmi ces applications la caractérisation des semiconducteurs hétérostructures dont les dimensions sont de l'ordre de nanomètre.
- L'exploitation des informations contenues dans la technique CL nécessite une modélisation réaliste que possible de cette dernière pour des meilleurs résultats obtenus.
- Une compréhension des phénomènes de l'interaction électron-matière mise en jeu lors d'une investigation par cette technique est indispensable pour cette modélisation, tel que les phénomènes de génération et de recombinaison.
- La méthode Monte Carlo reste la bonne méthode apte pour modéliser le phénomène de l'interaction électron-matière.

A partir de cette étude théorique qu'on a déjà exposé dans ce chapitre, on va essayer de construire un modèle basé pour la technique CL basé sur la méthode Monte Carlo pour caractériser les hétérostructures nanométriques.

## **Chapitre II**

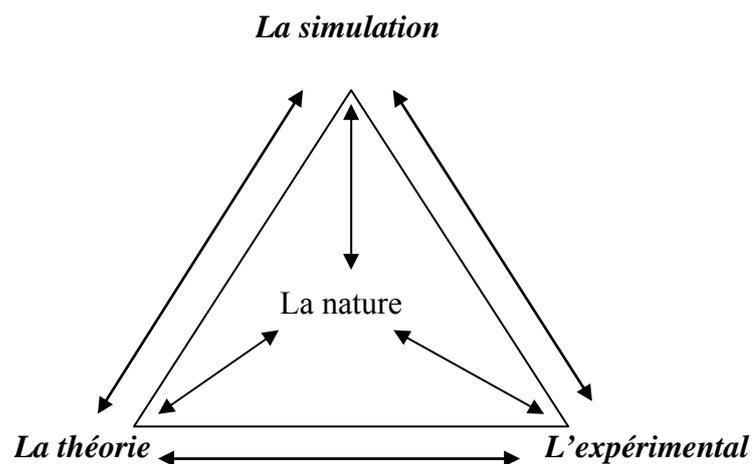
### **Modélisation**

## II.1. Introduction :

Les études modernes des nanostructures sont divisés en deux axes, le premier concerne les outils expérimentaux, tandis que le deuxième s'intéresse à la simulation et aux approches théoriques proposées pour comprendre les résultats expérimentaux d'une part, et de chercher les paramètres qui rentrent en jeu d'autre part. les modèles analytiques existants jusqu'à présent ne peuvent pas traiter les cas des multicouches, parce que les structures et les propriétés physique changent au fur et à mesure du diffusion des électrons dans le matériau. Donc, il ne reste que la simulation et les modèles numériques pour traiter les hétérostructures.

Nous souhaitons souligner que le but des simulations n'est pas de fournir un ajustement de courbes aux données expérimentales plus mieux que celui de la théorie analytique, le but est de créer une compréhension des propriétés et des processus physiques qui sont aussi complètes que possible, en se servant de la commande parfaite des conditions expérimentales dans l'ordinateur et de la possibilité d'examiner chaque aspect des configurations de système en détail. Le résultat désiré est alors l'élucidation des mécanismes physiques qui sont responsables des phénomènes observés [69]. En regardons donc le rapport entre la théorie, l'expérience, et la simulation on trouve qu'ils sont semblables aux cotés d'un triangle (fig.II.1), chacun est distinct, mais chacun est fortement relié aux deux autres.

En observant la croissance rapide de la puissance d'ordinateur, étant couplé à la baisse régulière dans son prix, il est clair que les simulations sur ordinateur pourront faire augmenter rapidement la sophistication pour permettre à des résultats plus subtiles d'être trouvés.



**Fig.II.1.** La relation entre la théorie, l'expérience et la simulation [69].

Pour cette grande importance de la simulation dans le domaine scientifique, on a voulu créer notre propre modèle qui sera inspiré de la technique cathodoluminescence CL.

La cathodoluminescence CL est une technique très utilisée pour étudier les matériaux semiconducteurs. Pour réaliser cette technique dans le cas des nanostructures il faut avoir une interaction électron-matière. Beaucoup de modèles analytiques ont été utilisés pour essayer d'étudier cette interaction. De notre côté, et en tenant compte des avantages fournis par la méthode Monte Carlo, on a préféré de proposer un modèle numérique dans toutes ses étapes en se basant sur les propriétés de cette méthode.

On va utiliser un certain générateur de nombres aléatoires, qui sera la base d'utilisation de la méthode de Monte Carlo dans notre modèle.

## **II.2. Générateur de nombres aléatoires :**

### **II.2.1. La fonction Ran :**

La simulation Monte Carlo repose sur l'existence d'un générateur de nombres aléatoires dont le prototype doit fournir des nombres issus d'une distribution uniforme.

Tous les langages (ou presque) disposent d'un générateur de nombres aléatoires. Les syntaxes varient : Random ( ) en PASCAL, ALEA ( ) dans EXCEL,...etc.

Dans notre modèle numérique, on a choisi d'utiliser la fonction Ran ( ) qui est la fonction responsable de la génération des nombres aléatoires dans le langage FORTRAN.

#### **II.2.1.1. La définition de la fonction Ran :**

La fonction Ran est définie comme étant la fonction d'exécution qui renvoie un nombre aléatoire supérieur ou égal à zéro et moins d'un de la distribution uniforme. Cette fonction utilise le générateur congruentiel linéaire suivant :

$$X_{n+1} = f(X_n) = (a X_n + c) \bmod m, n \geq 0 \quad \text{(II.1)}$$

Où :  $m = 2^{31}$ ,  $a = 843314861$ ,  $c = 453816693$  [2]

Sa période est bien sûr égale à  $m$ .

Notons que tous les nombres aléatoires générés par ordinateur sont des suites parfaitement déterministes qui « apparaissent » comme aléatoires (pour les bons générateurs) selon un certain nombre de tests statistiques. Pour se ramener à des nombres réels compris dans l'intervalle  $[0,1]$ , il faut diviser les entiers obtenus par  $m$ , et on obtient un générateur de nombres réels qui semblent suivre une loi uniforme sur  $[0,1]$ .

### II.2.1.2. La syntaxe de la fonction Ran :

La syntaxe de la fonction Ran est la suivante [17] :

$$\text{Le résultat} = \text{Ran}(\textit{iseed}) \quad (\text{II.2})$$

Le terme *iseed* (germe en français), est la valeur initiale donnée pour faire tourner le programme. Par défaut le germe est  $X_0 = 0$  [2].

Random\_Seed est la série de nombres entiers qui est utilisée pour réinitialiser le germe pour la génération des nombres aléatoires. Il peut être fourni par l'utilisateur avec une formulation Lire (READ) directement, ou il peut être généré automatiquement par l'horloge du système. Aussi long que la capacité de l'horloge du système en faisant tic-tac, on obtient des résultats différents à chaque fois que nous tournons le même code.

A la fin de chaque simulation, un autre argument facultatif GET (obtient) est utilisé pour mettre le germe à la valeur courante des germes (chaque fois qu'un nombre aléatoire est produit le germe est réinitialisée intérieurement). Cela veut dire qu'une séquence successive des germes aléatoires est utilisée pour l'ensemble entier de la simulation.

L'argument *iseed* devrait au commencement être placé à une grande valeur (de préférence, cette valeur doit être une valeur impaire de nombre entier). La fonction Ran enregistre la valeur dans l'argument *iseed* pour qu'elle fera des utilisations postérieures pour calculer le prochain nombre aléatoire.

Toutes les procédures aléatoires (Random, Ran et Random-number et les fonctions de PortLib Drand, Drandm, Rand et Irand) emploient les mêmes algorithmes et renvoient ainsi les mêmes réponses. Elles sont toutes compatibles et peuvent être employées l'un pour l'autre. L'algorithme utilisé est un générateur linéaire multiplicatif principal du module  $M$  (méthode de Congruence).

### II.3. Détails du modèle :

Beaucoup de modèles analytiques ont été consacrés pour étudier l'interaction de l'électron avec la matière. Ils ont trouvé des relations qui donnent des résultats acceptables avec ceux des expériences.

Ainsi, les modèles analytiques ne peuvent pas traiter d'une façon fiable les structures les plus compliquées, telle que les multicouches et nano structures en général. Il reste, donc, les modèles numériques qui peuvent être apte pour analyser et comprendre les nano structures

Notre travail consiste à réaliser un modèle numérique dans toutes ces étapes en se basant sur des théories physiques connues.

### II.3.1. Les bases physiques :

L'interaction du faisceau d'électrons avec la matière solide, la dissipation d'énergie d'électrons et la génération des porteurs dans le solide sont de grande importance pour l'analyse de la technique cathodoluminescence. La bibliographie donne plusieurs revues détaillées à ce sujet. Dans ce paragraphe nous présentons une brève vue globale des bases physiques que nous avons utilisées dans notre modèle.

Le mécanisme des dispersions peut être divisée en dispersion élastique et inélastique. Comme résultat de ces derniers, la trajectoire des électrons est aléatoire.

Notre modèle de simulation est basé sur deux points :

- 1- le tirage de nombres aléatoires (utilisation de la méthode MC) pour la détermination de la trajectoire des électrons, la distribution et la position du choc.
- 2- L'effet de l'interaction inélastique qui se traduit par la perte d'énergie après chaque choc de ce type (principe de la conservation d'énergie).

L'interaction de l'électron avec la matière (S-C) peut être analysée en employant le modèle de Rutherford qu'on va le présenter ci-dessous.

L'électron pénétrant aura une certaine énergie après sa traversé de la surface de l'échantillon. Cette énergie est [25] :

$$E = E_0 (1-\gamma) \quad \text{(II.3)}$$

$E_0$  : l'énergie de l'électron avant la pénétration.

$\gamma$  : le coefficient de la rétrodiffusion du matériau considéré.

Cet électron va subir des collisions aléatoires et successives jusqu' à la fin de sa trajectoire.

La distance entre deux collisions successives est [25] :

$$S = -\lambda \ln (R) \quad \text{(II.4)}$$

$R$  : un nombre aléatoire entre 0 et 1.

Remarque : si  $R=0$  le programme de calcul rejette la valeur et choisit un autre tirage

$\lambda$  : le libre parcours moyen

Le libre parcours moyen  $\lambda$  est donné par la relation suivante [25] :

$$\lambda = \frac{A}{N_A \rho \sigma} \quad (\text{II.5})$$

$A$  : La masse atomique du matériau

$N_A$  : le nombre d'Avogadro

$\rho$  : la densité du matériau

$\sigma$  : la section efficace total de diffusion

La section efficace totale est donnée par la relation [25] :

$$\sigma = (5.21.10^{-21}) \left[ \frac{Z}{E} \right]^2 \left[ \frac{E + m_0 c^2}{E + 2m_0 c^2} \right]^2 \cdot \frac{4\pi}{\delta(\delta + 1)} \quad (\text{II.6})$$

Où :

$Z$  : le nombre atomique de l'atome ( $Z=64$  pour le GaAs qui est supposé en tant qu'un élément, ainsi  $Z_{\text{GaAs}} = Z_{\text{Ga}} + Z_{\text{As}}$ ) [19,64]. Le même procédé pour le AlAs qui est aussi supposé en tant qu'un élément, ainsi  $Z_{\text{AlAs}} = Z_{\text{Al}} + Z_{\text{As}} = 46$ .

$E$  : l'énergie de l'électron incident (keV)

$\delta$  : Le paramètre d'écrantage.

Avec [65] :

$$\delta = (3.4.10^{-3}) \cdot \frac{Z^{0.67}}{E} \quad (\text{II.7})$$

L'angle  $\alpha$  qui caractérise un événement particulier de dispersion peut être obtenu à partir de la probabilité de la dispersion élastique dans un intervalle particulier d'angles (0 à  $\alpha$ ), qui peut être dérivé de l'équation (II.6) [25].

Ainsi, un rapport obtenu à partir de la probabilité de distributions est [25] :

$$\cos \alpha = 1 - \frac{2\delta R}{1 + \delta - R} \quad (\text{II.8})$$

on prend un angle  $\theta$  (aléatoire), puis on compare après chaque collision les deux angles ( $\theta$  et  $\alpha$ ) pour connaître si la collision est élastique ou inélastique [64].

La correction relativiste dans l'équation (II.6) peut être ignorée pour des énergies d'électron moins de 50 keV, c.-à-d., pour la plupart des travaux du MEB. Pour des énergies plus élevées, la correction relativiste de la section efficace est considérable et devrait être

appliquée. Le modèle de diffusion de Rutherford est assez exact pour les énergies de l'électron de 20 à 50 keV pour les solides de nombres atomiques bas.

Diffusion des électrons à travers les puits quantiques :

Puisque les dimension des couches étudiée sont de l'ordre de nanomètre, il est préférable et obligatoire d'utiliser la mécanique quantique en résolvant l'équation de Schrödinger pour calculer le taux de transmission  $T$  et de réflexion  $R$  à travers les parois des puits quantiques et des barrières des potentiels.

Si la barrière de potentiel ( $V_{\max}$ ) est supérieur à l'énergie de l'électron il existe un coefficient de transmission  $T$  non nul, que l'on appelle communément la transparence de la barrière de potentiel, et un coefficient de réflexion  $R$  aussi non nul, sachant que  $T+R=1$ . C'est évidemment là l'effet le plus spectaculaire, car une telle barrière est rigoureusement infranchissable en mécanique classique. Cette effet nommé d'une façon imagée « effet tunnel », a joué un rôle important [49].

La barrière rectangulaire est définie par :

$$V(x) = V_0 \quad \text{pour } 0 < x < a$$

$$V(x) = 0 \quad \text{pour } x < 0 \text{ et } x > a$$

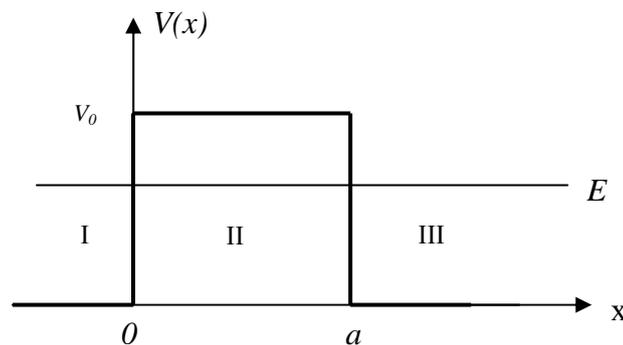
a) le cas où  $E < V_0$  :

Le traitement est très voisin de celui du puits rectangulaire, Dans les régions (I) et (III) pour les quelles  $V$  est nul, nous avons les solutions :

$$\psi_I = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$$

$$\psi_{III} = e^{ik(x-a)}$$

$$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$



**Fig. II.2.** Barrière de potentiel rectangulaire ( $E < V_0$ ) [49].

Dans la région (II), où l'équation de Schrödinger s'écrit :

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} - \frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E)\psi = 0$$

donc :

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} - \alpha^2\psi = 0$$

avec

$$\alpha = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}$$

nous avons la solution :

$$\psi_{II} = A'e^{\alpha x} + Be^{-\alpha x}$$

les conditions de continuité de  $\psi$  et de  $\Psi'$  fournissent les relations :

$$A + B = A' + B'$$

$$ik(A - B) = \alpha(A' - B')$$

$$A'e^{\alpha a} + B'e^{-\alpha a} = 1$$

$$\alpha(A'e^{\alpha a} - B'e^{-\alpha a}) = ik$$

ce qui donne:

$$4A = e^{-\alpha a} \left(1 + \frac{ik}{\alpha}\right) \left(1 + \frac{\alpha}{ik}\right) + e^{\alpha a} \left(1 - \frac{ik}{\alpha}\right) \left(1 - \frac{\alpha}{ik}\right).$$

Il est facile d'en déduire la transparence [49] :

$$\frac{1}{T} = 1 + \frac{V_0^2}{4E(V_0 - E)} sh^2 \alpha a$$

$$T = \frac{4E(V_0 - E)}{4E(V_0 - E) + V_0^2 sh^2 \left(\frac{a}{\hbar} \sqrt{2m(V_0 - E)}\right)} \quad (\text{II.9})$$

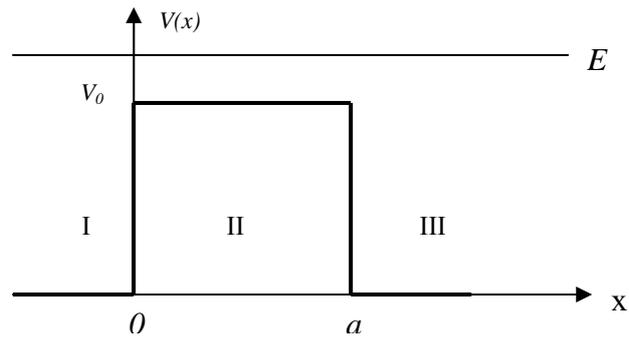
On a :

$$R + T = 1$$

Donc le coefficient de réflexion s'écrit [49] :

$$R = 1 - \frac{4E(V_0 - E)}{4E(V_0 - E) + V_0^2 sh^2 \left(\frac{a}{\hbar} \sqrt{2m(V_0 - E)}\right)} \quad (\text{II.10})$$

b) Dans le cas où  $E > V_0$  :



**Fig. II.3.** Barrière de potentiel rectangulaire ( $E > V_0$ ) [49].

dans ce cas la transparence s'écrit [49] :

$$T = \frac{4E(E - V_0)}{4E(E - V_0) + V_0^2 \sin^2\left(\frac{a}{\hbar} \sqrt{2m(E - V_0)}\right)} \quad (\text{II.11})$$

Et le coefficient de réflexion s'écrit [49]:

$$R = 1 - \frac{4E(E - V_0)}{4E(E - V_0) + V_0^2 \sin^2\left(\frac{a}{\hbar} \sqrt{2m(E - V_0)}\right)} \quad (\text{II.12})$$

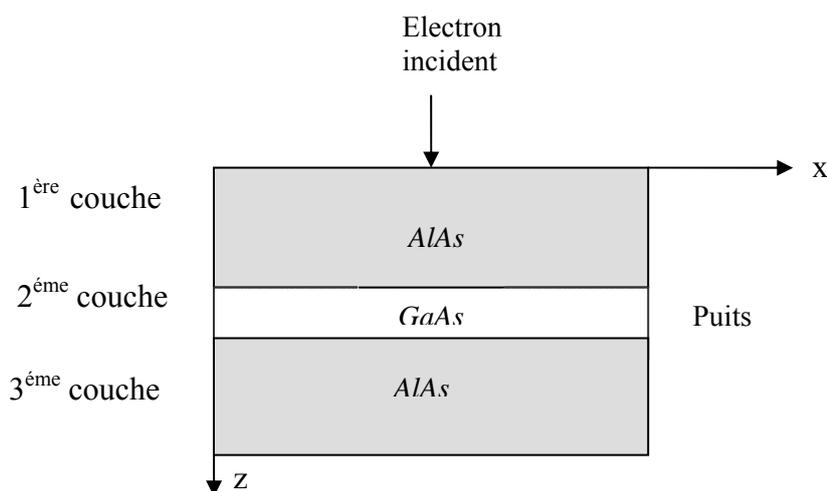
### II.3.2. Les étapes de calcul :

Le travail réalisé dans ce sujet peut être divisé en deux parties, la première partie concernant la caractérisation d'une hétérojonction à puits quantique *AlAs/GaAs/AlAs* dont le dimension du puits quantique de *GaAs* est de l'ordre de centaines de nanomètre.

La deuxième partie est consacrée à l'étude et la caractérisation d'une hétérostructure à trois puits quantiques ou multi-puits quantiques *AlAs/GaAs/AlAs/GaAs/AlAs/GaAs/AlAs*, dont les dimensions sont de l'ordre de dizaines de nanomètre.

### II.3.2.1. Puits quantique perpendiculaire (AlAs/GaAs/AlAs) :

Un électron d'énergie  $E_0$  frappe l'échantillon de AlAs/GaAs/AlAs à l'origine et à  $90^\circ$  de sa surface. Le premier événement d'interaction est supposé de se produire à l'origine. Si l'électron continue à pénétrer dans l'échantillon, la direction et l'énergie sont enregistrés ou bien sauvegardés dans le programme. On prend en considération les paramètres physiques de chaque couche parmi les trois couches de l'échantillon selon la position  $z$  (Figure (II.4)).

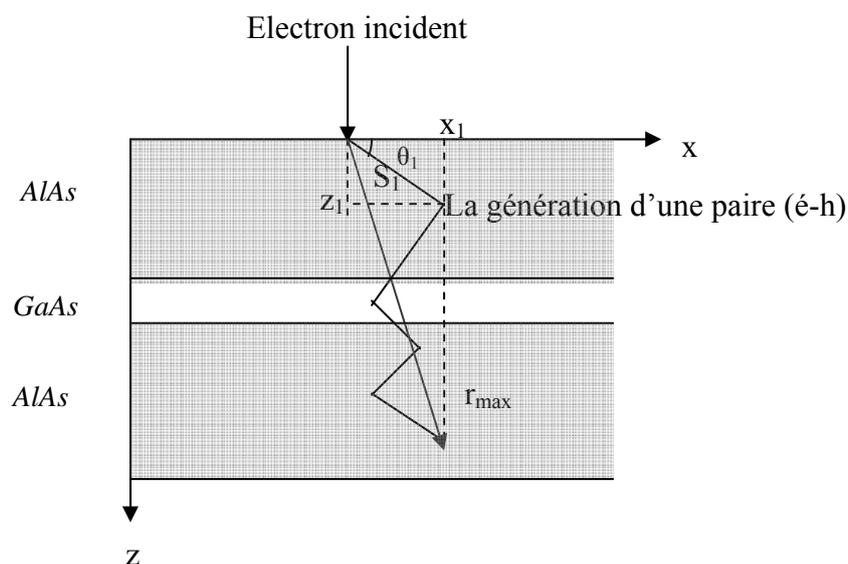


**Fig.II.4.** Hétérojonction AlAs/GaAs/AlAs

Dans notre calcul nous sommes intéressés par la génération des paires électrons-trous produites pendant la collision des électrons incidents avec les atomes du matériau.

#### II.3.2.1.1. Trajectoire des électrons :

L'électron prend les paramètres physiques de AlAs, est commence à faire des chocs inélastiques ou élastique avec les atomes de la matière cible.



**Fig.II.6.** Calcul de la profondeur de pénétration.

Pour simplifier le calcul, on prend deux dimensions (X,Z). Les coordonnées cartésiennes du point du choc, sont calculées à partir de la relation suivante (II.11) :

$$\begin{cases} x_i = S_i \cos \theta_i \\ z_i = S_i \sin \theta_i \end{cases} \quad (\text{II.13})$$

Avec  $S_i$  est la distance entre deux collisions successives calculée à partir de l'équation (II.4). Si  $z_i$  est appartient à la deuxième couche (GaAs) l'électron prend dans ce cas les paramètres physiques de GaAs et continue sa trajectoire et enfin lorsque  $z_i$  est appartient à la troisième couche l'électron prend les paramètres d'AlAs.

### II.3.2.1.2. Profondeur de pénétration :

$r_{\max}$  qui est la distance la plus grande qui peut être parcouru par un électron incident comme il est illustrée dans les figures (II.6) et (II.7).

Donc :

$$(r_{\max})_i = [(x_n)^2 + (z_n)^2]^{1/2} \quad (\text{II.14})$$

Avec  $(x_n, z_n)$  sont les coordonnées cartésiennes du point n qui correspond à la distance la plus grande.

Donc, et pour un faisceau électronique qui contient  $n_{el}$  électrons pénétrants dans l'échantillon, la profondeur de pénétration sera la moyenne des  $(r_{\max})_i$

$$R_e = \frac{\sum_{i=1}^{n_{el}} r_{\max i}}{n_{el}} \quad (\text{II.15})$$

Après avoir calculer cette profondeur, on a fait entrer les relations (I.3), (I.5) et (I.6) (les relations des parcours électroniques calculés d'après : Wittry-Kyser, Everhart – Hoff et Kanaya – Okayama) dans notre programme pour qu'on puissent faire une comparaison entre le parcours trouvé par notre modèle pour le AlAs et GaAs et ceux trouvés par ces chercheurs, (notre modèle est confronté les deux modèles, Wittry-Kyser, et Kanaya – Okayama).

### II.3.2.1.3. Profil de distribution (génération des porteurs en excès):

Pour calculer le profil de distribution on a poursuivi les étapes suivantes :

- calcul de nombre des paires  $(\Delta n_i)$  généré dans chaque zone.
- nous introduisons la correction due à la diffusion des porteurs (e -h) (grâce au gradient de concentration) dans le puits quantique de GaAs. La probabilité pour que un électron traverser une distance  $z_i$  s'écrit :

$$P \propto e^{-\frac{z_i}{L_n}} \quad (\text{II.16})$$

$z_i$  : distance traversé par un électron dans le semiconducteur.

$L_n$  : longueur de diffusion de l'électron dans un semiconducteur.

Donc, lorsque les électrons pénètrent le puits quantique de *GaAs* ils sont confinés dans cette puits, et la concentration des pairs (é-h) est augmente.

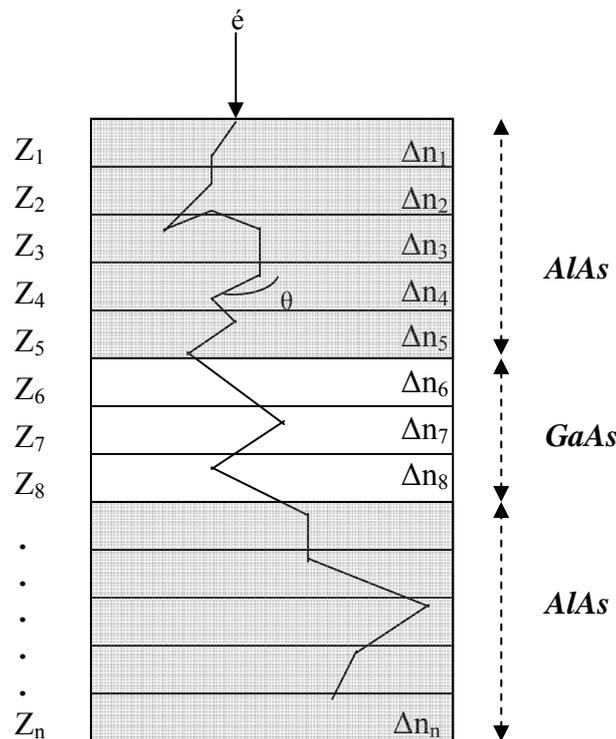
-Calculer la surface rectangulaire  $S_i$  pour chaque zone.

La concentration dans la zone  $i$  sera :

$$C_i = \Delta n_i / S_i \quad (\text{II.17})$$

C'est pour ça, qu'on a été obligé de faire une autre répartition (Fig.II.7) qui est basée sur la division théorique de l'échantillon en un nombre de zones horizontales,  $Z_1, Z_2, Z_3, \dots, Z_n$ .

(parce que dans ce cas, chaque pair (é-h) qui appartient a une telle zone a la même distance de la surface, ce qui permet de calculer le signal cathodoluminescence ultérieurement)



**Fig.II.7.** Zones horizontales pour calculer le signal CL.

$\theta$  : Angle de valeur aléatoire.

#### II.3.2.1.4. Calcul de signal CL (recombinaison des porteurs en excès) :

Dans ce calcul nous essayons de déterminer l'allure de l'intensité de la cathodoluminescence en fonction de l'énergie d'accélération.

Après la division de l'échantillon comme il est montré dans la Figure (II.7), à chaque zone, une quantité de paires électron trou ( $\Delta n_i$ ) est générée. Mais l'intensité de la cathodoluminescence  $I_{CL}$ , vient seulement de la recombinaison radiative des porteurs en excès due au *GaAs*. Dans le cas d'*AlAs* la recombinaison est non radiative et donc on ne prend pas en considération dans le calcul de signal  $I_{CL}$ , sauf les porteurs qui sont trouvés près du puits quantique, dans ce cas il y a une probabilité non nul pour que ces porteurs peuvent diffuser vers le puits (*GaAs*) et se recombinent d'une façon radiative.

-dans notre cas, et à cause des phénomènes de confinements, on a supposé que tous les porteurs  $\Delta n$  vont se recombinent, et par conséquent le signal cathodoluminescence est donnée

$$I_{CL} \propto \int_0^{\infty} \Delta n(z) \exp(-\alpha z) dz \quad (\text{II.18})$$

$\alpha$  : est le coefficient d'absorption.

En utilisant les couches proposées dans notre modèle (fig.II.8) cette intégrale devient une sommation sur le nombre de couches et on a alors :

$$\begin{aligned} I_{CL} &= \sum_{i=1}^n \Delta n_i e^{-\frac{\alpha}{L_n} z_i} \\ &= \Delta n_1 e^{-\alpha z_1} + \Delta n_2 e^{-\alpha z_2} + \dots + \Delta n_n e^{-\alpha z_n} \\ &= CL_1 + CL_2 + \dots + CL_n. \end{aligned}$$

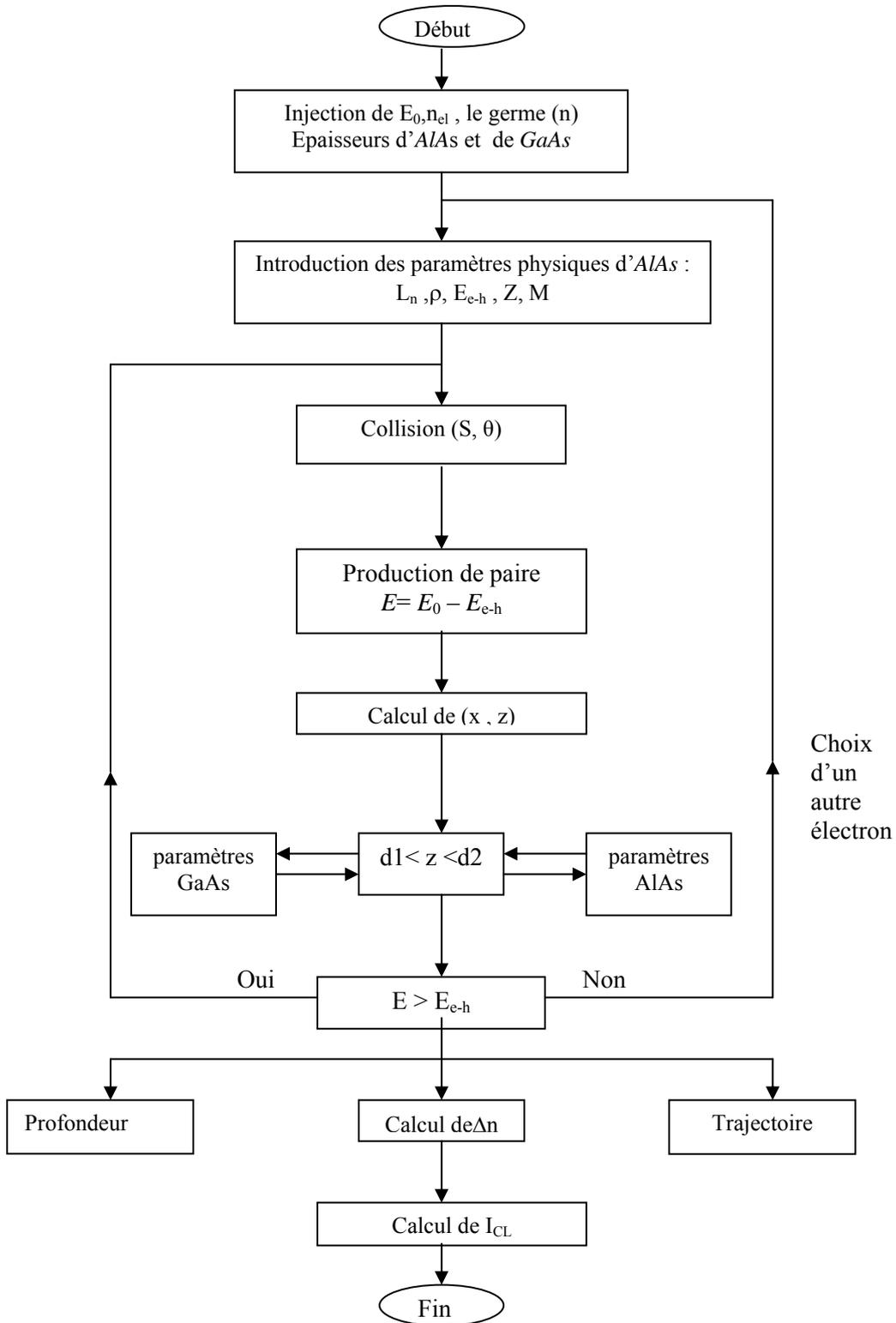
Remarque: dans le cas de la théorème de Shockly-Read-Hall, l'intensité de la cathodoluminescence est donnée par:

$$I_{CL} \propto \int_0^{\infty} \frac{\Delta n(z)}{\tau_n} \exp(-\alpha z) dz$$

le terme  $(\Delta n/\tau_n)$  est le taux de recombinaison dans le cas d'un échantillon massive.

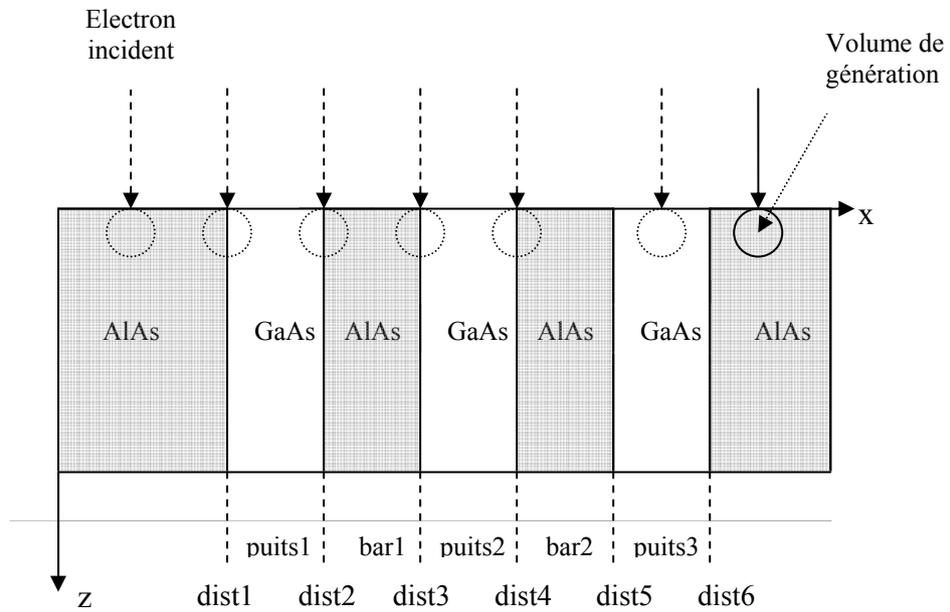
**II.3.2.1.5. Organigramme :**

Le programme a été écrit en langage FORTRAN, l'organigramme du programme est représenté si dessous :



### II.3.2.2. Multi puits quantiques parallèles :

Considérons le cas d'un électron incident d'énergie  $E_0$  parallèle par rapport au puits quantiques, frappe une face plane de l'échantillon (multi puits quantiques) comme il est montré dans la figure (II.8).



**Fig.II.8.** Multi puits quantiques parallèles  
AlAs/GaAs/AlAs/GaAs/AlAs/GaAs/AlAs.

On fait déplacer le faisceau électronique le long de la surface de l'échantillon, le volume de génération est assimilé à une sphère, parce que l'énergie d'accélération  $E_0$  est faible.

L'électron frappe l'échantillon dans la région d'AlAs au départ est commence à faire des collision inélastique et après chaque collision l'électron perd une partie de son énergie en produisant une paire électron-trou.

#### II.3.2.2.1. Trajectoire des électrons :

Les coordonnées cartésiennes du point du choc, sont calculées à partir de la relation suivante

$$(II.11) : \begin{cases} x_i = S_i \sin \theta_i \\ z_i = S_i \cos \theta_i \end{cases} \quad (II.19)$$

Avec  $S$  est la distance entre deux collisions successives calculée à partir de l'équation (II.6).

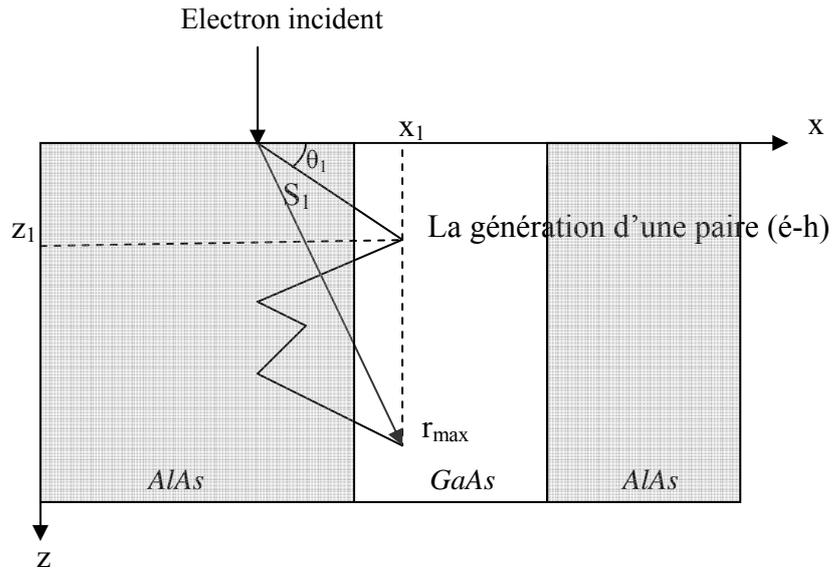


Fig.II.9. Représentation de  $r_{\max}$ .

### II.3.2.2.2. Profondeur de pénétration :

$r_{\max}$  qui est la distance la plus grande qui peut être traversé par un électron incident est illustrée dans les figures (II.20).

Donc :

$$(r_{\max})_i = [(x_n)^2 + (z_n)^2]^{1/2} \quad (\text{II.20})$$

Avec  $(x_n, z_n)$  sont les coordonnées cartésiennes du point n qui est le point qui correspond à la dernière paire (é-h) générée par l'électron i.

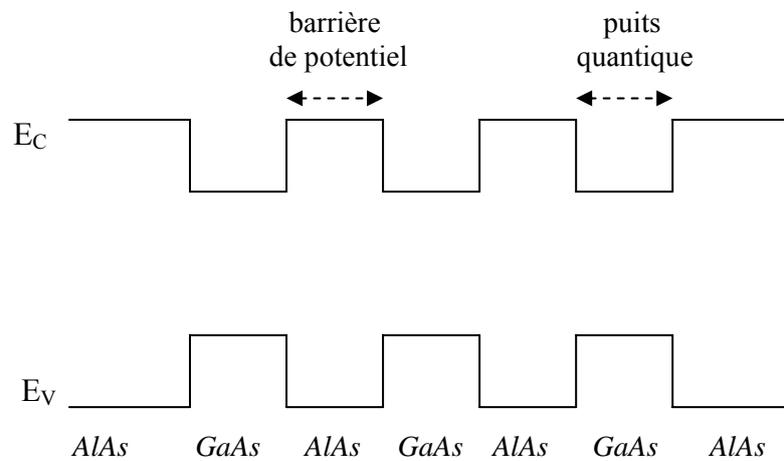
Pour un faisceau électronique qui contient  $n_{el}$  électrons pénétrant dans l'échantillon, la profondeur de pénétration sera la moyenne des  $(r_{\max})_i$

$$R_e = \frac{\sum_{i=1}^{n_{el}} r_{\max i}}{n_{el}} \quad (\text{II.21})$$

### II.3.2.2.3. Calcul de nombre de paires $(\Delta n_i)$ généré:

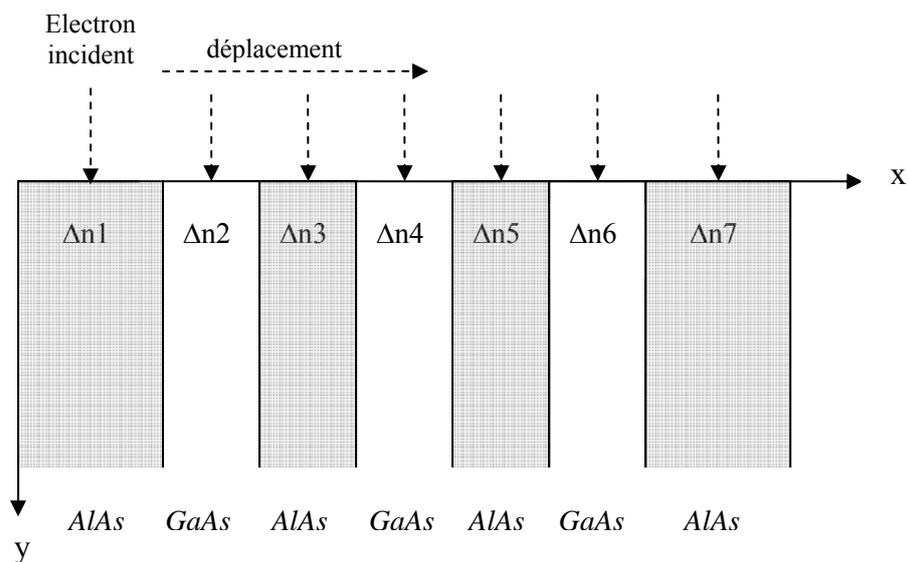
D'abord notre échantillon est un hétérojonction à trois puits quantiques de GaAs parallèles donc il y a trois régions de type GaAs sont des puits quantiques et quatre régions de type AlAs, donc il y a deux barrières de potentiels rectangulaires comme il est montré dans la figure (II.10).

Les séquences de calcul sont les suivants :



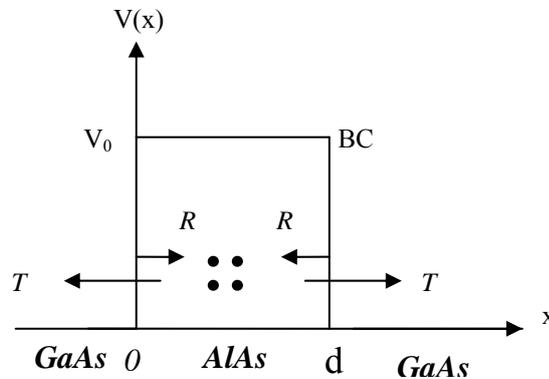
**Fig.II.10.** Représentation énergétique de l'hétérojonction à puits quantiques

- Lorsque le faisceau électronique balaye la surface de l'échantillon une quantité des paires électron-trou ( $\Delta n_i$ ) générées dans chaque région, on a donc : ( $\Delta n_1$ ), ( $\Delta n_2$ ), ( $\Delta n_3$ ), ( $\Delta n_4$ ), ( $\Delta n_5$ ), ( $\Delta n_6$ ), ( $\Delta n_7$ ) sont les paires(é-h) générés dans les régions 1,2,3,4,5,6, et 7 respectivement, comme il est montré dans la figure (II.11).



**Fig.II.11.** Séquence de calcul de nombre de paires ( $\Delta n_i$ ) générés.

- Dans notre modèle, la diffusion des électrons se fait à travers les barrières (AlAs) par les phénomènes de transmission et de réflexion ( $T \neq 0$  et  $R \neq 0$ ), la réflexion et la transmission peut se fait plusieurs fois selon la durée de vie de l'électron qui est déterminée par la longueur de diffusion ( $L_n$ ) et la largeur de barrière ( $d$ ) figure (II.12).



**Fig.II.12.** Electrons dans une barrière de potentiel.

Lorsque les électrons traversent la barrière de potentiel, le coefficient de transmission par l'effet tunnel est donné par la relation suivante :

$$T = \frac{4E(E - V_0)}{4E(E - V_0) + V_0^2 \sin^2 \left[ \frac{a}{\hbar} \sqrt{2m(E - V_0)} \right]} \quad (\text{II.22})$$

$V_0$  : potentiel du barrière rectangulaire.

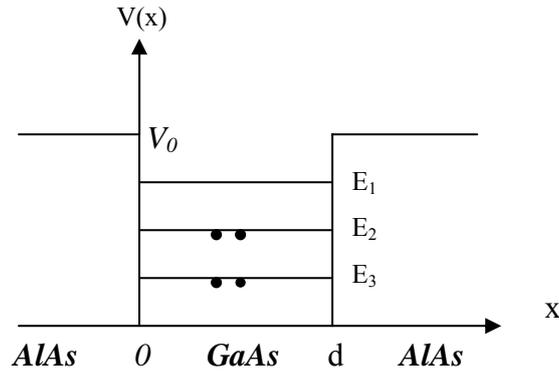
$E$  : l'énergie de l'électron.

$d$  : épaisseur de barrière du potentiel.

Dans le cas de la réflexion de ces électrons sur les parois de cette barrière, le coefficient de réflexion s'écrit :

$$R = 1 - \frac{4E(E - V_0)}{4E(E - V_0) + V_0^2 \sin^2 \left[ \frac{a}{\hbar} \sqrt{2m(E - V_0)} \right]} \quad (\text{II.23})$$

Une fois que l'électron entre dans le puits quantique (GaAs), il sera confiné, c'est-à-dire il fait des réflexions totales entre les parois du puits quantiques ( $T = 0$  et  $R = 1$ ), figure (II.13).



**Fig.II.13.** Electrons confinés dans un puits quantique de GaAs.

#### II.3.2.2.4. Calcule le signal cathodoluminescence :

Dans ce calcul nous essayons de déterminer l'allure de l'intensité de la cathodoluminescence en fonction de longueur de l'échantillon (la distance X) pour les faibles énergies (entre 0.5 et 2 keV) dans un échantillon à multi-puits quantiques *AlAs/GaAs/AlAs/GaAs/AlAs/GaAs/AlAs*.

- dans notre modèle de simulation nous supposons que toutes les porteurs générés dans chaque région sont localisés à une profondeur d, tel que :  $d = R_{max} / 2$ .
- En principe l'intensité de signal cathodoluminescence  $I_{CL}$  vient de la recombinaison radiative des porteurs en excès dans les régions des puits quantiques de GaAs, donc  $I_{CL}$  représente un maximum dans les régions de GaAs, au contraire  $I_{CL}$  est nul dans les régions d'AlAs, mais avec les corrections suivantes :
  - la première correction due à la diffusion des porteurs qui sont près des puits quantiques (grâce au gradient de concentration) dans ce dernier où ils se recombinent d'une façon radiative donc l'intensité  $I_{CL}$  croit au voisinage des puits quantiques.
  - la deuxième correction est due à la transmission des électrons dans les puits quantiques de GaAs. Le signal cathodoluminescence est donnée par :

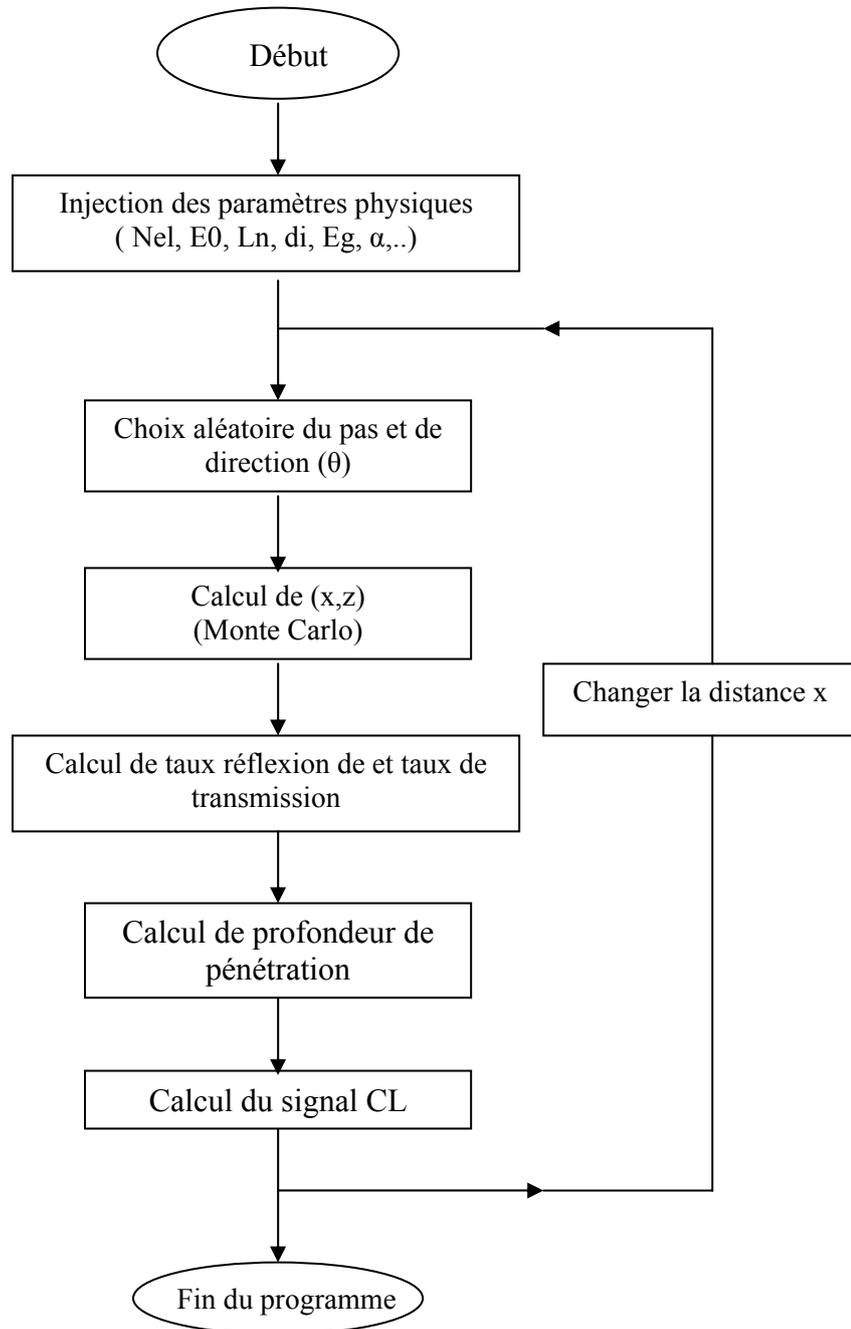
$$I_{CL} \propto \int_0^{\infty} \Delta n(x) \exp(-\alpha x) dx$$

En utilisant les couches proposées dans notre modèle (fig.II.12) cette intégrale devient une sommation sur le nombre de couches et on a alors :

$$I_{CL} = \sum_{i=1}^{n=7} \Delta n_i e^{-\alpha d}$$

$$I_{CL} = \Delta n_1 e^{-\alpha d} + \Delta n_2 e^{-\alpha d} + \dots + \Delta n_7 e^{-\alpha d}$$

$$I_{CL} = CL_1 + CL_2 + CL_3 + CL_4 + \dots + CL_7.$$

**II.3.2.2.5. Organigramme:**

Le tableau (II.1) englobe un certain nombre de paramètre de GaAs et d'AlAs qui étaient utilisés dans nos calculs :

<b>Paramètre</b>	<b>GaAs</b>	<b>AlAs</b>
<b>a(Å)</b>	5.63	5.66
<b>M (g.mole<sup>-1</sup>)</b>	144.64	101.90
<b>ρ (g.cm<sup>-3</sup>)</b>	5.32	3.717
<b>Z</b>	64	46
<b>E<sub>é-h</sub> (eV)</b>	4.6	6.45
<b>E<sub>g</sub> (eV)</b>	1.42	2.15
<b>ε<sub>r</sub></b>	12.90	10.06

**Tab.II.1.** Données numériques de l'arséniure de *GaAs* et *AlAs* à 300 k.

## II.4. Conclusion :

- Dans ce chapitre un modèle de calcul Monte Carlo des trajectoires électroniques et de la profondeur de pénétration ainsi que l'intensité de signal cathodoluminescence est présenté pour deux hétérostructures à puits quantique de la famille AlAs/GaAs/AlAs, et à multipuits quantiques.
- Ce modèle prend en compte les paramètres du matériau (coefficient d'absorption, longueur de diffusion, les largeurs des puits quantiques et l'énergie d'accélération des électrons incidents.
- Le modèle proposé prend en consécration des effets quantiques, tels que la transmission et réflexion à travers les barrières (AlAs), ainsi que le confinement dans les puits quantiques (GaAs), en utilisant la mécanique quantique (résolution de l'équation de Schrödinger avec les ondes planes  $\psi(\vec{r}) = Ae^{i\vec{k}\vec{r}}$  .

Pour montrer la consistance du modèle le troisième chapitre est consacré aux résultats obtenus.

## **Chapitre III**

### **Résultats et discussion**

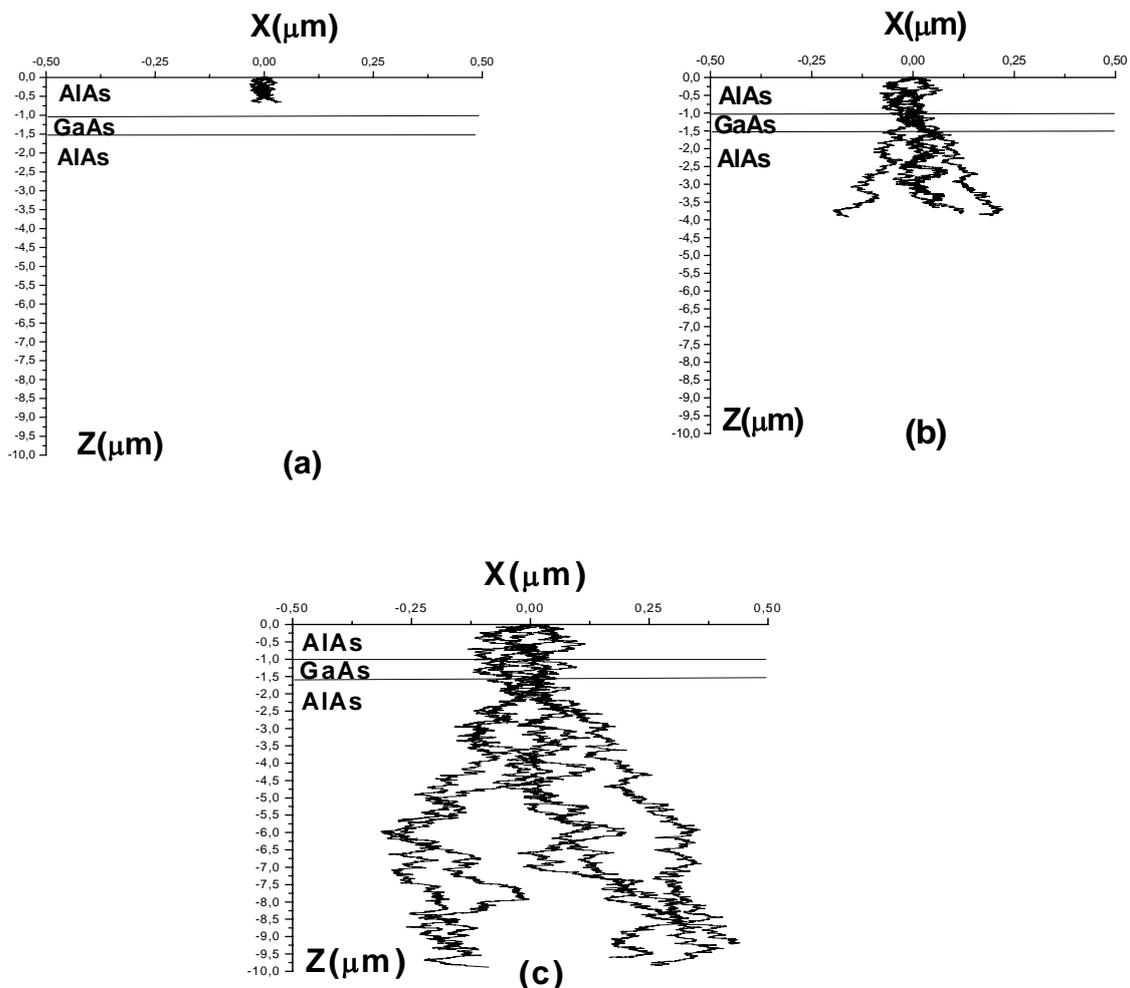
### III.1. Introduction :

Dans ce chapitre, on présentera les résultats de calcul concernant les trajectoires des électrons, la profondeur de pénétration, le profil de distribution sous l'influence de l'épaisseur de puits quantique et la longueur de diffusion des électrons, ainsi que le signal CL dans l'hétérostructure à puits quantique AlAs/GaAs/AlAs.

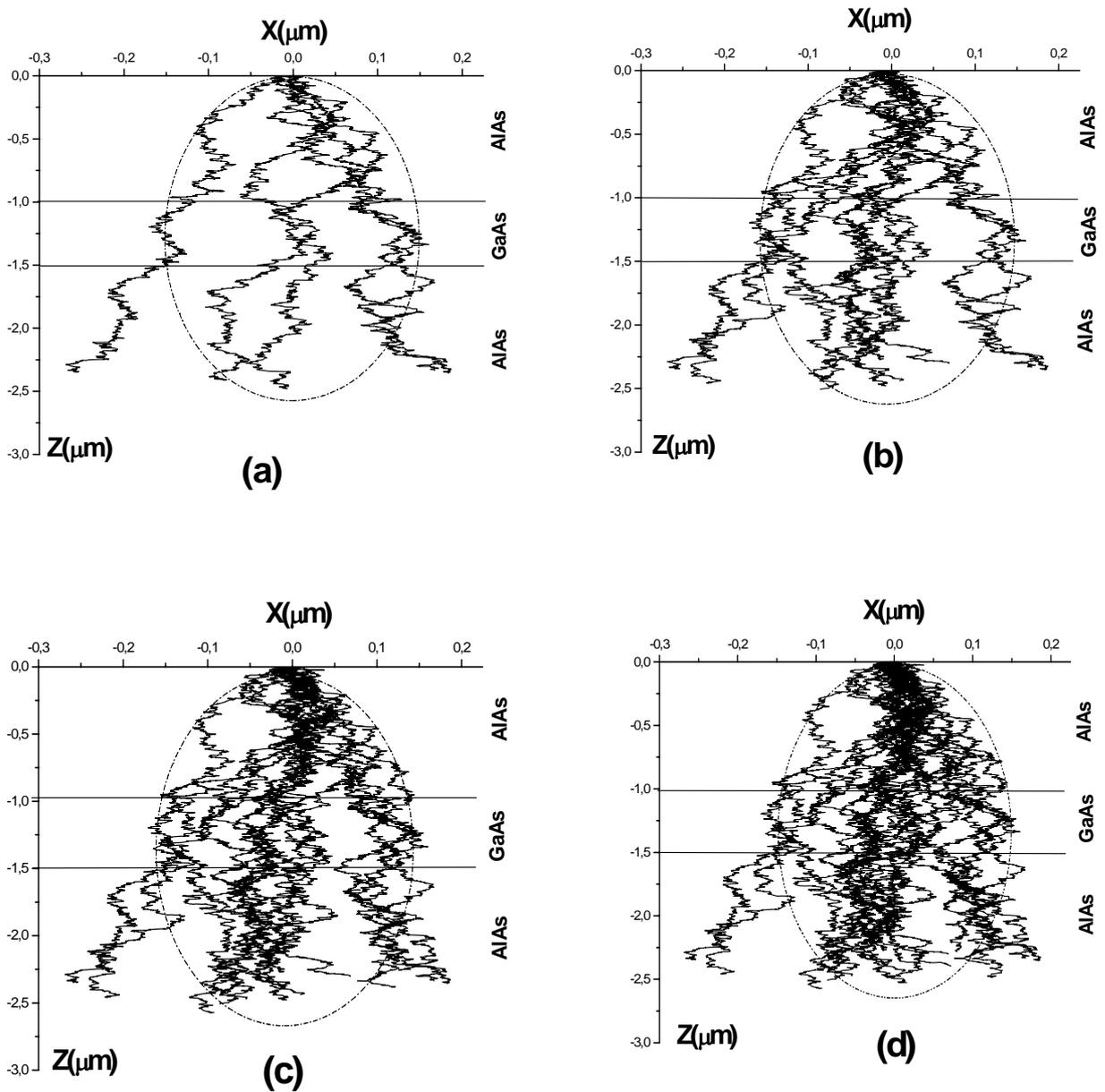
Dans le but de prévoir les paramètres responsables de variation de signal CL et même dans l'imagerie CL on présentera les résultats de simulation basés sur notre modèle concernant le calcul de signal CL dans une hétérostructure à multipuits quantiques.

### III.2. Trajectoire des électrons :

La figure (III.2) représente des trajectoires pour différents nombres d'électrons pénétrants dans l'échantillon d'AlAs/GaAs/AlAs. Alors, que la figure (III.1) représente ces trajectoires pour différentes valeurs de  $E_0$ , sachant que la largeur de puits (GaAs) est  $d = 500$  nm.



**FigIII.1.** : Les trajectoires des 5 électrons pénétrants dans le AlAs/GaAs/AlAs pour :  
 (a)  $E_0 = 10$  KeV, (b)  $E_0 = 25$  KeV, (c)  $E_0 = 40$  KeV.



**FigIII.2.** Les trajectoires des électrons pénétrants dans le AlAs/GaAs/AlAs pour  $E_0 = 25\text{KeV}$ :  
 (a) pour 5 électrons, (b) 10 électrons, (c) 15 électrons, (d) et 20 électrons.

On peut remarquer facilement que :

- La trajectoire de l'électron est aléatoire.
- La trajectoire et le volume de génération dépendent de l'énergie d'accélération des électrons.
- Le volume de génération prend une forme de poire.

### III.3. La profondeur de pénétration :

#### III.3.1. Profondeur de pénétration pour AlAs et GaAs :

Les figures (III.3) et (III.4) représentent la profondeur de pénétration calculée par notre modèle pour le AlAs et pour le GaAs respectivement, et la comparaison entre les profondeurs de pénétration trouvées par le modèle de Wittry et Kyser (relation (I.3)), le modèle de Everhart et Hoff (relation (I.5)), et celui de Kanaya et Okayama (relation (I.6)). Pour notre modèle il est bien clair que la profondeur de pénétration des électrons incidents croît en fonction de l'énergie d'accélération du faisceau incident.

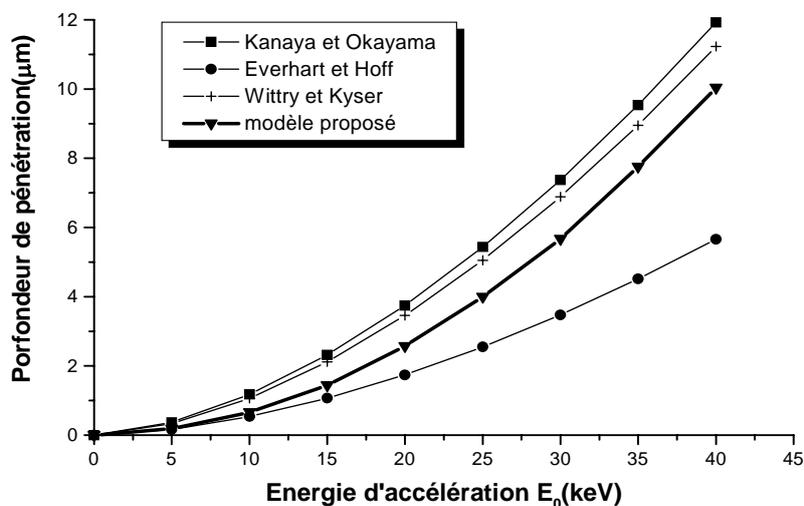


Fig.III.3. Profondeur de pénétration en fonction de  $E_0$  pour le AlAs.

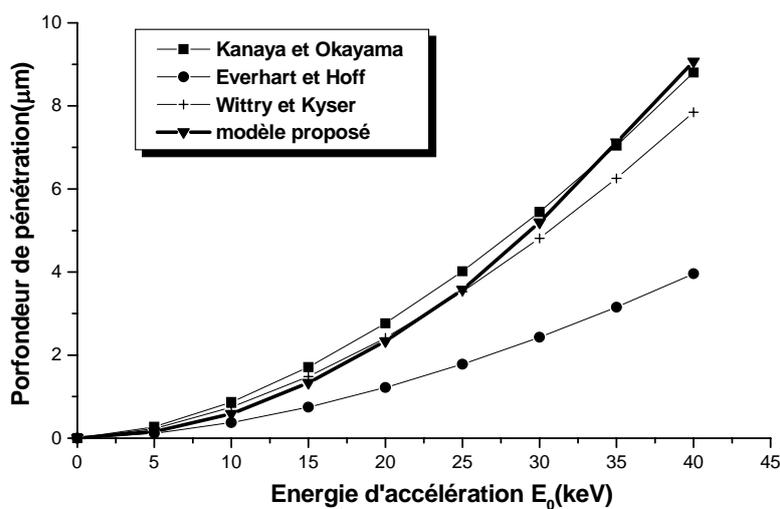
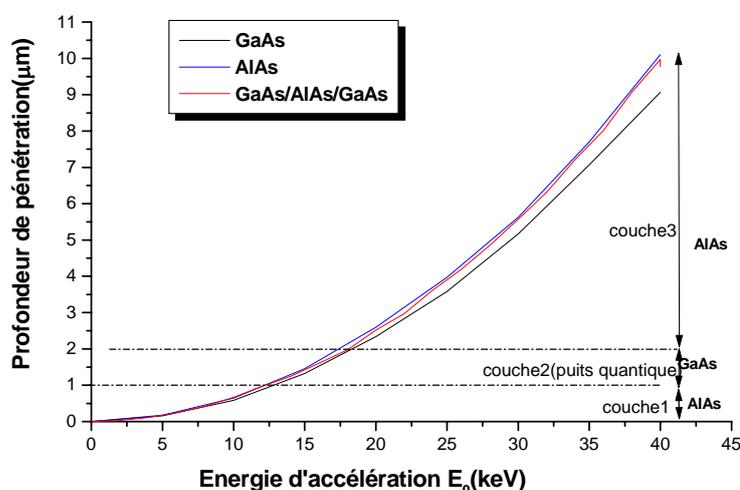


Fig.III. 4. Profondeur de pénétration en fonction de  $E_0$  pour le GaAs.

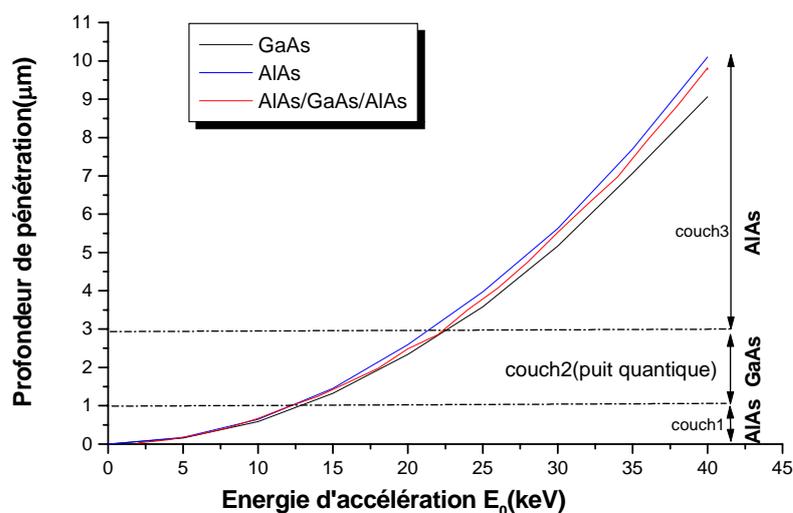
Donc on peut conclure que la profondeur de pénétration calculée par notre modèle numérique pour le *AlAs* et *GaAs* est similaire à celles obtenues par Wittry – Kyser [65] et Kanaya – Okayama [18], bien qu'elle est un peu écartée de celle de Everhart – Hoff [20].

### III.3.2. Profondeur de pénétration pour *AlAs/GaAs/AlAs* :

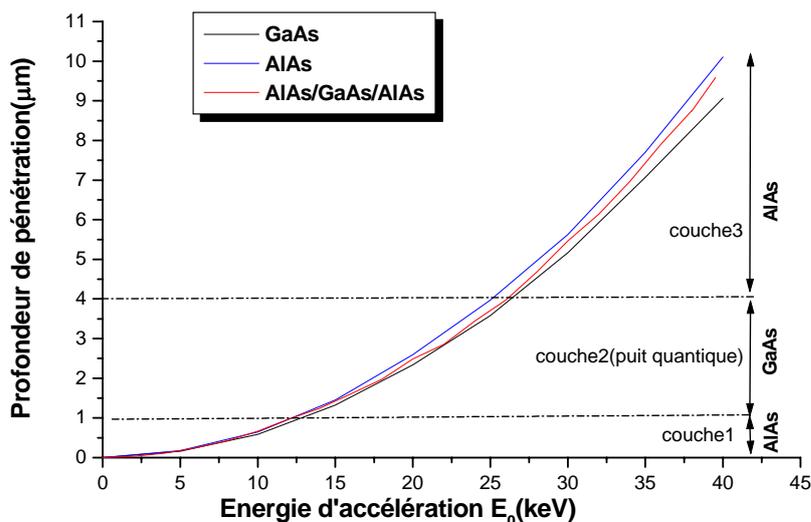
La profondeur de pénétration est aussi calculée en fonction de l'énergie d'accélération pour l'hétérostructure à puits quantique *AlAs/GaAs/AlAs*, pour trois valeurs du puits quantique de *GaAs*,  $d = 1\mu\text{m}$ ,  $2\mu\text{m}$  et  $3\mu\text{m}$ . Pour bien distinguer et comparer l'allure de profondeur de pénétration d'*AlAs/GaAs/AlAs* on fait présenter en plus la profondeur de pénétration de *GaAs* et celle d'*AlAs*.



**Fig.III.5.** Profondeur de pénétration en fonction de l'énergie d'accélération  $E_0$  dans le *AlAs/GaAs/AlAs* pour un puits quantique de  $1\mu\text{m}$ .



**Fig.III.6.** Profondeur de pénétration en fonction de  $E_0$  dans le *AlAs/GaAs/AlAs* pour un puits quantique de  $2\mu\text{m}$ .



**Fig.III.7.** : Profondeur de pénétration en fonction de l'énergie d'accélération  $E_0$  dans le AlAs/GaAs/AlAs pour un puits quantique de  $3\mu\text{m}$ .

La profondeur de pénétration d'AlAs/GaAs/AlAs rapproche de celle d'AlAs dans le premier cas qui correspond un puits de  $1\mu\text{m}$ ), lorsque les électrons pénètrent le puits quantique de GaAs on peut remarquer que l'allure de profondeur d'AlAs/GaAs/AlAs est déviée vers l'allure de GaAs, cette déviation est bien clair dans la figure (II.7) dont la valeur du puits est égale à  $3\mu\text{m}$ .

Quand les électrons pénètrent la troisième couche (AlAs) , on ne peut pas avoir un retour total de l'allure de AlAs/GaAs/AlAs vers l'allure d'AlAs, c'est-à-dire elle ne coïncide plus avec l'allure de AlAs, parce que, lorsque les électrons sortent de puits avec un trajet qui diffère de celle de AlAs , donc la déviation de l'allure de AlAs/GaAs/AlAs augmente quand la largeur de puits augmente mais cette déviation est continue même dans la troisième couche d'AlAs et elle ne coïncide jamais avec l'allure d'AlAs. Au contraire, si les dimensions de puit quantique diminuent à l'échelle nanométrique on ne peut pas observer une déviation, et dans ces cas, l'allure de profondeur de pénétration de AlAs/GaAs/AlAs coïncide pratiquement avec celle de AlAs.

On peut donc conclure qu'il est très difficile d'observer la déviation de la région de puits quantique à travers l'allure de profondeur de pénétration dans le cas de faible dimension de puits quantique (l'échelle nanométrique).

### III.4. Profil de distribution :

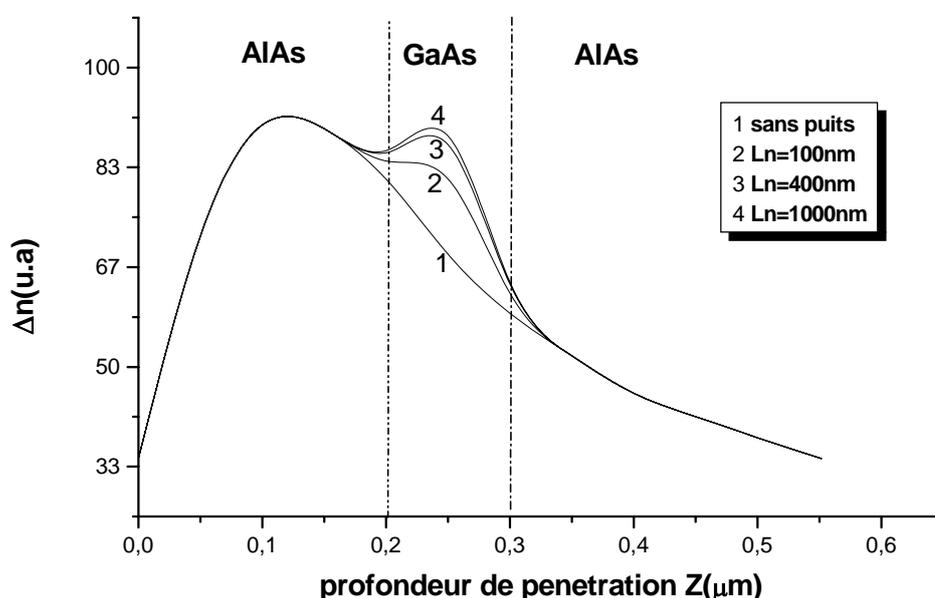
#### III.4.1. Influence de la largeur du puits et de la longueur de diffusion :

Afin d'illustrer la sensibilité de notre modèle de simulation Monte Carlo, nous exposons dans les figures 8,9 et 10 le profil de distribution des porteurs en excès en fonction de la profondeur de pénétration pour l'hétérostructure à puits quantique *AlAs/GaAs/AlAs*.

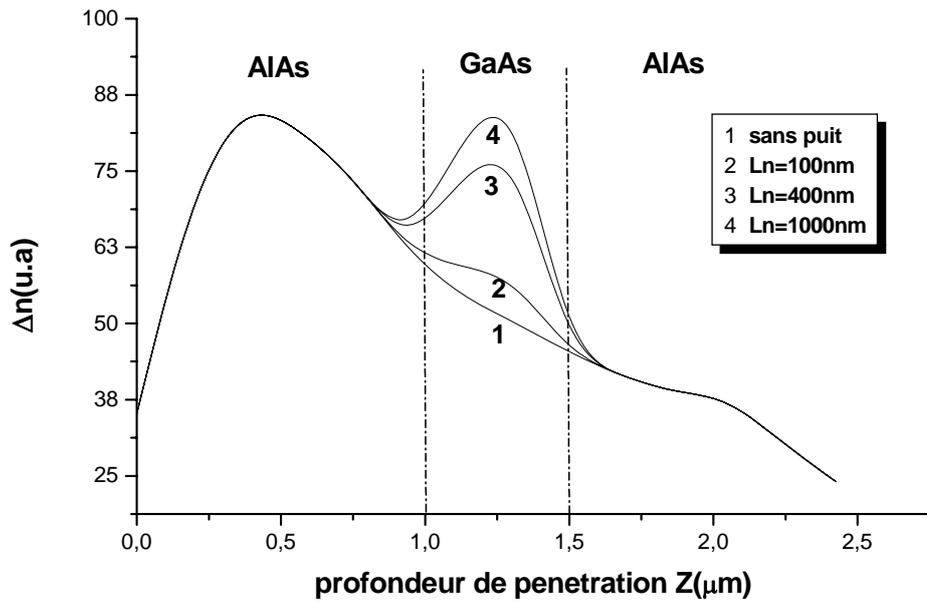
Le calcul a été fait pour trois largeurs différentes du puits quantique :  $d=100, 500$  et  $750\text{nm}$ , ainsi que pour quatre valeurs de longueur de diffusion  $L_n$  des porteurs en excès dans chaque puits quantique.

On peut remarquer facilement qu'il y a une singularité dans la courbe de chaque figure dans la région de puits quantique de *GaAs*. Cette singularité est due au phénomène de confinement des électrons qui est traduit par une augmentation de concentration des porteurs en excès dans le puits quantique, cette singularité augmente proportionnellement avec la largeur du puits quantique, et la longueur de diffusion, ce qu'il mène à une augmentation remarquable de la concentration des porteurs en excès ( $\Delta n$ ) dans la région du puits quantique.

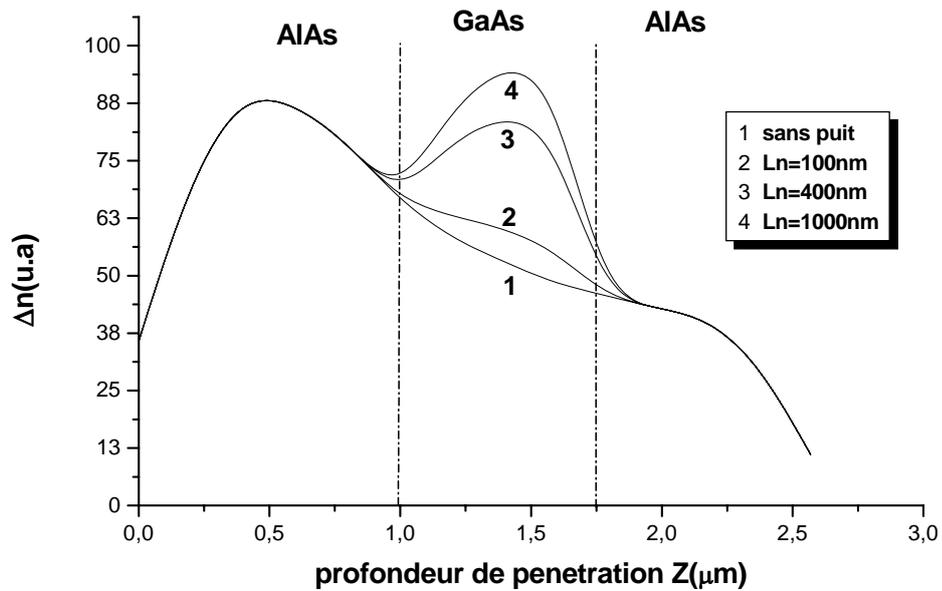
Les électrons diffusés sont les électrons localisés près du puits quantique parce qu'ils ont une grande probabilité de passer vers le puits, au contraire pour les électrons qui sont situés loin du puits quantique.



**Fig.III.8.** Profil de distribution des porteurs pour un puits quantique de  $100\text{nm}$  et  $E_0=10\text{KeV}$ .

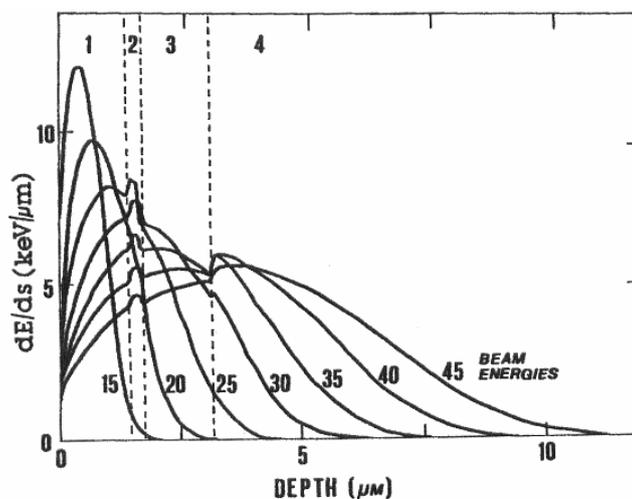


**Fig.III.9.** Profil de distribution des porteurs pour un puits quantique de 500 nm et  $E_0=20\text{KeV}$ .



**Fig.III.10.** Profil de distribution des porteurs pour un puits quantique de 750 nm et  $E_0=20\text{KeV}$ .

D'autres chercheurs ont trouvé des résultats similaires, figure (III.10.bis) [66].

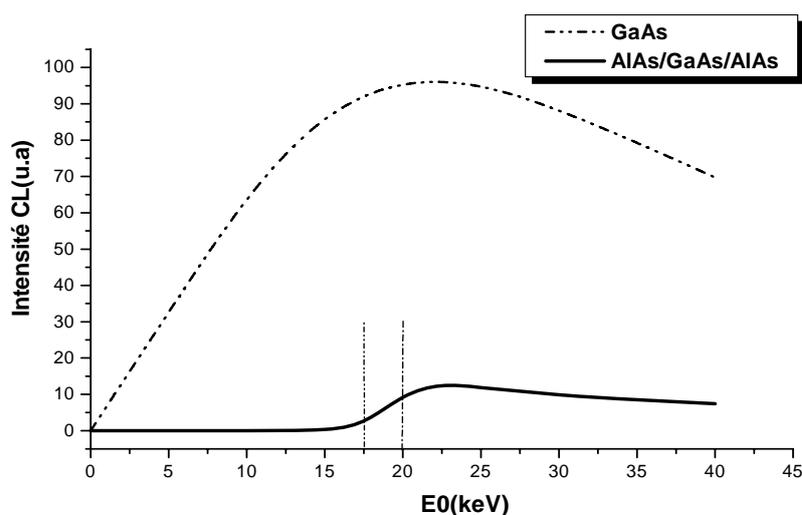


**Fig.III.10.bis.** La dose d'énergie d'accélération ( $dE/ds$ ) en fonction de la profondeur pour une hétérostructure GaAlAs. région1-Ga<sub>0.7</sub>Al<sub>0.3</sub>As, région2-Ga<sub>0.95</sub>Al<sub>0.05</sub>As (cavité laser), région3-Ga<sub>0.7</sub>Al<sub>0.3</sub>As, region4-GaAs (substrat) [66].

### III.5. Signal cathodoluminescence $I_{CL}$ :

#### III.5.1. Signal cathodoluminescence dans le AlAs/GaAs/AlAs :

La forme générale des courbes  $I_{CL}(E_0)$  est similaire pour tous les modèles utilisés dans le cas d'un simple échantillon, l'allure présente en général un maximum, elle est déterminée par la génération et la recombinaison des porteurs à faible énergie d'accélération et par l'absorption des photons à hautes énergies d'accélération figure (III.11) .

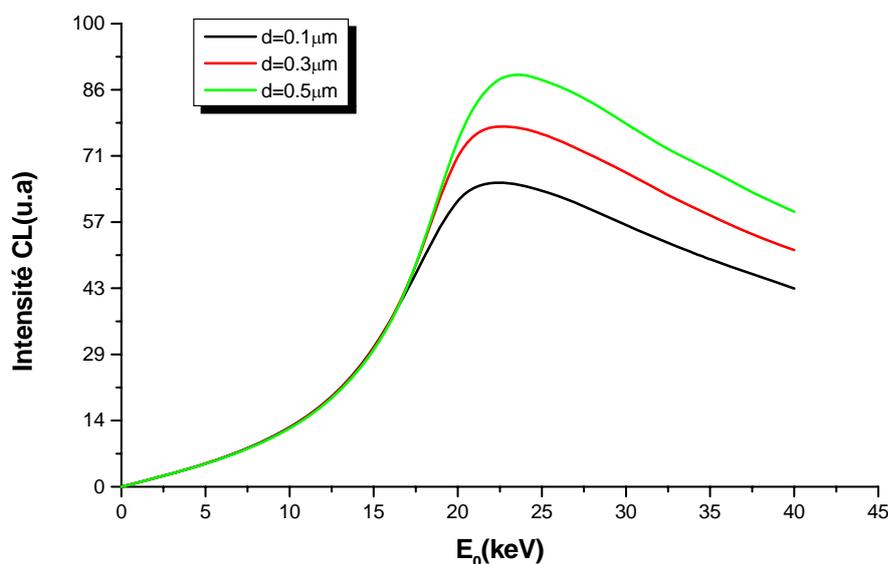


**Fig.III.11.**  $I_{CL}$  en fonction de l'énergie d'accélération  $E_0$  de GaAs et AlAs/GaAs/AlAs pour un puits de largeur  $d=500\text{nm}$ , et ( $N_e=100, \alpha=5 \cdot 10^3 \text{cm}^{-1}$ ,  $L_n=1000\text{nm}$ )

Dans le cas d'une hétérostructure à puits quantique  $AlAs/GaAs/AlAs$ , l'allure est différent de celle de GaAs, à cause de la recombinaison non radiative des porteur en excès dans les deux régions d' $AlAs$ , en principe, on va avoir un signal cathodoluminescence dans la région de GaAs seulement, mais dans la réalité, il y a un signal CL à côté de puit quantique avant  $E_0 \approx 17\text{KeV}$ , à cause de phénomène de diffusion des porteurs vers la couche GaAs.

Donc l'intensité de la cathodoluminescence sera nulle (pour  $0 < E_0 < 17 \text{ KeV}$ ) à l'exception de ceux qui sont situés près du puits quantique ces porteurs ont une probabilité élevée pour passer vers le puits quantique où l'intensité CL sera considérable.

### III.5.1. Influence de largeur du puits quantique:



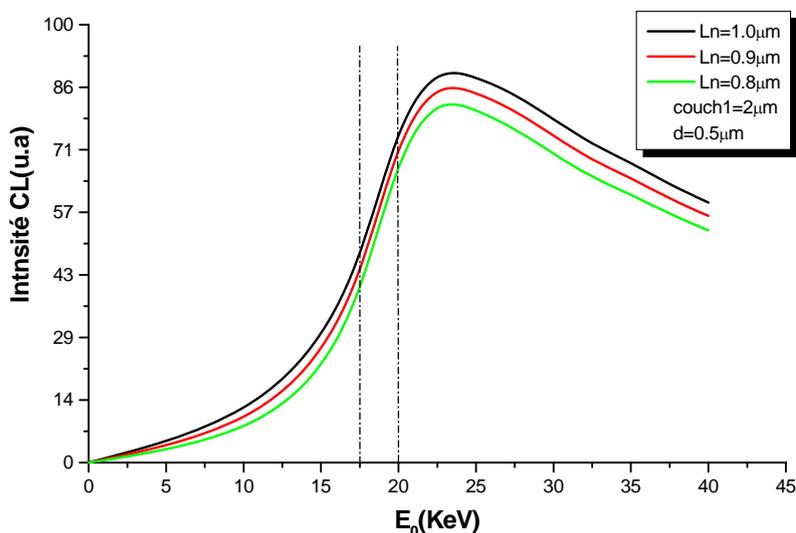
**Fig.III.12.**  $I_{CL}$  en fonction de l'énergie d'accélération  $E_0$  de  $AlAs/GaAs/AlAs$  pour différentes valeurs de puits quantique.

$$(N=100\text{é}, \alpha=5.10^3\text{cm}^{-1}, L_n=1000\text{nm})$$

$I_{CL}$  augmente à chaque fois quand la largeur de puits quantiques de GaAs augmente, parce que la zone de GaAs (le puit quantique) représente la région de la recombinaison radiative donc il est logique que l'intensité de Signal CL croit.

### III.5.2. Influence de longueur de diffusion :

Un des paramètres de volume les plus important est la longueur de diffusion des porteurs minoritaires  $L_n$  qui joue un rôle très important dans l'étude caractéristique des hétérostructures comme il est montré dans la figure (III.13).



**Fig.III.13.**  $I_{CL}$  en fonction de l'énergie d'accélération  $E_0$  de  $AlAs/GaAs/AlAs$  pour différentes valeurs de la longueur de diffusion:  $L_n=1, 0.9, 0.8 \mu m$ .

Le signal CL est presque nul pour les faibles énergies d'accélération  $E_0$  parce que les électrons pénétrants restent toujours dans la première couche  $AlAs$ . Le signal CL est important pour les fortes  $E_0$  puisque les électrons pénétrants atteignent la deuxième couche de  $GaAs$  peuvent se recombiner d'une façon radiative en donnant donc un signal CL. En général quand  $L_n$  augmente l'intensité CL croît.

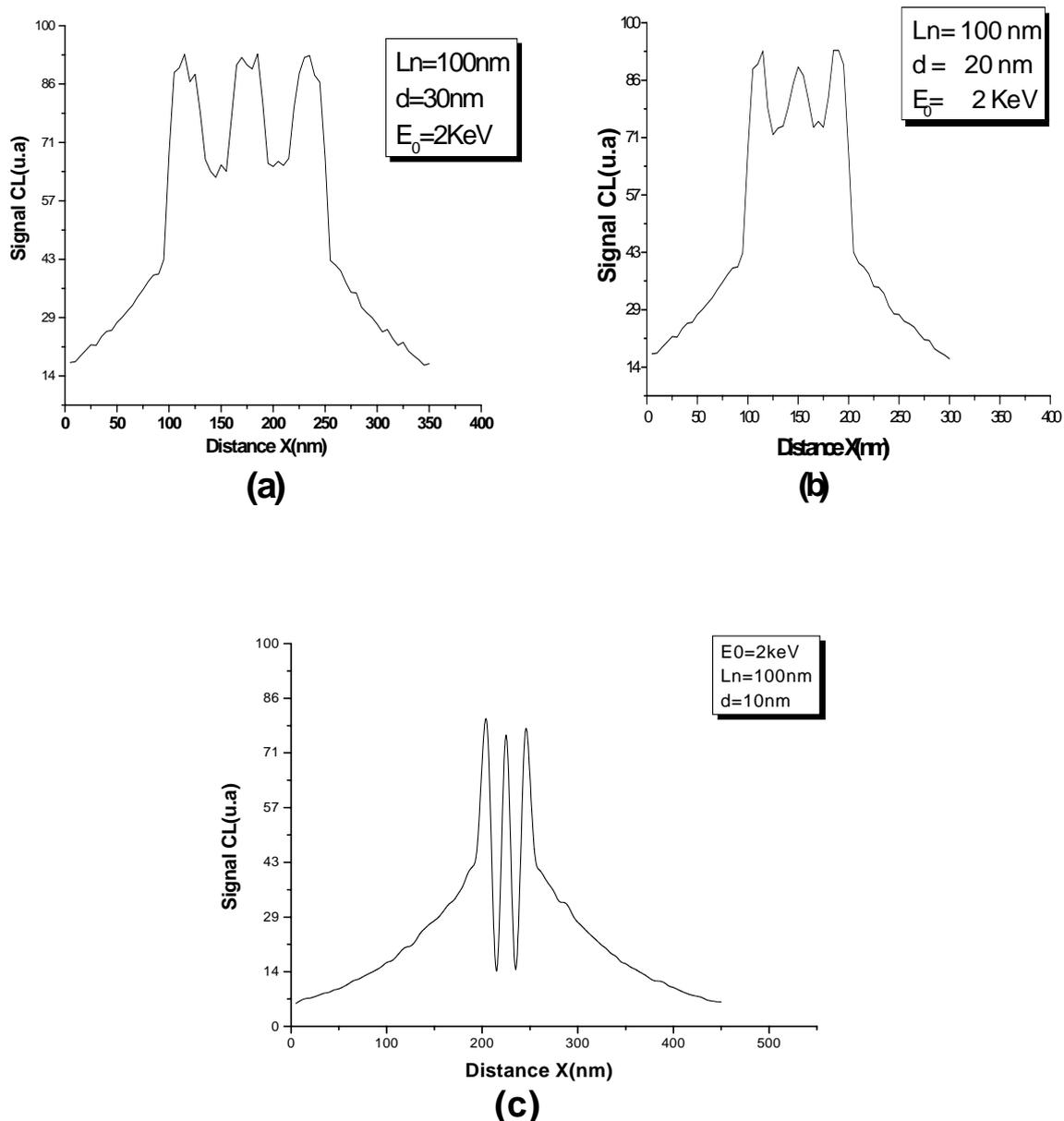
Remarque : l'influence de  $L_n$  peut être inversée si on utilise directement  $(\Delta n/\tau)$ , c'est-à-dire le théorème de Shockley-Read-Hall dans le calcul du signal CL.

### III.5.2. Signal CL dans une hétérostructure parallèle au faisceau :

Dans la deuxième partie de ce travail on a calculé l'intensité CL dans une hétérostructure à multipuits quantiques d' $AlAs/GaAs/AlAs/GaAs/AlAs/GaAs/AlAs$  parallèle par rapport au faisceau électronique. Le signal CL est calculé pour différentes largeurs du puits de  $GaAs$  et des barrières de potentiels ( $AlAs$ )  $d$ , ainsi que pour différentes valeurs de diffusion  $L_n$  et de différentes énergies d'accélération  $E_0$ .

### III.5.2.1. Influence de largeur du puits quantique :

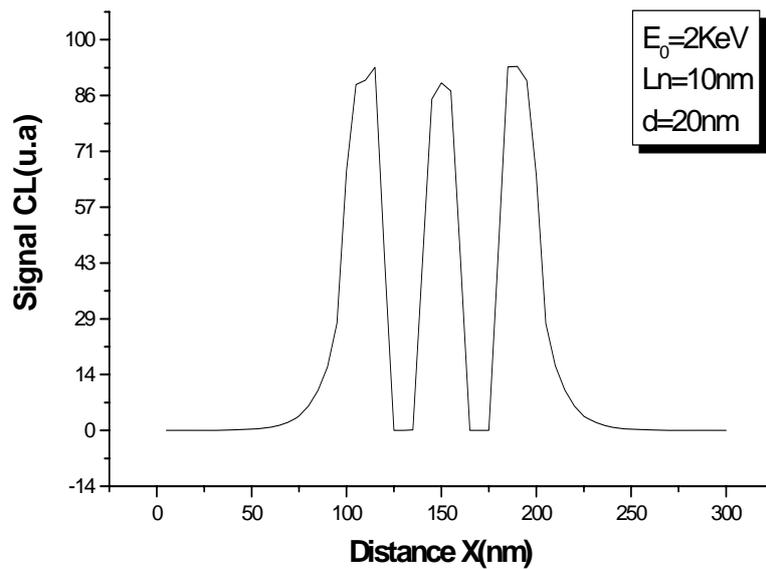
En ce qui concerne l'influence de l'épaisseur des puits quantique on peut dire, malgré que les épaisseur  $d$  des puits et des barrières est faible mais ils sont bien distingués et les trois pics des puits sont résolus, donc on peut dire (en mode d'image) qu'on a un bon contraste de l'image ce qu'il prouve la bonne sensibilité de notre modèle de simulation. Comme il est bien évident dans la figure (III.14).



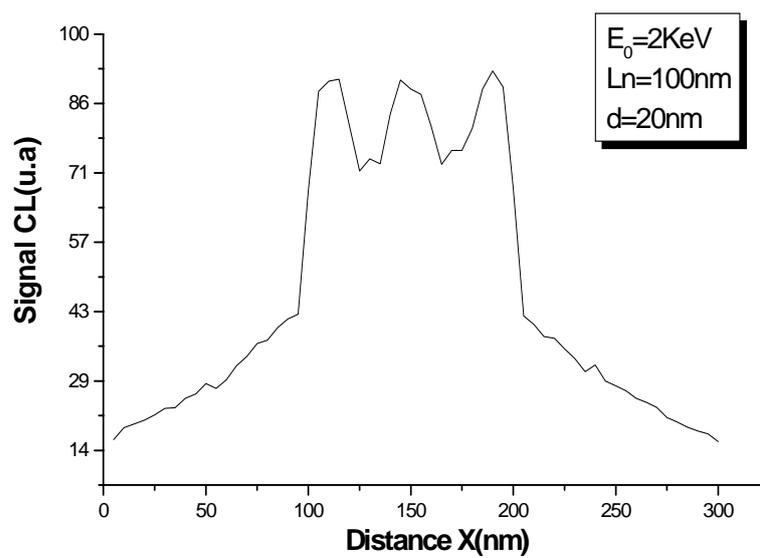
**Fig.III.14.** L'intensité de la cathodoluminescence  $I_{CL}$  en fonction de distance X de l'échantillon pour : (a)  $d = 30 \text{ nm}$  de largeur des barrière/puits quantiques. (b)  $d = 20 \text{ nm}$  de largeur des barrière/ puits quantiques. (c)  $d = 10 \text{ nm}$  de largeur des barrière/puits quantiques.

### III.5.2.2. Influence de longueur de diffusion :

Un des paramètres le plus important c'est la longueur de diffusion des porteurs minoritaires  $L_n$ , qui joue un rôle très important dans l'étude d'hétérostructures à multipuits quantiques et à l'intensité CL, dans la figure (III.15.a.b.c) nous avons vu l'influence de ce paramètre sur l'intensité CL .



(a)



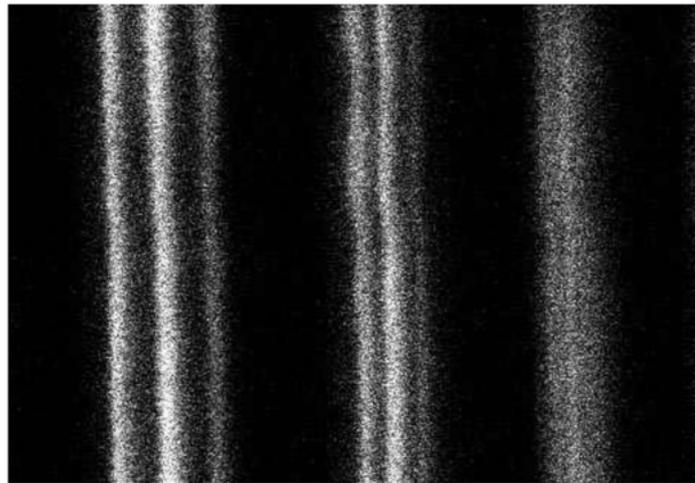
(b)

Pour comparer et juger notre travail, nous avons présentés quelques résultats (travaux) obtenus par d'autres chercheurs dans le même domaine :

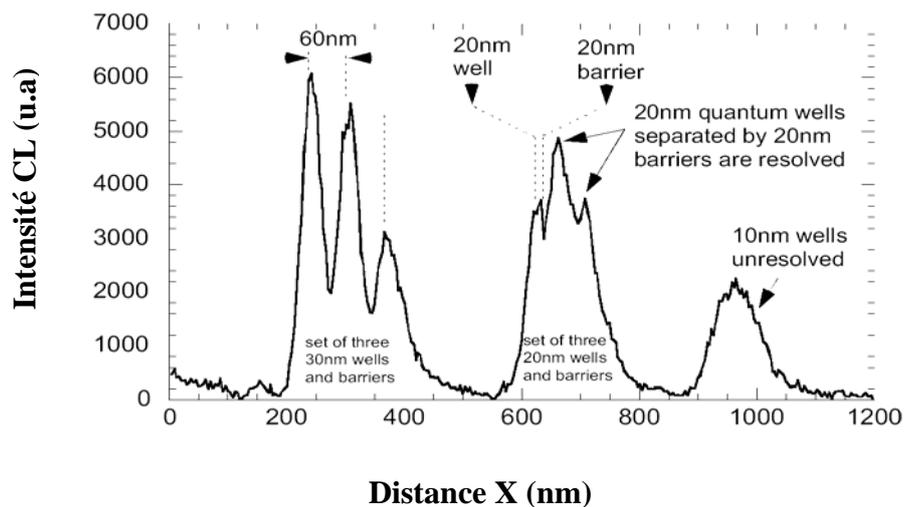
Un échantillon de GaAs/AlAs/AlGaAs à été élaboré et caractérisée par cathodoluminescence pour trois largeurs des puits/barrières :  $d = 10, 20, 30$  nm [67].

La figure (III.14.bis.a) montre l'image CL (le contraste), sur le côté gauche, les puits quantiques, sont bien résolus (distingue), sachant que  $d = 30$  nm et  $E_0 = 2$  keV [67].

La figure (III.14.bis.b) montre le signal CL pour une énergie d'accélération  $E_0 = 1.5$  keV [67].

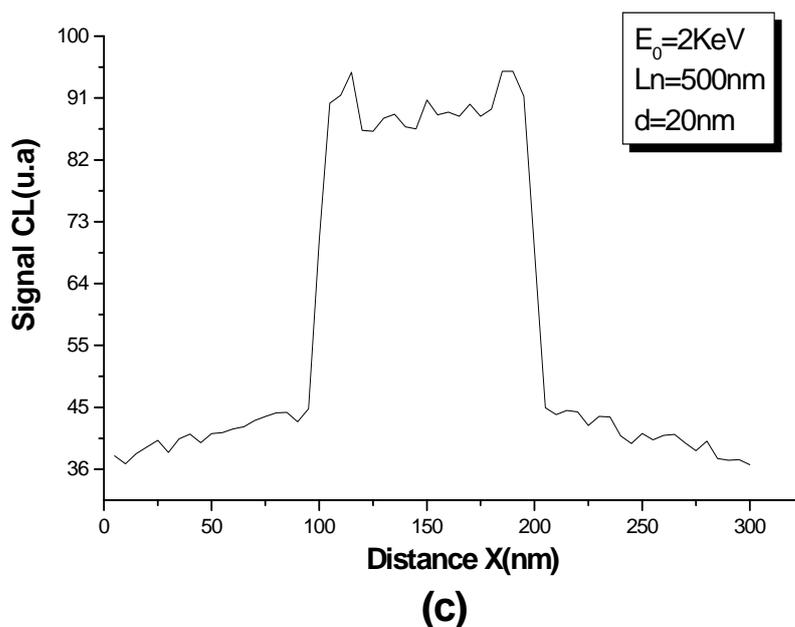


(a)



(b)

**Fig (III.14.bis) :** (a) l'image CL (b) l'intensité CL pour trois modes :  $d = 10, 20, 30$  nm de largeur des puits/barrières [67].



**Fig.III.15.** L'intensité de la cathodoluminescence  $I_{CL}$  en fonction de distance X de l'échantillon pour : (a)  $L_n = 10 \text{ nm}$ , (b)  $L_n = 100 \text{ nm}$ , (c)  $L_n = 500 \text{ nm}$ .

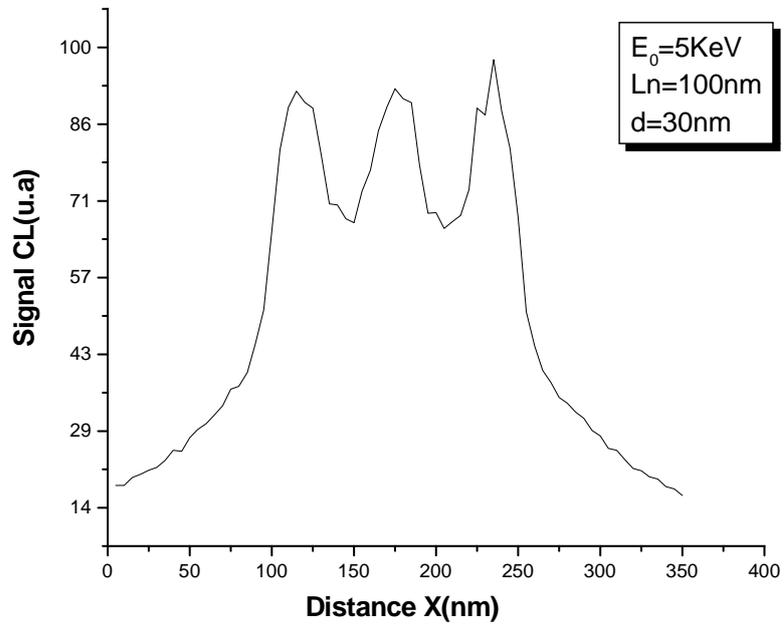
Pour les faibles valeurs de  $L_n = 10 \text{ nm}$  (figure III.15.a) on peut voir que les trois pics des puits quantiques sont bien distingués. Donc on a une bonne résolution, on peut expliquer ça par la suite : de diffusion  $L_n$  est faible donc la diffusion des porteurs en excès est faible (la diffusion des porteurs se fait de la région de AlAs vers les puits de GaAs où la recombinaison est radiative) donc l'intensité de signal CL sera nulle dans les régions d'AlAs (les barrières de potentiels) et presque nulle au voisinage des puits quantiques et forte au niveau des puits, ce qui nous donne une bonne résolution des puits quantiques et des barrières de potentiels.

Quand  $L_n$  augmente ( $L_n = 20 \text{ nm}$ , figure III.15.b) un nombre plus grand des porteurs en excès, qui sont situés au voisinage des puits, diffusent dans ces derniers et ils sont recombinés d'une façon radiative, ce qui traduit par un signal CL quand même important dans les côtés des puits quantiques de GaAs. Donc on a un phénomène de chevauchement des pics dus à la diffusion des porteurs minoritaires, donc le contraste de l'image est assez bien par rapport à la figure (III.15.a).

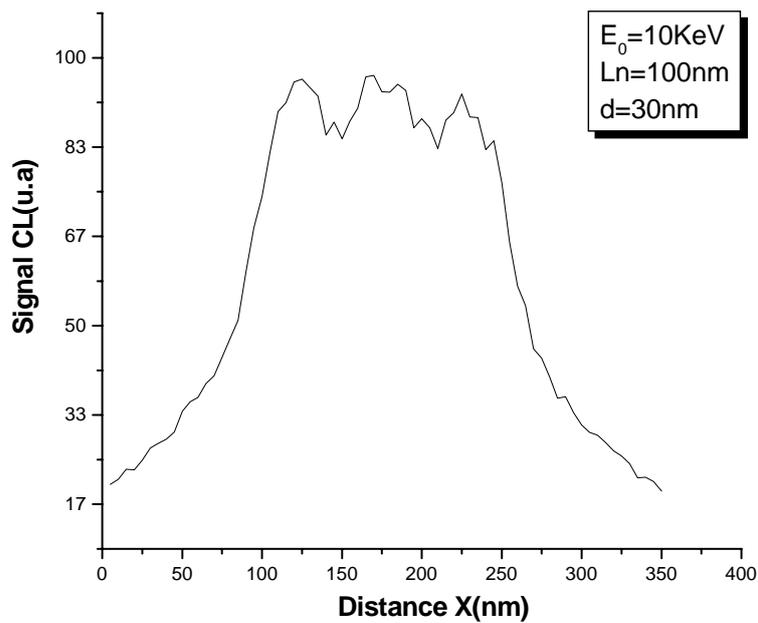
Quand  $L_n$  augmente encore ( $L_n = 500 \text{ nm}$ , figure III.15.c), dans ce cas, il y a un chevauchement total des raies de signal CL.

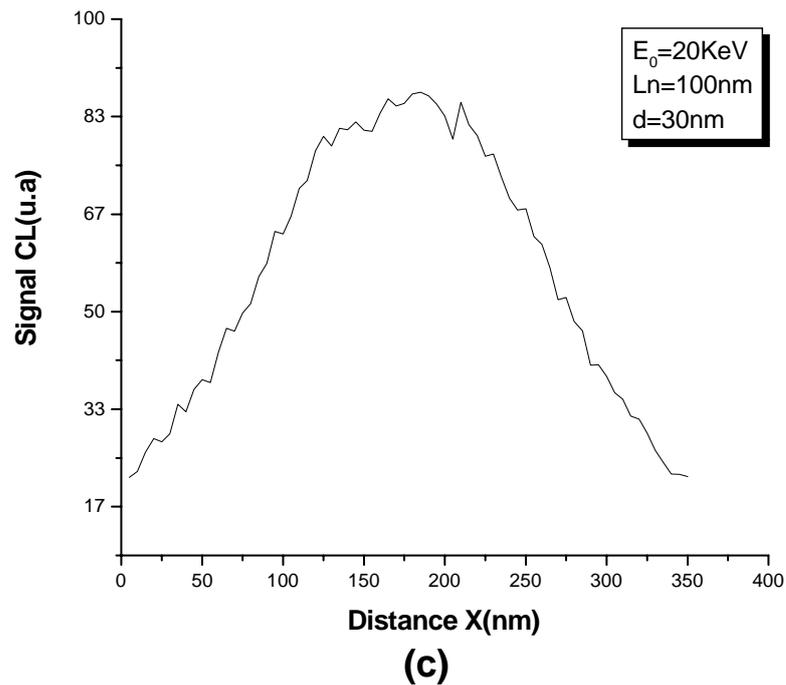
### III.5.2.3. Influence de l'énergie d'accélération:

Un autre paramètre aussi important, c'est l'énergie d'accélération des électrons incidents, le signal est calculé pour trois valeurs d'énergie :



(a)





**Fig.III.16.** L'intensité de la cathodoluminescence  $I_{CL}$  en fonction de distance  $X$  de l'échantillon pour : (a)  $E_0=5\text{KeV}$ , (b)  $E_0=10\text{KeV}$ , (c)  $E_0=20\text{KeV}$ .

Lorsque l'énergie d'accélération est faible  $E_0=5\text{KeV}$ , on peut distinguer trois pics correspondants au trois puits quantiques. La bonne correspondance est due à la faible valeur de l'énergie utilisée, figure (III.16.a).

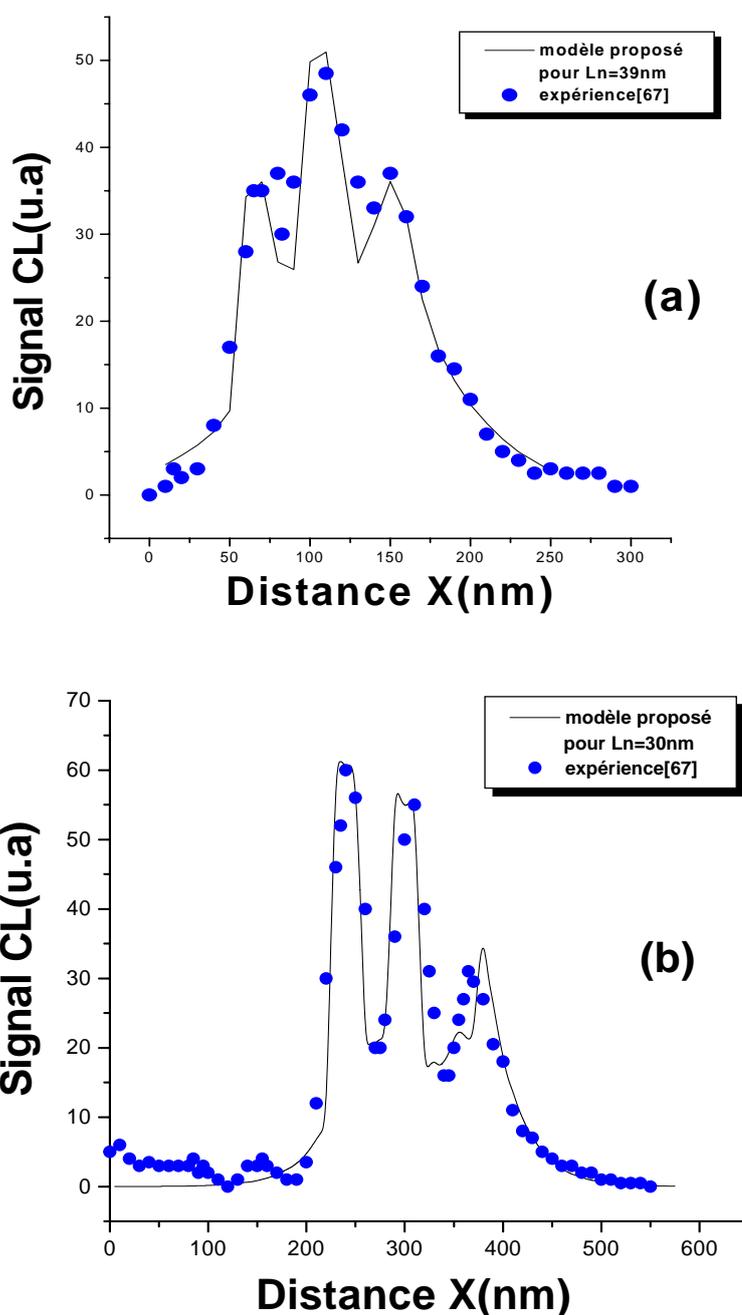
Quand on utilise une énergie faible donc nous avons créé un petit volume de génération à l'intérieur de l'échantillon, et lorsque ce volume est petit (de l'ordre de l'épaisseurs des dimensions des puits quantiques) donc il couvre des petites zones ce qu'il permet de bien distinguer les puits et les barrières de potentiel.

Lorsque l'énergie d'accélération augmente  $E_0=10$  et  $20\text{KeV}$  (figure.III.16.b,c), le volume de génération augmenté aussi (devient plus grand par rapport au dimension des puits quantique) donc il couvre une large zone qui appartient à tous les puits de GaAs et les barrière d'AlAs, dans ce cas, on ne peut pas distinguer les pics, et on a une chevauchement total des pics de l'intensité CL dans le cas de  $E_0=20\text{KeV}$  (figure.III.16.c).

### III.5.2.4. Comparaison avec l'expérimental:

La figure (III.17.a) et (III.17.b) illustre une comparaison des résultats expérimentaux [67] d'un échantillon de GaAs/AlAs/GaAlAs avec ceux obtenus par notre simulation.

L'ajustement des résultats de calcul avec les points expérimentaux permet de déterminer quelques paramètres telle que la longueur de diffusion  $L_n$  pour la structure étudiée.



**Fig.III.17.** L'intensité de la cathodoluminescence  $I_{CL}$  en fonction de distance X de Comparaison des résultats obtenus par simulation avec ceux de l'expérience pour : a)  $E_0=1.5\text{KeV}$  et  $d=20\text{nm}$ , b)  $E_0=1.5\text{KeV}$  et  $d=30\text{nm}$ .

On peut calculer la valeur expérimentale de  $L_n$ , en utilisant la diffusion des porteurs minoritaires vers le puits quantique où l'intensité du signal CL au voisinage du puits est donnée par la relation [27] :

$$I_{CL} \propto I_{\max} \exp(-x / L_n)$$

On a donc :

$$\log(I_{cl}) = -\frac{1}{L_n} x + \log(I_{\max}) \quad (\text{III.1})$$

Donc (III.1) est une équation simple d'une droite, et à partir de la pente on peut déduire la valeur expérimentale de longueur de diffusion  $L_n$ , pour la figure (III.17.a)  $L_n = 46$  nm, et pour la figure (III.17.b)  $L_n = 40$  nm. Ces valeurs sont comparables avec celles obtenues par notre modèle de simulation:  $L_n=39$  nm et  $L_n=30$  nm respectivement.

On peut remarquer que les pics n'ont pas la même valeur de signal CL. Cet effet peut être due au phénomène de l'interdiffusion des atomes au sein d'hétérostructure [70].

Remarque : on peut étudier quelques nanostructures (puits quantique) en utilisant la pointe du Microscope à effet tunnel (STM) [71].

### III.6. Conclusion :

Dans ce chapitre:

- La profondeur de pénétration des électrons et la trajectoire des électrons ont été calculées avec une comparaison avec d'autres modèles.
- La distribution des porteurs en excès est aussi calculée pour différentes largeurs de puits quantiques, ainsi que pour trois valeurs de longueurs de diffusion. L'allure générale prend la forme gaussienne avec une singularité due au phénomène de confinement des porteurs en excès.
- Le signal CL a été calculé dans une hétérostructure à puits quantique et dans une hétérostructure à multipuits quantiques.
- Enfin, une comparaison de résultats de signal CL a été faite avec l'expérience ce qui permet de déterminer la longueur de diffusion  $L_n$ .

## **Conclusion générale**

## Conclusion générale :

Les problèmes posés dans la caractérisation des nanostructures sont divisés en deux axes, le premier concerne les outils expérimentaux, tandis que le deuxième s'intéresse à la simulation et les approches théoriques proposées pour comprendre les résultats expérimentaux d'une part, et de chercher les paramètres qui rentrent en jeu d'autre part. Les modèles analytiques existants jusqu'à présent ne peuvent pas traiter les cas des multicouches, parce que les structures et les propriétés physiques changent au fur et à mesure de la diffusion des électrons dans le matériau. Donc, il ne reste que les modèles numériques pour traiter les hétérostructures.

Ce travail a été consacré à modéliser l'hétérostructure de la famille III-V comme par exemple AlAs/GaAs/AlAs, qui est utilisée dans le domaine d'optoélectronique (le diode laser), lors de sa caractérisation par des méthodes basées sur l'interaction électron-matière telle que la technique cathodoluminescence. Comme la diffusion des électrons dans le solide est stochastique, la méthode de calcul proposée a été Monte Carlo. Le problème posé dans la microscopie cathodoluminescence est la mauvaise résolution de l'image lors de l'étude des nanostructures (puits quantique, point quantique, nano agrégat...). Dans ce travail on a étudié les paramètres responsables de la variation de signal CL et même la résolution de l'image.

Le modèle qui a été réalisé en utilisant le langage Fortran est détaillé dans le deuxième chapitre, le principe physique est simple : l'électron incident pénètre dans le matériau avec une énergie d'accélération  $E_0$ , et il va perdre son énergie par des collisions aléatoires avec les atomes du matériau, après chaque collision une paire électron-trou est créée. A la fin du trajet on calcule la profondeur de pénétration, la distribution des porteurs en excès et le signal CL des porteurs minoritaires après la recombinaison radiative dans les couches de GaAs.

Le troisième chapitre résume les résultats de calcul obtenus par notre modèle.

La profondeur de pénétration calculée par notre modèle pour le AlAs et le GaAs est similaire à celles obtenues par d'autres résultats théoriques, l'allure de la profondeur de pénétration dans le cas d'AlAs/GaAs/AlAs aussi calculée, et l'influence de la largeur de puits quantique a été étudiée.

Concernant la distribution des porteurs en excès dans le AlAs/GaAs/AlAs, le calcul est fait pour trois largeurs de puits quantiques, ainsi que pour trois valeurs de longueur de diffusion. L'allure générale est similaire à la forme gaussienne avec une singularité dans la région de puits quantique due au phénomène de confinement des électrons dans le puits quantique.

Le signal cathodoluminescence (CL) a été calculé pour le cas d'une hétérostructure d'AlAs/GaAs/AlAs perpendiculaire au faisceau électronique, ainsi que pour une hétérostructure à multipuits quantiques parallèles d'AlAs/GaAs/AlAs/GaAs/AlAs/GaAs/AlAs, le signal a été calculé en fonction des paramètres qui sont les responsables à la variation de signal CL est à la résolution de l'image CL, comme la longueur de diffusion, l'énergie d'accélération et la largeur des multicouches nanométriques.

La bonne ajustement de ce modèle avec ce qui est trouvé expérimentalement montre la fiabilité de ce calcul et permet de déterminer quelques paramètres, tel que la longueur de diffusion, et les dimensions des couches, et par conséquent, l'optimisation de ces paramètres pour avoir une bonne résolution des images en mode cathodoluminescence, ce modèle numérique proposé peut être utilisé avec succès pour étudier des nanostructures en simulant les techniques de caractérisation basés sur l'interaction électron-matière telle que la technique cathodoluminescence.

**Références :**

- [1]: S. Najar, Thèse de Doctorat, Ecole Polytechnique, France, 1992.
- [2]: Microsoft Fortran Power Station 4.0, Fortran 90 for scientists and Engineers, 2003.
- [3]: Y. Beggah, thèse de Magister, univ. Constantine, 1992.
- [4]: H. Saijo and M. Shiojri, ICEM 14, Cancun (Mexico), Symp. Vol 1, 433, 1998.
- [5]: V. I. Petrov, R. S. Gvozdover, Scanning, 13, 410, 1991.
- [6]: D. Pastré, thèse de Doctorat, Université De Reims Champagne Ardenne, 1999.
- [7]: J. Schreiber, S. Hildebrandt, H. S. LLeipner, Phys. Stat. Sol (a) 138, 1993.
- [8]: G.V.Saparin, Bbiophysical Electron Microscopy, Academic Press London, 451, 1990.
- [9]: J.Faist, F. Capasso, Quantum Cascade Laser, Mc Graw-Hill Yearbook of Science and Technology, p265-267, 1997.
- [10]: J. Faist, F. Capasso, D. L. Sivco, C. Sirtori, A. L. Hutchinson, and A. Y. Cho, Quantum Cascade Laser, Science,264,553, 1994
- [11]: J. B. Anderson, J. Chem. Phys 63, 1499 (1975).
- [12]: S. Kouissa, Thèse de Magister, Université Mentouri Constantine, 2001.
- [13]: C. Frigeri, EBIC Assesment of Semiconductors Properties, Sciences, Technology and Education of Microscopy and: an overview. 1, 1, 163, Spain, 2003.
- [14]: A. Boudjani, Semicond. Sci. Technol 20, p. 175, 2005.
- [15]: M. Hadeif, Thèse de Magistère, Univ. Constantine, 1999.
- [16]: A. Nouri, Thèse de doctorat, Univ. Constantine, 2000.
- [17]: B. Lapeyer, E. Pardoux, R. Sentis. « Méthode de Monte-Carlo pour les Equations de Transport et de Diffusion », Springer, Berlin, 1998.
- [18]: K. Kanaya and S. Okayama, J. Appl. Phys. 5, 43 (1972).
- [19]: N, Belabed, Mémoire de Magister, Université Mentouri, Constantine, 2006
- [20]: T. E. Everhart and P. H. Hoff, J. Appl. Phys. 42, 5837, 1971.
- [21]: S. Hildebrandt, J.Schreiber, W. hergert, V. I. Petrov, Phys. Stt. Sol (a) 110, 1988.
- [22]: G. R. Booker, Microscopy of Semiconducting Material, 259, 1981.
- [23]: V. Barbin and M. Schoever, C. R. Acad. Sci. Paris, 325, 157, 1997.
- [24]: D.F.Kyser, Poc. Of the 6<sup>th</sup>Int. Conf. On X-Rays optics and microanalysis- Osaka,University of Tokyo Press-Tokyo-P.147, 1972.
- [25]: B. G. Yacobi and D. B. Holt, J. Appl. Phys. 59, 4, R1, 1986.
- [26]: C.C.Klick and.J.H.Schulman, Luminescence of Solids, Solid.Stat.Phys.5, 97, 1957.
- [27]: D.J.As, S. Potthast, U. Kohler, A. Khartohonko and K. Lischka, Cathodoluminescence of MBE-grown Cubic AlGa<sub>N</sub>/Ga<sub>N</sub> Multi-quantum Wells on GaAs(001) Substrates, Mat.Res.Soc, L5.4.4, 2003.
- [28]: B.G.Yacobi and D.B.Holt, Cathodoluminescence Microscopy of Inorganic solides, Edition Plenum Press, New York and Landon, 1990.
- [29]: K. Lohnert, E.Kubalek, Phys.Stat.Sol (a) 83, 307, 1984.
- [30]: D.P. Landau and K. Binder, A guide to Monte Carlo Simulation in Statistical Physic, Cambridge University Press, 2000.
- [31]: J.P.Smith, presented at 3 Nat'l, Conf. Electron Prob Analysis, Chicago, p38,1968.
- [32]: N. W. Moriarty, X. Krokidis, W. A. Lester Jr. and M. Frenklach, The Addition Reaction of Propargyl and Acetylene : Pathways to Cylic Hydrocarbons, 102, 2001.
- [33]: O. El Akramine, W. A. Lester Jr., X. Krokidis, C. A. Taft, A. C. Pavao, T. C. Guimaraes and R. Zhu, Molec. Phys. 101, 277, 2003.
- [34]: P.Baranski, V, Klotchkov, I. Potykévitch, Electroniques des semiconducteurs, Tome1, Edition Mir. Moscou, 369, 1975.
- [35]: S-M.Sze, « Semiconductor Device Development in the 1970s and 1980s-A perspective », IEEE tech. dig., Int. Electron device Meet. , Washington, D.C., Dec., 1980.

- [36]: N. Scala and E. Burstein, Phys. Rev. 98, 1757, 1955.
- [37]: J.L. Pankove, Optical Processes in Semiconductors, Dover publications Inc, 1971.
- [38]: R.K. Willardson, A.C. Beer; Semiconductors and Semimetals, Academic Press.
- [39]: C. Kittel, Introduction à la Physique de L'état Solide, Dunod, 1972.
- [40]: J.R. Chelikowsky, M.L. Cohen, Phys. Rev B 14,p.556, 1976.
- [41]: C.Aklein, Tech.Men, RaytheonCO.T.786, 1.8, 1969.
- [42]: J. Singh, Semiconductor Devices: Basic Principles, John-Wiley, 2001.
- [43]: B. Mombelli, Processus optique dans les solides, p.62-65, MASSON, 1995.
- [44]: C.et H. Ngô, Introduction à la physique des semi-conducteurs, P215, Dunod, 1998.
- [45]: H. Mathieu, Physique des Semiconducteur et des Composants Electroniques, 4<sup>em</sup> édition, Masson, p. 546.547, Paris, 1998.
- [46]: A. F. Bielajew, Fundamentals of The Monte Carlo Methode for Neutral and Charged Particle Transport, The University of Michigan, 2001.
- [47]: K. Binder, Monte Carlo Methods in Statistical Physics, Springer-Verlag, 1986.
- [48]: K. Nordlund, Basics of Monte Carlo Simulations, University of Helsinki, 2005.
- [49]: Y.Ayant E.Beloriwky, Cours de mécanique quantique, P.98.100.BORDAS, 2<sup>em</sup>e édition, Paris, 1974.
- [50]: G. Chalmond, La recherche 354, juin, 2002.
- [51]: F. Cesbon, A. Baumer, P. Blanc et D. Ohnenstetter, C. R. Acad. Sci. Paris t. 324, série 3a,353, 1997.
- [52]: M.Kostrzewa, Thèse de doctorat, Ecole Central de Lyon, France, 2003.
- [53]: P. Bhattacharya, Proprieties of III-V Quantum Wells and, Superlattices, p.3.26.38.66, London, 1996.
- [54]: G. Yang, A Monte Carlo Method of Integration, IB Diploma Programme Extended Essay in Mathematics, Norre Gymnasium, December, 2002.
- [55]: D. E. Knuth, The Art of Computer Programming Vol. 2: Semi Numerical Methods (Addison-wesley, Reading, Mass), 1981.
- [56]: G.A.Marsaglia, in Computational Science and Statistics: The interface, ed .L. Balliard (Elsevier, Amsterdam), 1985.
- [57]: M. Chelle, Thèse de Doctorat, Université de Rennes I, 1997.
- [58]: D.F.kyser, K. Murata, Electron Microprobe Film Analysis, IBM J.RES.DEVELOP, July, 1974.
- [59]: G. Belomoin, E. Rogozhina, J. Therrien, P. V. Braun, L. Abuhassan, M. H. Nayfeh, L. Wagner and L. Mitas, Phys. Rev. B 65, (2002).
- [60]: C. Filippi, S. B. Healy, P. Kratzer, E. Pehlke and M. Scheffler, Phys. Rev. Lett. p.89, 166,102, 2002.
- [61]: A. J. Williamson, J. C. Grossman, R. Q. Hood, A. Puzder and G. Galli, Phys. Rev. Lett. 89, 2002.
- [62]: A. Puzder, A. J. Williamson, J. C. Grossman and G. Galli, J. Chem. Phys. 117, 6721 (2002).
- [63]: A. Puzder, A. J. Williamson, J. C. Grossman and G. Galli, Phys. Rev. Lett. 88, 2002.
- [63]: Castagne, R., Duchemin, J.P., Gloannec, M., Rumelhard, Ch., Circuits Intégrés en Arseniure de Gallium, Collection technique et scientifique des télécommunications, Masson, 1989.
- [64]: A. Nouri, S. Chaguetmi, and N. Belabed, Surf. Inter. Analy, 2006.
- [65]: D.B. Wittry and D.F. Keyser, J.Appl.Phys.,38,375, 1967.
- [66]: W. Geral, R. A. Carlos, Monte Carlo simumation methode a Applied to the study of EBIC in a semiconductor LASER, p.261,Brazil,1987
- [67]: [http:// www.gatan.com/sem/monocl3.php](http://www.gatan.com/sem/monocl3.php)
- [68]: D. Pastere, Thèse de Doctorat, Université de Reims, p. 6, France, 1999.

- [69]: Z. Elataeche, Mémoire de Magister, Univ. Batna, 2006.
- [70]: B. Koiller and A. S. Martins, Optical Effects of Interdiffusion in GaAs/AlAs Heterostructures : Atomic Scale calculations, App.Phys.lett, 69 , Issue16,pp.2423-2425 ,1996.
- [71]: S. Ushioda, T. Tsuruoka, Y. Ohizumi, H. Hashimoto, STM Light Emission Spectroscopy of Individual Quantum Wells: Measurement of Transport Parameters in real Space, Braz.Jor.Phys,34 no.2b, 2004.

Titre :

**Etude de la nanostructure AlAs/GaAs/AlAs par cathodoluminescence et méthode Monte Carlo**

**Résumé:**

Dans ce présent travail, nous avons étudié le phénomène de l'interaction électron-matière, en élaborant un modèle numérique basé sur la méthode Monte Carlo et la technique Cathodoluminescence (CL), pour étudier une hétérostructure de la famille d'*AlAs/GaAs/AlAs* à puits quantique à l'échelle de nanomètre.

La procédure de calcul utilisée dans cette modélisation prend en compte la marche aléatoire des électrons dans la matière, et l'influence des paramètres du faisceau électronique (le nombre des électrons  $N_{el}$  et l'énergie d'accélération  $E_0$ ), ainsi que des paramètres physiques du matériau (la longueur de diffusion  $L_n$ , la largeur du puits quantique et le barrière de potentiel  $d$ ), et le phénomène de confinement électronique, et aussi son influence sur l'intensité du signal CL.

Nos résultats sont comparés avec ceux de l'expérience trouvés dans la littérature, ainsi que d'autres résultats théoriques, et ils sont en bon accord, ce qui nous a permis de constater que malgré la simplicité du modèle numérique, il est capable de bien caractériser les nanostructures à puits quantiques, et même déterminer les paramètres responsables à la résolution de l'image CL.

**Mots Clés :** Interaction électron-matière, Cathodoluminescence, Simulation Monte Carlo, Hétérostructure, AlAs/GaAs/AlAs, Puits quantique, confinement, nanostructure.

## دراسة البنى النانوية AlAs/GaAs/AlAs بتقنية التآلق المهبطي وطريقة مونتي كارلو

### ملخص:

في هذا العمل قمنا بدراسة ظاهرة التفاعل إلكترون- مادة عن طريق إنجاز نموذج حسابي يعتمد على طريقة مونتي كارلو و تقنية التآلق المهبطي (CL) ، من أجل دراسة مركب غير متجانس من نوع *AlAs/GaAs/AlAs* يتضمن بئر كمي (كوانتي) من رتبة النانومتر.

طريقة الحساب المستعملة في هذه النمذجة تأخذ بعين الاعتبار السير العشوائي للإلكترونات داخل المادة، وتأثير معاملات الحزمة الإلكترونية الساقطة (عدد الإلكترونات  $N_{el}$  وطاقة التسريع  $E_0$ )، كما تأخذ أيضا بعين الاعتبار المعاملات الفيزيائية للمادة المدروسة (طول الانتشار  $L_n$  عرض البئر الكمي و الحاجز الكموني  $d$ )، و ظاهرة الحصر الإلكتروني، وكذلك تأثيرها على شدة التآلق المهبطي و وضوح الصورة.

بمقارنة النتائج التي تحصلنا عليها مع بعض النتائج التجريبية الموجودة في المراجع وأخرى نظرية تبين وجود توافق جيد، الأمر الذي سمح لنا باستنتاج أنه رغم بساطة النموذج الحسابي إلا أنه قادر على وصف ودراسة مركبات وبنى من رتبة النانومتر ذات بئر كمي، وبإمكانه حتى تحديد المعاملات الفيزيائية المسؤولة عن وضوح الصورة في تقنية التآلق المهبطي.

**كلمات مفتاحية:** تفاعل إلكترون - مادة، التآلق المهبطي، محاكاة مونتي كارلو، مركب غير متجانس، *AlAs/GaAs/AlAs*، بئر كمي، ظاهرة الحصر الإلكتروني، البنى النانوية.

Title:

**Study of GaAs/AlAs/GaAs nanostructure by cathodoluminescence  
technique and Monte Carlo method**

**Abstract:**

In this present work, we studied the electron-matter interaction phenomena by elaboration a numerical model based on Monte Carlo Method, and the cathodoluminescence (CL) technique, to study a *AlAs/GaAs/AlAs* heterstructure with quantum well in the nanometer scale.

The procedure of calculation used in this modelling takes into account the random walk of the electrons within the matter and the influence of the electron beam parameters (electron numbers  $N_{el}$  and the acceleration energy  $E_0$ ) and the physical parameters of material (diffusion length  $L_n$ , The thickness of quantum well and potential barrier  $d$ ) and confinement phenomenon, and also its influence on the CL signal.

Our results are compared with those obtained by the experiment in the literature, as well as other theoretical results and they are in concord. This comparison leads to deduce that in spite of the simplicity of the numerical model, it is capable to characterize the nanostructures with quantum wells, and also determine the responsible parameters for resolution image.

**Keywords :** electron-matter Interaction, Cathodoluminescence, Monte Carlo simulation, Heterostructure, AlAs/GaAs/AlAs, quantum well, Confinement, Nanostructure.