

UNIVERSITEKASDIMERBAHOUARGLA

Facultédes nouvelles technologies de l'information et de communication
Départementd'électronique et des télécommunications



MEMOIRE FIN ETUDEMASTER PROFESSIONNEL

Domaine:sciences et technologies

Filière:Electronique

Spécialité : Instrumentation et system

Présenté par:

BENAMARA SALIM

BELMASSOUD MOHAMMED

Thème

**Contribution à l'étude et la simulation des structures semi-conductrices
à puits quantique : application en LED**

Soutenu publiquementle :

13/05/2022

Devantlejury:

Nom et prénoms :	grade :	fonction :	université :
Mr. Belkhier Benhelal	M.C.B	Président	UKM OUAREGLA
Mr. Benathmane Khaled	M.A.A	Encadreur	UKM OUAREGLA
Mr.Otmani Hamza	M.C.B	Exminateur	UKM OUAREGLA

AnnéeUniversitaire : 2021/2022

Dédicaces

Nous dédions cet humble travail à nos parents et à tous nos enseignants et professeurs, en particulier l'encadreur Khaled Benathmane, pour tout ce qu'il a fait pour nous, et nous n'oublions pas non plus tous nos collègues dans notre parcours académique, et nous demandons également à Dieu Tout-Puissant de nous aider nous dans notre prochain voyage.

Résumé

Le développement de LED à base de nitrures représente un enjeu important tant sur le plan scientifique qu'industriel et sociétal. De par leur large bande interdite, les matériaux semi-conducteurs à base de nitrures d'éléments III (composés III-N) tels que le GaN et ses alliages sont de très bons candidats pour la réalisation de dispositifs optoélectroniques nouveaux. Néanmoins, ces systèmes présentent bon nombre de limitations, principalement dues à l'évolution des propriétés de l'InGaN lorsque la concentration d'indium augmente. Les effets de contrainte et de polarisation affectent la qualité du matériau et donc l'émission spontanée de la LED en général. De plus, dans un contexte de raréfaction des ressources naturelles, l'utilisation de l'indium, matériau rare et cher, doit se faire de manière raisonnée. Or les systèmes actuels (micro-écran, dispositifs portatifs,) requièrent des LED toujours plus puissantes et riches en Indium. Le but est aujourd'hui d'obtenir des LED haute performance, avec un bon rendu de couleurs et surtout à moindre coût en utilisant des matériaux alternatifs

Mots-clés : nitrures, LED, semi-conducteurs, InGaN, matériaux, d'éléments III

Summary:

The development of nitride-based LEDs represents an important challenge both scientifically and industrially. societal. Due to their large forbidden band, semiconductor materials based on nitrides of III elements (III-N compounds) such as GaN and its alloys are very good candidates for the production of new optoelectronic devices. Nevertheless, these systems have many limitations, mainly due to the evolution of the properties of InGaN when the indium concentration increases. Stress and bias effects affect material quality and therefore the spontaneous emission of the LED in general. Moreover, in a context of scarcity of natural resources, the use of indium, a rare and expensive material, must be done in a reasoned way. However, current systems (micro-screen, portable devices, etc.) require LEDs that are ever more powerful and rich in Indium. The goal now is to get High performance LEDs, with good colour rendering and above all at a lower cost by using alternative materials

Keywords: nitride, LED, semiconductor, InGaN, materials, III elements

ملخص

يمثل تطوير مصابيح LED القائمة على النيتريد تحديًا مهمًا على الصعيدين العلمي والصناعي مجتمعيين. نظرًا لشريطها الكبير الممنوع، فإن مواد أشباه الموصلات تعتمد على نيتريدات العناصر III (مركبات III-N) مثل GaN وسبائكها مرشحين جيدين جدًا لإنتاج أجهزة إلكترونية ضوئية جديدة. ومع ذلك، فإن هذه الأنظمة لها العديد من القيود، ويرجع ذلك أساسًا إلى تطور خصائص InGaN عندما يزيد تركيز الإنديوم. تؤثر تأثيرات الإجهاد والتحيز على جودة المواد وبالتالي الانبعاث التلقائي ل LED بشكل عام. علاوة على ذلك، في سياق ندرة الموارد الطبيعية، يجب أن يتم استخدام الإنديوم، وهو مادة نادرة ومكلفة، بطريقة منطقية. ومع ذلك، فإن الأنظمة الحالية (شاشة صغيرة، وما إلى ذلك) تتطلب الأجهزة المحمولة مصابيح LED أكثر قوة وثراءً في الإنديوم. الهدف الآن هو الحصول على مصابيح LED عالية الأداء، مع عرض جيد للألوان وقبل كل شيء بتكلفة أقل باستخدام مواد بديلة.

كلمات مفتاحية نتريد ، أشباه الموصلات، مواد، العناصر الثلاثة

Sommaire

Chapitre 1 Les LED à base de nitrures d'éléments III

Introduction	1
1.1 Propriétés des nitrures d'élément III	3
1.1.1 Structure cristallographique	3
1.1.2 Polarité et polarisations spontanée	6
1.1.3 Diagrammes de bandes	8
1.1.4 Les hétérostructures GaN/AlGaIn/GaN/InGaN	11
Conclusion	14

Chapitre 2 : Simulation des LED avec SILVACO

Introduction	15
2.1 Structure de la LED simulée	16
2.2 Équations de base et modèles utilisés	17
2.2.1 Équation de Poisson	18
2.2.2 Équation de continuité	19
2.2.3 Équation de transport	19
2.2.4 Mécanismes de génération/recombinaison	20
2.3 SILVACO ATLAS	26
2.4 Entrées et Sorties dans SILVACO ATLAS	27
2.5 Structure d'entrée dans SILVACO ATLAS	30
Conclusion	33

Chapitre 3 : simulation et résultats obtenus

Introduction	34
3.1 Structure de dispositif	35
3.2 Étapes de simulation	36
Conclusion	40

Liste de figures

Figure 1.1 – Gap des nitrures d'éléments III en fonction du paramètre de maille obtenu en négligeant l'influence du paramètre de courbure.

Figure 1.2 – Green gap, d'après [2]

Figure 1.3–Structure classique d'une LED à base de nitrures d'éléments III

Figure 1.4–Maille unitaire Wurtzite du GaN [7].

Figure 1.5 – Représentation des plans de la maille Wurtzite dans la notation des indices de Miller-Bravais [7].

Figure 1.6–Illustration de la polarité Ga et N pour la maille Wurtzite [8].

Figure 1.7 – Structure de bandes théorique des composés ternaires InN, GaN et AlN. La bande de valence est composée de trois bandes séparées à cause de la faible symétrie de la structure Wurtzite et de l'interaction spin-orbite [11].

Figure 1.8–Variation du gap de l' $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{N}$ en fonction de la composition en Gallium déduit de mesures d'absorption (\square) et de photoluminescence (\blacksquare, \square). Les courbes correspondent à l'interpolation des données expérimentales et de l'expression du gap de l'InGaN en prenant $b=1.43$ eV avec $E_g(\text{InN})=0.78$ eV (trait plein) et $E_g(\text{InN})=1.9$ eV (pointillé). Pour les références [2], [3] et [4] se référer à l'article [12]

Figure 1.9 – Illustration des trois types de décalages des bords des bandes à l'interface d'une hétérojonction entre le semi-conducteur 1 et le semi-conducteur 2. VB_i et VC_i sont respectivement les bandes de valence et de conducteur du semi-conducteur i [7].

Figure 1.10 – Séparation des électrons et des trous créés au voisinage d'une interface entre deux semi-conducteurs à alignement de type II [7].

Figure 1.11–Distribution des porteurs de charges dans a) une homojonction et b) une double hétérojonction. Dans une homojonction, les porteurs de charge sont répartis sur une longueur de diffusion L_n et L_p alors que dans une hétérojonction ils sont localisés dans la zone de puits quantiques d'épaisseur W_{DH} [14].

Figure 1.12–Illustration de la fuite des porteurs en l'absence d'EBL.

Figure 1.13–Schéma d'un puits quantique de type GaN/InGaN.

Figure 2.1–Schéma d'une LED standard à base de semi-conducteurs III-N.

Figure 2.2– Processus de recombinaison SRH dans un semi-conducteur. L'électron est représenté par un cercle plein noir et le trou par un cercle vide. Les figures (a) et (b) décrivent la recombinaison et les figures (c) et (d) la génération d'une paire électron/trou. [14]

Figure 2.3– Processus de recombinaison Auger (e-h-a) direct et (b) indirect. [27]

Figure 2.4– Diagramme de bandes de la LED à l'équilibre ($V=0V$)

Figure 2.5 – Diagramme de bandes de la LED pour une densité de courant égale à $1 A/cm^2$ et zoom sur un des puits quantiques.

Figure 2.6– Caractéristiques $V(J)$ et $L(J)$ de la LED standard à multi puits émettant dans le bleu.

Figure 2.7– Caractéristique $J(V)$ de la LED standard à multi puits émettant dans le bleu.

Liste de abréviations

LED: light-emitting diode

Ga: Gallium

GaN: Gallium-Nitride

In: Indium

InN: Indium-Nitride

Al: Aluminium

AlN: Aluminium-Nitride

N: Nitrogen

WZ: Wurtzite

EQE: External Quantum Efficiency

EBL: Electron Blocking Layer

MQE: multi quantum wells

eV: electron volt

Introduction générale

En 2014, le département américain de l'énergie a publié un rapport intitulé "EnergySavingsForecast of Solid State Lighting in General Applications", qui indiquait que l'éclairage représentait désormais plus de 20 % de la consommation énergétique globale [1]. De plus, tant sur le plan économique qu'écologique, car les États-Unis dépensent environ 60 milliards de dollars pour la production d'électricité, et les énergies fossiles ont un impact direct sur les émissions de gaz à effet de serre et le changement climatique. Selon ce rapport, le développement des LED électroluminescentes.

Pour l'éclairage (éclairage de pointe ou "Solid State Lighting" en anglais), il est déjà permis d'économiser 40% de consommation d'énergie sur les 60 nécessaires pour atteindre les objectifs 2030. Les diodes électroluminescentes (DEL) ou "diodes électroluminescentes" (LED) sont donc des alternatives d'éclairage peu fiables aux sources traditionnelles telles que les lampes à incandescence. Ils présentent de nombreux avantages, dont des coûts de fabrication réduits et la possibilité de s'intégrer dans des structures technologiques pour des applications d'affichage (téléviseurs, lunettes de réalité augmentée, etc.). Les semi-conducteurs III-N ont eu le monopole de l'industrie des diodes électroluminescentes pendant des décennies, grâce à leurs propriétés optoélectroniques uniques. De ce fait, la majorité des dispositifs électroluminescents sont constitués d'une hétérostructure GaN/InGaN. Isamu Akasaki, Hiroshi Amano et ShujiKakamura ont également reçu le prix Nobel en 2014 pour leurs contributions à l'avancement des matériaux GaN et au développement des LED bleues.

Chapitre 1 Les LED à base de nitrures d'éléments III

Introduction

Les diodes électroluminescentes (ou LED) à base de nitrures d'éléments III sont très utilisées dans le domaine de l'éclairage à l'état solide (*Solid State Lighting* ou *SSL*) à cause de l'excellente qualité des dispositifs (haute efficacité, faible toxicité et grande durée de vie) [1]. Une autre propriété essentielle des matériaux III-N, (In, Ga) N, est leur capacité théorique à balayer tout le spectre visible, la variation du gap en fonction du paramètre de maille illustré sur la figure 1.1.

Néanmoins, en pratique, le spectre d'émission de ces LED est limité par la chute brutale de l'efficacité quantique dans le domaine jaune-vert, plus connue sous le nom de *green gap* illustré sur la figure 1.2. L'efficacité d'une LED, ou *External Quantum Efficiency* (EQE) est mesurée par le rapport entre le nombre de photons extraits de la structure et le nombre d'électrons injectés. Une efficacité quantique de 89% a été mesurée par la société Nichia pour des LEDs bleues à base

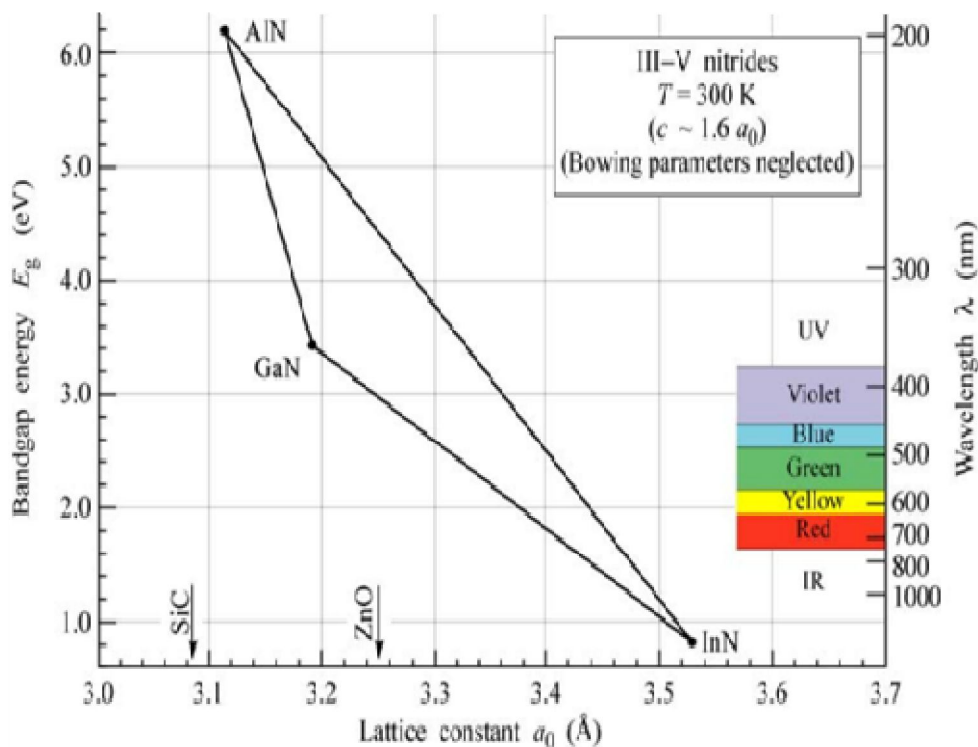


Figure 1.1 – Gap des nitrures d'éléments III en fonction du paramètre de maille obtenu en négligeant l'influence du paramètre de courbure.

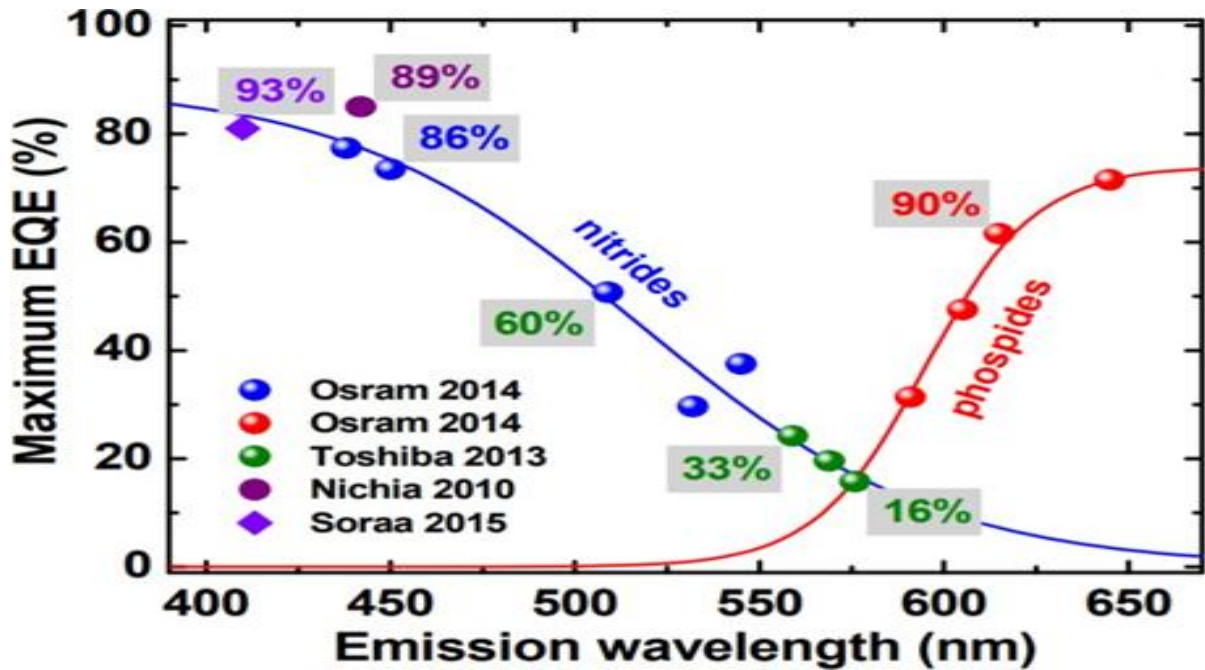


Figure 1.2 – Green gap, d’après [2]

D’InGaN. Narukawa et al. [3] rapportent également une EQE de 84.3% pour une LED bleue émettant à 444 nm. Le domaine rouge est quant à lui dominé par les LED à base de phosphures, (Al,Ga,In)P. OSRAM atteint une EQE de 72% pour des LED à base de AlInGaP émettant à 650 nm. L’EQE des LED vertes n’excède pas aujourd’hui 30% pour les LED à base d’InGaN et 10% pour les LED à base de AlInGaP. Dans le cas des phosphures, la chute de l’efficacité est une limitation fondamentale du matériau. En modifiant la composition du système AlInGaP pour émettre dans le vert plutôt que dans le rouge, le gap devient indirect, favorisant ainsi les recombinaisons non radiatives et la fuite des porteurs [4]. Les nitrures, eux, préservent un gap direct quel que soit la composition et sont donc les seuls à pouvoir dépasser le green gap, comme nous le verrons dans la suite.

Dans ce chapitre, nous rappellerons les principales caractéristiques des matériaux III-N et de leurs alliages. Nous verrons comment ces caractéristiques peuvent être à l’origine de la chute d’efficacité des LED vertes et nous donnerons les pistes possibles pour dépasser ce problème.

1.1 Propriétés des nitrides d'éléments III

Comme illustré sur la figure 1.3, les LED à base de matériaux III-N sont la plupart du temps constituées d'une zone active à base d'InGaN entourée de barrière de GaN. Une couche de blocage électronique (EBL) à base d'AlGaIn est ajoutée du côté de la LED afin de limiter la fuite des porteurs de la zone active. Ainsi, afin de comprendre les caractéristiques de ces LED, nous commencerons tout d'abord par étudier les propriétés des binaires III-N de leur alliage puis nous verrons les caractéristiques des hétérostructures (notamment GaN/InGaN).

Les matériaux binaires III-N ont été largement étudiés depuis les années 1970 et leurs propriétés

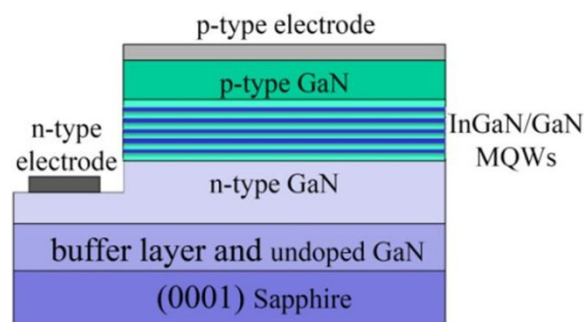


Figure 1.3 – Structure classique d'une LED à base de nitrides d'éléments III

Sont bien connues. Vurgaftman et al. [5] propose une synthèse des mesures expérimentales et des calculs théoriques réalisés sur ces matériaux et indique les paramètres recommandés à utiliser lors des simulations des dispositifs opto-électroniques. Nous nous appuyerons donc sur ses conclusions dans la suite de ce chapitre. Le tableau 1.1 rappelle les propriétés des binaires GaN, AlN et InN. Les masses effectives sont issues des calculs plus récents de Punya et al. [6]. Les différents termes seront explicités dans la suite de ce chapitre.

1.1.1 Structure cristallographique

Les nitrides d'éléments III sont formés par l'association d'un ou plusieurs éléments de la colonne III du tableau périodique (Aluminium (Al), Gallium (Ga) et Indium (In)) avec l'élément Azote (N) de la colonne V. Ces semi-conducteurs cristallisent majoritairement sous la forme d'une structure de type Wurtzite (WZ ou phase- α), stable à température ambiante. La structure Wurtzite idéale est hexagonale et comprend deux réseaux hexagonaux formés chacun d'atomes d'azote ou de métal, décalés d'une distance $u = 3/8$ dans la direction $[0001]$. Le groupe d'espace est $P6_3mc$ et le groupe ponctuel du cristal est $(6/m)mm$. L'absence de symétrie est responsable de la polarité de la structure. Nous détaillerons cette spécificité dans le paragraphe suivant. La figure

1.4

Représente lamaille unitaire du GaN type Wurtzite (WZ).

Les valeurs des paramètres de maille issus de [5] sont rappelés dans le tableau 1.1

Paramètres		GaN	AlN	InN
Paramètres de mailles à 300K	a (Å)	3.189	3.112	3.545
	c (Å)	5.185	4.982	5.703
	Rapport c/a	1.626	1.601	1.609
	Paramètre interne u	0.377	0.376	0.381
Bande interdite (gap) à 0K	E_g (eV)	3.510	6.25	0.78
Coefficients de Varsnhi	α (meV/K)	0.909	1.799	0.245
	β (K)	830	1462	624
Paramètres de bandes	Champ cristallin Δ_{cr} (meV)	0.010	-0.169	0.04
	Interaction spin-orbite Δ_{so} (meV)	0.017	0.019	0.05
	Affinité électronique χ (eV)	4.1	5.8	1.9
Masses effectives	m_e^{\parallel} (m_0)	0.20	0.32	0.09
	m_e^{\perp} (m_0)	0.22	0.31	0.09
	m_{hh}^{\perp} (m_0)	1.96	11.11	1.69
	m_{hh}^{\parallel} (m_0)	1.85	2.94	2.00
	m_{lh}^{\perp} (m_0)	0.18	0.26	0.07
	m_{lh}^{\parallel} (m_0)	1.85	2.94	2.00
	m_{ch}^{\perp} (m_0)	1.72	3.57	1.59
	m_{ch}^{\parallel} (m_0)	0.17	0.25	0.06
	Constantes diélectriques	statique ϵ_0	8.9	8.5
à hautes fréquences ϵ_{∞}		5.35	4.6	8.4
Indice de réfraction	n	2.4	2.2	2.9

Tableau 1.1 – Propriétés générales des binaires III-V [5][6].

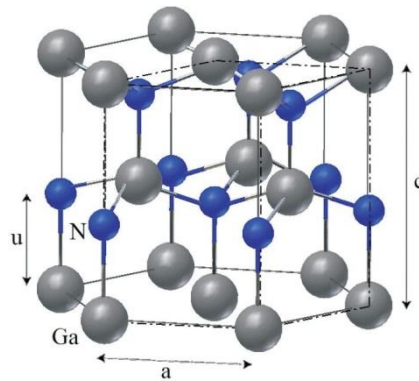


Figure 1.4 – Maille unitaire Wurtzite du GaN [7].

Les paramètres de mailles des alliages ternaires $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ et $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ sont obtenus par interpolation linéaire entre les paramètres de maille a et c des composés binaires GaN, AlN et InN (loi de Vegard) :

$$C_{InGaN} = x \times C_{InN} + (1 - x) \times C_{GaN}$$

$$a_{InGaN} = x \times a_{InN} + (1 - x) \times a_{GaN} \quad (1.1)$$

$$C_{AlGaN} = x \times C_{AlN} + (1 - x) \times C_{GaN}$$

$$a_{AlGaN} = x \times a_{AlN} + (1 - x) \times a_{GaN}$$

Avec x la composition en indium dans l'InGaN ou en aluminium dans l'AlGaN.

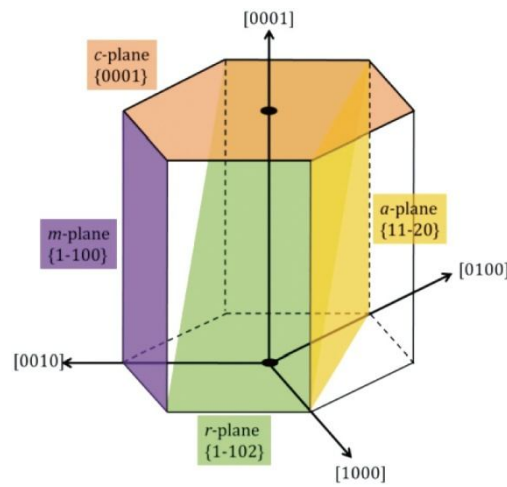


Figure 1.5 – Représentation des plans de la maille Wurtzite dans la notation des indices de Miller-Bravais [7].

1.1.2 Polarité et polarisations spontanée

Polarité :

La polarité est une propriété intrinsèque des structures non-Centro symétriques : l'absence de centre de symétrie dans la structure Wurtzite rend les deux directions $[0001]$ et $[000\bar{1}]$ non équivalentes. Selon le sens de croissance, ou selon le premier élément déposé, la polarité sera différente. Si le premier élément est l'azote (N), ce qui correspond au sens de croissance dit $[0001]$ ou direction c , la dernière couche atomique sera composée d'atomes de gallium (Ga) et la polarité sera de type Ga-face ou métal-face. Dans le cas contraire, nous aurons une polarité N-face $[000\bar{1}]$. La figure 1.6 schématise ces deux configurations N-face et Ga-face pour le GaN.

Polarisations spontanée :

La polarisation spontanée (P_{sp}) est une conséquence directe du caractère polaire du cristal de type Wurtzite. Le barycentre des charges positives (les atomes de Ga, In, Al) et des charges négatives (les atomes d'azote) ne coïncident pas dans l'espace, il y a création d'un dipôle dans chaque maille, et leur somme donne lieu à une polarisation macroscopique spontanée, présente intrinsèquement sans l'intervention d'une force externe. Le sens de cette polarisation est dépendant du sens de croissance (001) ou (00 $\bar{1}$), comme illustré sur la figure 1.6.

La polarisation spontanée influe fortement sur le comportement des dispositifs optoélectroniques : le champ associé à la polarisation du matériau sépare spatialement les électrons et les trous réduisant ainsi la probabilité de recombinaisons radiatives. La polarisation peut donc

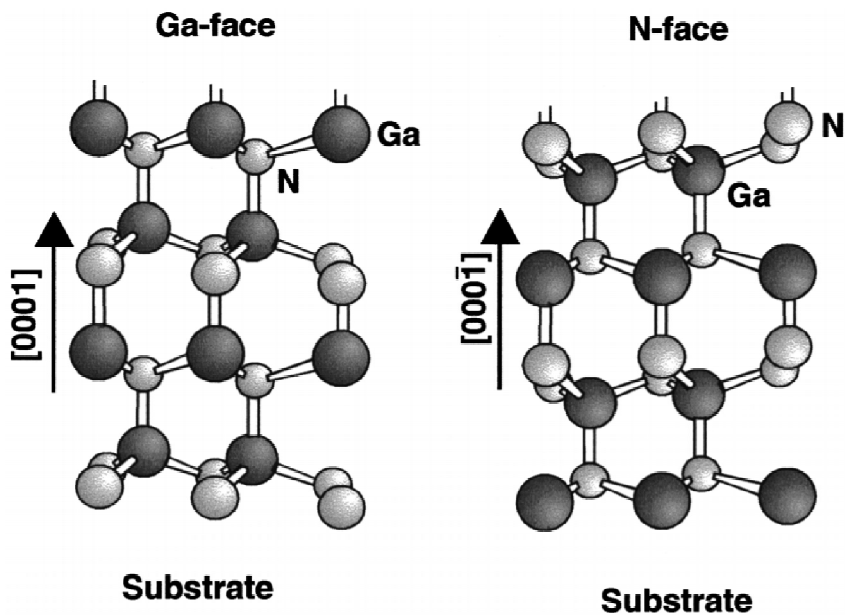


Figure 1.6 – Illustration de la polarité Ga et N pour la maille Wurtzite [8].

Améliorer les performances des composants s'ils s'agit d'extraire les porteurs ou, au contraire, limiter le rendement s'il s'agit d'émettre de la lumière comme pour les LED.

Le tableau 1.2 regroupe les valeurs de la polarisation spontanée pour les binaires GaN, InN et AlN [5] [8].

Pour les alliages ternaires comme l'InGaN la polarisation spontanée s'exprime en fonction de

la polarisation spontanée des binaires mais la relation n'est plus linéaire et fait intervenir un paramètre de courbure b telle que : [10] [9] :

$$P_{sp}(InGaN) = x \times P_{sp}(InN) + (1 - x) \times P_{sp}(GaN) - b \times x \times (1 - x) \quad (1.2)$$

Avec x la concentration en indium dans l' $In_xGa_{1-x}N$, $P_{sp}(InGaN)$ la polarisation spontanée de l' $InGaN$ [$C.m^{-2}$], $P_{sp}(GaN)$ et $P_{sp}(InN)$ la polarisation spontanée des binaires InN et GaN [$C.m^{-2}$] et b le paramètre de courbure de la polarisation spontanée dans l' $InGaN$ [$C.m^{-2}$]. Bernardini *et al.* [10] et Fiorentini *et al.* [10] ont rapporté un paramètre de courbure ("bowing parameter") de polarisation pour l' $InGaN$ égal à $b = 0.037 C.m^{-2}$.

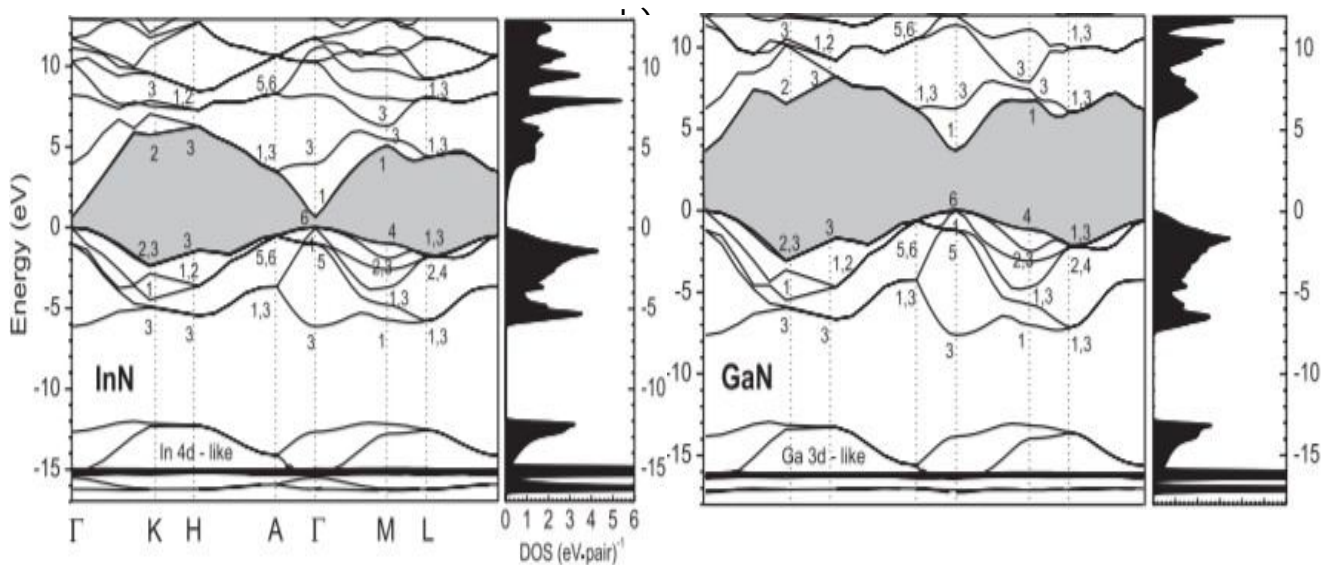
III-N	$P_{sp}(C.m^{-2})$
GaN	-0.029
InN	-0.042
AlN	-0.090

Tableau 1.2–

Valeurs de la polarisation spontanée pour les composés binaires GaN , InN et AlN [9].

1.1.3 Diagrammes de bandes

Les nitrures d'éléments III en phase hexagonale sont à gap (ou bande interdite) direct; c'est à dire que le minimum de la bande de conduction et le maximum de la bande de valence coïncident dans l'espace des k et dans notre cas sont situés au centre Γ ($k=0$) de la zone de Brillouin. La figure 1.7



Représente les structures de bandes pour AlN , InN et GaN calculées par la méthode empirique du

pseudo-potential [11], dans l'approximation des bandes paraboliques.

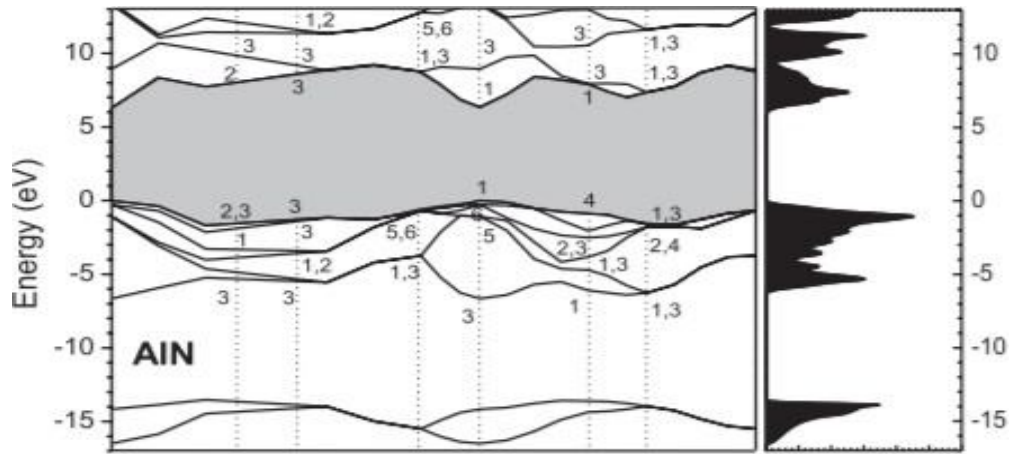


Figure 1.7 – Structure de bandes théorique des composés ternaires InN , GaN et AlN . La bande de valence est composée de trois bandes séparées à cause de la faible symétrie de la structure Wurtzite et de l'interaction spin-orbite [11].

$E_g(T)$ le gap du matériau à une température donnée [eV], $E_g(0)$ le gap du matériau à 0K, α une constante empirique [eV/K^{-1}], β une constante associée à la température de Debye [K] et T la température en [K]. Les paramètres $E_g(0)$, α et β pour les composés binaires sont regroupés dans le tableau 1.1 d'après [5].

L'expression du gap pour les composés ternaires ne suit pas la loi de Vegard mais une loi polynomiale faisant intervenir le paramètre b (en eV), appelé *paramètre de courbure* ("bowing parameter", en anglais) :

$$\begin{aligned} E_g(\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}) &= xE_g(\text{InN}) + (1-x)E_g(\text{GaN}) - b_{\text{In}}x(1-x) \\ E_g(\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}) &= xE_g(\text{AlN}) + (1-x)E_g(\text{GaN}) - b_{\text{Al}}x(1-x) \end{aligned} \quad (1.3)$$

La valeur du paramètre de courbure de l'InGaN à 0K est prise égale à 1.4 eV. Pour l'AlGaN, le paramètre de courbure couramment utilisé est 1 eV [5].

La détermination du gap de l'InN reste néanmoins un point sensible. En effet, avant 2002, le gap de l'InN était considéré égal à $E_g(\text{InN}) = 1.9 \text{ eV}$ et $b_{\text{In}} = 2.63 \text{ eV}$. Néanmoins, en 2002, Wu et al.

[12] démontre l'inadéquation de ces valeurs avec les données expérimentales, comme le montre le schéma 1.8 (extrait de [12]) et donne une nouvelle valeur pour $E_g(\text{InN}) = 0.78 \text{ eV}$, et $b_{\text{In}} = 1.43 \text{ eV}$. Vurgaftman et al. [5]

La valeur du paramètre b_{In} dans la littérature reste néanmoins très variable. L'étude la plus complète du gap de l'InGaN a été menée par Orsalet al. [13]. Le gap de l'InGaN y est déterminé par cathodoluminescence et photoluminescence pour différentes concentrations d'indium.

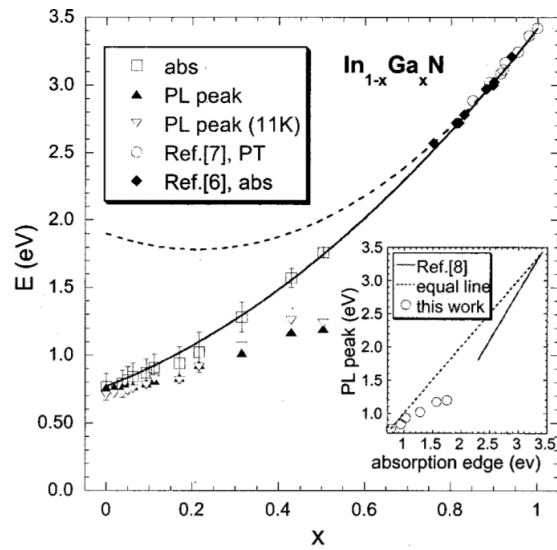


Figure 1.8 – Variation du gap de l' $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{N}$ en fonction de la composition en Gallium déduit de mesures d'absorption (\square) et de photoluminescence (\blacktriangle, ∇). Les courbes correspondent à l'interpolation des données expérimentales et de l'expression du gap de l' InGaN en prenant $b=1.43$ eV avec $E_g(\text{InN})=0.78$ eV (trait plein) et $E_g(\text{InN})=1.9$ eV (pointillé). Pour les références [2], [3] et [4] se référer à l'article [12]

1.1.4 Les hétérostructures GaN/AlGaNetGaN/InGaN

Définitions générales :

Une hétérostructure est une juxtaposition de deux semi-conducteurs de natures différentes, et par conséquent, de largeurs de bandes interdites différentes. Il existe trois types d'hétérostructures en fonction de l'alignement des bandes, comme illustré sur la figure 1.9.

Un alignement de type I correspond au cas où un semi-conducteur à plus petit gap est mis

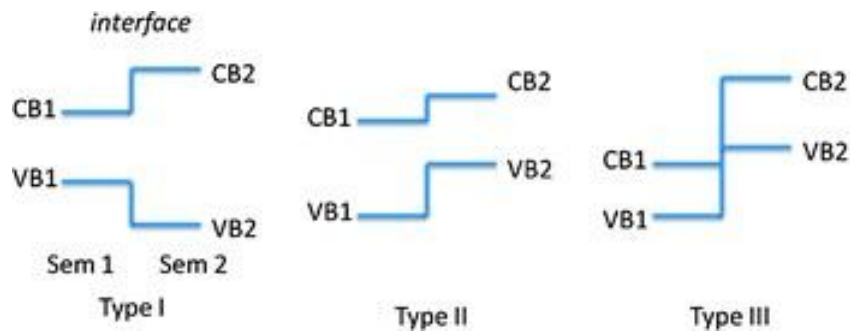


Figure 1.9 – Illustration des trois types de décalages des bords des bandes à l'interface d'une hétérojonction entre le semi-conducteur 1 et le semi-conducteur 2. VB_i et VC_i sont respectivement les bandes de valence et de conduction du semi-conducteur i [7].

En contact avec un semi-conducteur 2 à plus grand gap, et dont les bandes s'alignent de telle sorte que l'énergie maximale des bandes de valence comme l'énergie minimale des bandes de conduction correspondent au semi-conducteur 1. Un tel matériau 1 placé entre deux semi-conducteurs 2 représente le cas classique du puits quantique. Ce cas de figure est de loin le plus étudié car il favorise la localisation spatiale des porteurs de charges dans une même zone d'une hétérostructure.

Dans le cas d'un alignement de type II, au contraire, le maximum des bandes de valence ne se trouve pas dans le même semi-conducteur que le minimum des bandes de conduction. Dans cette hétérostructure, les électrons et les trous ont tendance à ne pas se trouver dans le même matériau, comme illustré sur la figure 1.10. Une grande partie de ce travail porte sur l'intérêt de ces hétérostructures de type-II pour les LEDs.

L'alignement de bande de type III est un cas particulier du type II, dans lequel il n'y a plus de

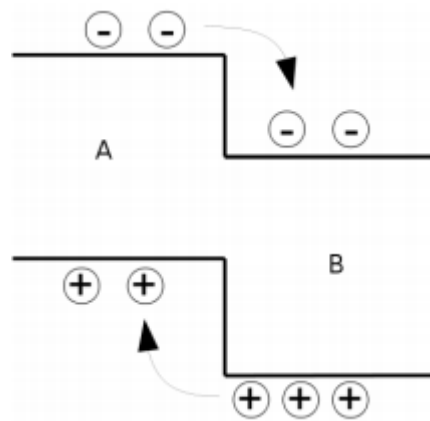


Figure 1.10 – Séparation des électrons et des trous créés au voisinage d'une interface entre deux semi-conducteurs à alignement de type II [7].

Recouvrement des bandes interdites. Un exemple de matériaux présentant un tel alignement est le couple InAs/GaSb utilisé entre autres pour fabriquer des détecteurs infrarouges [13].

La zone active des LED est généralement constituée de doubles hétérojonctions de quelques nanomètres d'épaisseur, appelées puits quantiques. Pour renforcer la concentration des porteurs dans les puits quantiques, l'énergie de la bande interdite du matériau composant le puits est inférieure à celle du matériau constituant la jonction $p-n$, comme illustré sur la figure 1.11. Dans les LED à base de GaN, l'alliage InGaN constitue les puits quantiques.

Malgré le confinement des porteurs dans le puits, les électrons peuvent s'échapper de la zone

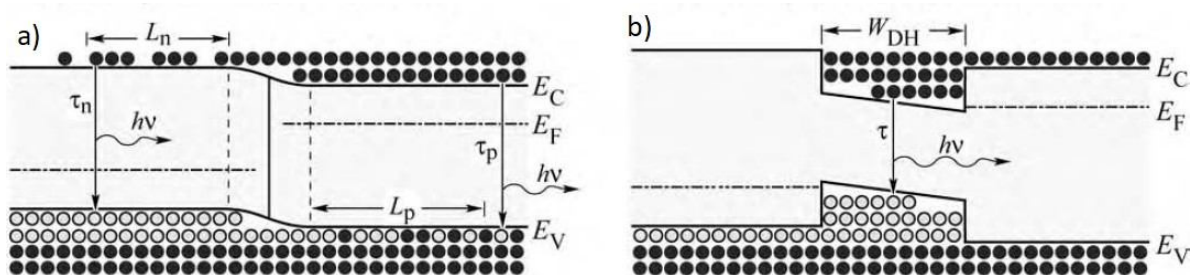


Figure 1.11 – Distribution des porteurs de charges dans a) une homojonction et b) une double

hétérojonction. Dans une homojonction, les porteurs de charge sont répartis sur une longueur de diffusion L_n et L_p alors que dans une hétérojonction ils sont localisés dans la zone de puits quantiques d'épaisseur W_{DH} [14].

Active vers les couches de confinement (voir figure 1.12), créant ainsi un courant de fuite.
 Ce phénomène est d'autant plus important que la température est élevée

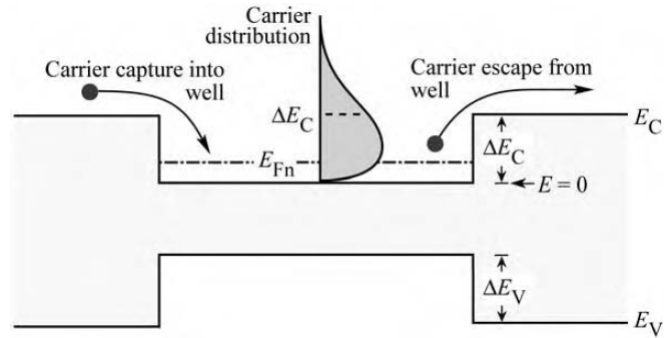


Figure 1.12 – Illustration de la fuite des porteurs en l'absence d'EBL.

ou que la hauteur des barrières entourant le puits est faible. Pour limiter ce phénomène, les LED disposent souvent de couche de blocage d'électrons (*Electron Blocking Layer (EBL)* en anglais), située entre la zone active et la zone de confinement dopée p. Les couches de blocage d'électrons sont à base de matériau dont l'énergie de la bande interdite est plus importante que celle du ou des matériaux constituant la jonction pn. Dans les LED à base de GaN, ces barrières sont en AlGaIn dopé p.

La figure 1.13 représente le cas d'un puits d'InGaIn d'épaisseur t_w entouré de barrières de GaN d'épaisseur t_B . Les niveaux d'énergie des états excités de la bande de conduction et de valence ainsi que les gaps sont représentés. Dans ce cas, la densité de charges surfaciques σ .

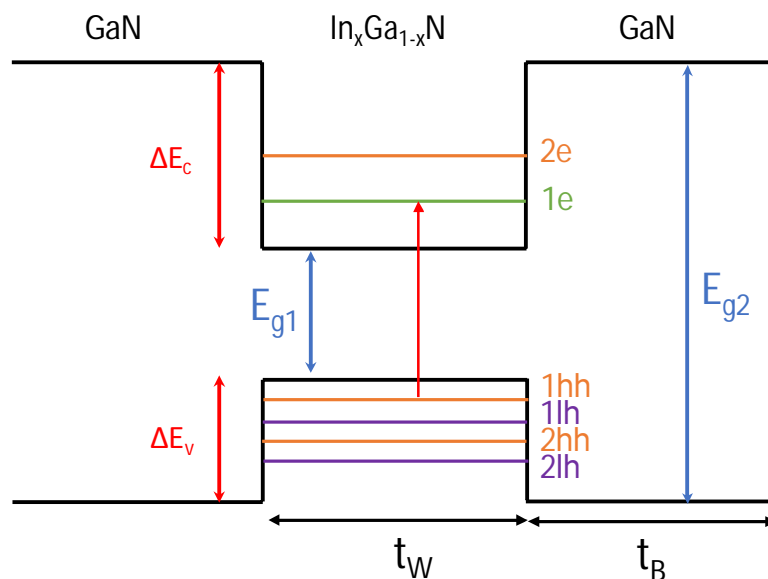


Figure 1.13 – Schéma d'un puits quantique de type GaN/InGaIn.

Aux interfaces entre la barrière et le puits est définie par la relation suivante:

$$\sigma_B / P = n(P_B - P_W) \quad (1.4)$$

P_B et P_W sont les polarisations totales (spontanées et piézoélectriques) de la barrière et du puits respectivement. n est le vecteur normal à la surface (plan c). En tenant compte de la conservation du vecteur déplacement électrique $D = F + P$ (F est ici le champ électrique) à l'interface nous obtenons la relation

$$\epsilon_W \epsilon_0 F_W - \epsilon_B \epsilon_0 F_B = P_B - P_W \quad (1.5)$$

Où ϵ_0 est la permittivité diélectrique du vide et $\epsilon_{B,W}$ sont les constantes diélectriques relatives des matériaux constituants respectivement le puits et la barrière. En notant t_B et t_W les épaisseurs de la barrière et du puits, la continuité de la structure de bandes à l'interface nous donne :

$$t_B F_B + t_W F_W = 0 \quad (1.6)$$

Le champ électrique dans le puits quantique s'exprime donc en fonction de la polarisation par la relation :

$$F_W = \frac{t_W (P_B + P_W)}{\epsilon_0 (\epsilon_W t_W + \epsilon_B t_B)} \quad (1.7)$$

La valeur du champ électrique dans un puits GaN/InGaN à 20% d'indium, déterminée expérimentalement par Le fibre et al. [15], est de l'ordre de 2.5 mV/cm. La valeur théorique trouvée par Bernardini *et al.* [9] est de 3.3 mV/cm pour un puits similaire. La différence peut s'expliquer par la non idéalité de l'interface entre la barrière de GaN et le puits d'InGaN. En règle générale la valeur du champ électrique pour les puits quantiques à base d'InGaN varie entre 0.5 mV/cm et 3.5 mV/cm. ce champ électrique engendre une courbure des bandes d'énergie et affecte sévèrement le taux de recombinaisons, la longueur d'onde d'émission et le transport des charges.

Conclusion

Nous avons rappelé les principales propriétés des binaires III-N ainsi que de leurs alliages AlGaIn et InGaIn et des hétérostructures formées par ces matériaux lors de l'élaboration de diodes électroluminescentes.

Chapitre 2 : Simulation des LED avec SILVACO

Introduction

Le logiciel utilisé pour les simulations de LED est ATLAS, développé par la société SILVACO (Silicon Valley Corporation). SILVACO est une société américaine basée à Santa Clara en Californie. Fondée en 1984, elle est aujourd'hui le principal fournisseur de logiciels de simulation par éléments finis et de conception assistée par ordinateur pour les technologies de l'électronique TCAD (Technology Computer Aided Design). ATLAS est spécialement conçu pour la modélisation 2D et 3D de composants basés sur la physique des semi-conducteurs. En utilisant la méthode des éléments finis, le logiciel crée un maillage couvrant toute la structure étudiée et résout numériquement les équations de base des semi-conducteurs par itération en chaque point de ce maillage.

2.1 Structure de la LED simulée

L'objectif de ce chapitre est de simuler le fonctionnement d'une LED standard émettant dans le bleu dont l'architecture est illustrée sur la figure 2.1. Il s'agit d'une LED rectangulaire de section égale à $200 \mu\text{m} \times 200 \mu\text{m}$. La structure et les paramètres géométriques de la LED sont basés sur ceux mentionnés dans la littérature, par exemple les LED simulées par Pipreket *al.* [38]. Cette structure LED dispose de (de haut en bas sur la figure 2.1) :

Une partie GaN dopée n (notée "GaN-n") de $3 \mu\text{m}$ d'épaisseur

Une zone active composée de 5 puits quantiques d'InGaN à 16% d'indium de 3 nm d'épaisseur séparés par des barrières en GaN de 15 nm d'épaisseur non intentionnellement dopées

Une couche de blocage d'électron (EBL) en AlGaIn à 15% d'aluminium de 45 nm d'épaisseur

Une partie GaN dopée p (notée "GaN-p") de 200 nm d'épaisseur

Pour chacune des parties de cette LED, les paramètres des matériaux sont résumés dans le tableau 2.1. Afin de tenir compte des mécanismes physiques présents dans les LED, les modèles cités dans le tableau 2.2 sont activés lors des simulations. Les modèles sont indiqués en gras dans le texte et seront détaillés dans la partie suivante. Pour les spécificités complètes de chaque modèle le lecteur est invité à consulter le manuel d'utilisation de ATLAS/SILVACO [18].

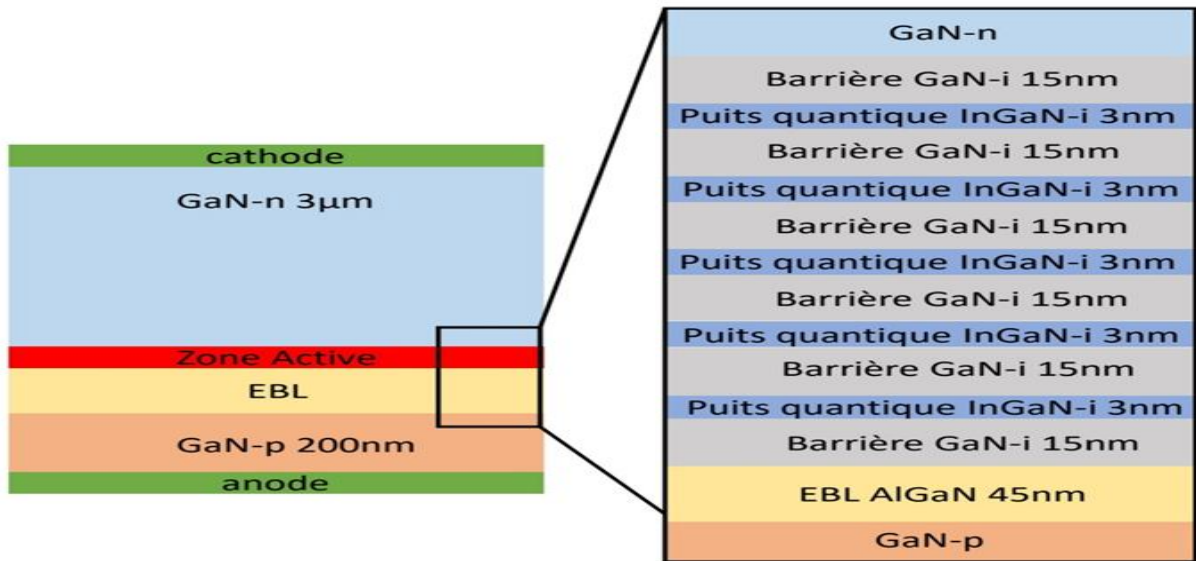


Figure 2.1 – Schéma d'une LED standard à base de semi-conducteurs III-N.

Paramètres	Valeur		
	GaN	InGaN	AlGaIn
Concentration de donneurs N_d (cm^{-3})	5×10^{18}	–	–
Concentration d'accepteurs N_a (cm^{-3})	1×10^{19}	–	1×10^{19}
Concentration des porteurs intrinsèques N_i	2×10^{16}	2×10^{16}	–
Mobilité des électrons μ_n ($\text{cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$)	400	200	250
Mobilité des trous μ_p ($\text{cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$)	10	10	5
Affinité électronique χ (eV)	4.4	4.98	4.26
Bande interdite (à 300K) E_g (eV)	3.42	2.6	3.62
Durée de vie des électrons τ_n (s)	2×10^{-7}	2×10^{-7}	2×10^{-7}
Durée de vie des trous τ_p (s)	2×10^{-7}	2×10^{-7}	2×10^{-7}
Coefficient de recombinaisons Auger $C_{net} C_p$ ($\text{cm}^{-6} \cdot \text{s}^{-1}$)	2.4×10^{-30}	2.4×10^{-30}	2.4×10^{-30}

Tableau 2.1 – Paramètres des matériaux utilisés dans les simulations

2.2 Équations de base et modèles utilisés

La physique des LED est convenablement décrite par un jeu d'équations fondamentales, qui relient entre eux le potentiel électrostatique et la densité de porteurs. Ces équations, dérivées des lois de Maxwell, sont l'équation de Poisson, les équations de continuité et les équations de transport. L'équation de Poisson relie les variations du potentiel électrostatique aux densités de porteurs de charges locales. Les équations de continuité et de transport décrivent la manière dont évoluent les densités des porteurs (électrons et trous) en fonction du transport et des processus de génération et recombinaisons. Cette partie présente ces différentes équations ainsi que leur implémentation dans ATLAS.

Paramètres	Modèle
Les bandes d'énergie	Modèle $k.p$
La recombinaison SRH	Modèle SRH indépendant du dopage, de la température, ...
La recombinaison Auger	Modèle Auger indépendant du dopage, de la température, ...
La recombinaison radiative	Modèle wz.kp (conçu pour la structure Wurtzite) et modèle de l'émission spontanée
Les mobilités des électrons et des trous	Mobilités constantes
Le champ de polarisation aux interfaces	Modèles Polarization, calc.strain et polar. scale
Ionisation des porteurs	Modèles incomplete

Tableau 2.2 – Modèles utilisés dans les simulations

2.2.1 Équation de Poisson

L'équation de Poisson relie le potentiel électrostatique à la densité de charge d'espace à l'intérieur de la LED

$$\text{div}(\nabla \psi) = -\rho \quad (2.1)$$

où ψ est le potentiel électrostatique, ϵ est la permittivité locale et ρ est la densité de charges d'espaces locale. La densité de charges d'espaces est la somme des contributions de toutes les charges mobiles et fixes, incluant les électrons, les trous et impuretés ionisées. L'équation 2.1 s'écrit alors :

$$\text{div}(\epsilon \nabla \psi) = q (n - p - N_d^+ + N_a^-) \quad (2.2)$$

où n, p sont les densités des électrons et des trous, N_d^+ et N_a^- sont les densités de donneurs et d'accepteurs ionisés. Les densités de donneurs et d'accepteurs (N_d^+ et N_a^-) dépendent du modèle d'ionisation utilisé dans la simulation et seront décrites dans la partie suivante. Les densités n et p à l'équilibre thermique suivent les statistiques de Fermi-Dirac et sont fonctions des densités d'états effectives N_c, N_v ainsi que des niveaux d'énergie E_c, E_v et E_f :

$$n = N_c F_{\frac{1}{2}} \left(\frac{E_f - E_c}{k_B T} \right) \quad (2.3)$$

$$p = N_v F_{\frac{1}{2}} \left(- \frac{E_F - E_v}{K_B T} \right) \quad (2.4)$$

où $F_{1/2}$ fait référence à l'intégrale de Fermi-Dirac d'ordre $1/2$. E_F est l'énergie d'un niveau de Fermi définie par:

$$E_F = \left(\frac{E_C + E_v}{2} \right) + \frac{K_B T}{2} \ln \left(\frac{N_V}{N_C} \right) \quad (2.5)$$

Si la température est élevée (T supérieur ou égale à 300 K) ou si les densités net n sont faibles, les statistiques de Fermi-Dirac peuvent être approximées par les statistiques de Boltzmann et les équations 2.3 à 2.4 à l'équilibre s'écrivent :

$$n = N_C \exp \left(- \frac{E_C + E_F}{K_B T} \right) \quad (2.6)$$

$$p = N_v \exp \left(- \frac{E_F + E_v}{K_B T} \right) \quad (2.7)$$

Où en termes de concentrations de porteurs intrinsèques hors équilibre :

$$n = n_i \exp \left(q \frac{\psi + \phi_n}{K_B T} \right) \quad (2.8)$$

$$p = n_i \exp \left(-q \frac{\psi + \phi_p}{K_B T} \right) \quad (2.9)$$

Où ψ est le potentiel intrinsèque et ϕ_n, ϕ_p les quasi potentiels de Fermi

$n_i = \sqrt{N_C N_V} \exp \left(\frac{-E_g}{2K_B T} \right)$ est la concentration de porteurs intrinsèques (lorsque le matériau est non dopé $n=p$).

2.2.2 Équation de continuité

Les équations de continuité pour les électrons et les trous sont données par :

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \frac{1}{q} \text{div } j_n + G_n - R_n \quad (2.10)$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} = \frac{1}{q} \text{div } j_p + G_p - R_p \quad (2.11)$$

Où n, p sont les concentrations des électrons et des trous, J_n, J_p les densités de courant des électrons et

des trous, G_n, p et R_n , les taux de générations et de recombinaisons des électrons et des trous. q est la charge élémentaire. Les équations 2.7 donnent un modèle générique de la variation des densités de porteurs dans la structure LED. Néanmoins des équations supplémentaires sont nécessaires pour spécifier les modèles physiques pour J_n, p et R_n, p .

2.2.3. Équation de transport

Les équations de transport donnent l'évolution des termes J_n, p . L'équation générale décrivant le transport est l'équation de transport de Boltzmann. Les modèles et équations de transport utilisés dans ATLAS dérivent de cette équation après plusieurs simplifications et approximations. Il existe différents modèles en fonction de l'approximation choisie. Le choix du modèle de transport a de nombreuses conséquences importantes sur le choix des modèles de recombinaison et de génération. Le modèle le plus simple est le modèle "drift diffusion". La plupart des dispositifs peut être décrit par ce modèle mais lorsque la taille des systèmes diminue il devient insuffisant. ATLAS fournit le modèle "drift-diffusion" ainsi que d'autres modèles plus complexes comme par exemple le modèle "capture escape" que nous détaillerons dans la suite.

$$J_n = -q\mu_n n \nabla \phi_n \quad (2.12)$$

$$J_p = -q\mu_p p \nabla \phi_p \quad (2.13)$$

Où μ_n et μ_p sont les mobilités des électrons et des trous.

Et donc en les insérant dans les équations 2.8, les densités de courants s'écrivent finalement

$$J_n = qn\mu_n E_n + qD_n \nabla n \quad (2.14)$$

$$J_p = qp\mu_p E_p + qD_p \nabla p \quad (2.15)$$

D_n et D_p sont les diffusivités des électrons et des trous, reliées aux mobilités par la relation d'Einstein :

$$D_{n,p} = \frac{\mu_{n,p} k_B T}{q} \quad (2.16)$$

2.2.4 Mécanismes de génération/recombinaison

Dans un semi-conducteur à l'équilibre les concentrations en électrons et en trous sont reliées par la loi d'action de masse

$$n_0 p_0 = n_i^2 \quad (2.17)$$

Lorsque le semi-conducteur est hors-équilibre, par injection électrique ou absorption de photons, les

concentrations en porteurs n et p sont déviées de leurs valeurs à l'équilibre n_0 et p_0 . Les mécanismes de génération/recombinaison sont tous les processus qui permettent au système de retrouver ses paramètres d'équilibre et permettent de déterminer les termes Gn, p et Rn, p dans les (équations 2.10 et 11). De façon très générale, nous distinguons deux types de recombinaisons dans un semi-conducteur :

La recombinaison dite *directe bande à bande* où un électron de la bande de conduction franchit la bande interdite vers un état inoccupé de la bande de valence.

Et la recombinaison *indirecte* où l'électron de la bande de conduction transite par un niveau profond dans la bande interdite avant de se recombiner avec un trou de la bande de valence.

Lors de la recombinaison, une énergie égale à l'énergie de la paire électron/trou est réémise au réseau cristallin, soit sous forme de radiation par émission d'un ou plusieurs photons, soit sous forme de chaleur par émission de phonons. Parmi les recombinaisons, il convient également de différencier les recombinaisons radiatives et les recombinaisons non radiatives qui sont à l'origine de la perte d'efficacité de la LED. Nous classons ces dernières en cinq catégories :

- Les recombinaisons SRH
- Les recombinaisons Auger
- Les recombinaisons par impact électronique
- Les recombinaisons à la surface
- Les transitions par effet tunnel

Recombinaisons radiatives :

Les recombinaisons radiatives sont des recombinaisons inter-bandes. En dehors des puits quantiques elles sont introduites par le modèle COPT et s'expriment par l'équation :

$$R^{OPT} = B(np - n_i^2) \quad (2.18)$$

Avec n et p les concentrations en électrons et en trous et B le coefficient de recombinaison biomoléculaire. Pour les semi-conducteurs III-V à gap direct, le facteur B prend typiquement des valeurs comprises entre $10^{-11} \text{cm}^3 \cdot \text{s}^{-1}$ et $10^{-9} \text{cm}^3 \cdot \text{s}^{-1}$. Dans nos simulations nous choisissons $B = 1.0 \cdot 10^{-11} \text{cm}^3 \cdot \text{s}^{-1}$. Le taux de recombinaisons radiatives dans les puits quantiques est quant à lui déterminé automatiquement par le modèle k pinclus dans le simulateur qui sera décrit par la suite.

Recombinaisons SRH :

Les recombinaisons de Shockley-Read-Hall [19][20] (ou recombinaisons SRH) sont le premier type de

recombinaisons non radiatives. Elles ont lieu en présence d'impuretés ou de défauts dans la bande interdite du semi-conducteur qui créent des niveaux piège [14].

Une impureté (représentée par un niveau piège) capture un électron ou un trou (figures 2.2a) et 2.2 c))

Cette même impureté va ensuite capturer un trou ou un électron dans l'autre bande, entraînant la disparition (figure 2.2 b) ou la création (figure 2.2 d)) d'une paire électron/trou dans la bande de conduction.

Le taux de recombinaison SRH est calculé dans ATLAS à l'aide de l'équation suivante [20]:

$$R_{SRH} = -\frac{\partial n}{\partial t} = \frac{\partial p}{\partial t} = -\frac{np - n_i^2}{\tau_n(p + p_T) + \tau_p(n + n_T)} \quad (2.19)$$

Où n et p sont les concentrations des électrons et des trous, n_i la concentration de porteurs intrinsèques, T la température en Kelvin. n_T , p_T sont les concentrations en électron et en trou à l'équilibre dans le cas où le niveau piège coïncide avec le niveau de Fermi, $E_T = E_F$, $n = N_C e^{-(E_T - E_C)/kT}$, $p = N_V e^{-(E_T - E_V)/kT}$ [21]:

$$n_T = N_C F_{1/2} \left(\frac{E_T + E_C}{K_B T} \right) \quad (2.20)$$

$$p_T = N_V F_{1/2} \left(-\frac{E_T + E_V}{K_B T} \right) \quad (2.21)$$

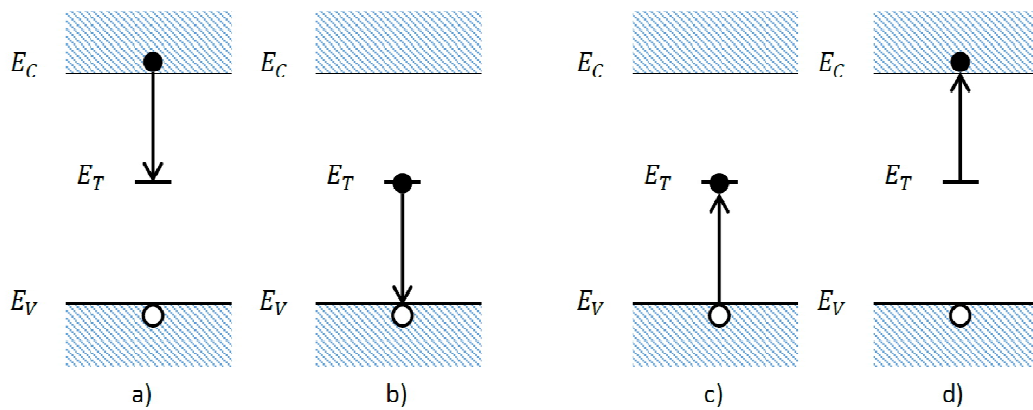


Figure 2.2 – Processus de recombinaison SRH dans un semi-conducteur. L'électron est représenté par un cercle plein noir et le trou par un cercle vide. Les figures a) et b) décrivent la recombinaison et les figures c) et d) la génération d'une paire électron/trou. [14]

τ_n et τ_p sont les durées de vie des électrons et des trous et sont définis par l'utilisateur. Les valeurs données dans la littérature pour τ_n et τ_p varient généralement de 30 ns [22][23] à 500 ns [24] [25] et sont fonction de la qualité du matériau épitaxié [16] [17] [26].

Dans les simulations de cette thèse nous choisissons $\tau n = \tau p = 200 \text{ ns}$, ce qui permet de reproduire les caractéristiques d'une LED bleue standard telle que celle décrite par Piprek dans [37].

Recombinaisons Auger :

Le deuxième mécanisme de recombinaisons non-radiatives est la recombinaison Auger qui est décrite comme un mécanisme à trois entités :

- Soit deux électrons et un trou (un électron et un trou se recombinent et transfèrent l'énergie de cette recombinaison à un électron), processus *eeh*.
- Soit deux trous et un électron (un électron et un trou se recombinent et transfère l'énergie à un trou, processus *ehh*).

La recombinaison peut être directe ou indirecte. Dans le cas d'une recombinaison directe, le porteur qui reçoit l'énergie de la recombinaison change de niveau d'énergie. Cette recombinaison est très faible dans les matériaux à large bande interdite. Dans le cas de la recombinaison indirecte, le changement de niveau d'énergie nécessite l'absorption ou l'émission d'un phonon, permettant l'accès à plus de niveaux d'énergie. Dans les semi-conducteurs purs, les recombinaisons Auger assistées par des phonons sont les plus importantes. Dans les semi-conducteurs fortement dopés, les recombinaisons assistées par des impuretés sont prédominantes. La figure 2.3 illustre les processus *eeh* directs et indirects.

Les recombinaisons Auger sont prises en compte dans notre simulation grâce au modèle Auger et s'expriment par l'équation [28] :

$$R_{Auger} = C_n(n^2p - nn_i^2) + C_p(p^2n - pn_i^2) \quad (2.22)$$

Les coefficients C_n et C_p sont respectivement les coefficients Auger pour les processus *eeh* et *ehh*. La valeur de ces coefficients est importante car ils déterminent la contribution de la recombinaison Auger par rapport aux recombinaisons SRH et ont un fort impact sur la perte d'efficacité de la LED. La détermination expérimentale des coefficients C_n/C_p reste néanmoins problématique et les résultats varient entre 10^{-34} et 10^{-29} [17] [25] [23]. Un choix judicieux des couples $(\tau n/\tau p, C_n/C_p)$ permet au final d'obtenir des résultats de simulation proches de la réalité physique. Conformément aux choix de Piprek *et al.* [38], dans ce travail de thèse nous choisissons des coefficients C_n et C_p égaux à 2.4×10^{-31} .

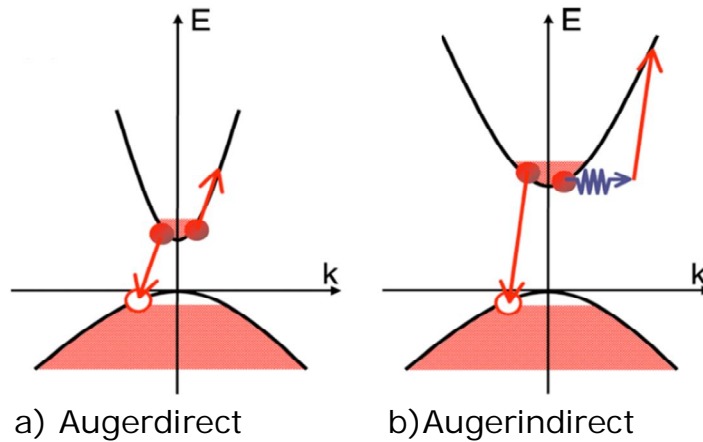


Figure 2.3–Processus de recombinaison Auger eeha) direct et b) indirect. [27]

2.3 LED à multi puits quantiques (MQW)

Cette partie présente les résultats de la simulation de la LED standard illustrés sur la figure 2.1 avec les modèles et les paramètres matériaux décrits plus haut. La zone active de cette LED comporte cinq puits quantiques de 30 Å (3 nm) d'épaisseur composés d'InGaN à 16% d'indium. Le diagramme de bandes du système à l'équilibre est représenté sur la figure 2.4.

La figure 2.5 illustre le diagramme de bandes pour une densité de courant égale à 1 A/cm². L'insert représente un des puits quantiques et les fonctions d'ondes des électrons et des trous ψ_e et ψ_h sont représentées. Nous pouvons noter la pente des bandes de conduction et de valence plus importante dans le puits quantique lorsque $V = 0$. Ce phénomène entraîne une séparation spatiale des fonctions d'ondes, plus connue sous le nom d'effet Stark, responsable de la chute d'efficacité des LED lorsque la densité de courant augmente. Dans le cas des LED bleues cette pente reste faible mais elle augmente avec la concentration d'indium dans l'InGaN.

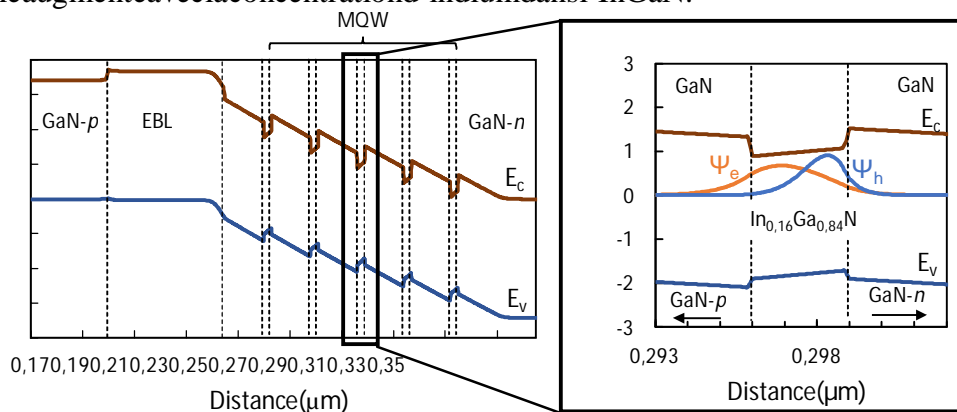


Figure 2.4–Diagramme de bandes de la LED à l'équilibre ($V=0V$)

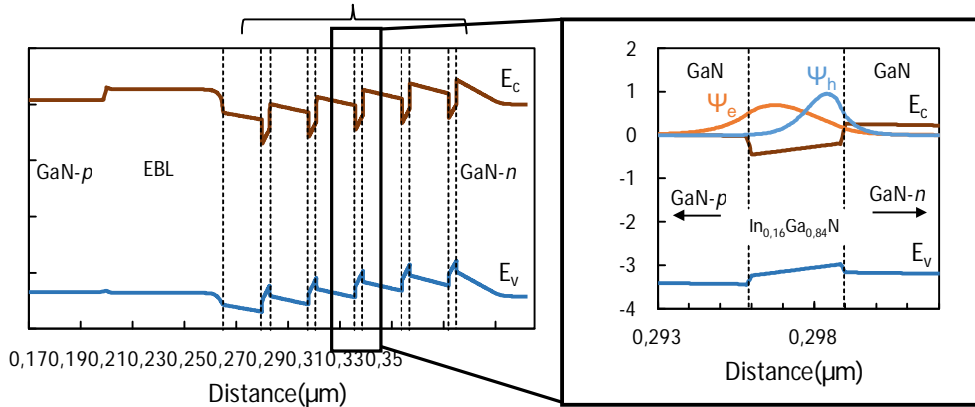


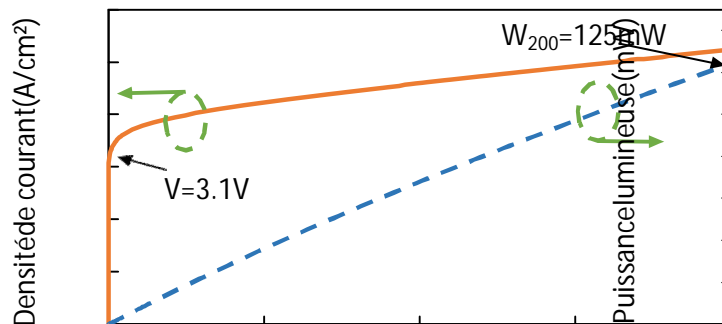
Figure 2.5 – Diagramme de bandes de la LED pour une densité de courant égale à 1 A/cm^2 et zoom sur un des puits quantiques.

Caractéristiques $J(V)$ et $L(J)$:

Lors de nos simulations nous nous attacherons tout d'abord à étudier les comportements électriques et lumineux des architectures LED à travers les caractéristiques $J(V)$ (ou $V(J)$) et $L(J)$. La figure 2.6 illustre les caractéristiques $V(J)$ et $L(J)$ de la LED bleue simulée. Le détail de la caractéristique $J(V)$ est quant à lui visible en figure 2.6.

Nous notons tout d'abord que la LED présente une tension de seuil de l'ordre de 3.1 V . La tension de seuil est la tension minimale à appliquer pour que la LED émette de la lumière. Sa valeur dépend essentiellement du gap des semi-conducteurs formant la LED mais aussi de son architecture. La tension de seuil tendance à augmenter avec le nombre de puits quantiques de la LED [35]. La puissance lumineuse de sortie L est une fonction croissante de la densité de courant et atteint une valeur de 125 mW pour une densité de courant de 200 A/cm^2 .

D'après la figure 2.7, il semble que la caractéristique $J(V)$ puisse être décomposée en 5 régimes notés A, B, C, D et E et représentés par des lignes verticales noires en pointillés. Ces régimes correspondent vraisemblablement aux différents mécanismes de transports dans la LED suggérés par Hirsch et Barrière [36].



Densité courant (A/cm^2)

Figure 2.6 – Caractéristiques $V(J)$ et $L(J)$ de la LED standard à multi puits émettant dans le bleu.

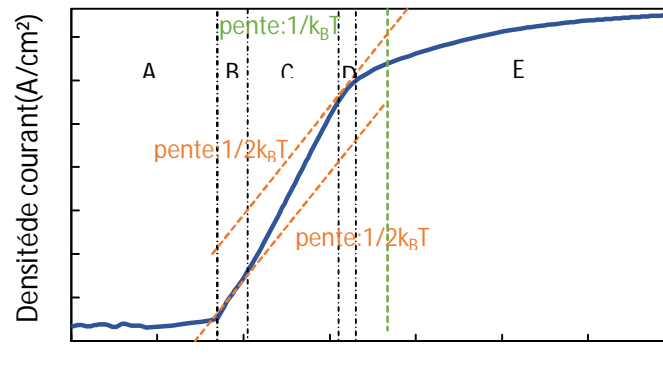


Figure 2.7 – Caractéristique $J(V)$ de la LED standard à multi puits émettant dans le bleu.

Régime A Le premier régime correspond à des tensions inférieures à 2.4 V. Dans ce régime, les fluctuations de la densité de courant sont dues au bruit numérique de la simulation causé par le choix d'une précision de calcul moyenne. Augmenter la précision de calcul permettrait de limiter les effets de bruit mais engendrerait une augmentation conséquente du temps de calcul. Dans la littérature, ce premier régime correspond au premier régime décrit par Hirsch et Barrière. Pour de très faibles tensions, le courant est assimilable à un courant de fuite dans une résistance [36].

Régime B et C Les régimes B et C, respectivement pour des tensions comprises entre 2.4 et 2.5 V et 2.5 et 3 V, correspondent au deuxième régime décrit par Hirsch et Barrière. Dans ces deux régimes, la densité de courant est une fonction exponentielle de la tension. En échelle semi-logarithmique, la pente de la caractéristique dans le régime B est $1/2k_B T$ et $1/k_B T$ dans le régime C. Ce comportement semble indiquer que le courant dans le premier sous-domaine est dominé par un courant de génération-recombinaison type SRH alors que le second sous-domaine est dominé par un courant de *drift-diffusion* [36].

Régime D Dans le domaine D, pour des tensions comprises entre 3 et 3.1 V le courant augmente toujours exponentiellement avec la tension mais avec une pente plus faible égale à $1/2k_B T$.

Régime E Le dernier régime correspond aux fortes tensions. La caractéristique n'est plus une fonction exponentielle de la tension appliquée mais semble atteindre un régime de saturation. Ce domaine correspond au troisième régime introduit par Hirsch et Barrière [36].

2.4. SILVACO ATLAS:

Silvaco International est une société de logiciels qui offre des programmes pour la modélisation de tous les domaines de l'électronique, y compris les circuits analogiques et numériques. Cette société dispose de logiciel allant de la simple modélisation Spic jusqu'aux schémas des circuits intégrés

de pointe et des outils d'extraction [39].

Le logiciel SILVACO-ATLAS est un simulateur de dispositifs semi-conducteurs basé sur les principes physiques à deux et à trois dimensions, ce qui signifie qu'il peut prédire les caractéristiques électriques qui sont associées aux structures physiques bien spécifiées et des conditions de polarisation. Ceci est obtenu en rapprochant le fonctionnement d'un dispositif sur une grille à deux ou trois dimensions, comprenant un certain nombre de points de grille appelés noeuds. En appliquant un ensemble d'équations différentielles, dérivées des lois de Maxwell, sur cette grille, vous pouvez simuler le transport des porteurs à travers une structure. Cela signifie que le rendement électrique d'un dispositif peut maintenant être modélisé en courant continu, alternatif ou en modes de fonctionnement transitoires [40].

ATLAS est conçu pour être utilisé avec les outils interactifs de VIRTUAL WAFER FAB (VWF). Ils'agit de DECKBUILD, TONYPLOT, DEVEDIT, MASKVIEWS et OPTIMIZER [41]:

DECKBUILD : Environnement d'exécution interactif qui permet la simulation des processus et de dispositifs (mais principalement il est l'interface des outils de simulation).

TONYPLOT : outil de visualisation et d'analyse graphique 1D et 2D des résultats des simulations
DEVEDIT : Outil d'édition de structure, on peut créer de nouvelles structures ou même modifier des structures existantes, on peut définir des maillages ou affiner les maillages existants.

MASKVIEWS : est un éditeur de masque pour le circuit intégré IC.

OPTIMIZER : supports d'optimisation à travers de multiples simulateurs.

Virtual Wafer Fabrication (VWF) aide à effectuer la simulation efficacement sans avoir recours à des logiciels tiers. De la figure III-1, on voit que Silvaco avec VWF propose des logiciels de simulation puissante.

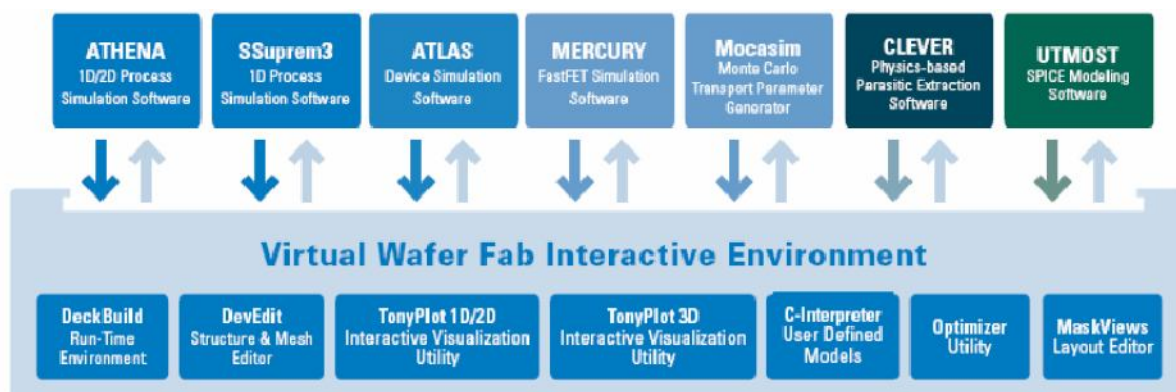
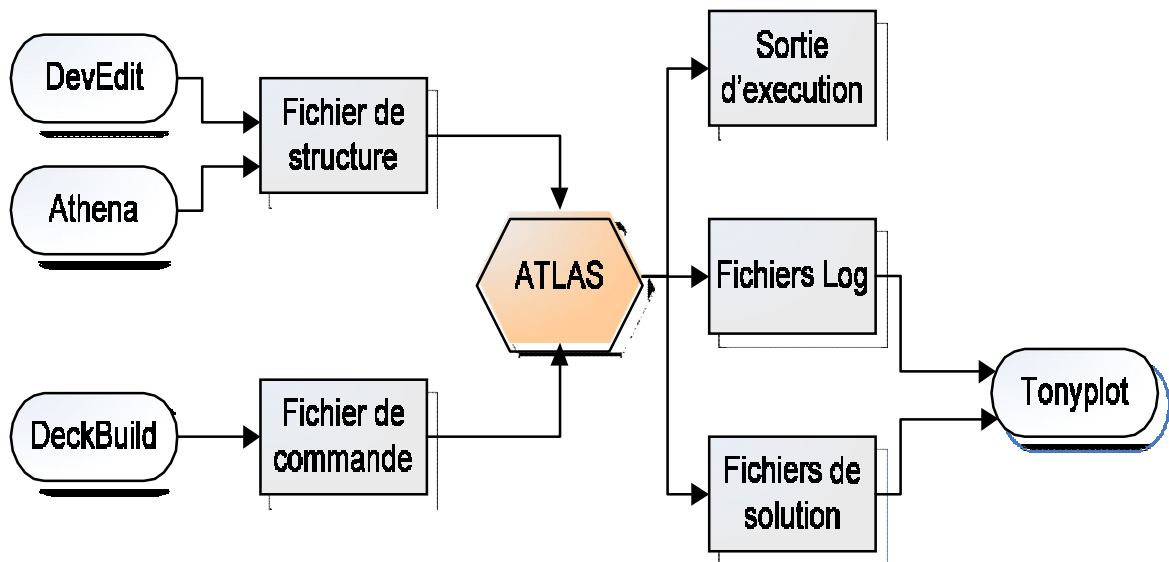


Figure 2-8: Environnement Virtual Wafer Fabrication. [42]

2.4.1. Entrées et Sorties dans SILVACO ATLAS:

La figure III-2 présente les types d'informations qui entrent et sortent d'ATLAS. La plupart des simulations sur ATLAS utilisent deux entrées: un fichier texte qui contient des commandes pour ATLAS à exécuter et un fichier de structure qui définit la structure qui sera simulée. ATLAS produit trois types de sortie. La sortie d'exécution (Routine output) fournit un guide pour le progrès des simulations en cours d'exécution, et c'est là que les messages d'erreur et les messages d'avertissement apparaissent. Les fichiers Log (Log-files) stockent toutes les tensions et courants terminaux de l'analyse de dispositif, et les fichiers de solution (Solution files) stockent les données deux et tridimensionnelles relatives à la valeur des variables de solution l'intérieur



dudispositif pour un seul point de polarisation [43].

Figure 2-9: ATLAS entrées et sorties [40].

DECKBUILD :

Deckbuild est un outil d'environnement d'exécution puissant qui permet à l'utilisateur de manière transparente d'aller de la simulation de processus à la simulation de dispositifs l'extraction de modèles SPICE. Il est facile d'utiliser l'environnement de l'exécution pour exécuter des simulateurs de base tels que ATLAS. Deckbuild contribue à créer des fichiers d'entrée à ATLAS. Plusieurs fenêtres fournissent des ponts d'entrées à base de menus ou à base de textes pour les informations saisies. Il comprend également un grand nombre d'exemples pour tous les types de technologies. Autres outils de simulation, tels que TONYPLOT,

DEVEDIT et MASKVIEW peuvent également être invoqués à partir de Deckbuild. Les

optimiseurs de Deckbuild contribuent

à l'optimisation des circuits comme les dimensions

structurelles et les paramètres des dispositifs après des tests électriques compliqués et des outputs intermédiaires.

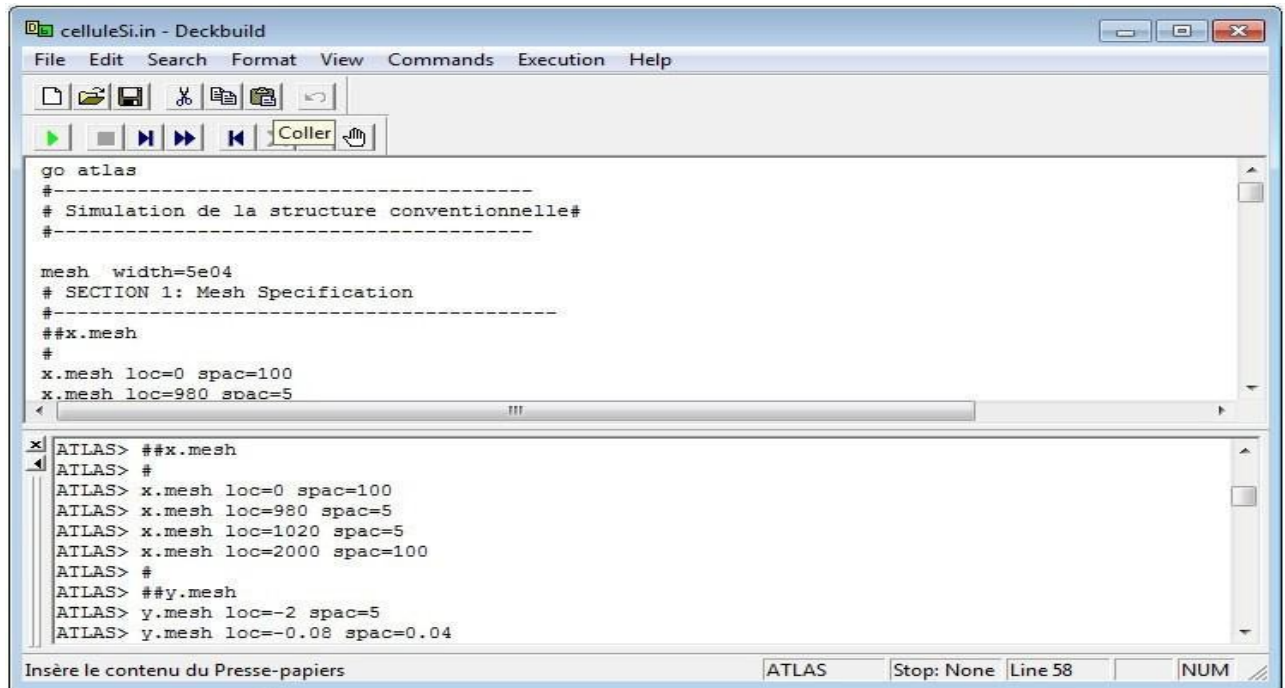


Figure2-10: Menu de commandes de Deckbuild.

TONYPLOT:

C'est l'outil de visualisation commun pour les produits SILVACO-

TCAD. Il fournit des fonctionnalités complètes pour la visualisation et l'analyse des outputs du simulateur. Les données peuvent être tracées selon le choix de l'utilisateur, soit en données x-y 1D, contour de données 2D, des graphiques polaires ou des graphiques Smith. Les données mesurées peuvent également être importées et tracées dans les types mentionnés ci-dessus. La fonction de superposition aide à comparer les simulations multiples. Il ajoute (commente) le tracé (plot) pour créer des figures significatives pour les rapports et les présentations. Il permet aux tracés de structure 2D d'être tranchés en plusieurs tranches indépendantes de 1D. Tonyplot comprend des fonctions d'animation qui permettent l'affichage d'une séquence de tracés d'une manière montrant des solutions en fonction de certains paramètres. Le paramètre peut être modifié par le curseur, ou par des cadres qui peuvent être bouclés en permanence, une caractéristique qui est très utile dans le développement d'aspects physiques. Il permet aux données de la caractéristique IV (courant-tension) ou les courbes 1D d'être superposées afin d'examiner comment les conditions du procédé affectent les résultats électriques. Il supporte le traçage des variables des équations définies par l'utilisateur étant soit des données électriques, comme par exemple le courant de drain ou physique,

comme par exemple, le champ électrique.

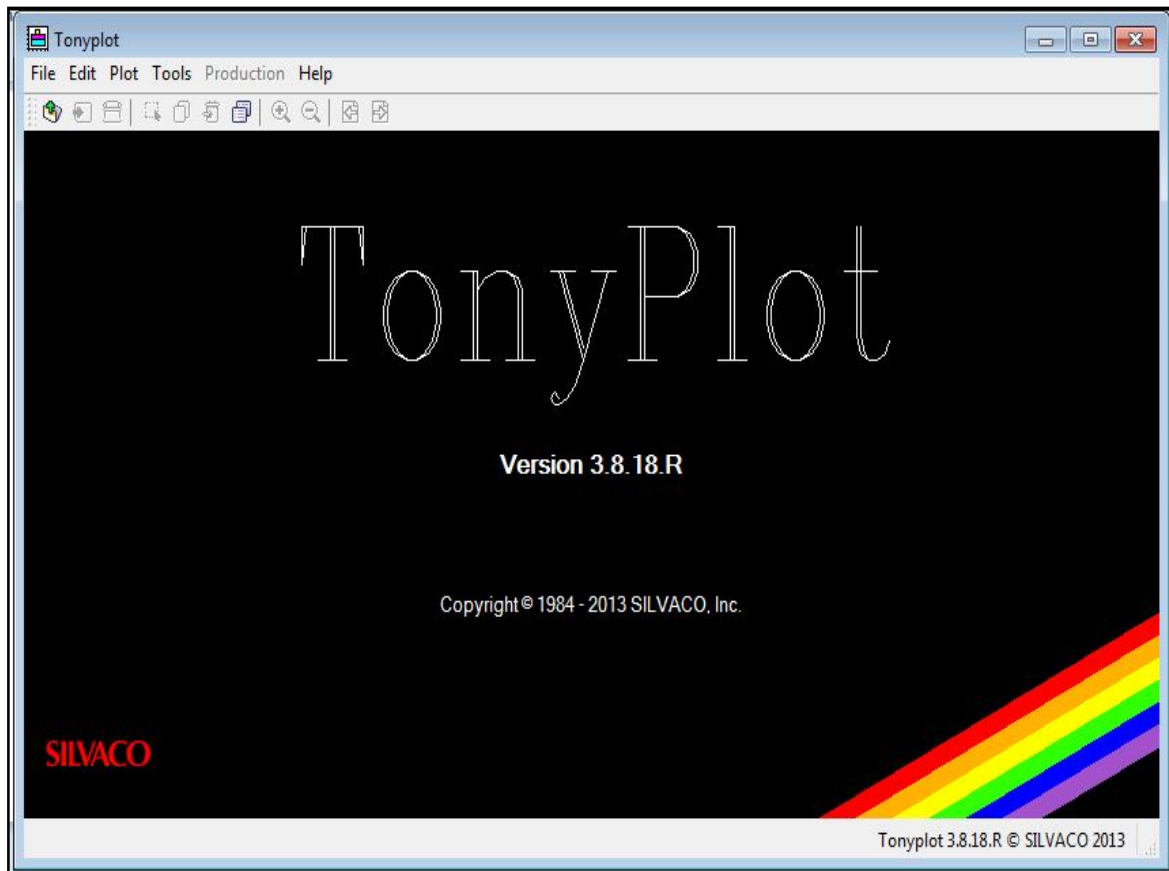


Figure2-11:FenêtrédeBasedeTonyPlot

2.4.2. StructureD'entréedansSILVACOATLAS:

Atlas peut accepter des fichiers de description de la structure à partir d'Athéna et Déverdit, et aussidesespropresfichiersdecommande.LedéveloppementdelastucturesouhaitéedansATLASse fait enutilisant unlangage de programmationdéclaratif. Dans cequi suit, ondonne un brefaperçucommentune structure estconstruiteetsimulée dansATLAS.

Le fichier d'entrée d'ATLAS contient un ordre de lignes de commande. Chaque ligne consiste enun nombre dedéclaration quiidentifie la commande etunjeu de paramètres.Leformatgénéralest :<DÉCLARATION><PARAMÈTRE>=<VALEUR>.

Par exemple: DOPING UNIFORM N. TYPE CONCENTRATION=116 REGION=1

La déclaration est DOPING les paramètres sont UNIFORM N. TYPE CONCENTRATION, et les valeurs sont $1e^{16}$ pour la concentration et 1 pour indiquer la région.

Les groupes de commandes sont résumés dans le (tableau 3.1).

Group		Statements
1. Structure specification	_____	MESH REGION ELECTRODE DOPING
2. Material models specification	_____	MATERIAL MODELS CONTACT INTERFACE
3. Numerical method selection	_____	METHOD
4. Solution specification	_____	LOG SOLVE LOAD SAVE
5. Results analysis	_____	EXTRACT TONY PLOT

Tableau 2-3: Groupes de commande ATLAS avec les déclarations de base dans chaque groupe

Contour général de construction d'ATLAS :

Dans cette simulation, la LED à base de (GaN) est définie graphiquement dans ATLAS via l'interface Deckbuild. Afin de bien définir une LED, il est nécessaire d'entrer non seulement les dimensions, mais aussi les propriétés des matériaux. L'organigramme suivant sur la figure III-6 peut clarifier les étapes pour construire chaque modèle.

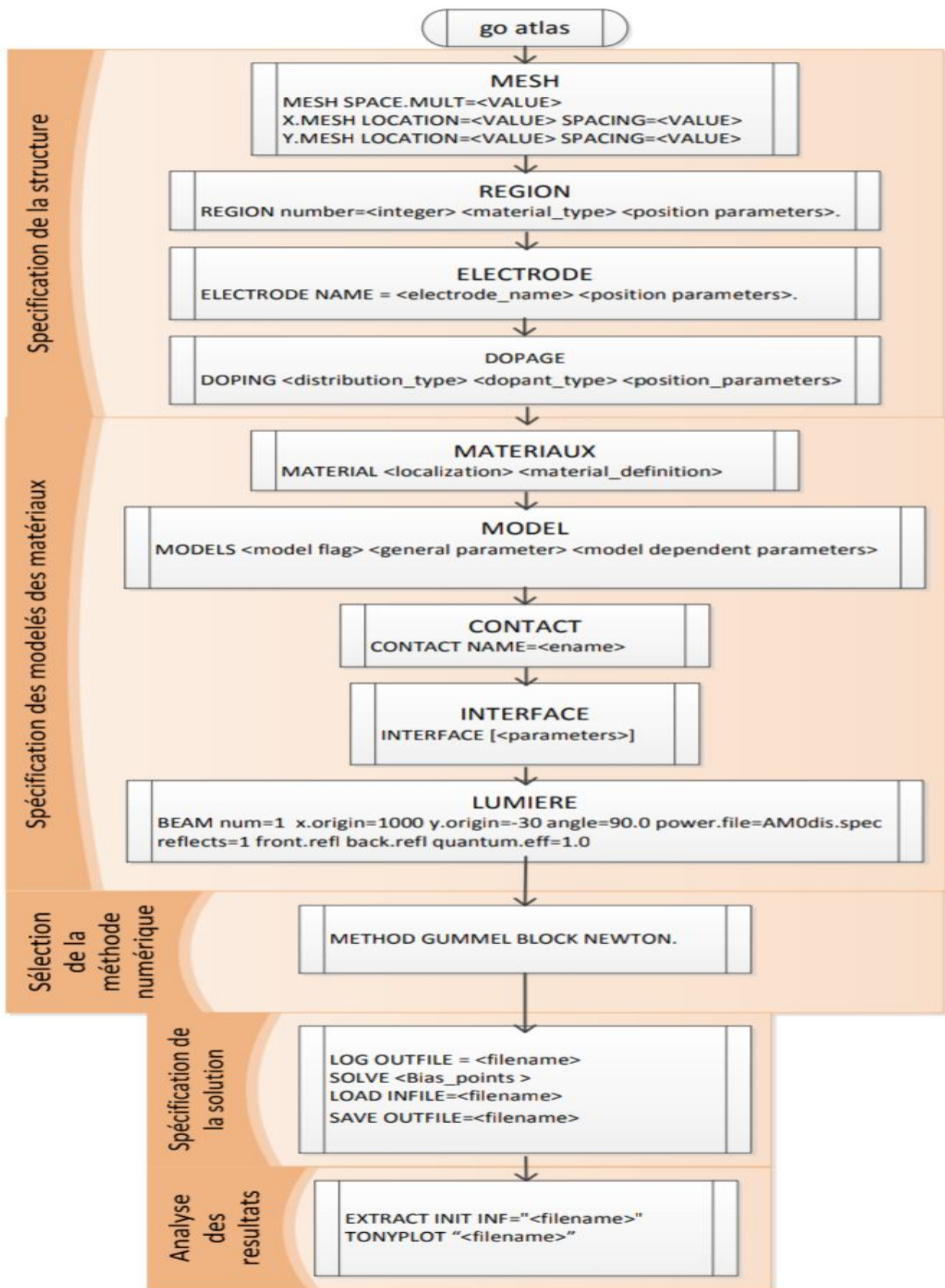


Figure2-12: Organigrammedesétapesdeconstructiond'unmodèlesurATLAS.

Conclusion

Dans ce chapitre nous avons mis en évidence les principales caractéristiques du logiciel de simulation utilisé ainsi que les modèles physiques mis en œuvre dans cette mémoire pour décrire le fonctionnement des LED. Les équations de Schrödinger-Poisson sont résolues de manière itérative dans les puits quantiques, le modèle *drift-diffusion* (dans les matériaux *bulk*) et le modèle *capture-escape* (dans les puits) sont utilisés pour décrire les transports des porteurs de charges. Les recombinaisons Auger et SRH sont prises en compte comme mécanismes de recombinaisons non-radiatives.

Nous avons montré comment SILVACO/ATLAS permettrait de rendre compte de manière fidèle du comportement des LED standards à base de GaN émettant dans le bleu.

Dans la suite de cette thèse, et notamment dans le chapitre suivant, nous partirons d'une LED bleue composée d'un seul puits quantique à base d'InGaN à 16% d'Indium. À l'intérieur de ce puits nous insérerons une fine couche de ZnGeN_2 (ou d'un autre matériau de la même famille dans le chapitre 6) et nous examinerons la modification du comportement des structures LED sur le plan électrique.

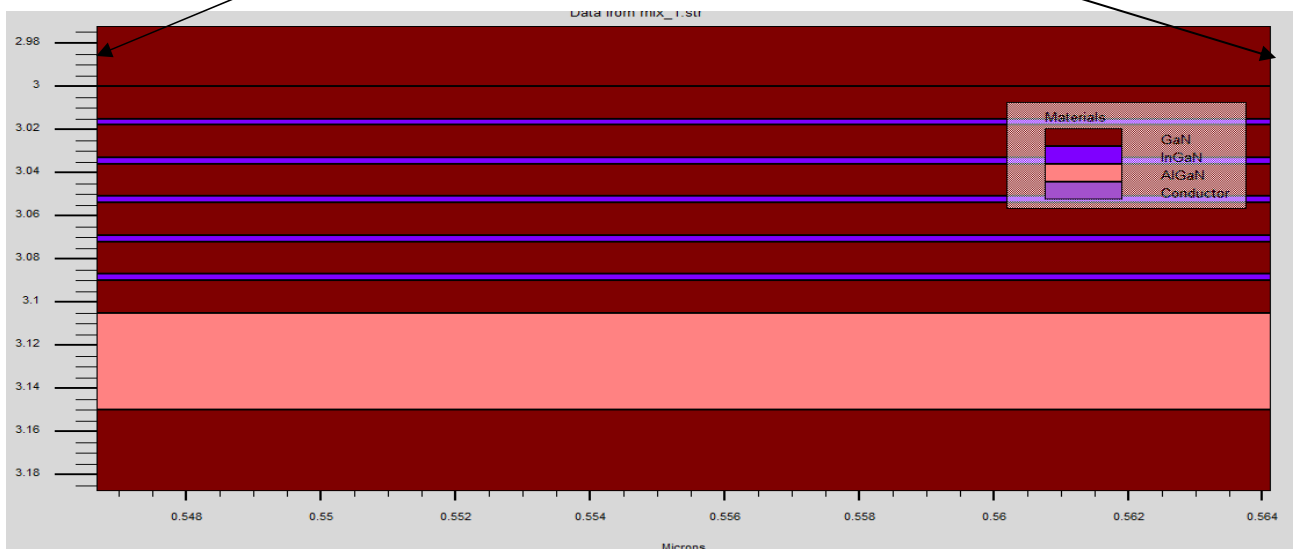
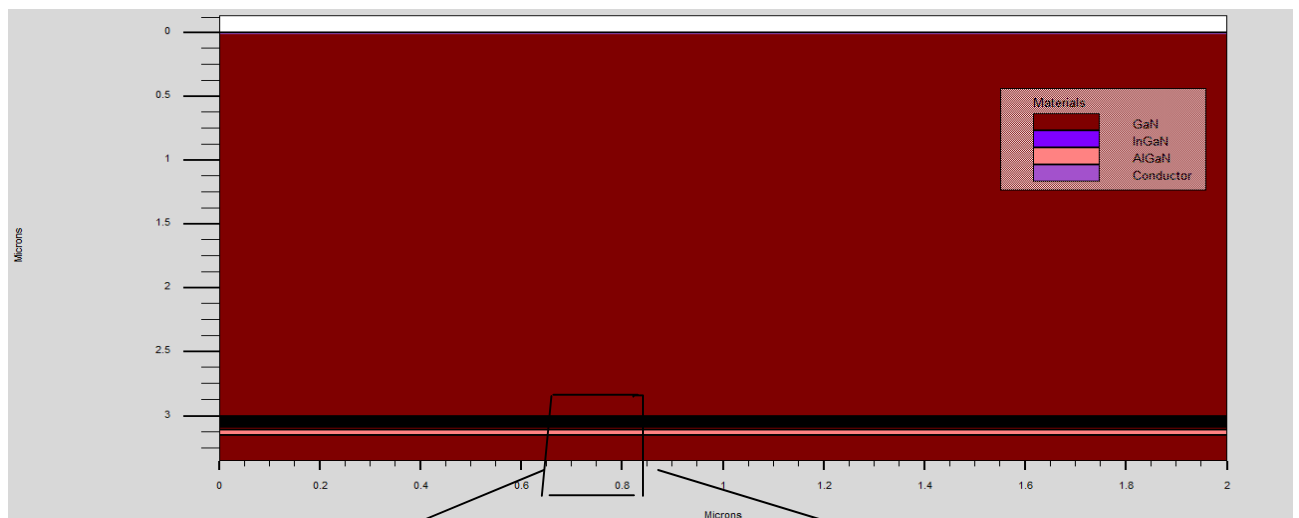
Chapitre 3 : simulation et résultats obtenus

3.1. Introduction

Dans ce travail nous étudierons le génie électrique d'un puits quantique dans Jonction simple (InGaN) de la structure pn. L'étude est menée en appliquant un programme SILVACO-ATLAS. Exécution du fichier programme SILVACO Un large éventail d'études intégrées dans le développement. Nous, nous Serons SILVACO-ATLAS D'excellents Résultats Le gestionnaire de données est répertorié ci-dessous.

3.2. Structure de dispositif

Pour obtenir la meilleure sortie de couleur, une structure idéale utiliserait de nombreux puits quantiques pour maximiser la probabilité de recombinaison radiative. Malheureusement, plus de puits quantiques entraînent une plus grande résistance interne de la structure simplement parce qu'il y a plus de matière à traverser pour le courant. Notre simulation a été prise pour travailler avec une structure à cinq (5) puits quantiques.



3.3. Etapes de simulation

Notre travail effectué une simulation électrique et optique couplée d'un LED à semi-conducteur.

3.3.1. Etapes de simulation

1. Résoudre l'équation d'Helmholtz pour calculer les modes optiques, leurs champs et leurs modèles d'intensité.
2. Calculer la recombinaison des porteurs due à l'émission de lumière.
3. Résoudre des équations de taux de photons pour calculer les densités de photons modèles.
4. Calculer la puissance de sortie de la lumière. la tension de la lumière et les caractéristiques de la tension actuelle.

Les résultats de notre simulation sont les suivantes :

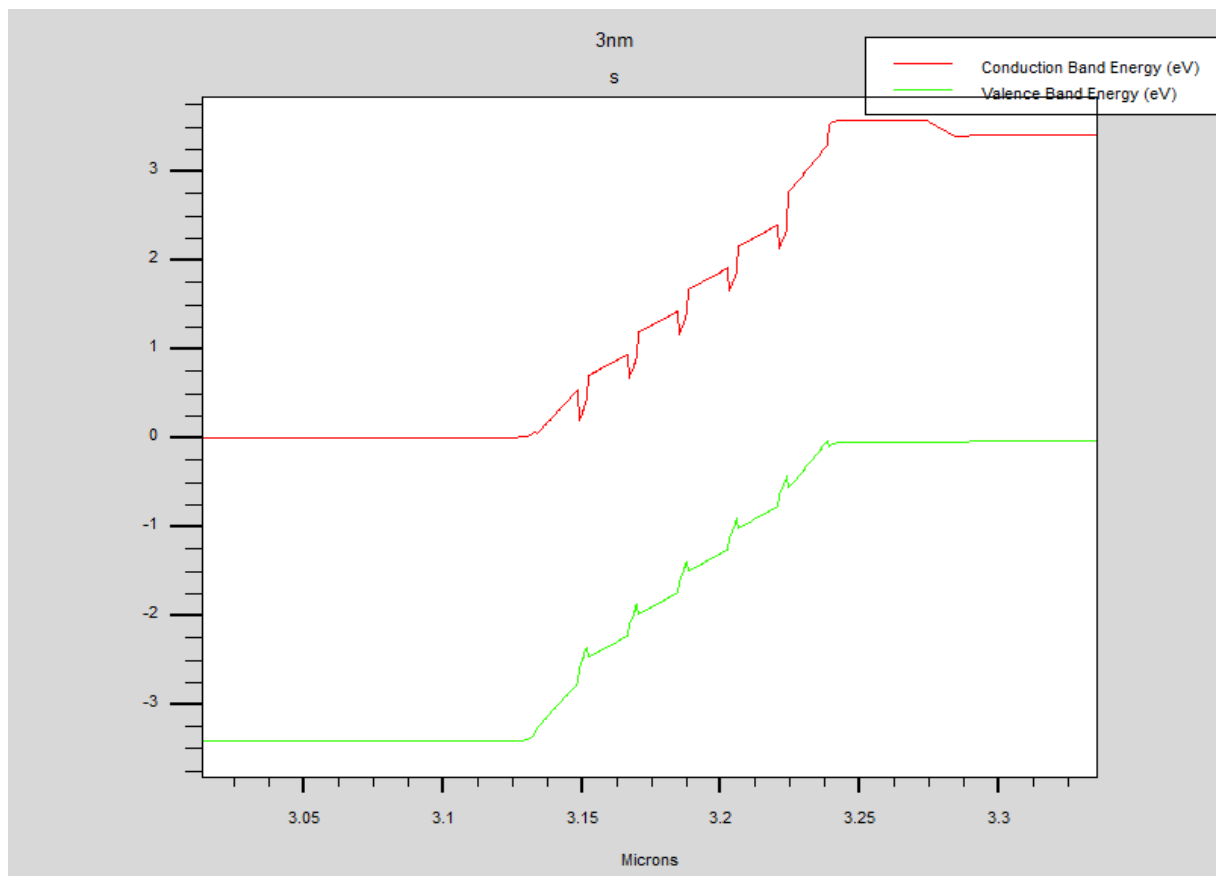


Figure 3.1. Diagramme des bandes (bande de conduction et bande de valence) d'un LED MQWlacourbe montrant le diagramme des bandes «la bande de conduction et la bande de valence», D'un LED MQW.

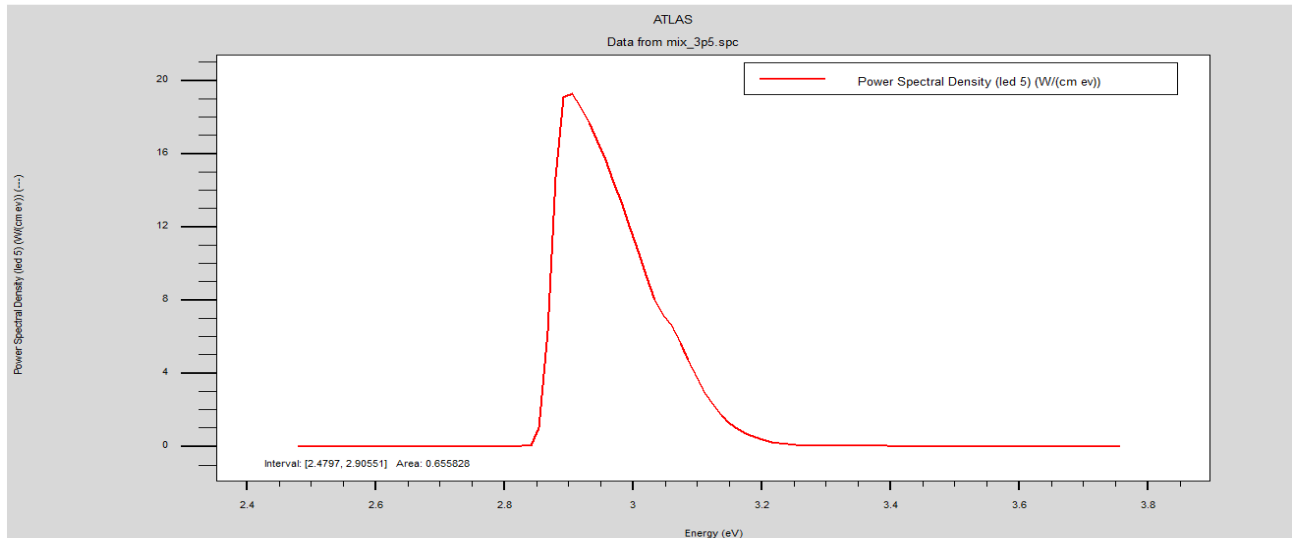


Figure 3.2: représente la puissance de spectre d'émission en fonction de l'énergie de photons

On remarque que de 0 à 2.3 pas d'émission de la lumière, à partir de 2.3 il commence à augmenter jusqu'à ce que vous atteigniez puissance=19 (de pointe), puis il décroît jusqu'à se fixer à 0.

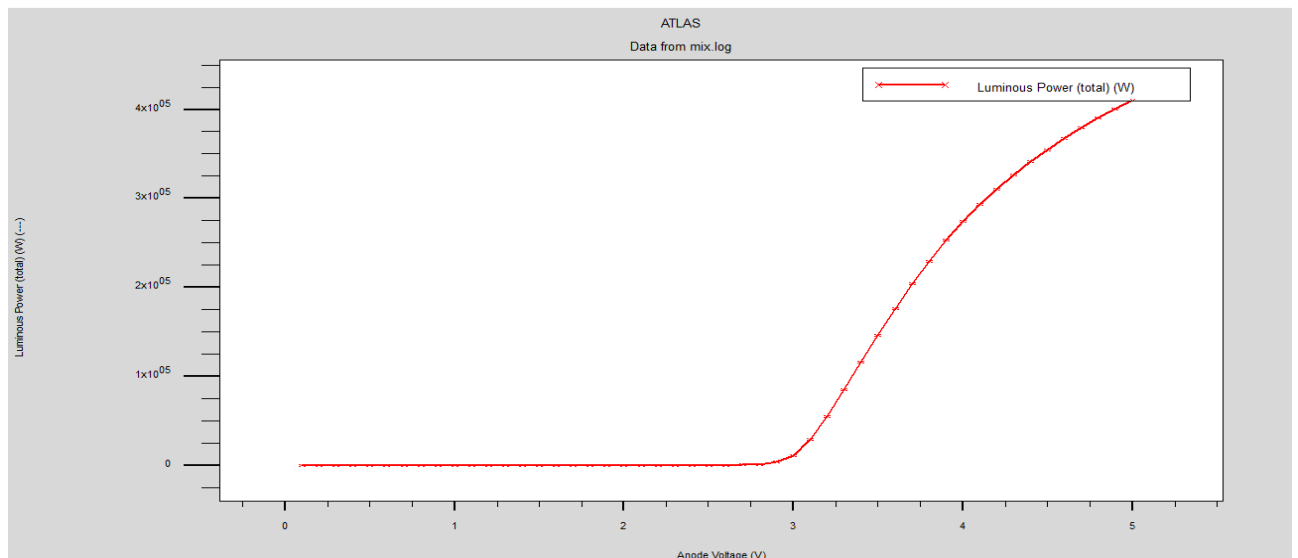


Figure 3.3: représente (Puissance –Tension) (W/V)

On constate que de 0 à 3 pas d'émission de lumière, et à partir de 3 elle augmente rapidement jusqu'à atteindre la valeur de saturation, on en conclut que le seuil des puissances à l'intensité du Tension 3.

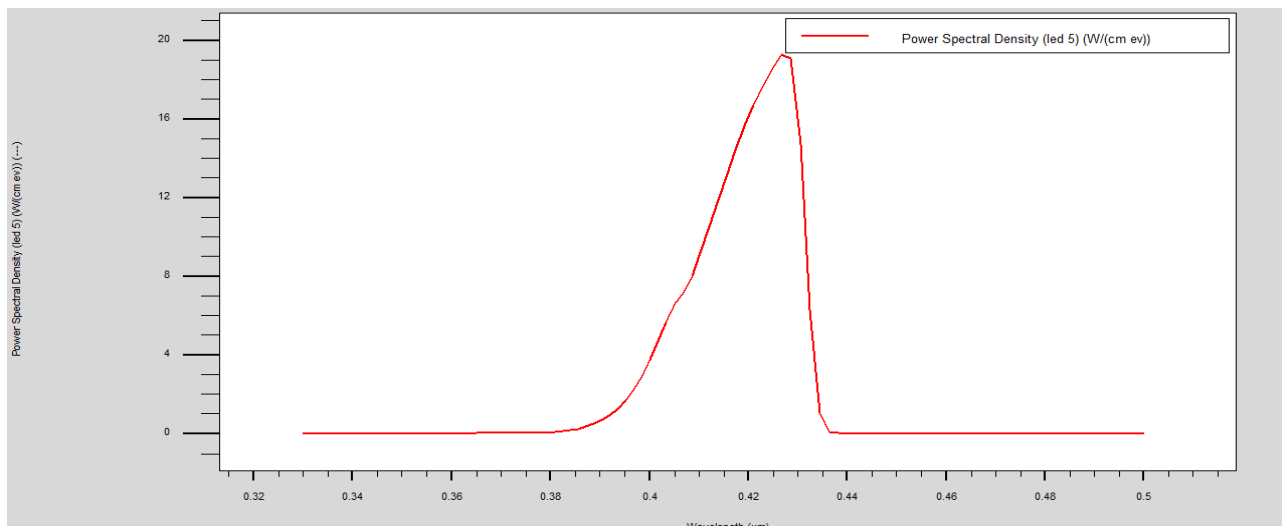


Figure 3.4: représente la puissance en fonction de la longueur d'onde

A partir des résultats obtenus on se trouve la puissance d'émission max dans la longueur d'onde 0.43um.

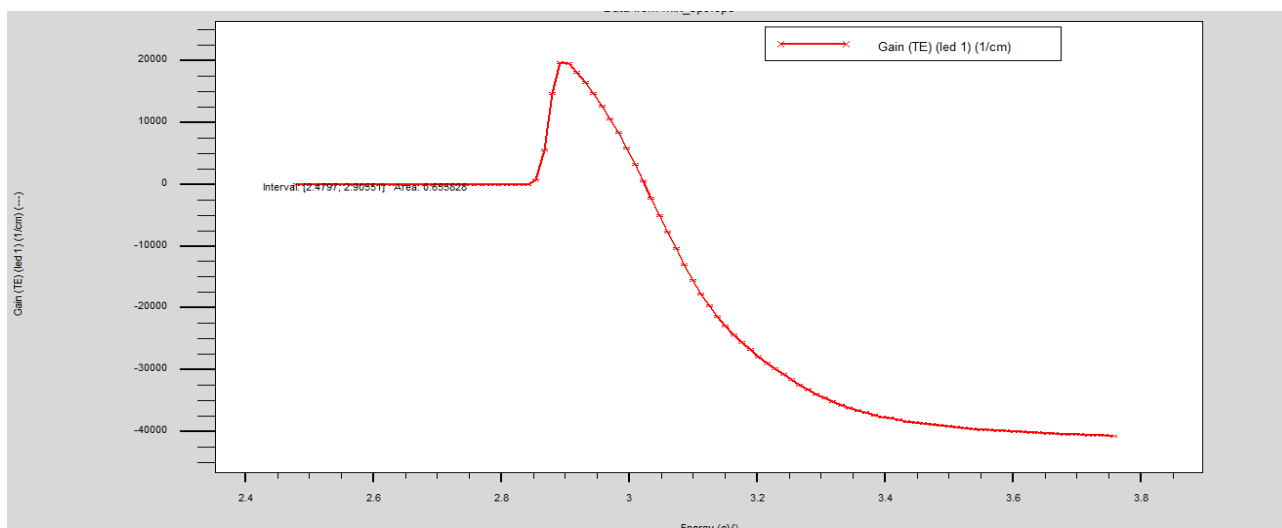


Figure 3.5: représente le gain en fonction de l'énergie

Nous avons une représentation le gain en fonction de l'énergie ; on remarque que jusqu' au point 2.9 il est égal à 0 les pertes sont dominantes. Immédiatement après cela, il augmente jusqu'à atteindre la valeur max 2000 le gain supérieur aux pertes, puis diminue jusqu'à atteindre -4000.

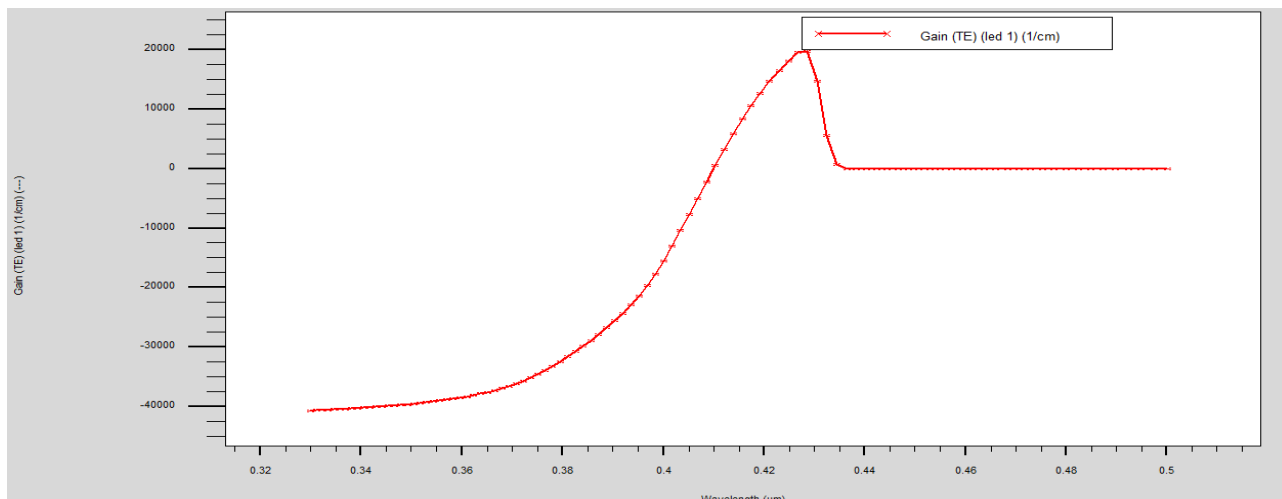


Figure 3.6: représente le gain en fonction de la longueur d'onde

On se trouve le maximum de gain correspondant à la longueur d'onde 0.43 um.

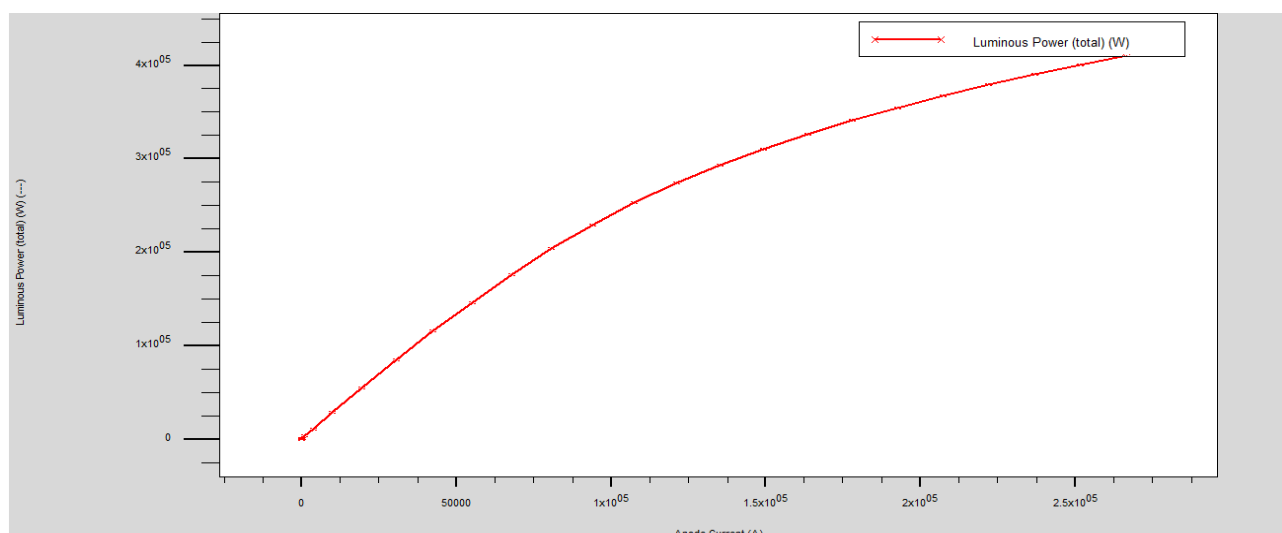


Figure 3.7: représente (Puissance-courant) (W/A)

On remarque que la proportion est directe entre courant et puissance, plus la valeur du courant est grande, plus la valeur de la puissance est grande, et cela est dû au fait que s'il n'y avait pas de puissance, on n'aurait pas de courant (lumière)

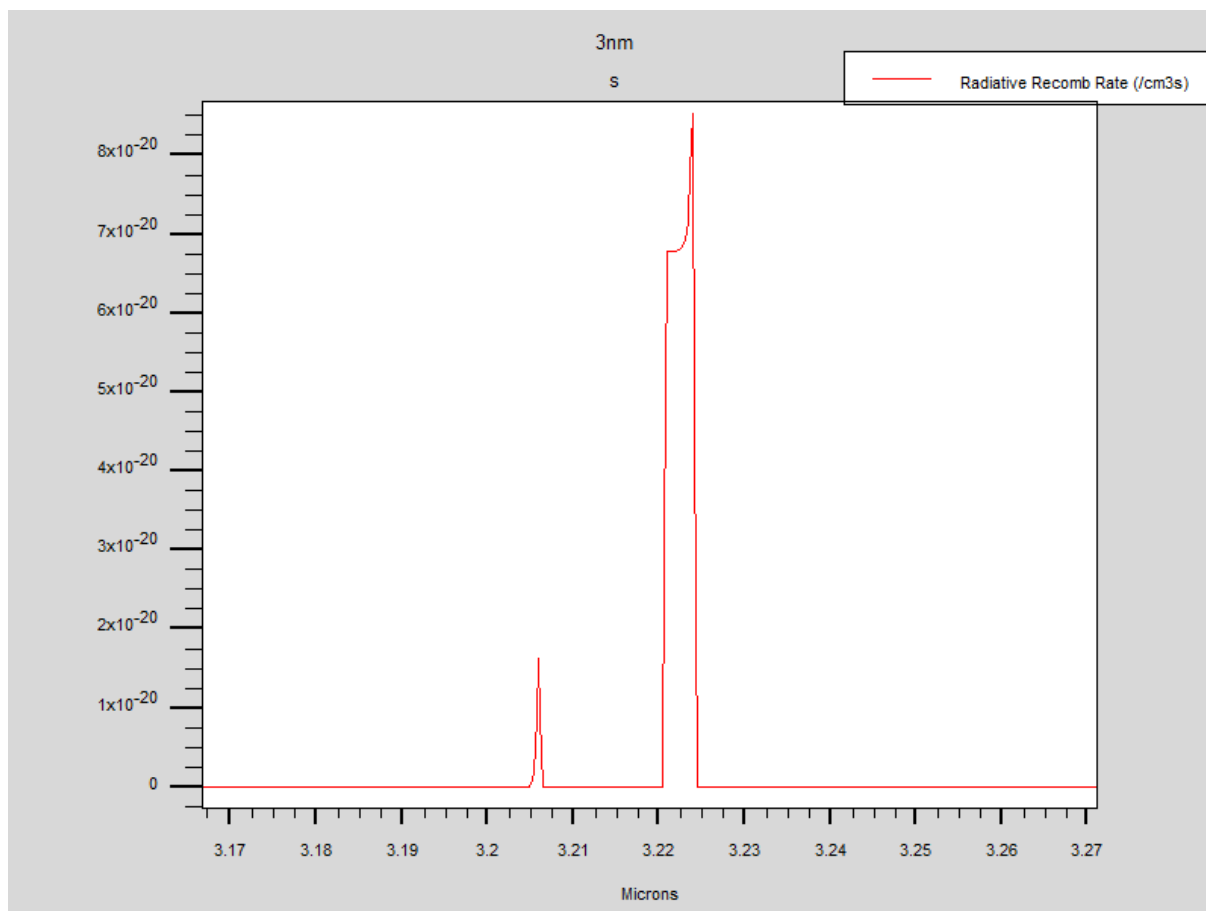


Figure 3.8. Représente les recombinaisons radiatives totales dans la LED MQW

On remarque que les recombinaisons radiatives est grand proche de coté P dans notre LED

Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons étudié et simulé une LED à puits quantiques constitué à l'aide du simulateur Silvaco Atlas et comment produire la lumière au niveau de la région active. l'un des freins à la fabrication de ces dispositifs est le cout lie à la croissance de l'InGaN et du GaN dans technologie actuelle.

Conclusions générales

Cette note a été réalisée dans le but de contribuer à l'étude et à la simulation de structures à puits quantiques semi-conducteurs InGaN pour les dispositifs LED à base de semi-conducteurs III-N et pour évaluer les propriétés optoélectroniques des structures formées par simulation numérique.

Les qualités des LED typiques constituées de semi-conducteurs III-N ont d'abord été étudiées. L'alliage (In, Ga) N, couramment utilisé dans l'industrie, permet théoriquement de balayer tout le spectre visible des longueurs d'onde. Cependant, au-delà de 20% d'indium, le green gap, ces LEDs montrent une baisse significative de l'efficacité quantique. La miscibilité limitée de l'indium dans le GaN (phénomène de ségrégation) et "l'effet de traction", d'une part, et l'état de contrainte de compression de l'InGaN sur le GaN, d'autre part, rendent difficile la croissance des LED à forte concentration en indium. Dans les puits quantiques InGaN/GaN, cette contrainte produit également l'émergence d'un champ électrique interne, responsable de l'effet Stark confiné quantique. L'effet Stark provoque une séparation spatiale des fonctions d'ondes d'électrons et de trous, réduisant leur taux de récupération et, par conséquent, l'efficacité de la LED. Celle-ci a tendance à augmenter à mesure que la profondeur du puits et la concentration en indium augmentent. Plusieurs solutions à ce problème ont été proposées, mais elles reposent toutes sur l'utilisation de matériaux III-N.

Bibliographie :

- [1] S.Nakamura,S.Pearnton,andG.Fasol, *TheBlueLaserDiode.2nd*.Berlin:Springer, 2000.
- [2] S.Y.Karpov*Proc.SPIE*,vol.9768,pp.9768–9768–17,2016.
- [3] Y. Narukawa, M. Ichikawa, D. Sanga, M. Sano, and T. Mukai*Journal of physics D : Applied physics*, vol. 43, no. 35, p. 354002, 2010.
- [4] J.M.Phillips,M.E.Coltrin,M.H.Crawford,A.J.Fischer,M.R.Krames,R.Mueller- Mach, G. O. Mueller, Y. Ohno, L. E. Rohwer, J. A. Simmons, *et al. Laser & Photonics Reviews*, vol. 1, no. 4, pp. 307–333, 2007.
- [5] I. Vurgaftman and J. R. Meyer *Journal of Applied Physics*, vol. 94, no. 6, pp. 3675–3696, 2003.
- [6] A.PunyaandW.R.Lambrecht*PhysicalReviewB*,vol.85,no.19,p.195147,2012.
- [7] C.Kittel,*Physiquedel'étatsolide*.DunodSciencesSup,8eéditioned.,2007.
- [8] O.Ambacher,J.Smart,J.R.Shealy,N.G.Weimann,K.Chu,M.Murphy,W.J.Schaff, L.F.Eastman,R.Dimitrov,L.Wittmer,M.Stutzmann,W.Rieger,andJ.Hilsenbeck *JournalofAppliedPhysics*,vol.85,no.6,pp.3222–3233,1999.
- [9] F.Bernardini,V.Fiorentini,andD.Vanderbilt*PhysicalReviewB*,vol.56,no.16, p. R10024, 1997.
- [10] F.BernardiniandV.Fiorentini*physicastatussolidi(a)*,vol.190,no.1,pp.65–73,2002.
- [11] L.C.deCarvalho,A.Schleife,andF.Bechstedt*PhysRevB*,vol.84,p.195105,2011.
- [12] J.Wu,W.Walukiewicz,K.M.Yu,J.W.A.III,E.E.Haller,H.Lu,andW.J.Schaff *AppliedPhysicsLetters*,vol.80,no.25,pp.4741–4743,2002
- [13]A.Rogalski,P.Martyniuk,andM.Kopytko*AppliedPhysicsReviews*,vol.4,no.3,p. 031304, 2017.
- [14]E.RosencherandB.Vinter,*Optoélectronique*.Paris,2002.
- [15]P.Lefebvre,A.Morel,M.Gallart,T.Taliercio,J.Allègre,B.Gil,H.Mathieu,B.Damilano,N.Grandjean,andJ.Massies*AppliedPhysicsLetters*,vol.78,no.9,pp.1252–1254,2001.
- [16] M.F. Schubert,S. Chhajed,J. K.Kim, E. F.Schubert, D.D. Koleske,M. Crawford,S.R.Lee,A.J.Fischer,G.Thaler,andM.A.Banas*AppliedPhysicsLetters*,vol.91, no. 23, p. 231114, 2007.
- [17]Y.Shen,G.Mueller,S.Watanabe,N.Gardner,A.Munkholm,andM.Krames*Applied PhysicsLetters*, vol. 91, no. 14, p. 141101, 2007.

- [18] Silvaco, ed., *ATLAS User's Manual*, vol. 12, 2015.
- [19] W. Shockley and W. Read Jr *Physical Review*, vol. 87, no. 5, p. 835, 1952.
- [20] R. N. Hall *Physical Review*, vol. 87, no. 2, p. 387, 1952.
- [21] L. E. Black in *New Perspectives on Surface Passivation: Understanding the Si-Al₂O₃ Interface*, pp. 15–28, Springer, 2016.
- [22] M. Aufder Maur, B. Galler, I. Pietzonka, M. Strassburg, H. Lugauer, and A. Di Carlo *Applied Physics Letters*, vol. 105, no. 13, p. 133504, 2014.
- [23] J. Piprek, F. Römer, and B. Witzigmann *Applied Physics Letters*, vol. 106, no. 10, p. 101101, 2015.
- [24] V. Malyutenko in *Light-Emitting Diodes : Materials, Devices, and Applications for Solid State Lighting XVIII*, vol. 9003, p. 90031T, International Society for Optics and Photonics, 2014.
- [25] H. Zhao, G. Liu, J. Zhang, R. A. Arif, and N. Tansu *Journal of Display Technology*, vol. 9, no. 4, pp. 212–225, 2013.
- [26] J. Son, S. Lee, H. Paek, T. Sakong, K. Ha, O. Nam, and Y. Park *physica status solidi c*, vol. 4, no. 7, pp. 2780–2783, 2007.
- [27] E. Kioupakis, P. Rinke, K. T. Delaney, and C. G. Van de Walle *Applied Physics Letters*, vol. 98, no. 16, p. 161107, 2011.
- [28] H. Morkoç, *Handbook of nitride semiconductors and devices, Materials Properties, Physics and Growth*, vol. 1. John Wiley & Sons, 2009.
- [29] R. Van Overstraeten and H. De Man *Solid-State Electronics*, vol. 13, no. 5, pp. 583–608, 1970.
- [30] A. Chynoweth *Physical Review*, vol. 109, no. 5, p. 1537, 1958.
- [31] D. Fitzgerald and A. Grove in *Electron Devices Meeting, 1967 International*, pp. 102–104, IEEE, 1967.
- [32] J. M. Langer and W. Walukiewicz in *Materials Science Forum*, vol. 196, pp. 1389–1394, Trans Tech Publ, 1995.
- [33] M. Boroditsky, I. Gontijo, M. Jackson, R. Vrijen, E. Yablonovitch, T. Krauss, C.-C. Cheng, A. Scherer, R. Bhat, and M. Krames *Journal of Applied Physics*, vol. 87, no. 7, pp. 3497–3504, 2000.
- [34] L. Meiners and H. Wieder *Materials Science Reports*, vol. 3, no. 3-4, pp. 139–216, 1988.

- [35] S. Atlas *Blue LED simulation, the simulation standard*, vol. 79, pp. 6–13, 2016.
- [36] L. Hirsch and A. S. Barrière *Journal of Applied Physics*, vol. 94, no. 8, pp. 5014–5020, 2003.
- [37] J. Piprek *physica status solidi (RRL)–Rapid Research Letters*, vol. 8, no. 5, pp. 424–426, 2014.
- [38] J. Piprek *physica status solidi (RRL)–Rapid Research Letters*, vol. 8, no. 5, pp. 424–426, 2014.
- [39] D. Bradley P, *Advanced ThermoPhotovoltaic Cells Modeling, Optimized for Use in Radioisotope Thermoelectric Generators (RTGS) for Mars and Deep Space Missions*”, Thesis Naval postgraduate school Monterey California. 2004.
- [40] ATLAS User’s Manuel, Device simulation software”, SILVACO International, California. 2011.
- [41] D. Vasileska, G. Stephen M, *Computational Electronics*”, Department of Electrical Engineering, Arizona State University. 2006.
- [42] B. Garcia, Jr, *Indium gallium nitride multijunction solar cell simulation using silvaco atlas*”, Thesis Naval postgraduate school Monterey California. 2007.
- [43] S. Daniel, *Modeling radiation effect on a triple junction solar cell using silvaco atlas*”, Thesis Naval postgraduate school Monterey California. 2012.