



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

UNIVERSITE ABOU-BEKR BELKAID - TLEMCCEN

THÈSE

Présentée à :

FACULTE DES SCIENCES – DEPARTEMENT DE PHYSIQUE

Pour l'obtention du diplôme de :

DOCTORAT EN SCIENCES

Spécialité: Energies Renouvelables

Par :

BOUCHACHIA Badia

Sur le thème

Simulation et optimisation de diodes électroluminescentes bleues à simple puits quantique BInGaN, InGaN sans et avec barrière arrière B GaN (back-barrier).

Soutenue publiquement le / /2019 à Tlemcen devant le jury composé de :

Mme BOUAZZA-GUEN Ahlam	Pr.	Université de Tlemcen	Présidente
Mr HAMDOUNE Abdelkader	Pr.	Université de Tlemcen	Directeur de thèse
Mr HAMOUNI Mohammed	Pr.	Université de Tlemcen	Examineur
Mme BOUKABRINE Fouzia	MCA	Université de Sidi Bel Abbes	Examineur
Melle BENSEDDIK Nadia	MCA	Université de Sidi Bel Abbes	Examineur

*Unité de recherche «Matériaux et énergies renouvelables», Faculté des Sciences, Université
Abou-BekrBelkaid, P.O. Box 119, 13000, Tlemcen, Algérie*

Je dédie ce travail à :

Mes très chers parents, ma famille et tous mes amis.

Remerciements

Le travail présenté dans cette thèse a été effectué à l'URMER «Unité de recherche Matériaux et Energies Renouvelables» à l'université de Tlemcen.

Je remercie avant tout Dieu, le tout puissant, qui ma donnée le courage, la patience, la volonté et la force nécessaire, pour affronter toutes les difficultés et tous les obstacles qui se sont hissés à travers mon chemin, tout au long de ce travail.

*Mes vifs remerciements à mon directeur de thèse **Mr HAMDOUNE ABDELKADER** pour le sujet qu'il m'a proposé et pour m'avoir encadrée durant ce projet de recherche, pour sa disponibilité, son aide et sa bonne humeur durant toutes les étapes de ce travail. Son dévouement, ses conseils scientifiques et son suivi, ont permis de mener ce travail à terme. Qu'il trouve ici l'expression de toute ma reconnaissance et tous mes remerciements.*

*Mes sincères Remerciements et ma profonde gratitude vont également à **Mme BOUAZZA-GUEN Ahlam** professeur à l'université **Abou-Bakr Belkaïd Tlemcen** de m'avoir fait l'honneur de présider le jury de soutenance, à **Monsieur HAMOUNI Mohammed** professeur à l'université **Abou-Bakr Belkaïd Tlemcen**, à **Mme BOUKABRINE Fouzia** et **Melle BENSEDDIK Nadia** maitres de conférences à l'université de **Sidi Bel Abbès** pour l'honneur qu'elles m'accordent, en acceptant de juger ce travail et être membres de jury.*

Je tiens à remercier sincèrement, tous les membres de la faculté de technologie département d'électronique et aussi tous mes collègues de poste graduation Microélectronique pour leurs encouragements durant toute la période de la rédaction de cette thèse.

Et enfin, merci à tous ceux qui ont contribué de près ou de loin durant l'accomplissement de mes études.

TABLE DES MATIERES

Introduction générale	1
Références	3
Chapitre I : Propriétés des composés nitrurés III-N	
I.1 Introduction	4
I.2 Présentation des composés III-V	4
I.3 Propriétés physiques des composés nitrurés III-N	6
I.3.1 Propriétés structurales	6
I.3.1.1 Présentation des deux structures des nitrures "Zinc Blende" et "Wurtzite"	6
I.3.1.2 Zone de Brillouin	8
I.3.1.3 Paramètres de maille	9
I.3.2 Polarisation interne et piézoélectricité	10
I.3.3 Propriétés mécaniques.....	12
I.3.4 Propriétés thermiques.....	14
I.3.4.1 Dilatation thermique.....	14
I.3.4.2 Chaleur spécifique.....	15
I.3.4.3 Température de Debye	16
I.3.4.4 Conductivité thermique.....	16
I.3.5 Propriétés chimiques	17
I.3.6 Propriétés électriques des nitrures.....	18
I.3.6.1 Concentration d'électrons dans les nitrures	18
I.3.6.2 Mobilité des porteurs dans les nitrures.....	19
I.4 Dopage des composés nitrurés III-N.....	20
I.4.1 Dopage de GaN type n	20
I.4.2 Dopage de GaN type p	20
I.5 Elaboration des composés nitrurés III-N.....	21
I.5.1 Techniques d'élaboration des nitrures.....	21
I.5.1.1 Epitaxie en phase vapeur par la méthode des halogénures (EPVH)	21
I.5.1.2 Epitaxie par jets moléculaires (EJM)	22
I.5.1.3 Epitaxie en phase vapeur par pyrolyse d'organométalliques (EPVOM)	23
I.5.2 Substrats pour le dépôt de nitrures cubiques et hexagonaux.....	23

I.5.3 Les substrats les plus utilisés.....	25
I.5.3.1 Saphir (Al_2O_3)	25
I.5.3.2 Carbure de silicium	25
I.5.3.3 Silicium Si(111)	26
Conclusion	26
Références	27

Chapitre II : Propriétés optiques des matériaux III-N

II.1 Introduction.....	32
II.2 Propriétés optoélectroniques.....	32
II.2.1 Diagrammes de bandes	32
II.2.1.1 Allure générale des bandes d'énergie	32
II.2.1.2 Bandes de conduction au voisinage des minima	33
II.2.2 Variation du gap en fonction de la température.....	34
II.2.3 Indice de réfraction et coefficient d'absorption	35
II.2.4 Masse effective des porteurs.....	38
II.3 Etude des composés ternaires $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$	39
II.3.1 Formules de Vegard et Phillips.....	39
II.3.1.1 Variation du gap en fonction de la fraction molaire d'indium.....	39
II.3.1.2 Paramètre de courbure	40
II.3.2 Stabilité et solubilité	41
II.4 Propriétés optiques de InGaN	41
II.4.1 Vitesse de saturation des électrons dans $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$	41
II.4.2 Mobilité des électrons dans $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ en fonction de x.....	42
II.4.3 Variation de la longueur d'onde émise par $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ en fonction de x	43
II.5 Propriétés des nouveaux matériaux B-III-N	45
II.5.1 Composé binaire BN.....	45
II.5.2 Composé ternaire B GaN.....	46
II.5.3 Alliages quaternaires B (Al, Ga, In) N	46
Conclusion	47
Références	48

Chapitre III : Diodes électroluminescentes

III.1 Introduction	52
III.2 Luminescence d'un semi-conducteur	52
III.3 Etat de l'art des LEDs bleues InGaN/GaN.....	54
III.3.1 Principe de fonctionnement.....	55
III.3.2 Rendement d'une LED	57
III.4 Description technologique des LEDs	58
III.4.1 LEDs UV	58
III.4.2 LEDs de couleurs.....	59
III.4.2.1 LEDs à simple hétérostructure (SH).....	60
III.4.2.2 LEDs à double hétérostructure (DH).....	60
III.4.2.3 LEDs à simple puits quantique (SQW)	61
III.4.2.4 LEDs à multiples puits quantiques (MQW)	63
III.4.2.5 LEDs sur substrat SiC.....	63
III.4.3 LEDs blanches	65
III.5 Propriétés des LEDs	65
III.5.1 Propriétés physiques	65
III.5.1.1 Recombinaisons radiatives	67
III.5.1.2 Recombinaisons non radiatives	67
III.5.2 Propriétés électriques.....	69
III.6 Fabrication des diodes électroluminescentes	70
III.7 Comparaison avec les sources de lumière traditionnelles	71
III.8 Grandeurs optoélectroniques	72
III.8.1 Longueur d'onde, largeur à mi-hauteur.....	72
III.8.2 Indice de rendu de couleur, température de couleur pour une source blanche.....	73
III.8.3 Flux lumineux et énergétiques, puissance de travail, efficacité lumineuse.....	73
III.8.4 Intensité lumineuse, luminance	73
III.9 Domaines d'applications	74
Conclusion	75
Références	76

Chapitre IV : Résultats et discussion

IV.1 Introduction	78
IV.2 SILVACO/ATLAS – méthodes et modèles disponibles.....	78
IV.3 Simulation et comparaison de LED bleues sans et avec couche de blocage électronique p-GaN/InGaN/n-GaN/GaN et p-GaN/p-AlGaN/InGaN/n-GaN/GaN	79
IV.3.1 Introduction	79
IV.3.2 Structure étudiée.....	79
IV.3.3 Maillage.....	80
IV.3.4 Modèles physiques utilisés.....	82
IV.3.5 Résultats et discussion.....	82
IV.3.5.1 Diagrammes de bande	82
IV.3.5.2 Concentration des électrons et des trous	83
IV.3.5.3 Champ électrique.....	83
IV.3.5.4 Caractéristiques électriques.....	85
IV.3.5.4.1 Caractéristique (I-V).....	85
IV.3.5.4.2 Puissance lumineuse émise	86
IV.3.5.5 Caractéristiques optiques.....	87
IV.3.5.5.1 Taux d'émission spontanée	87
IV.3.5.5.2 Recombinaison radiative	87
IV.3.5.5.3 Recombinaison Auger	88
IV.3.5.5.4 Gain optique	89
IV.3.5.5.5 Flux lumineux	89
IV.3.5.5.6 Densité spectrale de puissance	90
IV.3.5.5.7 Rendement global.....	91
IV.3.6 Effets des paramètres physiques sur les performances des deux diodes.....	91
IV.3.6.1 Effet de la tension de polarisation sur la caractéristique (I-V).....	91
IV.3.6.2 Effet de la tension de polarisation sur la puissance de sortie	92
IV.3.6.3 Effet de la tension de polarisation sur la densité spectrale de puissance	93
IV.3.6.4 Effet de la tension de polarisation sur le rendement global	94
IV.3.6.5 Effet de la température sur la caractéristique (I-V).....	94
IV.3.6.6 Effet de la température sur la puissance de sortie	95

IV.3.6.7 Effet de la température sur la densité spectrale de puissance.....	96
IV.3.6.8 Effet de la température sur le rendement global.....	97
Conclusion.....	98
IV.4 Effet du bore dans le puits quantique des LED bleues p-GaN/p-AlGaN/InGaN/n-GaN/GaN et p-GaN/p-AlGaN/BInGaN/n-GaN/GaN.....	98
IV.4.1 Introduction.....	98
IV.4.2 Structure et paramètres.....	98
IV.4.3 Résultats et discussion.....	100
IV.4.3.1 Diagramme de bande.....	100
IV.4.3.2 Caractéristiques électriques.....	100
IV.4.3.2.1 Caractéristique (I-V).....	100
IV.4.3.2.2 Puissance lumineuse émise.....	100
IV.4.3.3 Caractéristiques optiques.....	102
IV.4.3.3.1 Taux d'émission spontanée.....	102
IV.4.3.3.2 Recombinaison radiative.....	102
IV.4.3.3.3 Recombinaison Auger.....	103
IV.4.3.3.4 Gain optique.....	103
IV.4.3.3.5 Flux lumineux.....	104
IV.4.3.3.6 Densité spectrale de puissance.....	104
IV.4.3.3.7 Rendement global.....	105
IV.4.4 Effets des paramètres physiques sur les performances des LEDs p-GaN/p-AlGaN/InGaN/n-GaN/GaN et p-GaN/p-AlGaN/BInGaN/n-GaN/GaN.....	106
IV.4.4.1 Effet de la tension de polarisation sur la densité spectrale de puissance.....	106
IV.4.4.2 Effet de la température sur la densité spectrale de puissance.....	107
Conclusion.....	108
IV.5 Simulation de LED à base de InGaN avec EBL, sans et avec une couche barrière arrière p-GaN/p-AlGaN/InGaN/n-GaN/GaN et p-GaN/p-AlGaN/InGaN/n-GaN/BGaN/GaN.....	109
IV.5.1 Introduction.....	109
IV.5.2 Conception des structures.....	109
IV.5.3 Résultats et discussion.....	111
IV.5.3.1 Diagramme de bande et concentration des porteurs.....	111
IV.5.3.2 Caractéristiques électriques.....	112

IV.5.3.2.1 Caractéristique (I-V).....	112
IV.5.3.2.2 Puissance lumineuse émise	113
IV.5.3.3 Caractéristiques optiques.....	114
IV.5.3.3.1 Taux d'émission spontanée	114
IV.5.3.3.2 Recombinaison radiative	114
IV.5.3.3.3 Recombinaison Auger	115
IV.5.3.3.4 Gain optique	117
IV.5.3.3.5 Flux lumineux	117
IV.5.3.3.6 Densité spectrale de puissance	118
IV.5.3.3.7 Rendement global.....	117
IV.5.4 Effets des paramètres physiques sur les performances des LEDs p-GaN/p-AlGaN/InGaN/n-GaN/GaN et p-GaN/p-AlGaN/InGaN/n-GaN/BGaN/GaN	120
IV.5.4.1 Effet de la tension de polarisation sur la densité spectrale de puissance	120
IV.5.4.2 Effet de la température sur la densité spectrale de puissance.....	121
Conclusion	122
Références	123
Conclusion générale	126
Publications-Communications	129

Chapitre I : Propriétés des composés nitrurés III-N

Figure I.1: (a) Arrangement des atomes dans la maille élémentaire de GaN, (b) Séquences d'empilement des atomes dans les plans {11-20} et {1-10} des structures hexagonale et cubique, respectivement	7
Figure I.2: Les zones de Brillouin des deux structures : (a) wurtzite et (b) zinc blende	9
Figure I.3: Polarisation Ga et N pour le GaN	11
Figure I.4: Conductivités thermiques de GaN et d'autres composés importants	16
Figure I.5: Densité d'électrons et mobilité dans InN en fonction de l'épaisseur de la couche	18
Figure I.6: Concentration d'électrons en fonction de la température dans $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{N}$ avec différentes concentrations d'indium	19
Figure I.7: Mobilité des porteurs libres dans $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{N}$ en fonction de la température	20
Figure I.8: Schéma synoptique d'un bâti d'épitaxie par EJM	22
Figure I.9: Schéma synoptique d'un bâti d'épitaxie par EPVOM	23

Chapitre II : Propriétés optiques des matériaux III-N

Figure II.1: Structures de bandes des trois nitrures (GaN, AlN et InN) dans leurs phases cubiques	32
Figure II.2: Structures de bandes des trois nitrures (GaN, AlN et InN) dans leurs phases hexagonales	33
Figure II.3: Indice de réfraction du GaN entre 0.35 et 10 μm	35
Figure II.4: Estimation de la variation de l'indice de réfraction dans InGaN, GaAlN et InAlN	36
Figure II.5: Schéma des chemins optiques au niveau d'un dioptre plan	36
Figure II.6: Courbe d'absorption du GaN	37
Figure II.7: Structure de bandes du GaN en phase wurtzite au voisinage de $k = 0$	38
Figure II.8: Variation du gap d' $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$, en fonction de la fraction de mole In	40
Figure II.9: Vitesse de saturation dans InGaN, en fonction de la fraction de mole In	42
Figure II.10: Mobilité des électrons dans $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$, en fonction de la fraction molaire In ..	43
Figure II.11: Longueur d'onde d'émission d' $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ en fonction de x	44

Chapitre III : Diodes électroluminescentes

Figure III.1: (a) Diagramme de bande d'un SC à gap direct (Exemple : GaAs), (b) Diagramme de bande d'un SC à gap indirect (Exemple : Si).....	53
--	----

Figure III.2: (a) Principe de la luminescence, (b) Schéma de différentes transitions électroniques possibles dans un SC	54
Figure III.3: (a) Schéma d'une LED InGaN/GaN conventionnelle	55
Figure III.3: (b) LED bleue à base de InGaN/AlGaN codopée Zn et Si	55
Figure III.4 : Schéma de principe d'une homojonction pn	56
Figure III.5: Schéma de principe d'une hétérojonction pn avec trois types de semi-conducteurs	56
Figure III.6: Diode électroluminescente à multi-puits quantiques (MPQ) $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$	59
Figure III.7: Structure de LED (SH) selon M. Koike	60
Figure III.8: Structure d'une LED InGaN à double hétérostructure (DH) selon S. Nakamura	61
Figure III.9: Structure de LED InGaN (SQW), selon S. Nakamura	62
Figure III.10: Structure de LED bleue InGaN (MQW), selon M. Koike	63
Figure III.11: Structure de LED : (a) SiC/GaN avec une couche tampon isolante, (b) SiC/GaN avec une couche tampon conductrice AlGaN selon G. E. Bulman et al.	64
Figure III.12: Représentation schématique des processus Auger de type CHCC (a) et CHSH (b). Les symboles C, H, L et S ; identifient respectivement la bande de conduction et les bandes de valence	68
Figure III.13: Courbe courant-tension typique d'une diode électroluminescente	69
Figure III.14: Fabrication d'une diode électroluminescente (LED)	70
Figure III.15: Les applications des LEDs	75
 Chapitre IV : Résultats et discussion	
Figure IV.1: Modules utilisés dans la simulation par TCAD SILVACO	79
Figure IV.2: Représentation schématique des deux LEDs (a) p-GaN/InGaN/n-GaN/GaN, (b) p-GaN/p-AlGaN/InGaN/n-GaN/GaN	80
Figure IV.3: Maillage (a) LED1 p-GaN/InGaN/n-GaN/GaN, (b) LED2 p-GaN/p-AlGaN/InGaN/n-GaN/GaN	81
Figure IV.4: Diagramme de bande d'énergie dans (a) LED1 p-GaN/InGaN/n-GaN/GaN, (b) LED2 p-GaN/p-AlGaN/InGaN/n-GaN/GaN	83
Figure IV.5: Concentration des électrons et des trous dans (a) LED1 p-GaN/InGaN/n-GaN/GaN, (b) LED2 p-GaN/p-AlGaN/InGaN/n-GaN/GaN	84
Figure IV.6: Le champ électrique dans (a) LED1 p-GaN/InGaN/n-GaN/GaN, (b) LED2 p-GaN/p-AlGaN/InGaN/n-GaN/GaN	85
Figure IV.7: Caractéristique I-V (a) LED1 p-GaN/InGaN/n-GaN/GaN, (b) LED2 p-GaN/p-AlGaN/InGaN/n-GaN/GaN	86

Figure IV.8: Puissance lumineuse émise a) LED1 p-GaN/InGaN/n-GaN/GaN, (b) LED2 p-GaN/p-AlGaN/InGaN/n-GaN/GaN	86
Figure IV.9 : Le taux d'émission spontanée à polarisation TE (a) LED1 p-GaN/InGaN/n-GaN/GaN, (b) LED2 p-GaN/p-AlGaN/InGaN/n-GaN/GaN	87
Figure IV.10: Recombinaison radiative dans (a) LED1 p-GaN/InGaN/n-GaN/GaN, (b) LED2 p-GaN/p-AlGaN/InGaN/n-GaN/GaN	88
Figure IV.11: Recombinaison Auger dans (a) LED1 p-GaN/InGaN/n-GaN/GaN, (b) LED2 p-GaN/p-AlGaN/InGaN/n-GaN/GaN	88
Figure IV.12: Le gain optique (a) LED1 p-GaN/InGaN/n-GaN/GaN, (b) LED2 p-GaN/p-AlGaN/InGaN/n-GaN/GaN	89
Figure IV.13: Le flux lumineux (a) LED1 p-GaN/InGaN/n-GaN/GaN, (b) LED2 p-GaN/p-AlGaN/InGaN/n-GaN/GaN	90
Figure IV.14: Spectre d'électroluminescence a) LED1 p-GaN/InGaN/n-GaN/GaN, (b) LED2 p-GaN/p-AlGaN/InGaN/n-GaN/GaN	90
Figure IV.15: Rendement à la prise (a) LED1 p-GaN/InGaN/n-GaN/GaN, (b) LED2 p-GaN/ p-AlGaN/InGaN/n-GaN/GaN	91
Figure IV.16: Effet de la tension de polarisation sur la caractéristique (I-V) (a) LED1 p-GaN/InGaN/n-GaN/GaN, (b) LED2 p-GaN/p-AlGaN/InGaN/n-GaN/GaN	92
Figure IV.17: Effet de la tension de polarisation sur la puissance lumineuse (a) LED1 p-GaN/InGaN/n-GaN/GaN, (b) LED2 p-GaN/p-AlGaN/InGaN/n-GaN/GaN	92
Figure IV.18: Effet de la tension de polarisation dans (a) LED1 p-GaN/InGaN/n-GaN/GaN, (b) LED2 p-GaN/p-AlGaN/InGaN/n-GaN/GaN	93
Figure IV.19: Effet de la tension de polarisation sur le rendement global des deux LEDs ...	94
Figure IV.20: Effet de la température sur la caractéristique (I-V) (a) LED1 p-GaN/InGaN/n-GaN/GaN, (b) LED2 p-GaN/p-AlGaN/InGaN/n-GaN/GaN	95
Figure IV.21 : Effet de la température sur la puissance lumineuse (a) LED1 p-GaN/InGaN/ n-GaN/GaN, (b) LED2 p-GaN/p-AlGaN/InGaN/n-GaN/GaN	95
Figure IV.22: Effet de la température sur la densité spectrale de puissance (a) LED1 p-GaN/InGaN/n-GaN/GaN, (b) LED2 p-GaN/p-AlGaN/InGaN/n-GaN/GaN	96
Figure IV.23: Effet de la température sur le rendement global des deux LEDs	97
Figure IV.24: Structure schématique (a) p-GaN/p-AlGaN/InGaN/n-GaN/GaN LED et (b) p-GaN/p-AlGaN/BInGaN/n-GaN/GaN LED	98
Figure IV.25: Diagramme de bande d'énergie dans (a) LED1 p-GaN/p-AlGaN/InGaN/ n-GaN/GaN, (b) LED2 p-GaN/p-AlGaN/BInGaN/n-GaN/GaN	100
Figure IV.26: Caractéristique I-V (a) LED1 et (b) LED2.....	100
Figure IV.27: La puissance lumineuse en fonction du courant d'anode (a) LED1 et (b) LED2	101

Figure IV.28: Émission spontanée (TE) en fonction de la longueur d'onde (a) LED1 et (b) LED2.....	102
Figure IV.29: Recombinaison radiative dans la LED p-GaN/p-AlGa _N /BInGa _N /n-GaN/GaN	103
Figure IV.30: Recombinaison Auger dans p-GaN/p-AlGa _N /BInGa _N /n-GaN/GaN	103
Figure IV.31: Le gain optique (a) LED1 et (b) LED2	104
Figure IV.32: Le flux lumineux (a) LED1 et (b) LED2.....	104
Figure IV.33: Spectre d'électroluminescence (a) LED1 et (b) LED2.....	105
Figure IV.34: Rendement à la prise (a) LED1 et (b) LED2.....	105
Figure IV.35: Effet de la tension dans (a) la LED1 et (b) la LED2	106
Figure IV.36: Effet de la température sur la densité spectrale de puissance dans (a) la LED1 et (b) la LED2	107
Figure IV.37: Structures schématiques de (a) p-GaN/p-AlGa _N /InGa _N /n-GaN/GaN A-LED, (b) p-GaN/p-AlGa _N /InGa _N /n-GaN/BGa _N /Ga _N B-LED	110
Figure IV.38: Diagramme de bande d'énergie dans (a) A-LED (sans BGaN), et (b) B-LED (avec une couche de barrière arrière BGaN)	112
Figure IV.39: Concentration d'électrons et de trous dans (a) A-LED (sans BGaN), et (b) B-LED (avec une couche de barrière arrière BGaN)	112
Figure IV.40: Caractéristiques I-V (a) A-LED et (b) B-LED	113
Figure IV.41: La puissance lumineuse en fonction de la tension d'anode (a) A-LED et (b) B-LED	113
Figure IV.42: Émission spontanée (TE) en fonction de énergie (a) A-LED et (b) B-LED .	114
Figure IV.43: Recombinaison radiative dans B-LED avec différentes épaisseurs de BGaN (1 nm, 10 nm, 50 nm, 100 nm respectivement).....	115
Figure IV.44: Recombinaison Auger dans B-LED avec BGaN d'épaisseur (1 nm, 10 nm, 50 nm, 100 nm respectivement)	116
Figure IV.45: (a) Recombinaison Auger A-LED, et (b) Recombinaison radiative A-LED	116
Figure IV.46: Gain optique en fonction de l'énergie (a) A-LED et (b) B-LED	117
Figure IV.47: Flux lumineux en fonction de énergie (a) A-LED et (b) B-LED	118
Figure IV.48: Spectre d'électroluminescence (a) A-LED et (b) B-LED	118
Figure IV.49: Rendement global (a) A-LED et (b) B-LED	119
Figure IV.50: Effet de la tension de polarisation dans (a) A-LED et (b) B-LED (100 nm) .	120
Figure IV.51: Effet de la température dans (a) A-LED et (b) B-LED	121

Chapitre I : Propriétés des composés nitrurés III-N

Tableau I.1: Les principaux éléments des groupes III, IV et V	5
Tableau I.2: Propriétés des principaux composés binaires III-V à 300 K	5
Tableau I.3: Valeurs expérimentales et théoriques des paramètres de maille et de la distance u entre les anions et les cations pour les nitrures d'élément III en phase hexagonale	9
Tableau I.4: Paramètre de maille (a_0) théorique et expérimental, des structures cubiques	10
Tableau I.5: Constantes piézoélectriques et valeurs de la polarisation spontanée pour GaN et InN	12
Tableau I.6: Constantes d'élasticité C_{ij} expérimentales, et module de compressibilité volumique B théorique, pour GaN de type wurtzite	13
Tableau I.7: Coefficients de dilatation thermique de GaN et divers substrats selon Krukowski et al	15
Tableau I.8: Dopants les plus fréquents dans GaN	21
Tableau I.9: Désaccords thermo-élastiques et de maille entre les différents substrats utilisés pour l'épitaxie des nitrures dans la phase cubique	24
Tableau I.10: Les paramètres de maille et les coefficients de dilatation thermique des différents substrats employés pour la croissance du GaN sous sa structure hexagonale	24

Chapitre II : Propriétés optiques des matériaux III-N

Tableau II.1: Paramètres de l'équation de Varshni	35
Tableau II.2: Résumé des paramètres optiques du GaN et de l'InN	38
Tableau II.3: Paramètres de bande et masses effectives d'AlN, GaN et InN dans la phase wurtzite. Les symboles \parallel et \perp indiquent respectivement la direction parallèle et perpendiculaire à k_z	39
Tableau II.4: Les constantes a , b et c , pour le calcul de la vitesse de saturation en fonction de la fraction molaire x dans $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$	41
Tableau II.5: Les Mobilités des électrons dans $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ en fonction de la température	42
Tableau II.6: Données cristallographiques des différentes structures du BN	45
Tableau II.7: Grandeurs physiques des nitrures III-N	46

Chapitre III : Diodes électroluminescentes

Tableau III.1: Différents SC utilisés en fonction de la couleur de la lumière	66
Tableau III.2: Comparaison des performances des différentes sources de lumière existante	72

Chapitre IV : Résultats et discussion

Tableau IV.1: Paramètres des matériaux utilisés dans les simulations	80
Tableau IV.2: Modèles utilisés dans les simulations	82
Tableau IV.3: Les résultats obtenus pour le courant et la puissance, en fonction de la tension de polarisation	93
Tableau IV.4: Les valeurs du spectre électroluminescent	94
Tableau IV.5: Les résultats obtenus pour la puissance, en fonction de la température	96
Tableau IV.6: Résultats du spectre électroluminescent en fonction de la température	96
Tableau IV.7: Caractéristiques électriques et optiques des deux LEDs sans et avec couche de blocage électronique AlGaIn	97
Tableau IV.8: Résultats du spectre électroluminescent	106
Tableau IV.9: Résultats du spectre électroluminescent en fonction de la température	107
Tableau IV.10: Résultats obtenus pour les deux LED	108
Tableau IV.11: Les recombinaisons Auger et radiative des LED sans et avec B GaIn	117
Tableau IV.12: Rendement à la prise, avec et sans couche B GaIn	120
Tableau IV.13: les valeurs du spectre électroluminescent	121
Tableau IV.14: Résultats du spectre électroluminescent en fonction de la température dans A-LED et B-LED (100 nm).....	121
Tableau IV.15: Performances de la LED, avec et sans couche B GaIn	122

Introduction générale

Introduction générale

De nos jours, les matériaux semi-conducteurs tiennent une place essentielle dans les dispositifs optoélectroniques et électroniques. L'évolution actuelle de notre société et le choix d'un certain mode de vie ont fait que de tels dispositifs à base de semi-conducteurs (microprocesseurs, circuit intégrés, puces WiFi, transistors, diodes électroluminescentes (LEDs), diodes laser (LDs), photo-détecteurs,...) sont actuellement intégrés dans la plupart des appareils employés par chacun d'entre nous (voitures, ordinateurs, télévisions, téléphones, lecteur de disque compact, lecteur Blue ray, appareil photo...) [1]. L'émergence depuis plus de vingt ans des matériaux nitrurés III-N à large bande interdite a été à l'origine de nombreux développements par la communauté internationale : au Japon, aux USA et en Europe [2]. En effet, les matériaux nitrurés (GaN, AlN, InN ou encore BN) et leurs alliages ternaires ou quaternaires permettent de couvrir une gamme continue de longueurs d'onde allant de l'infrarouge proche à l'ultraviolet lointain [3].

La diode électroluminescente (en anglais LED pour "Light Emitting Diode") est un composant industriel de première importance qui offre de nombreux avantages par rapport aux sources de lumière conventionnelles (durée de vie, consommation, temps de réponse...).

En 1993, la réalisation de la première diode électroluminescence (LED) bleue à base de GaN et de InGaN de haute brillance réalisée par Nakamura et ses collaborateurs de l'entreprise japonaise Nichia, a relancé l'effort de recherche sur ces matériaux et leurs dispositifs [4].

Les LED blanches qui se basent sur les LED bleues, atteignent un rendement lumineux de l'ordre de 250 lm/W, beaucoup plus élevé que celui des ampoules classiques (~ 16 lm/W), et des tubes fluorescents (~ 100 lm/W). De plus, elles sont d'une plus grande longévité et durabilité par rapport aux lampes fluorescentes compactes [5]. La LED blanche réalisée en combinaison avec la LED bleue à simple puits quantique (SQW) InGaN et YAG phosphore est moins coûteuse que la LED blanche composée de trois LEDs de couleurs primaires. Les LED blanches sont prometteuses pour les futurs réseaux optiques sans fil. Dans le futur proche (les années 2020 ou 2030), les LEDs devraient être les sources de la lumière les plus efficaces.

Dans ce travail de thèse, nous étudions des diodes électroluminescentes bleues InGaN/GaN, à simple puits quantique, sur substrat saphir. Notre objectif consiste à simuler leurs caractéristiques électriques et optiques ; nous utilisons dans notre simulation, le logiciel SILVACO.

Le manuscrit se compose de quatre grands chapitres :

Dans le chapitre I, les principales propriétés physiques des nitrures d'éléments III sont présentées, ainsi que les différentes méthodes d'élaboration.

Dans le chapitre II, nous évoquons les principaux résultats obtenus concernant les propriétés optoélectroniques des systèmes InGaN.

Le chapitre III est consacré à l'étude des diodes électroluminescentes : le principe de fonctionnement, les caractéristiques, les types de LEDs, ainsi que les procédés de fabrication.

Dans le chapitre IV, nous présentons d'abord le logiciel de simulation SILVACO ; puis nous effectuons une étude d'une structure de LED bleue à base d'InGaN/GaN à simple puits quantique, avec le logiciel SILVACO. Nous simulons différentes caractéristiques telles que la caractéristique (I-V), la puissance lumineuse émise, le taux d'émission spontanée, la recombinaison radiative, la recombinaison Auger, le gain optique, le flux lumineux, la densité spectrale de puissance, la longueur d'onde d'émission.... Enfin, l'influence de la température et de la tension de polarisation sur les performances de la LED est simulée aussi.

Le travail concerne trois structures de LEDs ; la première structure est à base de $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ avec et sans couche de blocage AlGaIn.

Dans la deuxième structure ; nous incorporons une fraction molaire de Bore dans la couche active InGaIn, afin de développer une nouvelle hétérostructure $\text{B}_x\text{In}_y\text{Ga}_{1-x-y}\text{N}/\text{GaN}$.

Dans la troisième structure, nous insérons une couche de matériau ternaire BGaIn comme couche barrière arrière (insérée sous le puits quantique). Cette configuration existe déjà dans les HEMTs où elle a apporté des améliorations remarquables des performances, mais elle n'a jamais été utilisée dans les LEDs bleues.

Enfin nous terminons notre travail par une conclusion générale où une comparaison des résultats obtenus pour les trois structures est donnée ; et nous ouvrons une fenêtre sur des objectifs à venir.

Références

- [1] Pierre. Marie. Coulon, Ecole Doctorale de Sciences Fondamentales et Appliquées: «Croissance et Caractérisation de Nanofils/Microfils de GaN», Université de Nice Sophia Antipolis, (2014).
- [2] Mohamed. Boucherit, Ecole Doctorale de Sciences pour l'ingénieur : «Etude et réalisation de dispositifs hyperfréquences sur matériaux grand gap : -Diode à effet tunnel résonant $Al_xGa_{1-x}N/GaN$, -transistor HEMT boré à base de nitrure de galium», Université des Sciences et Technologies de Lille 1, (2012).
- [3] Vincent. Fellmann, Thèse de Doctorat : «Croissance et caractérisations structurales et optiques d'hétérostructures de nitrures d'éléments III émettant dans l'UV», Université de Grenoble, (13 janvier 2012).
- [4] Fabian. Rol, Thèse de Doctorat : «Étude optique de boîtes quantiques uniques non polaires de GaN/AlN», Université Joseph Fourier, Grenoble I, (15 mars 2007).
- [5] «LED lighting: Blue + yellow = white », IEEE Spectrum, <http://spectrum.ieee.org>, cited (14. Jan. 2011).

CHAPITRE I

Propriétés des composés nitrurés III-N

I.1 Introduction

Les composés nitrurés III-N présentent un intérêt fondamental pour les applications en électronique de puissance, haute fréquence et haute température, et pour l'optoélectronique dans les domaines spectrales du bleu à l'ultraviolet (LEDs, Lasers, Photodétecteurs). Dans ce chapitre nous allons rappeler les principales propriétés physiques des nitrures binaires tels que le nitrure de gallium (GaN), le nitrure d'aluminium (AlN) et le nitrure d'indium (InN) dans les deux types de structures hexagonal et cubique ; puis nous allons présenter les techniques d'élaboration des composés nitrurés III-N.

I.2 Présentation des composés III-V

Les semi-conducteurs III-V sont constitués d'éléments des colonnes III et V. Les énergies de leurs bandes interdites sont inférieures à $100k_B T$. Ils ont prouvé leur importance dans tous les domaines de l'électronique et l'optoélectronique où ils trouvent un champ d'application très vaste. L'intérêt pratique de ces matériaux est renforcé par la possibilité de fabriquer des alliages ternaires et quaternaires par substitution partielle de l'un des éléments par un élément de la même colonne ; ainsi, on peut obtenir une grande variété de compositions permettant de faire varier leurs propriétés électriques et optiques. Les principaux éléments III, IV et V qui forment les semi-conducteurs, sont donnés au tableau I.1. Dans une même colonne ; quand la masse atomique augmente (du haut vers le bas), l'élément considéré donne un composé à bande interdite plus petite, et une masse effective d'électrons plus faible. Par exemple, les composés contenant du bore ou de l'aluminium sont moins intéressants que le gallium ou l'indium pour l'électronique rapide.

Des semi-conducteurs binaires comme l'arséniure de gallium (GaAs), l'antimoniure de gallium (GaSb), le phosphure d'indium (InP), l'arséniure d'indium (InAs), l'arséniure d'aluminium (AlAs), le nitrure d'aluminium (AlN), le nitrure de gallium (GaN), le nitrure d'indium (InN), et leurs alliages ternaires et quaternaires possèdent des propriétés très intéressantes pour des applications en hyperfréquence.

IIIA	IVA	VA
$_{10.81}^{5}\text{B}$	$_{12.01}^{6}\text{C}$	$_{14.01}^{7}\text{N}$
$_{26.98}^{13}\text{Al}$	$_{28.09}^{14}\text{Si}$	$_{30.97}^{15}\text{P}$
$_{69.74}^{31}\text{Ga}$	$_{72.59}^{32}\text{Ge}$	$_{74.92}^{33}\text{As}$
$_{114.82}^{49}\text{In}$	$_{118.69}^{50}\text{Sn}$	$_{121.75}^{51}\text{Sb}$

Tableau I.1: Les principaux éléments des groupes III, IV et V.

Nous répertorions dans le tableau I.2, quelques paramètres essentiels des principaux composés binaires III-V, à 300 K [1]. E_g est la largeur de la bande interdite ; m^* et m_0 sont respectivement la masse effective et la masse de l'électron dans le vide, du bas de la bande de conduction ; μ est leur mobilité électronique à faible champ ; a est le paramètre de maille.

Composé III-V	$E_g(\text{eV})$	m^*/m_0	$\mu(\text{cm}^2/\text{V.S})$	$a(\text{\AA})$
BN	7.5			3.6150
AlP	2.45			5.4510
AlAs	2.16			5.6605
AlSb	1.58	0.12	200	6.1355
BP	2.0			4.5380
GaN	3.36	0.19	380	3.189
GaP	2.26	0.82	110	5.4512
GaAs	1.42	0.067	8500	5.6533
GaSb	0.72	0.042	5000	6.0959
InP	1.35	0.077	4600	5.8686
InAs	0.36	0.023	33000	6.0584
InSb	0.17	0.0145	80000	6.4794

Tableau I.2: Propriétés des principaux composés binaires III-V à 300 K.

Pour un élément donné du groupe V ; lorsque le nombre atomique de l'élément du groupe III augmente, la constante de maille diminue. Par conséquent ; l'énergie du gap et la masse effective des porteurs libres diminuent. Il en résulte alors une augmentation de la mobilité de ces porteurs.

Pour un élément donné du groupe III ; quand le nombre atomique de l'élément V augmente, la constante de maille augmente et la masse effective des porteurs libres diminue. Cette règle est valable pour les semi-conducteurs III-V classiques ; mais elle n'est plus respectée pour le nitrure de gallium.

I.3 Propriétés physiques des composés nitrurés III-N

I.3.1 Propriétés structurales

I.3.1.1 Présentation des deux structures des nitrures

Les nitrures cristallisent sous deux formes : cubique et hexagonale.

a) **Structure cubique dite "Zinc Blende"** : thermodynamiquement métastable, elle est présentée sur la figure I.1. La phase cubique est caractérisée par une séquence d'empilement de bicouches cation-anion, où chaque cation (anion) est lié avec quatre anions (cations). Les bicouches s'empilent selon trois positions distinctes : ...ABCABC....suivant la direction cristallographique $\langle 111 \rangle$.

Cette structure, qui s'apparente à celle du diamant (C, Ge, Si, etc.), est constituée de deux sous réseaux cubiques à faces centrées (cfc), l'un comprenant des atomes de la colonne III et l'autre des atomes de la colonne V, interpénétrés et décalés l'un par rapport à l'autre du quart de la diagonale principale, c'est-à-dire de $a \sqrt{3}/4 [111]$, où a représente le paramètre de maille du matériau.

De ce fait ; dans les matériaux III-N, les liaisons atomiques ne sont pas simplement covalentes comme dans le silicium. Ces liaisons reposent sur le transfert d'électrons des atomes du groupe V sur ceux du groupe III. Dans le cas de GaN, AlN et InN ; l'azote possède cinq électrons périphériques, alors que le gallium, l'indium et l'aluminium en possèdent trois. Dans un cristal de GaN, chaque atome d'azote est entouré de quatre atomes de gallium, et chaque atome de gallium est entouré de quatre atomes d'azote. Il se produit alors un échange d'électrons, et le cristal se construit avec les ions N^- et Ga^+ , qui ont tous quatre électrons périphériques. Cette répartition est à l'origine du caractère partiellement ionique et partiellement covalent des liaisons qui sont orientées dans l'espace suivant les axes de symétrie d'un tétraèdre régulier. On les appelle les semi-conducteurs polaires [2].

b) Phase hexagonale dite « Wurtzite » : thermodynamiquement stable elle est composée de deux réseaux hexagonaux comprenant chacun un type d'atomes, interpénétrés et décalés de $5/8^{\text{ème}}$ de la maille élémentaire. Pour la structure hexagonale, la séquence d'empilement est ...ABABAB... [3].

Les deux structures diffèrent uniquement au niveau de la séquence d'empilement des plans cristallins : l'entourage cristallographique des atomes ne diffère qu'à partir du troisième voisin.

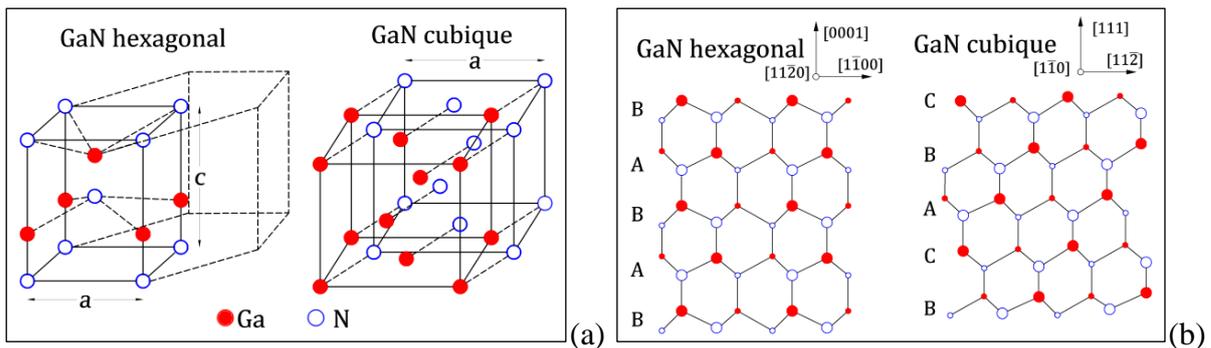


Figure I.1: (a) Arrangement des atomes dans la maille élémentaire de GaN,

(b) Séquences d'empilement des atomes dans les plans {11-20} et {1-10} des structures hexagonale et cubique, respectivement [4].

La forme cubique des nitrures a été observée pour la première fois sous forme d'inclusions dans la structure hexagonale. Cependant, son obtention n'a pas été intentionnelle et n'a pas été prise au sérieux. Mais les calculs théoriques qui ont été faits sur ses paramètres électriques et optiques, ont montré qu'elle présente plusieurs avantages par rapport à la forme hexagonale grâce à sa haute symétrie. Du point de vue technologique, elle est plus facile à cliver pour réaliser des cavités lasers ; et son élaboration sur des substrats conducteurs permettrait son intégration microélectronique. Les nitrures hexagonaux sont couramment élaborés sur substrat saphir qui est un isolant thermique et électrique ; ils sont alors difficiles à intégrer dans la microélectronique.

I.3.1.2 Zone de Brillouin

Le cristal étant périodique, les paramètres internes (comme la densité d'électrons) ont la périodicité du réseau. Le réseau direct est défini par la première zone de Brillouin. Les grandeurs physiques sont périodiques dans l'espace direct, il suffit de les connaître dans la maille élémentaire du réseau pour les reconnaître dans tout le cristal. Il est de même pour l'espace réciproque, il suffit de les avoir dans la première zone de Brillouin [5].

Les vecteurs primitifs \vec{b}_i du réseau réciproque sont déterminés par les relations :

$$\begin{cases} \vec{b}_1 = 2\pi \frac{\vec{a}_2 \wedge \vec{a}_3}{\vec{a}_1 \cdot \vec{a}_2 \wedge \vec{a}_3} \\ \vec{b}_2 = 2\pi \frac{\vec{a}_3 \wedge \vec{a}_1}{\vec{a}_1 \cdot \vec{a}_2 \wedge \vec{a}_3} \\ \vec{b}_3 = 2\pi \frac{\vec{a}_1 \wedge \vec{a}_2}{\vec{a}_1 \cdot \vec{a}_2 \wedge \vec{a}_3} \end{cases} \quad (\text{I. 1})$$

Les vecteurs \vec{a}_1 , \vec{a}_2 et \vec{a}_3 ont pour unités respectives \vec{i} , \vec{j} et \vec{k} ; les vecteurs \vec{b}_1 , \vec{b}_2 et \vec{b}_3 seront donc de la forme :

$$\begin{cases} \vec{b}_1 = 2\pi(\vec{i} + \vec{j} - \vec{k}) \\ \vec{b}_2 = 2\pi(-\vec{i} + \vec{j} + \vec{k}) \\ \vec{b}_3 = 2\pi(\vec{i} - \vec{j} + \vec{k}) \end{cases} \quad (\text{I. 2})$$

Rappelons que la zone de Brillouin, des réseaux cubiques à faces centrées (cfc), à la forme d'un octaèdre tronqué par les six faces d'un cube (figure I.2, b). Elle présente un centre de symétrie à l'origine (noté Γ) et des axes de symétrie :

- Les axes $\langle 100 \rangle$ à symétrie d'ordre 4 (Δ).
- Les axes $\langle 111 \rangle$ à symétrie d'ordre 6 (Λ).
- Les axes $\langle 011 \rangle$ à symétrie d'ordre 2 (Σ).

Les points de rencontre de chacun de ces axes avec les frontières de la zone de Brillouin, jouent un rôle essentiel dans la théorie des bandes. On les note généralement de la manière suivante :

- Points X de coordonnées $(2\pi/a, 0, 0)$ sur les axes $\langle 100 \rangle$.
- Points L de coordonnées $(\pi/a, \pi/a, \pi/a)$ sur les axes $\langle 111 \rangle$.
- Points K de coordonnées $(0, 3\pi/2a, 3\pi/2a)$ sur les axes $\langle 011 \rangle$.

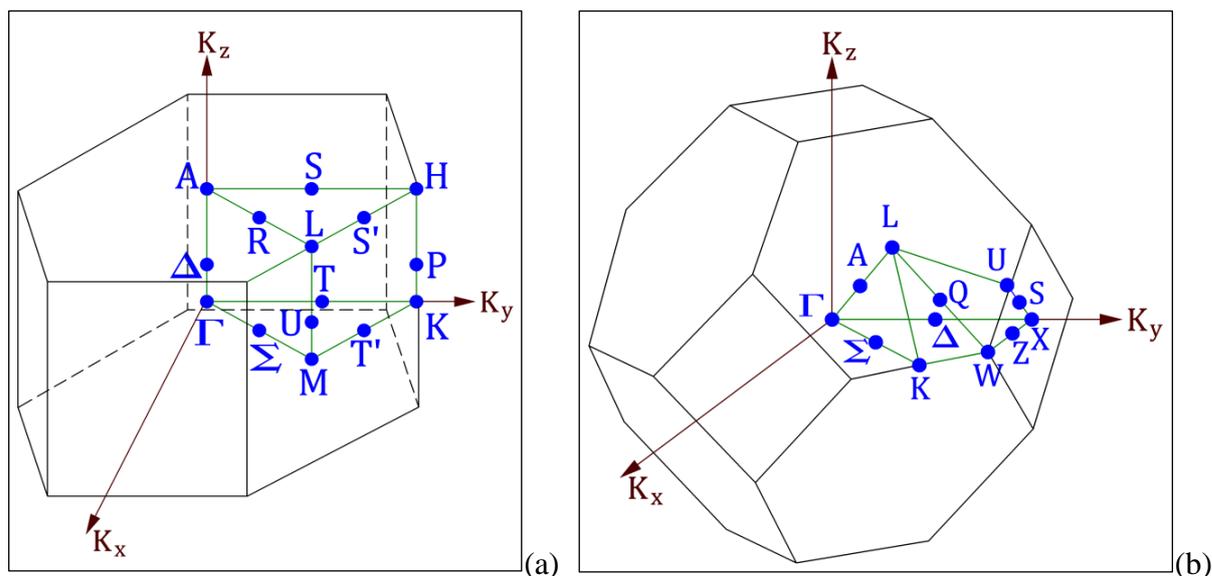


Figure I.2: Les zones de Brillouin des deux structures : (a) wurtzite et (b) zinc blende.

I.3.1.3 Paramètres de maille

Dans la structure hexagonale, il y a deux paramètres de maille : “a” dans le plan et “c” hors plan. Dans la structure cubique, la distance entre les plans atomiques est la même en raison de symétrie dans cette structure. Le tableau I.3 résume quelques paramètres des nitrures dans leur structure hexagonale.

Phase hexagonale	a (Å)	c (Å)	c/a expérimentale	c/a théorique	u(Å)
GaN	3.189±0.001	5.185±0.001	1.626	1.633	0.376
AlN	3.110 ±0.003	4.980 ±0.003	1.601	1.619	0.38
InN	3.54±0.01	5.70±0.01	1.610	1.627	0.377

Tableau I.3: Valeurs expérimentales et théoriques des paramètres de maille et de la distance u entre les anions et les cations pour les nitrures d’élément III en phase hexagonale [6].

En première approximation, la valeur du paramètre de réseau de la structure cubique est donnée en fonction de celle de la structure hexagonale par la formule suivante [3] :

$$a_{ZB} \times \sqrt{2a_{WZ}} \quad (I.3)$$

Le tableau I.4 donne les paramètres de maille des trois nitrures dans leur phase cubique. La différence entre les valeurs expérimentales et théoriques est due aux différences dans la qualité structurale et les contraintes existantes dans les couches.

Phase cubique	Valeur théorique de a_0 (Å) calculée par les méthodes empiriques [7]			Valeur expérimentale de a_0 (Å)
GaN	4.423	4.462	4.452	4.50 [8]
				4.53 [9]
AlN	4.301	4.392	4.340	4.38 [10]
				4.3996 [11]
InN	4.996	4.392	4.981	4.98 [12]
				4.97 [13]

Tableau I.4: Paramètre de maille (a_0) théorique et expérimental, des structures cubiques [3].

I.3.2 Polarisation interne et piézoélectricité

La structure wurtzite peut être représentée par deux sous-réseaux interpénétrés, celui des anions (N^{3-}) et celui des cations (Ga^{3+}), décalés selon l'axe c . Ce décalage peut être décrit par le paramètre a . Cette structure est dite non-centrosymétrique, c'est-à-dire que les barycentres de ces deux sous-réseaux ne se superposent pas, créant ainsi une polarisation interne et un caractère piézoélectrique.

La polarisation interne va séparer spatialement les électrons et les trous, et créer ainsi une accumulation de charges aux extrémités de la couche perpendiculairement à l'axe c (interface substrat / couche épitaxiée ou surface de la couche épitaxiée). Cette accumulation de charges peut changer les propriétés électriques et la réactivité du matériau. Il est donc important de connaître le sens de cette polarisation afin de pouvoir la contrôler. Ceci est possible avec le procédé de croissance. En effet, si la première couche atomique déposée est composée d'azote, alors la dernière sera composée d'atomes de gallium. On aura ainsi un excès de trous à la surface. Cette configuration est appelée polarisation Ga et la direction de croissance sera [0001]. Inversement, si la première couche est composée de gallium, la dernière sera composée d'azote et présentera donc un excès d'électrons. On aura alors une polarisation N et l'axe de croissance sera appelé [0001], comme le montre la figure I.3.

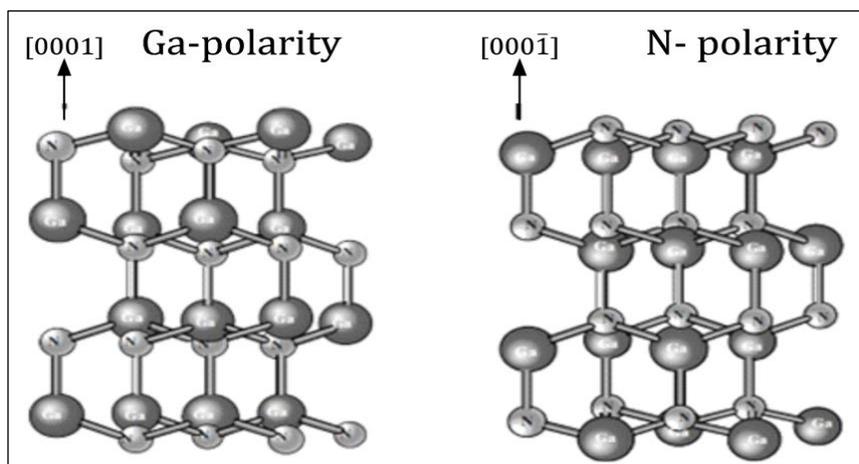


Figure I.3: Polarisation Ga et N pour le GaN [14].

Le traitement de surface avant la croissance, le procédé de croissance et la conception du composant sont donc très importants pour orienter la polarisation dans la direction désirée. La polarisation interne peut également interférer dans le comportement d'un composant. Par exemple, si le champ associé à la polarisation du matériau sépare spatialement les électrons et les trous, réduisant ainsi la probabilité de recombinaisons radiatives, la polarisation va améliorer les performances du composant électronique [15]. Si le champ électrique créé par la polarisation est opposé à la direction des porteurs, les électrons sont alors « bloqués » dans le matériau P et les trous dans le matériau N, le courant collecté est donc réduit mais les performances du composant optoélectroniques seront améliorées.

Outre la polarisation interne, les matériaux III-N possèdent également un caractère piézoélectrique. Cet effet est défini comme la création d'un champ électrique suite à une déformation mécanique, et réciproquement comme la création de déformations mécaniques lorsqu'on applique un champ électrique à un matériau. Il est dû au manque de symétrie dans la structure cristalline, à la nature fortement ionique des liaisons chimiques et aux déformations présentes dans le cristal (dues au désaccord de maille entre le matériau et le substrat, par exemple) [16]. Cette polarisation piézoélectrique n'est pas orientée forcément dans la même direction que la polarisation interne. Elle dépend des propriétés du matériau. Ainsi en l'absence de polarisation externe, la polarisation des matériaux à structure wurtzite, P, possède deux composantes, la polarisation interne (ou spontanée), P_{sp} , et la polarisation piézoélectrique induite par les déformations présentes dans le matériau, P_{piezo} [17].

$$P = P_{sp} - P_{piezo} \quad (I.4)$$

La polarisation piézoélectrique peut s'exprimer sous la forme :

$$P_{piezo} = e_{33}\varepsilon_3 + e_{31}(\varepsilon_1 + \varepsilon_2) \quad (I.5)$$

Avec : e_{33} et e_{31} sont les coefficients piézoélectriques du matériau [$C.m^{-2}$] ; ε_1 la déformation dans le plan (supposée isotopique), définie par $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = (a - a_0) / a_0$ [sans dimension (s.d)] ; ε_3 la déformation selon l'axe c définie par $\varepsilon_3 = (c - c_0) / c_0$ [s.d] ; a_0 et c_0 les paramètres de maille à l'équilibre [Å]. La troisième composante piézoélectrique, e_{15} , correspond à la polarisation liée à la déformation en torsion. De même que pour la polarisation interne, la piézoélectricité dans les couches va créer des électrons et des trous qui vont s'accumuler aux surfaces perpendiculaires à la polarisation piézoélectrique. En fonction de la déformation subie et de l'orientation de la polarisation spontanée, ces charges peuvent s'ajouter ou se soustraire aux charges produites par la polarisation spontanée.

	GaN	InN
$e_{31} [C/m^2]$	-0.49 [17] -0.32 [18]	-0.57 [17]
$e_{33} [C/m^2]$	0.73 [17]	0.97 [17]
$P_{sp} [C/m^2]$	-0.029 [17] -0.034 [19]	-0.032 [17] -0.042 [19]

Tableau I.5: Constantes piézoélectriques et valeurs de la polarisation spontanée pour GaN et InN.

Les constantes piézoélectriques du nitrure d'indium de gallium (InGaN) sont déduites linéairement à partir des valeurs de GaN et InN. A contrario, la valeur de la polarisation spontanée de InGaN n'est pas forcément une interpolation linéaire des valeurs de GaN et InN. [19].

I.3.3 Propriétés mécaniques

Les propriétés mécaniques de GaN sont mal connues ; cependant (Perlin et al. [20], Xia et al. [21], Ueno et al. [22], Uehara et al. [23], Savastenko et al. [24], Polian et al. [25], Tagaki et al. [26], Yamaguchi et al. [27], Schwarz et al. [28], Leszczynski et al. [29]), ont tous caractérisé ses propriétés élastiques par des méthodes indirectes, réalisées à pression atmosphérique (diffusion Brillouin et ultrasons), et en fonction de la pression [spectroscopie

d'absorption des rayons X (XAS), diffraction des rayons X par dispersion d'énergie (EDXD) et diffraction des rayons X (XRD)] [30].

Le tableau I.6 donne les valeurs des constantes d'élasticité C_{ij} de GaN, ainsi que son module de compressibilité volumique B , obtenus par diffusion Brillouin et ultrasons. Au travers de ces deux méthodes, les constantes d'élasticité sont déduites de la vitesse respectivement des phonons acoustiques et du son : $X = \rho v^2$, avec ρ la densité du matériau et X une combinaison de constantes d'élasticité C_{ij} dépendant de la direction de propagation des phonons en respectant les axes cristallographiques. Pour les phases hexagonales ; cinq constantes d'élasticité définissent le matériau : C_{11} , C_{33} , C_{13} , C_{44} et C_{12} . Les quatre premières correspondent respectivement à des modes selon les directions $[100]$, $[001]$, $[001]$ et $[011]$. C_{12} apparaît en combinaison, par exemple $(C_{12}+C_{11})/2$ gouverne un mode dans la direction $[100]$. Le module de compressibilité volumique est alors déduit des constantes d'élasticité selon l'équation (I.6) :

$$B = \frac{(C_{11} + C_{12}) \times C_{33} - 2 \times (C_{13})^2}{(C_{11} + C_{12} + 2 \times C_{33} - 4 \times C_{13})} \quad (\text{I.6})$$

Technique		C_{11} (GPa)	C_{12} (GPa)	C_{44} (GPa)	C_{33} (GPa)	C_{11} (GPa)	B (GPa)	Auteurs
XRD		296	130	241	267	158	190	Savastenko et al. [24]
Monocristaux	Brillouin	390	145	105	398	106	210	Polian et al. [25]
	Brillouin	374	106	101	379	70	180	Tagaki et al. [26]
	Brillouin	365	135	109	381	114	204	Yamaguchi et al. [27]
	Ultrasons	377	160	81.4	209	114	173	Schwarz et al. [28]

Tableau I.6 [30] : Constantes d'élasticité C_{ij} expérimentales, et module de compressibilité volumique B théorique, pour GaN de type wurtzite.

Les mesures ultrasoniques présentent un écart important pour C_{33} , certainement du fait de la trop faible épaisseur de l'échantillon étudié. D'une façon générale ; les écarts entre les valeurs obtenues de C_{ij} et de B , proviennent d'une part de la technique de caractérisation utilisée, et d'autre part du type de l'échantillon étudié. Plus l'échantillon analysé contiendra de défauts ou sera caractérisé par une forte concentration en électrons libres, plus ses propriétés mécaniques en seront affectées [27]. Les valeurs des C_{ij} suivent globalement la tendance suivante : C_{11} et C_{33} sont nettement plus élevées que C_{12} , C_{13} et C_{44} . Ceci montre une anisotropie des propriétés élastiques de GaN entre les deux directions, ce qui peut être

directement relié à l'anisotropie de la structure cristalline de type wurtzite selon ses directions. Savastenko et al. ont calculé le module de Young (ou module d'élasticité) et le coefficient de Poisson à partir des constantes d'élasticité. Leurs valeurs sont respectivement de 150 GPa et 0.372 [24].

Les valeurs expérimentales, caractérisant les propriétés mécaniques, montrent que GaN possède des constantes élastiques et un module de compressibilité volumique assez proches de ceux du AlN et supérieurs à ceux du InN [31]. Il faut noter aussi qu'ils sont plus grands pour h-GaN que pour c-GaN. Toutes ces valeurs sont généralement nettement plus faibles que celles du nitrure de bore (BN) cubique, dit matériau ultra dur, qui présente des propriétés mécaniques très proches de celles du diamant [32]. Il manque cependant des données sur la résistance à la rupture pour savoir plus sur la tenue mécanique de GaN.

I.3.4 Propriétés thermiques

La dilatation thermique, la chaleur spécifique, la température de Debye et la conductivité thermique permettent de définir les propriétés thermiques du nitrure de gallium.

I.3.4.1 Dilatation thermique

Tout matériau soumis à un changement de température se déforme : c'est le phénomène de la dilatation thermique. Il convient d'en tenir compte lorsque l'on étudie les propriétés des semiconducteurs à des températures différentes mais également lors de la croissance du matériau car celle-ci se fait à haute température. Ainsi une couche hétéroépitaxiée complètement relaxée à la température de croissance peut être contrainte à la température ambiante. Les coefficients de dilatation thermique permettent d'évaluer la déformation de la maille cristalline en fonction de la variation de température [33].

La dilatation thermique a été mesurée en fonction de la température sur monocristaux. Selon a : le coefficient de dilatation thermique est constant sur toute la gamme de température. Selon c : la composante principale, parallèle à l'axe c, dépend de la température ; la dilatation thermique connaît une rupture de pente à 700 K [32].

Le tableau I.7 donne les coefficients de dilatation thermique de GaN et ceux des substrats les plus souvent utilisés lors de l'hétéroépitaxie de GaN.

Matériaux	GaN Maruska et al. [23]		Saphir	6H-SiC	3C-siC	ZnO	GaAs
	300-700	700-900					
Température (K)	300-700	700-900	300	300	300	300	300
$\frac{\Delta a}{a} (10^{-6} K^{-1})$	5.59		7.5	4.2	2.7	2.9	6
$\frac{\Delta c}{c} (10^{-6} K^{-1})$	3.17	7.75	8.5	4.7	2.7	4.75	6

Tableau 1.7: Coefficients de dilatation thermique de GaN et divers substrats selon Krukowski et al. [32].

I.3.4.2 Chaleur spécifique

Le coefficient de chaleur spécifique permet de calculer la variation de température d'un système auquel on apporte une quantité connue de chaleur. Dans les semi-conducteurs ; l'énergie apportée a pour effet d'augmenter le nombre de phonons présents. Les électrons des bandes de conduction et les trous des bandes de valence sont généralement insuffisants en nombre, pour jouer un rôle important par rapport aux phonons. La concentration en porteurs libres et la présence de défauts ponctuels ou étendus, affectent la chaleur spécifique. La chaleur spécifique (à pression constante) a été mesurée en fonction de la température ; elle est donnée par l'équation (I.7) :

$$C_p(T) = 9.1 + 2.15 \times 10^{-3} \times T \quad (\text{en } \text{cal. mol}^{-1} \text{K}^{-1}) \quad (\text{I.7})$$

Il y a une forte déviation par rapport à la courbe prévue par la théorie de Debye, dans laquelle la capacité calorifique suit la loi de l'équation (I.8) :

$$C_p = [12\pi^4 > R/5] \times (T/\theta_D)^3 \times C \quad (\text{I.8})$$

Avec $R = 8.3144 \text{ J.mol}^{-1}.\text{K}^{-1}$ et θ_D la température de Debye. La différence observée serait due à la forte concentration en électrons libres des échantillons (allant jusqu'à $5 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$) [32].

I.3.4.3 Température de Debye

La température de Debye θ_D caractérise la valeur maximale des énergies de vibrations. Elle a été calculée par Polian et al. [25] à partir de la chaleur spécifique, et par Demidienko et al. [34] à partir des propriétés élastiques.

Les valeurs obtenues sont respectivement de 700 K et 650 K. Ces valeurs sont cohérentes avec les calculs de Kim et al. [35]. Christensen et al. [36], et Azuhaka et al. [37], qui prédisent θ_D entre 620 et 690 K [31].

I.3.4.4 Conductivité thermique

La conductivité thermique est la propriété cinétique qui est déterminée par les contributions des degrés de liberté électronique : de rotation et de vibration. Dans les semi-conducteurs, à cause des faibles densités d'électrons et de trous de conduction, la contribution principale au transport de chaleur vient des phonons. Dans un cristal pur, la conductivité thermique est déterminée uniquement par le processus de la diffusion des phonons. Dans un cristal réel, elle est déterminée aussi par les défauts ponctuels. De toutes les propriétés thermiques, la conductivité thermique est la plus affectée par les défauts de structure. Elle a été mesurée sur différents types d'échantillons : couche mince sur substrat saphir, par la méthode MVPE (Sichel et al. [38]) ; et monocristaux de GaN (Porowski et al. [39]). Les valeurs obtenues sont respectivement $1.3\text{Wcm}^{-1}\text{K}^{-1}$ et $1.7\text{Wcm}^{-1}\text{K}^{-1}$.

La valeur obtenue sur couche mince est inférieure aux calculs théoriques de Slack, prédisant une valeur de $1.7\text{Wcm}^{-1}\text{K}^{-1}$ du fait de la forte concentration en impuretés de l'échantillon (10^{18} cm^{-3}) [32]. Il faudra retenir qu'elle est égale à celle du Si (figure I.4), trois fois plus grande que celle du GaAs et trois fois plus petite que celle du SiC.

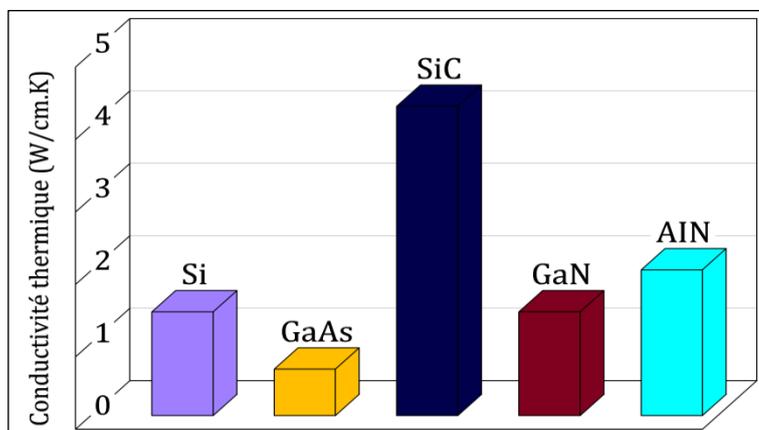


Figure I.4 [40] : Conductivités thermiques de GaN et d'autres composés importants.

I.3.5 Propriétés chimiques

GaN a été analysé la première fois par Johnson et al. en 1928 [41] qui a noté que le nitrure de gallium est un composé extrêmement stable. C'est cette stabilité chimique aux températures élevées, combinée avec son large gap, qui a fait du GaN un matériau attractif pour des dispositifs à hautes températures et dans les environnements caustiques. GaN est également un excellent candidat pour les couches protectrices, en raison de sa dureté. Cependant ; la majorité des travaux sur GaN portent sur ses applications dans les semi-conducteurs. Tandis que la stabilité thermique du GaN pourrait permettre un développement des études à haute température, la stabilité chimique du GaN présente un déficit technologique. Il y a beaucoup de rapports décrivant la résistance des films de GaN aux techniques de gravures humides conventionnelles utilisées dans le traitement des semi-conducteurs.

Seulement deux groupes ont décrit les caractéristiques de gravure chimique humide du GaN connu pour sa haute qualité. Maruska et Tietjen [42] ont rapporté que GaN était insoluble dans l'eau, les acides, ou les bases à température ambiante ; mais il se dissout dans les solutions alcalines chaudes à un taux très lent. Pankove [43] n'a pas pu graver GaN dans NaOH à cause de la formation d'une couche de GaOH sur la surface. Un matériau de moindre qualité a été observé en gravant à des taux élevés dans NaOH, H₂SO₄ et H₃PO₄. Ces gravures, qui sont seulement efficaces pour des films de GaN de mauvaise qualité, sont utiles pour l'identification des défauts et l'estimation de leurs densités dans les films de GaN. Jusqu'à présent, il n'existe aucun processus de gravure chimique établi, malgré les efforts de beaucoup de chercheurs.

AlN présente une résistance à la gravure chimique comme GaN. Il y a eu un grand nombre d'expériences de gravures d'AlN ; mais celles qui ont donné AlN de bonne qualité ne sont pas nombreuses. La chimie de surface de l'AlN a été étudiée par de nombreuses techniques, (spectroscopie d'électrons d'Auger, spectroscopie de photoémission des rayons X, (X-ray Photoemission Spectroscopy) (XPS), spectroscopie de photoélectrons de rayons ultraviolets, et spectroscopie d'électrons). Slack et Mc Nelly ont indiqué que l'AlN développe en surface, de l'oxyde d'épaisseur 50–100Å lorsqu'il reste exposé pendant une journée à la température ambiante. Toutefois, cette couche d'oxyde sert comme protection, et aucune décomposition des échantillons d'AlN n'a été observée.

Il ya eu plusieurs études qui ont indiqué une dissociation rapide de l'InN à des températures supérieures à 500°C. Depuis ; il n'y a pas eu d'InN de haute qualité développé, la résistance du matériau à la gravure chimique est inconnue. Wakahara et al. ont signalé la gravure réussie des films d'InN dans une solution chaude de H₃P₄O₄:H₂S₄O₄.

I.3.6 Propriétés électriques des nitrures

I.3.6.1 Concentration d'électrons dans les nitrures

Les mesures électriques sur les nitrures (GaN, InN et InGaN) montrent une forte concentration d'électrons, généralement de l'ordre de 10^{16} - 10^{18} cm⁻³, leur donnant un caractère intrinsèquement de type N [44, 45, 46]. Il semble que cette forte densité d'électrons puisse avoir plusieurs origines. Dans un premier temps, les défauts structuraux ont été proposés comme étant à l'origine de la forte concentration d'électrons, avec au premier rang les lacunes d'azote [44, 47, 48]. En effet ; d'après les calculs, ces dernières ont la plus faible énergie de formation dans GaN et InN [49]. Il a été également supposé que des impuretés comme l'oxygène, le carbone, etc. provenant des procédés de croissance participent au caractère de type N [44, 49, 50, 51].

Schaff et al. [46] ont montré que la concentration d'électrons dans InN est dépendante de l'épaisseur de la couche. En effet, la concentration des électrons suit la densité de défauts dus au désaccord de maille, qui diminue avec l'augmentation de l'épaisseur des couches, voir figure I.5. C'est pourquoi les défauts, et pas les contaminants, sont la principale source d'électrons dans InN [44].

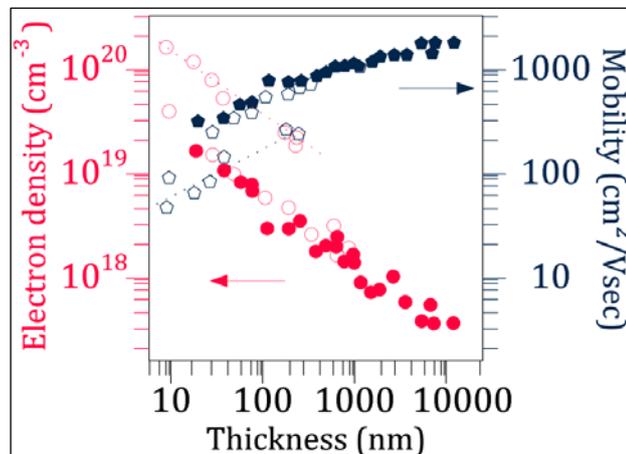


Figure I.5: Densité d'électrons et mobilité dans InN en fonction de l'épaisseur de la couche.

Les symboles pleins correspondent à des couches de InN déposées sur une couche de GaN tampon. Les symboles vides identifient les couches déposées sur une couche tampon de AlN. Les symboles avec un point, représentent les couches déposées directement sur le saphir [46]. La figure I.6 montre l'évolution de la concentration d'électrons en fonction de la température dans différents alliages de In_{1-x}Ga_xN, x étant la concentration de Ga.

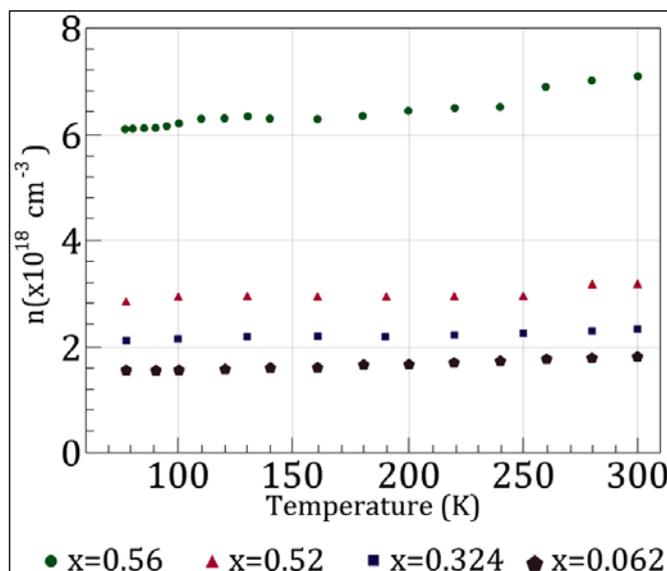


Figure I.6: Concentration d'électrons en fonction de la température dans $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{N}$ avec différentes concentrations d'indium [45].

On observe que la concentration d'électrons augmente avec la fraction de Ga dans $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{N}$ ce qui confirme l'hypothèse de l'augmentation de la densité de charges libres avec l'augmentation de défauts structuraux. Cependant, cette concentration est très peu dépendante de la température entre 77 et 300 K. A noter que la densité d'électrons est maximale pour 50% de Ga ou d'indium. Si on continue à augmenter la concentration de Ga dans $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{N}$, la densité d'électrons diminue.

I.3.6.2 Mobilité des porteurs dans les nitrures

Comme le montre la figure I.5, la mobilité des porteurs dans InN est inversement proportionnelle à la densité d'électrons libres présents dans le matériau. Ce phénomène est également présent dans les autres nitrures (GaN, InGaN).

La mobilité des porteurs libres dans $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{N}$ est présentée dans la figure I.7, avec x la concentration de Ga [45]. On observe que la mobilité diminue avec la concentration de Ga. Ceci est dû à la fois à l'augmentation de la masse effective des électrons avec l'augmentation de la concentration de Ga dans $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{N}$ ($m_e^{\text{GaN}} = 0.2m_0$ et $m_e^{\text{InN}} = 0.11m_0$), mais aussi à l'augmentation du phénomène de diffusion des porteurs à cause de l'alliage et des défauts qui augmentent avec la concentration de Ga dans $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{N}$. On observe également que la mobilité est quasiment dépendante de la température.

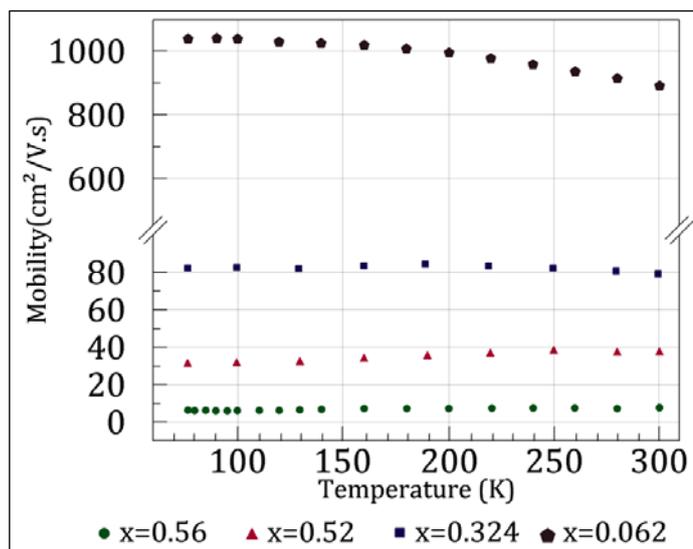


Figure I.7: Mobilité des porteurs libres dans $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{N}$ en fonction de la température [45].

I.4 Dopage des composés nitrurés III-N

I.4.1 Dopage de GaN type n

Le dopage de type n, est plus facile à contrôler que celui de type p, vu que le dopage résiduel de GaN est de type n (de 10^{16} cm^{-3} du fait du nombre important de défauts : lacunes d'azote, présence d'impuretés). Le Si est le dopant le plus utilisé et quasiment le seul pour les nitrures, ces dernières années, à cause de son efficacité à atteindre une large gamme de dopage dans GaN [52]. En effet, L'énergie d'activation du silicium n'est pas déterminée précisément, elle est généralement donnée entre 12 et 17 meV.

I.4.2 Dopage de GaN type p

Le Mg est le dopant de choix pour introduire des trous dans GaN, étant donné les états relativement peu profonds qu'il introduit dans le matériau. Sa limite d'incorporation dans GaN est de l'ordre de 10^{18} cm^{-3} ; au-delà, la morphologie du GaN se dégrade. Cependant ; lors de la croissance par MOCVD, l'omniprésence de l'hydrogène tend à passiver ce dopant en créant des complexes inactifs. L'hydrogène est passivant de Mg, il est nécessaire de faire subir un traitement au p-GaN afin de l'activer, de le faire passer d'un état hautement isolant à hautement conducteur. Une découverte accidentelle à la fin des années 1980 a permis l'activation par irradiation sous faisceau électronique. Ce traitement libère l'hydrogène des complexes Mg-H, ce qui permet l'injection de trous. L'existence de cette méthode a rendu possible la réalisation de jonctions PN. Aujourd'hui, l'activation du Mg est réalisée par recuit thermique à haute température ($> 750 \text{ }^\circ\text{C}$).

Dopant	Type de dopage	Site préférentiel	Energie des niveaux (meV)
Si	n	Ga	12-17
O	n	N	29
C	n	Ga	110-140
Be	p	N	700
Mg	p	Ga	160-210
Zn	p	Ga	210-340

Tableau I.8: Dopants les plus fréquents dans GaN [53].

I.5 Elaboration des composés nitrurés III-N

I.5.1 Techniques d'élaboration des nitrures

Pour fabriquer des dispositifs électroniques et optoélectroniques à partir des nitrures, l'élaboration de couches minces de bonne qualité est nécessaire. L'épitaxie des nitrures se fait en général par des techniques d'élaboration bien précises telles que : l'épitaxie en phase vapeur à partir d'hydruure (EPVH), l'épitaxie par jets moléculaires (EJM) et l'épitaxie en phase vapeur organométalliques (EPVOM).

I.5.1.1 Epitaxie en phase vapeur à partir d'hydruure (EPVH)

C'est historiquement la première technique d'épitaxie utilisée pour la croissance de GaN, et elle a permis les premières études physiques de ce matériau. En EPVH, la croissance résulte de la réaction entre un halogénure de l'élément III, généralement un chlorure, avec une espèce volatile de l'élément V. Dans le cas de la croissance de GaN, l'azote est transporté sous forme d'ammoniac, et le gallium par réaction entre le métal et HCl vers 900°C. Une variante consiste à utiliser le chlorure volatil GaCl₃ introduit par bullage. Les températures de croissance sont typiquement 1050-1100°C [54]. Le gaz vecteur est généralement H₂, N₂ ou un gaz rare [55]. Tous les substrats usuels peuvent être utilisés. Dans le cas du saphir, certains auteurs préconisent un prétraitement sous NH₃ ou GaCl [56] ou ZnO [57]. En EPVH, la croissance d'un tampon à basse température n'est pas nécessaire. Cette technique produit des couches de GaN de bonne qualité : les densités de dislocations sont dans la gamme des 10⁸-10⁹cm⁻². Le dopage n résiduel est autour de 10¹⁷cm⁻³, d'origine principale l'oxygène [58] et le silicium [59]. Les mobilités électroniques sont supérieures à 500cm²/V.s.

Outre le fait qu'elle permet l'épitaxie de GaN de bonne qualité, l'EPVH présente un intérêt particulier dans le cas des nitrures : elle permet l'obtention de grandes vitesses de croissance [60], jusqu'à 100µm/h, sans préjudice pour la qualité électronique du matériau. Elle est donc

utilisée pour la croissance de quasi-substrats pour l'épitaxie. Les diodes lasers commercialisées à l'heure actuelle sont obtenues sur ce genre de substrats.

I.5.1.2 Epitaxie par jets moléculaires (EJM)

La technique MBE (Molecular Beam Epitaxy) ou épitaxie par jets moléculaires est une technique de croissance sous ultravide. Elle consiste à l'évaporation sous vide de matériaux sources solides portés à haute température, lesquels se déposent sur un substrat à température plus faible (700-750°C) que celles des sources et qui est mis en rotation afin de garantir l'homogénéité des couches déposées. L'EJM présente l'avantage de pouvoir travailler avec des vitesses de croissance lentes (0.5 - 2µm/heure) afin de laisser le temps aux atomes arrivant à la surface de migrer par diffusion vers les sites cristallographiques. Ainsi, elle est particulièrement adaptée pour l'élaboration de structures multicouches constituées de couches extrêmement minces. La figure I.8 montre le schéma synoptique général d'un bâti d'EJM destiné à la croissance de GaN. De même que pour la croissance de la plupart des autres SC, les sources de gallium, d'aluminium et d'indium sont solides. La source d'azote utilisé est soit NH₃, soit N₂, auquel cas une source plasma RF (Radio Fréquence) ou ECR (Résonance Electron Cyclotron) est nécessaire pour dissocier les molécules d'azote très stables. L'EJM présente l'avantage de pouvoir ainsi contrôler parfaitement l'épaisseur déposée en utilisant une sonde RHEED (Reflection High Energy Electron Diffraction) ou une diffraction des électrons de haute énergie installée dans le bâti de dépôt qui va contrôler en temps réel la quantité d'éléments incorporés [61].

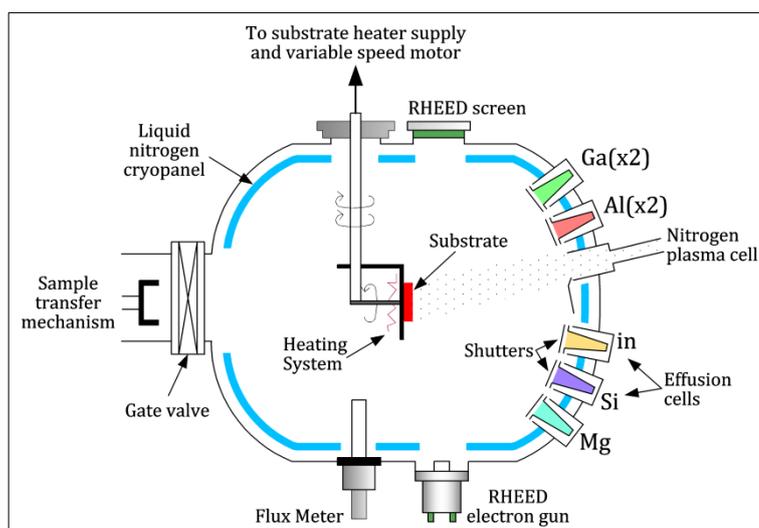


Figure I.8: Schéma synoptique d'un bâti d'épitaxie par EJM [62].

I.5.1.3 Epitaxie en phase vapeur organométalliques (EPVOM)

La croissance par EPVOM (MOCVD Metal Organic Chemical Vapor Deposition) résulte de la pyrolyse de composés organométalliques et d'hydrures transportés par un gaz vecteur au voisinage d'un substrat porté à haute température. L'EPVOM est la principale technique de croissance des nitrures III-V. Les vitesses de croissance sont de l'ordre de quelques $\mu\text{m/h}$.

La croissance consiste en la décomposition simultanée d'organométalliques (triéthylgallium (TEGa), triméthylaluminium (TMA), triméthylindium (TMI), Biscyclopentadiénylmagnésium (C_p2Mg), etc ...) et d'hydrures (NH_3 , SiH_4) qui sont transportés par un gaz vecteur (azote (N_2) et/ou hydrogène (H_2)). Les flux des sources utilisées sont stabilisés, ensuite mélangés juste avant leur introduction dans le réacteur à une seule entrée alors qu'ils se mélangent au niveau du substrat dans le cas d'un réacteur à deux entrées. L'épitaxie s'effectue en général sur substrat Al_2O_3 placé sur un suscepteur en graphite [63].

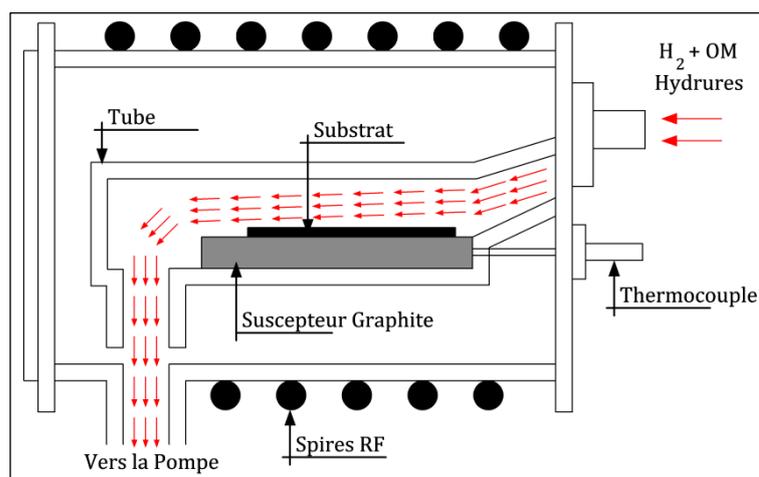


Figure I.9: Schéma synoptique d'un bati d'épitaxie par EPVOM [63].

I.5.2 Substrats pour le dépôt de nitrures cubiques et hexagonaux

Dans les dernières années, plusieurs substrats de symétrie cubique ont été testés pour l'épitaxie des nitrures cubiques. Dans le tableau I.9, nous donnons les caractéristiques de chacun de ces substrats en termes de désaccord de maille et thermo-élastique avec les couches épitaxiales (l'absence de signe sur les chiffres de colonnes de contrainte indique une contrainte en tension, et le signe négatif indique une contrainte en compression).

Substrat	Coefficient de dilatation thermique ($10^{-6}K^{-1}$)	Paramètre de maille a (Å)	Désaccord thermoélastique avec les nitrures (%)	Désaccord de maille avec les nitrures (%)
GaAs (001)	$\Delta a/a = 6.00$	5.6533	GaN : 0.19	GaN : -20.4
			AlN: 0.29	AlN : -22.5
			InN : 0.01	InN : -11.9
Si (001)	$\Delta a/a = 3.59$	5.4301	GaN : 0.03	GaN : -17.1
			AlN: 0.13	AlN : -19.3
			InN : 0.06	InN : -8.3
3C-SiC	$\Delta a/a = 4.3-5.2$ (400-500 K)	4.3569	GaN : 0.14	GaN : 3.3
			AlN: 0.02	AlN : 0.4
			InN : -0.02	InN : 14.2
MgO	$\Delta a/a = 10.50$	4.216	GaN : 0.49	GaN : 6.4
			AlN: 0.60	AlN : 3.9
			InN : 0.25	InN : 18.1
GaP	$\Delta a/a = 4.65$	5.4512	GaN : 0.10	GaN : -21.0
			AlN: 0.21	AlN : -19.6
			InN : -0.03	InN : -8.6

Tableau I.9: Désaccords thermo-élastiques et de maille entre les différents substrats utilisés pour l'épitaxie des nitrures dans la phase cubique [4].

Les substrats les plus utilisés dans le cas du GaN hexagonal sont donnés par le tableau I.10 :

Substrats pour GaN hexagonal	Structure cristalline	Paramètre de maille (Å)		Coefficient de dilatation thermique $\Delta a/a$, $\Delta c/c$ ($10^{-6} K^{-1}$)	
		a	c	a	c
Saphir Al_2O_3	Hexagonale	4.758	12.99	7.50	8.50
6H SiC	Hexagonale	3.08	15.12	4.20	4.68
Si (1 1 1) (1 0 0)	Cubique	5.4301	/	3.29	/
GaAs (1 1 1) (1 0 0)	Cubique	5.6533	/	6.00	/
ZnO	Hexagonale	3.250	5.213	8.25	4.75
AlN(couche tompon)	Hexagonale	3.112	4.982	4.20	5.30

Tableau I.10: Les paramètres de maille et les coefficients de dilatation thermique des différents substrats employés pour la croissance du GaN sous sa structure hexagonale [3].

I.5.3 Les substrats les plus utilisés

I.5.3.1 Saphir (Al_2O_3)

C'est le substrat le plus couramment utilisé pour l'épithaxie des nitrures. La majeure partie des fabricants de LED l'utilise, il est le plus utilisé pour les premières étapes de l'épithaxie des diodes laser, etc.... Ses inconvénients majeurs sont sa faible conductivité thermique et son caractère isolant. Ceci empêche son utilisation pour les dispositifs à géométrie verticale, ou fonctionnant sous haute puissance (DL, transistors de puissance). La relation d'épithaxie de GaN est alors (0001) GaN // (0001) saphir et (01-10) GaN // (-2110) saphir. La dernière relation qui implique une rotation de 30° de la maille hexagonale de GaN par rapport à celle du saphir, permet de réduire le désaccord de paramètre de maille qui reste cependant de 14%.

La croissance de GaN sur saphir débute par un recuit à haute température du saphir, généralement sous ammoniac. Un des effets de ce recuit est de transformer la surface du saphir en AlN [64] ou $\text{AlO}_x\text{N}_{1-x}$ [65]. Il semble que ceci fixe la polarité du cristal. En effet, que ce soit le GaN épithaxié sur saphir par MOVPE ou épithaxié sous jets moléculaires (EJM) par pyrolyse d'ammoniac, il a toujours la polarité Ga. Il est nécessaire ensuite de déposer une couche tampon à basse température en AlN ou GaN, d'épaisseur de quelques dizaines de nm. Ce tampon est polycristallin et polyphasé. Il devient monophasé (wurtzite) lors du recuit vers la température de croissance. La maille de GaN épithaxié sur saphir est relaxée ou en compression biaxiale ; plus cette compression est élevée, meilleure est la qualité optoélectronique de GaN.

I.5.3.2 Carbure de silicium

Les polytypes hexagonaux de SiC les plus utilisés pour l'épithaxie des nitrures sont le 6H-SiC principalement, et le 4H-SiC. Le désaccord de paramètre de maille dans le plan de base est faible et sa conductivité thermique est élevée. Il est disponible de type n et p ou isolant. La croissance de GaN sur SiC nécessite un tampon d'AlN ou de (Al, Ga) N. Dans ce dernier cas, il se forme naturellement une fine couche de mouillage (≤ 10 nm) très riche en AlN, qui permet de réduire la contrainte interfaciale [66]. La polarité du substrat SiC influe sur celle de GaN : GaN épithaxié sur une face de polarité Si (respectivement C) est généralement de polarité Ga (respectivement N) [67]. D'une manière générale, la qualité cristalline et optoélectronique de GaN épithaxié sur SiC est similaire à celle de GaN épithaxié sur saphir. Des LED fonctionnant en injection verticale, à travers le substrat et en utilisant des tampons conducteurs en (Al, Ga)N, sont commercialisées.

I.5.3.3 Silicium Si(111)

Malgré un désaccord de paramètre de maille important, le silicium est un substrat pour l'épithaxie des nitrures sur lequel on fonde beaucoup d'espoirs, en raison de ses avantages parmi lesquels, sa grande disponibilité, sa grande surface, sa haute qualité cristalline et son faible coût. Il est conducteur n ou p, et sa conductivité thermique est élevée. Il est aisé de séparer chimiquement les nitrures de leur substrat. Cependant, il présente des difficultés majeures : il réagit avec l'ammoniac aux températures de croissance pour former Si_xN_y sur lequel la croissance épithaxiale est impossible. Il présente aussi un très grand désaccord de coefficient de dilatation thermique (Tableau I.9) qui se traduit par une contrainte biaxiale extensive dans le GaN, pouvant provoquer l'apparition de fissures dans les échantillons et il n'est pas polaire.

Pour résoudre ces problèmes, il est nécessaire d'utiliser un tampon d'AlN, obtenu par déposition de quelques monocouches atomiques d'Al nitrurées ultérieurement [68]. Pour éviter la formation de fissures, il faut compenser la contrainte biaxiale extensive de GaN par une contrainte compressive. Ceci peut être réalisé par des alternances AlN/GaN de géométrie variable selon les auteurs. Des couches non fissurées d'épaisseur jusqu'à $2\mu\text{m}$ peuvent être obtenues. Des DEL bleues et vertes ont été réalisées sur Si(111) [69], mais leur efficacité est à l'heure actuelle loin d'égaliser celle des LED épithaxiées sur saphir ou SiC.

Conclusion

Les matériaux nitrures sont très prometteurs pour la micro-électronique de puissance et l'optoélectronique avancée, grâce à leurs propriétés nombreuses et exceptionnelles telles que la large bande interdite, la vitesse de saturation des porteurs, la résistivité électrique, la résistivité thermique et la stabilité chimique ; nous avons donné leurs principales propriétés et techniques d'élaboration.

Références

- [1] P. Chevalier, chp. B : «Propriétés des matériaux III-V», Université de Lille (1999).
- [2] Laure. Siozade, Ecole doctorale des Sciences Fondamentales: «Etude expérimentale et théorique de structures semi-conducteurs à base de Nitrure De Gallium», Université Blaise Pascal, Clermont-Ferrand II.
- [3] Martinez. Guerrero, Esteban, Institut national des sciences appliquées : «Elaboration en épitaxie par jets moléculaires des nitrures d'éléments III en phase cubique», Lyon, (2002).
- [4] Philippe. Agnès, Institut national des sciences appliquées : « Caractérisation électrique et optique du nitrure de gallium hexagonal et cubique en vue de l'obtention d'émetteurs bleus», Lyon, (1999).
- [5] N. Bachir, Mémoire de Magister : «Application de la méthode de Monte Carlo à l'étude du phénomène de transport dans GaN», Tlemcen (2004).
- [6] Stéphanie. Anceau, Thèse de Doctorat : «Etude des propriétés physiques des puits quantiques d'alliages quaternaires (Al,Ga,In)N pour la conception d'émetteurs ultraviolets», Université Montpellier, (2004).
- [7] Pugh S. K, Dugdale D. J, Brand S and Abram R.A: «Electronic structure calculation on nitride semiconductors», *Semicond.SCI, Technol*, Vol. 14, pp. 23-31, (1999).
- [8] Xu D.P, Whang, Y.T, Yang, H, Li, S F, Zho, D.G, Fu, Y.Zhang, Sm, Wu, RHJia, S.J Zheng, WL and Jiang XM: «Anomalous strains in the cubic phase GaN films grown on GaAs (001) by metalorganic chemical vapour deposition», *J. Appl. Phys*, Vol. 88, No 6, pp. 3762-3764 , (2000).
- [9] Powell, R.C, Lee N.E, Kim Y.W, and Greene J: «Hetero epitaxial wurtzite and zinc blende structure GaN grown by reactive ion molecular beam epitaxy, growth kinetic microstructure and proprieties», *J. Appl. phys*, Vol. 73, No1, pp. 189-204, (1993).
- [10] Petrov I, Majob E, Powell R.C and Greene J.E: «Synthesis of metastable epitaxial zinc blend structure AlN by solid reaction», *Appl. Phys Letters*. Vol. 60, No 20, pp. 2491-2493, (1992).
- [11] Okumaru H, Hamagushi H, Koizumi T, Balakrishnan K, Ishida Y, Akita M, Chichibu S, Nakanishi H, Nagatoma T, Yoshida S: «Growth of cubic III- nitrides by gas source MBE using atomic nitrogen plasma: GaN, AlGaN and AlN», *J. Gryst. Growth*, Vol. 198/190, pp. 390-394, (1998).

- [12] Strites .S, Chandrasekhr .D, Smith D .J, Sariel. J, Chen .H, Terhguch. N, and Morkoç .H: «Structural proprieties of InN films grown on GaAs subtracts: observations of the Zinc blend poly type», *J. Gryst. Growth*, Vol. 127, pp. 204-208, (1993).
- [13] Tabata A., Lima A. P., Teles L. K., Scolfaro L. M. R., Lette J. R., Lemos V., Schotteker B., Frey T., Schikora D. and Lischka K: «Structural properties and Raman modes of Zinc blende epitaxial layers», *Apply. Phys. Lett*, Vol. 74, N°3, pp. 362-364, (1999).
- [14] Morkoç.H, *Hand book of Nitride Semiconductors and Devices*. Weinheim: WILEY-VCH Verlagmb H & Co. KGaA, Vol. 1.978-3-527-40837-5, (2008).
- [15] Mokkaḡati, S. and Jagadish, C: «III-V compound SC for optoelectronic devices», *Materials Today*, Vol. 12, 22, (2009).
- [16] Liu, L. and Edgar, J.H: «Substrates for gallium nitride epitaxy», *Materials Science and Engineering R*, Vol. 37, 61, (2002).
- [17] Bernardini, F., Fiorentini, V. and Vanderbilt, D: «Spontaneous polarization and piezoelectric constants of III-V nitrides», *Physical Review B*, Vol. 56, R10024, (1997).
- [18] Shimada, K, Sota, T. and Suzuki, K: «First-principles study on electronic and elastic properties of BN, AlN, and GaN», *Journal of Applied Physics*, Vol. 84, 4951, (1998).
- [19] Vurgaftman, I. and Meyer, J.R: «Band parameters for nitrogen-containing semiconductors», *Journal of Applied Physics*, Vol. 94, 3675, (2003).
- [20] I. Vurgaftman, L.R. Ram-Mhan and J.R. Meyer, *Journal of Applied Physics*, Vol. 89, n°11 (June 2001).
- [21] S.J. Pearton, F. Ren, A.P. Zhang and K.P. Lee: «Fabrication and performance of GaN electronic devices», *Mat. Sci. Eng. R*, Vol. 30, pp. 55-212, (2000).
- [22] J. Y. Duboz : «GaN as seen by the industry», *Acad. Sci. Paris*, t. 1, Série IV, pp. 71-80, (2000).
- [23] P. Perlin, I. Gorczyca, N. E. Christensen, I. Grzegory, H. Teisseyre and T. Suski : «Pressure studies of gallium nitride: crystal growth and fundamental electronic Properties», *Phys. Rev. B*, Vol. 45, pp. 13307-13313, (1992).
- [24] V. A. Savastenko and A. U. Sheleg. *Phys. Status Solidi A*, pp. 135-148, (1978).
- [25] P. Polian, M. Grimsditch and I. Grzegory: «Elastic constants of gallium nitride», *J. Appl. Phys.* N°6, Vol. 79, pp. 3343-3344, (1996).
- [26] Y. Tagaki, M. Ahart, T. Azuata, T. Sota, K. Suzuki and S. Nakamura: «Brillouin scattering study in the GaN epitaxial layers», *Physical B*, pp. 219-220 and 547-549, (1996).

- [27] M. Yamaguchi, T. Yagi, T. Azuhata, T. Sota, K. Suzuki, S. Chichibu and S. Nakamura: «Brillouin scattering study of gallium nitride: elastic stiffness constants», *J. Phys. Condens. Matter* 1, Vol. 9, pp. 241-248, (1997).
- [28] R. B. Schwartz, K. Khachaturian and E. R. Weber: «Elastic modules of gallium nitride», *Appl. Phys. Lett.* 9, Vol. 70, pp. 1122-1124, (1997).
- [29] M. Leszczynski, T. Suski, P. Perlin, H. Teisseyre, I. Grzegory, M. Bockowski, J. Jun, S. Porowski and J. Majo: «Lattice constants, thermal expansion and compressibility of gallium nitride», *J. Phys. D*, Vol. 28, A 149, (1995).
- [30] A. Polian: «Mechanical properties of the group III nitrides», Publication INSPEC, Data review series n°23, pp. 11-20, (1998).
- [31] I. Akasaki and H. Amano: «Crystal structure, mechanical properties and thermal properties of BN», Publication INSPEC, Data review series n°11, pp. 7-21, (1994).
- [32] S. Krukowski, M. Leszczynski and S. Porowski: «Thermal properties of the group III Nitrides», publication INSPEC, Data review series n°23, p. 21-28, (1998).
- [33] H. Morkoc, S. Strite, G. B. Gao, M. E. Lin, B. Sverdlov, and M. Burns, «Large-bandgap SiC, III-V nitride, and II-VI ZnSe-based semiconductor device technologies», *Journal of Applied Physics*, vol. 76, pp.1363-1398, (1994).
- [34] Annaïg Denis: «Elaboration, cristallogénèse et caractérisation physico-chimiques des nitrures des éléments de la colonne IIIA et en particulier de GaN», Université Bordeaux I, (octobre 2003).
- [35] K. Kim, R. L. Lambrecht and B. Segall: «Elastic constants and related properties of tetrahedrally bonded BN, AlN, GaN and InN», *Phys. Rev. B*, Vol. 53, pp. 16310-16326, (1996).
- [36] N. E. Christensen and I. Gorczyca: «Optical and structural properties of III-V nitrides under pressure», *Phys. Rev. B* 7, Vol. 50, pp. 4397-4415, (1994).
- [37] T. Azuhata, T. Sota and K. Suzuki: «Elastic constants of III-V compound semiconductors: modification of Keyes' relation», *J. Phys. Condens. Matter*, Vol. 8, pp. 3111-3119, (1996).
- [38] E. K. Sichel and J. J. Pankove: «Thermal conductivity of GaN, 25–360 K», *J. Phys. Chem. Solids*, pp. 330-338, (1977).
- [39] S. Porowski and I. Grzegory: «Thermodynamical properties of III–V nitrides and crystal growth of GaN at high N₂ pressure», *J. Cryst. Growth*, 1-2, Vol. 178, pp. 174-188, (1997).
- [40] Michael S. Shur: «GaN-Based Electronic Devices», chp.5, Japan (1998).

- [41] Johnson W.C., Parsons J.B., Crew M.C., J. Phys. Chem. 234, 2651, (1932).
- [42] Maruska H.P., Tietjen J.J., Appl. Phys. Lett. 15, 327, (1969).
- [43] Pankove J.I., Leksono M., Chang S.S., Walker C., Van Zeghbroeck B: «High-power high-temperature heterobipolar transistor with Gallium Nitride emitter», Mrs Internet J. Nitride Semicon.1, article 39, (1996).
- [44] Wu, J: «When group-III nitrides go infrared: New properties and perspectives», Journal of Applied Physics, Vol. 106, 011101, (2009).
- [45] Donmez, O., et al: «High carrier concentration induced effects on the bowing parameter and the temperature dependence of the band gap of $Ga_xIn_{1-x}N$ », Journal of Applied Physics, Vol. 110, 103506, (2011).
- [46] Schaff, W.J., et al. 868, s.l, Physica Status Solidi B, Vol. 245, (2008).
- [47] Duan, X.M. and Stampft, C. 115207, s.l, Physical Review B, Vol. 77, (2008).
- [48] Yildiz, A., et al: «Structural, electrical and optical characterization of InGaN layers grown by MOVPE», Chinese Physics B, Vol. 18, 4007, (2009).
- [49] Neugebauer, J. and Van de Walle, C.G: «Atomic geometry and electronic structure of native defects in GaN», Physical Review B, Vol. 50, 8067, (1994).
- [50] Gorczyca, I., Svane, A. and Christensen, N.E: «Theory of point defects in GaN, AlN, and BN: Relaxation and pressure effects», Physical Review B, Vol. 60, 8147, (1999).
- [51] Stampfl, C., et al: «Native defects and impurities in InN: First principles studies using the local density approximation and self-interaction and relaxation-corrected pseudopotentials», Physical Review B, Vol. 61, 7846, (2000).
- [52] X. Huang, J. Ping Liu, J. Kong, Hui Yang and W. Huai-Bing: «High-efficiency InGaN-based LEDs grown on patterned sapphire substrates», Optics Express 949 Vol. 19, No. 14 China, (2011).
- [53] S. Kucheyev, J. Williams, and S. Pearton: «Ion implantation into GaN», Materials Science and Engineering R, vol. 33, no.2-3, pp. 51-108, (2001).
- [54] Akasaki I., Amano H., Koide Y., Hiramatsu K., Sawaki N., J. Cryst. Growth, 98, 209, (1989).
- [55] Melnik Y.V., Vassilevski K.V., Nikitina I.P., Babanin A.I., Davydov V.Y., Dmitriev V.A., Mrs Internet J. Nitride Semicond. Res. 2, 39(1997).
- [56] Molnar R.J., Aggarwal R., Liau Z.L., Brown E.R., Melngailis I., Götz W., Romano L.T., Johnson N.M., Mat. Res. Soc. Symp. Proc. 395, 189, (1996).
- [57] Götz W., Romano L/T., Walker J., Johnson N.M., Molanar R.J., Appl. Phys. Lett. 72, 1214, (1998).

- [58] Meister D., Böhm M., Topf M., Kriegseis W., Burkhardt W., Dimstorfer I., Rösel S., Farangis B., Meyer B.K., Hoffmann A., Siegle H., Thomsen C., Christen J., Bertram F., *J. Appl. Phys.* 88, 1811, (2000).
- [59] Götz W., Johnson N.M., Walker J., Bour D.P., Street R.A., *Appl. Phys. Lett.* 68, 667, (1996).
- [60] Cadoret R., *J. Cryst. Growth*, 205, 123, (1999).
- [61] F. Hadjaj, Mémoire de Magister : «Simulation des caractéristiques électriques des détecteurs d'irradiations en nitrure de gallium (GaN)», Université de Bechar, (2009).
- [62] F. Guillot, Thèse Doctorat : «Développement de nanostructures à base de semiconducteurs III Nitrures pour l'optoélectronique infrarouge», Université Joseph Fourier Grenoble I, (2007).
- [63] N. Défrance : «Caractérisation et modélisation de dispositif de la filière nitrure pour la conception de circuits intégrés de puissance hyperfréquences», (2007).
- [64] Grandjean N., Massies J., Leroux M., *Appl. Phys. Lett.* 69, 2071, (1996).
- [65] Widmann F., Feuillet G., Daudin B., Rouviere J.L., *J. Appl. Phys.* 85, 1550, (1999).
- [66] Bremser M.D., Perry W.G., Zheleva T., Edwards N.V., Nam O.H., Parikh, N., Aspnes D.E., Davis R.F., *Mrs Internet J. Nitride Semicond. Res.* 1, 8, (1996).
- [67] Hellmann E., *Mrs J. Internet J. Nitride Semicond. Res.* 3, 11, (1998).
- [68] Semond F., Damilano B., Vezian S., Grandjean N., Leroux M., Massies *Phys. Stat. Sol (B)* 216, 101, (1999).
- [69] Dalmasso S., Feltin E., De Mierry P., Beaumont B., Gibart P., Leroux M., *Electronic Letters* 36, 1728, (2000).

CHAPITRE II

Propriétés optiques des matériaux III-N

II.1 Introduction

Les semi-conducteurs III-V de la famille des nitrures (InN, GaN et AlN ainsi que leurs alliages) ont connu un développement considérable depuis une dizaine d'années. Cet engouement est dû notamment aux propriétés optoélectroniques de ces matériaux à bande interdite directe et aux applications qui en découlent. En effet, la bande interdite des nitrures d'éléments III s'échelonne de 0.7eV pour InN (proche Infrarouge) à 6.2eV (UV) pour AlN, ce qui grâce à l'ingénierie de bande interdite et la réalisation d'alliages ternaires ($\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ ou $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$) permet de réaliser des dispositifs émetteurs de lumière, comme des diodes électroluminescentes (LEDs) [1] ou des diodes lasers (DLs) [2], couvrant toute cette gamme spectrale.

Dans ce chapitre nous allons décrire dans un premier temps les propriétés optoélectroniques du matériau InGaN qui est le plus prometteur pour la réalisation des diodes électroluminescentes bleues. Dans un deuxième temps nous allons donner les nitrures à base de bore développés récemment, qui offrent beaucoup d'avantages pour l'amélioration des performances des dispositifs optoélectroniques et pour fabriquer de nouvelles générations de dispositifs optiques.

II.2 Propriétés optoélectroniques

II.2.1 Diagrammes des bandes

II.2.1.1 Allure générale des bandes d'énergie

Dans les figures II.1 et II.2 ; sont données les structures de bandes des trois nitrures GaN, AlN et InN, dans la phase cubique.

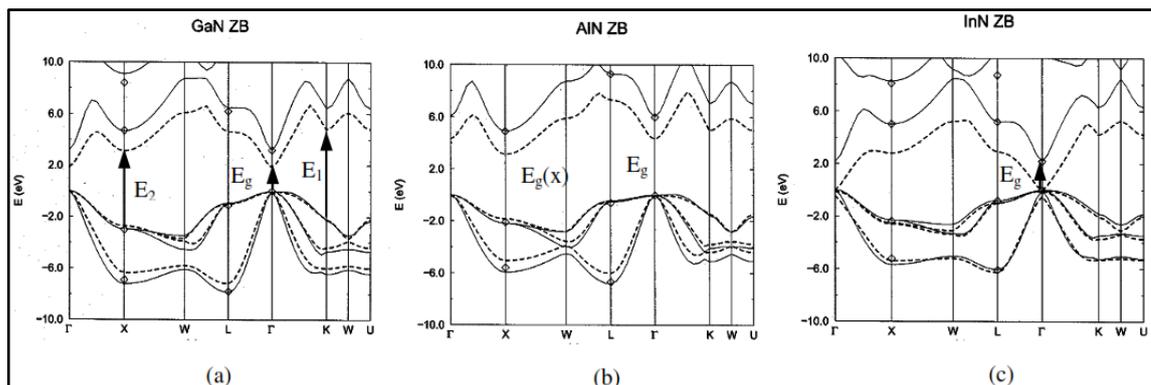


Figure II.1: Structures de bandes des trois nitrures (GaN, AlN et InN) dans leurs phases cubiques. Les lignes pointillées correspondent aux résultats obtenus par la méthode "first-principles" en utilisant l'environnement VASP. Les lignes continues sont celles de la méthode "semi-empirical pseudopotential" [3].

✚ GaN cubique : En plus de la vallée Γ , il y a la vallée L dans la direction $\langle 111 \rangle$ et la vallée X dans la direction $\langle 100 \rangle$, en bordure de la zone de Brillouin. Ces vallées sont caractérisées par une courbure plus faible et, par conséquent, la masse effective des électrons est plus élevée et leur mobilité est plus faible. Les minima de ces vallées par rapport à la bande Γ , sont de l'ordre de 2.6eV et 1.3eV [3] respectivement pour L et X ; ils sont très grands comparés aux autres composés III-V classiques.

✚ AlN cubique : Il existe deux minima entre la bande de conduction et la bande de valence. Cependant, la structure de bande présente une transition directe entre les points Γ correspondant au gap.

✚ InN cubique : Les deux minima entre la bande de conduction et la bande de valence, présentent une très faible différence.

Dans la phase hexagonale, les semi-conducteurs AlN, GaN et InN sont à gap direct. Le maximum de la bande de valence et le minimum de la bande de conduction sont tous les deux situés au centre de la zone de Brillouin (point Γ). La bande de valence se subdivise en trois bandes nommées HH, LH et CH (de symétries respectives Γ_9 , Γ_7 et Γ_7). Les présentations de la structure de bande pour la phase hexagonale des trois nitrures, sont données par la figure II.2.

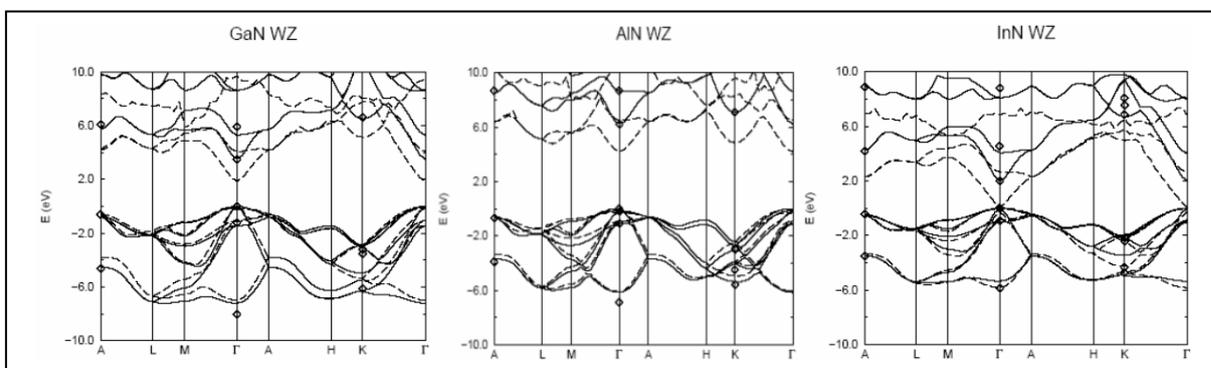


Figure II.2: Structures de bandes des trois nitrures (GaN, AlN et InN) dans leurs phases hexagonales [4].

II.2.1.2 Bandes de conduction au voisinage des minima [5]

Les bandes de conduction ne sont pas parfaitement paraboliques. La méthode de perturbation appliquée à l'Hamiltonien de l'électron, permet de mettre en évidence cette non-parabolicité et de ramener la relation entre l'énergie ε et le module du vecteur d'onde k , à une formule de type :

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} = E(1 + \alpha E) \quad (II.1)$$

Où m^* est la masse effective des électrons, et α est le coefficient de non parabolicité de la vallée considérée. Cette formule n'est valable qu'au voisinage du minimum considéré. Elle indique qu'au-delà d'un certain point d'inflexion, la cavité de la bande de conduction s'inverse. C'est à ce point que la vitesse atteint son maximum pour un champ électrique appliqué sur les électrons. La masse effective de l'électron dans la vallée Γ est liée à l'énergie de gap E_g et l'énergie Δ qui sépare les sous-bandes de valence au centre de la zone de Brillouin ; elle est donnée par la formule (II.2).

$$\frac{m_0}{m^*} = 1 + \theta_0 \left(\frac{2}{E_g} + \frac{1}{E_g + \Delta} \right) \quad (II.2)$$

m_0 est la masse de l'électron libre dans le vide, m^* sa masse effective, θ_0 en (eV) est un coefficient et E_g est l'énergie du gap.

Les vallées L et X ne présentent pas une symétrie sphérique ; cela implique que la masse transversale des électrons, m_t^* est différente de leur masse longitudinale m_l^* . La masse effective de densité d'état est donnée par l'équation (II.3):

$$m^* = \left(m_l^* (m_t^*)^2 \right)^{\frac{1}{3}} \quad (II.3)$$

La vallée Γ est à symétrie sphérique, le coefficient d'inertie et la masse effective de densité d'état, y sont alors confondus.

II.2.2 Variation du gap en fonction de la température

L'énergie de bande interdite varie avec la température : on observe expérimentalement une diminution de cette énergie lorsque la température augmente. Ceci est dû à deux phénomènes : la dilatation thermique qui modifie les distances inter-atomiques du réseau cristallin et deuxièmement l'interaction électron-phonon ; cette deuxième étant l'élément prépondérant dans la modification de l'énergie de bande interdite. Pour évaluer cette modification d'énergie, on utilise la formule empirique (dite de Varshni) permettant d'évaluer la variation de l'énergie de bande interdite en fonction de la température [6]. Le tableau II.1 donne les valeurs des paramètres de l'équation de Varshni pour GaN et InN ; où α et β sont des constantes pour un cristal donné, β étant lié à la température de Debye [7].

	$E_G(0)(\text{eV})$	$\alpha (\text{meV/K})$	$\beta (\text{K})$	$\Delta E_{300-0}(\text{eV})$
GaN	3.507	0.909	830	72×10^{-3}
InN	0.69	0.41	454	49.9×10^{-3}

Tableau II.1: Paramètres de l'équation de Varshni [8].

II.2.3 Indice de réfraction et coefficient d'absorption

L'indice de réfraction d'un matériau est défini par le rapport de la vitesse de la lumière dans le vide, c , sur la vitesse de la lumière dans le matériau, v , par :

$$n = \frac{c}{v} \quad (\text{II. 4})$$

La vitesse de la lumière dans un matériau n'est pas constante, elle change avec la longueur d'onde. La figure II.3 représente l'indice de réfraction du GaN en fonction de la longueur d'onde entre $0.35\mu\text{m}$ et $10\mu\text{m}$. La valeur de l'indice de réfraction est extrait de la partie constante, loin de la zone d'absorption. Dans le cas du GaN, elle est égale à environ 2.30 [9]. Pour InN, elle vaut environ 2.90 dans l'infrarouge [10].

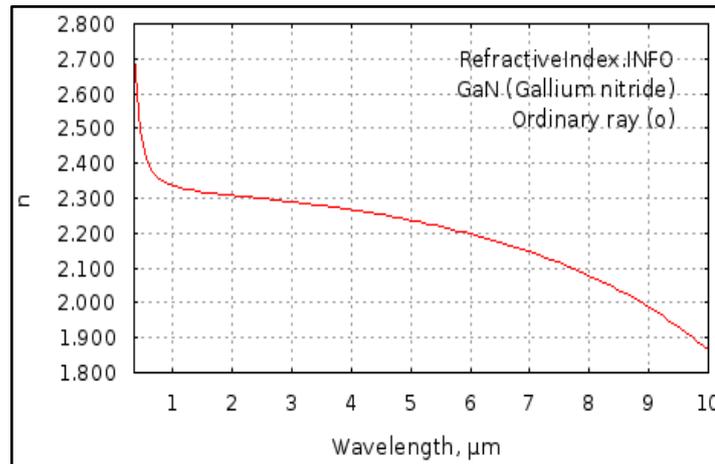


Figure II.3: Indice de réfraction du GaN entre $0.35\mu\text{m}$ et $10\mu\text{m}$ [11].

Anani et al. [12] estimèrent la variation de l'indice de réfraction d'alliages des matériaux III-N, elle est donnée par la figure II.4.

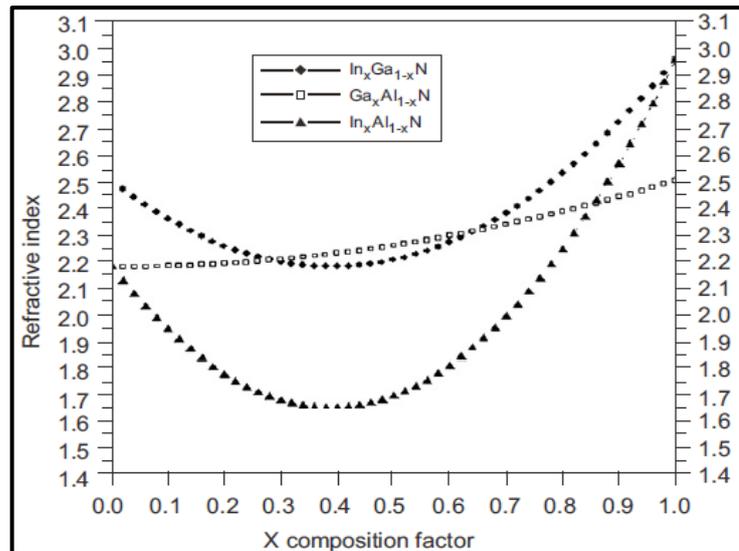


Figure II.4: Estimation de la variation de l'indice de réfraction dans InGaN, GaAlN et InAlN [12].

Ils relient la formule de l'indice de réfraction, n , à l'énergie d'un photon absorbé par un matériau, E_g , définie par :

$$E_g = \frac{hc}{\lambda} \quad (\text{II. 5})$$

Puisque le gap d'énergie possède un paramètre de courbure, ils proposent que l'indice de réfraction ait également un paramètre de courbure. L'indice de réfraction intervient également dans la détermination des coefficients de réflexion et de transmission à travers la relation de Snell-Descartes:

$$n_1 \sin \theta_1 = n_2 \sin \theta_2 \quad (\text{II. 6})$$

n_1 et n_2 les indices de réfractifs de deux milieux ; θ_1 et θ_2 les angles des rayons lumineux par rapport à la normale [°] (voir figure II.5).

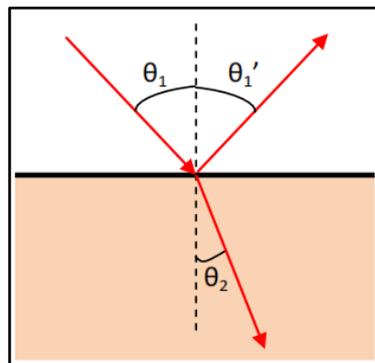


Figure II.5 : Schéma des chemins optiques au niveau d'un dioptre plan.

Le coefficient de réflexion, R , (transmission, T) est défini comme le rapport de l'intensité réfléchie, I_r , (transmise, I_t) sur l'intensité incidente, I_i .

$$R = \frac{I_r}{I_i}; \quad T = \frac{I_t}{I_i} \quad (II.7)$$

$$R = \frac{n_1 - n_2}{n_1 + n_2}; \quad T = \frac{2n_1}{n_1 + n_2} \quad (II.7)$$

La permittivité relative d'un matériau, aussi appelée constante diélectrique, décrit la réponse d'un matériau à un champ électrique appliqué et est définie par :

$$\varepsilon_r = \chi \varepsilon \quad (II.8)$$

Avec χ la susceptibilité du matériau [s.d.]

ε_0 la permittivité du vide [$8,85 \times 10^{-12}$ F.m⁻¹]

Elle est reliée à l'indice de réfraction par la relation:

$$n = \sqrt{\varepsilon_r} \quad (II.9)$$

Le coefficient d'absorption α est défini par :

$$\alpha(\lambda) = \frac{4 \pi k(\lambda)}{\lambda} \quad (II.10)$$

Avec k le coefficient d'atténuation, ou d'extinction [s.d.]

Un exemple de courbe d'absorption du GaN est montré dans la figure II.6.

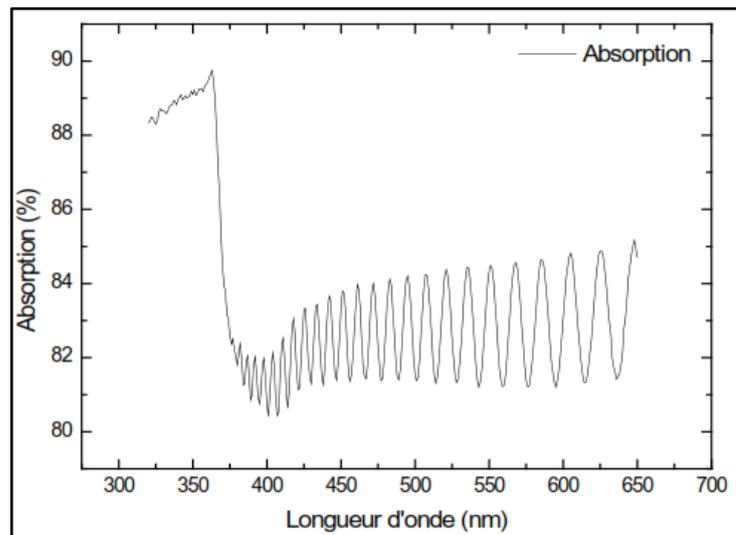


Figure II.6: Courbe d'absorption du GaN.

Les paramètres optiques du GaN et de l'InN sont résumés dans le tableau II.2.

	GaN	InN
Indice de réfraction [s.d.]	2,30	2,90
Constantes diélectriques statiques [s.d.]	10,40($E \parallel c$)	14,40($E \parallel c$)
	9,50($E \perp c$)	13,10($E \perp c$)
Constantes diélectriques à haute fréquence [s.d.]	5,80($E \parallel c$)	8,40
	5,35($E \perp c$)	
Coefficient d'absorption [cm^{-1}]	$1,10^5$ [13]	$5,10^5$ [14].

Tableau II.2: Résumé des paramètres optiques du GaN et de l'InN [15].

II.2.4 Masses effectives des porteurs

Chuang et al. [18] ont calculé la dispersion pour les trois bandes de valence de GaN, en utilisant un modèle $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ à 8 bandes. La dispersion suivant l'axe c , est presque parallèle pour les bandes hh (trous lourds) et lh (trous légers). Elle est parabolique selon cet axe et correspond à la masse effective de $1.1m_0$. Pour la bande ch, la masse effective selon l'axe c , est plus faible : $m^*_{ch} = 0.15m_0$.

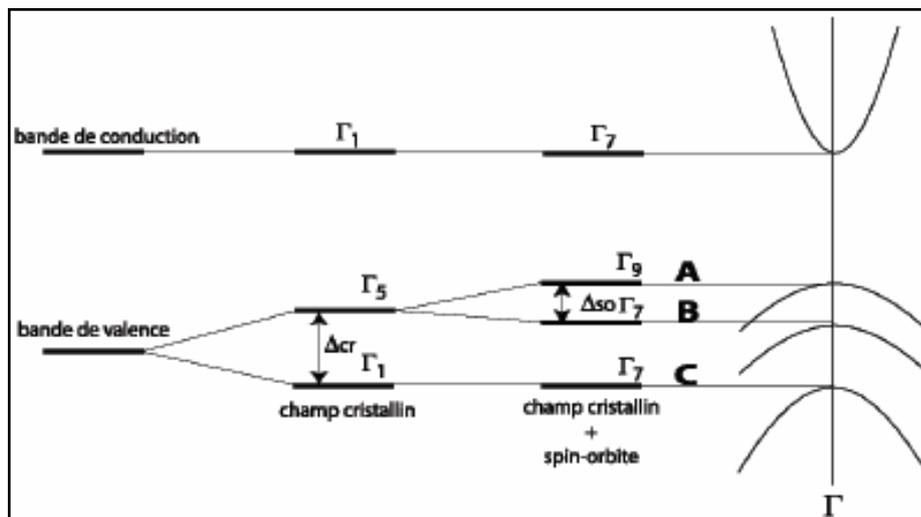


Figure II.7: Structure de bandes du GaN en phase wurtzite au voisinage de $k = 0$ [16, 17].

La masse effective des électrons dans GaN, en bord de bande de conduction, a été mesurée par plusieurs auteurs en utilisant des techniques expérimentales très variées. Les valeurs obtenues varient entre $0.1m_0$ et $0.28m_0$ [19], avec la majorité des résultats convergeant vers $0.2-0.23m_0$. Vurgaftman et al. [20] conseillent la valeur $0.22m_0$.

Dans AlN, la masse effective est prédite anisotrope mais sa valeur n'est pas bien connue.

Vurgaftman et al. [20] conseillent les valeurs $m^{\perp} = 0.3m_0$ et $m^{\parallel} = 0.32m_0$ pour les masses effectives perpendiculaire et parallèle à l'axe c. Les masses des trous sont très mal connues ; elles sont prédites fortement anisotropes avec des valeurs calculées pour les masses selon l'axe de croissance : $m^*_{hh} = 3.7m_0$, $m^*_{lh} = 0.26m_0$ et $m^*_{ch} = 2.9m_0$ [18].

Dans AlN ; l'éclatement dû au champ cristallin, est négatif. La bande de valence la plus haute en énergie, est la bande C [21].

Pour InN et à 300 K ; la masse effective des électrons dans la direction Z et la direction perpendiculaire, sont similaires : $m_e = 0.11m_0$ [22]. Celle des trous est : $m_{hh} = 1.63m_0$ [23], $m_{lh} = 0.27m_0$ [24], m_s (split-off band) = $0.65m_0$ [22].

Parameters	AlN	GaN	InN
E_g (eV)	6.25	3.510	~0.8
Δ_{cr} (eV)	-0.169	0.010	0.040
Δ_{so} (eV)	0.019	0.017	0.005
m^*e^{\parallel} ; m^*e^{\perp} (m_0)	0.32 ; 0.30	0.20 ; 0.20	0.07 ; 0.07
m^*hh^{\parallel} ; m^*hh^{\perp} (m_0)	3.57 ; 0.64	2.0 ; 0.34	1.67 ; 1.61
m^*lh^{\parallel} ; m^*lh^{\perp} (m_0)	3.51 ; 0.64	1.19 ; 0.35	1.67 ; 0.11
m^*sh^{\parallel} ; m^*sh^{\perp} (m_0)	0.26 ; 4.03	0.17 ; 1.27	0.10 ; 1.67

Tableau II.3: Paramètres de bande et masses effectives d'AlN, GaN et InN dans la phase wurtzite. Les symboles \parallel et \perp indiquent respectivement la direction parallèle et perpendiculaire à kz [25].

II.3 Etude des composés ternaires $In_xGa_{1-x}N$

II.3.1 Formules de Vegard et Phillips

Certaines propriétés (Y) comme le paramètre de maille, la polarisation et les constantes piézoélectriques peuvent être déduites par interpolation linéaire suivant la loi de Vegard [26]:

$$Y(In_{1-x}Ga_xN) = (1-x).Y(In) + x.Y(GaN) \quad (II.11)$$

Avec une erreur inférieure à 2% pour n'importe quelle valeur de x ($0 \leq x \leq 1$).

II.3.1.1 Variation du gap d' $In_xGa_{1-x}N$, en fonction de la fraction molaire d'indium

Pour l'énergie de bande interdite, l'équation (II.11) ne convient pas, il faut utiliser la relation quadratique de J.C. Phillips :

$$E_g^{In_xGa_{1-x}N} = x.E_g^{InN} + (1-x).E_g^{GaN} - x.(1-x).b \quad (II.12)$$

Où b est le paramètre de courbure (bowing parameter).

En remplaçant $E_g(\text{InN})$ et $E_g(\text{GaN})$ par leurs valeurs à 300 K, et en prenant $b = 1$, nous trouvons les équations qui donnent le gap d' $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ en fonction de x [27] :

$$\begin{cases} E_{g_1}(x) = x^2 - 2.41x + 3.3 \text{ eV} & (\text{cubique}) \\ E_{g_2}(x) = x^2 - 2.43x + 3.43 \text{ eV} & (\text{hexagonal}) \end{cases} \quad (\text{II.13})$$

$$\begin{cases} E_{g_1}(x) = x^2 - 2.41x + 3.3 \text{ eV} & (\text{cubique}) \\ E_{g_2}(x) = x^2 - 2.43x + 3.43 \text{ eV} & (\text{hexagonal}) \end{cases} \quad (\text{II.14})$$

L'énergie du gap diminue, et le sommet de la bande de valence au point Γ se décale vers le haut, quand la composition d'indium augmente.

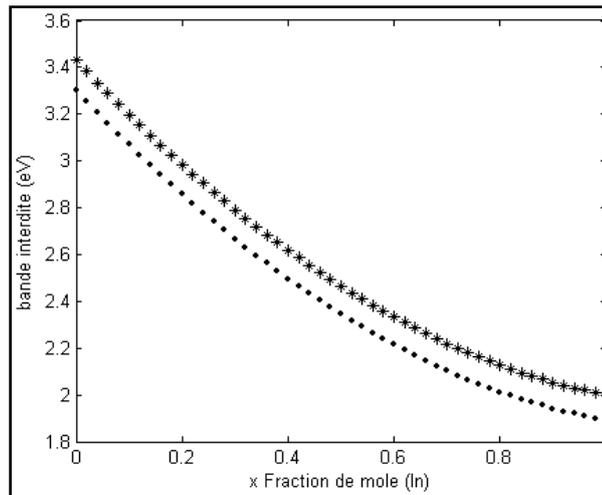


Figure II.8: Variation du gap d' $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$, en fonction de la fraction de mole In [27].

II.3.1.2 Paramètres de courbure

Le comportement exceptionnel du gap de cet alliage reste une issue à controverses. Le paramètre b mesuré, varie de 1eV à 5eV [28] ; cette variation serait due partiellement à la qualité des films d'alliages étudiés. Il y a aussi des difficultés expérimentales rapportées à la méthode utilisée pour mesurer le gap optique. Les incertitudes sont en partie une conséquence du fait que la plupart des études expérimentales ont été portées sur des échantillons où la concentration de In était assez petite ($x \leq 0.25$) [29].

Les premières études suggèrent un paramètre de courbure entre 0eV et 1.0eV [30]. D'autres recherches plus récentes prévoient $b=1\text{eV}$ pour InGaN cubique [31], alors qu'on s'attendait à la même valeur pour les deux structures. Beaucoup d'études annoncent un paramètre de courbure égal à 1eV pour l'alliage InGaN .

II.3.2 Stabilité et solubilité [32]

La réalisation d'un alliage ternaire (InGaN) à partir des deux composés binaires (GaN et InN) ayant des énergies et des longueurs de liaison différentes, n'est pas facile. Pour certaines valeurs de x , des problèmes de miscibilité se posent et dès lors, il y a ségrégation pour minimiser l'énergie totale. A une température de croissance de 800°C, Ho et al. [33] ont calculé une miscibilité de l'indium dans GaN de 6%. En diminuant la température, on augmente la miscibilité, mais au détriment de la cristallinité [34].

La température critique (température à partir de laquelle tous les composés sont stables) est atteinte pour une composition en In de 0.39, et vaut 1417°C [35] ; alors qu'à partir de 500°C, des gouttelettes métalliques d'indium se forment en surface. Ces études montrent donc qu'à température ambiante (de même qu'aux températures habituelles de croissance), presque tous les composés d' $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ sont instables, or la croissance de InGaN pauvre en indium ($x_{\text{In}} < 0.3$) est réalisée facilement.

II.4 Propriétés optiques de InGaN

II.4.1 Vitesse de saturation des électrons dans $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ [27]

Selon l'ajustage fait par Anwar et al. [36]; la vitesse de saturation, pour les alliages $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$, est donnée par : $V_s(x) = a + bx + cx^2$ ($\times 10^7 \text{ cm/s}$), où les constantes a , b et c dépendent du dopage.

$V_s(x) = a + bx + cx^2$ ($\times 10^7 \text{ cm/s}$)			
N_d	$\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$		
	a	b	c
10^{17} cm^{-3}	1.3286	0.3657	-0.2857
10^{18} cm^{-3}	1.3064	0.3668	-0.2767
10^{19} cm^{-3}	1.2675	0.4309	-0.3081

Tableau II.4: Les constantes a , b et c , pour le calcul de la vitesse de saturation en fonction de la fraction molaire x dans $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ [36].

A 300K ; en augmentant la fraction de mole In, la vitesse de saturation figure II.9 augmente initialement suivie par une décroissance graduelle qui peut être expliquée comme suit : quand la fraction de mole In augmente, la séparation Γ -L et la masse effective des électrons dans la vallée centrale, diminuent pendant que la masse effective des électrons dans la vallée supérieure augmente.

Une réduction de la masse des électrons dans la vallée centrale aboutit à une vitesse de dérive plus grande pour ces électrons. Cependant ; à cause de réduction de la séparation Γ -L, la dispersion intervallée augmente, en même temps que la population de la vallée supérieure qui est caractérisée par une vitesse de dérive plus petite.

Ces deux processus sont compétitifs ; l'augmentation de la vitesse de dérive, due à la réduction de la masse effective dans la vallée centrale, domine pour des fractions de mole In jusqu'à 0.7. Pour des fractions plus grandes, la vitesse de dérive diminue car la vallée supérieure devient hautement peuplée. La vitesse de saturation varie peu avec la concentration de dopage.

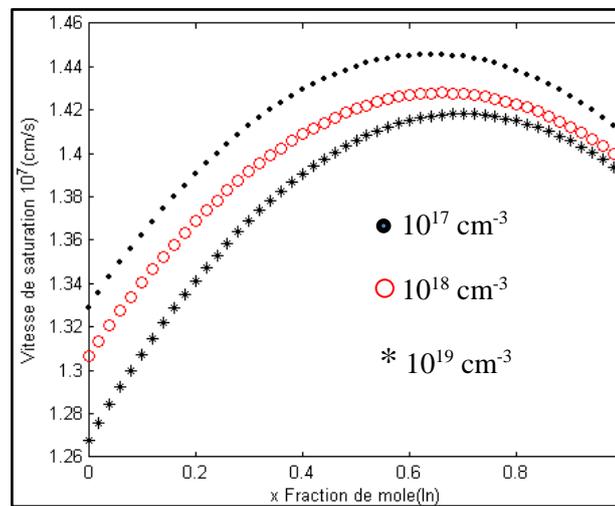


Figure II.9 : Vitesse de saturation dans InGaN, en fonction de la fraction de mole In [27].

II.4.2 Mobilité des électrons dans $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$, en fonction de x

A faible champ ; la courbe décrivant la mobilité des électrons dans les alliages $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$, est approchée par l'équation : $\mu(x) = a + b \times x + c \times x^2 + d \times x^3$ [36].

$\mu(x) = a + b \times x + c \times x^2 + d \times x^3$			
T	$\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$		
	a	b	c
100K	480.1	595.9	1273.2
300K	465.3	755.1	676.4
500K	347.1	244.1	226.9

Tableau II.5: Les Mobilités des électrons dans $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ en fonction de la température.

A la figure II.10 ; nous représentons la mobilité, à faible champ, en fonction de la fraction de mole In dans $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$, à la température ambiante.

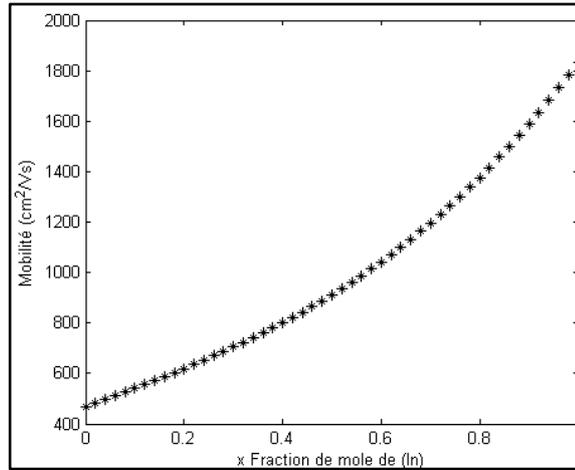


Figure II.10: Mobilité des électrons dans $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$, en fonction de la fraction molaire In [27].

En augmentant la fraction de mole In, la mobilité croît, due à la diminution de la masse effective dans la vallée centrale. Contrairement à AlGaIn, la dispersion des phonons optiques polaires est le mécanisme de dispersion dominant, sans tenir compte du dopage et de la fraction de mole In. La dispersion des phonons acoustiques dépend peu de la concentration de dopage et de la fraction de mole In. Cependant, la dispersion des impuretés ionisées décroît avec la fraction de mole In et dépend légèrement de la concentration de dopage.

II.4.3 Variation de la longueur d'onde émise par $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$, en fonction de x [27]

Les trois couleurs fondamentales (rouge, verte et bleue) permettent de générer n'importe quelle couleur, avec des taux bien déterminés. De la raie d'émission, on détermine la pureté de la couleur émise par une source monochromatique.

La longueur d'onde λ et l'énergie du gap E_g sont reliées par la relation :

$$E_g = h \times \nu = h \times c / \lambda$$

Où h est la constante de Planck, 'c' est la vitesse de la lumière ; λ est alors donnée par :

$$\lambda = h \times c / E_g$$

Nous calculons la longueur d'onde émise par $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ (et $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$), en fonction de la fraction de mole Al (et In). En appliquant la relation (II.15) (où λ sera en nm et E_g en eV), nous allons commettre une erreur relative qui sera inférieure ou égale à 5×10^{-4} .

$$\lambda(x) = 1240 / E_g(x) \tag{II.15}$$

	Violet		Bleu		Vert		Jaune		Orange		Rouge		
UV													IR
206	300	361.5	400		475	550	600	620	675	800			nm
6	4.14	3.43	3.1		2.61	2.25	2.07	2	1.84	1.55			eV
AlN	GaN												InN

InGaN est beaucoup plus étudié que le premier alliage ; il est très prometteur comme matériau en puits quantique "QW", en vue de fabriquer des dispositifs optiques tels que les LED et LD pouvant émettre la lumière verte et bleue, pour le stockage optique à haute densité. D'importantes études théoriques et expérimentales ont été menées sur les propriétés optiques extraordinaires de cet alliage. Nagatomo et al. ont observé que sa constante de réseau est 11% plus grande que celle du GaN ; cela limite l'épaisseur de couche de InGaN sur GaN. Ils ont observé aussi que la constante de réseau varie linéairement avec la fraction de mole In jusqu'à au moins 0.42.

Le même calcul (équation II.15) nous donne la longueur d'onde émise par l'alliage $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$, en fonction de la fraction de mole In (x) (figure II.11). La longueur d'onde augmente avec la fraction de mole In. Elle est de 380nm pour $x = 0$ (c-GaN), et de 660nm pour $x = 1$ (InN) ; elle est inversement proportionnelle à la variation du gap.

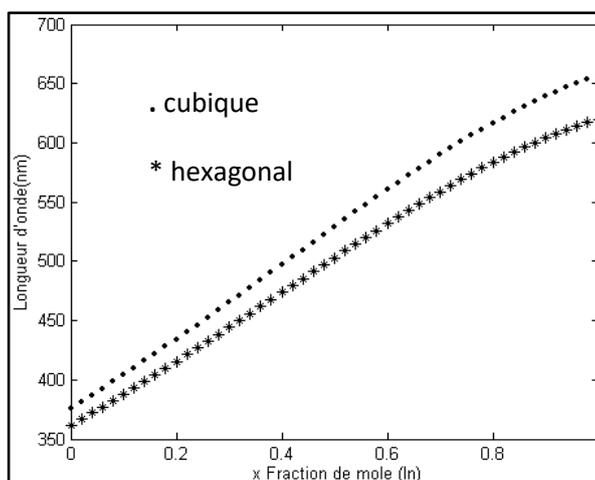


Figure II.11: Longueur d'onde d'émission d' $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ en fonction de x [27].

II.5 Propriétés des nouveaux matériaux B-III-N

Les nouveaux alliages tels que B (Al, Ga, In) N ont été proposés essentiellement pour l'optique avancée opérant dans la gamme spectrale du visible à l'UV.

Le nitrure de bore (BN) est un composé III-V. Contrairement aux autres nitrures (composés III-N) dont la structure la plus stable et la plus étudiée est la phase wurtzite [37], BN présente quatre polytypes stables : le BN hexagonal (hBN), le BN cubique (cBN), le BN wurtzite (wBN) et le BN rhomboédrique (rBN). Alors que la phase hexagonale est la phase stable à pression atmosphérique, la phase cubique est stable à haute température.

Le tableau II.6 résume les différentes structures du BN.

Nitrures III/V	Groupe d'espace	Paramètre de maille a (Å)	Paramètre de maille c (Å)	Distance entre les atomes B et N (Å)	Référence fiche ICDD n°
h-BN	P6 ₃ /mmc	2.504	6.661	1.45	73-2095
c-BN	F43m	3.615	-	1.57	35-1365
r-BN	R3m	2.504	10.00	1.45	45-1171
w-BN	P6 ₃ mc	2.550	4.215	1.56	49-1327

Tableau II.6: Données cristallographiques des différentes structures du BN [38].

1.5.1 Composé binaire BN

Le nitrure de bore (BN) possède des caractéristiques potentiellement intéressantes notamment les propriétés mécaniques et thermiques, avec une grande dureté, une grande résistance mécanique, une stabilité chimique, une courte longueur de liaison chimique, un point de fusion élevée et une conductivité thermique élevée ; il est très prometteur pour des applications en micro-électronique de puissance et en optoélectronique, mais aussi pour réaliser des couches de protection (coating) [39,40]. Il joue un rôle important dans le renforcement mécanique des alliages (durcissement structural), comme B GaN, B InN, B AlGaN, ... etc.

Le tableau II.7 résume quelques-unes des propriétés des III-N.

	w-InN	w-GaN	w-AIN	h-BN
Largeur de bande interdite (eV)	0.7	3.39	6.2	5.8
Conductivité thermique (W.m⁻¹.K⁻¹)	80	130	319	600
Densité (kg.m⁻³)	6810	6095	3255	2100
Point de fusion (K)	2146	2791	3487	3273
Mobilité électronique à T=300K (cm².V⁻¹.s⁻¹) (effet Hall)	3200	1250	300	<200
Constante diélectrique relative (sans unité)	15.3	9	8.5	2.53 à 4.4
Vitesse de saturation des électrons (10⁻⁷.cm⁻¹)	2.5	2.5	1.4	-

Tableau II.7: Grandeurs physiques des nitrures III-N [38].

1.5.2 Composé ternaire B GaN

Des études sur les propriétés électriques et structurales réalisées auparavant par une équipe de recherche sur B GaN, montrent qu'il est possible d'intégrer jusqu'à 4% de bore dans GaN sans aucune séparation de phase [41], Beghdadli et al [42] ont montré que la résistivité électrique est fortement liée à l'incorporation du bore dans les alliages B GaN, tandis que la mobilité augmente jusqu'à 290cm/V.s avec l'augmentation de la teneur en bore jusqu'à 1.75%. On peut dire qu'une couche de B GaN peut être très résistive avec seulement quelques pourcents de bore. Le système B GaN/GaN sert pour le développement d'une nouvelle classe de détecteurs de neutrons [43]. De plus, l'utilisation des structures B GaN/GaN dans la réalisation des transistors HEMTs apporte une amélioration significative de leurs propriétés de transport et de leurs performances en comparaison avec les structures conventionnelles à base de AlGaIn/GaN [44].

Selon la loi de VEGARD, et d'après Ougazzaden et autres [41], le gap du B GaN varie en fonction du paramètre de courbure (bowing parameter) $C = 9.2 \pm 0.5\text{eV}$. La variation du gap du $B_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$, en fonction de la fraction de molaire x , s'écrit :

$$Eg(x) = xEg(\text{BN}) + (1-x)Eg(\text{GaN}) - Cx(1-x) \quad (\text{II.16})$$

1.5.3 Alliages quaternaires B (Al, Ga, In) N

Les alliages quaternaires de la forme $A_xB_{1-x}C_yD_{1-y}$ sont formés par 4 composés binaires AC, BC, AD et BD. Il est facile d'utiliser les paramètres physiques des composés binaires d'extrémité pour estimer ceux du système quaternaire.

Pour un système quaternaire, les énergies sont calculées selon la formule (II.17) [45] :

$$G_{ABCD}(x, y) = \frac{x(1-x)[(1-y)G_{ABD}(x) + yG_{ABC}(x)] + y(1-y)[xG_{ACD}(y) + (1-x)G_{BCD}(y)]}{x(1-x) + y(1-y)} \quad (II.17)$$

Où : G_{ABD} , G_{ABC} , G_{ACD} , G_{BCD} sont les énergies des alliages ternaires $A_xB_{1-x}D$, $A_xB_{1-x}C$, $A_xC_{1-x}D$, $B_xC_{1-x}D$.

La constante de réseau $a(x,y)$ de l'alliage quaternaire est définie à partir d'une interpolation entre les constantes de ses constituants binaires suivant la loi de Végard, dans ce cas on a [46]:

$$a_{ABCD}(x, y) = xy a_{AC} + (1-x)y a_{BC} + x(1-y) a_{AD} + (1-x)(1-y) a_{BD} \quad (II.18)$$

Les alliages BAlInN, BAlGaN et BInGaN, sont utilisés dans le domaine de courtes longueurs d'onde. Le système quaternaire $B_xIn_yGa_{1-x-y}N$ montre deux coefficients stœchiométriques x et y , et fait intervenir trois composés binaires BN, InN, GaN. Plus récemment, Gautier et al. [47] ont montré la possibilité de croissance du quaternaire BInGaN sur le substrat GaN/Saphir par la méthode d'épitaxie en phase vapeur organométallique (Metal-Organic Vapour Phase Epitaxy, MOVPE), avec des proportions de B et In de 2% et 14%, respectivement. Le système BInGaN présente un accord de maille avec les substrats Si et ZnO [48]. Il présente un intérêt technologique dans la conception des hétérostructures pour la réalisation de la troisième génération de cellules solaires dans le domaine visible de bonne qualité structurale [49]. Les propriétés du quaternaire BInGaN sont d'un grand intérêt technologique.

Conclusion

Nous avons présenté les spécificités du nitrure d'indium InGaN, nous avons décrit ses propriétés optiques. Nous avons ensuite focalisé sur les nouveaux systèmes semi-conducteurs B-III-N et leurs hétérostructures qui sont prometteuses pour développer de nouvelles générations des sources de lumière dans la gamme spectrale visible.

Références

- [1] S. Nakamura, T. Mukai, and M. Senoh: «Candela-class high-brightness InGaN/AlGaN double heterostructure blue-light-emitting diodes», *Appl. Phys. Lett.* 64(13), 1687 (1994).
- [2] S. Nakamura, M. Senoh, S.-I. Nagahama, N. Iwasa, T. Yamada, T. Matsushita, Y. Sugimoto, and H. Kiyoku: «Room temperature continuous-wave operation of InGaN multi-quantum-well-structure laser diodes with a long lifetime», *Appl. Phys.*, (1997).
- [3] Martinez._Guerrero, Esteban, Thèse de Doctorat: «Elaboration en épitaxie par jets moléculaires des nitrures d'éléments III en phase cubique», Institut national des sciences appliquées Lyon, (2002).
- [4] Stephan. Fanget, Thèse de Doctorat : «Matériaux et hétérostructures à base de nitrures d'éléments III en phase cubique et hexagonale pour l'optoélectronique», Institut national des sciences appliquées Lyon, (2002).
- [5] R. Castagné, J.P Duchemin, M. Gloanie, Ch. Rhumelhard: «Circuits intégrés en Arsenic de Gallium, Physique technologie et conception», édition Masson, Mars (1989).
- [6] Y.P. Varshni, *Physica* 34, 149 (1967).
- [7] M. Muñoz, F.H. Pollak, M.B. Zakia, N.B. Patel et J.L. Herrera-Pérez, *Phys. Rev. B* 64, 16600 (2000).
- [8] X. Wang, A. Yoshikawa: «Crystal Growth and Characterization of Materials», 48/49, 42 (2004).
- [9] Ioffe. Physyco, Technical Institut GaN - Gallium nitride. Electronic archive: «New Semiconductor Materials. Characteristics and Properties», [Online] Cited: 11 16, (2011). <http://www.ioffe.ru/SVA/NSM/Semicond/GaN/index.html>.
- [10] Ioffe Physico-Technical Institute. InN - Indium Nitride: «New Semiconductor Materials. Characteristics and properties», [Online] Cited: 12 13, (2011). <http://www.ioffe.ru/SVA/NSM/Semicond/InN/index.html>.
- [11] Optical constants of GaN (Gallium nitride). Refractive Index. Info. [Online] Cited: 12 23, (2011). <http://refractiveindex.info/?group=CRYSTALS&material=GaN>.
- [12] Anani, M., et al: «In_xGa_{1-x} N refractive index calculations», *Microelectronics Journal*, Vol. 38, 262, (2007).
- [13] Muth, J.F., et al: «Absorption coefficient, energy gap, exciton binding energy, and recombination lifetime of GaN obtained from transmission measurements», *Applied Physics Letters*, Vol. 71, 2572, (1997).
- [14] Trainor, J.W. and Rose, K. 821, s.l.: *Journal of Electronic Materials*, Vol. 3, (1974).

- [15] Morkoç, H. Hand book of Nitride Semiconductors and Devices. Weinheim: WILEY VCH VerlagGmbH & Co. KGaA, Vol. 1. 978-3-527-40837-5, (2008).
- [16] Laurent. Nevou, Thèse de Doctorat : «Emission et modulation inter sous-bande dans les nanostructures de nitrures», Faculté des sciences d'Orsay, (2008).
- [17] Bernard. Gil: «Group III nitride semiconductor compounds», Ed. Oxford Science Publication, (1998).
- [18] S. L. Chuang, C. S. Chang: «k.p method for strained wurtzite semiconductor», Phys. Rev. B 54, 2491 (1996).
- [19] I. Vurgaftman, J. R. Meyer, L. R. Ram-Mohan: « Band parameters for III–V compound semiconductors and their alloys», J. Appl. Phys. 89, 5815 (2001).
- [20] I. Vurgaftman, and J. R. Meyer: «Band parameters for nitrogen-containing semiconductors», J. Appl. Phys. 94, 3675 (2003).
- [21] M. Leroux, S. Dalmaso, F. Natali, S. Helin, C. Touzi, S. Laugt, M. Passerel, F. Omnes, F. Semond, J. Massies, et P. Gibart: «Optical Characterization of $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ Alloys ($x < 0.7$) Grown on Sapphire or Silicon», Phys. Stat. Sol. (b) 234, 887, (2002).
- [22] Lambrecht, W.R., Segall B: «Anomalous band-gap behavior and phase stability of c-BN diamond alloys», Phys. Rev. B 47, 9289-9296, (1993).
- [23] Davydov, V. Yu., Klochikhin A.A., Emtsev V.V., Kurdyukov D.A., Ivanov S.V., Vekshin V.V., Bechstedt F., Furthmuller J., Aderhold J., Graul J., Mudryi A.V., Harima H., Hashimoto A., Yamamoto A., Haller E.E: «Band Gap of Hexagonal InN and InGaN Alloys», Phys. Stat. Solidi (b) 234(3), 787-795, (2002).
- [24] V. Darakchieva, E. Valcheva, P. P. Paskov, M. Schubert, T. Paskova, B. Monemar, H. Amano, I.Akasaki: «Phonon mode behavior in strained wurtzite AlN/GaN superlattices», Phys. Rev. B 71, 115329 (2005).
- [25] Ana. Helman, Thèse de Doctorat : «Puits et boîtes quantiques de GaN/AlN pour les applications en optoélectronique à $\lambda \approx 1,55 \mu\text{m}$ », Université de Paris XI d'orsay, Soutenue le 23 novembre (2004).
- [26] L. Vegard, Z. Phys. 5, 17 (1921).
- [27] Hamdoune. AEK : «Elaboration du nitrure de gallium ; Etude de ses propriétés et Applications», Université de Tlemcen, 21 Juin (2006).
- [28] H. K. Kim, T. Y. Seong, I. Adesida, C. W. Tang, K. M. Lau: «Low-resistance Pt/Pd/Au ohmic contacts to p-type AlGaN», Appl. Phys. Lett. 84, 1710 (2004).
- [29] M. Frehat, J. Furthmuller and F. Bechstedt: «Gap bowing and Stokes shift in $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ alloys: First-principles studies», A.P.L. Vol.80, n°8, pp. 1394-1396, (February 2002).

- [30] M. Ferhat and F. Bechstedt: «First-principles calculations of gap bowing in $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ and $\text{In}_x\text{Al}_{1-x}\text{N}$ alloys: Relation to structural and thermodynamic properties», *Physical review B*, vol. 65, 075213, pp. 1-6, (February 2002).
- [31] A. F. Wright and J. S. Nelson, *Appl. Phys. Lett.* 66, 3051, (1995).
- [32] Languy. Fabian : «Caractérisation de nanocolonnes d' $\text{In}(1-x)\text{Ga}(x)\text{N}$ en vue d'étudier l'origine de la haute conductivité de l' InN », (2007).
- [33] I-h. Ho and G.B. Stringfellow, *Appl. Phys. Lett.* 69, 2701 (1996).
- [34] T. Matsuoka, *Appl. Phys. Lett.* 71, 105 (1997).
- [35] T. Saito et Y. Arakawa, *Phys. Rev. B* 60, 1701 (1999).
- [36] A.F.M. Anwar, Senior Member, Shangli Wu, and Richard T, Webster: «Temperature dependent transport properties in GaN, $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$, and $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ semiconductors», *IEEE Transactions on Electron Devices*, Vol. 48, n° 3, pp. 567-572, (March 2001).
- [37] Bernard Gil: «Group III nitride semiconductor compounds», *Physics and applications*. Oxford Science Publications (1998).
- [38] Nicolas. COUDURIER: «Contribution à l'épitaxie des nitrures d'aluminium et de bore par dépôt chimique en phase vapeur à haute température», Université de Grenoble, 16 janvier (2014).
- [39] H. Wang, H. Xu, X. Wang, C. Jiang, *Phys. Lett. A.* 373, 2082, (2009).
- [40] T. Takayama, M. Yuri, K. Itoh, T. Baba, J.S. Harris, *J. Cryst. Growth.* 222, 29, (2001).
- [41] Ougazzaden, S. Gautier, T. Moudakir, Z. Djebbour, Z. Lochner, S. Choi, H.J. Kim, J.H. Ryou, R.D. Dupuis, A.A. Sirenko: «Band gap bowing in BGaN thin films», *Applied Physics Letters* 93, 083118, (2008).
- [42] T. Baghdadli et al: «Electrical and structural characterizations of BGaN thin films by metal-organic vapor phase epitaxy», *Phys. Status Solidi. C*, 6:S1029, (2009).
- [43] J. Uher, S. Pospisil, V. Linhart, M. Schieber, *Appl. Phys. Lett.* 90, 124101, (2007).
- [44] V. Ravindran, M. Boucherit, A. Soltani, S. Gautier, T. Moudakir, J. Dickerson, P. L. Voss, M.-A. Di Forte-Poisson, J.-C. D. Jaeger, and A. Ougazzaden, *Applied Physics Letters* 24, 243503, (2012).
- [45] C.k Williams, T.H. Glisson, J.R. Houser, and M.A. Littlejohn, *J. Electron. Mater.* 7, 639. (1978).
- [46] I. Vurtgafman and J.r. Meyer, L.R. Ram-Mohan. *J. Appl. Phys.* Vol. 89, No.11, 1 June (2001).

- [47] S. Gautier, G. Orsal, T. Moudakir, N. Maloufi, F. Jomard, M. Alnot, Z. Djebbour, A.A. Sirenko, M. Abid, K. Pantzas, I.T. Ferguson, P.L. Voss, A. Ougazzaden, *J. Cryst. Growth* 312, 641–644, (2010).
- [48] S. Gautier , G. Patriarche, T. Moudakir, M. Abid, G. Orsal, K.Pantzas, D. Troadec, A.Soltani, L. Largeau, O. Mauguin, A. Ougazzaden, *Journal of Crystal Growth* 315, 288–291, (2011).
- [49] O. Jani, I. Ferguson, C. Honsberg, S. Kurtz, *Appl. Phys. Lett.* 91 (2007) 132117.

CHAPITRE III

Diodes électroluminescentes

III.1 Introduction

La diode électroluminescente (en anglais LED pour "Light Emitting Diode") est un composant industriel de première importance qui offre de nombreux avantages par rapport aux sources de lumière conventionnelles (durée de vie, consommation, temps de réponse...) [1]. Les premières diodes électroluminescentes bleues à base des nitrures ont été réalisées en 1992 [2, 3]. Dans le cas des diodes électroluminescentes réalisées à partir de nitrure de gallium, les couches d'injections sont constituées de GaN dopé au silicium pour la couche de type n et de GaN dopé au magnésium pour la couche de type p [4]. Les puits quantiques InGaN dont l'énergie de la bande interdite définit la longueur de l'émission de la diode, sont utilisés afin d'améliorer le rendement optique [2, 4].

Dans ce chapitre, nous présentons les diodes électroluminescentes et les différents mécanismes de la luminescence ; ensuite nous présentons l'état de l'art des LED à base de nitrures, ainsi que les différents phénomènes pouvant influencer la réalisation et les performances d'une LED ; enfin nous donnons les domaines d'applications.

II.2 Luminescence d'un semi-conducteur

La structure de bandes d'un semi-conducteur se caractérise par l'existence d'une bande interdite de l'ordre de quelques électrons volts entre le minimum de la bande de conduction et le maximum de la bande de valence. Si les deux bandes sont situées toutes les deux à la même valeur de k on parle de matériau à gap direct (GaAs), et de gap indirect dans le cas contraire (Si) ; voir les figures III.1(a) et (b).

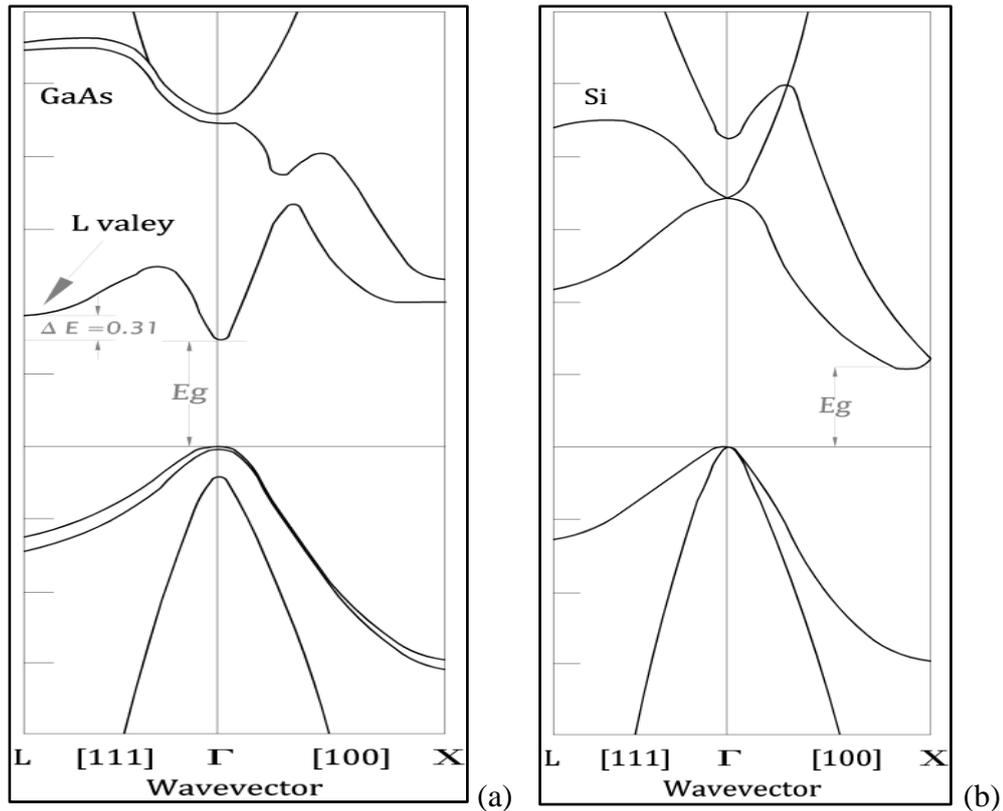


Figure III.1: (a) Diagramme de bande d'un SC à gap direct (Exemple : GaAs), (b) Diagramme de bande d'un SC à gap indirect (Exemple : Si) [5].

L'excitation d'un électron de la bande de valence à la bande de conduction (par l'absorption d'un phonon par exemple, est le phénomène de photoabsorption ; on a alors dans la bande de valence un état libre qu'on peut traiter comme une particule (trou). La recombinaison de ces porteurs de charge donne lieu à la photoluminescence (figure III.2.a). Ces deux particules peuvent relaxer (thermaliser par interaction avec les phonons du réseau en particulier) vers des états d'énergie inférieure. Ces niveaux peuvent être de plusieurs types (figure III.2.b) : minimum de la bande de conduction (pour les électrons) ou maximum de la bande de valence (pour les trous), états localisés dans le gap qu'ils soient donneurs, accepteurs ou profonds. L'électron et le trou peuvent également réduire leur énergie en entrant en interaction coulombienne forte, la paire électron-trou ainsi formée étant une quasi-particule nommée exciton qui peut occuper elle aussi des niveaux énergétiques bien précis. Une fois la relaxation achevée ; électron et trou vont recombiner en émettant un photon : du fait de cette relaxation, les caractéristiques du photon émis et en particulier sa longueur d'onde dépendront de celles des niveaux mis en jeu, donc du matériau et non de l'excitation. Il est à noter que les transitions électroniques conservent l'énergie et le vecteur d'onde : du fait de cette double condition, et en tenant compte de l'impulsion négligeable d'un

photon, la plupart des transitions se feront entre des états de même k . Dans le cas contraire, il faut l'intervention d'un autre processus qui permettra de compenser cette différence. En particulier, l'émission ou l'absorption d'un phonon peuvent permettre ces transitions indirectes, mais ces transitions à trois particules sont beaucoup moins favorables : c'est pour cela que l'intensité de la luminescence des matériaux à gap indirect est en général très faible [5].

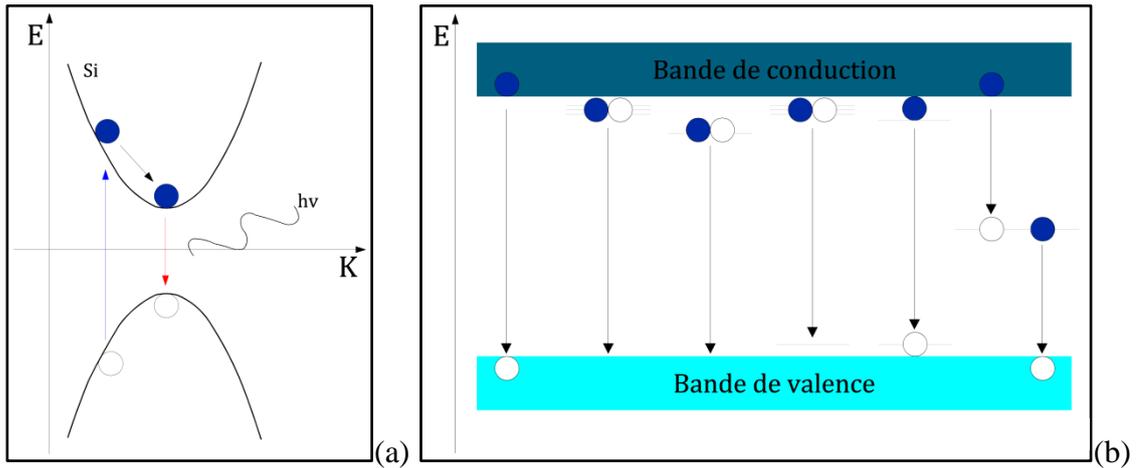


Figure III.2: (a) Principe de la luminescence, (b) Schéma de différentes transitions électroniques possibles dans un SC [5].

III.3 Etat de l'art des LEDs bleues InGaN/GaN

En 1992, la première LED bleue brillante à base de puits quantiques InGaN (rendement 1.5%) a été permise par le développement du dopage p du GaN [6, 7], et la production de masse a commencé en 1993.

La structure classique d'une LED InGaN/GaN est montrée sur la figure III.3.a, la majorité des couches de la structure est réalisée en GaN, dont le dopage et la croissance sont bien maîtrisés.

Pour permettre une émission dans le visible, la zone active est constituée d'une série de puits quantiques InGaN/GaN. C'est de leur composition (et de leur épaisseur si celle-ci est suffisamment fine) que la longueur d'onde des photons émis dépendra. L'utilisation d'insertions fines formant un puits de potentiel permet, en augmentant la densité de porteurs, d'augmenter le taux d'émission spontanée.

Le substrat communément utilisé étant le saphir, il est impossible de prendre le contact sur la face arrière : il est nécessaire d'effectuer une étape de gravure complexe pour venir prendre (en face avant) un contact sur le GaN dopé n. De nombreux efforts sont actuellement

en cours pour arriver à la réalisation industrielle de LEDs InGaN/GaN sur silicium, permettant à la fois des économies au niveau du prix du substrat et de la prise de contact sur la face arrière.

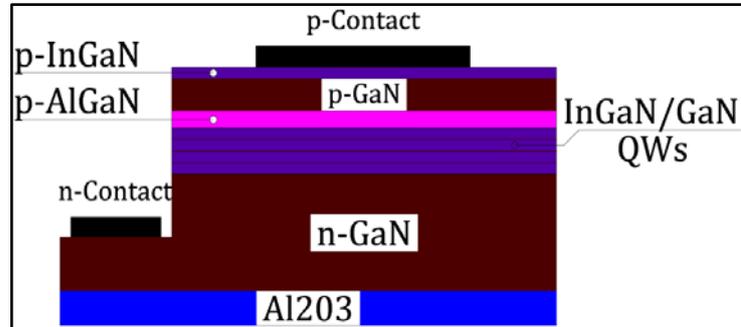


Figure III.3 : (a) Schéma d'une LED InGaN/GaN conventionnelle.

En 1993, Shuji. Nakamura et ses collaborateurs de la société Nichia Chemical Industries ont mis au point un premier prototype de haute luminosité permettant l'émission de lumière bleue (figure III.3.b) [4]. Le milieu actif (puits quantique) de ces premières diodes est constitué d'une couche de InGaN codopée Zinc et Si. L'épaisseur et la composition en Indium du puits déterminent la couleur de LED.

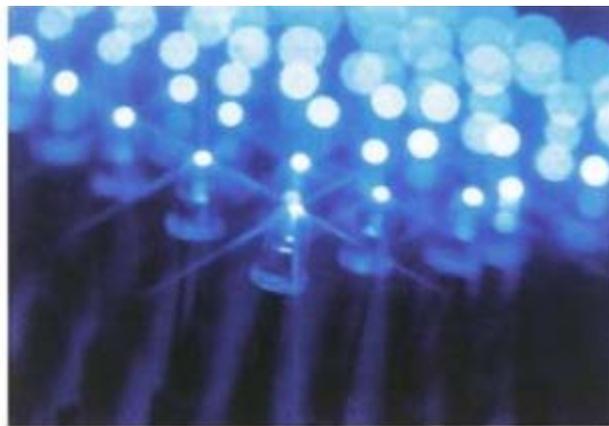


Figure III.3 : (b) LED bleue à base de InGaN/AlGaIn codopée Zn et Si.

III.3.1 Principe de fonctionnement

Une diode électroluminescente fonctionne sur le principe d'une jonction pn. Cette jonction est en fait un semi-conducteur ayant deux régions de conductivité différente : une de type p (constituée essentiellement de charges positives : les trous) et une autre de type n (constituée essentiellement de charges négatives : les électrons), ainsi qu'une région de

recombinaison radiative qui donne lieu au phénomène de luminescence. Sous l'effet d'une différence de potentiel entre deux électrodes, les électrons se recombinent avec les trous dans la zone de recombinaison. Cela engendre l'émission de photons, dont la nature dépend des caractéristiques des matériaux constituant la jonction. Actuellement, il existe deux familles de jonctions pn, les homojonctions et les hétérojonctions [8].

✚ Une homojonction (figure III.4) est constituée du même semi-conducteur pour les deux régions dopées de type p et n. Cette architecture atteint ses limites lorsque l'on augmente le niveau de dopage des semi-conducteurs dans l'objectif d'améliorer l'efficacité d'injection (indicateur sur l'influence des recombinaisons non radiatives par rapport aux recombinaisons radiatives). En procédant de cette manière, les impuretés dans le semi-conducteur augmentent et constituent des éléments de recombinaisons non radiatives. L'efficacité d'injection n'est donc plus améliorée. Pour résoudre ce problème, la technologie à hétérojonctions a été développée.

✚ Une hétérojonction (figure III.5) repose essentiellement sur un assemblage de deux (ou plusieurs) semi-conducteurs de différentes compositions et de différents degrés de dopage.

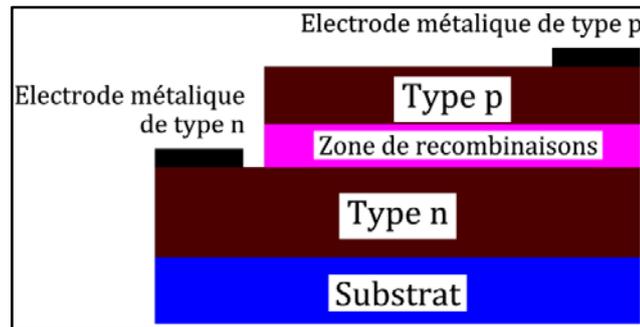


Figure III.4: Schéma de principe d'une homojonction pn.

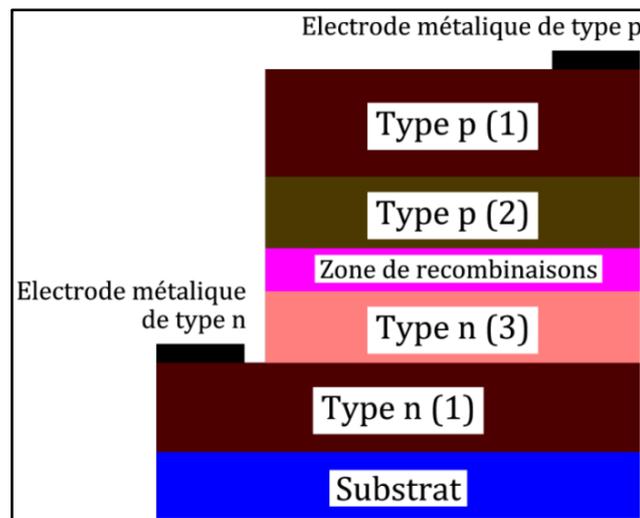


Figure III.5: Schéma de principe d'une hétérojonction pn avec trois types de semi-conducteurs.

III.3.2 Rendement d'une LED

Le rendement d'une LED atteint rapidement un maximum pour ensuite décroître en fonction de la tension appliquée. Ce rendement ne concerne que la conversion des électrons en photons et se nomme le rendement quantique interne (IQE pour "internal-quantum efficiency" en langue anglaise).

Le rendement quantique interne est généralement déterminé à l'aide de l'équation (III.1) [9]:

$$IQE = \eta_{int} = \frac{\text{nombre de photons émis par seconde}}{\text{nombre d'électrons injectés par seconde}} = \frac{P_{int} / (h\nu)}{I/q} \quad (\text{III. 1})$$

Avec :

P_{int} : la puissance optique émise par la zone active de la LED.

Cependant une fois généré, un photon peut ne pas être extrait de l'empilement formant la LED et ne pas contribuer au flux lumineux effectivement mesurable. Par exemple, le substrat ou les contacts peuvent absorber des photons. Autre exemple, à cause d'un fort indice de réfraction du GaN, les matériaux composant l'empilement de la LED peuvent également guider des photons par réflexion totale.

L'ensemble de ces pertes de photons sont quantifiées par le rendement d'extraction (EXE – "Extraction efficiency" en langue anglaise) qui est donné par l'équation (III.2) [9].

$$EXE = \eta_{extraction} = \frac{\text{nombre de photons sortant de la LED}}{\text{nombre de photons émis dans la LED}} = \frac{P / (h\nu)}{P_{int} / (h\nu)} \quad (\text{III. 2})$$

Dans l'équation (III.2), P est la puissance optique émise à l'extérieur de la LED et P_{int} la puissance optique émise par la zone active.

Afin qu'une LED émette des photons, des électrons et des trous doivent atteindre la zone active de la LED, c'est-à-dire le ou les multiples puits quantiques. En traversant les différentes parties de la LED pour atteindre la zone active, les porteurs de charge peuvent échapper au processus de recombinaison-émission d'un photon en empruntant diverses voies de recombinaison non radiative (ou radiative, avec émission d'un photon n'ayant pas la bonne longueur d'onde), par exemple les recombinaisons Shockley-Read-Hall (SRH). Alors, le rendement d'une LED comporte également un terme caractérisant la capacité d'une paire électron-trou à atteindre la zone active pour s'y recombiner. Ce terme, le rendement d'injection de la LED, est donné par l'équation (III.3) [9]:

$$\eta_{injection} = \frac{\text{nombre d'électrons injectés dans la zone active}}{\text{nombre d'électrons injectés dans la LED}} \quad (\text{III. 3})$$

Puisque les termes précédemment décrits caractérisent des étapes en série dans le processus de conversion d'une puissance électrique en puissance optique, le rendement global d'une LED sera alors le produit de l'ensemble des processus en série.

Le produit du rendement quantique interne, du rendement d'extraction et du rendement d'injection est appelé le rendement quantique externe (EQE – “external quantum efficiency” en langue anglaise), et caractérise le nombre de photons émis à l'extérieur de la LED par électron injecté dans la LED.

$$\eta_{ext} = \eta_{int} \times \eta_{extraction} \times \eta_{injection} \quad (\text{III. 4})$$

Une autre quantité importante exprime le rapport entre la puissance optique émise par une LED et la puissance électrique fournie à cette LED, et se nomme l'efficacité à la prise (wall-plug efficiency – WPE).

$$WPE = \frac{P}{IV} \quad (\text{III. 5})$$

III.4 Description technologique des LEDs

III.4.1 LEDs UV [10]

Depuis plusieurs années, il existe des diodes électroluminescentes à base de nitrures émettant dans l'ultraviolet. La figure III.6 montre le schéma simplifié d'une diode électroluminescente à puits quantique $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$. Pour aller plus loin dans l'ultraviolet, il est nécessaire d'utiliser des puits quantiques de GaN (voire d' $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$). Ainsi la réalisation de telles diodes dépend de la maîtrise du dopage de ces matériaux avec toutes les difficultés qu'il comporte. Plusieurs groupes ont réussi à fabriquer des diodes électroluminescentes émettant vers 275-285 nm : puits quantiques $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ dans une barrière $\text{Al}_y\text{Ga}_{1-y}\text{N}$ de concentration en aluminium très élevée, ou puits quantiques de quaternaire (Al, Ga, In) N dans une barrière $\text{Al}_y\text{Ga}_{1-y}\text{N}$. Enfin, des diodes électroluminescentes à base d' $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ émettant à 265 nm et à 250 nm ont été récemment réalisées.

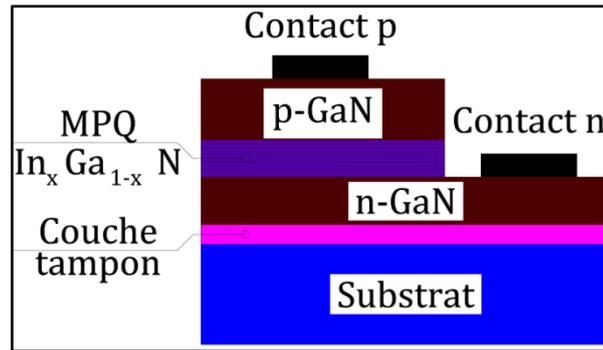


Figure III.6: Diode électroluminescente à multi-puits quantiques (MPQ) $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ [11].

III.4.2 LEDs de couleurs [10]

Les LED de couleur présentent un marché important, avec pour applications : la signalisation, l'affichage avec les écrans couleur, ou encore les sources de lumière blanche avec en particulier l'éclairage public.

Des LED rouges à base d'alliages GaAlAs sont commercialisées depuis longtemps déjà, avec une efficacité lumineuse de $20\text{-}30 \text{ lm.W}^{-1}$ et une haute brillance de 2 Cd .

Des LED vertes à base d'alliages AlInGaP sont aussi produites depuis un certain temps mais elles émettent dans le vert jaunâtre (564 nm) au lieu du vert pur (510 nm) ; en plus, elles possèdent un faible rendement quantique externe (0.6%) et une faible intensité (0.1 Cd).

Les LED bleues qui existent, à base de SiC, ne présentent qu'une brillance maximum de 0.02 Cd .

Afin de réaliser des écrans ; il a été alors nécessaire de réaliser des LED bleues (480nm) et vertes (510nm) de haute brillance (2 Cd), LED utiles pour la signalisation.

Les LED blanches sont basées soit sur l'association de trois LED (rouge, verte, bleue), soit sur l'association d'une LED bleue ou UV et d'un matériau qui émet des photons d'énergie inférieure quand il est excité ; la combinaison donne alors de la lumière blanche.

La réalisation de LED de haute brillance, émettant dans le bleu, le vert ou encore l'ultraviolet (en dessous de 400 nm), apparaissait là aussi nécessaire. Dans ce sens ; la réalisation des LED à base de GaN est devenue un challenge depuis le début des années 1990, période à laquelle leur réalisation a pu être envisagée grâce à une amélioration de la qualité cristalline des films épitaxiés de GaN.

Certaines LED ont été conçues et sont actuellement commercialisées. Dans ce qui va suivre, nous donnons une description pour les LED à simple (SH) ou double hétérostructure (DH) développées par Toyoda Gosei, les LED à simple puits quantique (SQW) développées par Nichia, les LED à multiples puits quantiques (MQW) développées par Toyoda Gosei, les

LED réalisées sur substrat SiC, développées par Cree, et enfin les LED blanches avec leurs structures complexes basées sur les LED précédemment développées.

III.4.2.1 LEDs à simple hétérostructure (SH)

Dans les premières LED bleues à simple hétérostructure (SH) (figure III.7) réalisées par Koike et al. Pour la firme "Toyoda Gosei", la couche active est composée de GaN. Une jonction p-n simple serait constituée de couches de GaN (n-GaN et p-GaN).

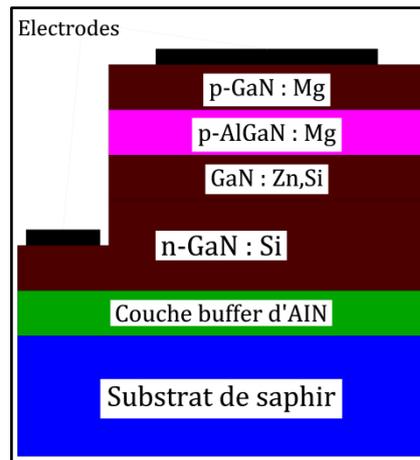


Figure III.7: Structure de LED (SH) selon M. Koike [10].

L'incorporation de dopants accepteurs étant limitée dans GaN ; il est alors nécessaire de co-doper la couche p afin d'augmenter la solubilité limite des dopants accepteurs sans dégrader la qualité des cristaux hôtes. D'autre part ; la présence de la couche de revêtement AlGaIn dopée p, permet d'améliorer l'intensité lumineuse de 50mCd à 0.5Cd, en augmentant l'hétéro-barrière pour les électrons injectés. L'intensité lumineuse de ce type de LED est cependant faible.

III.4.2.2 LEDs à double hétérostructure (DH)

Pour améliorer les performances, les LED à double hétérostructure ont été réalisées également par M. Koike et al. pour la firme "Toyoda Gosei", en remplaçant la couche active par un film de $\text{In}_{0,06}\text{Ga}_{0,94}\text{N}$, lui-même entouré de deux couches protectrices de $\text{Al}_{0,15}\text{Ga}_{0,85}\text{N}$ dopées n et p (figure III.8).

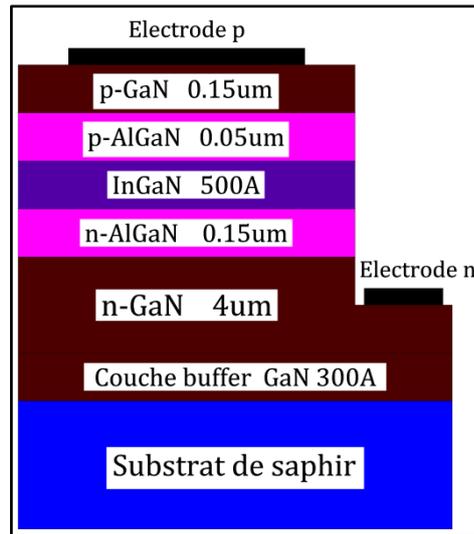


Figure III.8: Structure d'une LED InGaN à double hétérostructure (DH) selon S. Nakamura [10].

Le substrat de ces LED est taillé afin d'avoir une surface de $350\mu\text{m}\times 350\mu\text{m}$, dans le but d'obtenir des éléments suffisamment petits pour des applications en matière d'affichage. Les caractéristiques de ces LED (DH) InGaN bleues, qui sont commercialisées par "Toyoda Gosei", les rendent utilisables dans un certain nombre d'applications, avec en particulier une haute brillance jusqu'à 2.5 Cd. Cependant ; il n'a pas été possible de réaliser de LED vertes ou jaunes par cette méthode, car la couche cristalline n'avait pas une qualité suffisante. En effet ; lorsque le taux d'indium augmente, ce qui est nécessaire à la diminution de la valeur du gap, la différence de réseau entre les couches augmente aussi, et entraîne une augmentation de la densité de défauts.

III.4.2.3 LEDs à simple puits quantique (SQW)

Les LED SQW (figure III.9) possèdent une couche active InGaN très fine (30\AA). En effet ; plus une couche est épaisse, plus elle présente un nombre important de contraintes à cause de la différence entre les paramètres de maille du substrat et ceux de l'alliage InGaN. Les contraintes sont alors relâchées par formation de dislocations. Lorsque l'épaisseur de la couche InGaN diminue, les contraintes élastiques diminuent et la couche présente beaucoup moins de dislocations ; on obtient ainsi une meilleure qualité cristalline.

Des LED bleues et vertes ont ainsi été réalisées par Nakamura et al. Pour la société "Nichia", en faisant varier le taux d'indium au sein de la couche active $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$. Le substrat est retaillé à la même dimension que (DH) ($350\mu\text{m} \times 350\mu\text{m}$). Les LED vertes ainsi

réalisées, consomment dix fois moins d'énergie que les ampoules des lampes classiquement utilisées dans les feux de signalisation.

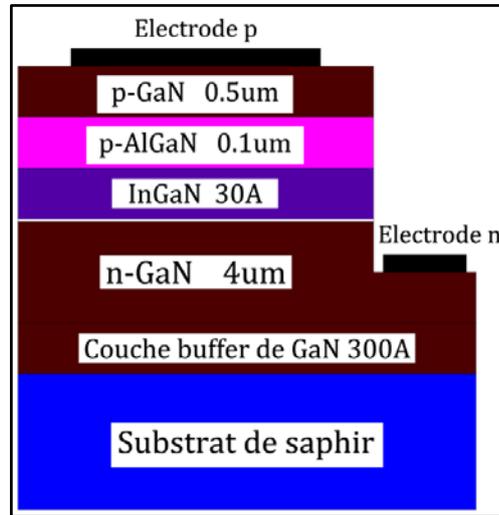


Figure III.9: Structure de LED InGaN (SQW), selon S. Nakamura [10].

Des LED (UV) SQW de haute brillance ont également été réalisées, par Nakamura et al. pour "Nichia", en diminuant très fortement le taux d'indium, presque à zéro ; une quantité minimale d'In est néanmoins nécessaire afin d'accroître l'émission de la couche active. En effet ; les couches InGaN présentent une fluctuation de composition en In, entraînant la formation de niveaux d'énergie localisés qui se comportent comme des états d'énergie quantiques ponctuels au sein de la couche du puits quantique InGaN ; d'où le nom de LED à simple puits quantique. Ces niveaux capturent alors les porteurs dans la couche active InGaN, avant que ceux-ci ne soient capturés par les centres de recombinaison non radiative. Ces centres sont causés par le grand nombre de dislocations. Sans indium ; les LED UV, avec une couche active de GaN dopé p, émettent avec un rendement dix fois plus faible que les LED UV à InGaN.

Les LED jaunes, réalisées selon le même principe que les LED vertes, ont une longueur d'onde de 594 nm et une largeur à mi-hauteur du pic d'émission de 50 nm. Cependant ; elles ne sont pas actuellement encore assez performantes. En effet ; pour obtenir une émission dans le jaune, l'augmentation du taux d'indium affecte la qualité cristalline de la couche, de manière trop importante.

III.4.2.4 LEDs à multiples puits quantiques (MQW)

Des LED bleues ont pu être réalisées avec des structures à multiples puits quantiques (MQW) (figure III.10) par Koike et al. Pour "Toyota Gosei".

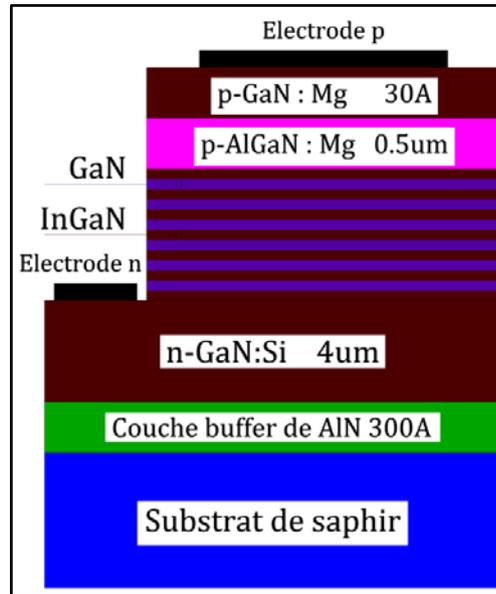


Figure III.10: Structure de LED bleue InGaN (MQW), selon M. Koike [10].

La couche active est composée d'une alternance de six très fines couches actives $\text{In}_{0.08}\text{Ga}_{0.92}\text{N}$ non dopées, et de sept couches de barrières quantiques de GaN non dopées. L'épaisseur des couches actives est importante car elle a deux effets sur l'émission : d'une part, le passage d'une couche $\text{In}_{0.08}\text{Ga}_{0.92}\text{N}$ de 100 Å à 30 Å entraîne une diminution de la longueur d'onde émise de 15 nm (ce qui peut s'expliquer par un effet de taille quantique) ; d'autre part, l'intensité lumineuse diminue très fortement lorsque l'épaisseur des couches augmente. Les épaisseurs optimales des couches de la structure MQW ont été déterminées à 70 Å pour les couches $\text{In}_{0.08}\text{Ga}_{0.92}\text{N}$, et à 90 Å pour les couches GaN non dopées.

Des LED vertes ont également pu être réalisées selon ce même principe. Elles ont des caractéristiques encore plus intéressantes, notamment une intensité lumineuse autour de 10Cd.

III.4.2.5 LEDs sur substrat SiC

D'autres LED ont été réalisées par Bulman et al. Pour la firme "Cree", en utilisant le carbure de silicium SiC comme substrat, à la place du saphir.

Le carbure de silicium présente plusieurs avantages. Tout d'abord et contrairement au saphir qui est isolant ; la conductivité électrique du SiC permet de réaliser des structures ayant un contact avec la couche active (en haut), et un contact direct avec le substrat (en bas). En plus, la conductivité thermique du SiC ($3.8 \text{ W.cm}^{-1}\text{K}^{-1}$) est plus élevée que celle du saphir

($2.23 \text{ W.cm}^{-1}\text{K}^{-1}$), ce qui permet une meilleure dissipation de la chaleur lors du fonctionnement des dispositifs électroniques et optoélectroniques. Enfin ; la différence de réseau entre GaN de structure wurtzite et SiC (de type 4H et 6H) n'est que de 3.5% contre 16% pour le saphir.

La qualité des couches de GaN est donc améliorée, avec une densité de défauts de l'ordre de 10^8cm^{-2} , soit cent fois moins que pour le saphir.

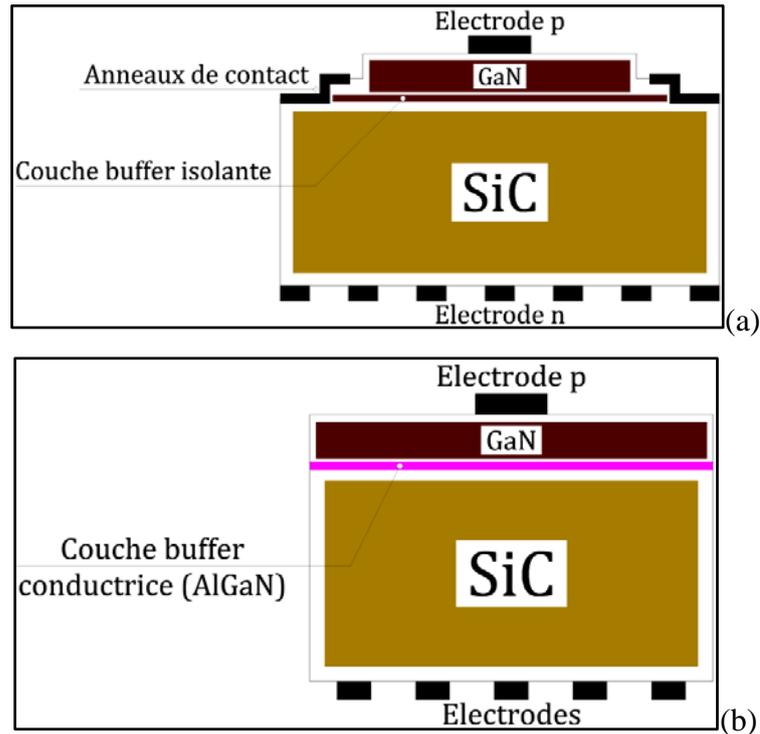


Figure III.11: Structure de LED : (a) SiC/GaN avec une couche tampon isolante, (b) SiC/GaN avec une couche tampon conductrice AlGaN selon G. E. Bulman et al. [10].

Un premier type de LED a été réalisé avec une couche tampon (buffer) de AlN sur substrat SiC, ce qui est nécessaire pour assurer un bon accrochage du GaN ensuite déposé (figure III.11 a). Un anneau de contact est ajouté afin de court-circuiter la couche isolante (AlN). Cependant, une partie de la lumière émise est absorbée par cet anneau.

Un second type, à double hétérostructure (DH), a été développé en remplaçant la couche tampon d'AlN isolante, par une couche tampon d'alliage AlGaN conductrice (figure III.11 b). La tension de travail est de 3.6V, ce qui est dans la même gamme que pour les LED réalisées sur saphir. Le substrat est retaillé à $260 \mu\text{m} \times 260 \mu\text{m}$, contre $350 \mu\text{m} \times 350 \mu\text{m}$ pour les autres LED. Ces LED sont un peu moins performantes que les précédentes et plus chères à cause du prix de SiC, bien que moins complexes à la fabrication. Cependant ; elles

représentent un atout dans certaines applications où le coût n'est pas un problème : car elles peuvent résister à des décharges électriques statiques quatre fois supérieures, et sont moins volumineuses.

III.4.3 LEDs blanches

La première solution pour obtenir des LED blanches consiste à assembler trois LED : une rouge (GaAlAs), une verte et une bleue (InGaN SQW). Ces LED sont assez volumineuses, et nécessitent un circuit spécial afin d'ajuster l'intensité de chaque couleur. La seconde méthode consiste à utiliser une LED bleue de haute brillance pour exciter des matériaux organiques ou inorganiques, en vue d'obtenir l'émission de photons d'énergie inférieure. La combinaison des rayonnements donne alors de la lumière blanche. Ces LED sont nommées "LUCOLED" avec LUCO pour "luminescence conversion". Le coût d'une LED est étroitement corrélé au coût du substrat sur lequel on dépose la couche de nitrure GaN. Celui-ci est généralement en saphir ou SiC qui restent chers.

Une solution alternative est apparue avec la possibilité de déposer du GaN sur du silicium, tout en conservant une qualité de couche compatible avec les exigences de fabrication de LED. Cette avancée permet d'obtenir du GaN sur des wafers de grande taille, ce qui contribue à une grande diminution du coût des composants. Cette technologie, qui doit être améliorée afin d'obtenir des qualités de couche satisfaisantes, sera certainement le point de départ d'une production de masse de LED blanches haute luminosité et bas coût.

III.5 Propriétés des LEDs

III.5.1 Propriétés physiques

Les diodes électroluminescentes sont basées sur la physique des SC qui se diffèrent en fonction de la couleur qu'on veut obtenir. Le tableau III.1 donne, de manière non exhaustive, quelques semi-conducteurs utilisés en fonction de la longueur d'onde d'émission désirée.

Zone du spectre électromagnétique	Longueur d'onde λ (nm)	Tension directe V_F (V)	Semi-conducteurs utilisés
Infrarouge	$\lambda > 780$	$V_F < 2,5$	<ul style="list-style-type: none"> ▪ arséniure de gallium aluminium (AlGaAs); ▪ arséniure de gallium (GaAs); ▪ phosphore arsenium gallium indium (InGaAsP).
Rouge	$610 < \lambda < 780$	$1,5 < V_F < 3$	<ul style="list-style-type: none"> ▪ phosphore aluminium gallium indium (AlGaInP); ▪ arséniure de gallium aluminium (AlGaAs); ▪ arséniure phosphore de gallium (GaAsP); ▪ phosphore de gallium (GaP).
Orange	$590 < \lambda < 610$	$2 < V_F < 2,5$	<ul style="list-style-type: none"> ▪ phosphore aluminium gallium indium (AlGaInP); ▪ arséniure phosphore de gallium (GaAsP); ▪ phosphore de gallium (GaP).
Jaune	$570 < \lambda < 590$	$1,5 < V_F < 3$	<ul style="list-style-type: none"> ▪ phosphore aluminium gallium indium (AlGaInP); ▪ arséniure phosphore de gallium (GaAsP); ▪ phosphore de gallium (GaP).
Vert	$500 < \lambda < 570$	$1,5 < V_F < 3$	<ul style="list-style-type: none"> ▪ nitride de gallium indium (InGaN); ▪ phosphore de gallium (GaP); ▪ phosphore aluminium gallium indium (AlGaInP).
Bleu	$450 < \lambda < 500$	$2,5 < V_F < 4$	<ul style="list-style-type: none"> ▪ nitride de gallium indium (InGaN); ▪ séléniure de zinc (ZnSe); ▪ carbure de silicium (SiC).
Violet	$380 < \lambda < 450$	$3 < V_F < 5$	<ul style="list-style-type: none"> ▪ nitride de gallium indium (InGaN); ▪ nitride gallium (GaN).
Ultraviolet	$\lambda < 380$	$3 < V_F < 5$	<ul style="list-style-type: none"> ▪ nitride de gallium indium (InGaN); ▪ nitride gallium aluminium (AlGaN); ▪ nitride gallium (GaN); ▪ nitride aluminium gallium indium (AlGaInN); ▪ nitride aluminium (AlN).
Blanc		$3 < V_F < 5$	<ul style="list-style-type: none"> ▪ idem que le bleu ou l'ultraviolet.

Tableau III.1: Différents SC utilisés en fonction de la couleur de la lumière [8].

III.5.1.1 Recombinaisons radiatives

Il existe deux types de recombinaisons provoquant l'émission de lumière à la jonction p-n des LEDs. Il y a d'abord la recombinaison spontanée, qui produit une lumière non cohérente ayant un spectre centré autour de l'énergie de la bande interdite. Le taux de recombinaison spontanée est donné par l'équation (III.6) [12] :

$$R_{spont} = \beta(np - n_0p_0) \quad (\text{III. 6})$$

Où n et p sont les densités de porteurs dans la jonction, n_0 et p_0 sont les densités de porteurs à l'équilibre thermodynamique, β est le coefficient de recombinaison spontanée.

C'est ce type de recombinaison qui domine dans les diodes électroluminescentes ; à la jonction p-n, il peut aussi y avoir des recombinaisons stimulées. Les photons émis dans ce cas sont cohérents et quasi-monochromatiques. Le taux de recombinaison stimulée à la jonction des semi-conducteurs est donné par l'équation (III.7) [12] :

$$R_{stimulée} = g(n, p)\Phi \quad (\text{III. 7})$$

Où $g(n, p)$ représente le gain et Φ correspond au flux de photons à l'intérieur du laser. Ce type de recombinaison est principalement présent dans les diodes laser et est très faible dans les diodes électroluminescentes.

III.5.1.2 Recombinaisons non radiatives

Il existe également à l'intérieur de la jonction deux autres types de recombinaisons qui sont dites non radiatives car l'énergie est émise sous forme de vibrations du réseau cristallin. Ces recombinaisons ne sont pas souhaitables dans une diode électroluminescente car elles diminuent l'intensité lumineuse émise pour un courant injecté donné.

Le premier type de recombinaison non radiative est appelé Shockley-Read-Hall. Il est causé par la présence de défauts ou d'impuretés dans le cristal qui créent un état intermédiaire dans la région interdite du diagramme de bande du semi-conducteur.

Ces sites dans la matrice du cristal peuvent capter ou émettre des porteurs conduisant à des recombinaisons sans émission de photons. Un seul défaut dans la matrice sera difficilement observable dû à sa petite taille. Par contre, ces défauts ont tendances à se regrouper pour former des sites étendus, ce qui rend leur observation plus facile. La valeur du taux de recombinaison Shockley-Read-Hall est donnée par l'équation (III.8) [12] :

$$R_{SRH} = \frac{np - n_0p_0}{\tau_p(n + n_0) + \tau_n(p + p_0)} \quad (\text{III. 8})$$

Où n et p sont les densités de porteurs dans la jonction, n_0 et p_0 sont les densités de porteurs à l'équilibre thermodynamique ; alors que τ_n et τ_p sont les temps de vie des électrons et des trous, respectivement.

La recombinaison Auger est le deuxième type de recombinaison non radiative à la jonction du semi-conducteur. Elle est particulièrement présente lorsque l'énergie de la bande interdite du semi-conducteur est faible. La recombinaison Auger provient d'une capture par un électron ou un trou de l'énergie émise lors d'une recombinaison spontanée ou stimulée. Si le porteur captant l'énergie est un électron, on parle d'une recombinaison Auger de type CHCC ; tandis que s'il s'agit d'un trou, on parle de type CHSH. Le porteur qui capte l'énergie se retrouve alors dans un état excité de la bande de conduction ou de valence avant de perdre son énergie par des interactions avec le réseau cristallin ou avec d'autres porteurs libres. Le taux de recombinaison Auger dans une jonction p-n est donné par l'équation (III.9) [12]:

$$R_{Auger} = (c_n n + c_p p)(np - n_0 p_0) \quad (\text{III. 9})$$

Où n et p sont les densités de porteurs dans la jonction, n_0 et p_0 sont les densités de porteurs à l'équilibre thermodynamique ; tandis que c_n et c_p sont des coefficients qui sont associés aux recombinaisons Auger de type CHCC faisant intervenir deux électrons et un trou (figure III.12a) et CHSH faisant intervenir deux trous et un électron (figure III.12 b). Les recombinaisons Auger de type CHCC et CHSH peuvent se produire de façon directe ou indirecte faisant intervenir un phonon.

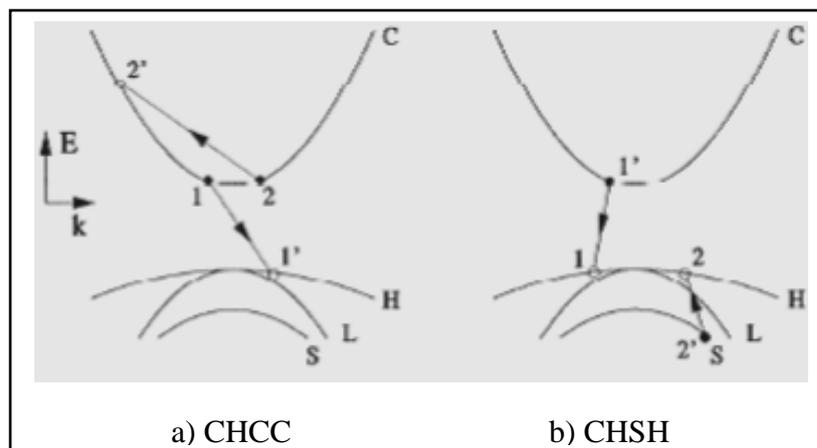


Figure III.12: Représentation schématique des processus Auger de type CHCC (a) et CHSH (b). Les symboles « C, H, L et S » identifient respectivement la bande de conduction et les bandes de valence.

III.5.2 Propriétés électriques

Une diode électroluminescente est d'abord une jonction p-n. L'expression du courant en fonction de la tension appliquée dans une diode de largeur A est donnée par l'équation (III.10) [9] dite de Shockley dans des conditions normales de polarisation directe :

$$I = eA \left[\sqrt{\frac{D_p}{\tau_p}} N_A + \sqrt{\frac{D_n}{\tau_n}} N_D \right] e^{\frac{e(V-V_D)}{K_B T}} \quad (\text{III.10})$$

Où $D_{n,p}$ sont les coefficients (ou constantes) de diffusion des électrons-trous, τ_n et τ_p sont les temps de vie de ces porteurs minoritaires. N_D et N_A sont respectivement les concentrations de donneurs et d'accepteurs. Le terme exponentiel fait apparaître une augmentation brusque du courant lorsque la tension V_D est atteinte, appelée tension de seuil. La valeur de V_D dépend essentiellement de l'énergie de la bande interdite du SC formant la diode. Dans son fonctionnement normal, une LED s'utilise en polarisation directe, c'est-à-dire lorsque le courant circule de l'anode vers la cathode.

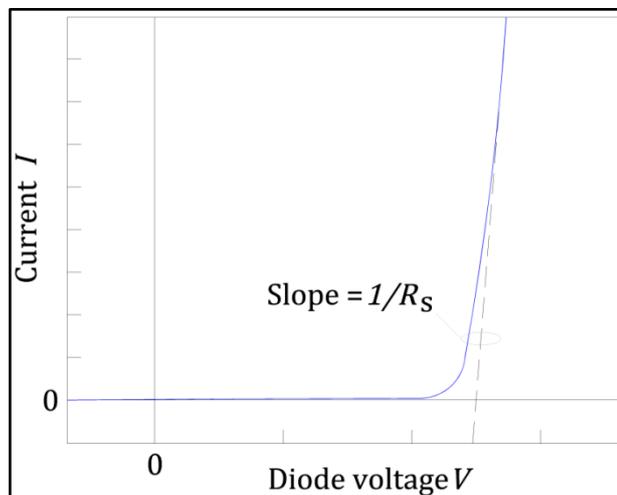


Figure III.13: Courbe courant-tension typique d'une diode électroluminescente [9].

Cette courbe présente aussi une manière d'extraire la résistance série interne de la diode. En effet, la partie linéaire à une pente correspondant à l'inverse de la valeur de la résistance série de la diode. Cette résistance série peut être causée par divers mécanismes à l'intérieur de la diode, les principaux connus étant :

- ✚ La résistance des contacts électriques (microsoudures, etc.) ;
- ✚ La résistance causée par une importante hétérostructure ;

✚ La résistance intrinsèque des matériaux, particulièrement lorsque les porteurs de charge ont une faible mobilité dans ces matériaux.

Il est possible d'évaluer l'évolution de la résistance série d'une diode en fonction des paramètres de dégradation, en mesurant la courbe courant-tension de façon régulière au cours de la durée de la vie.

III.6 Fabrication des diodes électroluminescentes

La longueur d'onde du rayonnement émis est déterminée par la largeur de la bande interdite et dépend donc du matériau utilisé. Toutes les valeurs du spectre lumineux peuvent être atteintes avec les matériaux actuels. Pour obtenir de l'infrarouge, le matériau adapté est l'arséniure de gallium (GaAs) avec comme dopant du silicium (Si) ou du zinc (Zn). Les fabricants proposent de nombreux types de diodes aux spécificités différentes. La figure III.14 illustre le processus de fabrication d'un composant LED.

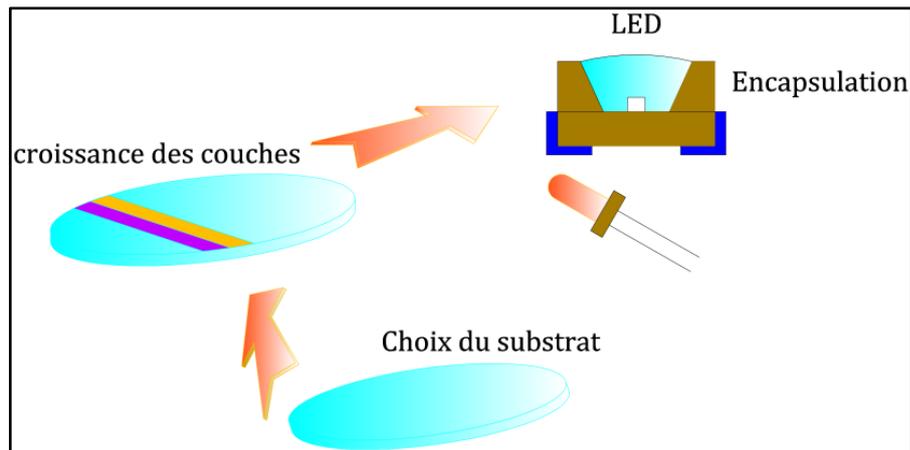


Figure III.14: Fabrication d'une diode électroluminescente (LED) [13].

Les diodes électroluminescentes peuvent être fabriquées à partir de plusieurs types de substrats tel que : le saphir (Al_2O_3), le carbure de silicium (SiC) et le silicium (Si). Le choix du substrat dépend de plusieurs critères : la qualité cristalline, l'expansion thermique, le raccordement de paramètre de maille avec le matériau épitaxié sur le substrat.

Les caractéristiques importantes à prendre en compte, lorsqu'on parle de croissance sur substrat, sont les paramètres de maille et les coefficients de dilatation thermique. En effet ; pour maximiser les chances d'avoir un matériau avec le moins de défauts et de contraintes possibles, il est nécessaire de faire croître le matériau sur un substrat doté d'une structure

cristallographique identique (homoépitaxie) ou bien la plus compatible possible (hétéroépitaxie).

La réalisation d'une jonction métal-SC (M-S) forme une barrière Schottky qui présente un effet redresseur, mais le niveau de potentiel de cette barrière peut être rendu pratiquement négligeable, par un choix correct du métal utilisé et un dopage suffisamment élevé du SC ; on obtient alors un contact à faible résistance et de caractéristique symétrique que l'on appelle contact ohmique. Ce type de contact est un moyen de communication avec le monde extérieur.

Enfin, il ne faut pas oublier que la jonction n'est qu'une petite partie de la LED, et que l'encapsulation joue un rôle primordial pour l'efficacité et la fiabilité de cette dernière. On utilise pour l'encapsulation des gels d'enrobage ; les plus fréquemment utilisés, jusqu'au début des années 2000, étaient les résines époxy. Pendant plusieurs années, elles furent choisies pour leur indice de réfraction élevé 1.4, leur bonne stabilité thermique jusqu' à 120 °C, leur transmittance élevée (85% à 90%) dans la gamme 500nm - 800nm [9, 14, 15].

III.7 Comparaison avec les sources de lumière traditionnelles

Les ampoules à incandescence produisent une « lumière chaude », l'émission provient d'un filament de tungstène chauffé à 2800K. Cette source de lumière est la moins coûteuse, elle délivre des klm par ampoule, mais c'est aussi celle qui a le moins bon rendement (~15 lm/W). Les ampoules à incandescence ont en effet une perte d'énergie par effet Joule très importante. 80% de l'énergie consommée est perdue par dissipation sous forme de chaleur. Elles émettent de plus, beaucoup d'infrarouges et d'ultraviolets.

Les tubes fluorescents émettent une « lumière froide » qui provient de phosphores excités par des UV obtenus par l'ionisation d'un gaz, essentiellement le mercure. Ils ont une grande efficacité lumineuse de l'ordre de 80 lm/W et produisent des klm par tube pour un faible coût.

Les LEDs émettent aussi une « lumière froide ». Elles ont une bien meilleure durée de vie que les sources de lumière traditionnelle: 100 000heures environ (soit ~10 ans en fonctionnement continu) contre 1000heures pour les ampoules à incandescence et 12 000heures pour les tubes fluorescents. Grâce à cette grande durée de vie et à leur robustesse, les LEDs facilitent la maintenance, surtout là où le remplacement de la source lumineuse est difficile.

Les autres sources de lumière, à cause de leur enveloppe en verre sont au contraire très fragiles. De plus, une LED est un dispositif très petit, ce qui peut être intéressant pour des applications où la source lumineuse doit être intégré dans de petits volumes. Ce n'est pas le

cas des tubes fluorescents pour lesquels il est difficile de réduire la taille sans réduire leur efficacité et leur durée de vie. L'indice de rendu des couleurs, paramètre important pour l'éclairage, est comparable d'une source à une autre. Certaines LEDs ont un indice de rendu des couleurs (IRC) dépassant les 90 [16], montrant qu'elles peuvent rivaliser avec les meilleures sources pour les éclairages de qualité. Au niveau de l'environnement, en plus de l'économie d'énergie, les LEDs permettraient le remplacement des tubes fluorescents qui contiennent du mercure, nocif pour l'environnement.

Un autre point fort des LEDs est la possibilité de contrôler la couleur. En revanche, le gros point noir reste le coût par lumen qui est encore très élevé. Le tableau III.2 présente les caractéristiques de différentes sources de lumière utilisées aujourd'hui.

Source	Rendement lumineux	Flux lumineux typique	Puissance électrique correspondante	Durée de vie	IRC	Prix (\$/klm)
Luxeon V DEL blanche R&D	24 lm/W > 65 lm/W	120 lm	5 W	50 000 h	> 75 > 90	< 250
Ampoule Incandescente	15 lm/W	900 lm	60 W	1 000 h	100	0.6 (75W)
Lampe à halogène	20 lm/W	1200 lm	60 W	4 000 h	100	
Tube Fluorescent	60-80 lm/W	600 lm	9 W	12 000 h	≤ 98	0.73
Lampe Fluo Compact	40-45 lm/W			10 000 h	82	

Tableau III.2: Comparaison des performances des différentes sources de lumière existantes [9, 17, 18].

III.8 Grandeurs optoélectroniques

III.8.1 Longueur d'onde, largeur à mi-hauteur

La première caractéristique d'un dispositif optoélectronique est la longueur d'onde d'émission λ ainsi que sa largeur à mi-hauteur FWHM (Full Width Middle Height). La longueur d'onde définit le type de rayonnement. Si le rayonnement est visible, elle correspond à une couleur, le blanc étant la somme de ces couleurs. La FWHM de la raie d'émission détermine la pureté de la couleur émise par une source monochromatique.

III.8.2 Indice de rendu de couleur, température de couleur pour une source blanche

Une source de lumière blanche est caractérisée par son indice de rendu de couleur R et sa température de couleur T_c . L'indice de rendu de couleur détermine l'aptitude d'une lumière, caractérisée par sa composition spectrale, à donner une perception satisfaisante de la couleur des objets. L'indice de rendu de couleur est d'autant moins bon que R est petit.

La température de couleur est plus complexe à définir. L'incandescence est l'émission de lumière par un corps du seul fait de sa température (par opposition à la luminescence). Par définition ; un corps noir absorbe intégralement les radiations reçues, l'émission de lumière par incandescence est alors, à surface égale, la même pour tous ces corps, et supérieure à celle de tous les corps non noirs. Lorsqu'une lumière a même composition spectrale que la lumière émise par un corps incandescent noir de température T_c , celle-ci est appelée température de couleur. Les étalons utilisés sont :

- ✚ A (lampe à incandescence) : $T = 2856\text{K}$.
- ✚ B (lumière directe du soleil) : $T = 4800\text{K}$.
- ✚ C (lumière moyenne du jour) : $T = 6500\text{K}$.

III.8.3 Flux lumineux et énergétiques, puissance de travail, efficacité lumineuse

Le flux lumineux F (en lumen : lm) correspond à la valeur instantanée d'un débit de rayonnement. Pour une lumière de composition spectrale déterminée, il est proportionnel à la puissance transportée, dite flux d'énergie Φ (en watts : W). Par définition ; le lumen est le flux reçu par une surface de 1 m^2 dont l'éclairement est partout de 1 lux.

La puissance de sortie d'un dispositif émettant un rayonnement, correspond au flux énergétique Φ .

L'efficacité lumineuse K d'un rayonnement (en lm.W^{-1}) est égale au rapport du flux lumineux sur le flux d'énergie.

III.8.4 Intensité lumineuse, luminance

L'intensité lumineuse d'une source (en candela : Cd) est le rapport entre le flux émis et l'angle solide dans lequel il est émis. Par définition ; la candela est l'intensité lumineuse d'une source qui émet un rayonnement monochromatique de fréquence $540 \times 10^{12}\text{Hz}$ et dont l'intensité énergétique, dans la direction considérée, est $1/683\text{watt}$ par stéradian (W.sr^{-1}). La luminance L (ou éclat ou brillance) est la valeur locale du rapport entre le flux et l'étendue géométrique. L'unité de luminance la plus souvent utilisée est la candela par mètre carré (Cd.m^{-2}), appelée aussi nit (nt).

Pour comparer la brillance de différentes sources, on compare en fait leur intensité lumineuse.

III.9 Domaines d'application

La technologie d'éclairage connaît actuellement une révolution, à savoir le passage des ampoules et des tubes fluorescents aux LED. L'ampoule, inventée par Thomas Edison en 1879, a un faible rendement ($\approx 16 \text{ lm/W}$), soit environ 4% de l'efficacité énergétique de l'électricité à la lumière. Une lumière est une unité utilisée pour caractériser le flux lumineux, qui prend en compte la réponse spectrale de l'œil. Le tube fluorescent, contenant du mercure et inventé par P. Cooper Hewitt en 1900, atteint une efficacité de 70 lm/W .

Les LED blanches atteignent actuellement plus de 300 lm/W , soit une efficacité à prise de plus de 50%. Les LED blanches utilisées pour l'éclairage sont souvent basées sur des LED bleues efficaces qui excitent un phosphore de sorte que la lumière bleue soit convertie en lumière blanche. Ces LED de haute qualité avec leur très longue durée de vie (100000 heures) sont de moins en moins chères et le marché est en train d'exploser. Dans l'avenir, des LED tricolores pourraient remplacer la combinaison de LED bleue et de phosphore pour un éclairage efficace. Cette technologie permettra un contrôle dynamique de la composition des couleurs.

Le remplacement des ampoules et des tubes fluorescents par des LED entraînera une réduction drastique des besoins en électricité pour l'éclairage. Étant donné que 20 à 30% de l'électricité consommée dans les économies industrielles est utilisée pour l'éclairage, des efforts considérables sont actuellement consacrés au remplacement des anciennes technologies d'éclairage par des LED.

Aujourd'hui, les LED à base de GaN constituent la technologie dominante pour les écrans à cristaux liquides rétro-éclairés dans de nombreux téléphones portables, tablettes, ordinateurs portables, écrans d'ordinateur, écrans de télévision, etc. Les lasers à diode GaN émettant dans les bleus et les UV sont également utilisés dans les DVD haute densité, qui a fait évoluer la technologie de stockage de musique, d'images et de films.

Les applications futures pourraient inclure l'utilisation de LED AlGaIn/GaN émettant des rayons UV pour la purification de l'eau, car les rayons ultraviolets détruisent l'ADN des bactéries, des virus et des micro-organismes. Dans les pays où les réseaux électriques sont insuffisants ou inexistant, l'électricité des panneaux solaires stockée dans des piles pendant la journée, alimente les LED blanches la nuit. Là-bas, on assiste à une transition directe des lampes à pétrole aux LED blanches [19].

Quatre grands fabricants se répartissent le marché mondial des LEDs : Philips Lumileds (USA), Osram (USA et Allemagne), Nichia (Japon) et Seoul Semi-conducteur [20, 21]. La figure III.15 indique la répartition du marché en 2010 selon les secteurs d'activités.

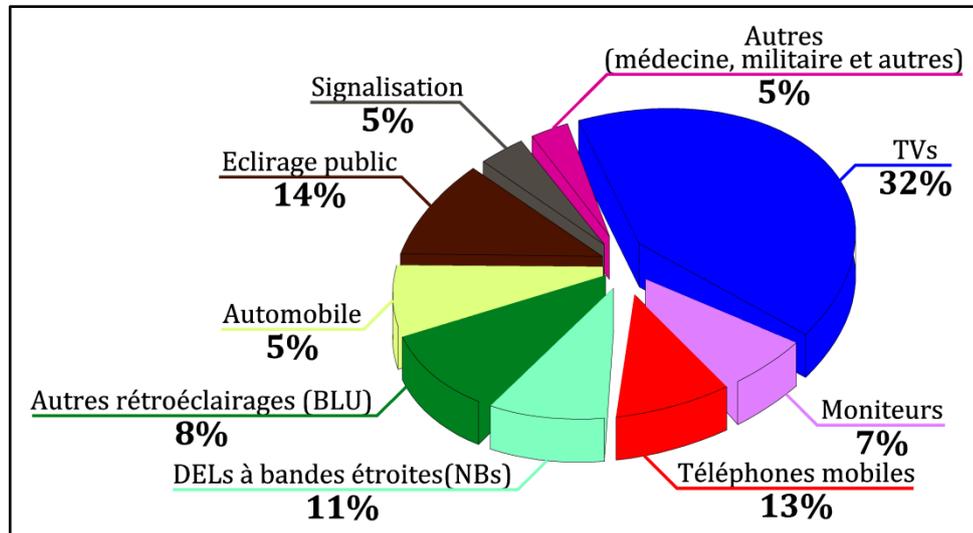


Figure III.15: Les applications des LEDs [22].

Conclusion

Le remplacement des ampoules à incandescence par des LEDs dans le domaine de l'éclairage permettrait de réaliser des économies d'énergies importantes. Dans ce chapitre, nous avons présenté les points importants des diodes électroluminescentes ; l'état de l'art des LEDs InGaN/GaN, leur principe de fonctionnement, les étapes de leurs fabrications et leurs applications. Les diodes électroluminescentes apparaissent aujourd'hui comme une solution technologique prometteuse et très efficace dans de nombreux domaines.

Références

- [1] Daniel. Ochoa, thèse de doctorat: «Diodes électroluminescentes planaires à haut rendement d'extraction lumineuse», Université de France (2001).
- [2] S. Nakamura, M. Senoh and T. Mukai, *Jpn. J. Appl. Phys.*, 32:L8, (1993).
- [3] S. Nakamura, T. Mukai and M. Senoh, *Appl. Phys. Lett.*, 64:1687, (1994).
- [4] S. Nakamura, S. Pearton and G. Fasol, «The blue Laser Diode» Springer, (2000).
- [5] Gabriel. Tourbot, thèse de doctorat: «Croissance par épitaxie par jets moléculaires et détermination des propriétés structurales et optiques de nanofils InGaN/GaN», Université de Grenoble, 11 juin (2012).
- [6] I Akasaki et al. *Inst. phys. Conf. Ser.*, (129):851-856, (1992).
- [7] S. Nakamura, N. Iwasa, M. Senoh, and T. Mukai. *Jpn. J Appl. Phys.*, (31):1258, (1992).
- [8] N. Pousset, thèse de doctorat: «Caractérisation du rendu de couleurs des nouvelles sources du rendu des diodes électroluminescentes», Conservatoire national des arts et métiers, (2009).
- [9] E. F. Schubert: «Light-emitting diodes», 2nd ed. Cambridge ; New York, Cambridge University Press, (2006).
- [10] Annaïg. Denis: «Elaboration, cristallogénèse et caractérisation physico-chimiques des nitrures des éléments de la colonne IIIA et en particulier de GaN», Université Bordeaux I, (octobre 2003).
- [11] Joseph. Fourier, thèse d'état: «Physique des matériaux», Grenoble 1 (décembre 2004).
- [12] Maciejko R, *Optoélectronique*, Presses Internationales Polytechnique, (2002), 528p.
- [13] G. Zisis: «Diode électroluminescente pour éclairage», *Cahiers Innovation IN-18 Technique de l'ingénieur*, pp.1-13, (2011).
- [14] G. Held: « Introduction to Light Emitting Diode Technology and Applications, CRC Press, (2008).
- [15] «Silicone Matériel Solutions for LED Packages and Assemblies, Momentive Performance Materials, pp. 1-9, (2007).
- [16] *Compound semiconductors*, 9 (11), 20, (December 2003).
- [17] Interview of Franck Steranka, vice-president of R&D at Lumileds, Opto and Laser Europe, (May 2003). (www.optics.org).
- [18] *Compound semiconductor*, 10 (9), 20, (October 2004).
- [19] Compiled by the Class for Physics of the Royal Swedish Academy of Sciences: «Efficient blue light-emitting diodes leading to bright and energy-saving white light sources», (2014).

- [20] A. Dussaigne, thèse de doctorat: «Diodes électroluminescentes blanches monolithiques», Université de Nice-Sophia Antipolis, (2005).
- [21] A. Henneghien, thèse de doctorat: «Etude et optimisation de l'émission et de l'extraction de lumière des nanofils semiconducteurs grand gap : application à des dispositifs électroluminescentes», Université de Grenoble, (2010).
- [22] J. Hsu: «LED Market Opportunities and Challenges», IMS Research, (2010).

CHAPITRE IV

Résultats et discussion

IV.1 Introduction

Durant ces dernières années ; à cause des coûts élevés de l'expérimentation et des performances des outils informatiques, les chercheurs se sont orientés vers la simulation ; elle permet de déterminer les paramètres les plus importants pour le fonctionnement des dispositifs, de minimiser les pertes et d'optimiser les paramètres physiques et géométriques des dispositifs, avant de passer à l'étape d'élaboration. Ce chapitre consiste à étudier la LED bleue à simple puits quantique à base de nitrure d'indium InGaN ; il s'agit de simuler ses performances électriques et optiques, en utilisant le logiciel de simulation SILVACO.

Dans la première partie, nous effectuons une simulation numérique pour comparer les propriétés optoélectroniques des diodes électroluminescentes p-GaN/InGaN/n-GaN/GaN et p-GaN/p-AlGaN/InGaN/n-GaN/GaN, sans et avec une couche de blocage électronique (AlGaIn), et nous éclairons leurs performances.

Dans la deuxième partie, nous étudions les propriétés optoélectroniques des LEDs p-GaN/p-AlGaN/InGaN/n-GaN/GaN et p-GaN/p-AlGaN/BInGaN/n-GaN/GaN. Le bore a déjà été incorporé dans le (les) puits quantique (s) pour élaborer ou étudier des LED émettant dans l'ultraviolet ; mais nous pensons qu'il n'a pas été utilisé dans les LED bleues.

Dans la troisième partie, nous allons insérer le nouveau matériau ternaire B_{0.01}Ga_{0.99}N comme couche barrière arrière ; le nitrure de bore et de gallium (B_{0.01}Ga_{0.99}N) est actuellement utilisé comme couche de barrière arrière dans les transistors à haute mobilité électronique (HEMTs), améliorant ainsi leurs performances. Cependant, ce matériau n'a jamais été utilisé dans une couche comme barrière arrière dans les LED bleues. Nous étudions les LEDs p-GaN/p-AlGaN/InGaN/n-GaN/GaN et p-GaN/p-AlGaN/InGaN/n-GaN/B_{0.01}Ga_{0.99}N ; nous considérons B_{0.01}Ga_{0.99}N avec différentes épaisseurs et nous comparons donc les performances entre les deux structures.

La simulation numérique est réalisée avec le logiciel ATLAS de SILVACO. En utilisant la méthode des éléments finis, le logiciel crée une maille couvrant toute la surface de la structure étudiée et résout numériquement les équations de base des semiconducteurs par itération. Les simulations peuvent être conduites en régime statique aussi bien qu'en régime transitoire. Les caractéristiques électro-optiques ainsi que les évolutions de différents mécanismes à l'intérieur d'une LED peuvent être extraites et exploitées.

IV.2 SILVACO/ATLAS – Méthodes et modèles disponibles

ATLAS permet de simuler le comportement électrique d'un composant semiconducteur créé et modélisé comme par exemple une diode ou un transistor. Le composant étudié est

représenté comme une structure maillée où chaque nœud a des propriétés qui lui sont associées telles que le type de matériau, le type de dopage, la concentration du dopant, etc. Ainsi pour chaque nœud ; la concentration de porteurs, le champ électrique...etc., peuvent être calculés. Les électrodes sont représentées par des surfaces sur lesquelles les conditions aux limites sont imposées, comme par exemple les tensions appliquées [1]. Le schéma bloc des modules utilisés dans la simulation par SILVACO est représenté sur la figure IV.1.

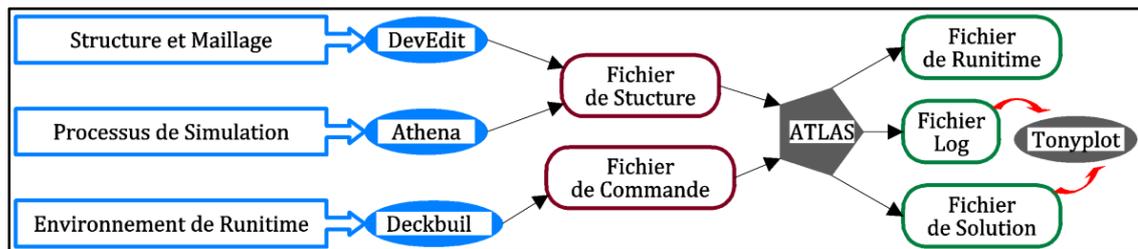


Figure IV.1: Modules utilisés dans la simulation par TCAD SILVACO.

IV.3 Simulation et comparaison de diodes électroluminescentes bleues sans et avec couche de blocage électronique p-GaN/InGaN/n-GaN/GaN et p-GaN/p-AlGaInGaN/n-GaN/GaN

IV.3.1 Introduction

Nous considérons une structure de LED bleue à simple puits quantique à base de nitrure d'indium InGaN, sans et avec couche de blocage électronique. Notre travail consiste à simuler leurs caractéristiques électriques et optiques, tout en essayant d'optimiser les performances par l'utilisation du logiciel TCAD SILVACO.

IV.3.2 Structures étudiées

Les structures des LED sont représentées sur les figures IV.2 (a) et (b). On y trouve :

1. Une couche p-GaN de 150 nm d'épaisseur.
2. Une couche de blocage électronique (EBL) p-AlGaIn de 100nm d'épaisseur (la deuxième LED).
3. Une couche active à simple puits quantique InGaN non dopée, de 3nm d'épaisseur.
4. Une couche n-GaN de 200nm d'épaisseur.
5. Une couche GaN non dopée (buffer), de 500nm d'épaisseur.
6. Un substrat saphir.

Les électrodes ont une épaisseur de 10nm ; le Nickel (Ni) pour le contact p et le titane (Ti) pour le contact n.

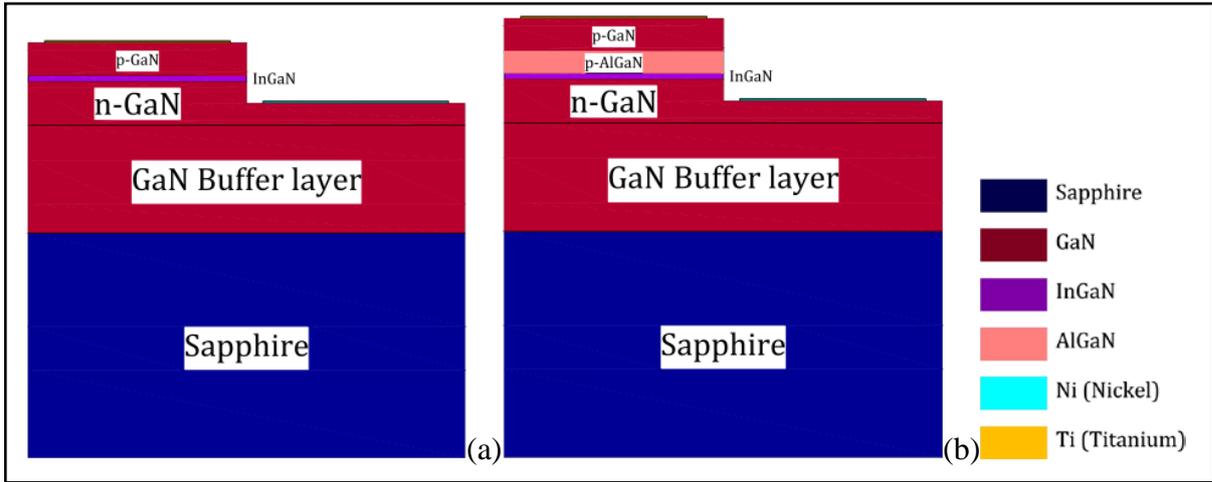


Figure IV.2: Représentation schématique des deux LEDs (a) p-GaN/InGaN/n-GaN/GaN, (b) p-GaN/p-AlGaN/InGaN/n-GaN/GaN.

Le dispositif a une surface de base rectangulaire de ($2\mu\text{m} \times 2\mu\text{m}$). Les paramètres des matériaux sont donnés par le tableau IV.1.

Paramètres	Valeur
Concentration de donneurs (N_d) (couches dopées n)	$1 \times 10^{18} \text{cm}^{-3}$
Concentration d'accepteurs (N_a) (couches dopées p)	$1 \times 10^{17} \text{cm}^{-3}$
Teneur d'indium dans le matériau InGaN	0.22
Mobilité des trous dans le puits quantique (μ_p)	$383 \text{cm}^2/\text{Vs}$
Mobilité des électrons dans le puits quantique (μ_n)	$1484 \text{cm}^2/\text{Vs}$
Teneur d'aluminium dans le matériau AlGaN	0.2
Durée de vie des électrons τ_n	$1 \times 10^{-9} \text{s}$
Durée de vie des trous τ_p	$1 \times 10^{-9} \text{s}$
Gap de GaN	3.4 eV
Gap de $\text{Al}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{N}$	3.8 eV
Gap de $\text{In}_{0.22}\text{Ga}_{0.78}\text{N}$	2.56 eV

Tableau IV.1: Paramètres des matériaux utilisés dans les simulations.

IV.3.3 Maillage

Le maillage est une grille qui recouvre la zone physique dans laquelle le dispositif est construit et simulé. Le maillage est simplement réalisé par une série de lignes horizontales et verticales définies par l'utilisateur avec un espacement entre eux [2].

Le maillage joue un rôle important pour l'obtention de bonnes simulations, il doit être fait avec la plus grande attention pour garantir la fiabilité des résultats. Le choix du maillage doit

être fait de façon à avoir un compromis entre la vitesse d'exécution et l'exactitude des résultats [3]. Le maillage créé dans ATLAS et que nous avons adopté, est illustré par les figures IV.3 (a) et (b).

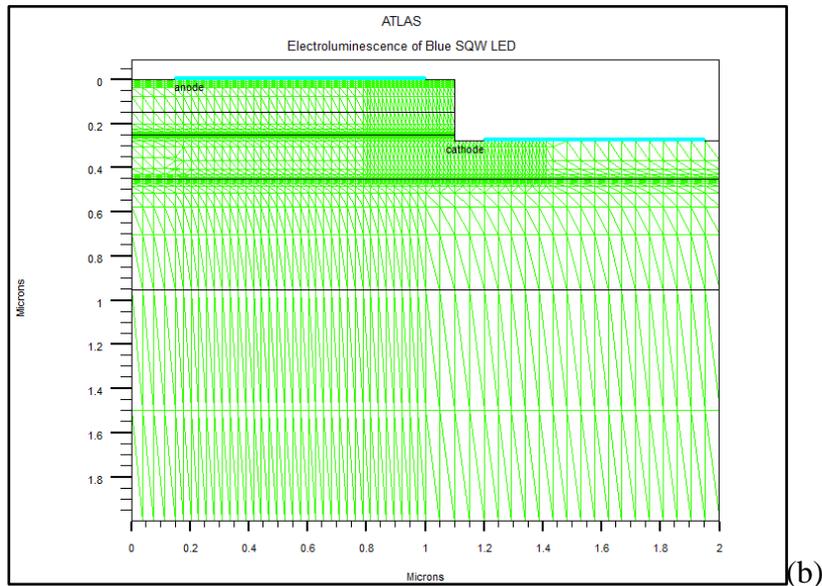
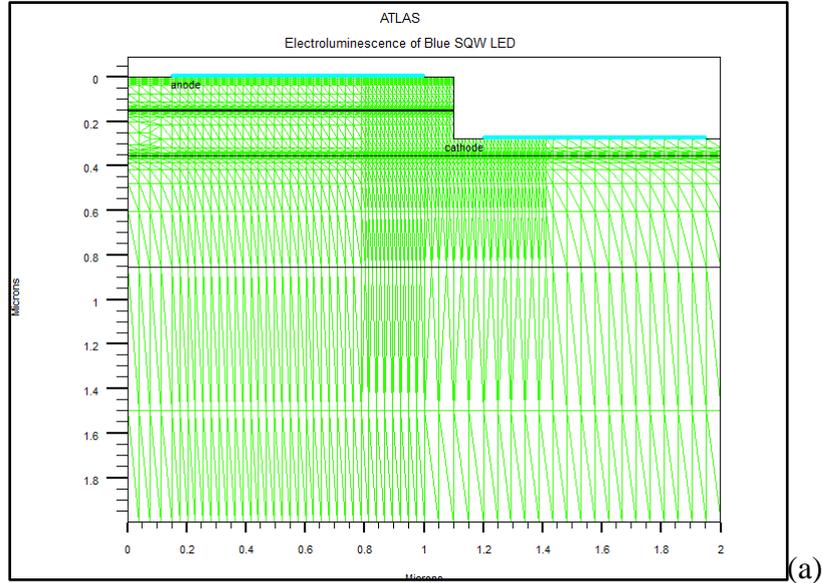


Figure IV.3: Maillage (a) LED1 p-GaN/InGaN/n-GaN/GaN,
(b) LED2 p-GaN/p-AlGaN/InGaN/n-GaN/GaN.

IV.3.4 Modèles physiques utilisés

Les modèles physiques cités dans le tableau IV.2 ci-dessous, sont activés.

Paramètres	Modèle
Les bandes d'énergie	Modèle k.p [4]
La recombinaison SRH	Modèle SRH indépendant du dopage et de la température
La recombinaison radiative	Modèle wz.kp (conçu pour la structure wurzite) et modèle de l'émission spontanée
La recombinaison Auger	Modèle Auger normal (sans influence du dopage, de la température, ...)
Les mobilités des électrons et des trous	Mobilité constante
Le champ de polarisation	Dans certains systèmes (tels que le système GaN/InGaN), les champs intégrés dus à la polarisation et contrainte (effet piézoélectrique) peuvent jouer un rôle important dans les caractéristiques d'émission des LED. ATLAS introduit ces champs de polarisation sous forme de charges surfaciques aux bords supérieur et inférieur des régions. Pour inclure les effets de la polarisation sur une région, on doit spécifier le paramètre POLARIZATION sur la déclaration REGION correspondante [5]
Ionisation des dopants	Incomplète

Tableau IV.2 : Modèles utilisés dans les simulations.

IV.3.5 Résultats et discussion

L'objectif de cette étude est de simuler et comparer les caractéristiques électriques et optiques de ces deux LEDs, en fonction de différents paramètres.

IV.3.5.1 Diagrammes de bande

Les figures IV.4 (a) et (b) montrent les diagrammes de bande d'énergie et le niveau de Fermi des deux LEDs à simple puits quantique sans et avec couche de blocage électronique, réalisés par ATLAS.

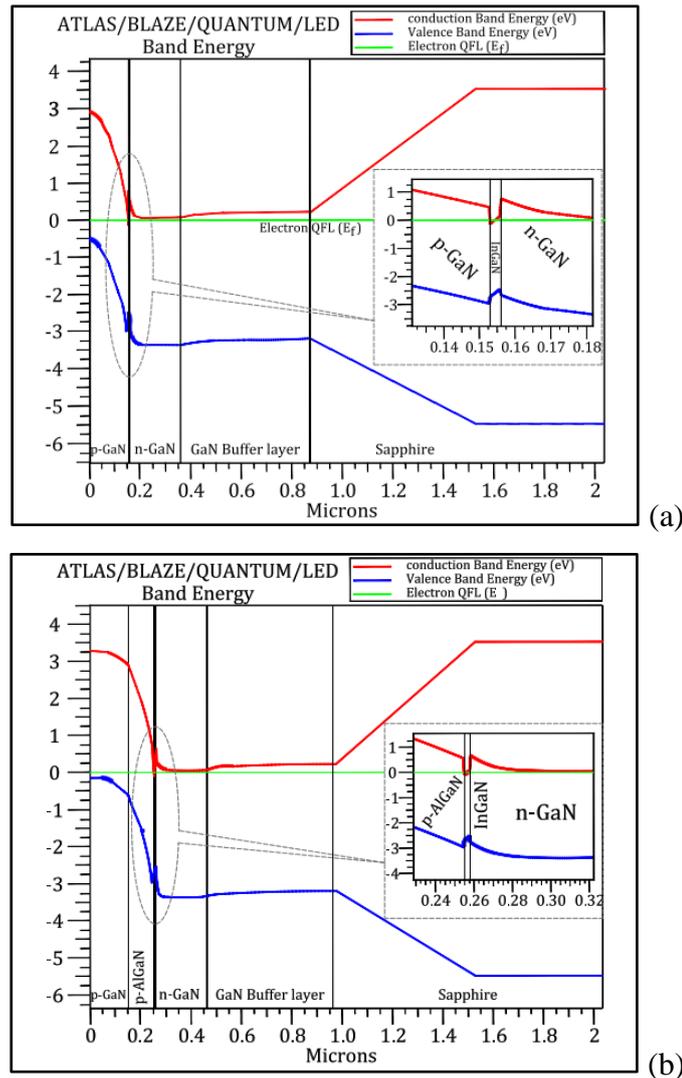


Figure IV.4: Diagramme de bande d'énergie dans (a) LED1 p-GaN/InGaN/n-GaN/GaN, (b) LED2 p-GaN/p-AlGaIn/InGaN/n-GaN/GaN.

Dans le cas de la LED2, comme illustré à la figure IV.4 (b), nous remarquons une barrière énergétique supplémentaire créée par la couche de blocage électronique (EBL) en AlGaIn. Lors du passage à travers la couche de blocage électronique, la barrière pour les électrons est plus élevée ; autrement dit, les électrons sont bloqués par cette couche, et théoriquement, la fuite d'électrons devrait être défavorisée. Pour la LED1 qui ne possède pas cette barrière énergétique (p-AlGaIn), la fuite des électrons constitue un problème.

IV.3.5.2 Concentration des électrons et des trous

Les figures IV.5 (a) et (b) montrent les concentrations des électrons et des trous réparties sur la profondeur des deux diodes électroluminescentes.

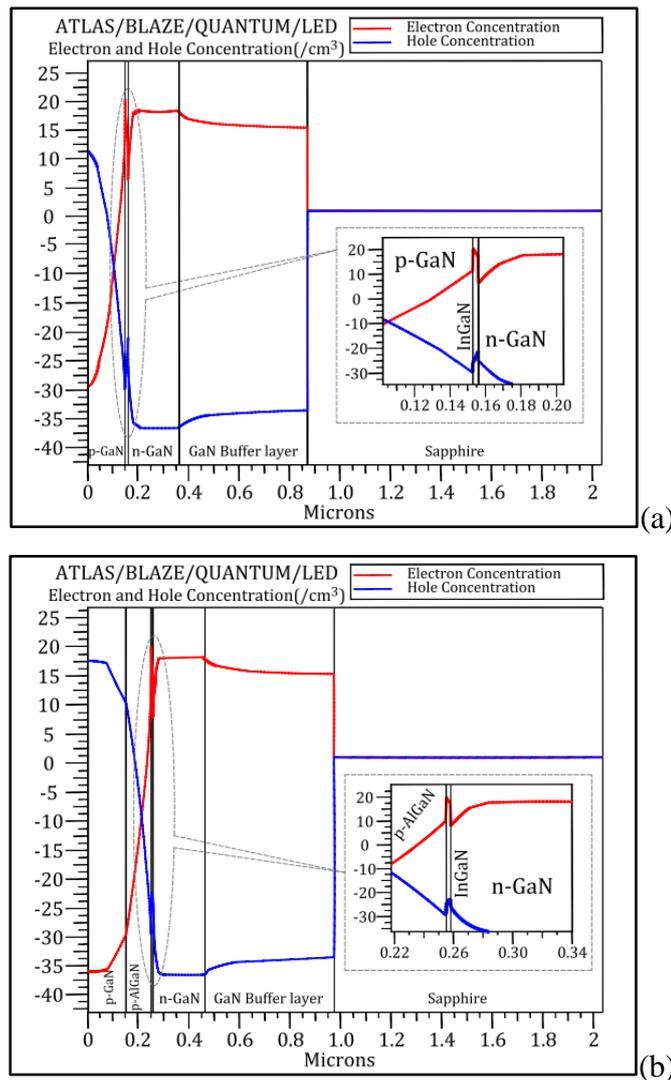


Figure IV.5: Concentration des électrons et des trous dans (a) LED1 p-GaN/InGaN/n-GaN/GaN, (b) LED2 p-GaN/p-AlGaIn/InGaN/n-GaN/GaN.

Nous pouvons remarquer dans Les figures IV.5 (a) et (b), la zone de meilleur recouvrement entre les concentrations d'électrons et de trous se situe dans la couche du puits quantique ; les concentrations des porteurs de charge y sont les plus grandes ; les concentrations des électrons et trous sont de l'ordre de 10^{20} cm^{-3} pour les deux LED. Les taux de recombinaison dans cette zone deviennent prédominants.

IV.3.5.3 Champ électrique

Les figures IV.6 (a) et (b) illustrent le champ électrique en fonction de la profondeur dans les deux structures, sans et avec couche de blocage électronique.

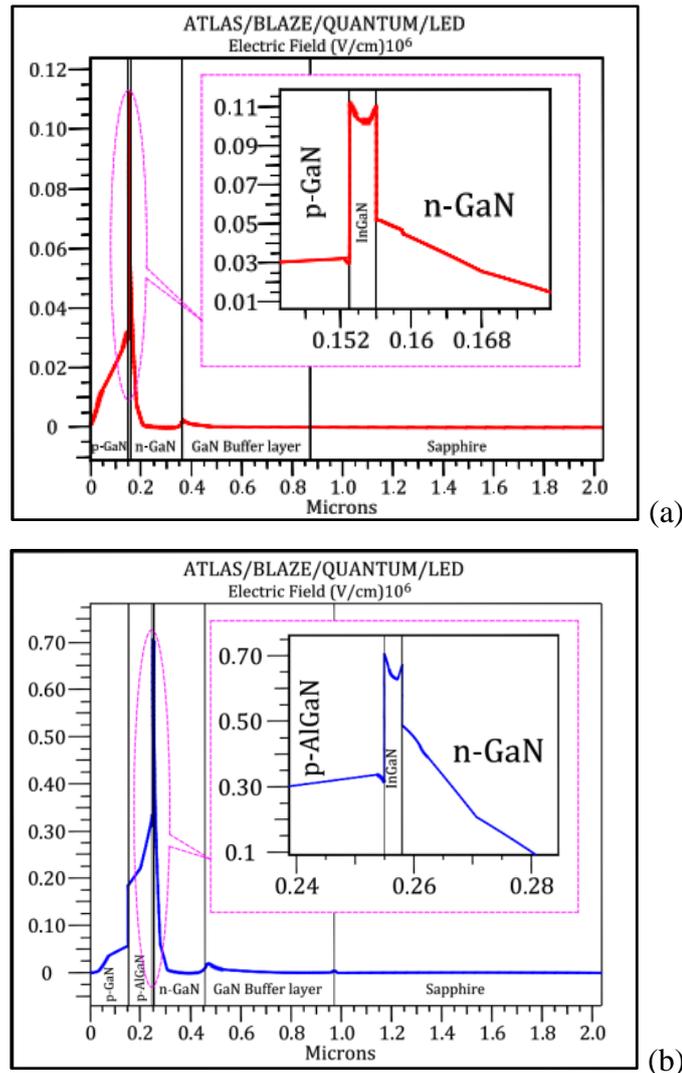


Figure IV.6 : Le champ électrique dans (a) LED1 p-GaN/InGaN/n-GaN/GaN, (b) LED2 p-GaN/p-AlGaN/InGaN/n-GaN/GaN.

Les valeurs du champ électrique dans les couches n-GaN et p-GaN sont plus faibles que dans le puits quantique InGaN pour les deux LEDs. La couche de blocage AlGaN a une grande influence sur les champs électriques dans la région active. Comme on peut le voir sur les figures, les champs électriques de la LED2 (0.70×10^6 V/cm) sont beaucoup plus grands que ceux de la LED1 (0.12×10^6 V/cm). Les désaccords de réseau entre la dernière barrière GaN, le puits quantique et AlGaN peuvent générer un fort champ électrique.

IV.3.5.4 Caractéristiques électriques

IV.3.5.4.1 Caractéristique (I-V)

Les courbes courant-tension (I-V) simulées des deux structures sont données par les figures IV.7 (a) et (b). Nous trouvons des tensions de seuil (V_{TH}) de 3.05V et 2.95V,

respectivement pour la LED1 et la LED2. Cette tension dépend essentiellement de l'énergie de la bande interdite du puits quantique de la LED, mais il y a aussi l'efficacité d'injection de courant qui est plus grande dans la deuxième LED ; ceci nous donne alors une tension de seuil plus petite pour cette LED.

A une tension anode de 5 V, nous trouvons un courant de 0.127mA (densité de courant : 31.75A/mm^2) et un courant de 0.162mA (densité de courant : 40.5A/mm^2), respectivement pour LED1 et LED2. Autrement dit ; pour une même tension appliquée, la densité de courant injecté est plus grande dans la LED2.

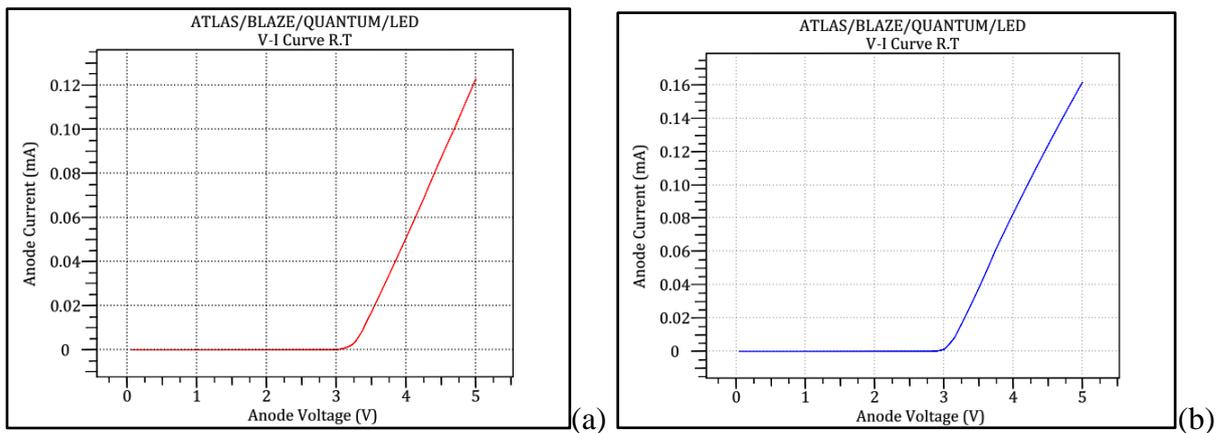


Figure IV.7: Caractéristique I-V (a) LED1 p-GaN/InGaN/n-GaN/GaN, (b) LED2 p-GaN/p-AlGaN/InGaN/n-GaN/GaN.

IV.3.5.4.2 Puissance lumineuse émise

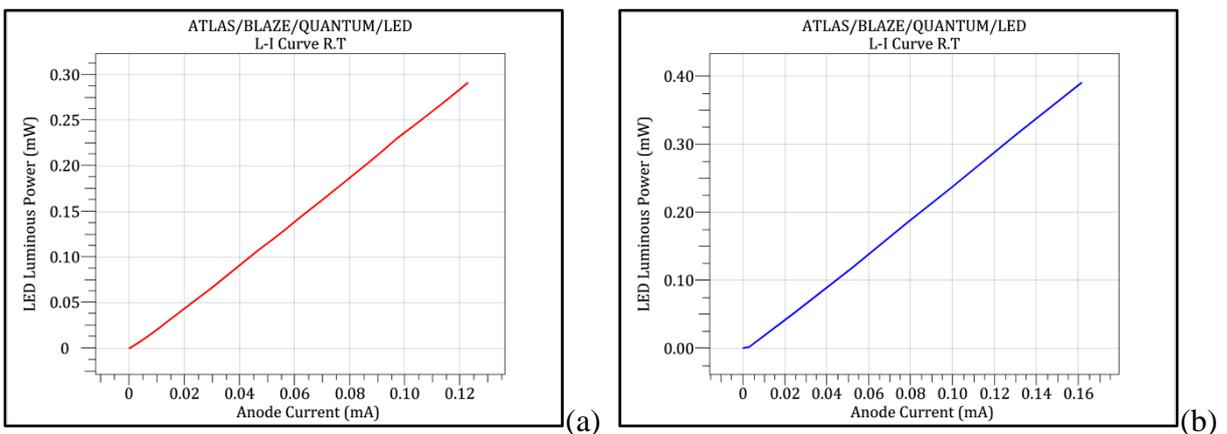


Figure IV.8: Puissance lumineuse émise a) LED1 p-GaN/InGaN/n-GaN/GaN, (b) LED2 p-GaN/p-AlGaN/InGaN/n-GaN/GaN.

Les figures IV.8 (a) et (b) montrent la puissance lumineuse émise (ou la puissance de sortie) en fonction du courant anodique, pour les deux LEDs. Nous obtenons une puissance lumineuse d'environ 0.29mW et 0.39mW pour un courant 0.127mA et 0.162mA, respectivement pour la LED1 et la LED2 ; cela veut dire pour une tension de 5V. Pour la LED2, avec couche de blocage électronique p-AlGaIn, il y a une amélioration remarquable des caractéristiques électriques, ce qui doit être attribué à la nature de grande résistance et de plus grand gap de p-AlGaIn qui limitent la fuite des électrons [6].

IV.3.5.5 Caractéristiques optiques

IV.3.5.5.1 Taux d'émission spontanée

Les figures IV.9 (a) et (b) illustrent les taux d'émission spontanée dans une polarisation TE, en fonction de la longueur d'onde (de l'énergie) pour les deux LED à $T = 300K$, à une tension anode de 5V. Le taux d'émission spontanée maximal de la LED1 est $0.12 \times 10^{30} \text{ s}^{-1} \text{ cm}^{-3} \text{ eV}$ correspondant à une énergie de 2.69eV ; soit une longueur d'onde de l'ordre de 460.97nm. Pour la LED2 ; le pic du taux d'émission spontanée est environ $0.25 \times 10^{30} \text{ s}^{-1} \text{ cm}^{-3} \text{ eV}$ à une énergie de 2.75eV ; soit une longueur d'onde de l'ordre de 450.90nm. On a deux fois plus d'émission spontanée dans la LED2.

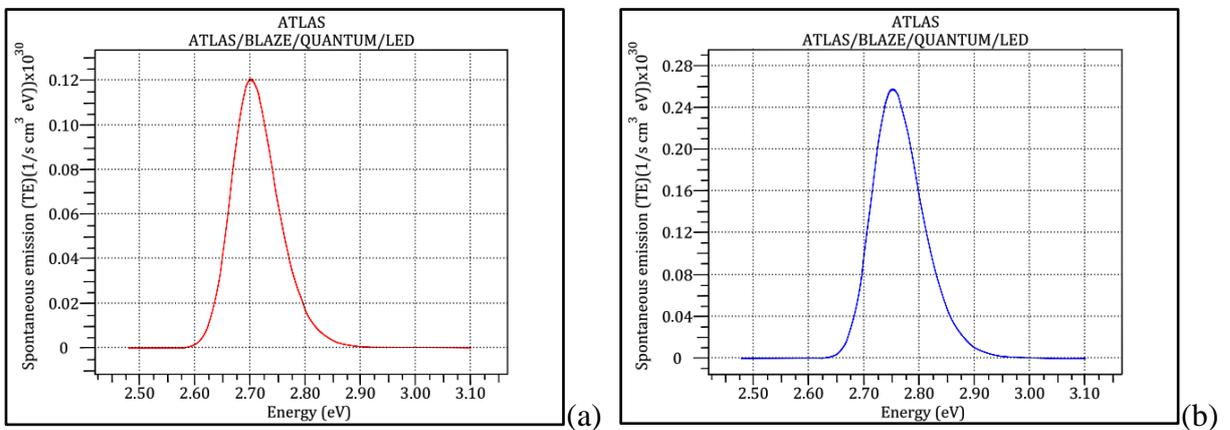


Figure IV.9: Le taux d'émission spontanée à polarisation TE (a) LED1 p-GaN/InGaIn/n-GaN/GaN, (b) LED2 p-GaN/p-AlGaIn/InGaIn/n-GaN/GaN.

IV.3.5.5.2 Recombinaison radiative

Nous représentons sur les figures IV.10 (a) et (b) la recombinaison radiative pour les deux LED, sans et avec couche de blocage électronique, à une tension de 5 V. Nous trouvons des taux de recombinaison radiative de $0.875 \times 10^{-18} \text{ cm}^{-3} \text{ s}^{-1}$ et $3.41 \times 10^{-18} \text{ cm}^{-3} \text{ s}^{-1}$, respectivement pour LED1 et LED2 ; soit 3.9 fois plus pour la LED2.

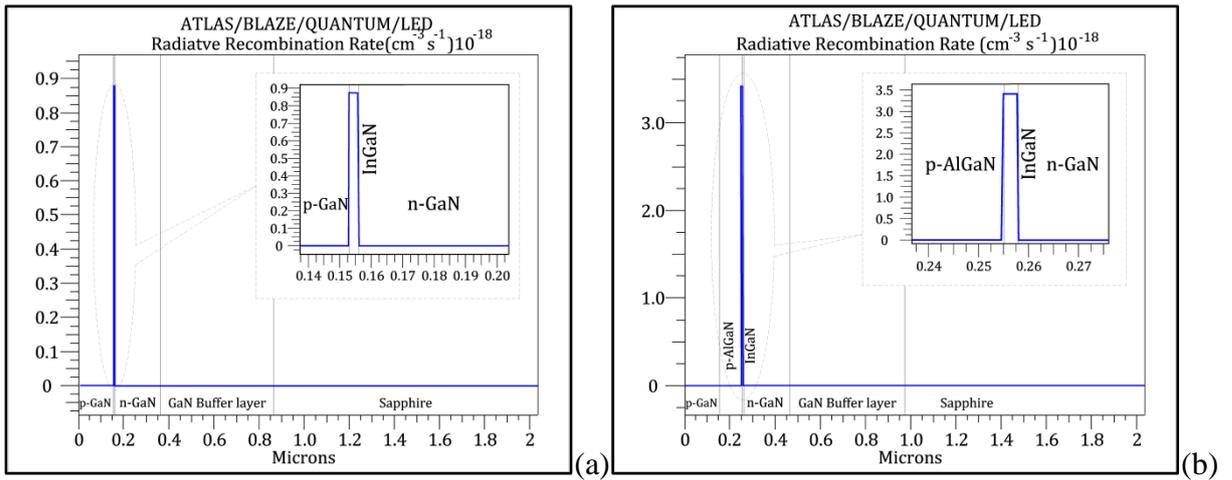


Figure IV.10: Recombinaison radiative dans (a) LED1 p-GaN/InGaN/n-GaN/GaN, (b) LED2 p-GaN/p-AlGaN/InGaN/n-GaN/GaN.

IV.3.5.5.3 Recombinaison Auger

Les figures IV.11 (a) et (b) illustrent le taux de recombinaison Auger pour un courant d'injection de 0.127mA (LED1) et 0.162mA (LED2), soit une polarisation de 5V.

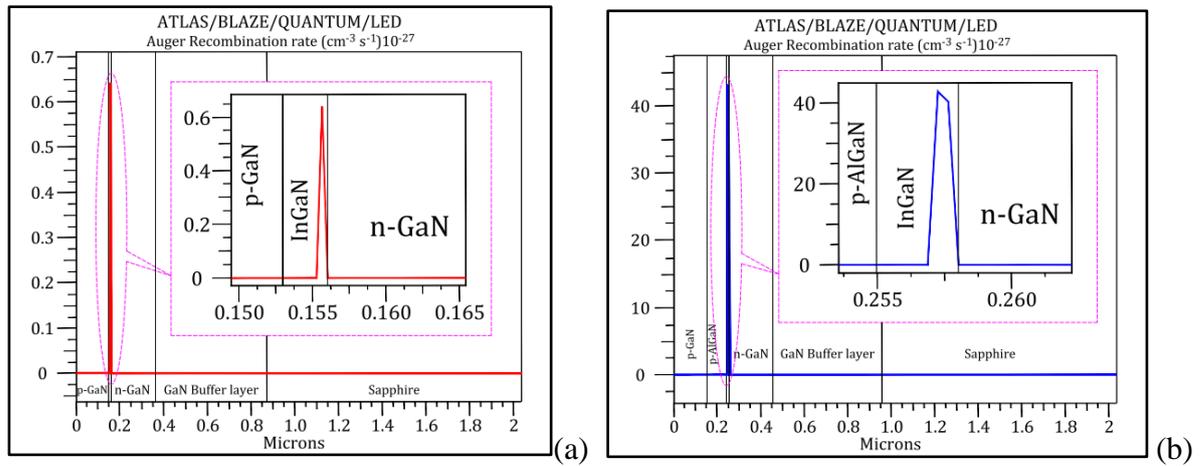


Figure IV.11: Recombinaison Auger dans (a) LED1 p-GaN/InGaN/n-GaN/GaN, (b) LED2 p-GaN/p-AlGaN/InGaN/n-GaN/GaN.

Nous trouvons un taux de recombinaison Auger, respectivement dans LED1 et LED2, de $0.641 \times 10^{-27} \text{ cm}^{-3} \text{ s}^{-1}$ et $42.8 \times 10^{-27} \text{ cm}^{-3} \text{ s}^{-1}$. Ceci pourrait s'expliquer ainsi : Dans la LED2, on a une couche de blocage électronique qui limite la fuite des électrons ; le taux de recombinaison Auger augmente alors avec celui des électrons qui vont se trouver dans le puits quantique.

IV.3.5.5.4 Gain optique

Les figures IV.12 (a) et (b) illustrent le gain optique en fonction de l'énergie (la longueur d'onde) pour les deux LEDs (SQW) à 5V. Nous obtenons un pic de gain d'environ $3.03 \times 10^3 \text{cm}^{-1}$ à une énergie de 2.69eV ($\lambda \approx 460.96 \text{ nm}$), et $7.27 \times 10^3 \text{cm}^{-1}$ à une énergie de 2.75eV ($\lambda \approx 450.90 \text{ nm}$), respectivement pour LED1 et LED2 ; soit un gain 2.4 fois plus grand pour LED2.

Pour la LED1, nous avons un gain positif pour une longueur d'onde entre 455nm et 477nm ; en dehors de cet intervalle, on a plutôt une absorption.

Pour la LED2, nous avons un gain positif pour une longueur d'onde entre 442nm et 467nm ; en dehors de cet intervalle, on a plutôt une absorption.

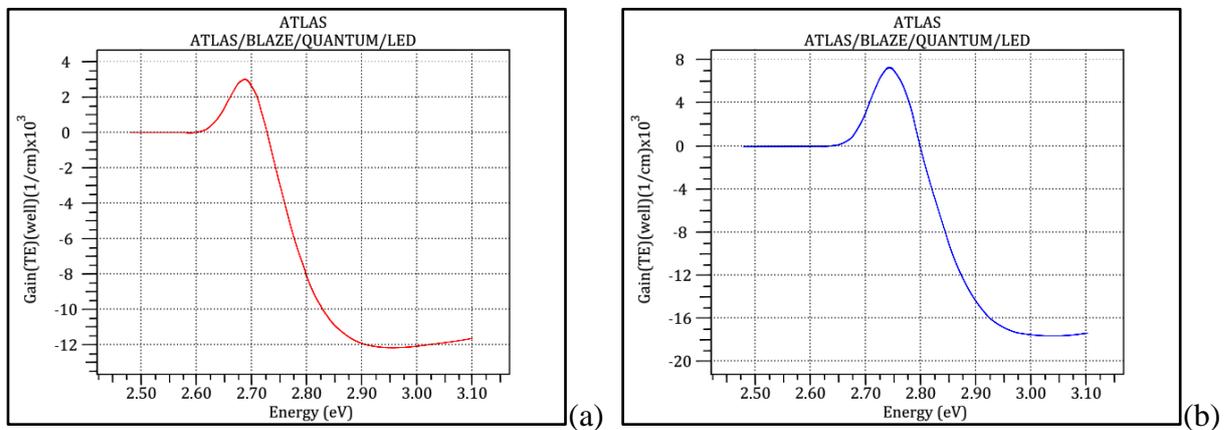


Figure IV.12: Le gain optique (a) LED1 p-GaN/InGaN/n-GaN/GaN, (b) LED2 p-GaN/p-AlGaIn/InGaN/n-GaN/GaN.

IV.3.5.5.5 Flux lumineux

Le flux lumineux étant une caractéristique très importante des diodes électroluminescentes ; les figures IV.13 (a) et (b) illustrent le flux lumineux en fonction de l'énergie à 5V. Le flux lumineux pour la LED2 est $8.49 \times 10^{18} \text{ s}^{-1} \text{ cm}^{-1} \text{ eV}^{-1}$ à une énergie de 2.75eV, alors qu'il n'est que $3.98 \times 10^{18} \text{ s}^{-1} \text{ cm}^{-1} \text{ eV}^{-1}$ pour la LED1 à une énergie de 2.70eV. Le flux lumineux est multiplié par 2, dans la LED2.

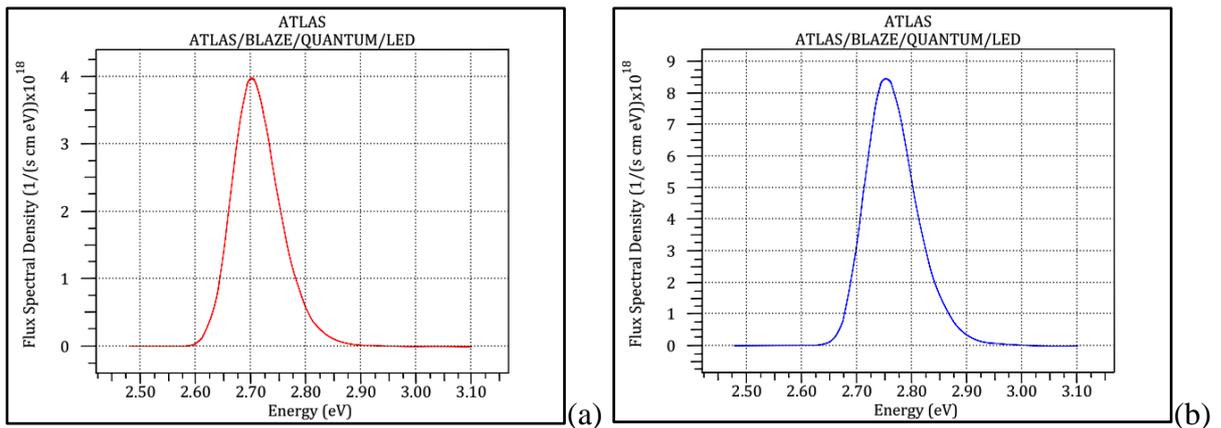


Figure IV.13: Le flux lumineux (a) LED1 p-GaN/InGaN/n-GaN/GaN,
(b) LED2 p-GaN/p-AlGaN/InGaN/n-GaN/GaN.

IV.3.5.5.6 Densité spectrale de puissance

La densité spectrale de puissance est la grandeur mesurée par le spectromètre ; les figures IV.14 (a) et (b) la représentent alors en fonction de la longueur d'onde, à 3.5V. Pour LED1, nous obtenons un pic de la densité spectrale de puissance de 1.72W/cm.eV à une longueur d'onde de 459nm . Pour LED2, nous obtenons un pic de la densité spectrale de puissance 3.75W/cm eV à une longueur d'onde de 450nm . Nous avons alors pratiquement la même longueur d'onde, mais une puissance plus grande dans la deuxième LED ; soit un rapport de 2.18 entre les deux LEDs.

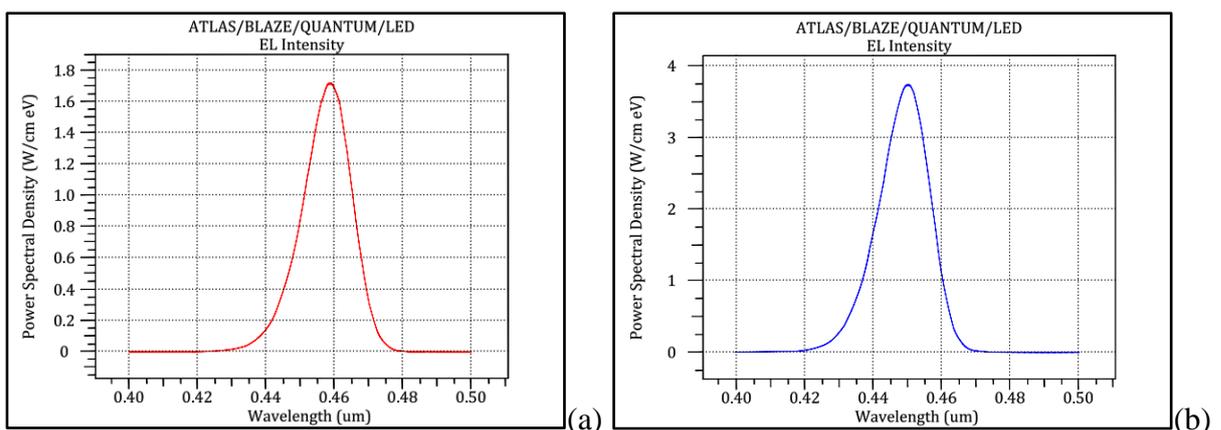


Figure IV.14: Spectre d'électroluminescence a) LED1 p-GaN/InGaN/n-GaN/GaN,
(b) LED2 p-GaN/p-AlGaN/InGaN/n-GaN/GaN.

IV.3.5.5.7 Rendement global

Le rendement le plus pertinent est le rendement global (η_{WP}) ou rendement à la prise (Wall Plug Efficiency : WPE) de la DEL ; il est donné par le rapport entre la puissance optique émise et la puissance électrique appliquée, soit : $\eta_{WP} = P_{opt} / P_{elec}$.

Les figures IV.15 (a) et (b) illustrent le rendement à la prise en fonction du courant injecté. Le WPE augmente en fonction du courant, rapidement au début pour atteindre un maximum de 61.75% à un courant de 0.013mA pour LED1 (densité de courant d'environ $32.5A.cm^{-2}$), et 64.02% à un courant de 0.029mA pour LED2 (densité de courant d'environ $72.5A.cm^{-2}$) ; puis il diminue. Cette amélioration significative de l'efficacité de la LED2 peut être attribuée principalement à l'amélioration de l'injection de trous ainsi qu'au confinement des électrons, en particulier à fort courant d'injection [7].

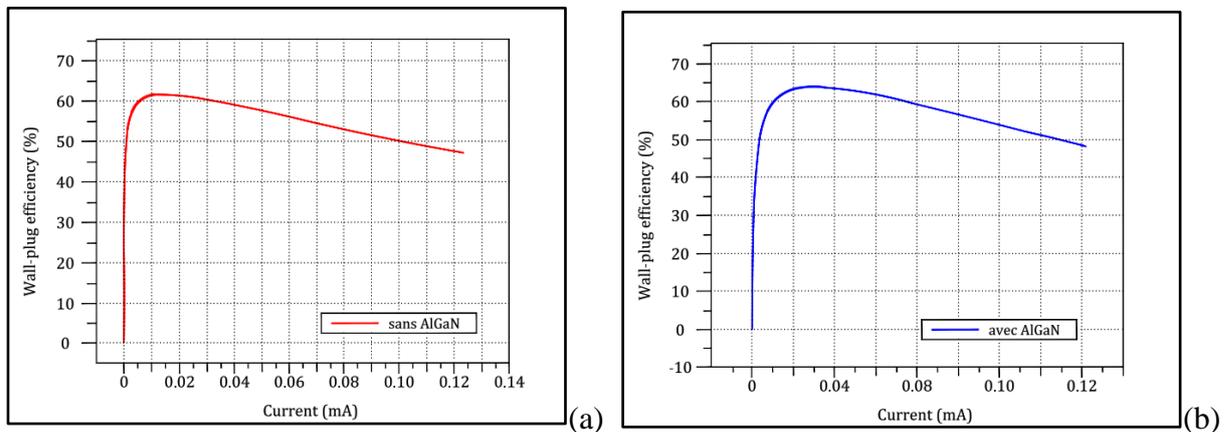


Figure IV.15: Rendement à la prise (a) LED1 p-GaN/InGaN/n-GaN/GaN, (b) LED2 p-GaN/p-AlGaN/InGaN/n-GaN/GaN.

Nous remarquons une amélioration remarquable dans les propriétés optiques pour la LED2 qui contient une couche de blocage électronique AlGaN : cette dernière couche peut supprimer le débordement d'électrons en dehors de la région active InGaN et réduit leur fuite, améliorant ainsi les performances de la LED.

IV.3.6 Effets des paramètres physiques sur les performances des deux diodes

IV.3.6.1 Effet de la tension de polarisation sur la caractéristique (I-V)

Les figures IV.16 (a) et (b) représentent la caractéristique (I-V) en fonction de tension de polarisation.

Pour les trois polarisations des deux diodes, la tension de seuil est la même ainsi que la pente du courant.

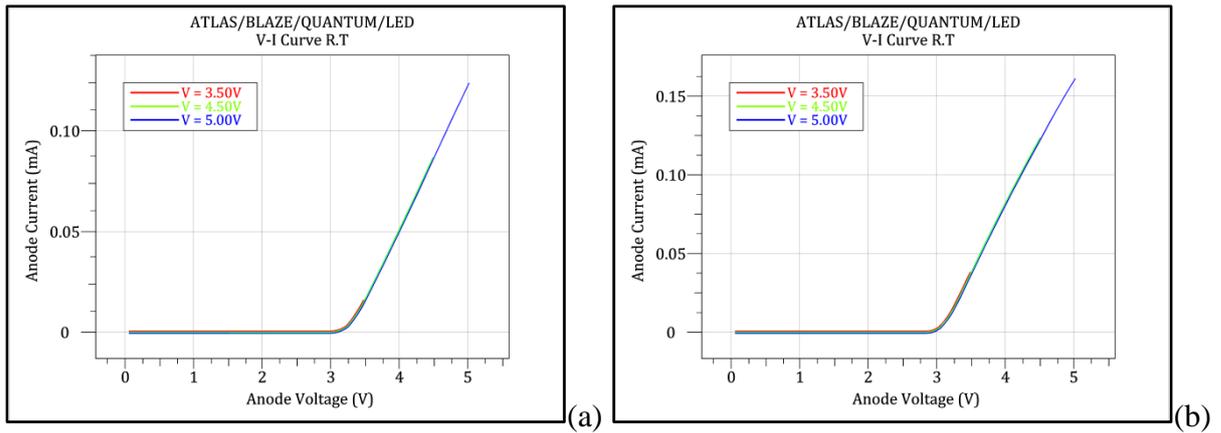


Figure IV.16: Effet de la tension de polarisation sur la caractéristique (I-V)

(a) LED1 p-GaN/InGaN/n-GaN/GaN, (b) LED2 p-GaN/p-AlGaInGaN/n-GaN/GaN.

IV.3.6.2 Effet de la tension de polarisation sur la puissance de sortie

Les variations des caractéristiques de puissance (P-I) en fonction de la tension de polarisation est donnée par les figures IV.17 (a) et (b). Les courbes ont la même pente.

La meilleure puissance lumineuse est obtenue pour une tension anode de 5V ; la pente de la courbe nous renseigne sur le rendement interne de la LED.

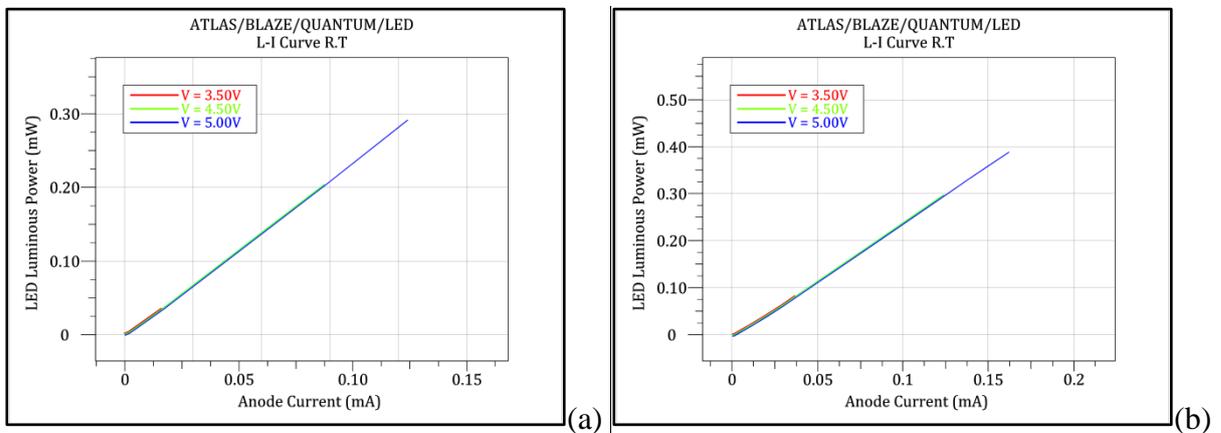


Figure IV.17 : Effet de la tension de polarisation sur la puissance lumineuse

(a) LED1 p-GaN/InGaN/n-GaN/GaN, (b) LED2 p-GaN/p-AlGaInGaN/n-GaN/GaN.

Les résultats obtenus pour le courant et la puissance, sont donnés dans le tableau IV.3.

LEDs	Sans EBL (LED1)			Avec EBL (LED2)		
	3.5	4.5	5.0	3.5	4.5	5.0
Tension de polarisation (V)	3.5	4.5	5.0	3.5	4.5	5.0
V_{TH} (V)	3.05	3.05	3.05	2.95	2.95	2.95
I (mA)	0.0165	0.087	0.127	0.038	0.123	0.162
P (mW)	0.036	0.20	0.29	0.085	0.29	0.39

Tableau IV.3: Les résultats obtenus pour le courant et la puissance, en fonction de la tension de polarisation.

IV.3.6.3 Effet de la tension de polarisation sur la densité spectrale de puissance

Les figures IV.18 (a) et (b) montrent le spectre électroluminescent émis à des valeurs de tension de 3.5V, 4.5V et 5.0V.

Une augmentation remarquable du pic est observée avec une légère diminution de la longueur d'onde d'émission et un élargissement du spectre de la densité vers les grandes énergies du spectre visible.

Lorsque la tension augmente, la concentration en porteurs de charge dans le puits quantique augmente ; en plus, il y a des porteurs de charge mis en jeu qui possèdent des énergies correspondant au violet.

Les résultats obtenus pour la densité spectrale de puissance pour les trois tensions, sont donnés dans le tableau IV.4.

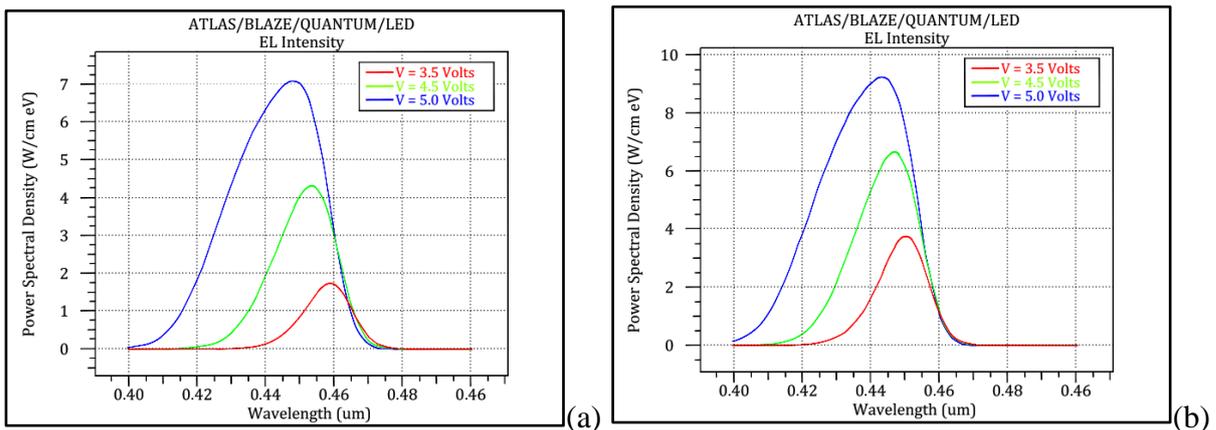


Figure IV.18: Effet de la tension de polarisation dans (a) LED1 p-GaN/InGaN/n-GaN/GaN, (b) LED2 p-GaN/p-AlGaIn/n-GaN/GaN.

LEDs	(LED1)		(LED2)	
Tension (V)	EL _{max} (W/cm eV)	λ_{peak} (nm)	EL _{max} (W/cm eV)	λ_{peak} (nm)
3.5	1.72	459	3.75	450
4.5	4.28	453	6.65	447
5.0	7.08	448	9.23	443

Tableau IV.4: Les valeurs du spectre électroluminescent.

IV.3.6.4 Effet de la tension de polarisation sur le rendement global

Les figures IV.19 (a) et (b) montrent le rendement global en fonction du courant sous l'effet de la tension de polarisation, à des valeurs de tension de 3.5V, 4.5V et 5.0V.

On observe un rendement global maximum à un très faible courant, puis il diminue rapidement dans les deux LED. Le même rendement est obtenu pour les trois tensions.

Pour LED1 ; nous avons un rendement maximum de 61.75% à un courant de 0.013mA.

Pour LED2 ; nous avons un rendement maximum de 64.02% à un courant de 0.029mA.

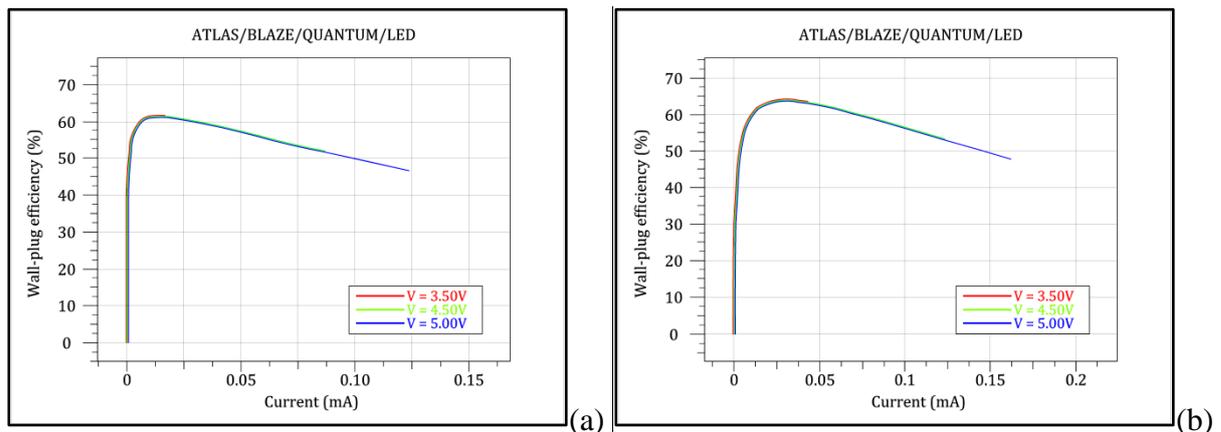


Figure IV.19: Effet de la tension de polarisation sur le rendement global des deux LEDs.

IV.3.6.5 Effet de la température sur la caractéristique (I-V)

La température est un facteur très important qui influe sur les caractéristiques des diodes électroluminescentes. Les figures IV.20 (a) et (b) représentent la caractéristique (I-V) en fonction de la température ($T = 300, 350$ et 400 K) pour une tension de 5V. On remarque que le courant injecté augmente avec la température jusqu'à 400K. Les valeurs sont données dans le tableau IV.5.

Au-delà de 400K, ce que nous n'avons pas représenté ici ; le courant va diminuer, cela est dû à l'augmentation des interactions.

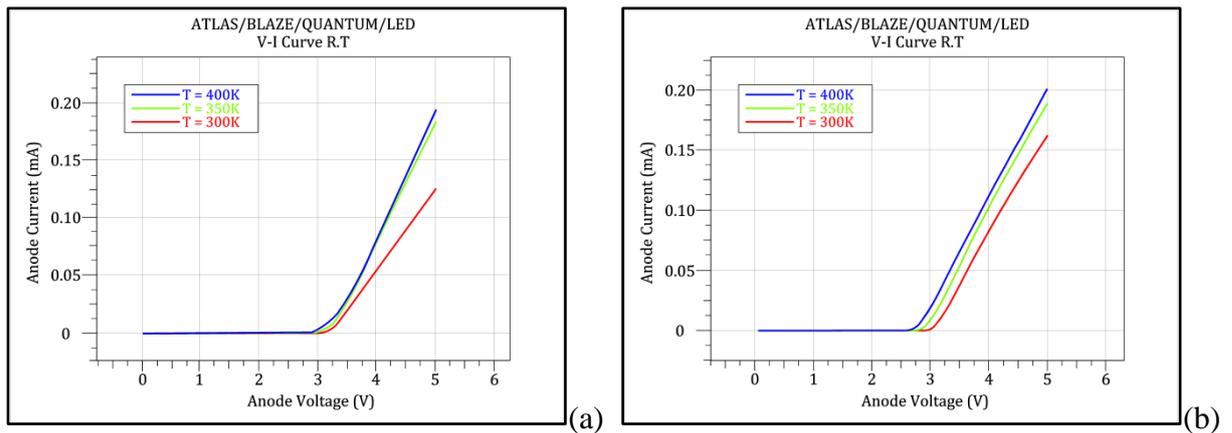


Figure IV.20: Effet de la température sur la caractéristique (I-V)

(a) LED1 p-GaN/InGaN/n-GaN/GaN, (b) LED2 p-GaN/p-AlGaInGaN/n-GaN/GaN.

IV.3.6.6 Effet de la température sur la puissance de sortie (P-I)

Les variations de la caractéristique de puissance (P-I) en fonction de la température, pour une tension anode de 5V, sont données par les figures IV.21 (a) et (b). Pour LED1 ; la puissance augmente de 300K à 350K, puis elle diminue à 400K. Pour LED2 ; la puissance est pratiquement la même pour 350K et 400K, bien supérieure à celle obtenue à 300K.

Au tableau IV.5, nous donnons les résultats obtenus pour la puissance en fonction du courant, pour les trois températures considérées.

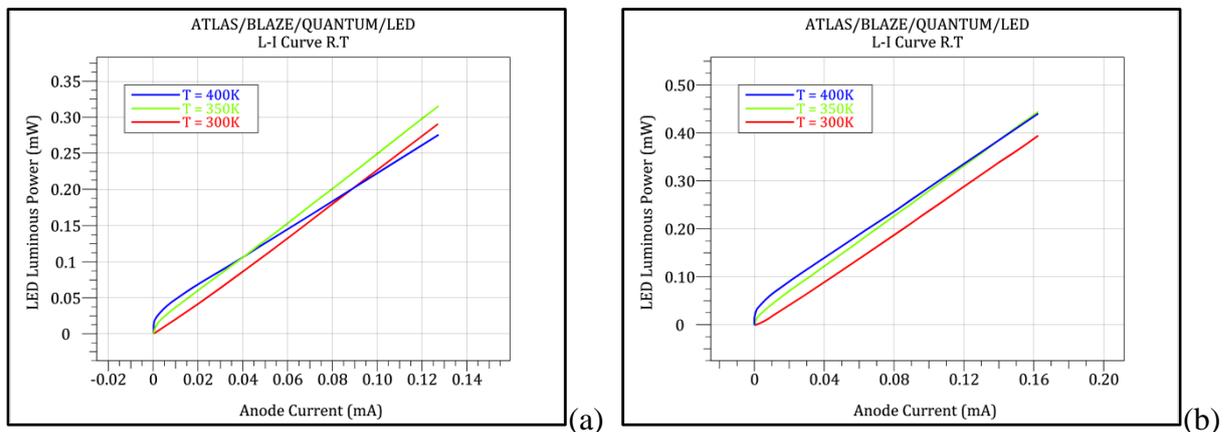


Figure IV.21: Effet de la température sur la puissance lumineuse

(a) LED1 p-GaN/InGaN/n-GaN/GaN, (b) LED2 p-GaN/p-AlGaInGaN/n-GaN/GaN.

LEDs	Sans EBL (LED1)			Avec EBL (LED2)		
	Température (K)	300	350	400	300	350
VTH (V)	3.05	3.00	2.85	2.95	2.85	2.65
I (mA) à 5 V	0.127	0.18	0.19	0.162	0.19	0.2
P (mW) à 5 V	0.29	0.31	0.27	0.39	0.45	0.44

Tableau IV.5: Les résultats obtenus pour la puissance, en fonction de la température.

IV.3.6.7 Effet de la température sur la densité spectrale de puissance

Les figures IV.22 (a) et (b) représentent la variation de la densité spectrale de puissance pour différentes températures (300, 350 et 400K), à 3.5V.

Les spectres EL varient légèrement avec la variation de la température ; nous observons une réduction de leur maximum avec un léger décalage vers des longueurs d'onde plus petites. Quand la température augmente, les interactions avec les phonons augmentent et les niveaux profonds sont plus excités ; ceci diminue alors la luminescence.

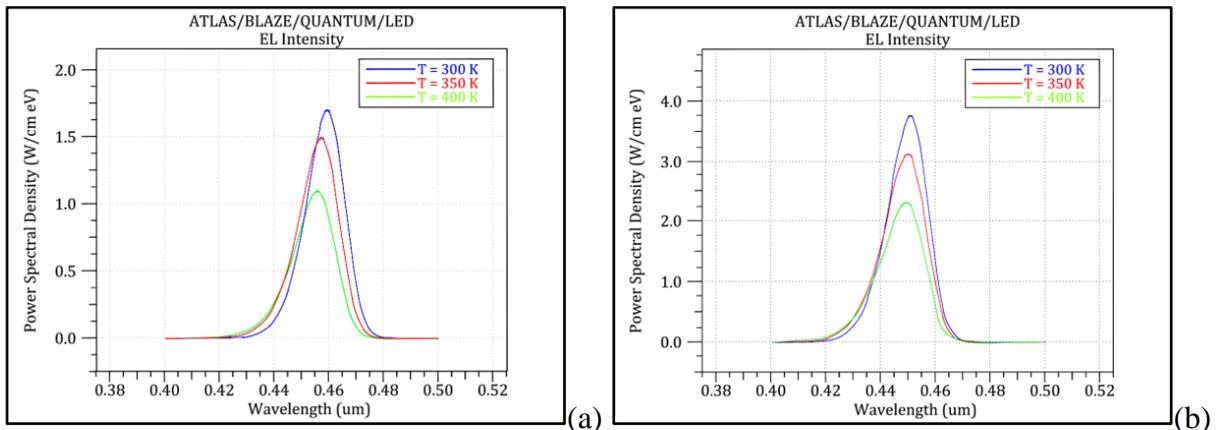


Figure IV.22: Effet de la température sur la densité spectrale de puissance

(a) LED1 p-GaN/InGaN/n-GaN/GaN, (b) LED2 p-GaN/p-AlGaInGaN/n-GaN/GaN.

LEDs	(LED1)		(LED2)		
	Température (K)	EL _{max} (W/cm eV)	λ_{peak} (nm)	EL _{max} (W/cm eV)	λ_{peak} (nm)
300		1.72	459	3.75	450
350		1.49	457	3.11	450
400		1.09	456	2.30	448

Tableau IV.6 : Résultats du spectre électroluminescent en fonction de la température.

IV.3.6.8 Effet de la température sur le rendement global

La variation du rendement global en fonction du courant sous l'effet de la température à 5V, est représentée sur les figures IV.23 (a) et (b). On remarque que le maximum de rendement diminue avec l'élévation de la température. Les interactions non radiatives augmentent avec la température, ceci induit une diminution du rendement.

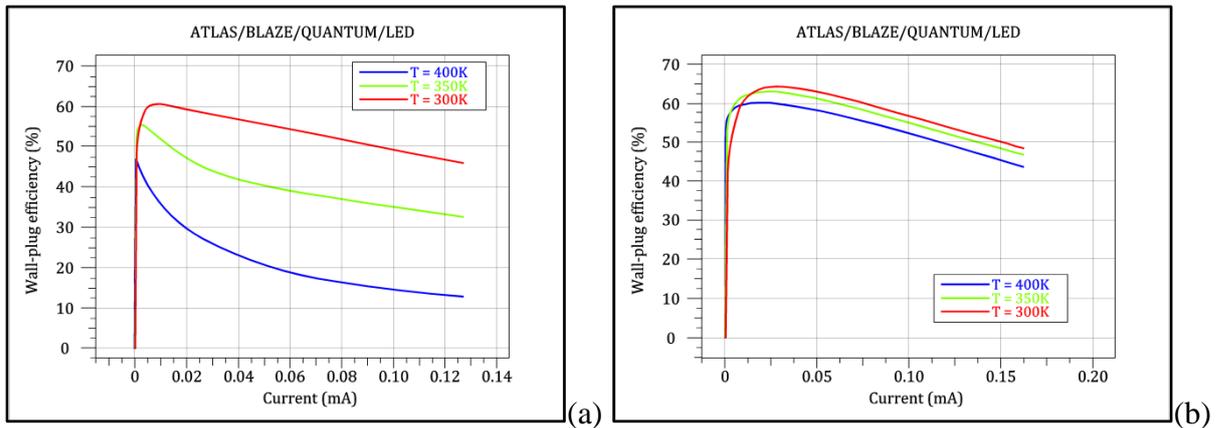


Figure IV.23: Effet de la température sur le rendement global des deux LEDs.

Tous les résultats obtenus des caractéristiques sont donnés par le tableau IV.7.

LEDs	Sans EBL (LED1)	Avec EBL (LED2)	
Le Champ électrique (V/cm)	0.12×10^6	0.70×10^6	
V_{TH} (V)	3.05	2.95	
I_{max} (mA) à 5 V	0.127	0.162	
P_{max} (mW) à 5 V	0.29	0.39	
Le taux d'émission spontanée ($s^{-1} cm^{-3} eV^{-1}$)	0.12×10^{30}	0.25×10^{30}	
Le taux de recombinaison radiative ($cm^{-3}s^{-1}$)	0.87×10^{-18}	3.41×10^{-18}	
Le taux de recombinaison Auger ($cm^{-3}s^{-1}$)	0.641×10^{-27}	42.8×10^{-27}	
Le gain optique (cm^{-1})	3.03×10^3	7.27×10^3	
Le flux lumineux ($s^{-1} cm^{-1} eV^{-1}$)	3.98×10^{18}	8.49×10^{18}	
EL_{max} (W/cm eV)	à 3.5 V	1.72	3.75
	à 5.0 V	7.08	9.23
Maximum WPE (%)	61.75	64.02	

Tableau IV.7 : Caractéristiques électriques et optiques des deux LEDs sans et avec couche de blocage électronique AlGaIn.

Conclusion

En résumé, nous avons étudié l'influence de la couche de blocage électronique AlGaN sur les performances électriques et optiques des LEDs InGaN/GaN. Les résultats de la simulation montrent que dans les structures sans couche de blocage, il y a une possible fuite de courant qui entraîne de très faibles densités d'électrons et de trous dans le QW. Par conséquent, l'adoption d'une couche de blocage électronique AlGaN remède à ce problème et améliore les performances du dispositif.

IV.4 Effet du bore dans le puits quantique des LED bleues p-GaN/p-AlGaN/InGaN/n-GaN/GaN et p-GaN/p-AlGaN/BInGaN/n-GaN/GaN

IV.4.1 Introduction

Dans cette recherche, nous étudions les propriétés optoélectroniques des LED bleues p-GaN/p-AlGaN/InGaN/n-GaN/GaN et p-GaN/p-AlGaN/BInGaN/n-GaN/GaN, à l'aide du simulateur SILVACO TCAD. Il est suggéré d'incorporer une petite quantité de bore dans le puits quantique InGaN, tout en essayant de conserver la même énergie de bande interdite ; nous prenons donc 22% d'indium dans InGaN pour la première LED, 1% de bore et 22% d'indium dans BInGaN pour la deuxième LED.

IV.4.2 Structures et paramètres

La conception des LED bleues à simple puits quantique est réalisée par ATLAS ; les structures sont illustrées par les figures IV.24 (a) et (b).

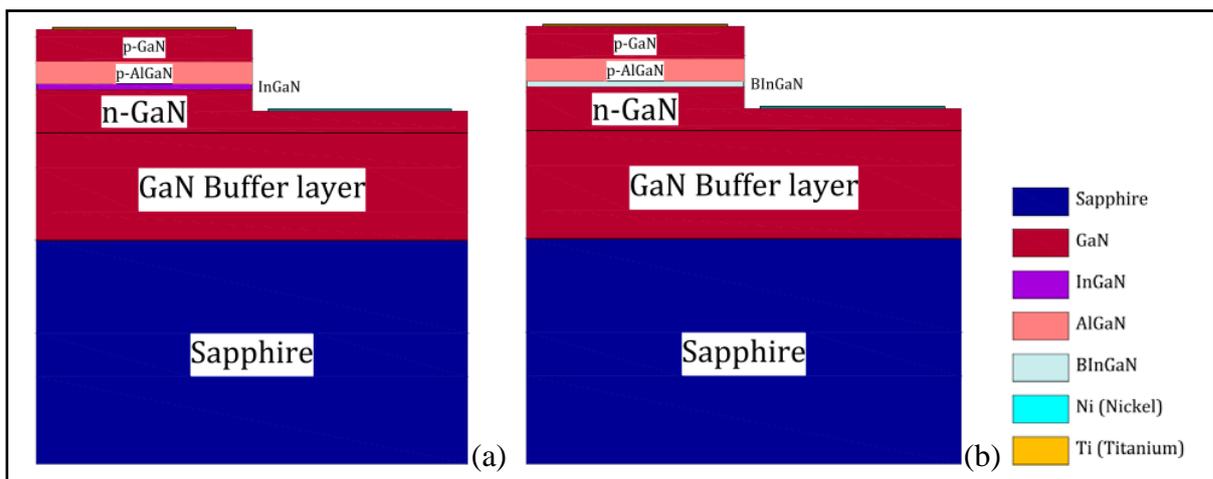


Figure IV.24: Structure schématique des LEDs (a) p-GaN/p-AlGaN/InGaN/n-GaN/GaN et (b) p-GaN/p-AlGaN/BInGaN/n-GaN/GaN.

La LED bleue conventionnelle n'est autre que la LED2 déjà étudiée (figure IV.24 (a)) ; elle comporte un substrat saphir de plan c, une couche tampon GaN d'épaisseur 500nm, une couche n-GaN d'épaisseur 200nm ($n = 1 \times 10^{18} \text{cm}^{-3}$), un seul puits quantique $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ d'épaisseur 3nm (non dopé), une couche de blocage d'électrons $\text{Al}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{N}$ d'épaisseur 100nm ($p = 1 \times 10^{17} \text{cm}^{-3}$) et une couche p-GaN d'épaisseur 150nm ($p = 1 \times 10^{17} \text{cm}^{-3}$). Le dispositif a une forme rectangulaire de $2\mu\text{m} \times 2\mu\text{m}$; les électrodes ayant une épaisseur de 10nm sont en Nickel (Ni) pour le contact de type p et en titane (Ti) pour le contact de type n. Dans la figure IV.24 (b), la deuxième structure notée LED3 est la même, sauf que la région active InGaN est remplacée par une région active BInGaN. Les énergies de bande interdite de $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ et de $\text{B}_y\text{In}_x\text{Ga}_{1-x-y}\text{N}$ (à la température ambiante) sont calculées à l'aide des équations (IV.1) et (IV.2).

$$Eg_{\text{InGaN}} = xEg(\text{InN}) + (1 - x)Eg(\text{GaN}) - x(1 - x)b \quad (\text{IV.1})$$

Où x est la fraction molaire d'indium, $Eg(\text{InN}) = 0.7 \text{ eV}$ [8], $Eg(\text{GaN}) = 3.4 \text{ eV}$ [9] et le paramètre de courbure $b = 1.43$ [10].

$$Eg(\text{B}_y\text{In}_x\text{Ga}_{1-x-y}\text{N}) = \frac{xy.Eg(\text{BInN}).u + y(1-x-y).Eg(\text{InGaN}).v + (1-x-y).x.Eg(\text{BGaN}).w}{xy + y(1-x-y) + x(1-x-y)} \quad [11] \quad (\text{IV.2})$$

Les énergies de bande interdite de $\text{B}_y\text{Ga}_{1-y}\text{N}$ et de $\text{B}_y\text{In}_{1-y}\text{N}$ sont calculées à l'aide des équations (IV.3) et (IV.4).

$$Eg_{\text{B}_y\text{Ga}_{1-y}\text{N}} = yEg(\text{BN}) + (1 - y)Eg(\text{GaN}) - y(1 - y)c \quad (\text{IV.3})$$

$$Eg_{\text{B}_y\text{In}_{1-y}\text{N}} = yEg(\text{BN}) + (1 - y)Eg(\text{InN}) - y(1 - y)d \quad (\text{IV.4})$$

Où y est la fraction molaire de bore, $Eg(\text{BN}) = 5.5 \text{ eV}$ [12, 13], le paramètre de courbure $c = 9$ [14] et le paramètre de courbure $d = 14$ [14].

$$u = (1-x-y) / 2; v = (2-x-2y) / 2; w = (2-2x-y) / 2.$$

L'énergie de la bande interdite de $\text{B}_{0.01}\text{Ga}_{0.99}\text{N}$ est alors 3.32 eV et celle de $\text{B}_{0.01}\text{In}_{0.99}\text{N}$ 3.28eV. L'énergie de la bande interdite de $\text{In}_{0.22}\text{Ga}_{0.78}\text{N}$ est 2.56eV et celle de $\text{B}_{0.01}\text{In}_{0.22}\text{Ga}_{0.77}\text{N}$ est 2.54eV.

Les propriétés physiques et optiques des LED sont étudiées numériquement à l'aide du logiciel Silvaco Atlas, capable de traiter les propriétés physiques des LED au moyen de l'équation de Poisson, des équations de continuité, de recombinaison Shockley–Read–Hall et

d'un modèle statistique Fermi Dirac. La simulation est effectuée à température ambiante ($T = 300\text{K}$).

Avec les modèles utilisés dans la première partie, on ne peut pas simuler la structure p-GaN/p-AlGaIn/BInGaIn/n-GaN/GaN, à cause de la présence du matériau quaternaire BInGaIn. Nous utilisons alors les modèles : srh fermi li spont.

IV.4.3 Résultats et discussion

IV.4.3.1 Diagramme de bande

Le diagramme de bande d'énergie est illustré par les figures IV.25 (a) et (b).

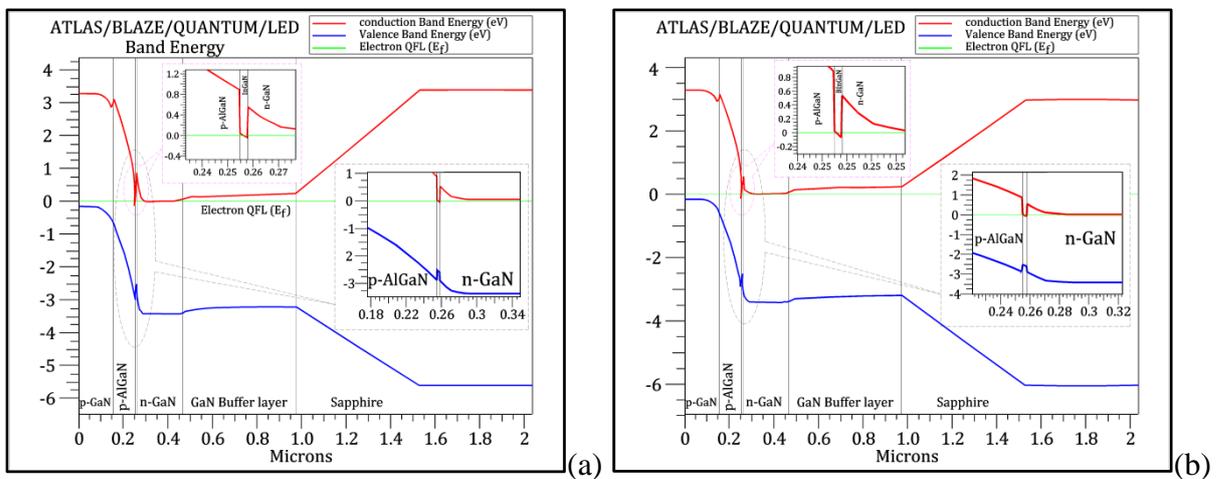


Figure IV.25: Diagramme de bande d'énergie dans (a) LED2

p-GaN/p-AlGaIn/InGaIn/n-GaN/GaN, (b) LED3 p-GaN/p-AlGaIn/BInGaIn/n-GaN/GaN.

Les LED émettent de la lumière lorsque les électrons de la bande de conduction se recombinent avec des trous dans la bande de valence, par recombinaison radiative. En fonctionnement normal, ce processus convertit une grande partie de l'énergie injectée en lumière et produit très peu de chaleur. Les LED bleues sont cruciales car les photons qui donnent la couleur bleue correspondent aux plus hautes énergies détectables par l'œil humain [15].

IV.4.3.2 Caractéristiques électriques

IV.4.3.2.1 Caractéristique (I-V)

Les caractéristiques (I-V) des LED sont illustrées par les figures IV.26 (a) et (b). Nous obtenons des tensions de seuil (V_{TH}) de 2.95V et 2.75V, respectivement pour LED2 et LED3. Pour une tension d'anode de 5V ; nous obtenons un courant de 0.23mA (densité de courant de

5.75kA/cm^2) et environ 0.24mA (densité de courant de 6kA/cm^2), respectivement pour LED2 et LED3. C'est pratiquement le même courant, avec une tension de seuil plus petite pour LED3.

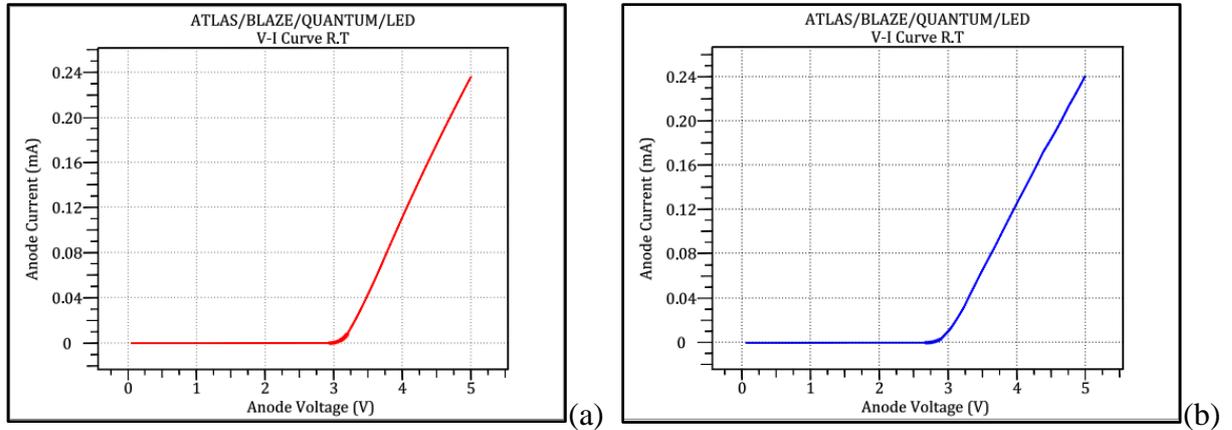


Figure IV.26: Caractéristique I-V (a) LED2 p-GaN/p-AlGaIn/InGaIn/n-GaN/GaN, (b) LED3 p-GaN/p-AlGaIn/BInGaIn/n-GaN/GaN.

IV.4.3.2.2 Puissance lumineuse émise

Les figures IV.27 (a) et (b) montrent la puissance lumineuse de sortie en fonction du courant d'anode, pour les deux LED. Nous obtenons une puissance lumineuse d'environ 0.57mW et 0.61mW pour le même courant 0.24mA , respectivement pour LED2 et LED3.

L'interface GaN/InGaIn est moins contrainte et la discontinuité de la polarisation est réduite lorsque du bore est ajouté dans l'alliage InGaIn ; on obtient un meilleur accord de réseau avec GaN [16].

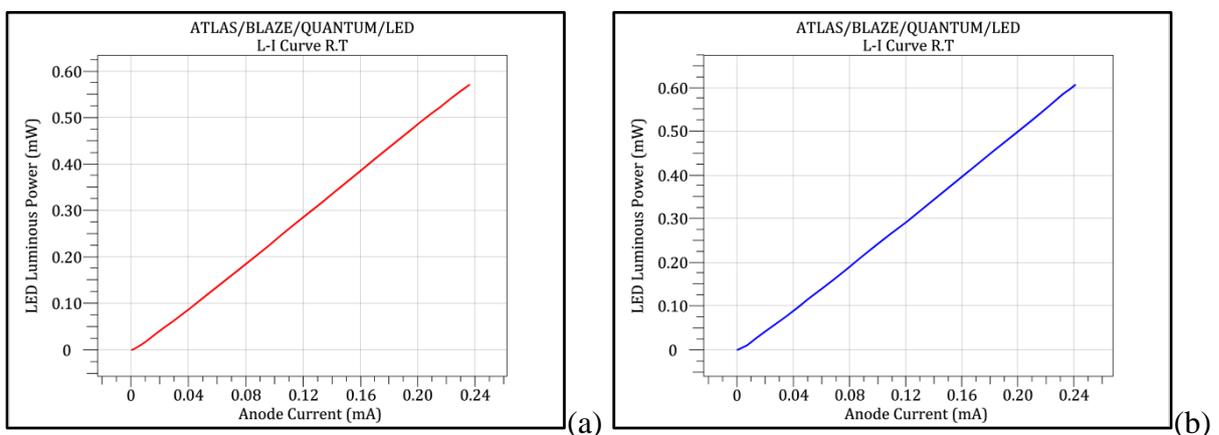


Figure IV.27: La puissance lumineuse en fonction du courant d'anode (a) LED2 et (b) LED3.

IV.4.3.3 Caractéristiques optiques

IV.4.3.3.1 Taux d'émission spontanée

Les figures IV.28 (a) et (b) illustrent les spectres d'émission spontanée à polarisation TE en fonction de la longueur d'onde, des LED à SQW à $T = 300\text{ K}$, pour un courant 0.24mA . Pour LED2, le pic du taux d'émission spontanée est $3.46 \times 10^{29}\text{ s}^{-1}\text{cm}^{-3}\text{eV}$ à une longueur d'onde de 457 nm ; pour LED3, le pic du taux d'émission spontanée est $3.13 \times 10^{29}\text{ s}^{-1}\text{cm}^{-3}\text{eV}$ à une longueur d'onde de 458nm . Lorsque du bore est ajouté, la résistance du matériau augmente et donc le nombre de porteurs de charge libres diminue d'où alors une diminution de l'émission spontanée [17].

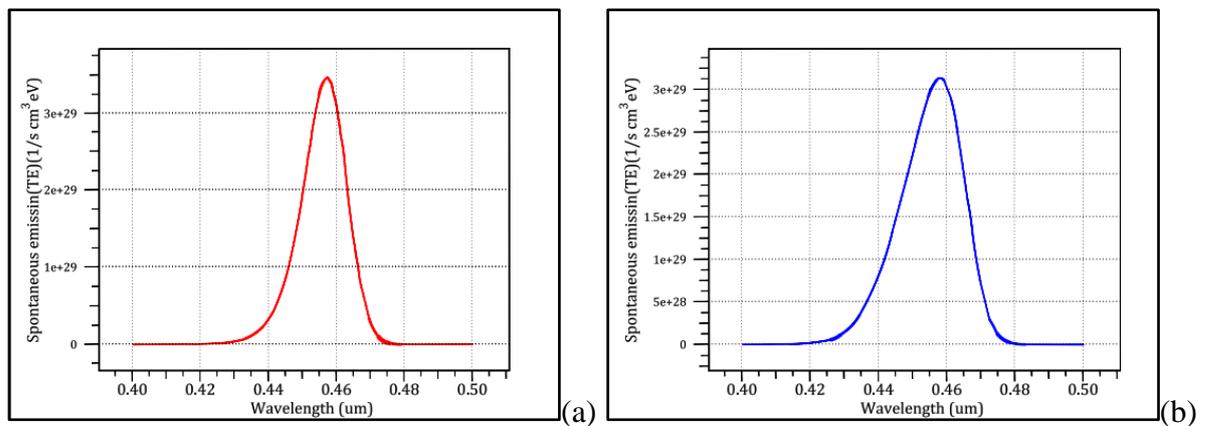


Figure IV.28: Émission spontanée (TE) en fonction de la longueur d'onde (a) LED2 et (b) LED3.

IV.4.3.3.2 Recombinaison radiative

La figure IV.29 illustre le taux de recombinaison radiative pour p-GaN/p-AlGaIn/BInGaIn/n-GaN/GaN (LED3) à $T = 300\text{K}$; nous obtenons un maximum de $0.61 \times 10^{-15}\text{ cm}^{-3}\text{s}^{-1}$, alors qu'il n'est que $3.41 \times 10^{-18}\text{ cm}^{-3}\text{s}^{-1}$ pour LED2 (voir page 90).

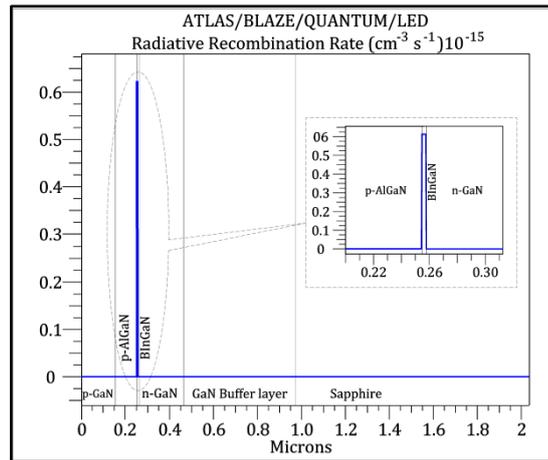


Figure IV.29: Recombinaison radiative dans LED3 p-GaN/p-AlGaIn/BInGaIn/n-GaN/GaN.

IV.4.3.3.3 Recombinaison Auger

La figure IV.30 illustre le taux de recombinaison Auger dans la LED3 p-GaN/p-AlGaIn/BInGaIn/n-GaN/GaN à $T = 300\text{K}$; nous obtenons un maximum de $1.26 \times 10^{-23} \text{ cm}^{-3} \text{ s}^{-1}$. Pour LED2, il est $4.28 \times 10^{-26} \text{ cm}^{-3} \text{ s}^{-1}$; cela peut être expliqué par le fait que dans la luminescence, il y a un compromis entre le dopage et la durée de vie Auger. Dans la LED3, le dopage diminue à cause du bore et donc la durée de vie Auger augmente ; ceci explique l'augmentation du taux de recombinaison Auger dans la LED3.

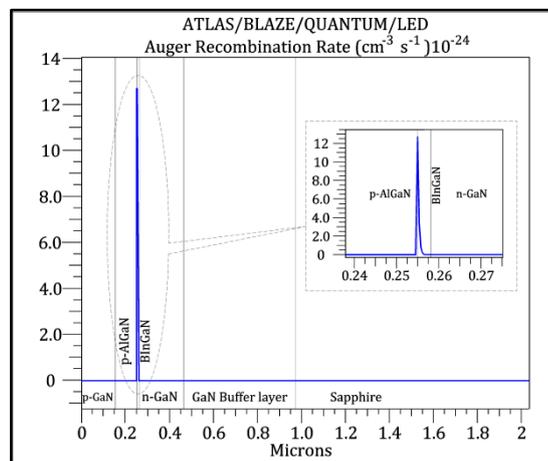


Figure IV.30: Recombinaison Auger dans p-GaN/p-AlGaIn/BInGaIn/n-GaN/GaN.

IV.4.3.3.4 Gain optique

Sur les figures IV.31 (a) et (b), nous présentons le gain optique en fonction de l'énergie pour les LED2 et LED3.

Nous obtenons un maximum de gain d'environ $10.24 \times 10^3 \text{ cm}^{-1}$ à une énergie $\sim 2.71\text{eV}$ pour LED2, et $11.3 \times 10^3 \text{ cm}^{-1}$ à une énergie de 2.70eV pour LED3.

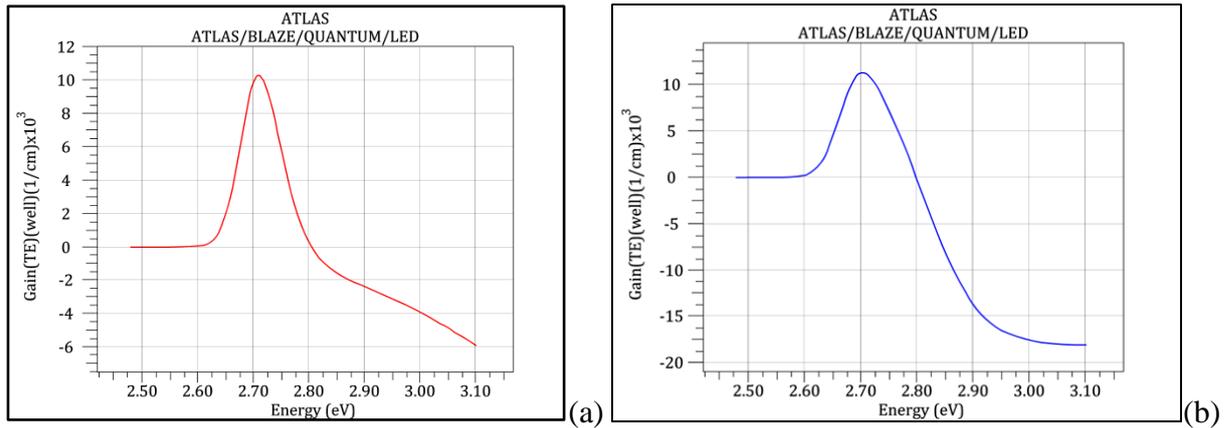


Figure IV.31: Le gain optique (a) LED2 et (b) LED3.

IV.4.3.3.5 Flux lumineux

Le flux lumineux en fonction de l'énergie pour les deux LED, est représenté sur les figures IV.32 (a) et (b).

Le maximum est obtenu pratiquement à la même énergie $\sim 2.72\text{eV}$. Il est $3.6 \times 10^{18} \text{ s}^{-1} \text{ cm}^{-1} \text{ eV}^{-1}$ pour la LED3, et $11.4 \times 10^{18} \text{ s}^{-1} \text{ cm}^{-1} \text{ eV}^{-1}$ pour LED2. Le flux lumineux est donc amélioré par l'incorporation du bore dans le puits quantique.

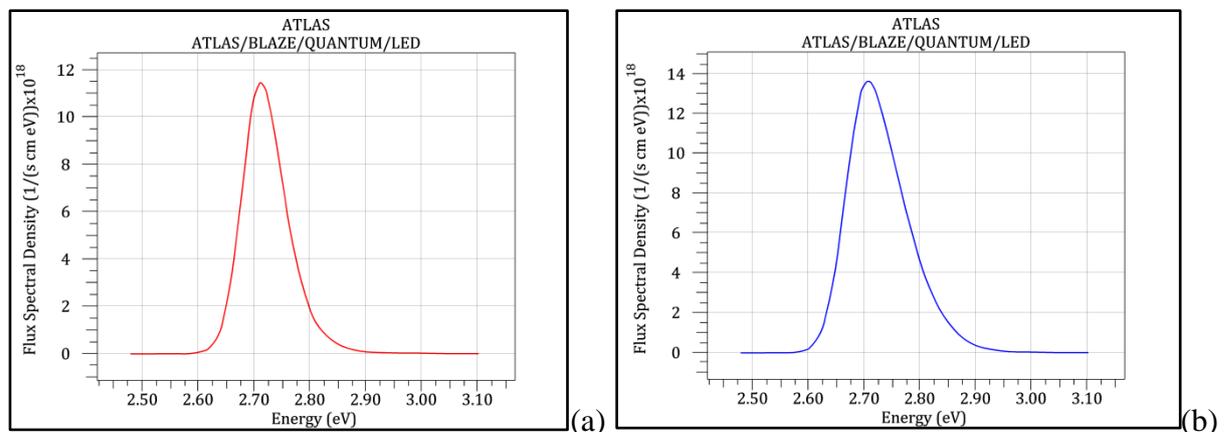


Figure IV.32: Le flux lumineux (a) LED2 et (b) LED3.

IV.4.3.3.6 Densité spectrale de puissance

Les figures IV.33 (a) et (b) représentent la densité spectrale de puissance en fonction de la longueur d'onde à 3.5V de la tension d'anode, pour les LED.

Nous avons un maximum de 4.97W/cm eV à une longueur d'onde de 457nm pour la LED2, et un maximum de 5.89W/cm eV à une longueur d'onde de 458nm pour la LED3. Il est possible d'obtenir un bon accord entre les paramètres du réseau BInGaN et du réseau GaN avec une

concentration de bore bien adaptée, BInGaN peut être plus facilement élaboré en couches épaisses, améliorant ainsi l'efficacité des LED.

On peut fixer le contenu en bore pour avoir une longueur d'onde d'émission de BInGaN proche de celle de InGaN. En faisant varier la concentration en bore, on peut avoir les longueurs d'ondes dans tout le spectre visible [18].

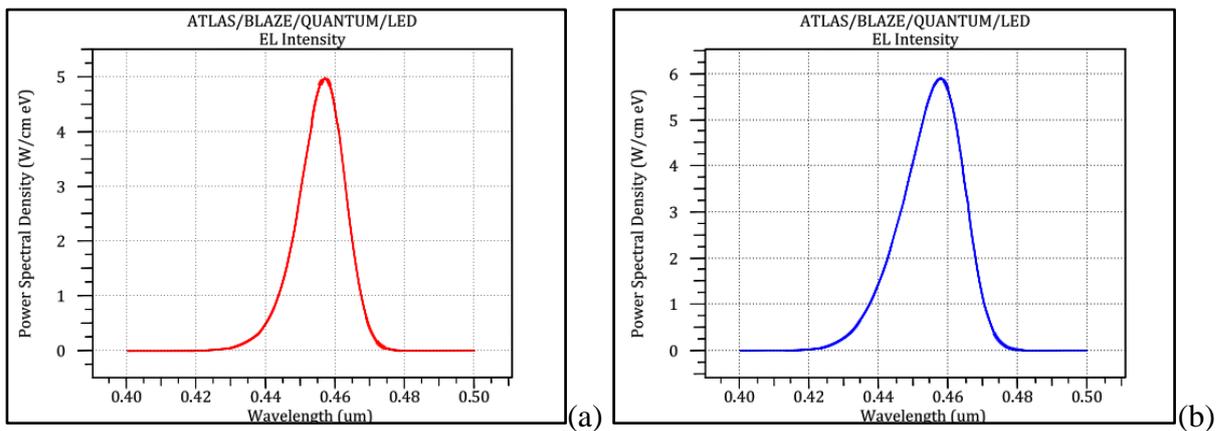


Figure IV.33: Spectre d'électroluminescence (a) LED2 et (b) LED3.

IV.4.3.3.7 Rendement global (wall-plug efficiency – WPE)

Les figures IV.34 (a) et (b) montrent le rendement global ou le rendement à la prise (wall-plug efficiency – WPE) pour les deux LED, en fonction du courant à la température ambiante à 5 V. Pour la LED2, nous obtenons un maximum WPE ~ 64% à un courant de 0.033mA; pour la LED3, nous obtenons un WPE maximum de 68.76% à un courant de 0.037mA. Pour des courants plus élevés, l'efficacité diminue.

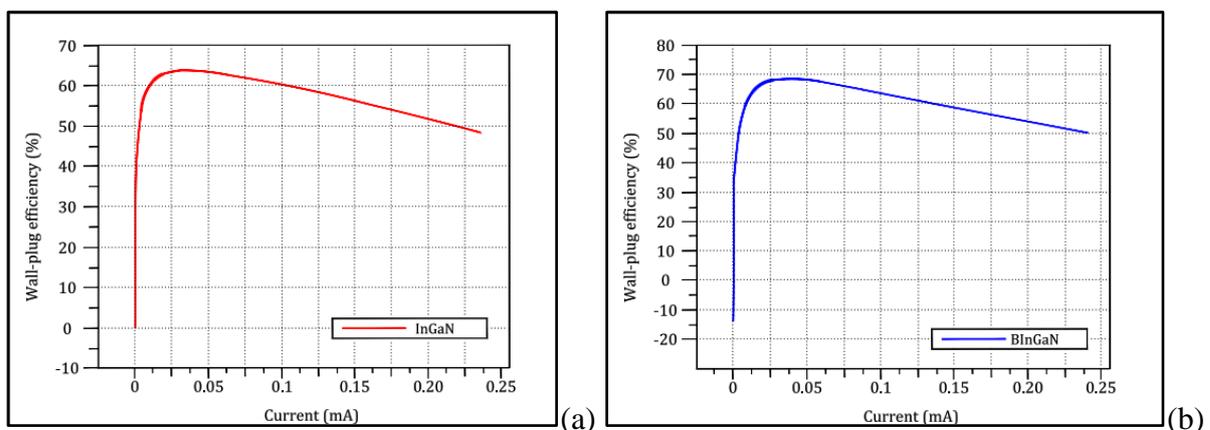


Figure IV.34: Rendement à la prise (a) LED2 et (b) LED3.

IV.4.4 Effets des paramètres physiques sur les performances des LEDs p-GaN/p-AlGaIn/n-GaN/GaN et p-GaN/p-AlGaIn/BInGaIn/n-GaN/GaN

IV.4.4.1 Effet de la tension de polarisation sur la densité spectrale de puissance

Les figures IV.35 (a) et (b) montrent le spectre électroluminescent émis à des valeurs de tension de 3.5V, 4.5V et 5.0V. Une augmentation remarquable du spectre est observée, car lorsque la tension augmente, la concentration en porteurs de charge dans le puits quantique augmente et le taux de recombinaison y augmente également. Il y a un décalage du pic et un élargissement de la largeur du spectre optique vers les grandes énergies, en augmentant la tension.

Pour 5V, la densité spectrale dans LED3 est plus petite que dans LED2 ; nous pensons que cela est dû à une plus grande réabsorption des photons en dehors de leur région de génération. Dans ce cas, la LED2 admet une plus grande densité mais elle émettrait plutôt dans le violet. Les résultats sont donnés par le tableau IV.8.

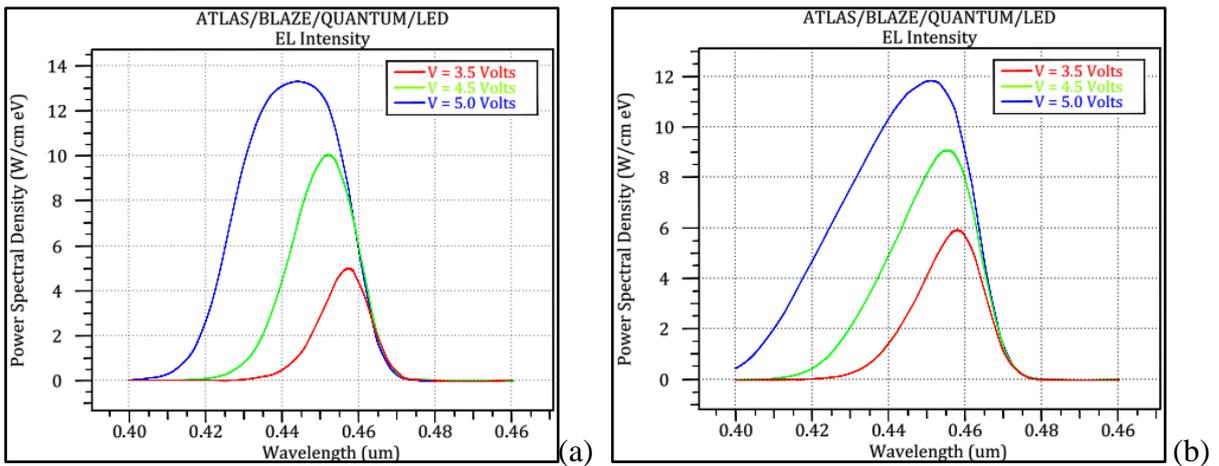


Figure IV.35: Effet de la tension dans (a) la LED2 et (b) la LED3.

LEDs	$\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ (LED2)		$\text{B}_y\text{In}_x\text{Ga}_{1-x-y}\text{N}$ (LED3)		
	Tension (V)	EL_{max} (W/cm eV)	λ_{peak} (nm)	EL_{max} (W/cm eV)	λ_{peak} (nm)
3.5		4.97	451	5.89	462
4.5		10.04	446	9.10	459
5.0		13.31	443	11.83	457

Tableau IV.8: Résultats du spectre électroluminescent.

IV.4.4.2 Effet de la température sur la densité spectrale de puissance

Les figures IV.36 (a) et (b) donnent les variations de la densité spectrale de puissance à 3.5V, pour différentes températures, pour $\text{In}_{0.22}\text{Ga}_{0.87}\text{N}/\text{GaN}$ (LED2) et $\text{B}_{0.01}\text{In}_{0.22}\text{Ga}_{0.77}\text{N}/\text{GaN}$ (LED3). Le maximum de densité est à 300K et il diminue quand la température augmente. Les résultats obtenus sont représentés dans le tableau IV.9.

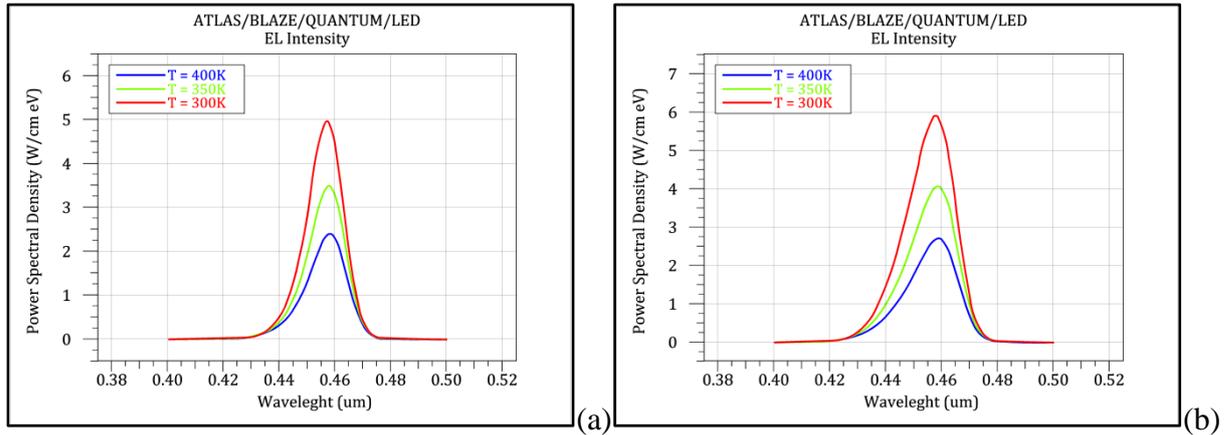


Figure IV.36: Effet de la température sur la densité spectrale de puissance dans (a) la LED2 et (b) la LED3.

LEDs	$\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ (LED2)		$\text{B}_y\text{In}_x\text{Ga}_{1-x-y}\text{N}$ (LED3)	
	EL_{max} (W/cm eV)	λ_{peak} (nm)	EL_{max} (W/cm eV)	λ_{peak} (nm)
300	4.97	457	5.89	458
350	3.49	457	4.06	458
400	2.40	458	2.70	458

Tableau IV.9: Résultats du spectre électroluminescent en fonction de la température.

Le puits quantique		$\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ (LED2)	$\text{B}_y\text{In}_x\text{Ga}_{1-x-y}\text{N}$ (LED3)
V_{TH} (V)		2.95	2.75
I (mA) à 5 V		0.23	0.24
P (mW) à 5 V		0.57	0.61
Le taux d'émission spontanée ($\text{s}^{-1} \text{cm}^{-3} \text{eV}^{-1}$)		3.46×10^{29}	3.13×10^{29}
Le taux de recombinaison radiative ($\text{cm}^{-3}\text{s}^{-1}$)		3.41×10^{-18}	0.61×10^{-15}
Le taux de recombinaison Auger ($\text{cm}^{-3}\text{s}^{-1}$)		4.28×10^{-26}	1.26×10^{-23}
Le gain optique (cm^{-1})		10.24×10^3	11.3×10^3
Le flux lumineux ($\text{s}^{-1} \text{cm}^{-1} \text{eV}^{-1}$)		11.4×10^{18}	13.6×10^{18}
EL_{max} (W/cm eV)	à 3.5 V	4.97	5.89
	à 5.0 V	13.31	11.83
Maximum WPE (%)		64	68.76

Tableau IV.10: Résultats obtenus pour les deux LED.

Conclusion

Les nitrures à base de bore récemment mis au point, offrent de nombreux avantages pour améliorer les performances des dispositifs optoélectroniques. Notre travail a été consacré à l'étude des LEDs ayant un puits quantique $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ et $\text{B}_y\text{In}_x\text{Ga}_{1-x-y}\text{N}$ avec une fraction molaire de bore de 1% et une fraction molaire d'indium de 22%.

Avec seulement 1% de bore, les caractéristiques électriques et optiques ont été améliorées. Nous avons notamment constaté une amélioration de 5% dans la puissance, de 18% dans la densité spectrale de puissance et de 7% dans le rendement à la prise.

Le semi-conducteur $\text{B}_y\text{In}_x\text{Ga}_{1-x-y}\text{N}$ est très prometteur pour être utilisé comme couche active dans une LED à simple puits quantique (SQW) pour un rendement et une densité spectrale de puissance élevés. Avec une fraction molaire de bore plus importante, les performances seraient encore meilleures.

IV.5 Simulation de LED à base d'InGaN avec EBL, sans et avec une couche barrière arrière p-GaN/p-AlGaN/InGaN/n-GaN/GaN et p-GaN/p-AlGaN/InGaN/n-GaN/BGaN/GaN

IV.5.1 Introduction

Dans cette partie, nous étudions les LED p-GaN/p-AlGaN/InGaN/n-GaN/GaN et p-GaN/p-AlGaN/InGaN/n-GaN/BGaN/GaN. Comparé à AlGaN, BGaN à faible concentration en bore présente un plus faible désaccord de réseau [19] avec GaN. Le désaccord de maille entre $B_{0.01}Ga_{0.99}N$ et GaN n'est que de 0.2% ; cela conduit donc à une bonne qualité structurale des dispositifs BGaN/GaN [20], et le désaccord de maille entre GaN et AlN est d'environ 2.5% [21]. Nous considérons $B_{0.01}Ga_{0.99}N$ avec différentes épaisseurs et nous comparons alors les performances des deux structures à l'aide du simulateur TCAD SILVACO.

IV.5.2 Conception des structures

La conception des LED bleues à simple puits quantique est réalisée par ATLAS ; les structures sont illustrées par les figures IV.37 (a) et (b).

La LED bleue conventionnelle p-GaN/p-AlGaN/InGaN/n-GaN/GaN, notée A-LED et donnée par la figure IV.35 (a), est élaborée sur substrat saphir de plan c ; nous avons une couche tampon GaN de 500nm d'épaisseur suivie d'une couche n-GaN de 200nm d'épaisseur ($n = 1 \times 10^{18} \text{cm}^{-3}$), une région active d'un seul puits quantique $In_xGa_{1-x}N$ de 10nm d'épaisseur, une couche de blocage électronique $Al_{0.2}Ga_{0.8}N$ de 100nm d'épaisseur [22] ($p = 1 \times 10^{17} \text{cm}^{-3}$) et une couche p-GaN de 150nm d'épaisseur ($p = 1 \times 10^{17} \text{cm}^{-3}$). Les électrons sont injectés du côté p et les trous du côté n. La mobilité des électrons est nettement supérieure à celle des trous ; c'est la raison pour laquelle les LED sont fabriquées avec la région dopée p proche de la surface émettrice de lumière. Les électrodes ayant une épaisseur de 10nm sont le nickel (Ni) pour le contact de type p et le titane (Ti) pour le contact de type n. Dans la figure IV.35 (b), nous avons la même structure comprenant en outre une couche $B_{0.01}Ga_{0.99}N$ entre n-GaN et GaN (B-LED) ; la couche $B_{0.01}Ga_{0.99}N$ est copiée sur celle utilisée comme couche barrière arrière dans les HEMT.

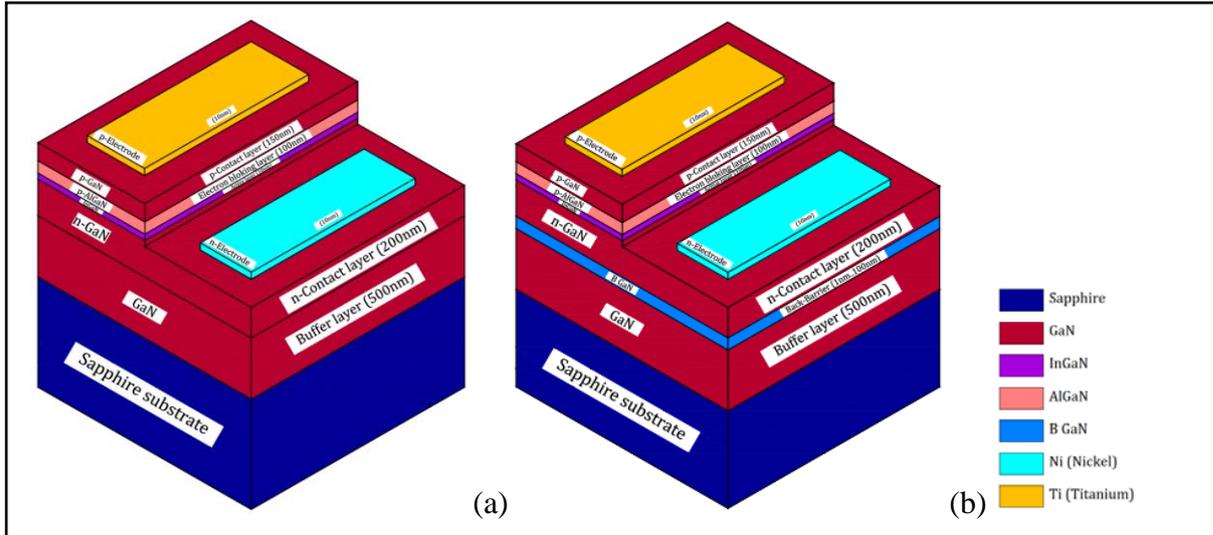


Figure IV.37: Structures schématiques de (a) p-GaN/p-AlGaIn/n-GaN/GaN A-LED, (b) p-GaN/p-AlGaIn/n-GaN/BGaIn/GaN B-LED.

Les énergies de bande interdite de $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ et $\text{B}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ (à la température ambiante) sont calculées à l'aide des équations (IV.5) et (IV.6).

$$E_{g\text{InGaIn}} = xE_g(\text{InN}) + (1 - x)E_g(\text{GaIn}) - x(1 - x)b \quad (\text{IV.5})$$

Où x est la fraction molaire d'indium, $E_g(\text{InN}) = 0.7\text{eV}$ [23], et $E_g(\text{GaIn}) = 3.4\text{eV}$ [24]. Plusieurs valeurs pour le paramètre de courbure (b) sont rapportées dans la littérature ; nous prenons ici $b = 1.43$ [10]. La longueur d'onde de la lumière bleue est globalement comprise entre 450nm et 500nm. Pour obtenir une émission de lumière dans cette bande, il est nécessaire de prendre une fraction molaire d'indium dans InGaIn comprise entre 16% et 24%.

Dans notre cas, nous prenons une fraction molaire de 22% ; l'énergie de bande interdite de $\text{In}_{0.22}\text{Ga}_{0.78}\text{N}$ est alors 2.56eV. Théoriquement, la longueur d'onde d'émission calculée est d'environ 484nm ; mais en raison de l'existence de l'effet Stark à confinement quantique, la longueur d'onde du pic serait plus petite.

$$E_{g\text{BGaN}} = xE_g(\text{BN}) + (1 - x)E_g(\text{GaIn}) - x(1 - x)c \quad (\text{IV.6})$$

x est la fraction molaire de bore, $E_g(\text{BN}) = 5.5\text{eV}$ [12, 13], et le paramètre de courbure $c = 9$ [14]. L'énergie de bande interdite de $\text{B}_{0.01}\text{Ga}_{0.99}\text{N}$ est alors 3.32eV. Les propriétés physiques et optiques des LED sont étudiées numériquement à l'aide du logiciel SILVACO ATLAS. Le décalage de bande GaN/BGaIn est égal à 0.05 eV. Nous introduisons dans le simulateur,

le modèle de réduction de bande interdite, le modèle de mobilité dépendant de la concentration de porteurs, le modèle de recombinaison Auger, le modèle de recombinaison Shockley–Read–Hall et le modèle de génération-recombinaison optique. Le modèle statistique Fermi–Dirac et le modèle d’ionisation incomplet sont appliqués pour calculer la concentration en porteurs [25].

Notre but ici est de simuler les effets d’une couche de barrière arrière B GaN dans une LED bleue. Nous prenons une structure de $2\mu\text{m} \times 2\mu\text{m}$; et pour de plus grandes dimensions, il serait facile de calculer les valeurs correspondantes à partir de nos résultats.

Avec un puits quantique de 3nm, la LED InGaN/GaN/B GaN émettrait dans le violet, à une longueur d’onde entre 447nm et 443nm pour une épaisseur de B GaN entre 1nm et 100nm ; cela est dû à l’effet Starck à confinement quantique. Pour rester dans le bleu, nous considérons alors une épaisseur du puits quantique de 10nm.

IV.5.3 Résultats et discussion

IV.5.3.1 Diagramme de bande et concentration des porteurs

Le diagramme de bandes d’énergie est illustré par les figures IV.38 (a) et (b) ; les concentrations en électrons et en trous sont données par les figures IV.39 (a) et (b). Ces figures peuvent aider à comprendre le principe de fonctionnement de la LED. La conception à double hétérostructure permet une meilleure efficacité de la LED.

L’hétérojonction InGaN/GaN forme un puits de potentiel dans la couche InGaN qui capture les électrons dans la bande de conduction et les trous dans la bande de valence. Lorsque la polarisation directe est appliquée, les niveaux de quasi-Fermi chevauchent les bandes de conduction et de valence dans le puits de potentiel, ce qui entraîne une concentration élevée d’électrons et de trous dans la couche InGaN. Afin de se recombiner, l’électron et le trou doivent tous les deux se trouver à la même coordonnée x (avoir le même vecteur d’onde) ; le puits de potentiel localise donc l’émission dans la couche InGaN. Comme souhaité, la longueur d’onde n’est émise que par le matériau InGaN et la localisation de l’émission augmente la proportion du taux de recombinaison [26] se produisant dans la couche InGaN, ce qui accroît l’efficacité de la LED [15].

Dans B-LED, nous pouvons voir que la couche de B GaN forme une barrière électrostatique qui pourrait améliorer les performances de la LED.

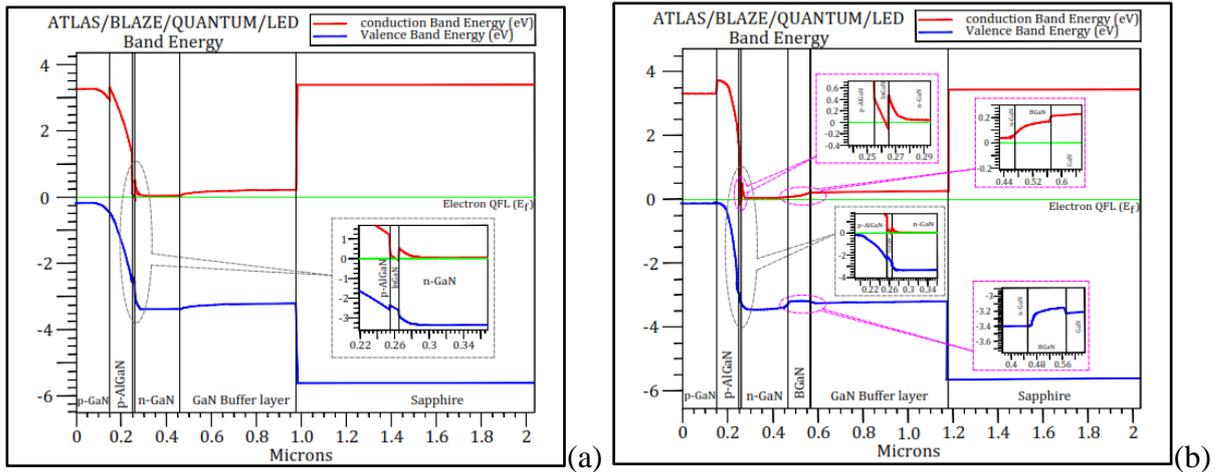


Figure IV.38: Diagramme de bande d'énergie dans (a) A-LED (sans BGaN), et (b) B-LED (avec une couche barrière arrière BGaN).

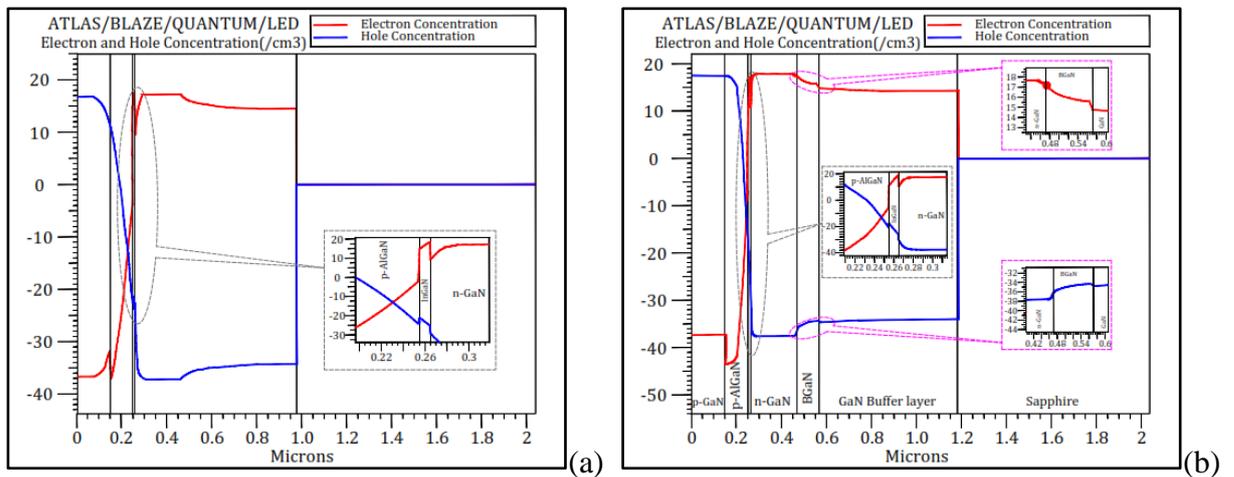


Figure IV.39: Concentration d'électrons et de trous dans (a) A-LED (sans BGaN), et (b) B-LED (avec une couche de barrière arrière BGaN).

IV.5.3.2 Caractéristiques électriques

IV.5.3.2.1 Caractéristique (I-V)

La figure IV.40 (a) représente les caractéristiques tension-courant (I-V) de A-LED ; et la figure IV.40 (b) représente I-V de B-LED, pour différentes épaisseurs de la couche de barrière arrière $B_{0.01}Ga_{0.99}N$: 1nm, 5nm, 10nm, 50nm et 100nm. Une augmentation soudaine du courant est observée lorsque la tension de seuil (V_{TH}) est atteinte, quand l'épaisseur de BGaN augmente ; la tension V_{TH} dépend essentiellement de l'énergie de la bande interdite du semi-conducteur formant le puits quantique de la LED.

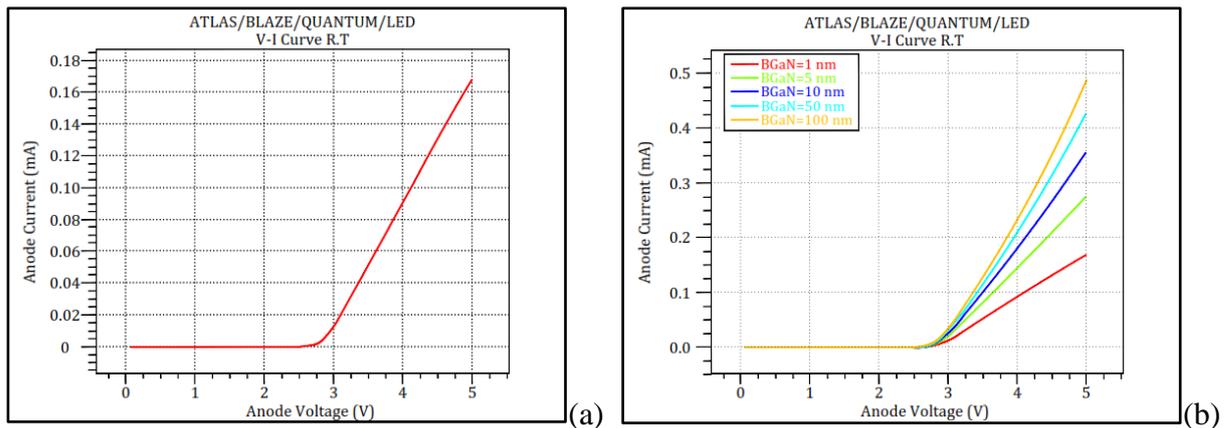


Figure IV.40: Caractéristiques I-V (a) A-LED et (b) B-LED.

Pour A-LED ; nous trouvons une tension de seuil de 2.70V, et un courant d'environ 0.17mA (soit une densité de courant de 4.22kA/cm^2) à une tension d'anode de 5V.

Pour B-LED ; nous trouvons une tension de seuil approximativement entre 2.55V et 2.70V. Le courant d'anode est remarquablement amélioré ; il est d'environ 0.35mA à une tension d'anode de 5V, pour seulement 10nm d'épaisseur de BGaN.

Le courant augmente à presque 0.5mA (une densité de courant de 12.5kA/cm^2) pour une épaisseur de BGaN de 100nm ; il est alors trois fois supérieur à celui de A-LED, avec la même tension appliquée. Ces résultats montrent que la couche barrière arrière BGaN empêche la fuite des électrons vers la couche tampon, améliorant ainsi le courant injecté.

IV.5.3.2.2 Puissance lumineuse émise

Les figures IV.41 (a) et (b) représentent la puissance lumineuse pour A-LED et B-LED en fonction de la tension d'anode.

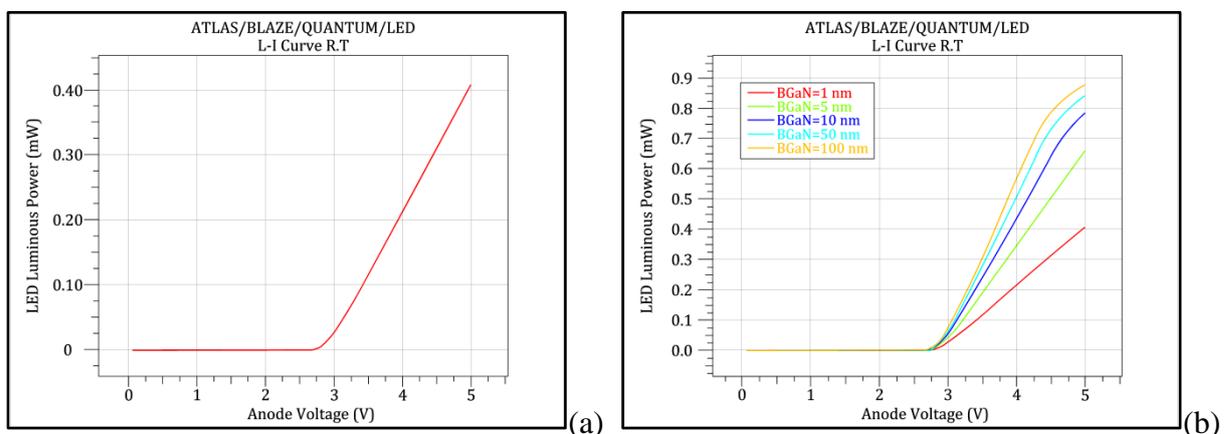


Figure IV.41: La puissance lumineuse en fonction de la tension d'anode (a) A-LED et (b) B-LED.

Nous obtenons une puissance lumineuse d'environ 0.4mW à $V = 5V$, pour la première LED. Pour B-LED d'une épaisseur de 1nm B GaN, nous avons une puissance lumineuse supérieure à 0.4mW et elle augmente à presque 0.9mW pour une épaisseur de 100nm B GaN. La puissance lumineuse [27] est donc environ deux fois plus grande que celle de A-LED. A partir de 10nm, la puissance lumineuse commence à tendre vers une saturation.

IV.5.3.3 Caractéristiques optiques

IV.5.3.3.1 Taux d'émission spontanée

Les figures IV.42 (a) et (b) représentent les taux d'émission spontanée dans une polarisation TE, en fonction de la longueur d'onde, respectivement pour A-LED et B-LED.

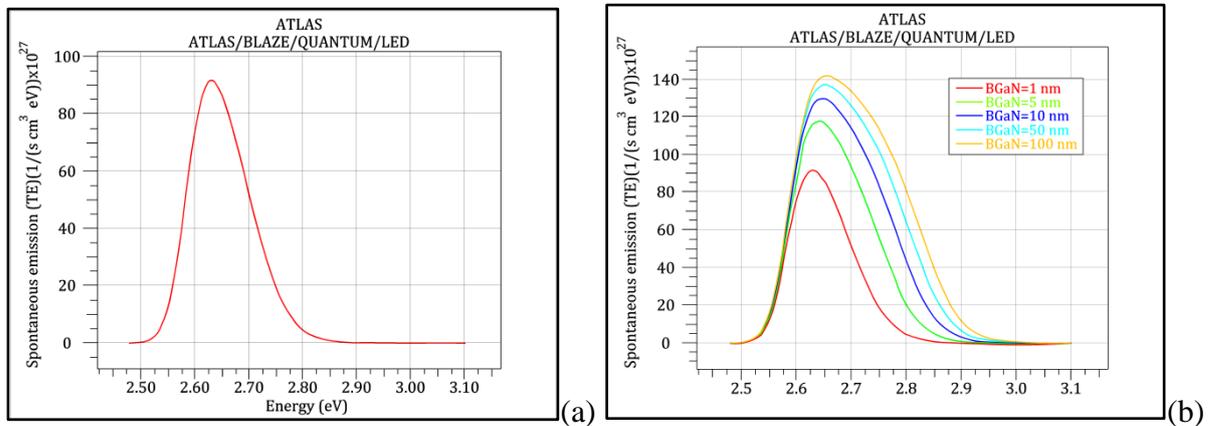


Figure IV.42: Émission spontanée (TE) en fonction de l'énergie (a) A-LED et (b) B-LED.

Pour A-LED, nous obtenons un pic de taux d'émission spontanée de $9.18 \times 10^{28} \text{ s}^{-1} \text{ cm}^{-3} \text{ eV}$ à une longueur d'onde de 471nm (2.63eV). Pour B-LED et pour une épaisseur de 1nm B GaN, nous avons un pic de $9.18 \times 10^{28} \text{ s}^{-1} \text{ cm}^{-3} \text{ eV}$ à une longueur d'onde de 471nm (2.63eV). Le pic augmente avec l'épaisseur du B GaN (5nm, 10nm, 50nm et 100nm) ; nous obtenons un pic de $14.1 \times 10^{28} \text{ s}^{-1} \text{ cm}^{-3} \text{ eV}$ pour 100nm, à une longueur d'onde de 465nm (2.65eV). Il y a alors un léger glissement du pic vers les hautes énergies.

IV.5.3.3.2 Recombinaison radiative

Les figures IV.43 (a), (b), (c) et (d) illustrent les recombinaisons radiatives pour les différentes épaisseurs de B GaN. Nous remarquons qu'il y a une grande augmentation avec l'épaisseur de B GaN (1nm, 10nm, 50nm, 100nm).

Nous donnons dans le tableau IV.11, les résultats des recombinaisons Auger et des recombinaisons radiatives de B-LED.

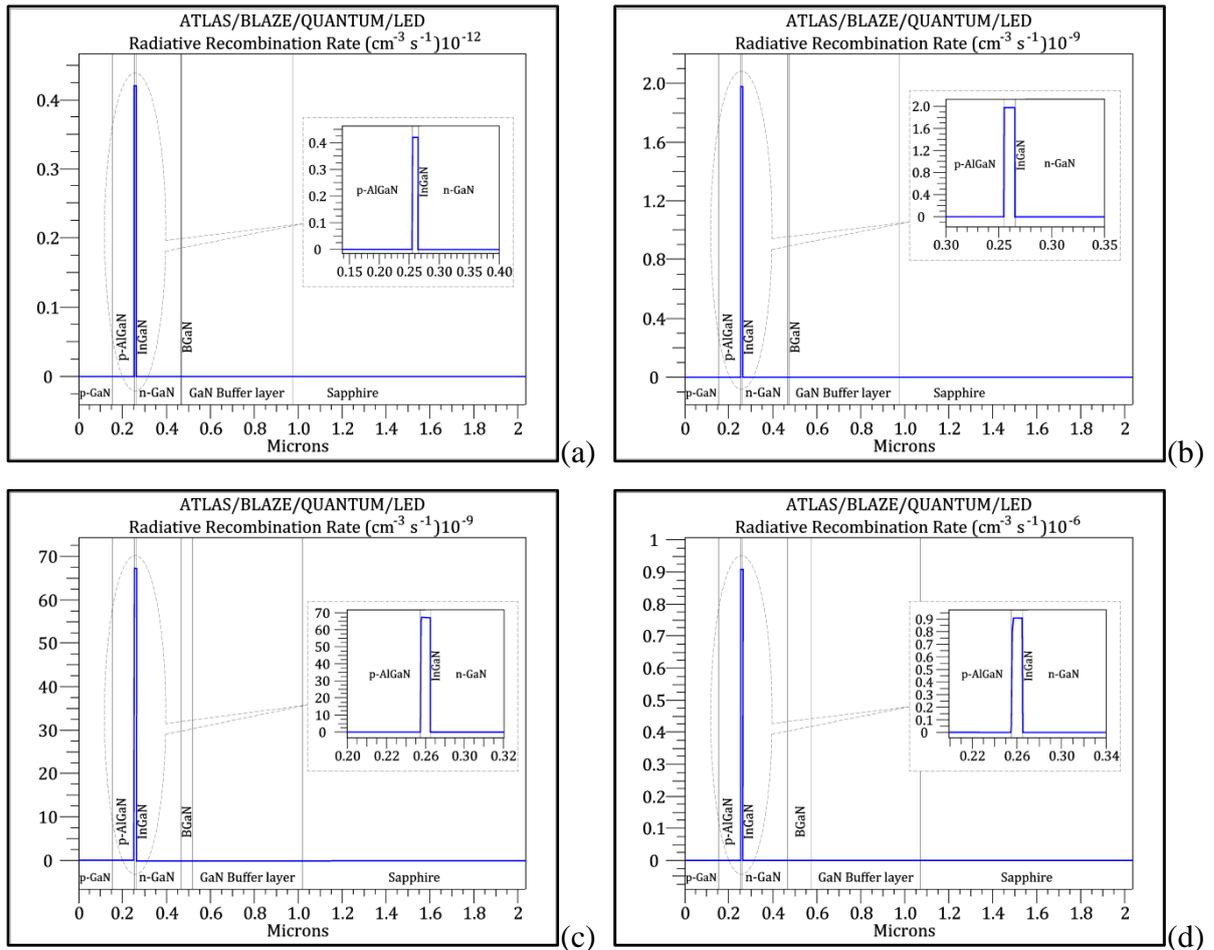


Figure IV.43: Recombinaison radiative dans B-LED avec différentes épaisseurs de B GaN (1nm, 10nm, 50nm, 100nm respectivement).

IV.5.3.3 Recombinaison Auger

Les recombinaisons Auger sont illustrées par les figures IV.44 (a), (b), (c) et (d). Nous remarquons une réduction des recombinaisons Auger (recombinaisons non radiatives) avec l'augmentation de l'épaisseur de B GaN. Ceci est dû au fait que le composé B GaN contient moins d'électrons libres.

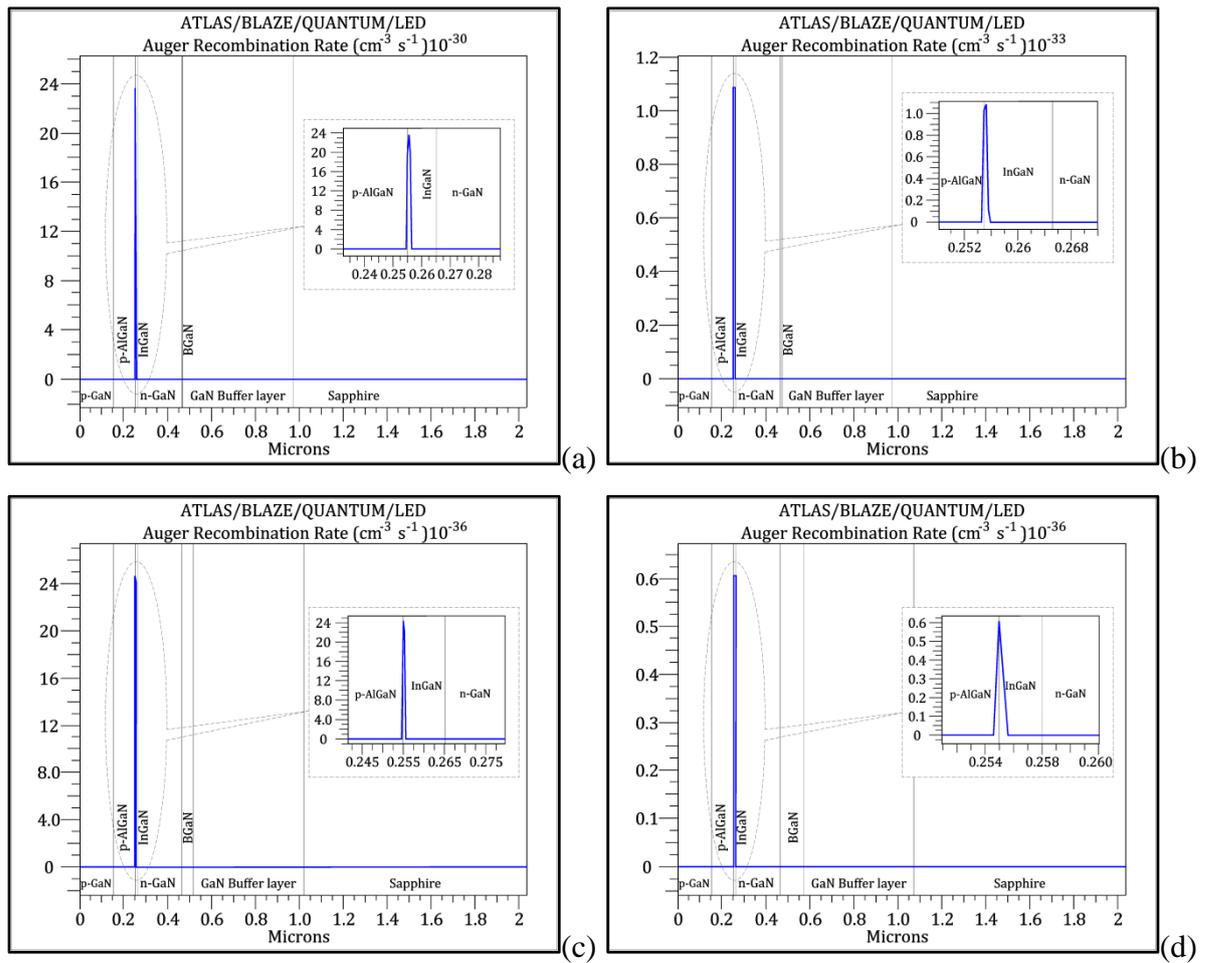


Figure IV.44: Recombinaison Auger dans B-LED avec BGaN d'épaisseur (1nm, 10nm, 50nm, 100nm respectivement).

Les figures IV.45 (a) et (b) illustrent le taux de recombinaison Auger et le taux de recombinaison radiative pour A-LED.

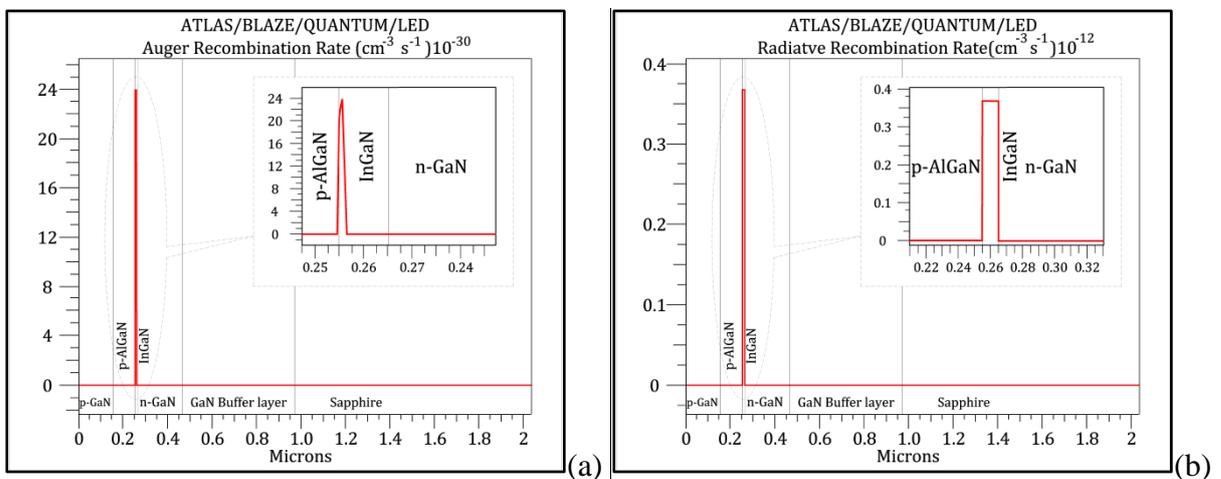


Figure IV.45: (a) Recombinaison Auger A-LED, et (b) Recombinaison radiative A-LED.

Epaisseur de B GaN	1 nm	10 nm	50 nm	100 nm	Sans B GaN
Recombinaison Auger ($\text{cm}^{-3}\text{s}^{-1}$)	2.36×10^{-29}	1.09×10^{-33}	24.4×10^{-36}	0.61×10^{-36}	2.4×10^{-29}
Recombinaison radiative ($\text{cm}^{-3}\text{s}^{-1}$)	4.2×10^{-13}	1.97×10^{-9}	67.6×10^{-9}	0.91×10^{-6}	3.68×10^{-13}

Tableau IV.11: Les recombinaisons Auger et radiative des LED sans et avec B GaN.

IV.5.3.3.4 Gain optique

Le gain optique (TE) est représenté par les figures IV.46 (a) et (b), respectivement pour A-LED et B-LED.

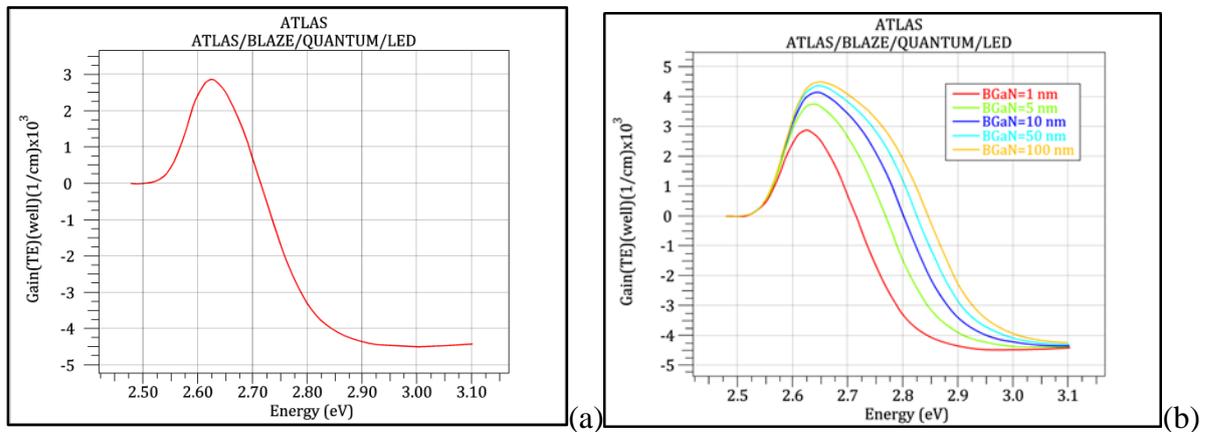


Figure IV.46: Gain optique en fonction de l'énergie (a) A-LED et (b) B-LED.

Pour A-LED, nous obtenons un pic de gain d'environ $2.87 \times 10^3 \text{ cm}^{-1}$ à une énergie de 2.62 eV. Pour B-LED ; nous obtenons à peu près les mêmes valeurs, pour une épaisseur de 1 nm de B GaN. Le maximum du gain augmente avec l'épaisseur de B GaN ; il est de l'ordre de $4.5 \times 10^3 \text{ cm}^{-1}$ à une énergie $\sim 2.65 \text{ eV}$, pour 100 nm.

IV.5.3.3.5 Flux lumineux

La densité spectrale du flux est représentée par les figures IV.47 (a) et (b). Nous obtenons une densité spectrale du flux d'environ $9.78 \times 10^{18} \text{ s}^{-1} \text{ cm}^{-1} \text{ eV}^{-1}$ à une énergie de 2.62 eV pour A-LED. Pour B-LED, Le pic de la densité spectrale du flux augmente avec l'épaisseur de B GaN ; il arrive à environ $15 \times 10^{18} \text{ s}^{-1} \text{ cm}^{-1} \text{ eV}^{-1}$ à une énergie de 2.66 eV pour une épaisseur de 100 nm de B GaN.

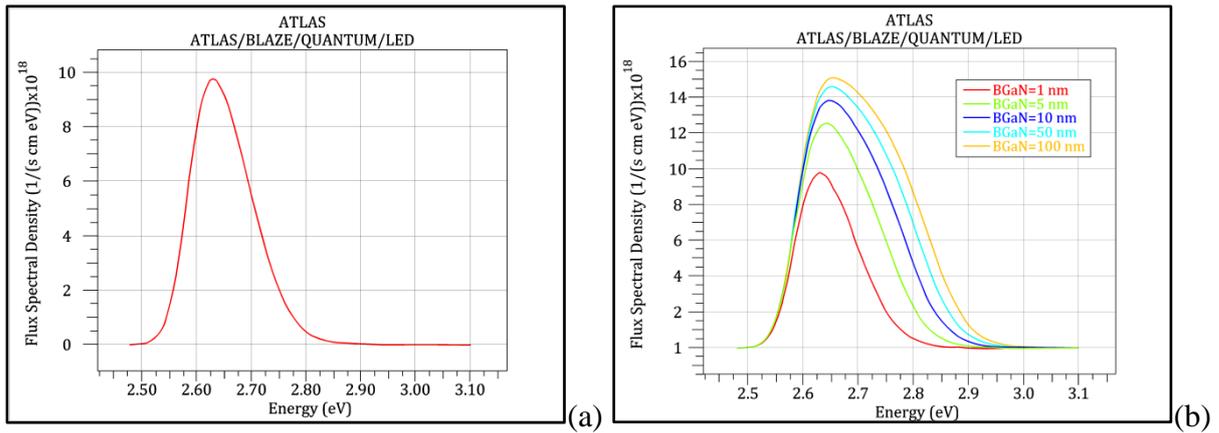


Figure IV.47: Flux lumineux en fonction de l'énergie (a) A-LED et (b) B-LED.

IV.5.3.3.6 Densité spectrale de puissance

La densité d'énergie spectrale émise est la quantité mesurable par un spectromètre, ce qui permet de caractériser une source d'émission de lumière en ce qui concerne sa distribution de fréquence (ou d'énergie). Les figures IV.48 (a) et (b) représentent la densité spectrale de puissance en fonction de la longueur d'onde, respectivement pour A-LED et B-LED à 3.5V.

Pour A-LED, nous obtenons un pic de la densité spectrale de puissance d'environ 4.11W/cm.eV à une longueur d'onde de 471nm (2.63eV). Dans B-LED et pour une épaisseur de 1 nm B GaN, nous avons un pic de 4.12W/cm.eV à une longueur d'onde de 471nm (2.63eV). Le pic de l'intensité EL augmente avec l'épaisseur de B GaN et la longueur d'onde du pic diminue légèrement ; la résistance de la couche B GaN augmente avec son épaisseur, il y a alors une augmentation du confinement quantique des porteurs et donc une diminution de l'effet Stark quantique. Avec 100nm, nous obtenons un pic de 6.42W/cm.eV à une longueur d'onde de 465nm (2.66 eV).

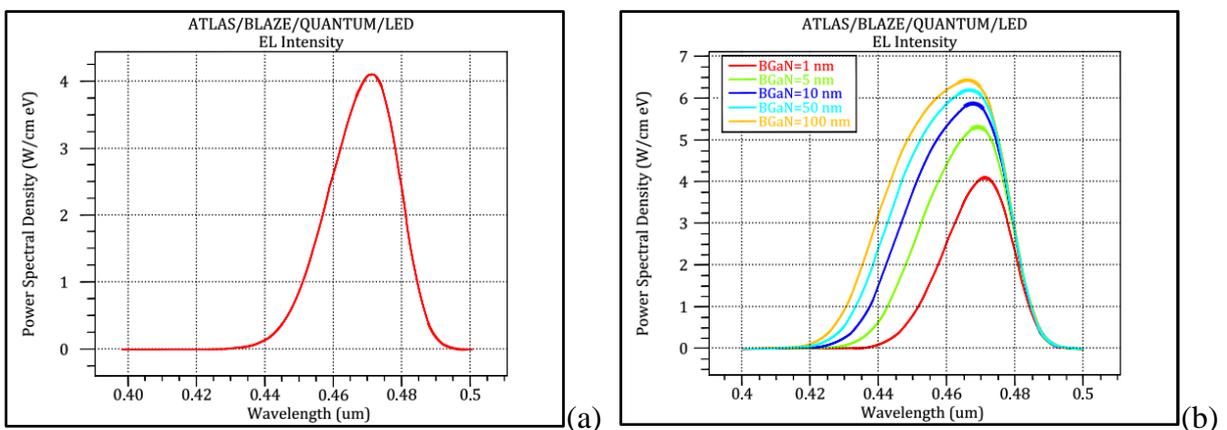


Figure IV.48: Spectre d'électroluminescence (a) A-LED et (b) B-LED.

Nous notons que le spectre s'élargit vers des énergies plus élevées lorsque l'épaisseur de B GaN augmente. Pour une plus grande épaisseur de B GaN, la longueur d'onde d'émission maximale serait inférieure à celle de A-LED et on atteindrait la couleur violette. Les électrons de la couche n-GaN sont bloqués par la couche de B GaN ; au lieu d'une fuite vers la couche tampon et le substrat, ces électrons participeront à l'émission de lumière, avec une énergie supérieure et une intensité inférieure à celles du puits quantique.

IV.5.3.3.7 Rendement global

Les figures IV.49 (a) et (b) représentent le rendement global ou le rendement à la prise (wall-plug efficiency – WPE) des deux LEDs en fonction du courant, à la température ambiante [28] ; les résultats sont présentés au tableau IV.12.

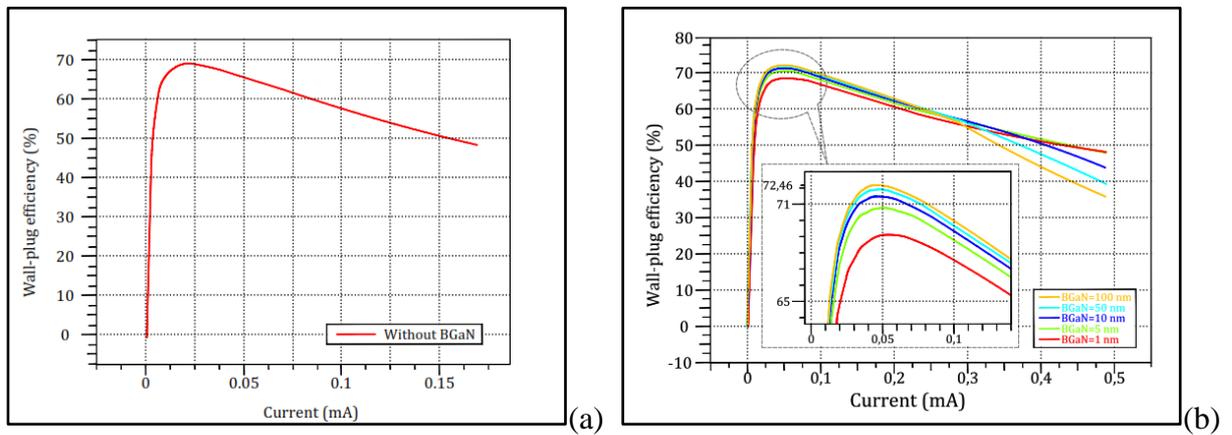


Figure IV.49: Rendement global (a) A-LED et (b) B-LED.

Sans B GaN, la LED présente une efficacité maximale de 68.91% à $\sim 24\mu\text{A}$. Avec la couche barrière arrière B GaN, nous obtenons un WPE maximum compris entre 68.99% à $20\mu\text{A}$ et 72.46% à $50\mu\text{A}$. Pour un courant de 0.15mA , nous obtenons un WPE de 50.62% pour A-LED. Pour le même courant ; nous obtenons pour B-LED, un WPE de 63.68% à 1nm d'épaisseur de B GaN et 66.32% à 100nm d'épaisseur de B GaN.

La seconde LED présente une chute d'efficacité [29] inférieure à celle de la première LED, grâce à la couche barrière arrière B GaN. À partir d'environ 0.4mA , le WPE est meilleur et présente une pente plus faible pour une plus petite épaisseur de B GaN. À 0.5mA , le WPE est environ 37%, 40%, 45% et 50% pour 100nm, 50nm, 10nm, 5nm et 1nm d'épaisseur de B GaN. Il reste meilleur que celui de A-LED à 0.15mA .

Epaisseur de BGaN	Maximum WPE (%)	Courant (μA)	WPE (%) à 0.15 mA
1 nm	68.99	20	63.68
5 nm	70.89	31	64.82
10 nm	71.69	39	65.42
50 nm	72.17	45	65.95
100 nm	72.46	50	66.32
Sans BGaN	68.91	24	50.62

Tableau IV.12: Rendement à la prise, avec et sans couche BGaN.

IV.5.4 Effets des paramètres physiques sur les performances des LEDs p-GaN/p-AlGaIn/InGaIn/n-GaN/GaN et p-GaN/p-AlGaIn/InGaIn/n-GaN/BGaN/GaN

IV.5.4.1 Effet de la tension de polarisation sur la densité spectrale de puissance

Cette simulation consiste à montrer l'influence de la tension de polarisation sur la densité spectrale de puissance des A-LED p-GaN/p-AlGaIn/InGaIn/n-GaN/GaN et B-LED p-GaN/p-AlGaIn/InGaIn/n-GaN/BGaN/GaN à 100 nm, pour les tensions 3.5V, 4.5V et 5.0V ; ceci est représenté par les figures IV.50 (a) et (b).

Nous observons un décalage des spectres optiques vers les hautes énergies sous l'effet de la tension de polarisation. Les résultats obtenus sont mentionnés dans le tableau IV.14.

Il est important de noter qu'à une densité spectrale de 5W/cm², on peut couvrir un spectre de lumière du rouge (400nm) au bleu (475nm) si on alimente la B-LED à 5 V.

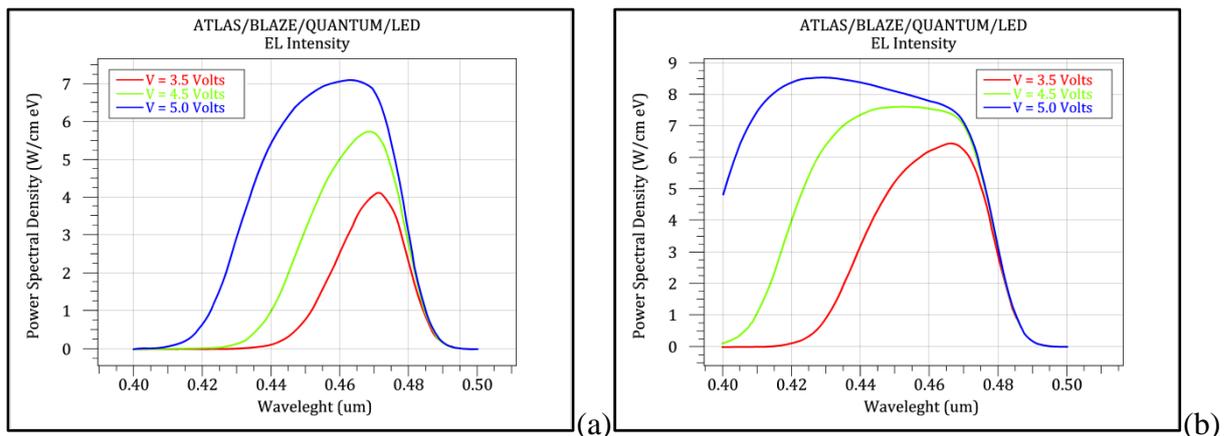


Figure IV.50: Effet de la tension de polarisation sur la densité spectrale de puissance

(a) A-LED et (b) B-LED (100nm).

LEDs	A-LED		B-LED (100 nm)	
Tension (V)	EL _{max} (W/cm eV)	λ _{peak} (nm)	EL _{max} (W/cm eV)	λ _{peak} (nm)
3.5	4.11	471	6.42	465
4.5	5.74	468	7.61	452
5.0	7.10	463	8.52	428

Tableau IV.13: Les valeurs du spectre électroluminescent.

IV.5.4.2 Effet de la température sur la densité spectrale de puissance

Dans cette partie, nous étudions l'effet de la variation de température qui varie de 300K à 400K ; les résultats obtenus sont représentés sur les figures IV.51 (a) et (b) où la tension anode est 3.5V.

Nous remarquons une diminution du pic de spectre avec l'augmentation de la température, à une même longueur d'onde pratiquement. Cette diminution est due aux interactions qui augmentent avec la température.

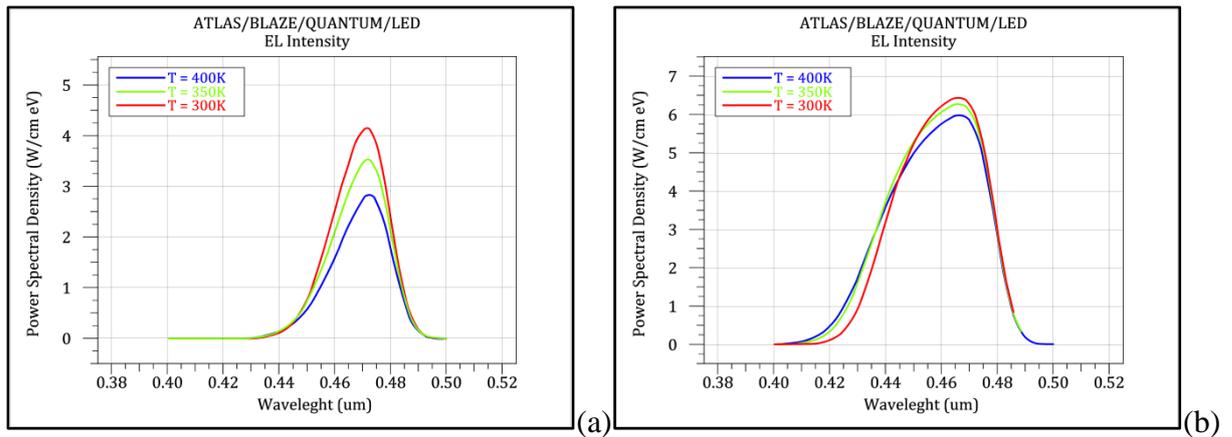


Figure IV.51: Effet de la température sur la densité spectrale de puissance

(a) A-LED et (b) B-LED.

LEDs	A-LED		B-LED (100 nm)	
Température (K)	EL _{max} (W/cm eV)	λ _{peak} (nm)	EL _{max} (W/cm eV)	λ _{peak} (nm)
300	4.11	471	6.42	465
350	3.50	471	6.25	465
400	2.80	472	5.87	468

Tableau IV.14: Résultats du spectre électroluminescent en fonction de la température dans A-LED et B-LED (100 nm).

Les résultats des caractéristiques sont donnés dans le tableau IV.15.

Epaisseur de B GaN	B-LED					A-LED	
	1 nm	5 nm	10 nm	50 nm	100 nm		
V_{TH} (V)	2.70	2.65	2.65	2.64	2.55	2.70	
I (mA) à 5 V	0.169	0.275	0.358	0.428	0.489	0.169	
P (mW) à 5 V	0.409	0.663	0.787	0.844	0.881	0.409	
Taux d'émission spontanée ($s^{-1} cm^{-3} eV$)	9.18×10^{28}	11.7×10^{28}	12.9×10^{28}	13.6×10^{28}	14.1×10^{28}	9.18×10^{28}	
Taux de recombinaison radiative ($cm^{-3}s^{-1}$)	4.2×10^{-13}	5.80×10^{-11}	1.97×10^{-9}	67.6×10^{-9}	0.91×10^{-6}	3.68×10^{-13}	
Taux de recombinaison Auger ($cm^{-3}s^{-1}$)	2.36×10^{-29}	8.42×10^{-32}	1.09×10^{-33}	24.4×10^{-36}	0.61×10^{-36}	2.4×10^{-29}	
Gain optique (cm^{-1})	2.87×10^3	3.76×10^3	4.14×10^3	4.35×10^3	4.50×10^3	2.87×10^3	
Flux lumineux ($s^{-1} cm eV$)	9.78×10^{18}	12.5×10^{18}	13.8×10^{18}	14.5×10^{18}	15.1×10^{18}	9.78×10^{18}	
ELmax (W/cm eV)	à 3.5 V	4.12	5.31	5.87	6.20	6.42	4.11
	à 5.0 V					8.52	7.10
Maximum WPE (%)	68.99	70.89	71.69	72.17	72.46	68.91	

Tableau IV.15: Performances de la LED, avec et sans couche B GaN.

Conclusion

Les LEDs p-GaN/p-AlGaIn/n-GaN/GaN et p-GaN/p-AlGaIn/n-GaN/BGaIn/GaN ont été simulées. Dans la seconde LED, une couche $B_{0.01}Ga_{0.99}N$ a été utilisée comme barrière arrière comme celle utilisée dans les HEMT. Nous avons constaté que les caractéristiques électriques et optiques sont améliorées avec l'utilisation de cette couche barrière arrière B GaN.

Pour la même tension d'anode et pour une épaisseur de B GaN de 100nm ; le courant d'anode, la puissance lumineuse et la densité spectrale de puissance étaient trois fois plus élevés dans la LED avec couche B GaN que dans la LED sans B GaN. Grâce à B GaN, le rendement global a été amélioré.

Les performances de la LED ont été améliorées avec seulement 1% de bore et seraient meilleures avec une fraction molaire de bore supérieure à 1% dans la couche de B GaN.

En outre ; une couche barrière arrière B GaN a deux effets : une discontinuité de bande induite par polarisation et une barrière résistive (barrière électrostatique) résultant de ses excellentes propriétés isolantes. B GaN augmente la résistivité du tampon et empêche la fuite d'électrons ; il améliore alors le confinement des électrons dans le puits quantique et la performance de la LED. Il serait important de faire une étude expérimentale pour la comparaison avec les résultats de notre simulation.

Références

- [1] L. Guenineche, A. Hamdoune: «Improvement of DC and RF Performances of an AlGa_{0.01}N/GaN HEMT by a B_{0.01}Ga_{0.99}N back-barrier Simulation Study», The 9th International Symposium on Advanced Topics in Electrical Engineering, May 7-9, 2015, Bucharest, Romania, (2015).
- [2] S. Daniel: «Modeling radiation effect on a triple junction solar cell using Silvaco Atlas», Thesis Naval postgraduate school, Monterey, California, (2012).
- [3] S. Mostefa K, Mémoire de Magistère: «Etude et Simulation de Cellules Photovoltaïques à Couches Minces à Base de CIS et CIGS», Université Abou-Bakr Belkaid - Tlemcen. (2012).
- [4] E. Rosencher and B. Vinter, Optoélectronique. Paris: Masson, (1998).
- [5] F. Della Sala et al: «Free-carrier screening of polarization fields in wurtzite GaN/InGa_N laser structures», Appl. Phys. Lett., Vol. 74, no. 14, p. 2002, (1999).
- [6] Yang. Li, Shengchang. Chen, Wu.Tian, Zhihao. Wu, Yanyan. Fang, Jiangnan. Dai, Changqing. Chen: «Advantages of AlGa_N-Based 310-nm UV Light-Emitting Diodes with Al Content Graded AlGa_N Electron Blocking Layers», IEEE Photonics Journal, Volume 5, Number 4, August (2013).
- [7] Bing-Cheng Lin, Kuo-Ju Chen, Chao-Hsun Wang, Ching-Hsueh Chiu, Chien-Chung Lin, Po-Tsung Lee, Min-Hsiung Shih, Yen-Kuang Kuo, Yu-Pin Lan, and Hao Chung Kuo: «Hole injection and electron overflow improvement in InGa_N/Ga_N light-emitting diodes by a tapered AlGa_N electron blocking layer», optics express 463 ,Vol. 22, No. 1, (13 January 2014) .
- [8] J. Wu, W. Walukiewicz, K.M. Yu, J.W. Ager III, E.E. Haller, H. Lu, W.J. Schaff, Y. Saito, Y. Nanishi, Appl. Phys. Lett, 80, 3967. 0.7, (2002).
- [9] R. Dingle, D.D. Sell, S.E. Stokowski, M. Ilegems, Phys. Rev. B 4, 1211.3.4, (1971).
- [10] J .Wu, and W. Walukiewicz, The Band gaps of InN and groups III nitride alloys Superlattices Microstruct», 34 63-75, (2003).
- [11] C. Williams, T.H. Glisson, J.R. Hauster, and M.A. Littlejohn, J. Electron, Mater.7, 639, (1978).
- [12] S. L. Rumyantsev, M. E. Levinshtein, A. D. Jackson, S. N. Mohammad, G.L. Harris, M. G. Spencer, and M. S. Shur, Properties of Advanced Semiconductor Materials GaN, AlN, InN, BN, SiC, SiGe, edited by M. E. Levinshtein, S. L. Rumyantsev, and M. S. Shur, Wiley, New York, pp. 67–92, (2001).

- [13] V. Bougrov., M. E. Levinshtein., S. L. Rumyantsev., and A. Zubrilov.: Properties of Advanced Semiconductor Materials GaN, AlN, InN, BN, SiC, SiGe, edited by M. E. Levinshtein., S. L. Rumyantsev., and M. S. Shur Wiley., New York, pp. 1–30, (2001).
- [14] A. Ougazzaden, S. Gautier, T. Moudakir, Z. Djebbour, Z. Lochner, S. Choi, H.J. Kim, J.H. Ryou, R.D. Dupuis, and A. Sirenko, Band gap bowing in BGeN thin films, Appl. Phys. Lett, vol. 93, 083118, Aug 25 , (2008).
- [15] Matt Pooley, “Investigating LED Efficiency via Multiphysics Simulation”, December 3. (2014).
- [16] Inventor Мелвин Б. МАКЛЮРИН, Boron-containing III-nitride light-emitting device, physics. Optics, Patent RU2011140129A, (2010).
- [17] Logan. Williams, al: «BInGaN alloys nearly lattice-matched to GaN for high-power high-efficiency visible LEDs», Applied. Physics. Letters, University of Michigan College of Engineering, (2017).
- [18] S.H. Park: «High-efficiency BAIGaN/AlN quantum well structures for optoelectronic applications in ultraviolet spectral region», University of Daegu Hayang, South Korea, vol. 23, No. 3, (2015).
- [19] Zheng. Jiayu; Li. Liyi; Peng. Mingying: «A New Red Aluminate Phosphor $\text{CaAl}_{12}\text{O}_{19}$ Activated by Bi_2^+ for White LEDs», Science of Advanced Materials, Volume 9, Numbers 3-4, pp. 485-489(5), March (2017).
- [20] S. Gautier , G. Patriarche, T. Moudakir, M. Abid, G. Orsal, K.Pantzas, D. Troadec, A.Soltani, L. Largeau, O. Mauguin, A. Ougazzaden: «Deep structural analysis of novel BGeN material layers grown by MOVPE», Journal of Crystal Growth 315, 288–291, (2011).
- [21] Nicolas. Grand jean, Jean. Massies: «Les nitrures d’éléments III : des semiconducteurs III-V singuliers ? Centre de recherche sur l’hétéroépitaxie et ses applications (CRHEA)», UPR 10 CNRS, Sophia Antipolis, 06560 Valbonne.
- [22] Qiao. Liang; He. Miao; Zheng. Shuwen; Li. Shutu: «Fabrication of Blue Light-Emitting Diode with Vertical Structure on the ZnO Substrate, Journal of Nanoelectronics and Optoelectronics», Volume 12, Number 1, pp. 76-79(4), January (2017).
- [23] J. Wu, W. Walukiewicz, K.M. Yu, J.W. Ager III, E.E. Haller, H. Lu, W.J. Schaff, Y. Saito, Y. Nanishi: «Unusual properties of the fundamental band gap of InN», Appl. Phys. Lett, 80 3967, (2002).
- [24] R. Dingle, D.D. Sell, S.E. Stokowski, M. Ilegems: «Absorption, Reflectance, and Luminescence of GaN Epitaxial Layers», Phys. Rev, B 4 .1211 (1971).

- [25] YU Hong-Ping, LI Shi-Bin, ZHANG Peng, WU Shuang-Hong, WEI Xiong-Bang, WU Zhi-Ming, CHEN Zhi: «Optical Performance of N-Face AlGaN Ultraviolet Light Emitting Diodes», Chinese Physics Letters, Vol. 31, no. 10, 108502, (2014).
- [26] Yang. Gwangseok; Jung. Younghun; Kim. Byung-Jae; Kim. Jihyun: «Electrical and Optical Damage to GaN-Based Light-Emitting Diodes by 20-MeV Proton Irradiation», Science of Advanced Materials, Volume 8, Number 1, pp. 160-163(4), January (2016).
- [27] Lee. Hyun Woo; Jeong. Sujin; Lee. Ho Won; Kim. Young Kwan; Yoon, Seung Soo: «Blue Electroluminescent Dibenzofuran-Substituted Bianthracene Derivatives for Organic Light-Emitting Diodes», Science of Advanced Materials, Volume 9, Number 8, pp. 1302-1306(5), August (2017).
- [28] Gu. Guorui; Xiang. Weidong; Yang. Cheng; Fan. Weibin; Lv. Yanmei; Zhang. Zhongfang; Liang. Xiaojuan: «A Novel Single-Component White-Emitting Tb and Mn Co-Doped Large-Sized $Y_3Al_5O_{12}:Ce^{3+}$ Single Crystal for White LED», Science of Advanced Materials, Volume 8, Number 7, pp. 1354-1360(7), July (2016).
- [29] Lam. Kin-Tak; Lin. Wei-Heng; Chang. Shoou-Jinn: «GaN-Based Light Emitting Diodes with Two-Step Grown GaN Quantum Barriers», Science of Advanced Materials, Volume 8, pp. 1451-1453(3), Number 7 July (2016).

Conclusion générale

Conclusion générale

D'un point de vue physique, une LED est un composant électronique qui idéalement produit de la lumière en convertissant la recombinaison d'un électron avec un trou en un photon. Elle est plus efficace, plus lumineuse, plus facile à utiliser, avec une durée de vie plus accrue et une consommation réduite comparée à une source de lumière conventionnelle.

Dans ce présent travail, nous avons fait une étude sur les matériaux nitrurés : les propriétés structurales, électroniques et optiques des composés binaires GaN, InN et BN, les composés ternaires et quaternaire B(InGaN). Après ; nous avons fixé une structure d'une LED bleue à simple puits quantique à base de nitrure d'indium InGaN.

L'objet de cette thèse était l'étude des caractéristiques électriques et optiques des LEDs bleues à simple puits quantique (SQW), modélisées avec SILVACO, pour estimer l'impact de divers paramètres de simulation sur la LED. Après l'analyse des résultats de simulation des trois LED p-GaN/p-AlGaIn/InGaIn/n-GaN/GaN, p-GaN/p-AlGaIn/BInGaIn/n-GaN/GaN et p-GaN/p-AlGaIn/InGaIn/n-GaN/BGaIn/GaN ; nous avons constaté que l'utilisation d'une couche barrière arrière BGaIn a une influence majeure sur les performances de la LED, et nous permettraient d'identifier aisément les déficiences dans la LED permettant ainsi des améliorations possibles dans la technologie du futur. Aussi, Nous avons montré l'influence de la température et de la tension de polarisation sur les performances de ces LEDs.

Nous avons beaucoup de résultats obtenus par simulation ; nous préférons les donner dans les tableaux suivants pour en avoir une idée plus claire. Nous pouvons y voir clairement que les performances de la LED sont améliorées si on remplace le puits quantique InGaIn par BInGaIn ; ces performances sont encore meilleures si on prend une couche BGaIn comme back-barrier. Cette dernière conception est une première, car elle n'a fait l'objet d'aucun travail précédent ; si ces résultats simulés s'avèrent justes, cela ferait une avancée et une amélioration de la LED bleue à prendre en considération. Notre travail portait sur une LED à simple puits quantique ; les améliorations trouvées seraient les mêmes quel que soit le nombre de puits quantiques considéré, et elles seraient encore meilleures si on augmentait la teneur du bore ou/et l'épaisseur de la couche back-barrier BGaIn.

p-GaN/InGaN/n-GaN/GaN (LED1) et p-GaN/p-AlGaIn/InGaN/n-GaN/GaN (LED2).

LEDs		Sans EBL (LED1)	Avec EBL (LED2)
Le Champ électrique (V/cm)		0.12×10^6	0.70×10^6
V_{TH} (V)		3.05	2.95
I_{max} (mA) à 5 V		0.127	0.162
P_{max} (mW) à 5 V		0.29	0.39
Le taux d'émission spontanée ($s^{-1} cm^{-3} eV^{-1}$)		0.12×10^{30}	0.25×10^{30}
Le taux de recombinaison radiative ($cm^{-3}s^{-1}$)		0.87×10^{-18}	3.41×10^{-18}
Le taux de recombinaison Auger ($cm^{-3}s^{-1}$)		0.641×10^{-27}	42.8×10^{-27}
Le gain optique (cm^{-1})		3.03×10^3	7.27×10^3
Le flux lumineux ($s^{-1} cm^{-1} eV^{-1}$)		3.98×10^{18}	8.49×10^{18}
EL_{max} (W/cm eV)	à 3.5 V	1.72	3.75
	à 5.0 V	7.08	9.23
Maximum WPE (%)		61.75	64.02

p-GaN/p-AlGaIn/InGaN/n-GaN/GaN (LED2) et

p-GaN/p-AlGaIn/BInGaIn/n-GaN/GaN (LED3).

Le puits quantique		$In_xGa_{1-x}N$ (LED2)	$B_yIn_xGa_{1-x-y}N$ (LED3)
V_{TH} (V)		2.95	2.75
I (mA) à 5 V		0.23	0.24
P (mW) à 5 V		0.57	0.61
Le taux d'émission spontanée ($s^{-1} cm^{-3} eV^{-1}$)		3.46×10^{29}	3.13×10^{29}
Le taux de recombinaison radiative ($cm^{-3}s^{-1}$)		3.41×10^{-18}	0.61×10^{-15}
Le taux de recombinaison Auger ($cm^{-3}s^{-1}$)		4.28×10^{-26}	1.26×10^{-23}
Le gain optique (cm^{-1})		10.24×10^3	11.3×10^3
Le flux lumineux ($s^{-1} cm^{-1} eV^{-1}$)		11.4×10^{18}	13.6×10^{18}
EL_{max} (W/cm eV)	à 3.5 V	4.97	5.89
	à 5.0 V	13.31	11.83
Maximum WPE (%)		64	68.76

p-GaN/p-AlGaN/InGaN/n-GaN/GaN (A-LED) et
p-GaN/p-AlGaN/InGaN/n-GaN/BGaN/GaN (B-LED).

Epaisseur de BGaN	B-LED					A-LED
	1 nm	5 nm	10 nm	50 nm	100 nm	
V_{TH} (V)	2.70	2.65	2.65	2.64	2.55	2.70
I (mA) à 5 V	0.169	0.275	0.358	0.428	0.489	0.169
P (mW) à 5 V	0.409	0.663	0.787	0.844	0.881	0.409
Taux d'émission spontanée ($s^{-1} cm^{-3} eV$)	9.18×10^{28}	11.7×10^{28}	12.9×10^{28}	13.6×10^{28}	14.1×10^{28}	9.18×10^{28}
Taux de recombinaison radiative ($cm^{-3}s^{-1}$)	4.2×10^{-13}	5.80×10^{-11}	1.97×10^{-9}	67.6×10^{-9}	0.91×10^{-6}	3.68×10^{-13}
Taux de recombinaison Auger ($cm^{-3}s^{-1}$)	2.36×10^{-29}	8.42×10^{-32}	1.09×10^{-33}	24.4×10^{-36}	0.61×10^{-36}	2.4×10^{-29}
Gain optique (cm^{-1})	2.87×10^3	3.76×10^3	4.14×10^3	4.35×10^3	4.50×10^3	2.87×10^3
Flux lumineux ($s^{-1} cm eV$)	9.78×10^{18}	12.5×10^{18}	13.8×10^{18}	14.5×10^{18}	15.1×10^{18}	9.78×10^{18}
ELmax (W/cm eV)	à 3.5 V	4.12	5.31	5.87	6.20	4.11
	à 5.0 V				8.52	7.10
Maximum WPE (%)	68.99	70.89	71.69	72.17	72.46	68.91

Communications - Publications

Communications

✚ **B.Bouchachia** , A. Hamdoune , F.Z.Bechlaghem , Simulation and optimization of light emitting Diodes Based InGaN "Colloque sur lumière laser et ses application " 13- 15 September 2015.

Publications

✚ **B.Bouchachia**, A. Hamdoune," Improvement of InGaN/GaN Blue LED Performance by a B GaN Back-Barrier Layer: Simulation Study". " Journal of Nanoelectronics and Optoelectronics"Volume 13, 2018, pp(1-7).

ARTICLE

Improvement of InGaN/GaN Blue LED Performance by a BGaN Back-Barrier Layer: Simulation Study

Badia Bouchachia^{1,*} and Abdelkader Hamdoune²

This work consists to study p-GaN/p-AlGaIn/n-GaN/GaN and p-GaN/p-AlGaIn/n-GaN/BGaN/GaN LEDs with a single quantum well of 10 nm thickness sandwiched between n-GaN and p-GaN layers; p-AlGaIn is an electron blocking layer. Using Silvaco TCAD simulator, we study the LEDs characteristics; for the second one, we study also the influence of $B_{0.01}Ga_{0.99}N$ back-barrier layer thickness. We simulate the anode current and the luminous power versus the anode voltage, and the power spectral density versus the wavelength. For the same anode voltage, these quantities are multiplied by three in the LED with a $B_{0.01}Ga_{0.99}N$ back-barrier layer having 100 nm of thickness. We simulate the wall-plug efficiency as a function of the anode current; for the first LED, we find a maximum wall-plug efficiency of about 68.91% at 24 μA . With 100 nm of BGaN back-barrier layer, we obtain a maximum wall-plug efficiency of 72.46% at 50 μA , and smaller efficiency droop than that of the first LED.

Keywords: GaN, InGaN, BGaN, Blue Light Emitting Diode, Silvaco.

1. INTRODUCTION

The III-nitride semiconductor group is widely used in many devices such as light emitting diodes (LEDs), lasers, ultraviolet detectors, and High Electron Mobility Transistors (HEMTs).¹ Nitrides have the advantage of wide and direct band gap, remarkable chemical stability, and good mechanical properties, which make them attractive for blue and UV light emitting,² for high temperature, high power and high frequency electronic applications.³ Among these nitrides, the boron nitride (BN) is a compound existing in several phases; it has been studied for many years and is used in many technological applications because of its exceptional electronic and structural properties.

Nitride-based light-emitting diodes (LEDs) find commercial applications for solid-state lighting and displays,⁴ but their performance decreases significantly when they operate at high electrical power. The first blue LED, reported by Nichia, was composed of InGaN/AlGaIn

double heterostructures;⁵ the active region was a InGaIn layer co-doped⁶ with Si and Zn, and an impurity-related transition was responsible of blue light emission.

The second generation of blue LED had an undoped active region of InGaIn quantum well (SQW), which exhibited an effective direct band gap emission.⁷

A major driver for the mass production and deployment of light emitting diodes (LEDs) has been the rise in maximum achievable wall-plug efficiency (WPE),⁸ such as the (η_{WPE}) of LED is defined as:

$$\eta = \frac{P_{out}}{I.V} \quad (1)$$

Where P_{out} is the optical output power emitted out of the LED, I and V are applied current and voltage, respectively.⁹

The boron gallium nitride (BGaN) is now currently used as a back-barrier layer in HEMTs, improving their performance; but it has never been used in blue LEDs.

In this paper, we study p-GaN/p-AlGaIn/n-GaN/GaN and p-GaN/p-AlGaIn/n-GaN/BGaN/GaN LEDs. Compared to AlGaIn, BGaN at low boron concentration has a smaller lattice¹⁰ mismatch with GaN. The lattice mismatch between $B_{0.01}Ga_{0.99}N$ and GaN which is only 0.2%, thus leads to a good structural quality of BGaN/GaN devices,¹¹ and the lattice mismatch between GaN and AlN is about 2.5%.¹² We consider $B_{0.01}Ga_{0.99}N$ with different thicknesses, and so we compare

¹Department of Sciences, Faculty of Physics, Materials and Renewable Energy Research Unit, University of Abou-Bakr Belkaid, Tlemcen, 13500, Algeria

²Department of Electrical and Electronic Engineering, Faculty of Technology, Materials and Renewable Energy Research Unit, University of Abou-Bakr Belkaid, Tlemcen, 13500, Algeria

*Author to whom correspondence should be addressed.

Email: badia.univ13@gmail.com

Received: 26 June 2018

Accepted: 22 July 2018

the performances between the two structures, using TCAD SILVACO simulator.

2. STRUCTURE DESIGN

The design of the single quantum well blue LED is performed by ATLAS; the structures are shown in Figures 1(a) and (b).

The conventional p-GaN/p-AlGaN/InGaN/n-GaN/GaN blue LED notated A-LED (Fig. 1(a)) is grown on a *c*-plane sapphire substrate; we have a 500 nm thick GaN buffer layer followed by a 200 nm-thick n-GaN layer (*n*-doping = $1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$), an active region of a single $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ quantum well of 10 nm thickness, a 100 nm-thick $\text{Al}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{N}$ electron blocking layer,¹³ (*p*-doping = $1 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$), and a 150 nm thick p-GaN layer (*p*-doping = $1 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$). Electrons are injected on the *p* side, and holes are injected on the *n* side. The mobility of the electrons is significantly greater than that of the holes; this is the reason for which the LEDs are manufactured with the *p*-doped region close to the light emitting surface. The electrodes with 10 nm of thickness are Nickel (Ni) for *p*-type contact and titanium (Ti) for *n*-type contact.

In Figure 1(b), we have the same structure further comprising a $\text{B}_{0.01}\text{Ga}_{0.99}\text{N}$ layer between n-GaN and GaN notated B-LED; the $\text{B}_{0.01}\text{Ga}_{0.99}\text{N}$ layer is copied to that used as back-barrier layer in HEMTs.

The band-gap energies of $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ and $\text{B}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ (at room temperature) are calculated by Eqs. (2) and (3).

$$E_{g\text{InGaN}} = xE_g(\text{InN}) + (1-x)E_g(\text{GaN}) - x(1-x)b \quad (2)$$

Where *x* is the indium content, $E_g(\text{InN}) = 0.7 \text{ eV}$,¹⁴ and $E_g(\text{GaN}) = 3.4 \text{ eV}$.¹⁵ There is not a single value for the bowing parameter (*b*) in the literature; we take here $b = 1.43$.¹⁶ The wavelength of blue light is generally between 450 nm and 500 nm. To obtain a light emission in this band, it is necessary to take a molar fraction of indium in InGaN between 16% and 24%. In our case, we take a molar fraction of 22%; the band-gap energy of $\text{In}_{0.22}\text{Ga}_{0.78}\text{N}$ is then 2.56 eV. Theoretically, the emission wavelength is of about 484 nm; but due to the existence of the Quantum-Confined Stark Effect, the wavelength of the peak would be smaller.

$$E_{g\text{BGaN}} = xE_g(\text{BN}) + (1-x)E_g(\text{GaN}) - x(1-x)c \quad (3)$$

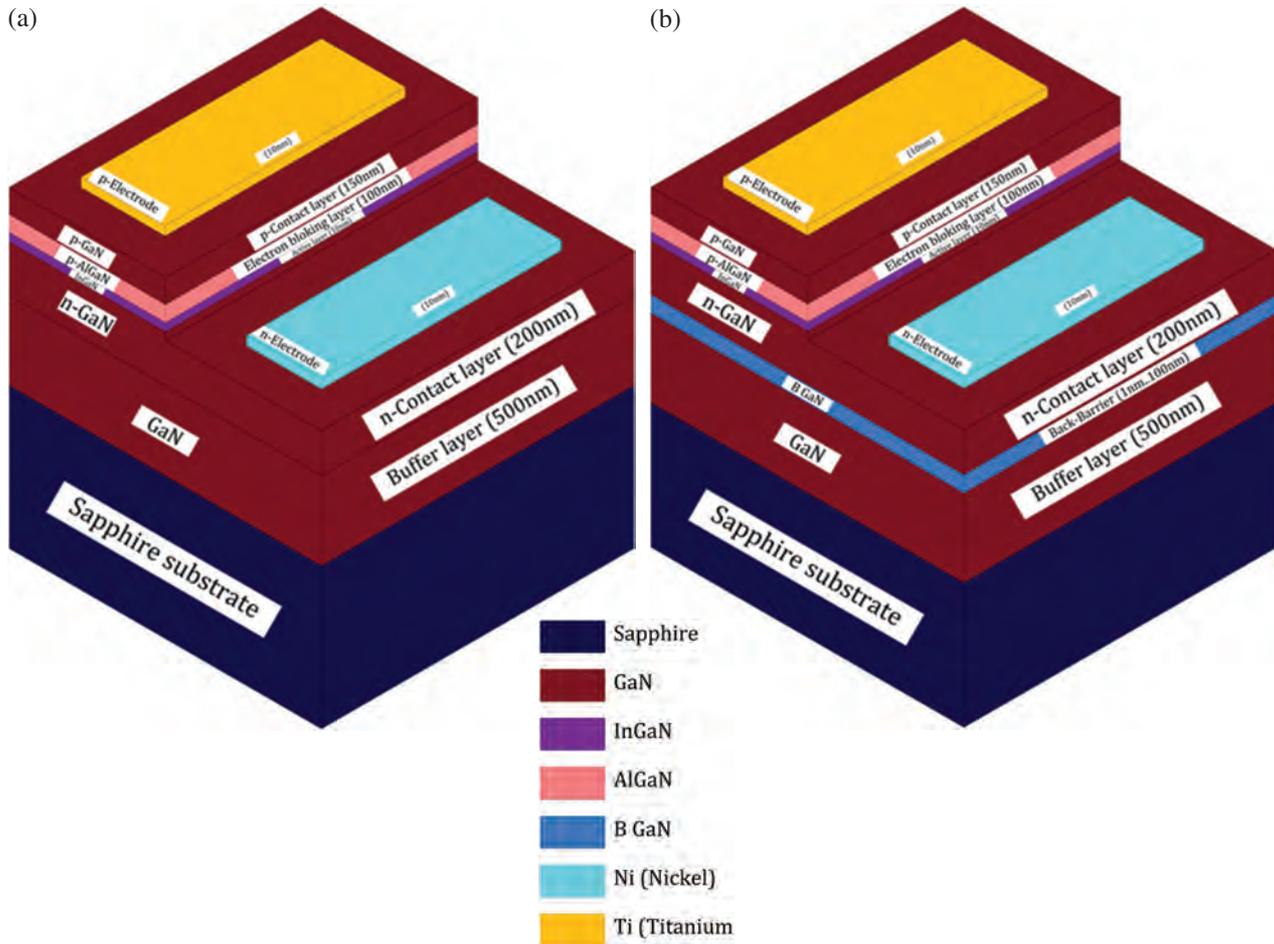


Fig. 1. Schematic structure of (a) p-GaN/p-AlGaN/InGaN/n-GaN/GaN LED, (b) p-GaN/p-AlGaN/InGaN/n-GaN/BGaN/GaN LED.

Where x is the boron content, $E_g(\text{BN}) = 5.5 \text{ eV}$,^{17,18} and bowing parameter $c = 9$.¹⁹

The band-gap energy of $\text{B}_{0.01}\text{Ga}_{0.99}\text{N}$ is then 3.32 eV . Physical and optical properties of the LEDs are investigated numerically with Silvaco Atlas software where the band-offset at GaN/BGaN is equal to 0.05 eV . The simulator includes the band-gap narrowing model, the carrier concentration dependent mobility model, the Auger recombination model, the Shockley–Read–Hall recombination model, and the optical generation-recombination model. The Fermi–Dirac statistic model and the incomplete ionization model are applied to calculate the carrier concentration.²⁰

Our purpose here is to simulate the effects of a BGaN back-barrier layer in a blue LED. We take a structure with an area of $2 \mu\text{m} \times 2 \mu\text{m}$; and for larger dimensions, it would be easy to calculate the corresponding values from our results.

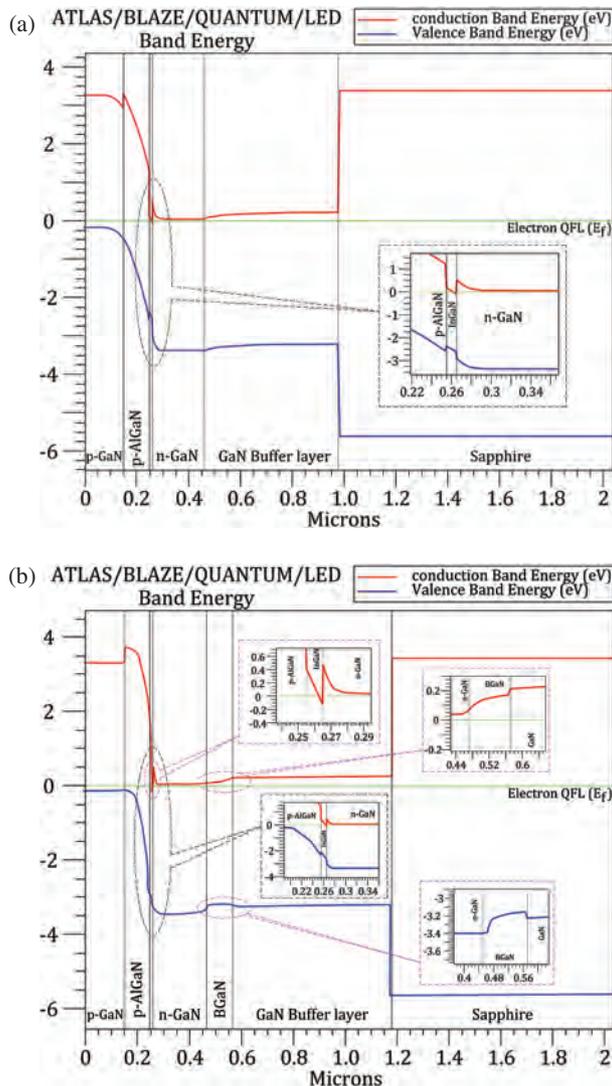


Fig. 2. Energy band diagram. (a) A-LED (without BGaN), and (b) B-LED (with 100 nm BGaN back-barrier layer).

3. RESULTS AND DISCUSSION

3.1. Band Diagram Energy

The energy band diagram is shown in Figures 2(a) and (b); the electron and hole concentrations are given in Figures 3(a) and (b). These figures can help to understand the operating principle of the LED.

The double heterostructure design helps to optimize the efficiency of the LED. The lower InGaN layer band gap forms a potential well which captures electrons in the conduction band and holes in the valence band. When direct polarization is applied, quasi-Fermi levels overlap the conduction and valence bands in the potential well, resulting in a high concentration of electrons and holes in the InGaN layer. In order to recombine, electron and hole both need to be at the same x -coordinate, so the potential well localizes the emission to within the InGaN layer. As desired, wavelength is emitted only by the InGaN material and the localization of the emission increases the proportion of recombination rate²¹ occurring within the InGaN layer, the efficiency of the LED increases.²²

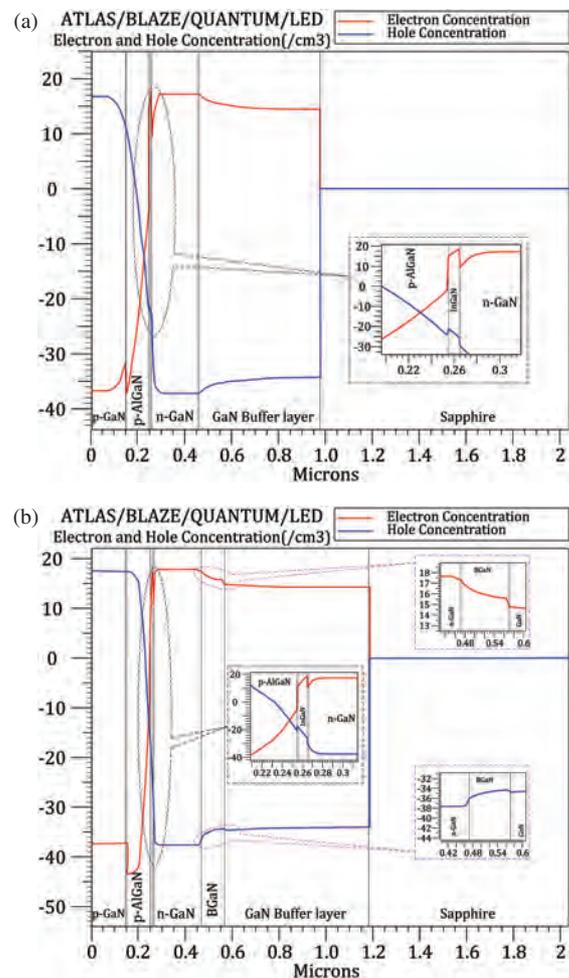


Fig. 3. Electron and hole concentration. (a) A-LED (without BGaN), and (b) B-LED (with 100 nm BGaN back-barrier layer).

Within B-LED, we can see that the B GaN layer forms an electrostatic barrier which could improve the performance of the LED.

3.2. Electrical Characteristics

Figure 4(a) represents the voltage–current characteristics (I – V) of A-LED; and Figure 4(b) represents I – V of B-LED, for different thicknesses of $B_{0.1}Ga_{0.9}N$ back-barrier layer: 1 nm, 5 nm, 10 nm, 50 nm, and 100 nm.

A sudden increase in the current is observed when the threshold voltage (V_{TH}) is reached; this voltage essentially depends on the band gap energy of the semiconductor forming the LED.

For A-LED; we find a threshold voltage of 3 V and a current of 0.169 mA (a current density of 4.22 kA/cm^2) at an anode voltage of 5 V.

For B-LED; we find a threshold voltage of 2.75 V. The anode current is remarkably improved in B-LED; it is about 0.32 mA at an anode voltage of 5 V, for only 10 nm thick B GaN. The current increases to almost 0.5 mA (a current density of 12.5 kA/cm^2) for a B GaN thickness of 100 nm; it is then three times greater than that

in A-LED, with the same applied voltage. These results show that the B GaN back-barrier layer confines the electrons and prevents their leakage towards the buffer layer, improving then the anode current.

Figure 5 represents the luminous power of A-LED and B-LED as a function of the anode voltage. We obtain a luminous power about of 0.4 mW at $V = 5 \text{ V}$, for the first LED.

For B-LED and with 1 nm B GaN thickness, we have a luminous power greater of 0.4 mW, and it increases up to about 0.9 mW for 100 nm B GaN thickness. The luminous power²³ is thus about two times greater than that of the A-LED.

3.3. Optical Characteristics

The spectral energy density emitted is the measurable quantity by a spectrometer, making it possible to characterize a source of light emission with regard to its frequency (or energy) distribution. Figure 6 represents the power spectral density as a function of the wavelength. For A-

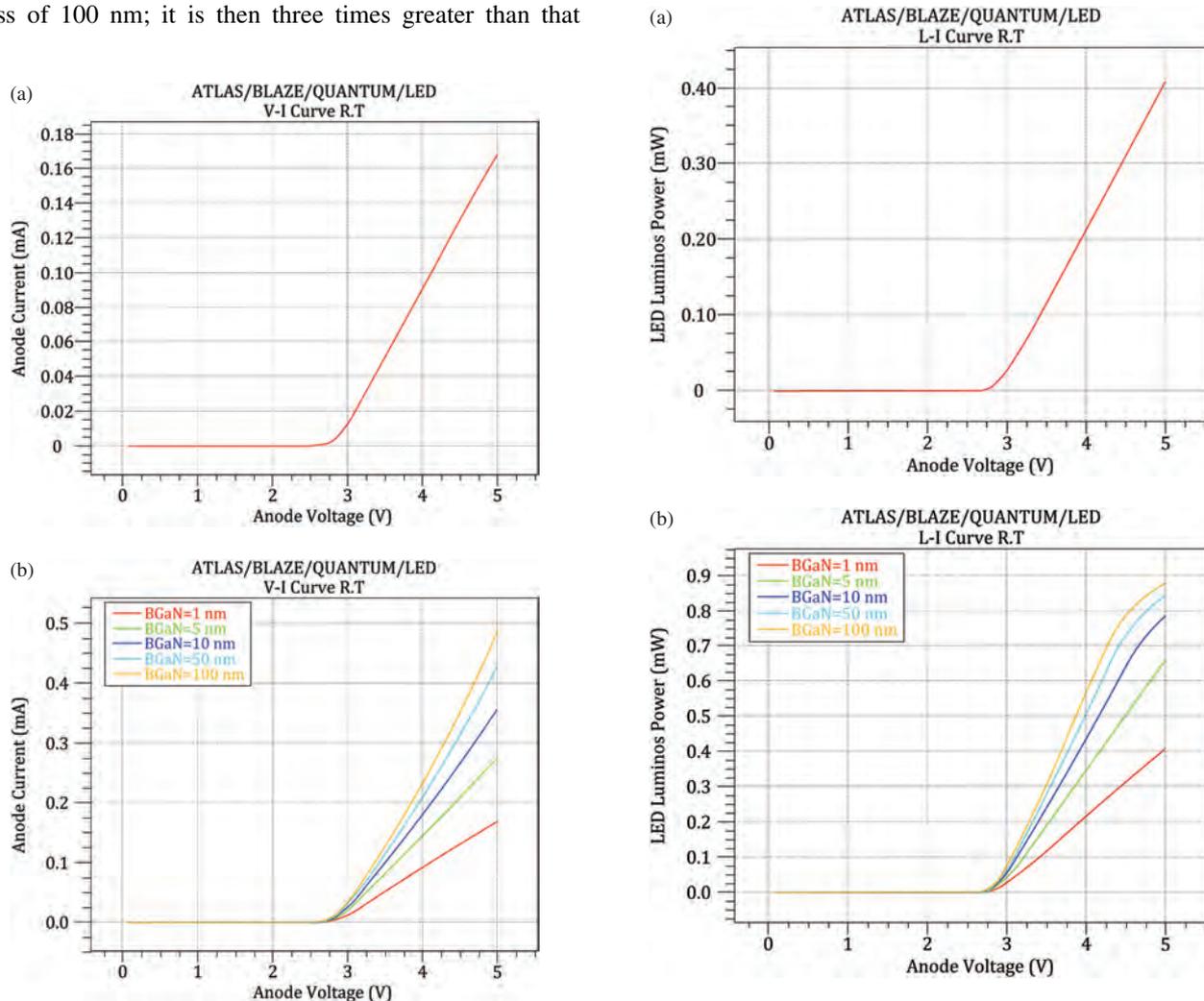


Fig. 4. I – V characteristic of (a) A-LED, and (b) B-LED.

Fig. 5. The luminous power as a function of the anode voltage for (a) A-LED, and (b) B-LED.

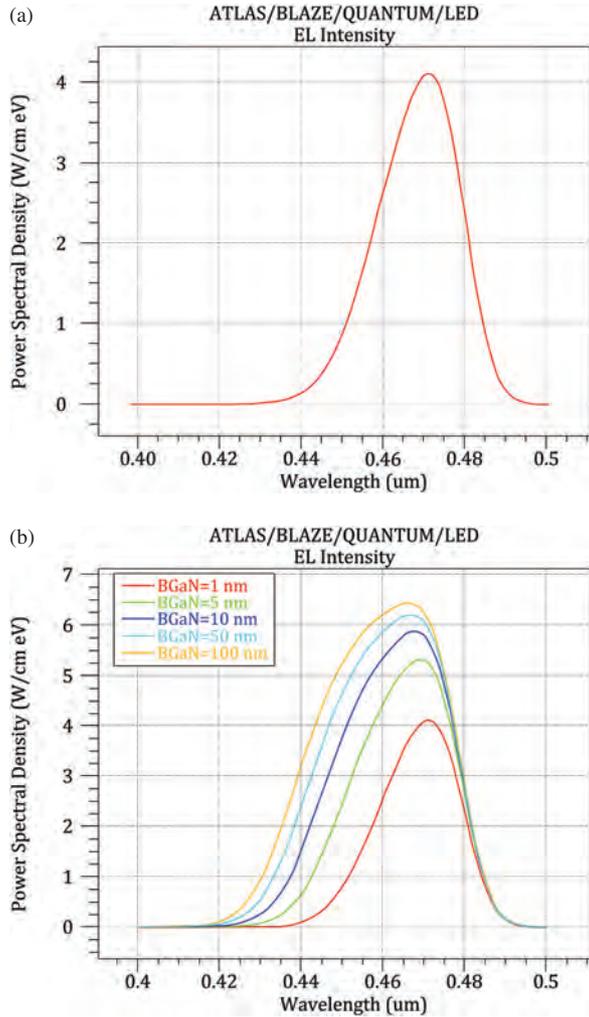


Fig. 6. Electroluminescence spectra of (a) A-LED, and (b) B-LED.

LED, we obtain a peak of the power spectral density of about 4.11 W/cm eV at a wavelength of 471 nm (2.63 eV). Within B-LED and for 1 nm BGaN thickness, we have a peak of 4.12 W/cm eV at a wavelength of 471 nm (2.63 eV). The peak of the EL intensity increases with the BGaN thickness, and the peak wavelength decreases slightly; the resistance of the BGaN layer increases with its thickness, there is then an increase in the quantum confinement of the carriers and therefore a decrease in the Quantum-Confined Stark effect. With 100 nm, we obtain a peak of 6.42 W/cm eV at a wavelength of 465 nm (2.66 eV).

We note that the spectrum broadens towards higher energies when the thickness of the BGaN increases. For a larger BGaN thickness, the maximum emission wavelength would be smaller than that of A-LED and the spectrum would overlap the purple color band.

Electrons of the n-GaN layer are blocked by BGaN layer; instead of a leakage towards the buffer layer and the sapphire substrate, these electrons will participate in

Table I. Performances of the LED, with and without BGaN layer.

BGaN thickness (nm)	V_{TH} (V)	I_{max} (mA) at 5 V	P_{max} (mW) at 5 V	E_{Lmax} (W/cm eV)	λ_{peak} (nm)
1	2.63	0.169	0.409	4.12	471
5	2.64	0.275	0.663	5.31	469
10	2.64	0.358	0.787	5.87	468
50	2.65	0.428	0.844	6.20	467
100	2.66	0.489	0.881	6.42	465
Without BGaN	2.63	0.169	0.409	4.11	471

the emission of light, with a higher energy and a lower intensity than those of the quantum well.

The results of the last three characteristics are given in Table I.

3.4. Wall-Plug Efficiency

Figures 7(a) and (b) represent the wall-plug efficiency (WPE) for the two LEDs as a function of current, at room temperature;²⁴ results are given by Table II.

Without BGaN, the LED exhibits a maximum efficiency of 68.91% at 24 μ A. With BGaN back-barrier layer, we

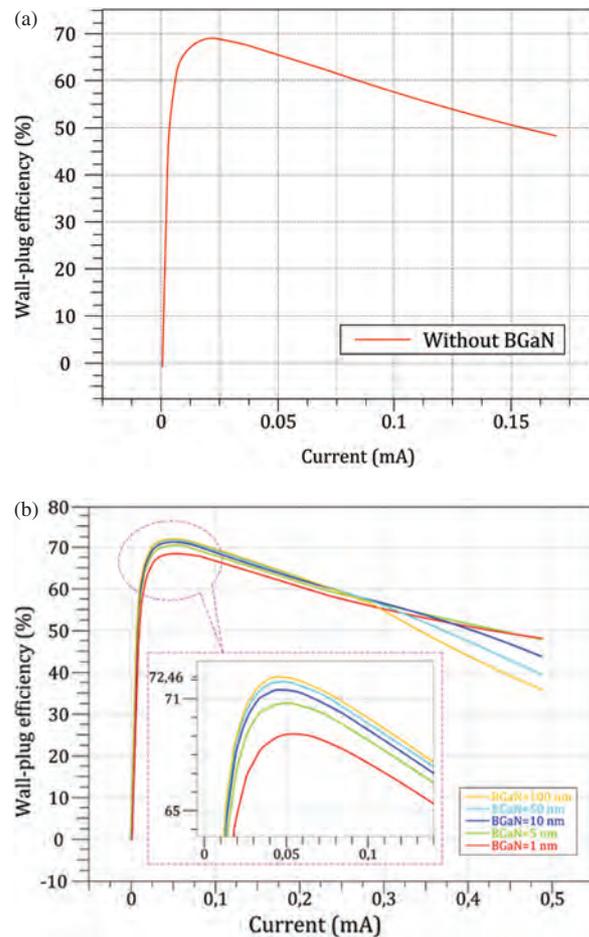


Fig. 7. Wall-plug efficiency of (a) A-LED, and (b) B-LED.

Table II. The wall-plug efficiency, with and without B GaN layer.

B GaN thickness (nm)	Maximum WPE (%)	Current (μ A)	WPE (%) at 0.15 mA
1	68.99	20	63.68
5	70.89	31	64.82
10	71.69	39	65.42
50	72.17	45	65.95
100	72.46	50	66.32
Without B GaN	68.91	24	50.62

obtain a maximum WPE between 68.99% at 20 μ A and 72.46% at 50 μ A.

For a current of 0.15 mA, we obtain a WPE of 50.62% for A-LED; for B-LED, we obtain a WPE of 63.68% (1 nm B GaN thick) and 66.32% (100 nm B GaN thick). The second LED presents an efficiency droop²⁵ smaller than of the first LED, thanks to the B GaN back-barrier layer.

From about 0.4 mA, the WPE is better and has a smaller slope for a smaller thickness of B GaN. At 0.5 mA, the WPE is about 37%, 40%, 45%, and 50% for 100 nm, 50 nm, 10 nm, 5 nm and 1 nm of B GaN thickness, respectively. It remains better than that of A-LED at 0.15 mA.

4. CONCLUSION

p-GaN/p-AlGaInGaN/n-GaN/GaN and p-GaN/p-AlGaInGaN/n-GaN/B GaN/GaN LEDs were simulated. In the second LED, B_{0.01}Ga_{0.99}N was used as a back-barrier layer like that in HEMTs. We found that electrical and optical characteristics were improved with the use of a B GaN back-barrier layer. For the same anode voltage and for a B GaN thickness of 100 nm; anode current, luminous power and power spectral density were three times greater in the LED with B GaN layer than that in the LED without B GaN. Thanks to B GaN, the wall-plug efficiency was improved and it had a smaller droop when the anode current increased. The performances of the LED were then improved with only 1% of boron and would be better with a molar fraction of boron greater than 1% in the B GaN layer.

In addition; a B GaN back-barrier layer has two effects: a polarization induced band discontinuity and a resistive barrier (electrostatic barrier) resulting from its excellent insulating properties. B GaN increases the resistivity of the buffer and prevents the electron leakage; then, it improves the electron confinement in the quantum well, and the performance of the LED.

It would be important to make experimental study for comparison with our simulation results.

Acknowledgment: This work was supported by University of Abou-Bekr Belkaid, Materials and Renewable Energy Research Unit, Tlemcen, Algeria. I am grateful to Professor Dr. A. HAMDOUNE for his support during this work.

References and Notes

- H. P. Maruska, The preparation and properties of vapor-deposited single-crystal-line GaN. *Appl. Phys. Lett.* 15, 327 (1969).
- L. Liyi, P. Mingyin, and W. Lotha, Low temperature spectroscopic properties of divalent bismuth doped B_{a2P2O7} for white light LEDs. *Sci. Adv. Mater.* 9, 490 (2017).
- T. Baghdadli, Etude des propriétés structurales et électroniques de nouveaux matériaux à base d'alliages III-N pour l'optoélectronique, Ph.D. Thesis, University of Abou-Bakr Belkaid, Tlemcen, Algeria (2009).
- L. Williams and E. Kioupakis, BInGaN alloys nearly lattice-matched to GaN for high-power high-efficiency visible LEDs, Department of Materials Science and Engineering, University of Michigan, Ann Arbor, Michigan 48109, USA, July (2017).
- S. Nakamura, T. Mukai, and M. Senoh, Candela-class high-brightness InGaN/AlGaIn double-heterostructure blue-light-emitting diodes. *Appl. Phys. Lett.* 64, 1687 (1994).
- X. Mubia, L. Dongy, Z. Guoxia, Z. Lihua, Q. LiQin, X. Lihong, and H. Tingting, Yellow white to blue white tunable luminescent properties of Dy³⁺ Tm doped Sr₂LiSiO₄F phosphors for Near-UV light-emitting diodes. *Sci. Adv. Mater.* 9, 475 (2017).
- S. Nakamura, M. Senoh, N. Iwasa, S. Nagahama, T. Yamada, and T. Mukai, Superbright green InGaIn single-quantum-well-structure light-emitting diodes. *Jpn. J. Appl. Phys.* 34, L1332 (1995).
- Technology focus LEDs and their applications. *Nat. Photonics* 1, 23 (2007).
- H.-Y. Ryu, K.-S. Jeon, M.-G. Kang, Y. Choi, and J.-S. Lee, Dependence of efficiencies in GaN-based vertical blue light-emitting diodes on the thickness and doping concentration of the n-GaN layer. *Optics Express* 21, A190 (2013).
- Z. Jiayu, L. Liy, and P. Mingyin, A new red aluminate phosphor CaAl_{12O₁₄} activated by B₂ for white LEDs. *Science of Advanced Materials* 9, 485 (2017).
- S. Gautier, G. Patriarche, T. Moudakir, M. Abid, G. Orsal, K. Pantzas, D. Troadec, A. Soltani, L. Largeau, O. Mauguin, and A. Ougazzaden, Deep structural analysis of novel B GaN material layers grown by MOVPE. *Journal of Crystal Growth* 315, 288 (2011).
- N. Grandjean and J. Massies, Les nitrides d'éléments III: des semiconducteurs III-V singuliers? Centre de recherche sur l'hétéroépitaxie et ses applications (CRHEA), UPR 10 CNRS, bât. 5, rue Bernard Grégory, Sophia Antipolis, 06560 Valbonne.
- Q. Lian, H. Mia, Z. Shuwen, and L. Shutu, Fabrication of blue light emitting diode with vertical structure on the ZnO substrate. *J. Nanoelectron. Optoelectron.* 12, 76 (2017).
- J. Wu, W. Walukiewicz, K. M. Yu, J. W. Ager III, E. E. Haller, H. Lu, W. J. Schaff, Y. Saito, and Y. Nanishi, Unusual properties of the fundamental band gap of InN. *Appl. Phys. Lett.* 80, 3967 (2002).
- R. Dingle, D. D. Sell, S. E. Stokowski, and M. Ilegems, Absorption, reflectance, and luminescence of GaN epitaxial layers. *Phys. Rev. B* 4, 1211 (1971).
- J. Wu and W. Walukiewicz, Band gaps of InN and groups III nitride alloys. *Superlattices Microstruct.* 34, 63 (2003).
- S. L. Rumyantsev, M. E. Levinshtein, A. D. Jackson, S. N. Mohammad, G. L. Harris, M. G. Spencer, and M. S. Shu, Properties of Advanced Semiconductor Materials GaN, AlN, InN, BN, SiC, SiGe, Edited by M. E. Levinshtein, S. L. Rumyantsev, and M. S. Shur, Wiley, New York (2001), pp. 6–92.

18. V. Bougrov, M. E. Levinshtein, S. L. Rumyantsev, and A. Zubrilov, Properties of Advanced Semiconductor Materials GaN, AlN, InN, BN, SiC, SiGe, edited by M. E. Levinshtein, S. L. Rumyantsev, and M. S. Shur Wiley, New York (2001), pp. 1–30.
19. A. Ougazzaden, S. Gautier, T. Moudakir, Z. Djebbour, Z. Lochner, S. Choi, H. J. Kim, J. H. Ryou, R. D. Dupuis, and A. A. Sirenko, Band gap bowing in BGaN thin films. *Appl. Phys. Lett.* 93, 083118 (2008).
20. Y. Hong-Ping, L. Shi-Bin, Z. Peng, W. Shuang-Hong, W. Xiong-Bang, W. Zhi-Ming, and C. Zh, Optical performance of N-Face AlGaN ultraviolet light emitting diodes. *Chinese Physics Letters* 31, 108502 (2014).
21. Y. Gwangseo, J. Younghu, K. Byung-Ja, and K. Jihyun, Electrical and optical damage to GaN-based light-emitting diodes by 20-MeV proton irradiation. *Science of Advanced Materials* 8, 160 (2016).
22. M. Pooley (ed.), Investigating LED efficiency via multiphysics simulation, *COMSOL Blog* (2014).
23. L. H. Wo, J. Sujin, L. H. Won, K. Y. Kwa, and Y. S. So, Blue electroluminescent dibenzofuran-substituted bianthracene derivatives for organic light-emitting diodes. *Science of Advanced Materials* 9, 1302 (2017).
24. G. Guorui, X. Weidon, Y. Cheng, F. Weibin, L. Yanme, Z. Zhongfan, and L. Xiaojuan, A novel single-component white-emitting Tb and Mn Co-doped large-sized $Y_3Al_5O_{12} : Ce^{3+}$ Single crystal for white LED. *Science of Advanced Materials* 8, 1354 (2016).
25. L. Kin-Tak, L. Wei-Hen, and C. Shouu-Jin, GaN-based light emitting diodes with two-step grown GaN quantum barriers. *Science of Advanced Materials* 8, 1451 (2016).

ملخص:

يتناول هذا العمل دراسة الخصائص الإلكترونية والبصرية لمصابيح LEDs وحيدة الأبارالكمية باستخدام برنامج SILVACO. البنية التي نقوم بمحاكاتها عبارة عن صمام ثنائي باعثٍ لضوءٍ أزرقٍ ذي قاعدة بُئرٍ كمي موجود بين طبقتين من نوع الجاليوم GaN مدعم على التوالي بـ p و n. في الجزء الأول من هذا العمل، ندرس تأثير طبقة الحظر الإلكترونية AlGaIn على أداء LEDs. في الجزء الثاني، نجري دراسة حول LED الأزرق ذي بنية متغايرة $B_yIn_xGa_{1-x-y}N/GaN$. في الجزء الثالث، نقوم بإدخال طبقة من المادة الثلاثية BGaN كطبقة عازلة خلفية. تم تحسين الخصائص الكهربائية والبصرية لمصباح LED الأزرق ذي SQW InGaIn باستخدام طبقة حاجز خلفية BGaN.

الكلمات الرئيسية:

InGaIn، BInGaIn، BGaN، الصمام الثنائي الباعث للضوء، الضوء الأزرق، SILVACO.

Abstract:

This work deals with the study of the optoelectronic properties of single-quantum well LEDs using the SILVACO software. The structure that we simulate is a quantum well-based blue light-emitting diode sandwiched between two p-and n-doped GaN layers. In the first part of this work, we study the influence of the AlGaIn electron blocking layer on LED performance. In the second part, we carry out a study of the blue LED based on the $B_yIn_xGa_{1-x-y}N/GaN$ (QW) heterostructure. In the third structure, we insert a layer of ternary material, BGaN, as a back barrier layer. The electrical and optical characteristics of InGaIn SQW blue LED are greatly enhanced with the use of a BGaN back barrier layer.

Keywords: InGaIn, BInGaIn, BGaN, light emitting diode, blue light, SILVACO.

Résumé :

Ce travail porte sur l'étude des propriétés optoélectroniques des LEDs à simple puits quantique en utilisant le logiciel SILVACO. La structure que nous simulons est une diode électroluminescente bleue à base de puits quantique pris en sandwich entre deux couches de GaN dopées respectivement p et n. Dans la première partie de ce travail, nous étudions l'influence de la couche de blocage électronique AlGaIn sur les performances des LEDs. Dans la deuxième partie, nous effectuons une étude sur la LED bleue à base de l'hétérostructure $B_yIn_xGa_{1-x-y}N/GaN$ (SQW). Dans la troisième structure, nous insérons une couche de matériau ternaire BGaN comme couche barrière arrière. Les caractéristiques électriques et optiques de la LED bleue à SQW InGaIn sont grandement améliorées avec l'utilisation d'une couche de barrière arrière BGaN.

Mots clés : InGaIn, BInGaIn, BGaN, diode électroluminescente, lumière bleue, SILVACO.